

Claude COHEN-TANNOUDJI
Jacques DUPONT-ROC — Gilbert GRYNBERG

Photons • et atomes •

*Introduction à
l'électrodynamique quantique*



Photons et atomes

Introduction à l'électrodynamique quantique

Claude Cohen-Tannoudji
Jacques Dupont-Roc
Gilbert Grynberg

S A V O I R S A C T U E L S

EDP Sciences / CNRS ÉDITIONS

© 2001, **EDP Sciences**, 7 avenue du Hoggar, BP 112, PA de Courtabœuf,
91944 Les Ulis Cedex A.
CNRS ÉDITIONS, 15, rue Malebranche, 75005 Paris.

1^{re} édition :
© 1987, **InterÉditions** – **CNRS ÉDITIONS**

Tous droits réservés. Aucun extrait de ce livre ne peut être reproduit, sous quelque forme ou par quelque procédé que ce soit (machine électronique, mécanique, à photocopier, à enregistrer ou toute autre) sans l'autorisation écrite préalable des éditeurs.

ISBN : 2-86883-535-X
ISBS : 2-222-03966-5

Table des matières

<i>Avant-propos</i>	1
<i>Introduction</i>	3

I

ÉLECTRODYNAMIQUE CLASSIQUE ÉQUATIONS DE BASE ET VARIABLES DYNAMIQUES FONDAMENTALES

<i>Introduction</i>	7
A. Equations de base dans l'espace ordinaire	9
1. Equations de Maxwell-Lorentz	9
2. Quelques constantes du mouvement importantes	10
3. Potentiels - Invariance de jauge	10
B. Electrodynamique dans l'espace réciproque	13
1. Transformation de Fourier spatiale - Notations	13
2. Equations des champs dans l'espace réciproque	14
3. Champs vectoriels longitudinaux et transverses	15
4. Champs électrique et magnétique longitudinaux	17
5. Contribution du champ électrique longitudinal à l'énergie totale, à l'impulsion totale et au moment cinétique total - <i>a. Energie totale.</i> <i>b. Impulsion totale. c. Moment cinétique total</i>	19
6. Equations du mouvement des champs transverses	23
C. Variables normales	25
1. Idée générale	25
2. Définition des variables normales	25
3. Equation d'évolution des variables normales	26
4. Expression des observables physiques du champ transverse en fonc- tion des variables normales - <i>a. Energie du champ transverse.</i> <i>b. Impulsion et moment cinétique du champ transverse. c. Champs</i> <i>électrique et magnétique transverses dans l'espace réel. d. Potentiel</i> <i>vecteur transverse</i>	28

5. Analogies et différences entre les variables normales et la fonction d'onde d'une particule de spin 1 dans l'espace réciproque	32
6. Conditions aux limites périodiques. Introduction de notations plus simples	33
D. Conclusion : discussion de quelques méthodes possibles de quantification	35

COMPLÉMENT A_I — LA FONCTION « DELTA TRANSVERSE »

1. Définition dans l'espace réciproque - <i>a. Base cartésienne, base transverse et longitudinale. b. Projecteur sur le sous-espace des champs transverses</i>	38
2. Expression de la fonction delta transverse dans l'espace réel - <i>a. Régularisation de $\delta^{\perp}_{ij}(\rho)$. b. Calcul de $g(\rho)$. c. Calcul des dérivées de $g(\rho)$. d. Discussion de l'expression de $\delta^{\perp}_{ij}(\rho)$</i>	40
3. Application au calcul du champ magnétique créé par une densité de magnétisation. Interaction de contact	44

COMPLÉMENT B_I — MOMENT CINÉTIQUE DU CHAMP ÉLECTROMAGNÉTIQUE ONDES MULTIPOLAIRES

<i>Introduction</i>	47
1. Contribution du champ électrique longitudinal au moment cinétique total	47
2. Moment cinétique du champ transverse - <i>a. Expression de $\mathbf{J}_{trans}$ dans l'espace réciproque. b. Expression en fonction des variables normales. c. Analogie avec la valeur moyenne du moment cinétique total d'une particule de spin 1</i>	49
3. Base de fonctions vectorielles de $\mathbf{k}$ « adaptées » au moment cinétique - <i>a. Idée générale. b. Méthode de construction de fonctions propres vectorielles de $\mathbf{J}^2$ et J_z. c. Fonctions propres longitudinales. d. Fonctions propres transverses</i>	53
4. Application : ondes multipolaires dans l'espace réel - <i>a. Calcul de quelques transformées de Fourier. b. Ondes multipolaires électriques. c. Ondes multipolaires magnétiques</i>	57

COMPLÉMENT C_I — EXERCICES

1. H et P constantes du mouvement	63
2. Passage de la jauge de Coulomb à la jauge de Lorentz	65

3. Compensation entre le champ électrique longitudinal et le champ transverse instantané	66
4. Variables normales et potentiels retardés	68
5. Champ créé par une particule chargée en son propre emplacement. Réaction de rayonnement	70
6. Champ produit par un dipôle électrique oscillant	73
7. Section efficace de diffusion du rayonnement par un électron classique élastiquement lié	76

II

APPROCHE LAGRANGIENNE ET HAMILTONIENNE DE L'ÉLECTRODYNAMIQUE LAGRANGIEN STANDARD ET JAUGE DE COULOMB

<i>Introduction</i>	81
A. Rappel sur le formalisme lagrangien et hamiltonien	83
1. Systèmes ayant un nombre fini de degrés de liberté - <i>a. Variables dynamiques, lagrangien et action. b. Equations de Lagrange. c. Lagrangiens équivalents. d. Moments conjugués et hamiltonien. e. Changement de variables dynamiques. f. Utilisation de coordonnées généralisées complexes. g. Coordonnées, impulsions et hamiltonien en mécanique quantique</i>	83
2. Système ayant un ensemble continu de degrés de liberté - <i>a. Variables dynamiques. b. Lagrangien. c. Equations de Lagrange. Moments conjugués et hamiltonien. e. Quantification. f. Formalisme hamiltonien et quantification avec des champs complexes</i>	92
B. Le lagrangien standard de l'électrodynamique classique	102
1. Expression du lagrangien standard - <i>a. Le lagrangien standard dans l'espace réel. b. Le lagrangien standard dans l'espace réciproque</i> ...	102
2. Dérivation des équations de l'électrodynamique classique à partir du lagrangien standard - <i>a. Equation de Lagrange pour les particules. b. Equation de Lagrange relative au potentiel scalaire. c. Equation de Lagrange relative au potentiel vecteur</i>	105
3. Propriétés générales du lagrangien standard - <i>a. Symétries globales. b. Invariance de jauge. c. Redondance des variations dynamiques</i> ..	107

C. Electrodynamique en jauge de Coulomb	113
1. Elimination des variables dynamiques redondantes du lagrangien standard - <i>a. Elimination du potentiel scalaire. b. Choix de la composante longitudinale du potentiel vecteur</i>	113
2. Le lagrangien en jauge de Coulomb	115
3. Formalisme hamiltonien - <i>a. Moments conjugués associés aux particules. b. Moments conjugués associés aux variables du champ. c. Hamiltonien en jauge de Coulomb. d. Les grandeurs physiques</i> ..	117
4. Quantification canonique en jauge de Coulomb - <i>a. Relations de commutation fondamentales. b. Importance de la transversalité dans le cas du champ électromagnétique. c. Opérateurs de création et d'annihilation</i>	120
5. Conclusion : quelques caractéristiques importantes de cette description de l'électrodynamique - <i>a. Les variables dynamiques sont indépendantes. b. Le champ électrique est séparé en champ de Coulomb et champ transverse. c. Le formalisme n'est pas manifestement covariant. d. L'interaction des particules avec les modes relativistes n'est pas correctement décrite</i>	123

COMPLÉMENT A_{II} — DÉRIVÉE FONCTIONNELLE INTRODUCTION SIMPLE ET QUELQUES APPLICATIONS

1. Passage d'un système discret à un système continu. Limite des dérivés partielles	128
2. Notion de dérivée fonctionnelle	130
3. Dérivée fonctionnelle de l'action et équations de Lagrange	130
4. Dérivée fonctionnelle du lagrangien d'un système continu	132
5. Dérivée fonctionnelle de l'hamiltonien d'un système continu	134

COMPLÉMENT B_{II} — SYMÉTRIES DU LAGRANGIEN EN JAUGE DE COULOMB ET CONSTANTES DU MOUVEMENT

1. Variation de l'action entre deux mouvements réels infiniment voisins	136
2. Constantes du mouvement dans un cas simple	138
3. Conservation de l'énergie totale pour le système charges + champ en interaction	139
4. Conservation de l'impulsion totale	140
5. Conservation du moment cinétique total	141

COMPLÉMENT C_{II} — ÉLECTRODYNAMIQUE EN PRÉSENCE D'UN CHAMP EXTÉRIEUR

1. Séparation du champ extérieur	143
2. Lagrangien en présence d'un champ extérieur - <i>a. Introduction d'un lagrangien. b. Le lagrangien en jauge de Coulomb</i>	144

3. Hamiltonien en présence d'un champ extérieur - <i>a. Les moments conjugués. b. Hamiltonien. c. Quantification</i>	145

COMPLÉMENT D_{II} — EXERCICES

1. Exemple d'hamiltonien différent de l'énergie	148
2. Passage d'un système discret à un système continu : introduction des densités de lagrangien et d'hamiltonien	149
3. Equations de Lagrange pour les composantes du champ électromagnétique dans l'espace réel	152
4. Equations de Lagrange pour le lagrangien standard en jauge de Coulomb	153
5. Impulsion et moment cinétique d'un champ quelconque	154
6. Lagrangien de variables complexes, linéaire vis-à-vis des vitesses	156
7. Description lagrangienne et hamiltonienne du champ de matière de Schrödinger	159
8. Quantification du champ de Schrödinger	163
9. Equation de Schrödinger d'une particule dans un champ électromagnétique : arbitraire de phase et invariance de jauge	169

III ÉLECTRODYNAMIQUE QUANTIQUE EN JAUGE DE COULOMB

<i>Introduction</i>	171
A. Cadre général	173
1. Variables dynamiques fondamentales. Relations de commutation ...	173
2. Expression des opérateurs associés aux diverses grandeurs physiques du système	173
3. Espace des états	177
B. Evolution temporelle	178
1. Point de vue de Schrödinger	178
2. Point de vue de Heisenberg. Les équations de Maxwell-Lorentz quantiques - <i>a. Equations de Heisenberg pour les particules. b. Equations de Heisenberg pour les champs. c. Avantages du point de vue de Heisenberg</i>	178
C. Observables et états du champ quantique libre	185
1. Revue de quelques observables du champ libre - <i>a. Energie totale et impulsion totale du champ. b. Champs en un point donné r de l'espace. c. Observables correspondant à des mesures photoélectriques</i>	185

2. Excitations élémentaires du champ quantique libre : photons - <i>a. Etats propres de l'énergie et de l'impulsion totales. b. Interprétation en termes de photons. c. Etats à un photon - Propagation</i>	188
3. Etude de quelques propriétés du vide - <i>a. Discussion qualitative. b. Valeurs moyennes et variances des champs dans le vide. c. Fluctuations du vide</i>	191
4. Etats quasi classiques - <i>a. Idée générale. b. Caractérisation des états quasi classiques. c. Quelques propriétés des états quasi classiques. d. Opérateur de translation pour a et a^+</i>	194
D. Hamiltonien d'interaction entre particules et champ	199
1. Hamiltonien des particules - Hamiltonien du rayonnement - Hamiltonien d'interaction	199
2. Ordres de grandeur des divers termes d'interaction pour des systèmes de particules liées	200
3. Règles de sélection	201
4. Introduction d'une coupure	202

COMPLÉMENT A_{III} — ANALYSE DES PHÉNOMÈNES D'INTERFÉRENCE EN THÉORIE QUANTIQUE DU RAYONNEMENT

<i>Introduction</i>	206
1. Présentation d'un modèle simple	207
2. Phénomènes d'interférence observables sur les signaux de photodétection simple - <i>a. Cas général. b. Etats quasi classiques. c. Etats factorisés. d. Etats à un seul photon</i>	209
3. Phénomènes d'interférence observables sur les signaux de photodétection double - <i>a. Etats quasi classiques. b. Etats à un seul photon. c. Etats à 2 photons</i>	211
4. Interprétation physique en termes d'interférences entre amplitudes de transition	215
5. Conclusion : la dualité onde-corpuscule en théorie quantique du rayonnement	217

COMPLÉMENT B_{III} — CHAMP QUANTIQUE RAYONNÉ PAR DES SOURCES CLASSIQUES

1. Hypothèse sur les sources	219
2. Etude de l'évolution des champs dans le point vue de Heisenberg	220
3. Point de vue de Schrödinger - Etat quantique du champ à l'instant t	221

COMPLÉMENT C_{III} — RELATIONS DE COMMUTATION DES CHAMPS LIBRES À DES INSTANTS DIFFÉRENTS. SUSCEPTIBILITÉS ET FONCTIONS DE CORRÉLATION DES CHAMPS DANS LE VIDE

<i>Introduction</i>	223
1. Calcul préliminaire	224
2. Commutateurs des champs - <i>a. Réduction des expressions en fonction de D. b. Expressions explicite des commutateurs. c. Propriétés des commutateurs</i>	225
3. Fonctions de corrélation symétriques des champs dans le vide	229

COMPLÉMENT D_{III} — EXERCICES

1. Commutateurs de $\mathbf{A}$, $\mathbf{E}_\perp$, $\mathbf{B}$ en jauge de Coulomb	232
2. Hamiltonien d'un système de 2 particules de charges opposées couplées au champ électromagnétique	234
3. Relations de commutation de l'impulsion totale $\mathbf{P}$ avec H_P , H_R , H_I	235
4. Distribution de Bose - Einstein	236
5. Densités de quasi-probabilité et fonctions caractéristiques	238
6. Composantes en quadrature d'un champ monomode. Représentation graphique de l'état du champ	243
7. Etats comprimés du rayonnement	248
8. Génération d'états comprimés du rayonnement dans une interaction à deux photons	250
9. Densité de quasi-probabilité d'un état comprimé	252

IV AUTRES FORMULATIONS ÉQUIVALENTES DE L'ÉLECTRODYNAMIQUE

<i>Introduction</i>	255
A. Comment obtenir d'autres formulations équivalentes de l'électrodynamique	257
1. Changement de jauge et changement de lagrangien	257
2. Changement de lagrangien et transformation unitaire associée - <i>a. Changement de lagrangien. b. Les deux descriptions quantiques. c. Correspondance entre les deux descriptions quantiques. d. Application au champ électromagnétique</i>	258
3. Transformation unitaire générale. L'équivalence entre les différentes formulations de l'électrodynamique quantique	264

B. Quelques exemples simples pour des charges couplées à un champ extérieur	268
1. Lagrangien et hamiltonien du système	268
2. Changement de jauge simple ; invariance de jauge - <i>a. Le nouveau point de vue. b. Transformation unitaire reliant les deux points de vue - Invariance de jauge</i>	269
3. La transformation de Göppert-Mayer - <i>a. L'approximation des grandes longueurs d'onde. b. Changement de jauge faisant apparaître l'interaction dipolaire électrique. c. Avantages du nouveau point de vue. d. Equivalence entre les hamiltoniens d'interaction A.p et E.r. e. Généralisation.</i>	271
4. Une transformation ne se ramenant pas à un changement de lagrangien : la transformation de Henneberger - <i>a. Motivation. b. Détermination de la transformation unitaire - Transformés des divers opérateurs. c. Discussion physique. d. Généralisation à un champ quantique : la transformation de Pauli-Fierz-Kramers</i>	277
C. La transformation de Power-Zienau-Woolley : forme multipolaire de l'interaction entre charges et champ	282
1. Description des sources par une densité de polarisation et de magnétisation - <i>a. Densité de polarisation associée à un système de charges. b. L'induction électrique. c. Courant de polarisation et courant de magnétisation</i>	283
2. Changement de lagrangien - <i>a. La transformation de Power-Zienau-Woolley. b. Le nouveau lagrangien. c. Développement multipolaire de l'interaction entre les particules chargées et le champ</i>	288
3. Nouveaux moments conjugués et nouvel hamiltonien - <i>a. Expression de ces grandeurs. b. Signification physique des nouveaux moments conjugués. c. Structure du nouvel hamiltonien</i>	291
4. L'électrodynamique quantique dans le nouveau point de vue - <i>a. Quantification. b. Expression de quelques grandeurs physiques</i> ...	295
5. Equivalence entre les deux points de vue - Quelques écueils à éviter ..	298
D. Forme simplifiée de l'équivalence pour les matrices S de diffusion	300
1. Introduction de la matrice S	300
2. Matrice S dans un autre point de vue - Etude de l'équivalence	302
3. Commentaires sur l'utilisation de l'équivalence entre les matrices S ..	304

COMPLÉMENT A_{IV} — INTRODUCTION ÉLÉMENTAIRE DE L'HAMILTONIEN DIPOLAIRE ÉLECTRIQUE

<i>Introduction</i>	306
1. Hamiltonien dipolaire électrique pour un système localisé de charges couplées à un champ extérieur - <i>a. Transformation unitaire suggérée par</i>	

<i>l'approximation des grandes longueurs d'onde. b. Hamiltonien transformé. c. L'opérateur vitesse dans le nouveau point de vue</i>	306
2. Hamiltonien dipolaire électrique pour un système localisé de charges couplées au rayonnement quantique - <i>a. Etude de la transformation unitaire. b. Transformation des grandeurs physiques. c. Densité de polarisation et induction électrique. d. Expression de l'hamiltonien dans le nouveau point de vue</i>	309
3. Quelques prolongements - <i>a. Cas de deux systèmes séparés de charges. b. Cas d'un champ quantique couplé à des sources classiques</i>	314

COMPLÉMENT B_{IV} — PROCESSUS À UN OU DEUX PHOTONS : ÉQUIVALENCE ENTRE LES HAMILTONIENS D'INTERACTION EN **A.p** ET **E.r**

<i>Introduction</i>	318
1. Notations - Principe du calcul	318
2. Calcul des amplitudes de transition dans les deux points de vue - a. Hamiltonien d'interaction en A.p . b. Hamiltonien d'interaction en E.r . c. Vérification directe de l'identité entre les deux amplitudes	319
3. Généralisations - <i>a. Extension à d'autres processus. b. Processus non résonnants</i>	327

COMPLÉMENT C_{IV} — INTERACTION ENTRE DEUX SYSTÈMES LOCALISÉS DE CHARGES DANS LE POINT DE VUE DE POWER-ZIENAU-WOOLLEY

<i>Introduction</i>	330
1. Notations	330
2. Expression de l'hamiltonien	331

COMPLÉMENT D_{IV} — TRANSFORMATION DE POWER-ZIENAU-WOOLLEY ET JAUGE DE POINCARÉ

<i>Introduction</i>	333
1. La transformation de Power-Zienau-Woolley considérée comme un changement de jauge	333
2. Propriétés du potentiel vecteur dans la nouvelle jauge	334
3. Les potentiels dans la jauge de Poincaré	335

COMPLÉMENT E_{IV} — EXERCICES

1. Exemple d'effet produit par un branchement soudain du potentiel vecteur	338
2. Excitation à deux photons de l'atome d'hydrogène : calculs approchés faits à partir des hamiltoniens en $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$	340
3. Hamiltonien dipolaire électrique pour un ion couplé à un champ extérieur	344
4. Diffusion d'une particule par un potentiel en présence d'un rayonnement laser	346
5. Equivalence entre les hamiltoniens d'interaction en $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et $\mathbf{Z} \cdot (\nabla V)$ pour le calcul des amplitudes de transition	351
6. Réponse linéaire et susceptibilité ; application au calcul du rayonnement d'un dipôle	354
7. Diffusion non résonnante : vérification directe de l'égalité des amplitudes de transition calculées dans les points de vue $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$	358

V

INTRODUCTION A LA FORMULATION COVARIANTE
DE L'ÉLECTRODYNAMIQUE QUANTIQUE

<i>Introduction</i>	363
A. Electrodynamique classique en jauge de Lorentz	366
1. Formalisme lagrangien - <i>a. Notations covariantes - Notations ordinaires. b. Choix d'un nouveau lagrangien pour le champ. c. Equations de Lagrange du champ. d. Condition supplémentaire. e. Densité de lagrangien dans l'espace réciproque</i>	366
2. Formalisme hamiltonien - <i>a. Moments conjugués des potentiels. b. Hamiltonien du champ. c. Equations de Hamilton-Jacobi du champ libre</i>	371
3. Variables normales du champ classique - <i>a. Définition. b. Développement des potentiels en variables normales. c. Forme de la condition supplémentaire pour le champ classique libre - Arbitraire de jauge. d. Expression de l'hamiltonien du champ</i>	373
B. Difficultés posées par la quantification du champ libre	382
1. Quantification canonique - <i>a. Relations de commutation canoniques. b. Opérateurs d'annihilation et de création. c. Relations de commutation covariantes entre les potentiels libres dans le point de vue de Heisenberg</i>	382

2. Problèmes d'interprétation physique posés par la quantification covariante - <i>a. Forme de la condition supplémentaire en théorie quantique. b. Problèmes posés par la construction de l'espace des états</i>	385
C. Quantification covariante avec une métrique indéfinie	389
1. Métrique indéfinie dans un espace de Hilbert	389
2. Choix de la nouvelle métrique pour la quantification covariante	393
3. Construction des kets physiques	395
4. Valeurs moyennes des grandeurs physiques dans un ket physique - <i>a. Valeur moyenne des potentiels et des champs. b. Arbitraire de jauge et arbitraire sur les kets physiques associés à un état physique. c. Valeur moyenne de l'hamiltonien</i>	398
D. Exemple simple d'interaction : champ quantique couplé à deux charges extérieures fixes	402
1. Hamiltonien du problème	402
2. Déplacement de l'état fondamental du champ - Réinterprétation de la loi de Coulomb. - <i>a. Calcul perturbatif du déplacement. b. Discussion physique - Echange de photons scalaires entre les deux charges. c. Calcul exact</i>	403
3. Quelques propriétés du nouvel état fondamental du champ - <i>a. Condition supplémentaire en présence d'interaction - Caractère physique du nouvel état fondamental. b. Valeur moyenne du potentiel scalaire dans le nouvel état fondamental du champ</i>	407
4. Conclusion et généralisation	409

COMPLÉMENT A_V — INTRODUCTION ÉLÉMENTAIRE À LA THÉORIE DU CHAMP ÉLECTRON-POSITRON, COUPLÉ AU CHAMP DE PHOTONS EN JAUGE DE LORENTZ

<i>Introduction</i>	410
1. Brefs rappels sur l'équation de Dirac - <i>a. Matrices de Dirac. b. Hamiltonien de Dirac ; densités de charge et de courant. c. Lien avec les notations covariantes. d. Spectre d'énergie de la particule libre. e. Etats d'énergie négative - Théorie des trous</i>	410
2. Quantification du champ de Dirac libre - <i>a. Procédure de seconde quantification. b. Hamiltonien du champ quantifié - Niveaux d'énergie. c. Translations temporelles et spatiales</i>	416
3. Champ de Dirac et champ électromagnétique en interaction - <i>a. Hamiltonien du système total - Hamiltonien d'interaction. b. Equations de Heisenberg des champs. c. Forme de la condition supplémentaire en présence d'interaction</i>	420

COMPLÉMENT B_V — JUSTIFICATION DE LA THÉORIE NON RELATIVISTE EN JAUGE DE COULOMB À PARTIR DE L'ÉLECTRODYNAMIQUE QUANTIQUE RELATIVISTE

<i>Introduction</i>	426
1. Passage de la jauge de Lorentz à la jauge de Coulomb en électro- dynamique quantique relativiste - <i>a. Transformation sur les photons sca- laires faisant apparaître l'interaction de Coulomb. b. Effet de la trans- formation sur les autres termes de l'hamiltonien en jauge de Lorentz. c. Condition supplémentaire - Absence d'effets physiques des photons scalaires et longitudinaux. d. Conclusion : hamiltonien de l'électro- dynamique quantique relativiste en jauge de Coulomb</i>	427
2. Limite non relativiste en jauge de Coulomb : justification de l'hamiltonien de Pauli pour les particules - <i>a. Terme prépondérant H_0 de l'hamiltonien à la limite non relativiste : énergie de masse des particules. b. Hamiltonien effectif dans une multiplicité. c. Discussion physique</i>	434

COMPLÉMENT C_V — EXERCICES

1. Autres lagrangiens covariants du champ électromagnétique	443
2. Opérateurs d'annihilation et de création de photons scalaires : peut-on échanger leur signification ?	445
3. Quelques propriétés relatives à la métrique indéfinie	447
4. Opérateur de translation pour les opérateurs de création et d'annihilation d'un photon scalaire	448
5. Lagrangien du champ de Dirac. Lien entre phase du champ de Dirac et jauge du champ électromagnétique	451
6. Lagrangien et hamiltonien des champs de Dirac et Maxwell couplés	453
7. Opérateurs champ de Dirac et densité de charge. Etude de quelques relations de commutation	456
<i>Liste des ouvrages cités en référence</i>	459
<i>Index</i>	461

Avant-propos

Le développement spectaculaire de nouvelles sources de rayonnement électromagnétique, couvrant un domaine de fréquences allant des ondes radio à l'ultra-violet lointain (lasers, masers, rayonnement synchrotron, sources millimétriques), a renouvelé considérablement l'intérêt porté aux processus d'interaction entre photons et atomes. De nouvelles méthodes sont apparues permettant d'obtenir des informations de plus en plus précises sur la structure et la dynamique des atomes et des molécules, de contrôler leurs degrés de liberté internes et externes ou de générer de nouveaux types de rayonnements. Ces développements font qu'un nombre croissant de physiciens et de chimistes, de chercheurs et d'ingénieurs, s'intéressent aux processus d'interaction entre matière et rayonnement à basse énergie. L'ambition de cet ouvrage est de mettre à leur disposition les bases théoriques nécessaires pour aborder l'étude de ces processus en partant d'un niveau en mécanique quantique et en électromagnétisme classique correspondant à celui de la maîtrise.

Un tel programme comporte naturellement deux volets. Il faut, d'une part, présenter le cadre théorique permettant de décrire la dynamique quantique du système global champ électromagnétique + particules chargées non relativistes, discuter le contenu physique de la théorie et les diverses formulations que l'on peut en donner. Tel est l'objet du présent volume intitulé « Photons et atomes — Introduction à l'électrodynamique quantique ». Il faut, d'autre part, décrire les processus d'interaction entre matière et rayonnement (émission, absorption, diffusion de photons par des atomes...) et présenter les méthodes théoriques qui permettent de les analyser (méthodes perturbatives, resommations partielles de la série des perturbations, équation pilote, équations de Bloch optiques, méthode de l'atome habillé...). Ces questions sont abordées dans un autre volume intitulé « Photons et atomes — Les processus d'interaction ». Les objectifs de ces deux volumes sont donc clairement distincts et, suivant ses préoccupations ou ses besoins, le lecteur pourra utiliser l'un, l'autre ou les deux volumes de cet ouvrage.

L'exposé des thèmes étudiés montre clairement que cet ouvrage ne se situe pas sur le même plan que d'autres livres consacrés à l'électrodynamique quantique. En effet, la plupart de ceux-ci s'adressent à un public de physiciens de la théorie des champs pour lesquels les notions de covariance manifeste, d'invariance relativiste, de champ de matière, de renor-

malisation... sont fondamentales. Par ailleurs, les livres traitant de problèmes d'optique quantique, et en particulier d'optique des lasers, sont très succincts sur les bases de l'électrodynamique et, notamment, sur les problèmes posés par la quantification du rayonnement. Il y a entre ces deux voies extrêmes, une approche intermédiaire que nous avons choisie ici, car elle répond, nous semble-t-il, à un besoin important et actuel.

Remerciements

Cet ouvrage s'appuie sur un travail d'enseignement et de recherche qui s'est poursuivi pendant plusieurs années au Collège de France et au Laboratoire de Physique de l'Ecole Normale Supérieure. Nous tenons ici à exprimer tous nos remerciements à nos collègues et amis qui ont directement participé à ces recherches ou qui nous ont fait bénéficier de leurs réflexions.

Nous sommes particulièrement reconnaissants à Jean Dalibard qui nous a beaucoup aidés pour la conception et la mise au point des exercices, et à Mesdames et Mesdemoiselles Marthouret, Guillaume, Brodschi et Audoin pour la frappe et le tirage du manuscrit.

Introduction

Les manifestations du champ électromagnétique sont perceptibles en permanence autour de nous. Il assure la cohésion des atomes et molécules, il est à l'origine des phénomènes électriques et magnétiques. Les ondes électromagnétiques de toute nature, et en particulier les ondes lumineuses sont une source essentielle d'informations sur l'univers qui nous entoure.

Le champ électromagnétique occupe également une place centrale dans le développement de la physique. Sans remonter à Maxwell, on peut rappeler que c'est à propos de la lumière qu'ont été introduites la constante de Planck et la notion de dualité onde-corpuscule. Plus récemment, le champ électromagnétique est devenu le prototype des champs de jauge quantiques.

Toutes ces raisons montrent l'intérêt d'une compréhension approfondie de la dynamique du champ électromagnétique couplé à des particules chargées, et en particulier de ses aspects quantiques. Pour parvenir à une telle compréhension, il faut préciser comment le champ électromagnétique peut être quantifié, comment s'introduit le concept de photon et quelle est sa signification physique, quelles sont les observables et les états qui décrivent les différents aspects du rayonnement, quel est l'hamiltonien qui régit l'évolution couplée des photons et des atomes. C'est à la discussion de ces questions et des diverses réponses qui peuvent leur être données qu'est consacré le présent volume.

La quantification du champ électromagnétique est le problème central autour duquel s'articulent les divers chapitres. Cette quantification est délicate par suite de l'arbitraire de jauge et de la redondance qui sont associés aux potentiels vecteur et scalaire. C'est la raison pour laquelle nous nous sommes efforcés d'aborder ce problème à plusieurs niveaux, de difficultés croissantes.

Dans le chapitre I, nous partons des équations de Maxwell-Lorentz qui décrivent l'évolution couplée des champs électrique et magnétique et d'un ensemble de particules chargées, et nous montrons qu'une transformation de Fourier spatiale des champs permet d'identifier plus clairement les degrés de liberté réellement indépendants des champs. Nous introduisons ainsi les variables normales qui décrivent les modes normaux de vibration du champ en l'absence de sources. La quantification est alors effectuée de manière élémentaire en quantifiant les oscillateurs harmo-

riques fictifs associés à chaque mode normal de vibration, les variables normales devenant les opérateurs de création et d'annihilation d'un photon.

Le problème est repris de manière plus approfondie et plus rigoureuse au chapitre II, à partir d'une formulation lagrangienne et hamiltonienne de l'électrodynamique. Une telle approche permet en effet de définir sans ambiguïté les variables du champ qui sont canoniquement conjuguées l'une de l'autre. Elle fournit par ailleurs un schéma de quantification clair, la quantification canonique, qui associe à deux grandeurs conjuguées deux opérateurs dont le commutateur vaut $i\hbar$. Nous montrons cependant que ce schéma théorique n'est pas directement applicable au lagrangien le plus couramment utilisé en électrodynamique : le lagrangien standard. Ceci tient au fait que les variables dynamiques de ce lagrangien, qui sont les potentiels vecteur et scalaire, sont redondantes. La façon la plus simple de résoudre ce problème, puis de quantifier la théorie, consiste à choisir la jauge de Coulomb. D'autres possibilités existent, ayant chacune leurs avantages et leurs inconvénients ; elles sont explorées plus loin dans les chapitres IV (jauge de Poincaré) et V (jauge de Lorentz).

Plusieurs aspects essentiels de l'électrodynamique quantique en jauge de Coulomb sont discutés en détail dans le chapitre III : équations d'évolution quantiques pour un système de charges et de champs couplés, étude des états et des observables du champ quantique libre, propriétés du vide et des états cohérents, phénomènes d'interférence et dualité onde corpuscule en théorie quantique du rayonnement. Nous analysons également en détail les propriétés de l'hamiltonien qui décrit les couplages entre particules et photons.

Ce dernier sujet est repris plus en détail dans le chapitre IV qui est consacré à d'autres formulations équivalentes de l'électrodynamique, dérivées de la jauge de Coulomb. Nous montrons comment il est possible d'obtenir d'autres descriptions de l'électrodynamique, mieux adaptées à tel ou tel type de problème, en changeant de jauge, en ajoutant au lagrangien standard en jauge de Coulomb la dérivée totale d'une fonction des coordonnées généralisées du système, ou encore en effectuant directement sur l'hamiltonien en jauge de Coulomb une transformation unitaire. L'accent est mis sur la signification physique qu'ont les divers opérateurs mathématiques dans l'ancien et dans le nouveau point de vue et sur l'équivalence des prédictions physiques faites dans un point de vue et dans l'autre. C'est là qu'une compréhension satisfaisante des fondements de l'électrodynamique quantique est essentielle si l'on veut éviter des interprétations erronées, concernant par exemple l'équivalence des hamiltoniens d'interaction « en $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ » ou « en $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$ ».

Dans les points de vue étudiés dans les chapitres II et IV, la symétrie entre les quatre composantes du quadrivecteur potentiel n'est pas maintenue. Les formalismes correspondants ne sont donc pas adaptés à une

quantification covariante du champ. Ces problèmes sont abordés dans le chapitre V qui traite de la quantification du champ en jauge de Lorentz. Nous expliquons les difficultés qui surgissent quand les quatre composantes du potentiel sont traitées comme des variables indépendantes. Nous indiquons également comment il est possible de les résoudre en sélectionnant, au moyen de la condition de Lorentz, un sous-espace d'états physiques dans l'espace des états du rayonnement.

Mentionnons enfin qu'à l'exception des compléments du chapitre V, nous traitons les particules de manière non relativiste, et les décrivons par des fonctions d'onde de Schrödinger ou des spineurs de Pauli. Une telle approximation est très largement suffisante pour le domaine des basses énergies couvert par cet ouvrage. De plus, le choix de la jauge de Coulomb, qui fait apparaître de manière explicite l'interaction de Coulomb entre particules, prépondérante à basse énergie, est très commode pour l'étude des états liés de particules chargées que sont les atomes et les molécules. Un tel avantage subsiste pour les autres formulations de l'électrodynamique dérivées de la jauge de Coulomb et étudiées dans le chapitre IV. Une description relativiste et quantique des particules nécessite de les considérer comme des excitations élémentaires d'un champ de matière relativiste, comme le champ de Dirac pour les électrons et les positrons. Nous abordons ces problèmes dans deux compléments du chapitre V et montrons qu'il est possible de justifier les hamiltoniens non relativistes utilisés dans cet ouvrage, en les faisant apparaître comme des « hamiltoniens effectifs », agissant dans des multiplicités à nombre bien déterminé de particules, et dérivés de l'hamiltonien de l'électrodynamique quantique relativiste pour lequel le nombre de particules, comme celui des photons, est indéterminé.

Ce volume comprend cinq chapitres et dix-neuf compléments. Les compléments répondent à des objectifs très variés. Ils précisent les notions physiques ou mathématiques introduites dans les chapitres auxquels ils sont rattachés, ou prolongent ces chapitres en présentant des exemples d'application, en proposant d'autres points de vue, ou en abordant des problèmes qui ne sont pas étudiés dans les chapitres. Le dernier complément de chaque chapitre regroupe des exercices corrigés. Une bibliographie succincte, non exhaustive, est donnée, soit sous forme de références générales à la fin des chapitres et éventuellement des compléments, soit sous forme de références plus spécialisées mentionnées dans des notes en bas de page. Les livres sont cités simplement par le nom des auteurs, sauf en ce qui concerne l'autre volume de cet ouvrage qui est mentionné par son titre, « Photons et atomes — Les processus d'interaction ». La liste détaillée des livres, avec leurs références complètes, est donnée à la fin du volume.

Il est possible de lire chronologiquement ce volume du début à la fin. Nous l'avons cependant conçu de manière que certains chapitres et compléments puissent être sautés lors d'une première lecture.

Un étudiant en fin de maîtrise ou un chercheur désireux d'arriver le plus rapidement possible à l'étude des processus d'interaction eux-mêmes pourrait par exemple lire le chapitre I, puis le chapitre III et le complément A_{III} . Il aurait ainsi une connaissance sérieuse de la quantification du champ sous sa forme la plus simple, des aspects corpusculaire et ondulatoire du rayonnement et de la dynamique du système champ + particules. La lecture des compléments A_{IV} et B_{IV} pourrait également lui donner une idée simple de l'approximation dipolaire électrique et de l'équivalence des hamiltoniens d'interaction « en $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ » et « en $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$ » pour l'étude des processus à un ou deux photons.

Un étudiant de troisième cycle ou un chercheur désireux d'approfondir sa réflexion sur la structure de l'électrodynamique quantique et sur les problèmes liés à l'arbitraire de jauge pourrait compléter cette lecture par celle des chapitres II, IV et V et choisir les compléments qui répondent le mieux à ses préoccupations et à ses domaines d'intérêt.

CHAPITRE I

Electrodynamique classique

Equations de base et variables dynamiques fondamentales

Ce premier chapitre a pour but de rappeler les équations de base de l'électrodynamique classique, et d'introduire un ensemble de variables dynamiques permettant de caractériser simplement l'état du système global champ + particules à un instant donné.

Le chapitre débute (partie A) par un rappel des *équations de Maxwell-Lorentz* qui décrivent l'évolution couplée du champ électromagnétique et d'un ensemble de particules chargées. Un certain nombre de résultats importants, concernant les *constantes du mouvement*, les *potentiels* et l'*invariance de jauge* sont également passés en revue.

En vue des développements qui seront abordés dans les chapitres ultérieurs (et notamment de la quantification), on montre ensuite (partie B) que l'électrodynamique classique prend une forme plus simple dans l'*espace réciproque*, après une transformation de Fourier spatiale des champs. Une telle transformation permet de décomposer simplement le champ électromagnétique en ses *composantes longitudinale et transverse*. Il apparaît aussi clairement que le champ électrique longitudinal n'est pas une vraie variable dynamique du système puisqu'il peut être réexprimé en fonction des positions des particules.

L'étape suivante (partie C) consiste alors à introduire des combinaisons linéaires simples des champs électrique et magnétique transverses dans l'espace réciproque, qui ont la propriété importante d'évoluer indépendamment les uns des autres en l'absence de particules, et qui décrivent donc les *modes normaux de vibration* du champ libre. Ces nouvelles variables dynamiques, appelées *variables normales*, jouent un rôle central dans la théorie, puisqu'elles deviendront, après quantification, les *opérateurs de création et d'annihilation de photons*. Toutes les observables du champ s'expriment en fonction de ces variables normales (et des variables des particules).

Le chapitre se termine enfin (partie D) par une discussion de quelques stratégies possibles de *quantification* de la théorie précédente. Une méthode élémentaire et économique (bien que non rigoureuse) consiste à quantifier chacun des oscillateurs harmoniques fictifs associés aux divers modes normaux de vibration du champ. On obtient ainsi toutes les relations de commutation fondamentales nécessaires à la lecture du chapitre III. Le problème sera repris de manière plus approfondie au chapitre II à partir d'une formulation lagrangienne et hamiltonienne de l'électrodynamique.

Mentionnons enfin que le complément B₁ regroupe un certain nombre de résultats relatifs au moment cinétique du champ électromagnétique et au développement du champ en ondes multipolaires.

A — ÉQUATIONS DE BASE DANS L'ESPACE ORDINAIRE

1. Equations de Maxwell-Lorentz

Les équations de base se groupent en deux ensembles. Tout d'abord, les *équations de Maxwell* reliant les champs électrique $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ et magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ aux densités de charge $\rho(\mathbf{r}, t)$ et de courant $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho(\mathbf{r}, t) \end{array} \right. \quad (\text{A.1.a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{A.1.b})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \end{array} \right. \quad (\text{A.1.c})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t). \end{array} \right. \quad (\text{A.1.d})$$

Ensuite, les *équations de Newton-Lorentz* décrivant la dynamique de chaque particule α , ayant une masse m_α , une charge q_α , une position $\mathbf{r}_\alpha(t)$, une vitesse $\mathbf{v}_\alpha(t)$, sous l'effet des forces électrique et magnétique exercées par les champs

$$m_\alpha \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r}_\alpha(t) = q_\alpha [\mathbf{E}(\mathbf{r}_\alpha(t), t) + \mathbf{v}_\alpha(t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha(t), t)]. \quad (\text{A.2})$$

Les équations (A.2) ne sont valables que pour des particules lentes, non relativistes ($v_\alpha \ll c$).

De (A.1.a) et (A.1.d) on déduit que

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (\text{A.3})$$

Une telle équation exprime la conservation locale de la charge électrique globale

$$Q = \int d^3r \rho(\mathbf{r}, t). \quad (\text{A.4})$$

L'expression de ρ et $\mathbf{j}$ en fonction des variables des particules est :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho(\mathbf{r}, t) = \sum_\alpha q_\alpha \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha(t)] \end{array} \right. \quad (\text{A.5.a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \sum_\alpha q_\alpha \mathbf{v}_\alpha(t) \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha(t)]. \end{array} \right. \quad (\text{A.5.b})$$

On peut vérifier que les expressions (A.5) satisfont l'équation de continuité (A.3).

Les équations (A.1) et (A.2) forment deux ensembles d'équations couplées. L'évolution des champs dépend des particules par l'intermédiaire de ρ et $\mathbf{j}$. Le mouvement des particules dépend des champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$. Les équations (A.1) sont des équations aux dérivées partielles du premier ordre, alors que les équations (A.2) sont des équations différentielles du second ordre. Il s'ensuit que « l'état » du système global champ + particules est déterminé, à un instant t_0 , par la donnée des champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ en tous les points $\mathbf{r}$ de l'espace, et par celle de la position $\mathbf{r}_\alpha$ et de la vitesse $\mathbf{v}_\alpha$ de chaque particule α

$$\{ \mathbf{E}(\mathbf{r}, t_0), \mathbf{B}(\mathbf{r}, t_0), \mathbf{r}_\alpha(t_0), \mathbf{v}_\alpha(t_0) \}. \quad (\text{A.6})$$

Il importe de bien noter que, dans les équations de Maxwell (A.1), $\mathbf{r}$ n'est pas une variable dynamique (comme $\mathbf{r}_\alpha$), mais un paramètre continu permettant de repérer les variables de champ.

2. Quelques constantes du mouvement importantes

A partir des équations de base (A.1) et (A.2) et des expressions (A.5) de ρ et $\mathbf{j}$, on peut montrer (voir exercice 1) que les fonctions suivantes de $\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{r}_\alpha$, $\mathbf{v}_\alpha$:

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} v_{\alpha}^2(t) + \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3r [\mathbf{E}^2(\mathbf{r}, t) + c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{r}, t)] \quad (\text{A.7})$$

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}(t) + \epsilon_0 \int d^3r \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A.8})$$

$$\mathbf{J} = \sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha}(t) \times m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}(t) + \epsilon_0 \int d^3r \mathbf{r} \times [\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)] \quad (\text{A.9})$$

sont des constantes du mouvement, c'est-à-dire indépendantes de t .

H est l'énergie totale du système global champ + particules, $\mathbf{P}$ l'impulsion totale, $\mathbf{J}$ le moment cinétique total. Le fait que ces quantités soient des constantes du mouvement résulte de l'invariance des équations du mouvement vis-à-vis d'un changement de l'origine des temps, de l'origine et de l'orientation des axes de coordonnées (le lien entre ces constantes du mouvement et les propriétés d'invariance du lagrangien de l'électrodynamique sera analysé dans le complément B_{II}).

3. Potentiels. Invariance de jauge

Les équations (A.1.b) et (A.1.c) entraînent que les champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ peuvent toujours être écrits sous la forme

$$\begin{cases} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) & (\text{A. 10. a}) \\ \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \nabla U(\mathbf{r}, t) & (\text{A. 10. b}) \end{cases}$$

où $\mathbf{A}$ est un champ vectoriel, appelé *potentiel vecteur*, U un champ scalaire, appelé *potentiel scalaire*. Un premier avantage d'introduire $\mathbf{A}$ et U est que les deux équations de Maxwell (A. 1. b) et (A. 1. c) sont automatiquement satisfaites. D'autres intérêts apparaîtront dans la formulation lagrangienne et hamiltonienne de l'électrodynamique (voir chapitre II).

En reportant (A. 10) dans les équations de Maxwell (A. 1. a) et (A. 1. d), on obtient les équations du mouvement de $\mathbf{A}$ et U

$$\begin{cases} \Delta U(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\epsilon_0} \rho(\mathbf{r}, t) - \nabla \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) & (\text{A. 11. a}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \\ = \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) - \nabla \left[\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} U(\mathbf{r}, t) \right] & (\text{A. 11. b}) \end{cases}$$

qui sont des équations aux dérivées partielles du second ordre, et non plus du premier comme dans (A. 1). En réalité, comme $\partial^2 U / \partial t^2$ n'apparaît pas dans (A. 11. a), cette équation n'est pas une équation du mouvement pour U , mais relie plutôt à chaque instant U à $\partial \mathbf{A} / \partial t$. L'état du champ est déterminé maintenant par la donnée de $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t_0)$ et $\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t_0) / \partial t$ pour tout $\mathbf{r}$.

De (A. 10) il découle que $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ sont invariants dans la « transformation de jauge » suivante

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla F(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A. 12. a})$$

$$U(\mathbf{r}, t) \rightarrow U'(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} F(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A. 12. b})$$

où $F(\mathbf{r}, t)$ est une fonction arbitraire de $\mathbf{r}$ et t . Il y a donc une certaine redondance dans les potentiels puisque les mêmes champs physiques $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ peuvent être décrits par plusieurs potentiels $\mathbf{A}$ et U différents. Une telle redondance peut être réduite par le choix d'une condition de jauge qui fixe $\nabla \cdot \mathbf{A}$ (la valeur de $\nabla \times \mathbf{A}$ est déjà déterminée par (A. 10. a)).

Les deux jauges les plus couramment utilisées sont la jauge de Lorentz et la jauge de Coulomb.

(i) La jauge de Lorentz est définie par

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} U(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (\text{A. 13})$$

On peut vérifier qu'il est toujours possible de choisir dans (A.12) une fonction F telle que la condition (A.13) soit remplie. Dans la jauge de Lorentz, les équations (A.11) prennent une forme plus symétrique

$$\left\{ \begin{array}{l} \square U(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\varepsilon_0} \rho(\mathbf{r}, t) \\ \square \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(A.14.a)} \\ \text{(A.14.b)} \end{array}$$

où $\square = \partial^2/c^2 - \Delta$ est le D'Alembertien. Ceci est dû au fait que les équations de Maxwell d'une part, la condition de Lorentz d'autre part, sont invariantes relativistes (elles gardent la même forme dans deux référentiels de Lorentz différents). Avec des notations covariantes, les équations (A.13) et (A.14) peuvent être écrites

$$\sum_{\mu} \partial_{\mu} A^{\mu} = 0 \quad \text{(A.15)}$$

$$\text{où } \partial_{\mu} = \left\{ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \nabla \right\} \quad A^{\mu} = \left\{ \frac{U}{c}, \mathbf{A} \right\}$$

$$\sum_{\nu} \partial_{\nu} \partial^{\nu} A^{\mu} = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} j^{\mu} \quad \text{(A.16)}$$

$$\text{où } j^{\mu} = \{ c\rho, \mathbf{j} \}$$

où A^{μ} et j^{μ} sont des quadrivecteurs respectivement associés aux potentiels et aux courants.

(ii) La jauge de Coulomb est définie par

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \text{(A.17)}$$

les équations (A.11) deviennent alors

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta U(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\varepsilon_0} \rho(\mathbf{r}, t) \end{array} \right. \quad \text{(A.18.a)}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \square \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2} \nabla \frac{\partial}{\partial t} U(\mathbf{r}, t). \end{array} \right. \quad \text{(A.18.b)}$$

L'équation (A.18.a) est l'équation de Poisson pour U . La covariance manifeste est perdue, mais d'autres avantages de la jauge de Coulomb apparaîtront dans les chapitres ultérieurs.

B — ÉLECTRODYNAMIQUE DANS L'ESPACE RÉCIPROQUE

1. Transformation de Fourier spatiale. Notations

Nous notons $\mathcal{E}(\mathbf{k}, t)$ la transformée de Fourier spatiale de $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$. $\mathbf{E}$ et $\mathcal{E}$ sont reliés par les équations suivantes

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{E}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \end{array} \right. \quad (\text{B.1.a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \mathcal{E}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \end{array} \right. \quad (\text{B.1.b})$$

Sur le tableau I sont indiquées les notations choisies pour les transformées de Fourier de quelques autres grandeurs physiques. (Nous utilisons des lettres « droites » pour les grandeurs dans l'espace réel, des lettres « cursives » pour les grandeurs dans l'espace réciproque.)

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \leftrightarrow \mathcal{E}(\mathbf{k}, t)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \leftrightarrow \mathcal{B}(\mathbf{k}, t)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \leftrightarrow \mathcal{A}(\mathbf{k}, t)$$

$$U(\mathbf{r}, t) \leftrightarrow \mathcal{U}(\mathbf{k}, t)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \leftrightarrow \rho(\mathbf{k}, t)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \leftrightarrow \mathcal{j}(\mathbf{k}, t).$$

Tableau I

La réalité de $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ entraîne que

$$\mathcal{E}^*(\mathbf{k}, t) = \mathcal{E}(-\mathbf{k}, t). \quad (\text{B.2})$$

Dans la suite, nous utiliserons fréquemment l'identité de Parseval-Plancherel

$$\int d^3r F^*(\mathbf{r}) G(\mathbf{r}) = \int d^3k \mathcal{F}^*(\mathbf{k}) \mathcal{G}(\mathbf{k}) \quad (\text{B.3})$$

(où $\mathcal{F}$ et $\mathcal{G}$ sont les transformées de Fourier de F et G), et le fait que la transformée de Fourier d'un produit est proportionnelle au produit de convolution des transformées de Fourier

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r' F(\mathbf{r}') G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \leftrightarrow \mathcal{F}(\mathbf{k}) \mathcal{G}(\mathbf{k}). \quad (\text{B.4})$$

Le tableau II donne quelques transformées de Fourier intervenant dans la suite

$$\begin{aligned}\frac{1}{4\pi r} &\leftrightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{k^2} \\ \frac{\mathbf{r}}{4\pi r^3} &\leftrightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{-i\mathbf{k}}{k^2} \\ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) &\leftrightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a}.\end{aligned}$$

Tableau II

Finalement, pour simplifier les notations, nous écrirons souvent $\dot{\mathbf{r}}_a$ au lieu de $d\mathbf{r}_a(t)/dt$, $\dot{\mathbf{E}}$ au lieu de $\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)/\partial t$, $\dot{\mathcal{E}}$ au lieu de $\partial^2 \mathcal{E}(\mathbf{k}, t)/\partial t^2 \dots$ lorsqu'il n'y a pas de risque de confusion.

2. Equations des champs dans l'espace réciproque

Comme l'opérateur gradient ∇ dans l'espace réel devient la multiplication par $i\mathbf{k}$ dans l'espace réciproque, les équations de Maxwell (A.1) s'écrivent dans l'espace réciproque

$$\left\{ \begin{array}{l} i\mathbf{k} \cdot \mathcal{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \rho \\ i\mathbf{k} \cdot \mathcal{B} = 0 \\ i\mathbf{k} \times \mathcal{E} = -\dot{\mathcal{B}} \\ i\mathbf{k} \times \mathcal{B} = \frac{1}{c^2} \dot{\mathcal{E}} + \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \mathbf{j}. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(B.5.a)} \\ \text{(B.5.b)} \\ \text{(B.5.c)} \\ \text{(B.5.d)} \end{array}$$

Il apparaît clairement sur (B.5) que $\dot{\mathcal{E}}(\mathbf{k})$ et $\dot{\mathcal{B}}(\mathbf{k})$ dépendent seulement des valeurs de $\mathcal{E}(\mathbf{k})$, $\mathcal{B}(\mathbf{k})$, $\rho(\mathbf{k})$, $\mathbf{j}(\mathbf{k})$ au même point $\mathbf{k}$. Les équations de Maxwell, qui sont des équations aux dérivées partielles dans l'espace réel, deviennent *strictement locales* dans l'espace réciproque, ce qui introduit une grande simplification.

L'équation de conservation de la charge (A.3) s'écrit maintenant

$$i\mathbf{k} \cdot \mathbf{j} + \dot{\rho} = 0. \quad \text{(B.6)}$$

Les relations (A.10) entre les champs et potentiels deviennent

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{B} = i\mathbf{k} \times \mathcal{A} \\ \mathcal{E} = -\dot{\mathcal{A}} - i\mathbf{k}\mathcal{U} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(B.7.a)} \\ \text{(B.7.b)} \end{array}$$

la transformation de jauge (A. 12)

$$\mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}' = \mathcal{A} + i\mathbf{k} \mathcal{F} \quad (\text{B. 8. a})$$

$$\mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}' = \mathcal{U} - \dot{\mathcal{F}} \quad (\text{B. 8. b})$$

et les équations des potentiels (A. 11)

$$\left\{ \begin{array}{l} k^2 \mathcal{U} = \frac{1}{\varepsilon_0} \rho + i\mathbf{k} \cdot \dot{\mathcal{A}} \end{array} \right. \quad (\text{B. 9. a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{c^2} \ddot{\mathcal{A}} + k^2 \mathcal{A} = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \mathbf{j} - i\mathbf{k} \left(i\mathbf{k} \cdot \mathcal{A} + \frac{1}{c^2} \dot{\mathcal{U}} \right). \end{array} \right. \quad (\text{B. 9. b})$$

3. Champs vectoriels longitudinaux et transverses

Par définition, un champ vectoriel longitudinal $\mathbf{V}_{\parallel}(\mathbf{r})$ est un champ vectoriel tel que

$$\nabla \times \mathbf{V}_{\parallel}(\mathbf{r}) = \mathbf{0}. \quad (\text{B. 10. a})$$

Une telle relation devient dans l'espace réciproque

$$i\mathbf{k} \times \mathcal{V}_{\parallel}(\mathbf{k}) = \mathbf{0}. \quad (\text{B. 10. b})$$

Un champ vectoriel transverse $\mathbf{V}_{\perp}(\mathbf{r})$ est caractérisé par

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{V}_{\perp}(\mathbf{r}) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{B. 11. a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} i\mathbf{k} \cdot \mathcal{V}_{\perp}(\mathbf{k}) = 0. \end{array} \right. \quad (\text{B. 11. b})$$

La comparaison de (B. 10. a) et (B. 10. b), ou de (B. 11. a) et (B. 11. b), montre que la dénomination longitudinal ou transverse a une signification géométrique claire dans l'espace réciproque : pour un champ vectoriel longitudinal, $\mathcal{V}_{\parallel}(\mathbf{k})$ est parallèle à $\mathbf{k}$ pour tout $\mathbf{k}$, pour un champ vectoriel transverse, $\mathcal{V}_{\perp}(\mathbf{k})$ est perpendiculaire à $\mathbf{k}$ pour tout $\mathbf{k}$.

Il importe de bien noter qu'un champ vectoriel est longitudinal (ou transverse), si et seulement si (B. 10) (ou (B. 11)) sont satisfaites pour *tout* $\mathbf{r}$, ou *tout* $\mathbf{k}$. Par exemple, en présence d'une charge ponctuelle en $\mathbf{r}_x$, $\nabla \cdot \mathbf{E}$ est, d'après (A. 1. a), égal à zéro dans tout l'espace à l'exception du point $\mathbf{r}_x$ où se trouve la particule. En présence d'une charge, $\mathbf{E}$ n'est donc pas un champ transverse. Ceci est encore plus évident dans l'espace réciproque puisque $\mathbf{k} \cdot \mathcal{E}$ est alors proportionnel à $e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_x}$ qui est visiblement non nul partout.

L'utilisation de l'espace réciproque permet également une décomposition très simple de tout champ vectoriel en une partie longitudinale et une partie transverse

$$\mathcal{V}(\mathbf{k}) = \mathcal{V}_{\parallel}(\mathbf{k}) + \mathcal{V}_{\perp}(\mathbf{k}). \quad (\text{B. 12})$$

En tout point $\mathbf{k}$, $\mathcal{V}_{\parallel}(\mathbf{k})$ est obtenu par projection de $\mathcal{V}(\mathbf{k})$ sur le vecteur unitaire $\boldsymbol{\kappa}$ dans la direction $\mathbf{k}$

$$\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}/k. \quad (\text{B.13})$$

Nous avons donc

$$\begin{cases} \mathcal{V}_{\parallel}(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\kappa}[\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathcal{V}(\mathbf{k})] \\ \mathcal{V}_{\perp}(\mathbf{k}) = \mathcal{V}(\mathbf{k}) - \mathcal{V}_{\parallel}(\mathbf{k}) \end{cases} \quad (\text{B.14.a})$$

$$(\text{B.14.b})$$

$V_{\parallel}(\mathbf{r})$ et $V_{\perp}(\mathbf{r})$ sont enfin obtenus par transformation de Fourier spatiale des équations (B.14).

Remarques

(i) Dans l'espace réciproque, la relation qui existe entre un champ vectoriel $\mathcal{V}(\mathbf{k})$ et ses parties longitudinale ou transverse est une relation locale. Par exemple, on déduit de (B.14) que

$$\mathcal{V}_{\perp i}(\mathbf{k}) = \sum_j \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \mathcal{V}_j(\mathbf{k}) \quad (\text{B.15})$$

où $i, j = x, y, z$. Chaque composante de $\mathcal{V}_{\perp}(\mathbf{k})$ au point $\mathbf{k}$ ne dépend que des composantes de $\mathcal{V}(\mathbf{k})$ au même point $\mathbf{k}$. Par transformation de Fourier, l'équation (B.15) devient alors, compte tenu de (B.4)

$$V_{\perp i}(\mathbf{r}) = \sum_j \int d^3 r' \delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V_j(\mathbf{r}') \quad (\text{B.16})$$

où

$$\begin{aligned} \delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \\ &= \delta_{ij} \delta(\mathbf{r}) + \frac{\partial^2}{\partial r_i \partial r_j} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{1}{k^2} \\ &= \delta_{ij} \delta(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi} \frac{\partial^2}{\partial r_i \partial r_j} \frac{1}{r} \end{aligned} \quad (\text{B.17.a})$$

$\delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{r})$ est appelée aussi « fonction- δ transverse ». L'existence du dernier terme de (B.17.a) entraîne que la relation entre $V_{\perp}(\mathbf{r})$ et $V(\mathbf{r})$ n'est pas locale : $V_{\perp}(\mathbf{r})$ dépend des valeurs $V(\mathbf{r}')$ de V en tous les autres points $\mathbf{r}'$. Notons également que le calcul explicite du dernier terme de (B.17.a) exige quelques précautions en $r = 0$. La double dérivée de $1/r$ doit être calculée au sens des distributions, et donne naissance à un terme identique, à un coefficient près, au premier terme du second membre de (B.17.a). Le calcul correspondant, détaillé dans le complément A₁, conduit à

$$\delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{r}) = \frac{2}{3} \delta_{ij} \delta(\mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi r^3} \left(\delta_{ij} - \frac{3 r_i r_j}{r^2} \right) \quad (\text{B.17.b})$$

(ii) La décomposition d'un champ vectoriel (issu d'un quadrivecteur ou d'un quadritenseur antisymétrique) en une partie longitudinale et une partie transverse n'est pas une opération invariante relativiste. Un champ vectoriel, apparaissant comme transverse dans un référentiel de Lorentz, n'est plus nécessairement transverse dans un autre référentiel de Lorentz.

(iii) Bien que la décomposition (B. 12) introduise des effets non locaux dans l'espace réel et ne soit pas invariante relativiste, elle n'en est pas moins intéressante, dans la mesure où elle simplifie la résolution des équations de Maxwell. En effet, comme nous le verrons dans les paragraphes suivants, deux des quatre équations de Maxwell ne font que fixer la partie longitudinale des champs électrique et magnétique, alors que les deux autres équations donnent la vitesse de variation des champs transverses. Un tel point de vue permet alors d'introduire simplement un ensemble commode de variables normales pour les champs transverses.

4. Champs électrique et magnétique longitudinaux

Revenons aux équations de Maxwell. Il apparaît maintenant clairement que les deux premières équations (B. 5. a) et (B. 5. b) donnent en fait les parties longitudinales de $\mathcal{E}$ et $\mathcal{B}$. La deuxième équation (B. 5. b) exprime ainsi que le champ magnétique est purement transverse

$$\mathcal{B}_{\parallel} = 0 = \mathbf{B}_{\parallel}. \quad (\text{B. 18})$$

La première équation (B. 5. a) relie, quant à elle, le champ électrique longitudinal $\mathcal{E}_{\parallel}(\mathbf{k})$ à la distribution de charges $\rho(\mathbf{k})$

$$\mathcal{E}_{\parallel}(\mathbf{k}) = - \frac{i}{\epsilon_0} \rho(\mathbf{k}) \frac{\mathbf{k}}{k^2} \quad (\text{B. 19})$$

$\mathcal{E}_{\parallel}(\mathbf{k})$ apparaît ainsi comme le produit de deux fonctions de $\mathbf{k}$ dont les transformées de Fourier sont

$$\rho(\mathbf{k}) \leftrightarrow \rho(\mathbf{r}) \quad (\text{B. 20. a})$$

$$- \frac{i}{\epsilon_0} \frac{\mathbf{k}}{k^2} \leftrightarrow \frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}}{r^3}. \quad (\text{B. 20. b})$$

D'après (B. 4), il vient alors

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\parallel}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \rho(\mathbf{r}', t) \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \\ &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\alpha} q_{\alpha} \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}(t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}(t)|^3}. \end{aligned} \quad (\text{B. 21})$$

Il apparaît ainsi que le champ électrique longitudinal à l'instant t est le champ de Coulomb associé à ρ et calculé comme si la densité de charge ρ était statique et figée à sa valeur prise à l'instant t (champ de Coulomb instantané).

Insistons sur le fait qu'un tel résultat est indépendant de tout choix de jauge puisqu'il a été dérivé directement des équations de Maxwell pour les champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ sans faire aucunement appel aux potentiels.

Le fait que le champ électrique longitudinal suive instantanément l'évolution de la distribution de charges n'implique pas l'existence de perturbations électriques se propageant plus vite que la lumière. En effet, seul le champ électrique *total*, $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\parallel} + \mathbf{E}_{\perp}$, a un sens physique, et on peut montrer que le champ transverse $\mathbf{E}_{\perp}$ a, lui aussi, une composante instantanée qui compense exactement celle de $\mathbf{E}_{\parallel}$, de sorte que le champ total reste toujours purement retardé. Nous reviendrons ultérieurement sur ce point (§ B.6).

Considérons maintenant les parties longitudinales de (B.5.c) et (B.5.d). Les deux membres de (B.5.c) sont transverses. La partie longitudinale de (B.5.d) s'écrit

$$\dot{\mathcal{E}}_{\parallel} + \frac{1}{\epsilon_0} j_{\parallel} = 0. \quad (\text{B.22})$$

Prenant le produit scalaire de (B.22) avec $\mathbf{k}$, utilisant (B.19) et le fait que $\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}_{\parallel} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{j}$, on obtient alors

$$\dot{\rho} + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (\text{B.23})$$

qui n'est autre que l'équation de conservation de la charge (B.6) et n'apporte donc rien de nouveau.

Remarques

(i) Des expressions (A.10.b), ou (B.7.b), reliant le champ électrique aux potentiels, il découle que

$$\mathbf{E}_{\perp} = -\dot{\mathbf{A}}_{\perp} \quad (\text{B.24.a})$$

$$\mathbf{E}_{\parallel} = -\dot{\mathbf{A}}_{\parallel} - \nabla U. \quad (\text{B.24.b})$$

En jauge de Coulomb, nous avons $\mathbf{A}_{\parallel} = 0$, de sorte que

$$\mathbf{A}_{\parallel} = 0 \rightarrow \mathbf{E}_{\parallel} = -\nabla U. \quad (\text{B.25.a})$$

Il s'ensuit que les parties longitudinale et transverse de $\mathbf{E}$ sont, en jauge de Coulomb, respectivement associées à U et $\mathbf{A}$. La comparaison de (B.25.a) et (B.21) montre qu'en jauge de Coulomb, U n'est autre que le potentiel coulombien de la distribution de charges

$$\mathbf{A}_{\parallel} = 0 \rightarrow U(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (\text{B.25.b})$$

Un tel résultat pourrait être également déduit directement de l'équation (A.18.a). La solution de cette équation de Poisson (tendant vers zéro quand $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$) n'est autre que (B.25.b).

(ii) Il apparaît clairement sur (B.8.a) qu'une transformation de jauge ne change pas $A_{\perp}$. Il s'ensuit que le *potentiel vecteur transverse* $A_{\perp}$ est invariant de jauge.

$$A'_{\perp} = A_{\perp}. \quad (\text{B.26})$$

(iii) Nous regroupons ici les équations de Maxwell en deux ensembles : (A.1.a) et (A.1.b) donnant les champs longitudinaux, (A.1.c) et (A.1.d) donnant la vitesse de variation des champs transverses (§ B.6). Un tel regroupement diffère de celui effectué en relativité, où les équations (A.1.b) et (A.1.c) d'une part, (A.1.a) et (A.1.d) de l'autre, sont combinées en deux équations covariantes

$$\partial_{\mu} F_{\nu\rho} + \partial_{\nu} F_{\rho\mu} + \partial_{\rho} F_{\mu\nu} = 0 \quad \mu \neq \nu \neq \rho \quad (\text{B.27.a})$$

$$\sum_{\mu} \partial_{\mu} F^{\mu\nu} = \frac{1}{\epsilon_0 c^2} j^{\nu} \quad (\text{B.27.b})$$

où

$$F_{\mu\nu} = \partial_{\mu} A_{\nu} - \partial_{\nu} A_{\mu} \quad (\text{B.28})$$

est le tenseur champ électromagnétique, A_{μ} le quadrivecteur potentiel, j_{μ} le quadrivecteur courant.

5. Contribution du champ électrique longitudinal à l'énergie totale, à l'impulsion totale et au moment cinétique total

Utilisons maintenant l'expression (B.19) de $\mathcal{E}_{\parallel}(\mathbf{k})$ pour évaluer la contribution du champ électrique longitudinal à quelques observables physiques importantes

a) ENERGIE TOTALE

L'identité de Parseval-Plancherel (B.3) permet d'écrire :

$$\frac{\epsilon_0}{2} \int d^3r \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} = \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3k \mathcal{E}^* \cdot \mathcal{E}. \quad (\text{B.29})$$

Remplaçons alors $\mathcal{E}$ par $\mathcal{E}_{\parallel} + \mathcal{E}_{\perp}$ et utilisons $\mathcal{E}_{\parallel} \cdot \mathcal{E}_{\perp} = 0$. Il vient

$$\frac{\epsilon_0}{2} \int d^3r \mathbf{E}^2 = \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3k |\mathcal{E}_{\parallel}(\mathbf{k})|^2 + \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3k |\mathcal{E}_{\perp}(\mathbf{k})|^2. \quad (\text{B.30})$$

Le premier terme de (B.30) est la contribution, H_{long} , du champ électrique longitudinal à l'énergie totale donnée en (A.7)

$$H_{\text{long}} = \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3k |\mathcal{E}_{\parallel}(\mathbf{k})|^2 = \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3r \mathbf{E}_{\parallel}^2(\mathbf{r}) \quad (\text{B.31.a})$$

alors que le second, ajouté à l'énergie magnétique, donne la contribution, H_{trans} , des champs transverses $\mathbf{E}_\perp$ et $\mathbf{B}$

$$\begin{aligned} H_{\text{trans}} &= \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3k [|\mathcal{E}_\perp(\mathbf{k})|^2 + c^2 |\mathcal{B}(\mathbf{k})|^2] \\ &= \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3r [\mathbf{E}_\perp^2(\mathbf{r}) + c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{r})]. \end{aligned} \quad (\text{B.31. b})$$

En reportant dans (B.31. a) l'expression (B.19) de $\mathcal{E}_\parallel(\mathbf{k})$, on obtient

$$H_{\text{long}} = \frac{1}{2 \varepsilon_0} \int d^3k \rho^*(\mathbf{k}) \frac{\rho(\mathbf{k})}{k^2} \quad (\text{B.32})$$

qui s'écrit encore, compte tenu de (B.3) et (B.4)

$$H_{\text{long}} = \frac{1}{8 \pi \varepsilon_0} \iint d^3r d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (\text{B.33})$$

H_{long} est donc l'énergie électrostatique coulombienne de la distribution de charges. Calculons enfin H_{long} pour une distribution de charges ponctuelles. Il est commode pour cela d'utiliser l'expression

$$\rho(\mathbf{k}) = \sum_\alpha \frac{q_\alpha}{(2 \pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha} \quad (\text{B.34})$$

de la transformée de Fourier de la distribution de charges donnée en (A.5.a). En reportant (B.34) dans (B.32), on obtient

$$H_{\text{long}} = V_{\text{Coul}} = \sum_\alpha \frac{q_\alpha^2}{2 \varepsilon_0 (2 \pi)^3} \int \frac{d^3k}{k^2} + \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{q_\alpha q_\beta}{2 \varepsilon_0 (2 \pi)^3} \int d^3k \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta)}}{k^2}. \quad (\text{B.35})$$

Le premier terme de (B.35) peut s'écrire $\sum_\alpha \varepsilon_{\text{Coul}}^\alpha$, où

$$\varepsilon_{\text{Coul}}^\alpha = \frac{q_\alpha^2}{2 \varepsilon_0 (2 \pi)^3} \int \frac{d^3k}{k^2} \quad (\text{B.36})$$

est l'énergie coulombienne propre de la particule α (en fait, une quantité infinie, à moins qu'une coupure ne soit introduite dans l'intégrale sur k). Le second terme de (B.35) n'est autre que l'interaction coulombienne entre paires de particules (α, β) de sorte que finalement

$$H_{\text{long}} = V_{\text{Coul}} = \sum_\alpha \varepsilon_{\text{Coul}}^\alpha + \frac{1}{8 \pi \varepsilon_0} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{q_\alpha q_\beta}{|\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta|}. \quad (\text{B.37})$$

En conclusion, nous avons donc montré dans ce paragraphe que l'énergie totale (A. 7) du système peut s'écrire

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 + V_{\text{Coul}} + H_{\text{trans}} \quad (\text{B. 38})$$

et apparaît comme la somme de trois énergies : l'énergie cinétique des particules (premier terme), leur énergie coulombienne (second terme) et l'énergie des champs transverses (troisième terme). Comme dans le paragraphe précédent, ces résultats sont indépendants de tout choix de jauge.

b) IMPULSION TOTALE

Remplaçons $\mathbf{E}$ par $\mathbf{E}_{\parallel} + \mathbf{E}_{\perp}$ dans le second terme de (A. 8). L'impulsion totale du champ apparaît alors comme la somme de deux contributions $\mathbf{P}_{\text{long}}$ et $\mathbf{P}_{\text{trans}}$ données par

$$\mathbf{P}_{\text{long}} = \varepsilon_0 \int d^3r \mathbf{E}_{\parallel}(\mathbf{r}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \varepsilon_0 \int d^3k \mathcal{E}_{\parallel}^*(\mathbf{k}) \times \mathcal{B}(\mathbf{k}) \quad (\text{B. 39. a})$$

$$\mathbf{P}_{\text{trans}} = \varepsilon_0 \int d^3r \mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \varepsilon_0 \int d^3k \mathcal{E}_{\perp}^*(\mathbf{k}) \times \mathcal{B}(\mathbf{k}). \quad (\text{B. 39. b})$$

En utilisant l'expression (B. 19) de $\mathcal{E}_{\parallel}$, la relation (B. 7. a) entre $\mathcal{B}$ et $\mathcal{A}$ et l'identité

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) \mathbf{b} - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{c} \quad (\text{B. 40})$$

on peut transformer (B. 39. a) en

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\text{long}} &= \varepsilon_0 \int d^3k \frac{i\rho^*}{\varepsilon_0} \frac{\mathbf{k}}{k^2} \times (i\mathbf{k} \times \mathcal{A}) \\ &= \int d^3k \rho^* [\mathcal{A} - \kappa(\kappa \cdot \mathcal{A})]. \end{aligned} \quad (\text{B. 41})$$

Le terme entre crochets de (B. 41) n'est autre que la partie transverse de $\mathcal{A}$, de sorte que $\mathbf{P}_{\text{long}}$ prend la forme plus simple

$$\mathbf{P}_{\text{long}} = \int d^3k \rho^* \mathcal{A}_{\perp} = \int d^3r \rho \mathbf{A}_{\perp} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha}) \quad (\text{B. 42})$$

(nous avons utilisé l'expression (A. 5. a) de ρ). Comme plus haut, un tel résultat est indépendant de tout choix de jauge, puisque $\mathbf{A}_{\perp}$ est, d'après (B. 26), invariant de jauge.

Finalement, l'impulsion totale $\mathbf{P}$ donnée en (A.8) peut s'écrire

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} [m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} + q_{\alpha} \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha})] + \mathbf{P}_{\text{trans}} \quad (\text{B.43})$$

et apparaît comme la somme des « quantités de mouvement » $m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}$ des particules, de l'impulsion du champ longitudinal, $\sum_{\alpha} q_{\alpha} \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha})$, et de l'impulsion du champ transverse. L'expression (B.43) suggère d'introduire, pour chaque particule α , la quantité

$$\mathbf{p}_{\alpha} = m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} + q_{\alpha} \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha}) \quad (\text{B.44})$$

de sorte que $\mathbf{P}$ peut encore s'écrire

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha} + \mathbf{P}_{\text{trans}}. \quad (\text{B.45})$$

En fait, on peut montrer qu'en jauge de Coulomb, $\mathbf{p}_{\alpha}$ est le « moment conjugué » de $\mathbf{r}_{\alpha}$, ou encore « l'impulsion généralisée » de la particule α (voir le § C.3 du chapitre II). Il apparaît donc qu'en jauge de Coulomb, la différence entre l'impulsion $\mathbf{p}_{\alpha}$ et la quantité de mouvement $m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}$ de la particule α n'est autre que l'impulsion associée au champ longitudinal de la particule α .

Remarque

Compte tenu de (B.44), l'énergie totale donnée en (B.38) peut s'écrire

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha})]^2 + V_{\text{Coul}} + H_{\text{trans}}. \quad (\text{B.46})$$

On peut montrer que H n'est autre que l'hamiltonien du système en jauge de Coulomb (voir le § C.3 du chapitre II).

c) MOMENT CINÉTIQUE TOTAL

Des calculs analogues aux précédents (voir aussi le § I du complément B_I) permettent de montrer que le moment cinétique total $\mathbf{J}$ donné en (A.9) peut s'écrire

$$\mathbf{J} = \sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{p}_{\alpha} + \mathbf{J}_{\text{trans}} \quad (\text{B.47})$$

où $\mathbf{p}_{\alpha}$ est défini en (B.44), et où

$$\mathbf{J}_{\text{trans}} = \varepsilon_0 \int d^3r \, \mathbf{r} \times [\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r})] \quad (\text{B.48})$$

est le moment cinétique du champ transverse.

6. Equations du mouvement des champs transverses

Revenons aux deux dernières équations de Maxwell (B.5.c) et (B.5.d) et considérons les parties transverses de ces deux équations qui peuvent être écrites sous la forme

$$\begin{cases} \dot{\mathcal{B}} = -ik \times \mathcal{E} = -ik \times \mathcal{E}_\perp & (\text{B.49.a}) \\ \dot{\mathcal{E}}_\perp = ic^2 \mathbf{k} \times \mathcal{B} - \frac{1}{\epsilon_0} j_\perp. & (\text{B.49.b}) \end{cases}$$

Les deux dernières équations de Maxwell apparaissent donc comme des équations dynamiques donnant la vitesse de variation des champs transverses $\mathcal{B}$ et $\mathcal{E}_\perp$.

Il importe de noter que le terme source apparaissant dans l'équation du mouvement (B.49.b) de $\mathcal{E}_\perp$ est $j_\perp$, et non pas j . Comme, dans l'espace ordinaire, la relation entre $j_\perp$ et j n'est pas locale (voir remarque i du § B.3 ci-dessus), la vitesse de variation de $\mathcal{E}_\perp(\mathbf{r}, t)$, au point $\mathbf{r}$ et à l'instant t , dépend du courant $j(\mathbf{r}', t)$ en tous les autres points $\mathbf{r}'$ au même instant t . Il s'ensuit que $\mathcal{E}_\perp$ contient, comme $\mathcal{E}_\parallel$, des contributions instantanées de la distribution de charges, dont on peut montrer qu'elles se compensent exactement (voir exercice 3), de sorte que le champ total $\mathcal{E} = \mathcal{E}_\parallel + \mathcal{E}_\perp$ est purement retardé.

Pour conclure ce paragraphe B, il peut être utile de reconsidérer la définition (A.6) de « l'état » du système global champ + particules à l'instant t_0 . Comme le champ longitudinal peut en fait être réexprimé entièrement en fonction des $\mathbf{r}_\alpha$ (voir (B.21)), l'état du système est entièrement déterminé par la donnée de

$$\{ \mathcal{E}_\perp(\mathbf{k}, t_0), \mathcal{B}(\mathbf{k}, t_0), \mathbf{r}_\alpha(t_0), \dot{\mathbf{r}}_\alpha(t_0) \} \quad (\text{B.50})$$

pour tout $\mathbf{k}$ et tout α . Nous verrons dans le paragraphe suivant C qu'il est possible d'améliorer encore le choix des variables dynamiques caractérisant l'état du champ.

Remarque

Dans cette partie B, nous avons considéré uniquement les équations (B.5) relatives aux champs. Il est possible aussi d'étudier les parties longitudinale et transverse des équations (B.9) relatives aux potentiels. Comme le dernier terme de (B.9.b) est longitudinal, la partie transverse de (B.9.b) s'écrit

$$\frac{1}{c^2} \ddot{\mathcal{A}}_\perp + k^2 \mathcal{A}_\perp = \frac{1}{\epsilon_0 c^2} j_\perp \quad (\text{B.51})$$

et devient dans l'espace réel

$$\square \mathcal{A}_\perp = \frac{1}{\epsilon_0 c^2} j_\perp. \quad (\text{B.52})$$

Une telle équation est très analogue à (A.14.b), à part que nous avons maintenant $\mathbf{A}_\perp$ et $\mathbf{j}_\perp$ au lieu de $\mathbf{A}$ et $\mathbf{j}$. Si l'on prend la partie longitudinale de (B.9.b) et qu'on utilise (B.9.a) pour éliminer $\dot{\mathcal{U}}$, on obtient, une fois de plus, l'équation de conservation de la charge (B.6). Comme pour (B.5.d), la partie longitudinale de (B.9.b) n'apporte rien de nouveau. Finalement, il ne nous reste plus que la seule équation (B.9.a), qui peut être écrite

$$k^2 \mathcal{U} = \frac{1}{\varepsilon_0} \rho + i\mathbf{k} \cdot \dot{\mathcal{A}}_\parallel \quad (\text{B.53})$$

(puisque $\mathbf{k} \cdot \mathcal{A}_\perp = 0$), et qui n'est pas suffisante pour déterminer le mouvement de $\mathcal{A}_\parallel$ et $\mathcal{U}$. Un tel résultat n'est pas surprenant puisque les potentiels sont redondants. Pour déterminer $\mathcal{A}_\parallel$ et $\mathcal{U}$, il nous faut une condition supplémentaire, c'est-à-dire une condition de jauge. Si nous choisissons la jauge de Coulomb, nous faisons $\mathcal{A}_\parallel = 0$ et (B.53) donne alors $\mathcal{U}$. Si nous choisissons la jauge de Lorentz, la condition supplémentaire (A.13) s'écrit dans l'espace réciproque

$$\dot{\mathcal{U}} = -ic^2 \mathbf{k} \cdot \mathcal{A}_\parallel. \quad (\text{B.54})$$

Les équations (B.53) et (B.54) forment alors un système de deux équations du premier ordre décrivant l'évolution de $\mathcal{A}_\parallel$ et $\mathcal{U}$. D'autres choix de conditions de jauge sont bien sûr possibles.

C — VARIABLES NORMALES

1. Idée générale

Dans l'espace ordinaire, les vitesses de variation $\dot{\mathbf{E}}(\mathbf{r})$ et $\dot{\mathbf{B}}(\mathbf{r})$ des champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ au point $\mathbf{r}$ dépendent des dérivées spatiales de $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$, donc des valeurs de $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ au voisinage de $\mathbf{r}$. Les équations de Maxwell (A. 1) sont des équations aux *dérivées partielles*.

En passant dans l'espace réciproque, nous avons tout d'abord éliminé $\mathcal{E}_{\parallel}(\mathbf{k})$, qui n'est pas réellement une variable dynamique, puisqu'il peut être réexprimé en fonction des $\mathbf{r}_\alpha$, et nous avons alors montré que les vitesses $\dot{\mathcal{E}}_{\perp}(\mathbf{k})$ et $\dot{\mathcal{B}}(\mathbf{k})$ dépendent seulement des valeurs de $\mathcal{E}_{\perp}(\mathbf{k})$ et $\mathcal{B}(\mathbf{k})$ (et aussi de $j_{\perp}(\mathbf{k})$) au même point $\mathbf{k}$. Les équations (B. 49) forment, en chaque point $\mathbf{k}$, un système de deux équations *différentielles* couplées.

L'examen du système différentiel linéaire (B. 49) suggère alors d'essayer d'introduire deux combinaisons linéaires de $\mathcal{E}_{\perp}$ et $\mathcal{B}$ qui évoluent *indépendamment* l'une de l'autre, au moins pour le champ libre, quand $j_{\perp} = 0$.

2. Définition des variables normales

Réécrivons tout d'abord les équations (B. 49) sous la forme

$$\begin{cases} \dot{\mathcal{E}}_{\perp} = ic^2 \mathbf{k} \times \mathcal{B} - \frac{1}{\epsilon_0} j_{\perp} & \text{(C. 1. a)} \\ \mathbf{k} \times \dot{\mathcal{B}} = ik^2 \mathcal{E}_{\perp}. & \text{(C. 1. b)} \end{cases}$$

Nous recherchons les fonctions propres d'un tel système quand $j_{\perp} = 0$. On déduit alors de (C. 1) que

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathcal{E}_{\perp} \mp c\mathbf{k} \times \mathcal{B}) = \mp i\omega (\mathcal{E}_{\perp} \mp c\mathbf{k} \times \mathcal{B}) \quad \text{(C. 2)}$$

avec

$$\omega = ck \quad \mathbf{\kappa} = \mathbf{k}/k. \quad \text{(C. 3)}$$

Nous sommes ainsi conduits à *définir*, même si $j_{\perp} \neq 0$, deux nouvelles variables $\alpha(\mathbf{k}, t)$ et $\beta(\mathbf{k}, t)$ par

$$\begin{cases} \alpha(\mathbf{k}, t) = -\frac{i}{2\mathcal{N}(k)} [\mathcal{E}_{\perp}(\mathbf{k}, t) - c\mathbf{k} \times \mathcal{B}(\mathbf{k}, t)] & \text{(C. 4. a)} \\ \beta(\mathbf{k}, t) = -\frac{i}{2\mathcal{N}(k)} [\mathcal{E}_{\perp}(\mathbf{k}, t) + c\mathbf{k} \times \mathcal{B}(\mathbf{k}, t)] & \text{(C. 4. b)} \end{cases}$$

Enfin, si les sources sont des particules interagissant avec le champ, le mouvement de $j_{\perp}$ dépend des α , de sorte que l'évolution des diverses variables $\alpha(\mathbf{k}, t)$ est en général couplée par l'intermédiaire du courant $j_{\perp}(\mathbf{k}, t)$. Il faut alors ajouter à (C.8) l'équation du mouvement de $j_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ (déterminée à partir de l'équation de Newton-Lorentz (A.2), et de la définition (A.5) du courant), et essayer de résoudre cet ensemble d'équations couplées.

Avant de terminer ce paragraphe, introduisons une nouvelle notation. Comme α est (de même que $\mathcal{E}_{\perp}$ et $\mathcal{B}$) un champ vectoriel transverse, on peut, pour chaque valeur de $\mathbf{k}$, développer $\alpha(\mathbf{k}, t)$ sur deux vecteurs unitaires ε et ε' , perpendiculaires entre eux et contenus tous deux dans le plan perpendiculaire à $\mathbf{k}$ (Fig. 1)

$$\begin{aligned}\varepsilon \cdot \varepsilon &= \varepsilon' \cdot \varepsilon' = \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = 1 \\ \varepsilon \cdot \varepsilon' &= \varepsilon \cdot \mathbf{k} = \varepsilon' \cdot \mathbf{k} = 0.\end{aligned}\tag{C.9}$$

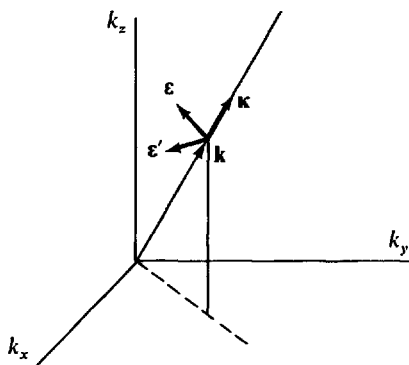


Figure 1. — Vecteurs polarisation transverses ε et ε' .

Nous avons donc

$$\begin{aligned}\alpha(\mathbf{k}, t) &= \varepsilon \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) + \varepsilon' \alpha_{\varepsilon'}(\mathbf{k}, t) \\ &= \sum_{\varepsilon} \varepsilon \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t)\end{aligned}\tag{C.10}$$

où

$$\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) = \varepsilon \cdot \alpha(\mathbf{k}, t)\tag{C.11}$$

est la composante de α le long de ε . L'ensemble $\{ \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) \}$, pour toutes les valeurs de $\mathbf{k}$ et de ε , forme donc un ensemble complet de variables indépendantes pour le champ transverse. L'équation du mouvement de $\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t)$ est

$$\dot{\alpha}_e(\mathbf{k}, t) + i\omega\alpha_e(\mathbf{k}, t) = \frac{i}{2\varepsilon_0 \mathcal{N}(k)} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{C.12})$$

où nous avons utilisé $\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{j}_\perp = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{j}$.

4. Expression des observables physiques du champ transverse en fonction des variables normales

Nous utiliserons toujours par la suite les variables normales $\alpha_e(\mathbf{k}, t)$ (et les opérateurs quantiques correspondants) pour caractériser l'état du champ transverse. Il est donc important de donner, dans ce paragraphe, l'expression des diverses observables physiques du champ transverse en fonction des α_e .

a) ENERGIE DU CHAMP TRANSVERSE H_{trans}

Reportons dans (B.31.b) les expressions (C.6) de $\mathcal{E}_\perp$ et $\mathcal{B}$ en fonction de α et α^* [nous utilisons la notation plus concise α^*_- pour $\alpha^*(-\mathbf{k}, t)$]. Nous respectons en outre l'ordre entre α et α^* , tel qu'il apparaît dans les calculs, même si α et α^* sont des nombres qui commutent. La raison en est que des calculs très semblables devront être faits en électrodynamique quantique, α et α^* étant dans ce cas remplacés par des opérateurs qui ne commutent pas entre eux. Les résultats obtenus dans ce paragraphe pourront alors être généralisés sans modifications au cas quantique.

De (C.6), on déduit

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_\perp^* \cdot \mathcal{E}_\perp &= \mathcal{N}^2(\alpha^* - \alpha_-) \cdot (\alpha - \alpha^*_-) \\ &= \mathcal{N}^2(\alpha^* \cdot \alpha + \alpha_- \cdot \alpha^* - \alpha^* \cdot \alpha^*_- - \alpha_- \cdot \alpha) \\ c^2 \mathcal{B}^* \cdot \mathcal{B} &= \mathcal{N}^2(\alpha^* + \alpha_-) \cdot (\alpha + \alpha^*_-) \\ &= \mathcal{N}^2(\alpha^* \cdot \alpha + \alpha_- \cdot \alpha^* + \alpha^* \cdot \alpha^*_- + \alpha_- \cdot \alpha) \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

de sorte que (B.31.b) devient

$$H_{\text{trans}} = \varepsilon_0 \int d^3k \mathcal{N}^2[\alpha^* \cdot \alpha + \alpha_- \cdot \alpha^*]. \quad (\text{C.14})$$

Le changement de $\mathbf{k}$ en $-\mathbf{k}$ dans l'intégrale du deuxième terme permet de remplacer $\alpha_- \cdot \alpha^*_-$ par $\alpha \cdot \alpha^*$. Si l'on fixe maintenant pour le coefficient de normalisation $\mathcal{N}(k)$ la valeur

$$\mathcal{N}(k) = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0}} \quad (\text{C.15})$$

choisie de manière à avoir en théorie quantique des relations de commu-

tation simples entre les opérateurs correspondant à α_ε et α_ε^* , l'expression (C.14) prend la forme plus suggestive

$$H_{\text{trans}} = \int d^3k \sum_{\varepsilon} \frac{\hbar\omega}{2} [\alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t) \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) + \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) \alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)]. \quad (\text{C.16})$$

Elle apparaît comme la somme des énergies d'un ensemble d'oscillateurs harmoniques fictifs, un oscillateur de fréquence $\omega = ck$ étant associé à chaque couple de vecteurs $\mathbf{k}, \varepsilon$ (avec ε perpendiculaire à $\mathbf{k}$). Un tel couple $(\mathbf{k}, \varepsilon)$ définit un « mode » du champ transverse.

b) IMPULSION $\mathbf{P}_{\text{trans}}$ ET MOMENT CINÉTIQUE $\mathbf{J}_{\text{trans}}$ DU CHAMP TRANSVERSE

Des calculs analogues aux précédents permettent d'obtenir, à partir de (B.39. b)

$$\mathbf{P}_{\text{trans}} = \int d^3k \sum_{\varepsilon} \frac{\hbar\mathbf{k}}{2} [\alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t) \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) + \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) \alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)]. \quad (\text{C.17})$$

Pour le moment cinétique $\mathbf{J}_{\text{trans}}$ du champ transverse, donné en (B.48), les calculs sont un peu plus laborieux que pour H_{trans} et $\mathbf{P}_{\text{trans}}$ (voir § 2b du complément B₁). Le résultat est le suivant

$$J_a^{\text{trans}} = \frac{\hbar}{2i} \sum_{bcd} \int d^3k [\alpha_d^* \varepsilon_{abc} k_b \partial_c \alpha_d + \alpha_b^* \varepsilon_{abc} \alpha_c - \alpha_d \varepsilon_{abc} k_b \partial_c \alpha_d^* - \alpha_b \varepsilon_{abc} \alpha_c^*] \quad (\text{C.18})$$

où $a, b, c, d = x, y$ ou z , $\partial_c = \partial/\partial k_c$, et ε_{abc} est le tenseur complètement antisymétrique.

Remarque

Dans les expressions de $\mathbf{P}_{\text{trans}}$ et $\mathbf{J}_{\text{trans}}$ apparaît le produit $\mathbf{E}_{\perp} \times \mathbf{B}$. En théorie quantique, $\mathbf{E}_{\perp}$ et $\mathbf{B}$ deviennent des opérateurs, et on peut se demander s'il ne faudrait pas symétriser $\mathbf{E}_{\perp} \times \mathbf{B}$ sous la forme $(\mathbf{E}_{\perp} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \mathbf{E}_{\perp})/2$. En fait, $\mathbf{E}_{\perp}$ et $\mathbf{B}$ sont pris au même point $\mathbf{r}$ de l'espace, et nous verrons au chapitre III (§ A.2) que $\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ sont deux observables qui commutent, de sorte que la symétrisation est inutile.

c) CHAMPS ÉLECTRIQUE ET MAGNÉTIQUE TRANSVERSES DANS L'ESPACE RÉEL

Les développements de $\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ sont obtenus en prenant les transformées de Fourier de (C.6.a) et (C.6.b) (dans l'intégrale sur $\mathbf{k}$ des derniers termes de (C.6.a) et (C.6.b), on change également $\mathbf{k}$ en $-\mathbf{k}$). Il vient ainsi

$$\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}, t) = i \int d^3k \sum_{\varepsilon} \mathcal{E}_{\omega} [\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) \varepsilon e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t) \varepsilon e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}] \quad (\text{C.19})$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = i \int d^3k \sum_{\epsilon} \mathcal{B}_{\omega} [\alpha_{\epsilon}(\mathbf{k}, t) \boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\epsilon} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \alpha_{\epsilon}^*(\mathbf{k}, t) \boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\epsilon} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}] \quad (\text{C.20})$$

avec

$$\mathcal{E}_{\omega} = \left[\frac{\hbar \omega}{2 \epsilon_0 (2\pi)^3} \right]^{1/2} \quad \mathcal{B}_{\omega} = \mathcal{E}_{\omega}/c. \quad (\text{C.21})$$

La réalité (*) de $\mathbf{E}_{\perp}$ et $\mathbf{B}$ est manifeste sur (C.19) et (C.20).

Pour le *champ libre* ($\mathbf{j}_{\perp} = 0$), la solution de l'équation du mouvement (C.12) de α_{ϵ} est

$$\alpha_{\epsilon}(\mathbf{k}, t) = \alpha_{\epsilon}(\mathbf{k}) e^{-i\omega t}. \quad (\text{C.22})$$

Reportant (C.22) dans (C.19) et (C.20), on obtient alors pour $\mathbf{E}_{\perp}$ et $\mathbf{B}$ des développements en *ondes planes progressives* $e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$, de vecteur d'onde $\mathbf{k}$. Par exemple,

$$\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}, t) = i \int d^3k \sum_{\epsilon} \mathcal{E}_{\omega} \alpha_{\epsilon}(\mathbf{k}) \boldsymbol{\epsilon} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + \text{c.c.} \quad (\text{C.23})$$

Il est facile aussi de vérifier qu'avec la solution (C.22) pour un champ libre, les expressions (C.16), (C.17) et (C.18) de H_{trans} , $\mathbf{P}_{\text{trans}}$ et $\mathbf{J}_{\text{trans}}$ sont des constantes du mouvement (indépendantes de t).

Insistons bien sur le fait que la définition (C.4) des variables normales, de même que les développements (C.16) à (C.20) qui en découlent, sont valables en présence ou en absence de sources. Par contre, la solution simple (C.22) pour $\alpha_{\epsilon}(\mathbf{k}, t)$ ne s'applique qu'au champ libre. En présence de sources, la solution de l'équation du mouvement (C.12) est plus compliquée que (C.22), et les développements (C.19) et (C.20) de $\mathbf{E}_{\perp}$ et $\mathbf{B}$ ne sont plus des superpositions linéaires d'ondes planes progressives. De même, l'énergie du champ transverse donnée en (C.16) n'est plus une constante du mouvement. Des échanges d'énergie se produisent entre le champ transverse et les particules et, seule, l'énergie *totale* donnée en (B.38) est conservée. Les mêmes idées restent valables pour $\mathbf{P}_{\text{trans}}$ et $\mathbf{J}_{\text{trans}}$.

Il est d'usage de noter $\mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{r}, t)$, la partie du développement (C.19) contenant seulement des $\alpha_{\epsilon}(\mathbf{k}, t)$ (et non des $\alpha_{\epsilon}^*(\mathbf{k}, t)$)

$$\mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{r}, t) = i \int d^3k \sum_{\epsilon} \mathcal{E}_{\omega} \alpha_{\epsilon}(\mathbf{k}, t) \boldsymbol{\epsilon} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (\text{C.24})$$

(*) Le vecteur polarisation $\boldsymbol{\epsilon}$ est réel. Il est bien sûr possible d'introduire des vecteurs polarisation complexes pour décrire des modes du champ transverse ayant une polarisation circulaire ou elliptique. Il faut dans ce cas remplacer le second $\boldsymbol{\epsilon}$ de (C.19) et (C.20) par $\boldsymbol{\epsilon}^*$.

La partie restante de (C.19) est notée $E_{\perp}^{(-)}(\mathbf{r}, t)$

$$E_{\perp}^{(-)}(\mathbf{r}, t) = [E_{\perp}^{(+)}(\mathbf{r}, t)]^* \quad (\text{C.25})$$

Pour un champ libre, $E_{\perp}^{(+)}$ est la partie de fréquence positive de $E_{\perp}$, $E_{\perp}^{(-)}$ la partie de fréquence négative.

d) POTENTIEL VECTEUR TRANSVERSE $A_{\perp}(\mathbf{r}, t)$

Pour la suite, il sera également utile de donner le développement sur les variables normales de la partie transverse $A_{\perp}$ du potentiel vecteur A . Rappelons que $A_{\perp}$ est invariant de jauge (voir éq. (B.26)).

Remarquons tout d'abord que les champs transverses $E_{\perp}$ et B ne sont reliés qu'à $A_{\perp}$. De (A.10.a) et (B.24.a), il découle en effet que

$$\begin{cases} E_{\perp}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} A_{\perp}(\mathbf{r}, t) & (\text{C.26.a}) \\ B(\mathbf{r}, t) = \nabla \times A_{\perp}(\mathbf{r}, t) & (\text{C.26.b}) \end{cases}$$

[puisque $\nabla \times A_{\parallel} = 0$].

Montrons maintenant que $A_{\perp}(\mathbf{r}, t)$ peut s'écrire

$$A_{\perp}(\mathbf{r}, t) = \int d^3k \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{A}_{\omega}[\alpha_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}, t) \varepsilon e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \text{c.c.}] \quad (\text{C.27})$$

avec

$$\mathcal{A}_{\omega} = \mathcal{B}_{\omega}/k = \mathcal{E}_{\omega}/\omega. \quad (\text{C.28})$$

Comme ε est perpendiculaire à $\mathbf{k}$, le champ vectoriel (C.27) est transverse. Si l'on prend le rotationnel de l'expression (C.27), on retrouve le développement (C.20) de B , de sorte que (C.27) vérifie (C.26.b). Comme $A_{\perp}$ est de divergence nulle, l'équation (C.26.b) suffit à le déterminer entièrement et les équations de Maxwell entraînent que (C.26.a) est automatiquement vérifiée.

On peut également calculer la transformée de Fourier $\mathcal{A}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ de $A_{\perp}(\mathbf{r}, t)$. Après changement de $\mathbf{k}$ en $-\mathbf{k}$ dans la deuxième intégrale de (C.27), il vient

$$\mathcal{A}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega}} [\alpha(\mathbf{k}, t) + \alpha^*(-\mathbf{k}, t)]. \quad (\text{C.29})$$

Il est possible enfin de combiner (C.29) et (C.6.a) pour exprimer α en fonction de $\mathcal{A}_{\perp}$ et $\mathcal{E}_{\perp}$ (au lieu de $\mathcal{E}_{\perp}$ et $\mathcal{B}$ comme dans (C.4.a)).

$$\alpha(\mathbf{k}, t) = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2\hbar\omega}} [\omega\mathcal{A}_{\perp}(\mathbf{k}, t) - i\mathcal{E}_{\perp}(\mathbf{k}, t)]. \quad (\text{C.30})$$

5. Analogies et différences entre les variables normales et la fonction d'onde d'une particule de spin 1 dans l'espace réciproque.

Considérons tout d'abord le cas du champ libre. L'équation (C.8) peut s'écrire

$$i\hbar\dot{\alpha}(\mathbf{k}, t) = \hbar\omega\alpha(\mathbf{k}, t) \quad (\text{C.31})$$

et apparaît alors comme une équation de Schrödinger relative à une « fonction d'onde vectorielle » $\alpha(\mathbf{k}, t)$, l'hamiltonien correspondant étant diagonal dans l'espace réciproque, avec des éléments de matrice $\hbar\omega\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$. L'équation (C.16) peut aussi être interprétée comme la valeur moyenne d'un tel hamiltonien dans la fonction d'onde $\alpha(\mathbf{k}, t)$. De même, puisqu'en mécanique quantique, l'opérateur impulsion d'une particule est diagonal dans l'espace réciproque, avec des éléments de matrice $\hbar\mathbf{k}\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, l'équation (C.17) peut être interprétée comme la valeur moyenne de l'opérateur impulsion dans la fonction d'onde $\alpha(\mathbf{k}, t)$. Enfin, on peut montrer (voir § 2.c du complément B) que l'expression (C.18), donnant le moment cinétique du champ transverse, coïncide avec la valeur moyenne, dans la fonction d'onde $\alpha(\mathbf{k}, t)$, de $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ (où $\mathbf{L}$ et $\mathbf{S}$ sont les opérateurs quantiques usuels moment cinétique orbital et moment cinétique de spin). Le premier terme du crochet de (C.18) correspond à $\mathbf{L}$, le second à $\mathbf{S}$.

Tous les résultats précédents inciteraient à interpréter $\alpha(\mathbf{k}, t)$ comme la fonction d'onde, dans l'espace réciproque, d'une particule de spin 1 (*), qui serait le photon. Une telle analogie ne peut cependant être poussée trop loin. Tout d'abord, on peut montrer que la transformée de Fourier de $\alpha(\mathbf{k}, t)$ ne peut être interprétée comme la fonction d'onde du photon dans l'espace ordinaire, et, plus généralement, qu'il est impossible de construire un opérateur position pour le photon (**). Ensuite, l'équation d'évolution (C.8) de α n'a plus la structure d'une équation de Schrödinger en présence de sources : elle n'est pas homogène. Un tel résultat n'est d'ailleurs pas surprenant. L'équation de Schrödinger conserve la norme de la fonction d'onde, et donc le nombre des particules. Or, il est bien connu qu'en présence de sources, des photons peuvent être absorbés ou émis. Il est donc impossible d'introduire une équation de Schrödinger pour un seul photon en présence de sources. En fait, la quantification doit porter sur le champ électromagnétique lui-même, les photons apparaissant alors comme des excitations élémentaires du champ quantifié. Nous verrons dans les chapitres suivants que la « fonction d'onde », plus précisément le « vecteur d'état », du champ quantifié est un vecteur d'un

(*) La valeur 1 du spin est liée au caractère vectoriel de α . (Voir Akhiezer et Berestetski, chap. I.)

(**) Voir par exemple : E. Wigner and T. D. Newton, *Rev. Mod. Phys.* 21 (1949) 400 ; M. H. L. Pryce, *Proc. Roy. Soc.* 195A (1948) 62.

espace de Fock où le nombre de photons peut varier entre zéro (état vide) et l'infini.

L'analogie précédente peut cependant être utile. Elle suggère par exemple d'étudier les fonctions propres transverses de J^2 et J_z dans l'espace réciproque. Ceci conduit au développement multipolaire du champ transverse (voir complément B₁), plus commode que le développement en ondes planes (donné plus haut) dans tous les problèmes où le moment cinétique joue un rôle important.

6. Conditions aux limites périodiques. Introduction de notations plus simples

Il est courant de considérer les champs comme étant contenus dans un cube de côté L , et satisfaisant à des conditions aux limites périodiques sur les parois du cube. A la fin des calculs, on fait tendre L vers l'infini. Toutes les prédictions physiques (sections efficaces, probabilités de transition...) doivent bien sûr être indépendantes de L .

L'avantage d'une telle procédure est de remplacer des intégrales de Fourier par des séries de Fourier. En d'autres termes, les intégrales sur $\mathbf{k}$ sont remplacées par des sommes discrètes sur

$$k_{x,y,z} = 2 \pi n_{x,y,z} / L \quad (\text{C. 32})$$

où $n_{x,y,z}$ sont des entiers (positifs, négatifs ou nuls). Les variables $\alpha_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}, t)$ sont remplacées par des variables discrètes $\alpha_{\mathbf{k}_i}(t)$:

$$\alpha_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}, t) \rightarrow \alpha_{\mathbf{k}_i}(t). \quad (\text{C. 33. a})$$

On peut même utiliser des notations plus concises

$$\alpha_{\mathbf{k}_i}(t) \rightarrow \alpha_i \quad (\text{C. 33. b})$$

où l'indice i désigne l'ensemble $(\mathbf{k}_i, \varepsilon_i)$. La correspondance entre les deux types de somme obéit à la règle suivante

$$\int d^3k \sum_{\varepsilon} f(\mathbf{k}, \varepsilon) \leftrightarrow \sum_i \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 f(\mathbf{k}_i, \varepsilon_i). \quad (\text{C. 34})$$

A titre de récapitulation, donnons maintenant les développements en α_i et α_i^* de H_{trans} , $\mathbf{P}_{\text{trans}}$, $\mathbf{A}_{\perp}$, $\mathbf{E}_{\perp}$, $\mathbf{B}$

$$H_{\text{trans}} = \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2} (\alpha_i^* \alpha_i + \alpha_i \alpha_i^*) \quad (\text{C. 35})$$

$$\mathbf{P}_{\text{trans}} = \sum_i \frac{\hbar \mathbf{k}_i}{2} (\alpha_i^* \alpha_i + \alpha_i \alpha_i^*) \quad (\text{C. 36})$$

$$\mathbf{A}_{\perp} = \sum_i \mathcal{A}_{\omega_i} [\alpha_i \varepsilon_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \alpha_i^* \varepsilon_i e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}] \quad (\text{C. 37})$$

$$\mathbf{E}_\perp = i \sum_i \mathcal{E}_{\omega_i} [\alpha_i \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} - \alpha_i^* \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}] \quad (\text{C.38})$$

$$\mathbf{B} = i \sum_i \mathcal{B}_{\omega_i} [\alpha_i \boldsymbol{\kappa}_i \times \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} - \alpha_i^* \boldsymbol{\kappa}_i \times \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}] \quad (\text{C.39})$$

avec

$$\mathcal{E}_{\omega_i} = \left[\frac{\hbar \omega_i}{2 \varepsilon_0 L^3} \right]^{1/2} \quad \mathcal{B}_{\omega_i} = \frac{\mathcal{E}_{\omega_i}}{c} \quad \mathcal{A}_{\omega_i} = \frac{\mathcal{E}_{\omega_i}}{\omega_i}. \quad (\text{C.40})$$

Dans ces expressions, $\sum_i$ veut dire sommation sur les modes $\mathbf{k}_i \boldsymbol{\varepsilon}_i$. Il convient de noter aussi que, lors du passage des intégrales de Fourier aux séries de Fourier, le facteur $(1/2 \pi)^{3/2}$ des équations (B.1) est remplacé par $1/L^{3/2}$. Ceci explique pourquoi $\mathcal{E}_{\omega_i}$ contient L^3 au lieu de $(2 \pi)^3$ (comparer (C.21) et (C.40)). Finalement, l'équation d'évolution de α_i est

$$\ddot{\alpha}_i + i \omega_i \dot{\alpha}_i = \frac{i}{\sqrt{2 \varepsilon_0 \hbar \omega_i}} j_i \quad (\text{C.41})$$

avec

$$j_i = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \int d^3 r e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}). \quad (\text{C.42})$$

Remarque

La variable discrète α_i n'a pas la même dimension que la variable continue $\alpha_i(\mathbf{k})$. De façon plus précise,

$$\alpha_i = \left(\frac{2 \pi}{L} \right)^{3/2} \alpha_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{k}_i). \quad (\text{C.43})$$

D — CONCLUSION : DISCUSSION DE QUELQUES MÉTHODES POSSIBLES DE QUANTIFICATION

Après ce rapide survol de l'électrodynamique classique, se pose maintenant le problème de la quantification d'une telle théorie. Nous passons en revue dans cette conclusion quelques stratégies possibles de quantification, ce qui nous permettra d'éclairer le lecteur sur les motivations et l'organisation des chapitres qui suivent.

(i) *Approche élémentaire*

La formulation de l'électrodynamique classique que nous avons donnée dans ce chapitre se prête particulièrement bien à une telle approche.

Nous avons en effet montré que le système global champ électromagnétique + particules était formellement équivalent à un ensemble de particules et d'oscillateurs interagissant mutuellement. L'idée la plus simple qui vient alors à l'esprit pour quantifier un tel système est de quantifier particules et oscillateurs en associant à la position $\mathbf{r}_\alpha$ et à l'impulsion $\mathbf{p}_\alpha$ de la particule α des opérateurs (*) (dont le commutateur vaut $i\hbar$), et en remplaçant les variables normales α_i et α_i^* de l'oscillateur i par les opérateurs d'annihilation et de création a_i et a_i^+ , bien connus dans la théorie de l'oscillateur harmonique quantique (et dont le commutateur vaut 1)

$$\alpha_i \rightarrow a_i \quad \alpha_i^* \rightarrow a_i^+ . \quad (\text{D.1})$$

Toutes les grandeurs physiques qui, nous l'avons vu, s'expriment en fonction des $\mathbf{r}_\alpha$, $\mathbf{p}_\alpha$, α_i , α_i^* , deviennent ainsi des opérateurs agissant dans l'espace des états quantiques du système global.

Une telle approche est cependant insuffisante. Comme elle ne repose pas sur une formulation lagrangienne et hamiltonienne de l'électrodynamique, nous ne savons pas si $\mathbf{r}_\alpha$ et $\mathbf{p}_\alpha$ d'une part, α_i et α_i^* de l'autre [plus exactement $q_i = (\alpha_i + \alpha_i^*)\sqrt{\hbar/2}$ et $p_i = i(\alpha_i^* - \alpha_i)\sqrt{\hbar/2}$] peuvent être considérées comme des variables dynamiques conjuguées vis-à-vis d'un hamiltonien dont nous n'avons pas établi l'expression. Nous avons certes donné dans ce chapitre I l'expression de l'énergie totale du système, mais nous n'avons pas montré dans quelles conditions une telle expression peut être considérée comme l'hamiltonien du système.

Il est néanmoins possible de contourner cette difficulté. Postulons pour l'hamiltonien l'expression suivante en jauge de Coulomb

$$H = \sum_\alpha \frac{1}{2m_\alpha} [\mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha)]^2 + V_{\text{Coul}} + \sum_i \frac{\hbar\omega_i}{2} (a_i^+ a_i + a_i a_i^+) \quad (\text{D.2})$$

(*) Pour simplifier les notations, nous garderons les mêmes symboles pour désigner les variables classiques $\mathbf{r}_\alpha$ et $\mathbf{p}_\alpha$ relatives aux particules et les opérateurs associés.

qui n'est autre que l'expression (B.46) de l'énergie totale (en jauge de Coulomb, $\mathbf{A} = \mathbf{A}_\perp$), α_i et α_i^* étant remplacés dans l'expression (C.35) de H_{trans} par les opérateurs a_i et a_i^+ . Postulons également les relations de commutation suivantes, pour $\mathbf{r}_\alpha$ et $\mathbf{p}_\alpha$ d'une part

$$\begin{cases} [r_{\alpha i}, r_{\beta j}] = [p_{\alpha i}, p_{\beta j}] = 0 \\ [r_{\alpha i}, p_{\beta j}] = i\hbar \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \end{cases} \quad (\text{D.3})$$

où $i, j = x, y, z$ (le $\delta_{\alpha\beta}$ exprime que les variables de deux particules différentes commutent), pour a_i , et a_i^+ d'autre part

$$\begin{cases} [a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0 \\ [a_i, a_j^+] = \delta_{ij}. \end{cases} \quad (\text{D.4})$$

(Le δ_{ij} exprime que les variables de deux modes différents du champ transverse commutent.) On peut alors montrer (§ B 2 du chap. III) que les équations de Heisenberg, déduites de l'hamiltonien (D.2) et des relations de commutation (D.3) et (D.4), redonnent les bonnes équations du mouvement, c'est-à-dire les équations de Maxwell-Lorentz entre opérateurs.

Le lecteur prêt à admettre les points précédents, et désireux d'arriver le plus vite et le plus simplement possible à la théorie quantique, peut donc sauter le chapitre II consacré à la formulation lagrangienne et hamiltonienne de l'électrodynamique, et aborder directement le chapitre III qui part des relations données dans ce paragraphe.

(ii) *Approche lagrangienne et hamiltonienne*

Cette approche consiste à montrer tout d'abord que les équations de base de l'électrodynamique classique, les équations de Maxwell-Lorentz, peuvent être considérées comme des équations de Lagrange déduites variationnellement d'un certain lagrangien. La quantification (canonique) du système est effectuée alors en associant à chaque couple formé par une « coordonnée généralisée » et son moment « canoniquement conjugué » deux opérateurs dont le commutateur vaut $i\hbar$.

Bien que plus abstraite, une telle approche présente de nombreux avantages. Elle permet tout d'abord d'identifier clairement quelles sont les variables du champ qui sont canoniquement conjuguées l'une de l'autre (par exemple, en jauge de Coulomb, le potentiel vecteur et le champ électrique transverse), et d'obtenir directement l'expression de l'hamiltonien sans qu'il soit nécessaire de postuler une telle expression. Cette approche permet ensuite une compréhension plus profonde des problèmes liés au choix de la jauge. La jauge de Coulomb apparaît ainsi comme la jauge la plus « économique », permettant d'éliminer le plus simplement possible du lagrangien les variables dynamiques redondantes. Enfin, il est bien connu que deux lagrangiens ne différant que par une dérivée totale sont

physiquement équivalents. Il est donc possible de construire ainsi plusieurs formulations équivalentes de l'électrodynamique quantique et de discuter simplement les relations qui existent entre elles.

Le chapitre II qui suit présente l'électrodynamique classique à partir d'un tel point de vue et la quantification canonique qu'on peut ensuite faire d'une telle théorie. Les relations (D. 2), (D. 3) et (D. 4) seront ainsi justifiées de manière rigoureuse. Les changements de lagrangien et d'hamiltonien seront discutés dans le chapitre IV, ainsi que les diverses formulations de l'électrodynamique auxquelles ils donnent naissance.

Pour certains problèmes, il est important d'utiliser un formalisme manifestement covariant. Ceci conduit à choisir d'autres jauges que le jauge de Coulomb et complice notablement la procédure de quantification. Ces problèmes seront abordés dans le chapitre V.

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES ET CONSEILS DE LECTURE.

Jackson, Feynman (tome II), Landau et Lifchitz (tome II), Messiah (chap. XXI, § III), Akhiezer et Berestetski (chap. I), Cohen-Tannoudji (§ 1).

COMPLÉMENT A₁

LA FONCTION « DELTA TRANSVERSE »

La fonction « delta transverse » $\delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{p})$ permet de passer d'un champ vectoriel à sa partie transverse. Il est aisé de comprendre qu'elle joue un rôle important dans l'électrodynamique en jauge de Coulomb, dans la mesure où les champs transverses sont privilégiés dans cette jauge. Le but de ce complément est d'établir l'expression et les propriétés de cette fonction, et d'illustrer son utilité sur un exemple simple. L'expression de la fonction « delta transverse » est particulièrement simple dans l'espace réciproque. En revanche, nous verrons que le calcul de sa transformée de Fourier $\delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{p})$ présente quelques difficultés qui justifient la présentation détaillée que nous en donnons ici.

1. Définition dans l'espace réciproque

a) BASE CARTÉSIENNE, BASE TRANSVERSE ET LONGITUDINALE

Nous utiliserons pour repérer les champs vectoriels deux types de bases : une base cartésienne $\{\mathbf{e}_i\}$ ($i = x, y, z$), orthonormée, et la base constituée du vecteur unitaire longitudinal $\mathbf{\kappa} = \mathbf{k}/k$ et de 2 vecteurs unitaires transverses $\boldsymbol{\varepsilon}$ et $\boldsymbol{\varepsilon}'$, introduite dans l'espace réciproque (voir formule (C.9)). Les composantes cartésiennes du vecteur $\mathcal{V}$ seront notées $\mathcal{V}_i$. Nous serons souvent amenés à faire des sommations, sur les 2 polarisations transverses, de produits de composantes de $\boldsymbol{\varepsilon}$ et $\boldsymbol{\varepsilon}'$. Nous en donnons ici les expressions. Considérons d'abord

$$\begin{aligned} \sum_{\boldsymbol{\varepsilon} \perp \mathbf{k}} \varepsilon_i \varepsilon_j &= \varepsilon_i \varepsilon_j + \varepsilon'_i \varepsilon'_j \\ &= [(\mathbf{e}_i \cdot \boldsymbol{\varepsilon})(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{e}_j) + (\mathbf{e}_i \cdot \boldsymbol{\varepsilon}')(\boldsymbol{\varepsilon}' \cdot \mathbf{e}_j) + (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{\kappa})(\mathbf{\kappa} \cdot \mathbf{e}_j)] - \\ &\quad - (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{\kappa})(\mathbf{\kappa} \cdot \mathbf{e}_j) \\ &= \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j - (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{\kappa})(\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{\kappa}) \\ &= \delta_{ij} - \kappa_i \kappa_j. \end{aligned} \quad (1)$$

Envisageons maintenant :

$$\sum_{\boldsymbol{\varepsilon} \perp \mathbf{k}} \varepsilon_i (\mathbf{\kappa} \times \boldsymbol{\varepsilon})_j = \varepsilon_i \varepsilon'_j + \varepsilon'_i (-\varepsilon_j) \quad (2)$$

où nous avons utilisé pour écrire le second membre le fait que

$$\mathbf{\kappa} \times \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}' \quad \mathbf{\kappa} \times \boldsymbol{\varepsilon}' = -\boldsymbol{\varepsilon}. \quad (3)$$

Il apparaît ainsi que le 2^e membre n'est autre que la composante du produit vectoriel $\varepsilon \times \varepsilon'$ sur $\mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j$. Il vient alors

$$\sum_{\varepsilon \perp \mathbf{k}} \varepsilon_i (\mathbf{k} \times \varepsilon)_j = \sum_l \varepsilon_{ijl} \kappa_l \quad (4)$$

où ε_{ijk} est le tenseur complètement antisymétrique. Enfin, en utilisant (3) et (1), on trouve immédiatement

$$\sum_{\varepsilon \perp \mathbf{k}} (\mathbf{k} \times \varepsilon)_i (\mathbf{k} \times \varepsilon)_j = \delta_{ij} - \kappa_i \kappa_j. \quad (5)$$

b) PROJECTEUR SUR LE SOUS-ESPACE DES CHAMPS TRANSVERSES

La fonction delta transverse est étroitement liée à l'opérateur de projection sur le sous-espace des champs vectoriels transverses.

Pour le voir, considérons un champ vectoriel $\mathbf{V}(\mathbf{r})$ et sa transformée de Fourier $\mathcal{V}(\mathbf{k})$. Dans l'espace réciproque, le passage de $\mathcal{V}(\mathbf{k})$ à $\mathcal{V}_\perp(\mathbf{k})$ se fait simplement, en projetant, au point $\mathbf{k}$, $\mathcal{V}(\mathbf{k})$ sur le plan perpendiculaire à $\mathbf{k}$:

$$\mathcal{V}_\perp(\mathbf{k}) = \sum_{\varepsilon} \varepsilon (\varepsilon \cdot \mathcal{V}(\mathbf{k})) \quad (6)$$

soit encore, en projetant sur $\mathbf{e}_i$ et en utilisant (1)

$$\mathcal{V}_{\perp i}(\mathbf{k}) = \sum_j (\delta_{ij} - \kappa_i \kappa_j) \mathcal{V}_j(\mathbf{k}). \quad (7)$$

Appelons $\Delta^\perp$ l'opérateur de projection agissant dans l'espace des champs vectoriels et réalisant la correspondance entre $\mathbf{V}$ et $\mathbf{V}_\perp$

$$|\mathbf{V}_\perp\rangle = \Delta^\perp |\mathbf{V}\rangle. \quad (8)$$

Cette relation, écrite entre les composantes cartésiennes dans l'espace réciproque, devient

$$\mathcal{V}_{\perp i}(\mathbf{k}) = \int d^3k' \sum_j \Delta_{ij}^\perp(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \mathcal{V}_j(\mathbf{k}') \quad (9)$$

où $\Delta_{ij}^\perp(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ est l'élément de matrice de l'opérateur $\Delta^\perp$ dans la base $\{|\mathbf{k}, \mathbf{e}_i\rangle\}$,

La comparaison avec (7) montre que cet élément de matrice est égal à :

$$\Delta_{ij}^\perp = \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (10)$$

Dans l'espace réel, la même relation (8) s'écrit

$$\mathbf{V}_{\perp i}(\mathbf{r}) = \int d^3r' \sum_j \Delta_{ij}^\perp(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{V}_j(\mathbf{r}'). \quad (11)$$

Les éléments de matrice de l'opérateur $\Delta^\perp$ dans la base $\{ | \mathbf{r}, \mathbf{e}_i \rangle \}$ étant donnés par :

$$\begin{aligned} \Delta_{ij}^\perp(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \int d^3k \int d^3k' \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} \Delta_{ij}^\perp(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} \\ &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right). \end{aligned} \quad (12)$$

Il apparaît ainsi que la fonction delta transverse introduite en (B.17)

$$\delta_{ij}^\perp(\mathbf{p}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \quad (13)$$

est reliée à l'élément de matrice de $\Delta^\perp$ dans la base $\{ | \mathbf{r}, \mathbf{e}_i \rangle \}$ par l'équation

$$\Delta_{ij}^\perp(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta_{ij}^\perp(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (14)$$

Remarque

On peut introduire de la même façon le projecteur sur l'espace des champs longitudinaux Δ^l , qui est le complément à $\mathbb{1}$ de $\Delta^\perp$

$$\Delta^l = \mathbb{1} - \Delta^\perp \quad (15)$$

2. Expression de la fonction delta transverse dans l'espace réel

Sur la définition (13), il apparaît que $\delta_{ij}^\perp(\mathbf{p})$ est la transformée de Fourier d'une fonction qui ne tend pas vers zéro quand $|\mathbf{k}|$ tend vers l'infini. La fonction delta transverse présente donc une singularité en $\mathbf{p} = \mathbf{0}$ que nous allons caractériser soigneusement. Pour cela, nous allons la régulariser en coupant les fréquences spatiales supérieures à une borne k_M . Nous ferons ensuite tendre k_M vers l'infini. Physiquement, une telle procédure signifie que l'on ne s'intéresse pas aux variations des champs sur des distances infiniment courtes, mais plutôt à des moyennes de ces champs sur des régions de l'espace très petites, mais finies.

a) RÉGULARISATION DE $\delta_{ij}^\perp(\mathbf{p})$

Mathématiquement, nous effectuons la régularisation en multipliant $\delta_{ij} - (k_i k_j / k^2)$ par $k_M^2 / (k^2 + k_M^2)$, qui vaut 1 pour $k \ll k_M$, et décroît comme $1/k^2$ à l'infini :

$$\delta_{ij}^\perp(\mathbf{p}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \frac{k_M^2}{k^2 + k_M^2}. \quad (16)$$

Cette fonction régularisée peut encore s'écrire, compte tenu des propriétés de la transformation de Fourier

$$\delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{p}) = \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho_i \partial \rho_j} - \delta_{ij} \left(\sum_l \frac{\partial^2}{\partial \rho_l^2} \right) \right] g(\mathbf{p}) \quad (17)$$

où

$$g(\mathbf{p}) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{k_M^2 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}}{k^2(k^2 + k_M^2)} \quad (18)$$

b) CALCUL DE $g(\mathbf{p})$

Faisons tout d'abord l'intégrale angulaire sur $\mathbf{k}$:

$$\begin{aligned} g(\mathbf{p}) &= \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} 2\pi \int_{-1}^1 du \frac{e^{ik\rho u} k_M^2}{k^2(k^2 + k_M^2)} \\ &= \int_0^\infty \frac{dk}{(2\pi)^2} \frac{e^{ik\rho} - e^{-ik\rho}}{ik\rho} \frac{k_M^2}{k^2 + k_M^2} \\ &= \frac{k_M^2}{(2\pi)^2 i\rho} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{ik\rho}}{k(k^2 + k_M^2)}. \end{aligned} \quad (19)$$

Cette dernière intégrale se calcule aisément par la méthode des résidus :

$$\begin{aligned} g(\mathbf{p}) &= \frac{k_M^2}{(2\pi)^2 i\rho} [2i\pi \operatorname{Res}(k = ik_M) + i\pi \operatorname{Res}(k = 0)] \\ &= \frac{k_M^2}{2\pi\rho} \left[\frac{e^{-k_M\rho}}{ik_M(2ik_M)} + \frac{1}{2k_M^2} \right]. \end{aligned}$$

Soit finalement

$$g(\mathbf{p}) = \frac{1}{4\pi\rho} (1 - e^{-k_M\rho}). \quad (20)$$

En dehors du voisinage de l'origine ($\rho \gg 1/k_M$), $g(\mathbf{p})$ est égal à $1/4\pi\rho$ qui est bien la transformée de Fourier de $1/k^2$. Mais lorsque $\rho \rightarrow 0$, $g(\mathbf{p})$ reste fini et tend vers $k_M/4\pi$.

c) CALCUL DES DÉRIVÉES DE $g(\mathbf{p})$

La formule (17) exprime la fonction delta transverse en fonction des dérivées secondes de la fonction $g(\mathbf{p})$. Comme cette dernière n'est fonction que du module de $\mathbf{p}$, nous utiliserons pour calculer ses dérivées

$$\frac{\partial}{\partial \rho_i} g(\mathbf{p}) = \frac{\rho_i}{\rho} g'(\rho) \quad (21a)$$

$$\frac{\partial}{\partial \rho_j} \rho_i = \delta_{ij} \quad (21b)$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial \rho_i \partial \rho_j} g(\mathbf{\rho}) &= \frac{\delta_{ij}}{\rho} g'(\rho) + \frac{\rho_i \rho_j}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\frac{g'(\rho)}{\rho} \right) \\ &= \delta_{ij} \frac{g'}{\rho} + \frac{\rho_i \rho_j}{\rho^2} \left(g'' - \frac{g'}{\rho} \right) \end{aligned} \quad (21c)$$

puis

$$\sum_i \frac{\partial^2}{\partial \rho_i^2} g(\mathbf{\rho}) = g'' + \frac{2}{\rho} g'. \quad (21d)$$

Reportées dans (17), ces formules donnent l'expression de $\delta_{ij}^\perp(\mathbf{\rho})$:

$$\delta_{ij}^\perp(\mathbf{\rho}) = \frac{\rho_i \rho_j}{\rho^2} \left(g'' - \frac{g'}{\rho} \right) - \delta_{ij} \left(g'' + \frac{g'}{\rho} \right). \quad (22)$$

Le calcul de g'' et g'/ρ donne :

$$g''(\rho) = \frac{1}{4 \pi \rho^3} \left[2 - 2 e^{-k_M \rho} \left(1 + k_M \rho + \frac{k_M^2 \rho^2}{2} \right) \right] \quad (23a)$$

$$\frac{1}{\rho} g'(\rho) = \frac{-1}{4 \pi \rho^3} [1 - e^{-k_M \rho} (1 + k_M \rho)]. \quad (23b)$$

d) DISCUSSION DE L'EXPRESSION DE $\delta_{ij}^\perp(\mathbf{\rho})$

Des formules (21), (22) et (23) découle l'expression suivante de la fonction delta transverse régularisée (17)

$$\delta_{ij}^\perp(\mathbf{\rho}) = \gamma_{ij}(\mathbf{\rho}) + \frac{1}{4 \pi \rho^3} \left[\frac{3 \rho_i \rho_j}{\rho^2} - \delta_{ij} \right] \eta(\mathbf{\rho}) \quad (24)$$

où

$$\gamma_{ij}(\mathbf{\rho}) = \frac{k_M^2}{8 \pi \rho} \left(\frac{\rho_i \rho_j}{\rho^2} + \delta_{ij} \right) e^{-k_M \rho} \quad (25)$$

$$\eta(\mathbf{\rho}) = 1 - \left(1 + k_M \rho + \frac{1}{2} k_M^2 \rho^2 \right) e^{-k_M \rho}. \quad (26)$$

La fonction $\gamma_{ij}(\mathbf{\rho})$ est localisée autour de l'origine. A la limite $k_M \rightarrow \infty$, elle tend vers une distribution de support ponctuel centrée en $\mathbf{\rho} = \mathbf{0}$. Une telle distribution peut s'écrire a priori comme une somme d'une fonction $\delta(\mathbf{\rho})$ et de ses dérivées d'ordre 1, 2, ..., somme que nous allons déterminer.

Remarquons tout d'abord que, pour une simple raison d'homogénéité, l'intégrale

$$\int d^3\rho \gamma_{ij}(\rho) = I_1 \quad (27)$$

est un nombre indépendant de k_M . Au contraire, l'intégrale de la même fonction avec un terme de degré m en ρ_i est proportionnelle à $(1/k_M)^m$ et tend vers zéro lorsque $k_M \rightarrow \infty$. Ainsi, dans l'intégrale du produit de $\gamma_{ij}(\rho)$ avec une fonction $\psi(\rho)$ développable en $\rho = 0$, seul le premier terme du développement donne une contribution non nulle à la limite $k_M \rightarrow \infty$:

$$\int d^3\rho \gamma_{ij}(\rho) \psi(\rho) = I_1 \psi(0). \quad (28)$$

On en déduit donc que

$$\lim_{k_M \rightarrow \infty} \gamma_{ij}(\rho) = I_1 \delta(\rho) \quad (29)$$

où

$$\begin{aligned} I_1 &= \int d^3\rho \gamma_{ij}(\rho) \\ &= \int_0^\infty \frac{k_M^2}{8\pi} \rho \, d\rho \int d\Omega_\rho \left(\delta_{ij} + \frac{\rho_i \rho_j}{\rho^2} \right) e^{-k_M \rho}. \end{aligned} \quad (30)$$

La moyenne angulaire de $\rho_i \rho_j / \rho^2$ vaut $\delta_{ij}/3$ et l'intégrale radiale est la somme de $x e^{-x}$ entre 0 et ∞ , de sorte que finalement

$$I_1 = \frac{2}{3} \delta_{ij}. \quad (31)$$

A la limite $k_M \rightarrow \infty$, $\gamma_{ij}(\rho)$ est donc simplement

$$\gamma_{ij}(\rho) = \frac{2}{3} \delta_{ij} \delta(\rho) \quad (32)$$

où il est entendu que la fonction $\delta(\rho)$ a une extension $1/k_M$.

La fonction $\eta(\rho)$ est une fonction de coupure qui vaut 1 pour $\rho \gg 1/k_M$ et qui démarre en $k_M^3 \rho^3/6$ à l'origine, de sorte que le deuxième terme de (24) ne diverge pas en $\rho = 0$. Il s'agit d'un champ dipolaire régularisé à l'origine, ayant des propriétés analogues, dans l'espace à 3 dimensions, à celles de la fonction partie principale $\mathcal{P}(1/x)$. En effet, intégré sur un petit volume centré à l'origine, le deuxième terme de (24) donne zéro, bien qu'il prenne dans cette région des valeurs de l'ordre de k_M^3 . Cette propriété vient de la nullité de la moyenne angulaire de $(3 \rho_i \rho_j / \rho^2) - \delta_{ij}$, de la même façon que l'intégrale de $\mathcal{P}(1/x)$ est nulle du fait du caractère impair de cette fonction.

En définitive, la fonction delta transverse s'écrit

$$\delta_{ij}^\perp(\rho) = \frac{2}{3} \delta_{ij} \delta(\rho) + \frac{\eta(\rho)}{4\pi\rho^3} \left(3 \frac{\rho_i \rho_j}{\rho^2} - \delta_{ij} \right) \quad (33)$$

où $\eta(\rho)$ est égale à 1 en dehors de l'origine et supprime la divergence en $\rho = 0$.

Remarque

(i) Le facteur $2/3$ de la formule (32) peut se retrouver très simplement. En effet, la trace sur i de l'expression (13) donne immédiatement

$$\sum_i \delta_{ii}^\perp(\rho) = 2 \delta(\rho). \quad (34)$$

Dans l'expression (33) de $\delta_{ij}^\perp$, seul le premier terme contribue à la trace et le facteur $2/3$ de (32) est nécessaire pour retrouver (34).

(ii) On peut se demander si le second terme de (24) ne donne pas naissance, à la limite $k_M \rightarrow \infty$, à des dérivées de la fonction $\delta(\rho)$. En fait, l'argument dimensionnel déjà développé à propos de $\gamma_{ij}(\rho)$ s'applique : pour des fonctions variant comme un monôme de degré m en ρ , au voisinage de l'origine, la contribution du voisinage de l'origine à l'intégrale du produit de ces fonctions avec le second terme de (24) est d'ordre $1/k_M^m$ et tend vers zéro lorsque $k_M \rightarrow \infty$.

3. Application au calcul du champ magnétique créé par une densité de magnétisation. Interaction de contact

Le champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ créé par une densité de magnétisation $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ est donné par l'équation de Maxwell

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \quad (35)$$

où

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}) \quad (36)$$

est le courant associé à $\mathbf{M}(\mathbf{r})$. Reportons (36) dans (35) et passons dans l'espace réciproque. Il vient

$$\mathbf{k} \times \mathcal{B}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \mathbf{k} \times \mathcal{M}(\mathbf{k}). \quad (37)$$

Cette équation permet de déterminer $\mathcal{B}(\mathbf{k})$. En multipliant vectoriellement les deux membres de (37) par $\mathbf{k}$ et en utilisant la transversalité de $\mathcal{B}$ ($\mathbf{k} \cdot \mathcal{B} = 0$), on obtient en effet l'équation

$$\mathcal{B}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} [\mathcal{M}(\mathbf{k}) - \kappa(\kappa \cdot \mathcal{M}(\mathbf{k}))] = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \mathcal{M}_\perp(\mathbf{k}) \quad (38)$$

qui exprime que $\mathcal{B}$ est (au facteur $1/\varepsilon_0 c^2$ près) la partie transverse de $\mathcal{M}$. Dans l'espace réel, l'équation (38) s'écrit

$$B_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} M_{\perp i}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \sum_j \int d^3 r' \delta_{ij}^\perp(\mathbf{r} - \mathbf{r}') M_j(\mathbf{r}'). \quad (39)$$

L'utilisation de l'expression (33) pour la fonction delta transverse apparaissant dans (39) montre alors que $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ est une somme de deux contributions. La première, provenant du premier terme de (33), est tout simplement proportionnelle à la densité $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ prise au même point $\mathbf{r}$. La seconde, associée au deuxième terme de (33), représente physiquement le champ dipolaire créé au point $\mathbf{r}$ par la densité de magnétisation $\mathbf{M}(\mathbf{r}')$ existant en tous les autres points $\mathbf{r}'$. La présence de la fonction de régularisation η dans le deuxième terme de (33) rend en effet toutes les expressions finies et des arguments de symétrie permettent alors de montrer que le voisinage immédiat de $\mathbf{r}$ ne contribue pas à l'intégrale sur $\mathbf{r}'$ du produit du deuxième terme de (33) par $M_j(\mathbf{r}')$ (voir § 2d ci-dessus).

Considérons maintenant une autre densité de magnétisation $\mathbf{M}'(\mathbf{r})$. L'énergie d'interaction de $\mathbf{M}'(\mathbf{r})$ avec le champ $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ créé par $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ est égale à

$$W = - \int d^3 r \mathbf{M}'(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}). \quad (40)$$

L'équation (39) permet de réécrire W sous une forme plus symétrique

$$W = - \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \sum_i \sum_j \int d^3 r \int d^3 r' M'_i(\mathbf{r}) \delta_{ij}^\perp(\mathbf{r} - \mathbf{r}') M_j(\mathbf{r}'). \quad (41)$$

Là encore, l'utilisation de (33) permet de séparer deux contributions dans W . La première

$$W_1 = - \frac{2}{3} \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \int d^3 r \mathbf{M}'(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}) \quad (42)$$

qui fait intervenir les densités de magnétisation $\mathbf{M}$ et $\mathbf{M}'$ au même point $\mathbf{r}$ est appelée, pour cette raison, interaction de contact. La seconde,

$$W_2 = - \frac{1}{4 \pi \varepsilon_0 c^2} \sum_i \sum_j \int d^3 r \int d^3 r' \frac{\eta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)^3} \times \\ \times M'_i(\mathbf{r}) \left[\frac{3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')_i (\mathbf{r} - \mathbf{r}')_j}{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2} - \delta_{ij} \right] M_j(\mathbf{r}') \quad (43)$$

représente l'interaction magnétique dipôle-dipôle entre les deux densités. Comme plus haut, la régularisation introduite par η et des arguments de symétrie permettent de montrer que le voisinage immédiat de $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = 0$ ne contribue pas à W .

Remarque

La démarche précédente peut être appliquée à l'étude des interactions magnétiques entre le spin d'un noyau et le spin d'un électron dans un atome. Prenons pour $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ la densité de magnétisation du noyau. Cette densité ne prend de valeurs notables que dans un volume de l'ordre de r_0^3 , où r_0 caractérise les dimensions du noyau, que nous supposons placé à l'origine des coordonnées. L'intégrale de $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ n'est autre que le moment magnétique μ_N du noyau

$$\mu_N = \int d^3r \mathbf{M}(\mathbf{r}). \quad (44)$$

Nous supposons par ailleurs que $\mathbf{M}'(\mathbf{r})$ représente la densité de magnétisation de spin d'un électron dans l'état $\psi(\mathbf{r})$, de sorte que

$$\mathbf{M}'(\mathbf{r}) = \mu_e |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (45)$$

où μ_e est le moment magnétique de spin de l'électron. Des simplifications importantes apparaissent dans l'énergie d'interaction W par suite des différences d'extensions spatiales de $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{M}'(\mathbf{r})$. L'extension spatiale de $|\psi(\mathbf{r})|^2$ est en effet de l'ordre du rayon de Bohr a_0 , qui est beaucoup plus grand que le rayon r_0 du noyau. Si l'on néglige les variations de $|\psi(\mathbf{r})|^2$ à l'intérieur du noyau, l'interaction de contact (42) devient

$$W_1 \simeq -\frac{2}{3} \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \int d^3r \mathbf{M}'(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}) \quad (46)$$

c'est-à-dire encore, compte tenu de (44) et (45)

$$W_1 \simeq -\frac{2}{3} \frac{\mu_N \cdot \mu_e}{\epsilon_0 c^2} |\psi(\mathbf{0})|^2. \quad (47)$$

Dans le même ordre d'idées, on peut faire dans (43) un développement multipolaire de $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ et ne garder que le terme d'ordre le plus bas, ce qui revient à écrire

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \mu_N \delta(\mathbf{r}). \quad (48)$$

L'expression (43) devient alors

$$W_2 \simeq -\frac{1}{4\pi\epsilon_0 c^2} \sum_i \sum_j \int d^3r' \frac{\eta(r')}{r'^3} \mu_{Ni} \left(\frac{3r'_i r'_j}{r'^2} - \delta_{ij} \right) \mu_{ej} |\psi(\mathbf{r}')|^2. \quad (49)$$

Finalement, le regroupement de (47) et (49) montre que l'énergie d'interaction magnétique entre les deux spins apparaît comme la valeur moyenne dans l'état $\psi(\mathbf{r})$ de l'hamiltonien d'interaction,

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{\epsilon_0 c^2} \sum_i \sum_j \mu_{Ni} \delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{r}) \mu_{ej} \\ &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0 c^2} \left[\frac{8\pi}{3} \mu_e \cdot \mu_N \delta(\mathbf{r}) + \frac{3(\mu_e \cdot \mathbf{r})(\mu_N \cdot \mathbf{r})}{r^5} - \frac{\mu_e \cdot \mu_N}{r^3} \right] \end{aligned} \quad (50)$$

où $\mathbf{r}$ est la position de l'électron par rapport au noyau, et où il est sous-entendu que l'interaction dipôle-dipôle est régularisée en $r = 0$.

COMPLÉMENT B₁MOMENT CINÉTIQUE DU CHAMP ÉLECTROMAGNÉTIQUE
ONDES MULTIPOLAIRES

Une première motivation de ce complément est d'établir un certain nombre de résultats, énoncés sans démonstration dans le chapitre I, et relatifs au moment cinétique du champ électromagnétique. Nous montrons ainsi (§ 1) que la contribution du champ électrique longitudinal au moment cinétique du champ peut être réexprimée en fonction des coordonnées $\mathbf{r}_a$ des particules et du potentiel vecteur transverse $\mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}_a)$ et regroupée avec le moment cinétique des particules. Nous établissons également (§ 2) l'expression du moment cinétique du champ transverse en fonction des variables normales $\alpha(\mathbf{k})$, et montrons que l'expression ainsi obtenue est très analogue à celle donnant la valeur moyenne du moment cinétique total d'une particule de spin 1 dont la fonction d'onde vectorielle à trois composantes dans l'espace réciproque serait précisément $\alpha(\mathbf{k})$.

L'analogie précédente suggère alors de rechercher des fonctions $\alpha(\mathbf{k})$ qui soient « adaptées » au moment cinétique du champ transverse, de manière plus précise, des fonctions vectorielles transverses de $\mathbf{k}$, définies sur la sphère de rayon k_0 , qui soient fonctions propres de $\mathbf{J}^2$ et J_z , où $\mathbf{J}$ est le moment cinétique total d'une particule de spin 1. Au lieu de composer le moment cinétique orbital $\mathbf{L}$, et le moment cinétique de spin $\mathbf{S}$ d'une telle particule, nous présentons au paragraphe 3, une méthode de construction plus simple des fonctions propres de $\mathbf{J}^2$ et J_z , qui donne directement des fonctions propres longitudinales ou transverses.

Lorsque les fonctions propres transverses ainsi déterminées sont reportées dans les développements des champs électrique et magnétique en variables normales, on obtient alors (§ 4) la structure, dans l'espace réel, des ondes électromagnétiques correspondant à un photon d'énergie, de moment cinétique et de parité bien définis. La seconde motivation de ce complément est d'introduire simplement de telles ondes multipolaires qui sont bien adaptées à tous les problèmes de physique atomique ou nucléaire où les échanges de moment cinétique entre matière et rayonnement jouent un rôle important.

1. Contribution du champ électrique longitudinal au moment cinétique total

Soit

$$\mathbf{J}_{\text{long}} = \varepsilon_0 \int d^3r \, \mathbf{r} \times (\mathbf{E}_{\parallel} \times \mathbf{B}) \quad (1)$$

la contribution du champ électrique longitudinal au moment cinétique total du système champ + particules. Remplaçons $\mathbf{B}$ par $\nabla \times \mathbf{A}_\perp$ (puisque $\nabla \times \mathbf{A}_\parallel = 0$), et utilisons la formule du double produit vectoriel (en respectant l'ordre relatif de ∇ et $\mathbf{A}_\perp$) pour transformer $\mathbf{E}_\parallel \times (\nabla \times \mathbf{A}_\perp)$. Il vient ainsi :

$$\mathbf{J}_{\text{long}} = \varepsilon_0 \int d^3r \left\{ \sum_{a=x,y,z} E_{\parallel a} (\mathbf{r} \times \nabla) A_{\perp a} - \mathbf{r} \times (\mathbf{E}_\parallel \cdot \nabla) \mathbf{A}_\perp \right\}. \quad (2)$$

Le dernier terme de (2) s'écrit encore, si l'on fait passer $\mathbf{r}$ à droite de ∇

$$\varepsilon_0 \int d^3r [- (\mathbf{E}_\parallel \cdot \nabla) (\mathbf{r} \times \mathbf{A}_\perp) + \mathbf{E}_\parallel \times \mathbf{A}_\perp]. \quad (3)$$

Intégrons par parties le premier terme de (3). Le terme tout intégré donne une intégrale de surface à l'infini, qui est nulle si les champs tendent vers zéro suffisamment vite. Dans le terme restant, apparaît $\nabla \cdot \mathbf{E}_\parallel$ qui n'est autre que ρ/ε_0 d'après l'équation de Maxwell (A.1.a) du chapitre I. En regroupant le résultat ainsi obtenu pour (3) et le premier terme de (2), et en utilisant $\mathbf{E}_\parallel = -\nabla U$ où U est le potentiel coulombien, on obtient finalement

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{\text{long}} &= \\ &= \int d^3r \left\{ \rho (\mathbf{r} \times \mathbf{A}_\perp) - \varepsilon_0 \sum_a (\nabla_a U) (\mathbf{r} \times \nabla) A_{\perp a} - \varepsilon_0 (\nabla U) \times \mathbf{A}_\perp \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

Montrons maintenant que les deux derniers termes de (4) se compensent. Si on les intègre par parties, ils deviennent

$$\varepsilon_0 \int d^3r \left\{ \sum_a U \nabla_a (\mathbf{r} \times \nabla) A_{\perp a} + U (\nabla \times \mathbf{A}_\perp) \right\}. \quad (5)$$

Or

$$\sum_a U \nabla_a (\mathbf{r} \times \nabla) A_{\perp a} = U (\mathbf{r} \times \nabla) (\nabla \cdot \mathbf{A}_\perp) - U (\nabla \times \mathbf{A}_\perp). \quad (6)$$

Le premier terme de (6) est nul car $\nabla \cdot \mathbf{A}_\perp = 0$. Le deuxième terme de (6) se compense avec le dernier terme de (5). Il ne reste finalement que le premier terme de (4) qui, compte tenu de l'expression (A.5.a) du chapitre I pour ρ , donne

$$\mathbf{J}_{\text{long}} = \sum_\alpha q_\alpha \mathbf{r}_\alpha \times \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}_\alpha). \quad (7)$$

Il apparaît bien ainsi que $\mathbf{J}_{\text{long}}$ peut être réexprimé en fonction des coordonnées $\mathbf{r}_\alpha$ des particules et du potentiel transverse $\mathbf{A}_\perp$. Un tel résultat

est indépendant de tout choix de jauge (rappelons que $A_{\perp}$ est invariant de jauge; voir (B.26)).

Regroupons enfin J_{long} avec le moment cinétique, $\sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \times m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}$, des particules. Il vient

$$\begin{aligned} J_{\text{long}} + \sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \times m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} &= \sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \times [q_{\alpha} A_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha}) + m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}] \\ &= \sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{p}_{\alpha} \end{aligned} \quad (8)$$

où $\mathbf{p}_{\alpha}$ est défini par la formule (B.44) du chapitre I. En jauge de Coulomb ($A = A_{\perp}$), $\mathbf{p}_{\alpha}$ est le moment conjugué de $\mathbf{r}_{\alpha}$, ou encore l'impulsion généralisée de la particule α . Il apparaît ainsi qu'en jauge de Coulomb, la différence entre le moment de l'impulsion de la particule α , $\mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{p}_{\alpha}$, et le moment de sa quantité de mouvement, $\mathbf{r}_{\alpha} \times m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}$, n'est autre que le moment cinétique associé au champ électrique longitudinal de la particule α .

2. Moment cinétique du champ transverse

Nous nous proposons, dans ce paragraphe, de transformer l'expression

$$\mathbf{J}_{\text{trans}} = \varepsilon_0 \int d^3r \, \mathbf{r} \times (\mathbf{E}_{\perp} \times \mathbf{B}) \quad (9)$$

du moment cinétique du champ transverse.

a) EXPRESSION DE $\mathbf{J}_{\text{trans}}$ DANS L'ESPACE RÉCIPROQUE

Les calculs du début du paragraphe ci-dessus demeurent valables, à condition de remplacer partout $E_{\parallel}$ par $E_{\perp}$. Comme $\nabla \cdot \mathbf{E}_{\perp} = 0$, l'intégration par parties du terme correspondant au premier terme de (3) donne maintenant un résultat nul, et il ne reste que les termes correspondant au premier terme de (2) et au dernier de (3)

$$\mathbf{J}_{\text{trans}} = \varepsilon_0 \int d^3r \left\{ \sum_a E_{\perp a} (\mathbf{r} \times \nabla) A_{\perp a} + \mathbf{E}_{\perp} \times \mathbf{A}_{\perp} \right\}. \quad (10)$$

Réexprimons maintenant $\mathbf{J}_{\text{trans}}$ en fonction des transformées de Fourier spatiales $\mathcal{E}_{\perp}$ et $\mathcal{A}_{\perp}$ de $\mathbf{E}_{\perp}$ et $\mathbf{A}_{\perp}$. Utilisons pour cela l'identité de Parseval-Plancherel et le tableau suivant

$$\mathbf{r} \leftrightarrow i\mathbf{V}$$

$$\nabla \leftrightarrow i\mathbf{k}$$

Tableau I

résumant la correspondance entre les opérateurs multiplication par $\mathbf{r}$, et gradient ∇ par rapport à $\mathbf{r}$ dans l'espace réel d'une part, multiplication par $\mathbf{k}$ et gradient par rapport à $\mathbf{k}$ (noté ∇ pour le distinguer de ∇) dans l'espace réciproque d'autre part. On obtient ainsi

$$\mathbf{J}_{\text{trans}} = \varepsilon_0 \int d^3k \left\{ \sum_a \mathcal{E}_{1a}^*(\mathbf{k} \times \nabla) \mathcal{A}_{1a} + \mathcal{E}_{1-}^* \times \mathcal{A}_{1-} \right\} \quad (11)$$

(on a utilisé $\mathbf{k} \times \nabla = -\nabla \times \mathbf{k}$).

b) EXPRESSION EN FONCTION DES VARIABLES NORMALES

Comme nous l'avons vu au paragraphe C du chapitre I, $\mathcal{E}_{1-}$ et $\mathcal{A}_{1-}$ s'expriment en fonction des variables normales $\alpha(\mathbf{k})$:

$$\begin{cases} \mathcal{E}_{1-} = i \mathcal{N}(\alpha - \alpha_-^*) \\ \mathcal{A}_{1-} = \frac{\mathcal{N}}{\omega}(\alpha + \alpha_-^*) \end{cases} \quad (12)$$

$$\quad \quad \quad (13)$$

Rappelons que $\mathcal{N}$ est un coefficient de normalisation donné par la formule (C.15) du chapitre I, et que α_- est une notation abrégée pour $\alpha(-\mathbf{k}, t)$. En reportant (12) et (13) dans (11), et en changeant $\mathbf{k}$ en $-\mathbf{k}$ dans certains termes, on obtient

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{\text{trans}} = \varepsilon_0 \int d^3k \frac{\mathcal{N}^2}{\omega} \left\{ \sum_a \alpha_a^*(-i\mathbf{k} \times \nabla) \alpha_a - i\alpha_a^* \times \alpha_a - \right. \\ \left. - \sum_a \alpha_{-a}(-i\mathbf{k} \times \nabla) \alpha_a + i\alpha_{-} \times \alpha - \right. \\ \left. - [\text{mêmes termes où } \alpha \rightleftharpoons \alpha^*] \right\}. \quad (14) \end{aligned}$$

La contribution de la deuxième ligne de (14) à l'intégrale est nulle. Tout d'abord, le terme $\alpha_{-} \times \alpha$ est impair en $\mathbf{k}$ et son intégrale s'annule. Ensuite, en changeant $\mathbf{k}$ en $-\mathbf{k}$ dans le premier terme de la deuxième ligne de (14), et en l'intégrant par parties, on montre que la contribution de ce terme est égale à son opposée, donc nulle. Il vient ainsi

$$\mathbf{J}_{\text{trans}} = \frac{\hbar}{2} \int d^3k \left\{ \left[\sum_a \alpha_a^*(-i\mathbf{k} \times \nabla) \alpha_a - i\alpha_a^* \times \alpha \right] - [\alpha \rightleftharpoons \alpha^*] \right\} \quad (15)$$

expression équivalente à l'équation (C.18) du chapitre I.

Dans tous les calculs qui précèdent l'ordre entre α et α^* a toujours été respecté tel qu'il apparaît dans les équations. Si l'on ne tient pas compte

de cet ordre, l'expression (15) se simplifie et devient

$$\mathbf{J}_{\text{trans}} = \hbar \int d^3k \left[\sum_a \alpha_a^* (-i\mathbf{k} \times \nabla) \alpha_a - i\alpha^* \times \alpha \right]. \quad (16)$$

c) ANALOGIE AVEC LA VALEUR MOYENNE DU MOMENT CINÉTIQUE TOTAL D'UNE PARTICULE DE SPIN 1

Nous allons montrer maintenant qu'il est possible de donner une réinterprétation de l'expression (16) de $\mathbf{J}_{\text{trans}}$.

Pour cela, oublions momentanément le problème du moment cinétique du champ électromagnétique et faisons quelques rappels de mécanique quantique relatifs à une particule de spin 1.

Comme il y a trois états de spin possibles pour une telle particule, la fonction d'onde représentant l'état $|\phi\rangle$ de la particule sera une fonction d'onde vectorielle à trois composantes. Dans l'espace réciproque, ces composantes seront notées

$$\langle \mathbf{k}, a | \phi \rangle = \phi_a(\mathbf{k}). \quad (17)$$

Nous avons pris une base $\{|a\rangle\}$ d'états de spin qui n'est pas la base habituelle $\{|-1\rangle, |0\rangle, |+1\rangle\}$ des états propres de S_z , mais la base cartésienne $\{|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle\}$ reliée à la précédente

$$\left\{ \begin{array}{l} |x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle - |+1\rangle) \\ |y\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|-1\rangle + |+1\rangle) \\ |z\rangle = |0\rangle. \end{array} \right. \quad (18)$$

Calculons maintenant la valeur moyenne, dans l'état $|\phi\rangle$, du moment cinétique total

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (19)$$

d'une telle particule, où $\mathbf{L}$ et $\mathbf{S}$ sont les moments cinétiques orbital et de spin. D'après le tableau I, $\mathbf{L}$ est représenté dans l'espace réciproque par l'opérateur

$$\mathbf{L} = i \nabla \times \hbar \mathbf{k} = -i \hbar \mathbf{k} \times \nabla. \quad (20)$$

Comme $\mathbf{L}$ n'agit pas sur les nombres quantiques de spin

$$\langle \phi | \mathbf{L} | \phi \rangle = \hbar \int d^3k \sum_a \phi_a^*(\mathbf{k}) (-i\mathbf{k} \times \nabla) \phi_a(\mathbf{k}). \quad (21)$$

Pour calculer la valeur moyenne de S , donnons tout d'abord l'action de S_x, S_y, S_z sur les états de la base cartésienne $|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle$:

$$S_a |b\rangle = i\hbar \sum_c \varepsilon_{abc} |c\rangle \quad (22)$$

formule qui se déduit de l'action bien connue de $S_z, S_{\pm} = S_x \pm iS_y$ sur les états propres $\{|m\rangle\}$ de S_z et des formules de changement de base (18). Comme S n'agit pas sur les nombres quantiques $\mathbf{k}$, on déduit alors de (22) que

$$\langle \phi | S | \phi \rangle = -i\hbar \int d^3k \phi^*(\mathbf{k}) \times \phi(\mathbf{k}). \quad (23)$$

Comparons alors (21) et (23) avec les deux termes apparaissant au second membre de l'expression (16) de $\mathbf{J}_{\text{trans}}$. Si l'on assimile les variables normales $\alpha(\mathbf{k})$ à la fonction d'onde vectorielle $\phi(\mathbf{k})$ d'une particule de spin 1 dans l'espace réciproque, $\mathbf{J}_{\text{trans}}$ apparaît alors comme la valeur moyenne du moment cinétique total d'une telle particule, les premier et second termes de (16) étant respectivement associés au moment cinétique orbital et au moment cinétique de spin.

Remarques

(i) Il ne faut pas oublier que les variables normales $\alpha(\mathbf{k})$ forment un champ vectoriel *transverse*. Si l'on réinterprète $\alpha(\mathbf{k})$ comme la fonction d'onde du photon dans l'espace réciproque, il faut donc également restreindre l'espace des fonctions d'onde du photon à un sous-espace de l'espace des champs vectoriels, le sous-espace des champs transverses, et ne considérer comme physiques que les observables laissant un tel sous-espace invariant. Montrons alors que $\mathbf{L}$ et $\mathbf{S}$ ne sont pas séparément des observables physiques alors que $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ l'est. L'opérateur $\mathbf{L}$ est en effet associé à une « rotation orbitale » du champ de vecteurs : $\mathbf{L}$ fait tourner le point d'application $\mathbf{k}$ de chaque vecteur $\alpha(\mathbf{k})$ du champ, sans faire tourner le vecteur α lui-même. Dans une telle opération, la perpendicularité entre $\mathbf{k}$ et $\alpha(\mathbf{k})$ est détruite. De même, $\mathbf{S}$ fait tourner le vecteur α , sans changer le point d'application, ce qui détruit aussi le caractère transversal du champ. Par contre, $\mathbf{J}$ fait tourner à la fois le vecteur et son point d'application, en conservant les angles, et donc la transversalité. La discussion précédente peut également être éclairée par l'argument suivant. Le spin d'une particule se réduit à son moment cinétique total dans le référentiel où elle est au repos. Un tel référentiel n'existe pas pour le photon, qui se propage à la vitesse de la lumière, de sorte que $\mathbf{S}$ (et par suite $\mathbf{L}$) n'est pas séparément observable pour un photon.

(ii) Un raisonnement analogue permet d'ailleurs de comprendre pourquoi $\mathbf{r}$ ne peut pas être un opérateur position pour le photon : $\mathbf{r}$ est le générateur des translations dans l'espace réciproque, et ces opérations, dans leur ensemble, ne respectent pas l'orthogonalité entre α et le rayon vecteur $\mathbf{k}$.

3. Base de fonctions vectorielles de $\mathbf{k}$ « adaptées » au moment cinétique

a) IDÉE GÉNÉRALE

Comme nous l'avons vu dans le paragraphe C du chapitre I, la donnée de la fonction vectorielle complexe $\alpha(\mathbf{k})$ définit entièrement l'état du champ électromagnétique. A la transversalité près, sur laquelle nous reviendrons, cette fonction est isomorphe à la fonction d'onde d'une particule de spin 1. A tout choix d'une base dans l'espace des états de cette particule correspond un ensemble d'états du champ électromagnétique pouvant engendrer, par combinaison linéaire, un état quelconque du champ. Ainsi, l'ensemble de fonctions

$$\phi_{\mathbf{k}_i \varepsilon_i}(\mathbf{k}) = \varepsilon_i \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_i) \quad (24)$$

pour tous les $\mathbf{k}_i$ et tous les ε_i perpendiculaires à $\mathbf{k}_i$, forme une base de l'espace des fonctions vectorielles, à laquelle correspond le développement du champ en ondes planes utilisé dans le chapitre I. Cette base est en fait la base des états propres de l'impulsion de la particule de spin 1 associée. Cette propriété est à relier à la simplicité de l'expression (C. 17) de l'impulsion du champ transverse, lorsqu'on utilise cette base.

De façon semblable, nous allons maintenant construire une autre base « adaptée » au moment cinétique. C'est une base d'états propres de $\mathbf{J}^2$ et J_z , $\mathbf{J}$ étant le moment cinétique total (19) de la particule de spin 1 que nous avons associée au champ électromagnétique. Il est bien connu que l'opérateur moment cinétique orbital $\mathbf{L}$ n'agit que sur les angles polaires du vecteur $\mathbf{k}$, c'est-à-dire encore sur le vecteur unitaire $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}/k$. L'opérateur $\mathbf{S}$ quant à lui n'agit pas du tout sur $\mathbf{k}$. Le fait de fixer les valeurs propres de $\mathbf{J}^2$ et J_z n'indique donc rien sur la partie radiale des fonctions propres. Nous prendrons cette partie radiale proportionnelle à $\delta(k - k_0)$, ce qui revient à imposer aux fonctions de base cherchées d'être aussi fonctions propres de l'énergie, de valeur propre $\hbar c k_0$ (puisque l'énergie d'un photon ne dépend que de $|\mathbf{k}|$). Nous poserons donc

$$\phi_{k_0 J M}(\mathbf{k}) = \frac{1}{k_0} \delta(k - k_0) \phi_{J M}(\boldsymbol{\kappa}) \quad (25. a)$$

où le facteur $1/k_0$ a été introduit pour la normalisation :

$$\int d^3 k \phi_{k_0 J' M'}^*(\mathbf{k}) \cdot \phi_{k_0 J M}(\mathbf{k}) = \delta(k_0 - k'_0) \delta_{J J'} \delta_{M M'} \quad (25. b)$$

La fonction angulaire $\phi_{J M}(\boldsymbol{\kappa})$ est elle-même normalisée sur la sphère de rayon 1 :

$$\int d^2 \boldsymbol{\kappa} \phi_{J' M'}^*(\boldsymbol{\kappa}) \cdot \phi_{J M}(\boldsymbol{\kappa}) = \delta_{J J'} \delta_{M M'} \quad (25. c)$$

et doit être déterminée de sorte que $\phi_{k_0JM}(\mathbf{k})$ soit fonction propre de J^2 et J_z avec les valeurs propres $J(J+1)\hbar^2$ et $M\hbar$.

Une première méthode pour construire $\phi_{JM}(\kappa)$ consiste à partir des états orbitaux propres à L^2 et L_z (les harmoniques sphériques) et à les coupler aux états propres de S_z en utilisant l'algèbre habituelle de composition des moments cinétiques. On construit ainsi les harmoniques sphériques vectorielles. Cependant, ces fonctions vectorielles ne sont en général ni longitudinales, ni transverses ($\phi_{JM}(\kappa)$ n'est ni parallèle, ni perpendiculaire à κ). Pour obtenir des fonctions transverses, il faut combiner entre elles des fonctions de mêmes nombres quantiques J et M , mais correspondant à des valeurs propres différentes $L(L+1)\hbar^2$ de L^2 .

Nous allons utiliser ici une autre méthode plus simple, due à Beresetski, Lifshitz et Pitayevski, qui donne directement des fonctions longitudinales ou transverses.

b) MÉTHODE DE CONSTRUCTION DE FONCTIONS PROPRES VECTORIELLES DE J^2 ET J_z

On peut générer des fonctions vectorielles en faisant agir un opérateur vectoriel $\mathbf{V}$ orbital sur une fonction scalaire $\chi(\kappa)$ définie sur la sphère de rayon unité dans l'espace réciproque.

Considérons l'action de $\mathbf{J}$ sur une telle fonction

$$J_a(\mathbf{V}\chi(\kappa)) = L_a(\mathbf{V}\chi(\kappa)) + S_a(\mathbf{V}\chi(\kappa)). \quad (26)$$

Comme $\mathbf{V}$ est un opérateur vectoriel orbital, il a des relations de commutation simples avec $\mathbf{L}$

$$[L_a, V_b] = i\hbar \sum_c \varepsilon_{abc} V_c \quad (27)$$

ce qui permet d'écrire

$$L_a(\mathbf{V}\chi(\kappa)) = \mathbf{V}(L_a \chi(\kappa)) - i\hbar \mathbf{e}_a \times \mathbf{V}\chi(\kappa). \quad (28)$$

Pour calculer $S_a(\mathbf{V}\chi(\kappa))$, notons tout d'abord que la fonction d'onde vectorielle $\mathbf{V}\chi(\kappa)$ est associée au ket $\sum_b |b\rangle |V_b \chi\rangle$, où $|V_b \chi\rangle$ est la partie orbitale du ket, $|b\rangle$ la partie de spin. En utilisant (22), on obtient alors

$$S_a \sum_b |b\rangle |V_b \chi\rangle = i\hbar \sum_{c,b} \varepsilon_{abc} |c\rangle |V_b \chi\rangle \quad (29)$$

ce qui donne pour la fonction d'onde associée

$$S_a(\mathbf{V}\chi(\kappa)) = i\hbar \mathbf{e}_a \times \mathbf{V}\chi(\kappa). \quad (30)$$

Ajoutons (28) et (30). Il vient

$$J_a(\mathbf{V}\chi(\kappa)) = \mathbf{V}(L_a \chi(\kappa)). \quad (31)$$

Il s'ensuit immédiatement que, si l'on choisit pour $\chi(\kappa)$ une harmonique sphérique $Y_{JM}(\kappa)$, qui est fonction propre de L^2 et L_z avec les valeurs propres $J(J+1)\hbar^2$ et $M\hbar$, $\mathbf{V}Y_{JM}(\kappa)$ est une fonction propre vectorielle de $\mathbf{J}^2$ et J_z correspondant aux mêmes valeurs propres :

$$\begin{cases} \mathbf{J}^2(\mathbf{V}Y_{JM}(\kappa)) = J(J+1)\hbar^2 \mathbf{V}Y_{JM}(\kappa) \\ J_z(\mathbf{V}Y_{JM}(\kappa)) = M\hbar \mathbf{V}Y_{JM}(\kappa). \end{cases} \quad (32)$$

Il suffit maintenant de choisir convenablement $\mathbf{V}$ pour que $\mathbf{V}Y_{JM}$ soit longitudinale ou transverse.

c) FONCTIONS PROPRES LONGITUDINALES

Comme premier choix de $\mathbf{V}$, prenons l'opérateur multiplication par κ . On obtient une fonction vectorielle, évidemment longitudinale, que nous noterons N_{JM}

$$N_{JM}(\kappa) = \kappa Y_{JM}(\kappa) \quad (33)$$

et qui est normalisée sur la sphère de rayon unité.

Déterminons l'action de l'opérateur parité Π sur la fonction $N_{JM}(\kappa)$. N_{JM} étant un champ de vecteurs polaires, l'opérateur Π change de signe N_{JM} en même temps qu'il change son point d'application de κ en $-\kappa$.

$$(\Pi N_{JM})(\kappa) = -N_{JM}(-\kappa). \quad (34)$$

Sachant que

$$Y_{JM}(-\kappa) = (-1)^J Y_{JM}(\kappa) \quad (35)$$

on en déduit

$$(\Pi N_{JM})(\kappa) = (-1)^J N_{JM}(\kappa) \quad (36)$$

N_{JM} est donc de parité $(-1)^J$.

d) FONCTIONS PROPRES TRANSVERSES

Comme deuxième choix de $\mathbf{V}$, nous prendrons l'opérateur gradient sur la sphère de rayon unité. Un tel opérateur, que nous noterons ∇_κ , n'agit que sur les angles polaires de κ . Il est relié à l'opérateur gradient ordinaire ∇ par

$$\nabla = \kappa \frac{\partial}{\partial \kappa} + \frac{1}{\kappa} \nabla_\kappa. \quad (37)$$

Le premier terme de (37) donne la composante radiale du gradient, le second la composante perpendiculaire à κ . Il en résulte que $\nabla_\kappa Y_{JM}(\kappa)$ est

dans le plan tangent à la sphère de rayon unité, et est donc une fonction vectorielle transverse. Nous poserons

$$\mathbf{Z}_{JM}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{J(J+1)}} \nabla_{\mathbf{k}} Y_{JM}(\mathbf{k}) \quad (38)$$

où le facteur $1/\sqrt{J(J+1)}$ a été introduit pour la normalisation. Les fonctions transverses $\mathbf{Z}_{JM}$ sont orthogonales aux fonctions longitudinales N_{JM} . Elles sont de plus orthogonales entre elles. En effet,

$$\int d^2\mathbf{k} \mathbf{Z}_{JM}^*(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{Z}_{J'M'}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{J(J+1)J'(J'+1)}} \int d^2\mathbf{k} (\nabla_{\mathbf{k}} Y_{JM})^* \cdot (\nabla_{\mathbf{k}} Y_{J'M'}). \quad (39)$$

Par intégration par parties, on fait apparaître $-\Delta_{\mathbf{k}} Y_{J'M'}$, qui vaut $J'(J'+1) Y_{J'M'}$, de sorte qu'il vient finalement, compte tenu de l'orthonormalisation des harmoniques sphériques

$$\int d^2\mathbf{k} \mathbf{Z}_{JM}^*(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{Z}_{J'M'}(\mathbf{k}) = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}. \quad (40)$$

Notons enfin que, l'opérateur $\nabla_{\mathbf{k}}$ étant de nature polaire, $\mathbf{Z}_{JM}$ a, comme N_{JM} , une parité $(-1)^J$.

Comme troisième choix de $\mathbf{V}$, nous prendrons l'opérateur $\mathbf{k} \times \nabla_{\mathbf{k}}$ et introduisons ainsi les fonctions

$$\mathbf{X}_{JM}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{J(J+1)}} (\mathbf{k} \times \nabla_{\mathbf{k}}) Y_{JM}(\mathbf{k}) \quad (41)$$

où le facteur $1/\sqrt{J(J+1)}$ est toujours introduit pour la normalisation. La fonction $\mathbf{X}_{JM}$ est perpendiculaire à la fois à N_{JM} et $\mathbf{Z}_{JM}$, et est donc aussi orthogonale à ces deux fonctions (au sens du produit scalaire des fonctions de $\mathbf{k}$). C'est une fonction vectorielle transverse, reliée simplement à $\mathbf{Z}_{JM}$ par

$$\mathbf{X}_{JM}(\mathbf{k}) = \mathbf{k} \times \mathbf{Z}_{JM}(\mathbf{k}) \quad (42)$$

relation qui peut s'inverser pour donner

$$\mathbf{Z}_{JM}(\mathbf{k}) = -\mathbf{k} \times \mathbf{X}_{JM}(\mathbf{k}). \quad (43)$$

Notons qu'il existe un lien simple entre $\mathbf{k} \times \nabla_{\mathbf{k}}$ et l'opérateur moment cinétique orbital $\mathbf{L}$. En effet, compte tenu de (37) et (20), $\mathbf{k} \times \nabla_{\mathbf{k}}$ n'est autre que $\mathbf{k} \times \nabla$, c'est-à-dire encore $i\mathbf{L}/\hbar$, de sorte que

$$\mathbf{X}_{JM}(\mathbf{k}) = \frac{i}{\hbar \sqrt{J(J+1)}} \mathbf{L} Y_{JM}(\mathbf{k}). \quad (44)$$

Les composantes de X_{JM} sont donc faciles à calculer en fonction des harmoniques sphériques, et, par l'intermédiaire de (43), celles de Z_{JM} aussi. Les relations d'orthonormalisation des X_{JM} résultent immédiatement de celles des Z_{JM} , grâce à la relation (42) qui ramène les intégrales des $X_{JM}^* \cdot X_{J'M'}$ à celles des $Z_{JM}^* \cdot Z_{J'M'}$. Enfin, le vecteur $\kappa \times V_\kappa$ étant axial, X_{JM} a une parité opposée à celle de N_{JM} et Z_{JM} , soit $(-1)^{J+1}$.

Ainsi, les trois familles de fonctions N, X, Z forment en chaque point de la sphère unité un trièdre trirectangle sur lequel on peut décomposer un champ de vecteurs quelconque : elles forment une base de fonctions vectorielles sur cette sphère de rayon unité. Si l'on ne garde que les champs X et Z , on engendre tous les champs transverses.

De façon plus précise, l'ensemble de fonctions

$$\phi_{k_0 J M X}(\mathbf{k}) = \frac{1}{k_0} \delta(k - k_0) X_{JM}(\mathbf{k}) \quad (45. a)$$

$$\phi_{k_0 J M Z}(\mathbf{k}) = \frac{1}{k_0} \delta(k - k_0) Z_{JM}(\mathbf{k}) \quad (45. b)$$

forme une base de champs transverses dans l'espace réciproque. La donnée des valeurs propres de l'énergie ($\hbar c k_0$), de J^2 et J_z [$J(J+1) \hbar^2$ et $M \hbar$], de la parité [$(-1)^{J+1}$ ou $(-1)^J$] spécifie sans ambiguïté la fonction propre correspondante [(45. a) ou (45. b)]. L'énergie, le moment cinétique total (J^2 et J_z) et la parité forment donc un ensemble complet d'observables qui commutent pour le photon. Tout état $\alpha(\mathbf{k})$ du champ transverse se développe d'une manière et d'une seule sur la base (45)

$$\alpha(\mathbf{k}) = \int_0^\alpha dk_0 \sum_{J=1}^{\infty} \sum_{M=-J}^{+J} \times \{ \alpha_{k_0 J M X} \phi_{k_0 J M X}(\mathbf{k}) + \alpha_{k_0 J M Z} \phi_{k_0 J M Z}(\mathbf{k}) \}. \quad (46)$$

Les coefficients $\alpha_{k_0 J M X}$ ou $\alpha_{k_0 J M Z}$ de ce développement (et leurs complexes conjugués) deviendront, lors de la quantification, les opérateurs de destruction (et de création) d'un photon d'énergie $\hbar c k_0$, de moment cinétique $J(J+1) \hbar^2$ et $M \hbar$, de parité $(-1)^{J+1}$ ou $(-1)^J$.

Remarque

Il n'y a pas de fonction X et Z avec $J = 0$ car Y_{00} est une constante et $V_\kappa Y_{00} = 0$. C'est pourquoi la somme sur J part de $J = 1$ dans (46).

4. Application : ondes multipolaires dans l'espace réel

Lorsque tous les coefficients du développement (46) sont nuls sauf un, la fonction $\alpha(\mathbf{k})$ se réduit à la fonction propre $\phi_{k_0 J M X}(\mathbf{k})$ ou $\phi_{k_0 J M Z}(\mathbf{k})$. Nous

nous proposons dans ce paragraphe d'étudier la structure des ondes électromagnétiques obtenues en remplaçant $\alpha(\mathbf{k})$ par $\phi_{k_0 J M X}(\mathbf{k})$ ou $\phi_{k_0 J M Z}(\mathbf{k})$ dans les expressions (C.19) et (C.20) du chapitre I donnant $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ en fonction de $\alpha(\mathbf{k})$. De telles ondes, appelées ondes multipolaires, sont les ondes associées à des photons d'énergie, de moment cinétique et de parité bien définis.

a) CALCUL DE QUELQUES TRANSFORMÉES DE FOURIER

Lorsqu'on remplace $\sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}) \boldsymbol{\varepsilon} = \alpha(\mathbf{k})$ par la fonction propre (45.a) ou (45.b) dans l'expression (C.19) du chapitre I relative à $\mathbf{E}_\perp$, il apparaît immédiatement qu'il faut calculer la transformée de Fourier de ces fonctions. Pour cela, il est utile de rappeler l'expression du développement d'une onde plane en ondes sphériques (*).

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} (i)^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\boldsymbol{\kappa}) Y_{lm}(\boldsymbol{\rho}) \quad (47)$$

où

$$\boldsymbol{\rho} = \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (48)$$

est le vecteur unitaire dans la direction de $\mathbf{r}$ et où $j_l(kr)$ est la fonction de Bessel sphérique d'ordre l . De (47) il découle que

$$\int d^3k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{1}{k_0} \delta(k - k_0) Y_{lm}(\boldsymbol{\kappa}) = 4\pi (i)^l k_0 j_l(k_0 r) Y_{lm}(\boldsymbol{\rho}) \quad (49)$$

formule dont nous ferons usage ultérieurement.

Calculons tout d'abord la transformée de Fourier de $\phi_{k_0 J M X}(\mathbf{k})$ que nous noterons

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_{k_0 J M X}(\mathbf{r}) &= \text{T.F.} \{ \phi_{k_0 J M X}(\mathbf{k}) \} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{1}{k_0} \delta(k - k_0) (\boldsymbol{\kappa} \times \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}) \frac{Y_{JM}(\boldsymbol{\kappa})}{\sqrt{J(J+1)}}. \end{aligned} \quad (50)$$

Comme $\boldsymbol{\kappa} \times \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}$ n'agit pas sur k , on peut faire passer $\delta(k - k_0)$ à droite de $\boldsymbol{\kappa} \times \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}$, qui s'écrit encore, d'après (37), $\mathbf{k} \times \nabla$. Il vient alors, compte tenu du tableau I (p.49)

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_{k_0 J M X}(\mathbf{r}) &= \text{T.F.} \left\{ (\mathbf{k} \times \nabla) \frac{1}{k_0} \delta(k - k_0) \frac{Y_{JM}(\boldsymbol{\kappa})}{\sqrt{J(J+1)}} \right\} \\ &= \frac{1}{k_0} (\mathbf{r} \times \nabla) \text{T.F.} \left\{ \delta(k - k_0) \frac{Y_{JM}(\boldsymbol{\kappa})}{\sqrt{J(J+1)}} \right\}. \end{aligned} \quad (51)$$

(*) Voir par exemple Cohen-Tannoudji, Diu et Laloë, complément A_{VIII}.

Le calcul de la transformée de Fourier du crochet, donne, compte tenu de (49)

$$\mathbf{I}_{k_0 J M X}(\mathbf{r}) = \frac{k_0}{(2\pi)^{3/2}} (\mathbf{r} \times \nabla) \left[4\pi(i)^J j_J(k_0 r) \frac{Y_{JM}(\mathbf{p})}{\sqrt{J(J+1)}} \right]. \quad (52)$$

Comme $\mathbf{r} \times \nabla$ n'agit que sur $\mathbf{p}$, on voit apparaître la définition (41) de $\mathbf{X}_{JM}(\mathbf{p})$ et il vient finalement

$$\mathbf{I}_{k_0 J M X}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} k_0(i)^J j_J(k_0 r) \mathbf{X}_{JM}(\mathbf{p}). \quad (53)$$

Le calcul de

$$\mathbf{I}_{k_0 J M Z}(\mathbf{r}) = \text{T.F.} \left\{ \frac{1}{k_0} \delta(k - k_0) \nabla_{\kappa} \frac{Y_{JM}(\kappa)}{\sqrt{J(J+1)}} \right\} \quad (54)$$

est un peu plus compliqué. Comme $Y_{JM}(\kappa)$ ne dépend pas de k , le crochet peut s'écrire plus simplement, en utilisant (37) :

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_0} \delta(k - k_0) \nabla_{\kappa} Y_{JM}(\kappa) &= \delta(k - k_0) \nabla Y_{JM}(\kappa) \\ &= \nabla [\delta(k - k_0) Y_{JM}(\kappa)] - \frac{k}{k} \delta'(k - k_0) Y_{JM}(\kappa) \end{aligned} \quad (55)$$

Il vient alors, compte tenu du tableau I, p. 49

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_{k_0 J M Z}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{J(J+1)}} \left\{ -i\mathbf{r} \text{T.F.} [\delta(k - k_0) Y_{JM}(\kappa)] + \right. \\ &\quad \left. + i\nabla \text{T.F.} \left[\frac{1}{k} \delta'(k - k_0) Y_{JM}(\kappa) \right] \right\} \end{aligned} \quad (56)$$

Calculons les deux transformées de Fourier de (56). La première est directement donnée par (49) à un facteur $k_0/(2\pi)^{3/2}$ près. Pour calculer la seconde, remarquons que dans l'intégrand de (49), $(1/k_0) \delta(k - k_0)$ peut aussi s'écrire $(1/k) \delta(k - k_0)$. La dérivation des deux membres par rapport à k_0 fait alors apparaître, au signe près, la transformée de Fourier cherchée

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_{k_0 J M Z}(\mathbf{r}) &= \frac{4\pi(i)^J}{(2\pi)^{3/2} \sqrt{J(J+1)}} \left\{ (-i\mathbf{r}) k_0^2 j_J(k_0 r) Y_{JM}(\mathbf{p}) + \right. \\ &\quad \left. + (-i\nabla) \frac{\partial}{\partial k_0} [k_0 j_J(k_0 r) Y_{JM}(\mathbf{p})] \right\}. \end{aligned} \quad (57)$$

Explicitons l'action de l'opérateur ∇ en séparant son action radiale et angulaire, et introduisons la variable sans dimension $x = k_0 r$

$$\nabla = \mathbf{p} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \nabla_{\mathbf{p}} = k_0 \mathbf{p} \frac{\partial}{\partial x} + k_0 \frac{1}{x} \nabla_{\mathbf{p}} \quad (58)$$

Il vient

$$\begin{aligned} \nabla \frac{\partial}{\partial k_0} [k_0 j_J(k_0 r) Y_{JM}(\rho)] = \\ = \left(k_0 \rho \frac{\partial}{\partial x} + k_0 \frac{1}{x} \nabla_\rho \right) \frac{\partial}{\partial x} (x j_J(x)) Y_{JM}(\rho). \end{aligned} \quad (59)$$

En se référant à (33) et (38), nous remarquons que l'expression (57) fait apparaître $N_{JM}(\rho)$ et $Z_{JM}(\rho)$. Après mise en facteur de $(-ik_0)$, le terme entre accolades de (57) s'écrit :

$$\left[x_{JJ}(x) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x j_J(x)) \right] N_{JM}(\rho) + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} (x j_J(x)) Z_{JM}(\rho) \sqrt{J(J+1)}. \quad (60)$$

Comme $j_J(x)$ est solution de l'équation radiale

$$j_J''(x) + \frac{2}{x} j_J'(x) + j_J(x) - \frac{J(J+1)}{x^2} j_J(x) = 0 \quad (61)$$

le coefficient de $N_{JM}(\rho)$ est simplement $(1/x) J(J+1) j_J(x)$. En portant l'expression (60) ainsi simplifiée dans (57), on obtient finalement :

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_{k_0 J M Z}(\mathbf{r}) = \frac{4 \pi(i)^{J-1}}{(2 \pi)^{3/2} r} \left\{ \sqrt{J(J+1)} j_J(k_0 r) N_{JM}(\rho) + \right. \\ \left. + \frac{d}{d(k_0 r)} [k_0 r j_J(k_0 r)] Z_{JM}(\rho) \right\}. \end{aligned} \quad (62)$$

b) ONDES MULTIPOLAIRES ÉLECTRIQUES

Ce sont les ondes correspondant à $\alpha(\mathbf{k}) = \phi_{k_0 J M Z}(\mathbf{k})$. D'après (C.19), (C.20), $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ sont alors donnés par

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\perp k_0 J M Z}(\mathbf{r}, t) = i(2 \pi)^{3/2} \mathcal{E}_{\omega_0} \mathbf{I}_{k_0 J M Z}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_0 t} + c.c. \\ c\mathbf{B}_{k_0 J M Z}(\mathbf{r}, t) = i(2 \pi)^{3/2} \mathcal{E}_{\omega_0} \mathbf{I}_{k_0 J M X}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_0 t} + c.c. \end{aligned} \quad (63)$$

On a supposé les champs libres (de sorte que l'évolution temporelle est purement harmonique) et donné $c\mathbf{B}$ plutôt que $\mathbf{B}$ pour avoir une quantité de même dimension que $\mathbf{E}_\perp$.

Le champ magnétique au point $\mathbf{r}$ est perpendiculaire au rayon vecteur $\mathbf{r}$, car $\mathbf{I}_{k_0 J M X}(\mathbf{r})$, proportionnel à $\mathbf{X}_{JM}(\rho)$, l'est. L'expression du champ électrique $\mathbf{E}_\perp$ fait par contre intervenir à la fois $\mathbf{Z}_{JM}(\rho)$ et $\mathbf{N}_{JM}(\rho)$ (voir l'expression (62) de $\mathbf{I}_{k_0 J M Z}(\mathbf{r})$). $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r})$ n'est donc pas perpendiculaire à $\mathbf{r}$, ce qui est d'ailleurs indispensable pour que $\mathbf{E}_\perp \times \mathbf{B}$ ait un moment non nul par rapport à l'origine. Par contre, $\mathbf{E}_\perp$ et $\mathbf{B}$ sont perpendiculaires l'un à l'autre.

Au voisinage de l'origine ($k_0 r \ll 1$),

$$j_J(k_0 r) \simeq \frac{(k_0 r)^J}{(2J+1)!!} \quad (64)$$

de sorte que

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}, t) &\simeq 4 \pi k_0 \mathcal{E}_{\omega_0} \frac{1}{k_0 r} \frac{(k_0 r)^J}{(2J+1)!!} \times \\ &\times \{ (i)^J [\sqrt{J(J+1)} \mathbf{N}_{JM}(\boldsymbol{\rho}) + (J+1) \mathbf{Z}_{JM}(\boldsymbol{\rho})] e^{-i\omega_0 t} + c.c. \} \\ c\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &\simeq 4 \pi k_0 \mathcal{E}_{\omega_0} \frac{(k_0 r)^J}{(2J+1)!!} \{ (i)^{J+1} \mathbf{X}_{JM}(\boldsymbol{\rho}) e^{-i\omega_0 t} + c.c. \}. \end{aligned} \quad (65)$$

Les fonctions $\mathbf{N}$, $\mathbf{X}$, $\mathbf{Z}$ sont en moyenne du même ordre de grandeur sur la sphère unité. On a donc

$$cB \simeq \frac{1}{J} k_0 r E_\perp. \quad (66)$$

Par rapport à une onde plane de même champ électrique, le champ magnétique est, au voisinage de l'origine, plus petit par un facteur de l'ordre de $k_0 r/J$. De telles ondes se couplent donc, au voisinage de l'origine, essentiellement à des moments multipolaires électriques, d'où leur nom d'ondes multipolaires électriques.

A grande distance ($k_0 r \gg 1$),

$$j_J(k_0 r) \simeq \frac{1}{k_0 r} \sin \left(k_0 r - J \frac{\pi}{2} \right) \quad (67)$$

et les formes asymptotiques des champs sont

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}, t) &\simeq 4 \pi \mathcal{E}_{\omega_0} \left\{ \left[\frac{1}{r} \cos \left(k_0 r - J \frac{\pi}{2} \right) \mathbf{Z}_{JM}(\boldsymbol{\rho}) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\sqrt{J(J+1)}}{k_0 r^2} \sin \left(k_0 r - J \frac{\pi}{2} \right) \mathbf{N}_{JM}(\boldsymbol{\rho}) \right] (i)^J e^{-i\omega_0 t} + c.c. \right\} \\ c\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &\simeq 4 \pi \mathcal{E}_{\omega_0} \left\{ \frac{1}{r} \sin \left(k_0 r - J \frac{\pi}{2} \right) \mathbf{X}_{JM}(\boldsymbol{\rho}) (i)^{J+1} e^{-i\omega_0 t} + c.c. \right\}. \end{aligned} \quad (68)$$

La partie radiale de $\mathbf{E}$ décroît en $1/r^2$, de sorte qu'il ne reste à l'infini qu'une onde décroissante en $1/r$, avec la structure d'une onde plane stationnaire, transverse dans l'espace des $\mathbf{r}$.

c) ONDES MULTIPOLAIRES MAGNÉTIQUES

Les ondes associées à $\Phi_{k_0 J M X}(\mathbf{k})$ sont appelées ondes multipolaires magnétiques. Les champs libres $\mathbf{E}_\perp$ et $\mathbf{B}$ correspondants sont donnés par

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\perp k_0 J M X}(\mathbf{r}, t) &= i(2\pi)^{3/2} \mathcal{E}_{\omega_0} \mathbf{I}_{k_0 J M X}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_0 t} + c.c. \\ c\mathbf{B}_{k_0 J M X}(\mathbf{r}, t) &= -i(2\pi)^{3/2} \mathcal{E}_{\omega_0} \mathbf{I}_{k_0 J M Z}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_0 t} + c.c. \end{aligned} \quad (69)$$

En comparant (69) et (63), on constate que l'on a simplement interverti $\mathbf{E}_\perp$ et $c\mathbf{B}$, et changé le signe de l'un des deux champs. Toutes les conclusions du paragraphe précédent peuvent donc être transposées sans difficultés.

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES ET CONSEILS DE LECTURE

Akhiezer et Berestetski (chap. I), Berestetski, Lifchitz et Pitayevski (chap. I), Jackson (chap. 16), Blatt et Weisskopf (appendice B).

COMPLÉMENT C₁

EXERCICES

- Exercice 1 H et $\mathbf{P}$ constantes du mouvement
 Exercice 2 Passage de la jauge de Coulomb à la jauge de Lorentz
 Exercice 3 Compensation entre le champ électrique longitudinal et le champ transverse instantané
 Exercice 4 Variables normales et potentiels retardés
 Exercice 5 Champ créé par une particule chargée en son propre emplacement. Réaction de rayonnement
 Exercice 6 Champ produit par un dipôle électrique oscillant
 Exercice 7 Section efficace de diffusion du rayonnement par un électron classique élastiquement lié

1. H ET $\mathbf{P}$ CONSTANTES DU MOUVEMENT

a) Montrer que l'énergie d'un ensemble de particules et du champ en interaction

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} v_{\alpha}^2 + \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3r [\mathbf{E}^2 + c^2 \mathbf{B}^2] \quad (1)$$

est une constante du mouvement.

b) Démontrer le même résultat en utilisant la décomposition du champ transverse en variables normales.

c) Montrer que l'impulsion totale

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} + \epsilon_0 \int d^3r \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (2)$$

est également une constante du mouvement

Solution

a) Calculons dH/dt

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \cdot \frac{d\mathbf{v}_{\alpha}}{dt} + \epsilon_0 \int d^3r \left[\mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + c^2 \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right] \quad (3)$$

et exprimons $d\mathbf{v}_{\alpha}/dt$ à l'aide de l'équation de Lorentz, $\partial \mathbf{E}/\partial t$ et $\partial \mathbf{B}/\partial t$ à l'aide des équations de Maxwell. Il vient

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \cdot (q_{\alpha} \mathbf{E}(\mathbf{r}_{\alpha}, t)) + \epsilon_0 \int d^3r \left[\mathbf{E} \cdot \left(c^2 \nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{j} \right) - c^2 \mathbf{B} \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) \right] \quad (4)$$

puisque $\mathbf{v}_{\alpha} \cdot (\mathbf{v}_{\alpha} \times \mathbf{B}) = 0$.

Reportons l'expression (A.5b) de $\mathbf{j}$ dans $\int d^3r \mathbf{E} \cdot \mathbf{j}$. Il vient

$$\int d^3r \mathbf{E} \cdot \mathbf{j} = \sum_a \mathbf{E}(\mathbf{r}_a, t) \cdot (q_a \mathbf{v}_a). \quad (5)$$

Calculons maintenant :

$$\int d^3r [\mathbf{B} \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) - \mathbf{E} \cdot (\nabla \times \mathbf{B})] = \int d^3r \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) \quad (6)$$

que l'on peut transformer en une intégrale de surface, qui est nulle puisque les champs sont nuls à l'infini. En utilisant (4), (5) et (6) nous trouvons finalement

$$\frac{dH}{dt} = 0. \quad (7)$$

b) Exprimée en fonction des variables normales, l'énergie s'écrit :

$$H = \sum_a \frac{1}{2} m_a \mathbf{v}_a^2 + \int d^3k \frac{\rho^* \rho}{2 \varepsilon_0 k^2} + \sum_\varepsilon \int d^3k \frac{\hbar \omega}{2} [\alpha_\varepsilon^* \alpha_\varepsilon + \alpha_\varepsilon \alpha_\varepsilon^*] \quad (8)$$

Calculons dH/dt . L'accélération $d\mathbf{v}_a/dt$ est donnée par l'équation de Lorentz. D'après la conservation de la charge, $\dot{\rho}$ est égal à $-ik \cdot \mathbf{j}$. Quant à $\dot{\alpha}_\varepsilon$, il est donné par (C.8). Nous en déduisons :

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} = \sum_a q_a \mathbf{v}_a \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_a, t) + \int \frac{d^3k}{2 \varepsilon_0 k^2} [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}^*) \rho - i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}) \rho^*] - \\ - \frac{i}{2 \varepsilon_0} \sum_\varepsilon \int \frac{d^3k}{\mathcal{N}(\mathbf{k})} \hbar \omega [(\varepsilon \cdot \mathbf{j}^*) \alpha_\varepsilon - (\varepsilon \cdot \mathbf{j}) \alpha_\varepsilon^*] \end{aligned} \quad (9)$$

or, d'après (B.19), $\mathcal{E}_\parallel = -i\rho k/\varepsilon_0 k^2$. Le second terme de (9) s'écrit donc :

$$-\frac{1}{2} \int d^3k (\mathcal{E}_\parallel \cdot \mathbf{j}^* + \mathcal{E}_\parallel^* \cdot \mathbf{j}) = - \int d^3r \mathbf{E}_\parallel \cdot \mathbf{j}. \quad (10)$$

Pour évaluer le dernier terme de (9), remarquons que $\mathbf{j}^*(-\mathbf{k}) = \mathbf{j}(\mathbf{k})$. Comme $\mathcal{N}(-\mathbf{k}) = \mathcal{N}(\mathbf{k})$, nous pouvons réécrire ce dernier terme sous la forme :

$$\frac{i}{2 \varepsilon_0} \sum_\varepsilon \int \frac{d^3k}{\mathcal{N}(\mathbf{k})} \hbar \omega [\alpha_\varepsilon^*(\mathbf{k}) - \alpha_\varepsilon(-\mathbf{k})] \varepsilon \cdot \mathbf{j}(\mathbf{k}). \quad (11)$$

En utilisant $\mathcal{N}(\mathbf{k}) = \sqrt{\hbar \omega / 2 \varepsilon_0}$ et (C.6.a), (11) devient :

$$- \int d^3k \mathcal{E}_1^* \cdot \mathbf{j} = - \int d^3r \mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{j}. \quad (12)$$

Nous en déduisons que (10) et (12) compensent le premier terme de (9).

c) Calculons $d\mathbf{P}/dt$ et utilisons les équations de Maxwell-Lorentz pour exprimer $d\mathbf{v}_a/dt$, $\partial \mathbf{E}/\partial t$ et $\partial \mathbf{B}/\partial t$.

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \sum_a m_a \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} + \varepsilon_0 \int d^3r \left[\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \times \mathbf{B} + \mathbf{E} \times \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right] \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}}{dt} = \sum_a q_a \mathbf{E}(\mathbf{r}_a, t) + \sum_a q_a \mathbf{v}_a \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_a, t) + \\ + \varepsilon_0 \int d^3r \left[\left(c^2 \nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{\varepsilon_0} \mathbf{j} \right) \times \mathbf{B} - \mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{E}) \right] \end{aligned} \quad (14)$$

Or l'équation (A.5. b) conduit à

$$-\int d^3r \mathbf{j} \times \mathbf{B} = -\sum_{\alpha} q_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \quad (15)$$

ce qui annule le second terme de (14). Par ailleurs, pour un champ vectoriel $\mathbf{X}$

$$\begin{aligned} \mathbf{X} \times (\nabla \times \mathbf{X}) &= \frac{1}{2} \nabla(X^2) - (\mathbf{X} \cdot \nabla) \mathbf{X} \\ &= \frac{1}{2} \nabla(X^2) - \sum_j e_j \nabla \cdot (X_j \mathbf{X}) + \mathbf{X}(\nabla \cdot \mathbf{X}) \end{aligned} \quad (16)$$

L'intégrale sur tout l'espace des deux premiers termes de (16) peut être transformée en une intégrale de surface qui est nulle si le champ décroît assez vite à l'infini. Quant au dernier terme, il vaut 0 dans le cas du champ $\mathbf{B}$ et $\mathbf{E}\rho/\epsilon_0$ dans le cas du champ $\mathbf{E}$. Nous en déduisons en utilisant (A.5. a) :

$$-\epsilon_0 \int d^3r \mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\sum_{\alpha} q_{\alpha} \mathbf{E}(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \quad (17)$$

qui annule le premier terme de (14). En définitive, les équations (14), (15) et (16) donnent $d\mathbf{P}/dt = 0$.

2. PASSAGE DE LA JAUGE DE COULOMB À LA JAUGE DE LORENTZ

On suppose connus les potentiels $\mathcal{A}$ et $\mathcal{U}$ en jauge de Coulomb. Quelle équation doit vérifier la fonction de jauge $\mathcal{F}$ permettant de passer en jauge de Lorentz ?

Solution

Soit $\mathcal{A}'$ et $\mathcal{U}'$ les nouveaux potentiels. La condition de Lorentz (A.13) s'écrit dans l'espace réciproque :

$$ik \cdot \mathcal{A}' + \frac{\dot{\mathcal{U}}'}{c^2} = 0 \quad (1)$$

$\mathcal{A}'$ et $\mathcal{U}'$ s'expriment en fonction de $\mathcal{A}$ et $\mathcal{U}$ à l'aide des relations (B.8). En combinant (1) et (B.8), nous obtenons :

$$ik \cdot (\mathcal{A} + ik\mathcal{F}) + \frac{1}{c^2}(\dot{\mathcal{U}} - \ddot{\mathcal{F}}) = 0. \quad (2)$$

La transversalité de $\mathcal{A}$ en jauge de Coulomb donne alors

$$\frac{1}{c^2} \ddot{\mathcal{F}} + k^2 \mathcal{F} = \frac{\dot{\mathcal{U}}}{c^2} \quad (3)$$

soit, en utilisant l'expression de $\mathcal{U}$ en jauge de Coulomb

$$\frac{1}{c^2} \ddot{\mathcal{F}} + k^2 \mathcal{F} = \sum_{\alpha} \frac{-q_{\alpha}(ik \cdot \mathbf{v}_{\alpha}) e^{-ik \cdot \mathbf{r}_{\alpha}}}{(2\pi)^{3/2} \epsilon_0 c^2 k^2}. \quad (4)$$

Il apparaît clairement que $\mathcal{F}$ dépend des vitesses $\mathbf{v}_{\alpha}$. C'est pour cette raison que le passage de la jauge de Coulomb à la jauge de Lorentz n'est pas équivalent à un changement de lagrangien (voir remarque (i) du § B.3. b du chap. II).

Notons enfin que l'équation (3) s'écrit dans l'espace ordinaire

$$\square F = \frac{\dot{U}}{c^2}. \quad (5)$$

3. COMPENSATION ENTRE LE CHAMP ÉLECTRIQUE LONGITUDINAL ET LE CHAMP TRANSVERSE INSTANTANÉ

Une particule de charge q_α est fixe à l'origine O des coordonnées. Entre les instants 0 et T , on la déplace de 0 à $\mathbf{r}_\alpha(T)$, suivant un chemin $\mathbf{r}_\alpha(t)$ ($0 \leq t \leq T$). Soit $\mathbf{r}$ un point éloigné de l'origine ($r \gg |\mathbf{r}_\alpha(t)|, cT$). Le but de cet exercice est de vérifier directement, à partir des équations de Maxwell, que les variations instantanées du champ électrique longitudinal créé par la charge q_α en $\mathbf{r}$ sont exactement compensées par la composante instantanée du champ électrique transverse produit par le déplacement de la particule.

a) Calculer en fonction de $\mathbf{r}_\alpha(t)$ le champ électrique longitudinal $\mathbf{E}_\parallel(\mathbf{r}, t)$ produit au point $\mathbf{r}$ et à l'instant t par la charge q_α . Montrer que $\mathbf{E}_\parallel(\mathbf{r}, t)$ peut s'écrire

$$\mathbf{E}_\parallel(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_\parallel(\mathbf{r}, 0) + \delta\mathbf{E}_\parallel(\mathbf{r}, t)$$

où $\delta\mathbf{E}_\parallel$ est donné par un développement en puissances de $|\mathbf{r}_\alpha(t)|/r$. Montrer que le terme d'ordre le plus bas de ce développement s'exprime simplement en fonction de $q_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha(t)$ et de la fonction delta transverse $\delta_{ij}^+(\mathbf{r})$.

b) Calculer le courant $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ associé au mouvement de la particule. Exprimer le courant transverse $\mathbf{j}_\perp(\mathbf{r}, t)$ au point d'observation $\mathbf{r}$, en fonction de $q_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha(t)$ et de la fonction delta transverse $\delta_{ij}^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha(t))$. Montrer qu'à l'ordre le plus bas en $|\mathbf{r}_\alpha(t)|/r$, on peut remplacer $\delta_{ij}^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha(t))$ par $\delta_{ij}^+(\mathbf{r})$.

Ecrire l'équation de Maxwell donnant $\partial\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}, t)/\partial t$ en fonction de $\mathbf{j}_\perp(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$. On commence par négliger la contribution de $\mathbf{B}$ à $\partial\mathbf{E}_\perp/\partial t$. Intégrer l'équation précédente entre 0 et t . Montrer que le champ électrique transverse $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}, t)$ produit par $\mathbf{j}_\perp(\mathbf{r}, t)$ compense exactement (à l'ordre le plus bas en $|\mathbf{r}_\alpha(t)|/r$) le champ $\delta\mathbf{E}_\parallel(\mathbf{r}, t)$ calculé dans la question a) ci-dessus.

c) En éliminant le champ électrique transverse entre les équations de Maxwell pour les champs transverses, établir l'équation du mouvement du champ magnétique $\mathbf{B}$. Montrer que le terme source de cette équation peut être écrit sous une forme qui ne fait intervenir que le courant total $\mathbf{j}$. Justifier l'approximation faite plus haut et consistant à négliger la contribution de $\mathbf{B}$ à $\partial\mathbf{E}_\perp/\partial t$ aux temps courts.

Solution

a) D'après les résultats du paragraphe B.4, $\mathbf{E}_\parallel(\mathbf{r}, t)$ est le champ coulombien créé par la charge q_α , figée à l'instant t

$$\mathbf{E}_\parallel(\mathbf{r}, t) = -\nabla U(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

avec

$$U(\mathbf{r}, t) = \frac{q_\alpha}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha(t)|} \quad (2)$$

Développons U en puissances de $|\mathbf{r}_a(t)|/r$

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}, t) &= \frac{q_a}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_a(t)}{r} + \dots} = \\ &= \frac{q_a}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{r} + \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_a(t)}{r^3} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (3)$$

En reportant (3) dans (1), on obtient, pour la composante i de $\mathbf{E}_{\parallel}(\mathbf{r}, t)$ ($i = x, y, z$)

$$E_{\parallel i}(\mathbf{r}, t) = E_{\parallel i}(\mathbf{r}, 0) + \delta E_{\parallel i}(\mathbf{r}, t) \quad (4)$$

où

$$\begin{aligned} \delta E_{\parallel i}(\mathbf{r}, t) &= -\frac{q_a}{4\pi\epsilon_0} \frac{\partial}{\partial r_i} \sum_j \frac{r_j r_{aj}(t)}{r^3} = \\ &= -\frac{q_a}{4\pi\epsilon_0} \sum_j \left(\delta_{ij} - \frac{3r_i r_j}{r^2} \right) \frac{r_{aj}(t)}{r^3}. \end{aligned} \quad (5)$$

La comparaison de (5) avec (B.17.b), donne, compte tenu du fait que r est non nul,

$$\delta E_{\parallel i}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\epsilon_0} \sum_j \delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{r}) q_a r_{aj}(t). \quad (6)$$

b) D'après (A.5.b),

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = q_a \dot{\mathbf{r}}_a(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)). \quad (7)$$

L'équation (B.16) entraîne alors que

$$\begin{aligned} j_{\perp i}(\mathbf{r}, t) &= \sum_j \int d^3r' \delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') j_j(\mathbf{r}', t) \\ &= \sum_j \delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)) q_a \dot{r}_{aj}(t) \end{aligned} \quad (8)$$

Comme $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)|$ est non nul $\delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t))$ varie en $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)|^{-3}$, qui à l'ordre le plus bas en $|\mathbf{r}_a(t)|/r$ coïncide avec r^{-3} . On peut donc, à cet ordre, écrire

$$j_{\perp i}(\mathbf{r}, t) = \sum_j \delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{r}) q_a \dot{r}_{aj}(t). \quad (9)$$

L'équation de Maxwell (B.49.b) s'écrit, dans l'espace ordinaire

$$\frac{\partial \mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = c^2 \nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{j}_{\perp}(\mathbf{r}, t). \quad (10)$$

Pour $t < 0$, $\mathbf{E}_{\perp}$, $\mathbf{B}$ et $\mathbf{j}_{\perp}$ sont nuls. Si l'on néglige la contribution de $\mathbf{B}$, l'intégrale de (10) entre 0 et t donne

$$E_{\perp i}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\epsilon_0} \int_0^t dt' j_{\perp i}(\mathbf{r}, t') \quad (11)$$

ce qui donne, compte tenu de (9)

$$\begin{aligned} E_{\perp i}(\mathbf{r}, t) &= -\frac{q_a}{\epsilon_0} \sum_j \delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{r}) \int_0^t \dot{r}_{aj}(t') dt' \\ &= -\frac{1}{\epsilon_0} \sum_j \delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{r}) q_a r_{aj}(t). \end{aligned} \quad (12)$$

La comparaison de (6) et (12) montre que $E_{\perp i}(\mathbf{r}, t)$ compense à chaque instant $\delta E_{\parallel i}(\mathbf{r}, t)$.

c) L'élimination de $\mathcal{E}_{\perp}$ entre les 2 équations (B.49) donne

$$\frac{1}{c^2} \ddot{\mathcal{E}} + k^2 \mathcal{E} = -\frac{1}{\epsilon_0 c^2} \mathbf{ik} \times \mathbf{j}_{\perp} = -\frac{1}{\epsilon_0 c^2} \mathbf{ik} \times \mathbf{j} \quad (13)$$

puisque $\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}_{\parallel} = 0$. Dans l'espace réel, (13) devient

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = - \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \nabla \times \mathbf{j}(\mathbf{r}, t). \quad (14)$$

Comme le terme source, qui fait intervenir $\mathbf{j}$, est localisé en $\mathbf{r} = 0$, la solution de (14) est purement retardée et ne contient aucun terme instantané. $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ est donc identiquement nul dans l'intervalle $[0, r/c]$, et il est légitime de négliger le premier terme du second membre de (10) dans cet intervalle.

4. VARIABLES NORMALES ET POTENTIELS RETARDÉS

a) On considère un ensemble de particules chargées créant un courant $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$. Intégrer formellement l'équation d'évolution des variables normales du champ et exprimer les variables normales à l'instant t sous forme d'une intégrale des courants entre $-\infty$ et t . En déduire la valeur du potentiel vecteur $\mathcal{A}_1(\mathbf{k}, t)$ dans l'espace réciproque.

b) Calculer, à partir des résultats précédents, l'expression des potentiels en jauge de Coulomb dans l'espace réel.

c) En repartant des résultats de la question a) dans l'espace réciproque, calculer le champ électrique total $\mathcal{E}(\mathbf{k}, t)$. En déduire que le champ électrique dans l'espace réel est de la forme

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = & - \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{4 \pi \varepsilon_0 c^2} \int d^3 r' \frac{\mathbf{j}\left(\mathbf{r}', t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}\right)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] \\ & - \nabla \left[\frac{1}{4 \pi \varepsilon_0} \int d^3 r' \frac{\rho\left(\mathbf{r}', t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}\right)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] \end{aligned} \quad (1)$$

et qu'il ne contient donc aucun terme coulombien instantané.

Solution

a) La solution de l'équation (C.8) donnant l'évolution de $\alpha(\mathbf{k}, t)$ est :

$$\alpha(\mathbf{k}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' e^{-i\omega(t-t')} \theta(t-t') \frac{i}{2 \varepsilon_0 \mathcal{N}(k)} j_1(\mathbf{k}, t') \quad (2)$$

où $\theta(\tau) = 1$ pour $\tau > 0$, $\theta(\tau) = 0$ pour $\tau < 0$, et où $\mathcal{N}(k) = \sqrt{\hbar\omega/2\varepsilon_0}$. A partir de (C.29), nous obtenons :

$$\mathcal{A}_1(\mathbf{k}, t) = \frac{i}{2 \varepsilon_0 \omega} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \theta(\tau) [e^{-i\omega\tau} j_1(\mathbf{k}, t - \tau) - e^{i\omega\tau} j_1^*(-\mathbf{k}, t - \tau)] \quad (3)$$

soit, en utilisant la réalité de $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$:

$$\mathcal{A}_1(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{\varepsilon_0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \theta(\tau) \frac{\sin \omega\tau}{\omega} j_1(\mathbf{k}, t - \tau). \quad (4)$$

b) Le potentiel transverse est donné dans l'espace réel par :

$$A_{\perp}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathcal{A}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \quad (5)$$

c'est-à-dire d'après (4) :

$$A_{\perp}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3 \epsilon_0} \int d^3k \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \theta(\tau) \frac{\sin \omega\tau}{\omega} \int d^3r' j_{\perp}(\mathbf{r}', t - \tau) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} \quad (6)$$

Or, on peut montrer que

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \frac{\sin \omega\tau}{\omega} \theta(\tau) = \frac{1}{4\pi c^2} \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \delta\left(\tau - \frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{c}\right). \quad (7)$$

(Il suffit d'effectuer tout d'abord l'intégrale sur les angles polaires de $\mathbf{k}$, puis l'intégrale sur k). Il s'ensuit que :

$$A_{\perp}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 c^2} \int d^3r' \int_0^{+\infty} d\tau \frac{j_{\perp}(\mathbf{r}', t - \tau)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \delta\left(\tau - \frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{c}\right). \quad (8)$$

En jauge de Coulomb, $A(\mathbf{r}, t) = A_{\perp}(\mathbf{r}, t)$ et le potentiel scalaire est le potentiel coulombien statique (B.25.b)

$$U(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (9)$$

U est un terme instantané. Pour assurer la vitesse finie de propagation du champ $\mathbf{E}$, il doit y avoir dans $A_{\perp}$ un terme qui compense (9). En effet, $A_{\perp}$ n'est pas purement retardé puisque le courant transverse $j_{\perp}$ qui apparaît dans (8) introduit une composante non locale.

c) Le champ électrique dans l'espace réciproque est donné par :

$$\mathcal{E} = -i\mathbf{k}\mathcal{U} - \dot{\mathcal{A}}_{\perp}. \quad (10)$$

Les équations (9) et (4) donnent alors

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\mathbf{k}, t) &= -\frac{i\mathbf{k}}{\epsilon_0 k^2} \rho(\mathbf{k}, t) - \frac{1}{\epsilon_0} \int_0^{+\infty} d\tau \frac{\sin \omega\tau}{\omega} \dot{j}_{\perp}(\mathbf{k}, t - \tau) \\ &= -\frac{i\mathbf{k}}{\epsilon_0 k^2} \rho(\mathbf{k}, t) - \frac{1}{\epsilon_0} \int_0^{+\infty} d\tau \frac{\sin \omega\tau}{\omega} \dot{j}(\mathbf{k}, t - \tau) + \frac{1}{\epsilon_0} \int_0^{+\infty} d\tau \frac{\sin \omega\tau}{\omega} \dot{j}_{\parallel}(\mathbf{k}, t - \tau). \end{aligned} \quad (11)$$

Intégrons par parties la dernière intégrale

$$\frac{1}{\epsilon_0} \int_0^{+\infty} d\tau \frac{\sin \omega\tau}{\omega} \dot{j}_{\parallel}(\mathbf{k}, t - \tau) = \frac{1}{\epsilon_0} \int_0^{+\infty} d\tau \cos \omega\tau j_{\parallel}(\mathbf{k}, t - \tau). \quad (12)$$

L'équation de conservation de la charge (B.6) permet de transformer l'intégrale (12) en :

$$\frac{i\mathbf{k}}{\epsilon_0 k^2} \int_0^{+\infty} d\tau \cos \omega\tau \dot{\rho}(\mathbf{k}, t - \tau) = \frac{i\mathbf{k}}{\epsilon_0 k^2} \rho(\mathbf{k}, t) - \frac{i\mathbf{k}}{\epsilon_0 k^2} \int_0^{+\infty} d\tau \omega \sin \omega\tau \rho(\mathbf{k}, t - \tau). \quad (13)$$

En portant (13) dans (11), nous trouvons

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}, t) = -\frac{1}{\epsilon_0} \int_0^{+\infty} d\tau \frac{\sin \omega\tau}{\omega} \dot{j}(\mathbf{k}, t - \tau) - \frac{i\mathbf{k}}{\epsilon_0 c^2} \int_0^{+\infty} d\tau \frac{\sin \omega\tau}{\omega} \rho(\mathbf{k}, t - \tau) \quad (14)$$

ce qui, compte tenu des résultats de la question b), donne dans l'espace réel la formule (1) de l'énoncé. Le champ électrique $\mathbf{E}$ n'est autre que le champ déduit des potentiels retardés calculés en jauge de Lorentz (*). On constate que le terme coulombien instantané (premier terme de (11)) a bien été compensé par un terme provenant de j_1 (premier terme de (13)).

5. CHAMP CRÉÉ PAR UNE PARTICULE CHARGÉE EN SON PROPRE EMPLACEMENT. RÉACTION DE RAYONNEMENT

On considère une particule chargée, de charge q_a , de masse m_a , liée au voisinage de l'origine O par une force $\mathbf{F}$ dérivant d'une énergie potentielle extérieure $V(\mathbf{r})$: $\mathbf{F} = -\nabla V$. Le but de cet exercice est de calculer, à partir de l'équation d'évolution des variables normales, le champ créé par cette charge en son propre emplacement, et d'obtenir ainsi l'expression de la « réaction de rayonnement » qui résulte de l'interaction de la particule avec son propre champ (**).

a) Donner l'expression du courant associé à la particule dans l'espace ordinaire et dans l'espace réciproque.

b) Ecrire l'équation d'évolution des variables normales $\alpha_k(\mathbf{k}, t)$ décrivant l'état du champ transverse. Soit a_0 un ordre de grandeur des dimensions spatiales de la zone dans laquelle la particule se trouve liée autour de O . On ne s'intéressera dans tout cet exercice qu'aux modes $\mathbf{k}$ du champ transverse pour lesquels $k \leq k_M$ avec $k_M a_0 \ll 1$. Réécrire, à l'ordre zéro en $k_M a_0$, l'équation d'évolution de $\alpha_k(\mathbf{k}, t)$. Intégrer formellement cette équation entre l'instant initial t_0 et t et exprimer $\alpha_k(\mathbf{k}, t)$ en fonction de $\alpha_k(\mathbf{k}, t_0)$ et de la vitesse $\dot{\mathbf{r}}_a(t')$ de la particule entre t_0 et t . Quelle est la signification physique des 2 termes obtenus ?

c) Dans le développement des champs transverses $\mathbf{E}_\perp$ et $\mathbf{B}$ en modes, on ne tient compte que de la contribution des modes $k \leq k_M$. Montrer qu'on peut alors prendre $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{0}, t)$ et $\mathbf{B}(\mathbf{0}, t)$ pour valeurs approchées des champs transverses au point $\mathbf{r}_a$ où se trouve la particule.

Avec cette approximation (ordre zéro en $k_M a_0$), donner, en utilisant les résultats de b), l'expression des champs transverses $\mathbf{E}_{\perp P}(\mathbf{0}, t)$ et $\mathbf{B}_P(\mathbf{0}, t)$ produits par la particule en son propre emplacement. Effectuer la somme sur les polarisations et l'intégrale sur les angles de $\mathbf{k}$. Montrer que $\mathbf{B}_P(\mathbf{0}, t)$ est nul et que $\mathbf{E}_{\perp P}(\mathbf{0}, t)$ s'écrit

$$\mathbf{E}_{\perp P}(\mathbf{0}, t) = \frac{q_a}{3 \pi \epsilon_0 c^3} \int_0^{t-t_0} d\tau \dot{\mathbf{r}}_a(t-\tau) \ddot{\delta}_M(\tau)$$

$$\text{où} \quad \delta_M(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\omega_M}^{+\omega_M} e^{-i\omega\tau} d\omega$$

est une fonction delta de largeur $1/\omega_M = 1/c k_M$.

(*) Voir Feynman, tome II (chap. 21).

(**) Voir Feynman, tome II (chap. 28) et Jackson (chap. 17).

d) Intégrer par parties l'intégrale donnant $E_{\perp P}(0, t)$. On suppose que $t - t_0$ est très grand devant $1/\omega_M$ et que $\mathbf{r}_\alpha$ varie peu sur un intervalle de temps $1/\omega_M$. Montrer alors que $E_{\perp P}(0, t)$ est la somme de deux contributions, l'une proportionnelle à $\ddot{\mathbf{r}}_\alpha(t)$, l'autre à $\dot{\mathbf{r}}_\alpha(t)$.

e) Ecrire l'équation du mouvement de la particule. Montrer que l'un des deux termes provenant de l'interaction de la particule avec son propre champ transverse peut être interprété comme décrivant une modification δm_α de la masse m_α de la particule. Calculer δm_α . Quelle est l'origine physique de δm_α ?

f) Pour interpréter physiquement l'autre terme provenant du couplage de la particule avec $E_{\perp P}(0, t)$, on suppose que la particule effectue un mouvement sinusoïdal. Montrer que cet autre terme décrit alors un amortissement du mouvement de la particule. Quelle est l'origine physique de cet amortissement ? Justifier l'appellation de réaction de rayonnement donnée à ce terme.

Solution

a) D'après (A.5.b)

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = q_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha(t)) \quad (1.a)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} q_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha(t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha(t)}. \quad (1.b)$$

b) La variable normale $\alpha_\epsilon(\mathbf{k}, t)$ obéit à l'équation (C.12) qui s'écrit, compte tenu de (C.15) et (1.b)

$$\dot{\alpha}_\epsilon(\mathbf{k}, t) + i\omega \alpha_\epsilon(\mathbf{k}, t) = \frac{iq_\alpha}{\sqrt{2\epsilon_0} \hbar \omega (2\pi)^3} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \dot{\mathbf{r}}_\alpha(t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha(t)}. \quad (2)$$

A l'ordre zéro en $k_M a_0$, on peut remplacer dans le dernier terme de (2) $e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha(t)}$ par 1. L'intégration de (2) donne alors

$$\alpha_\epsilon(\mathbf{k}, t) = \alpha_\epsilon(\mathbf{k}, t_0) e^{-i\omega(t-t_0)} + \frac{iq_\alpha}{\sqrt{2\epsilon_0} \hbar \omega (2\pi)^3} \int_{t_0}^t dt' e^{-i\omega(t-t')} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \dot{\mathbf{r}}_\alpha(t'). \quad (3)$$

Le premier terme de (3) représente un champ évoluant librement entre t_0 et t à partir de l'état initial $\alpha_\epsilon(\mathbf{k}, t_0)$. Le second terme décrit le champ créé par la particule entre t_0 et t .

c) Dans le développement en modes des champs $\mathbf{E}_\perp$ et $\mathbf{B}$ évalués au point $\mathbf{r}_\alpha$ apparaissent les exponentielles $e^{\pm i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha(t)}$. Si les sommes sur $\mathbf{k}$ sont limitées à $k \leq k_M$, il est correct, à l'ordre zéro en $k_M a_0$, de remplacer les exponentielles par 1, ce qui revient à confondre les champs en $\mathbf{r}_\alpha$ avec les champs à l'origine. Pour obtenir les champs produits par la particule en son propre emplacement, il suffit donc de reporter le dernier terme de (3) et son complexe conjugué dans le développement de $\mathbf{E}_\perp(0, t)$ et $\mathbf{B}(0, t)$ en modes. Il vient ainsi, pour la composante i de $\mathbf{E}_{\perp P}$

$$\begin{aligned} (E_{\perp P}(0, t))_i &= \sum_{j=x,y,z} \int_{k \leq k_M} k^2 dk d\Omega \times \\ &\times \sum_{\epsilon, \pm \mathbf{k}} \left(-\frac{q_\alpha}{2\epsilon_0(2\pi)^3} \right) \epsilon_i \epsilon_j \int_0^{t-t_0} d\tau e^{-i\omega\tau} \dot{r}_{\alpha j}(t-\tau) + c.c. \quad (4) \end{aligned}$$

La somme sur les polarisations donne

$$\sum_{\varepsilon \perp \mathbf{k}} \varepsilon_i \varepsilon_j = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \quad (5)$$

et l'intégrale angulaire conduit à

$$\int d\Omega \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) = \frac{8\pi}{3} \delta_{ij} \quad (6)$$

de sorte que

$$\mathbf{E}_{\perp P}(\mathbf{0}, t) = -\frac{q_a}{6\varepsilon_0 \pi^2} \int_0^{t-t_0} d\tau \dot{\mathbf{r}}_a(t-\tau) \int_{-k_M}^{+k_M} dk k^2 e^{-ick\tau} \quad (7)$$

Evaluons l'intégrale sur k de (7). Elle vaut

$$\int_{-k_M}^{+k_M} dk k^2 e^{-ick\tau} = -\frac{2\pi}{c^3} \frac{d^2}{d\tau^2} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\omega_M}^{+\omega_M} d\omega e^{-i\omega\tau} \right] = -\frac{2\pi}{c^3} \ddot{\delta}_M(\tau) \quad (8)$$

où

$$\delta_M(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\omega_M}^{+\omega_M} d\omega e^{-i\omega\tau} \quad (9)$$

est une fonction delta de largeur $1/\omega_M$. Finalement

$$\mathbf{E}_{\perp P}(\mathbf{0}, t) = \frac{q_a}{3\pi\varepsilon_0 c^3} \int_0^{t-t_0} d\tau \dot{\mathbf{r}}_a(t-\tau) \ddot{\delta}_M(\tau). \quad (10)$$

Un calcul analogue peut être fait pour $\mathbf{B}_P(\mathbf{0}, t)$. La somme sur les polarisations conduit alors à une fonction impaire de $\kappa = \mathbf{k}/k$ dont l'intégrale angulaire est nulle. On a donc

$$\mathbf{B}_P(\mathbf{0}, t) = \mathbf{0}. \quad (11)$$

d) Une double intégration par parties de (10) donne, compte tenu du fait que $\dot{\delta}_M$ est une fonction impaire de τ et que δ_M et $\ddot{\delta}_M$ sont négligeables pour $\tau = t - t_0$,

$$\mathbf{E}_{\perp P}(\mathbf{0}, t) = \frac{q_a}{3\pi\varepsilon_0 c^3} \left[-\delta_M(0) \ddot{\mathbf{r}}_a(t) + \int_0^{t-t_0} d\tau \ddot{\mathbf{r}}_a(t-\tau) \delta_M(\tau) \right]. \quad (12)$$

D'après (9), $\delta_M(0) = \omega_M/\pi$. D'autre part, puisque $\ddot{\mathbf{r}}_a$ varie lentement à l'échelle de $1/\omega_M$, on peut remplacer dans la dernière intégrale $\ddot{\mathbf{r}}_a(t-\tau)$ par $\ddot{\mathbf{r}}_a(t)$ et sortir $\ddot{\mathbf{r}}_a(t)$ de l'intégrale qui vaut alors $1/2$ par suite du caractère pair de $\delta_M(\tau)$ et du fait que $t - t_0 \gg 1/\omega_M$. On obtient ainsi finalement

$$\mathbf{E}_{\perp P}(\mathbf{0}, t) = -\frac{q_a \omega_M}{3\pi^2 \varepsilon_0 c^3} \ddot{\mathbf{r}}_a(t) + \frac{q_a}{6\pi\varepsilon_0 c^3} \ddot{\mathbf{r}}_a(t). \quad (13)$$

e) Comme $\mathbf{B}_P(\mathbf{0}, t)$ est nul, l'équation du mouvement de la particule s'écrit

$$m_a \ddot{\mathbf{r}}_a(t) = -\nabla V(\mathbf{r}_a) + q_a \mathbf{E}_{\perp P}(\mathbf{0}, t) + q_a \mathbf{E}_{\text{libre}}(\mathbf{0}, t). \quad (14)$$

Le premier terme décrit l'effet du potentiel extérieur liant la particule au voisinage de $\mathbf{0}$, le second l'interaction de la particule avec son propre champ transverse (l'interaction de la particule avec son propre champ longitudinal conduit à une force résultante nulle par raison de symétrie), le dernier l'interaction avec le champ libre ($\mathbf{E}_{\text{libre}}$ est associé au premier terme de (3) et décrit éventuellement un rayonnement incident).

Reportons (13) dans (14) et faisons passer le terme $\ddot{\mathbf{r}}_a$ au premier membre. On obtient alors

$$(m_a + \delta m_a) \ddot{\mathbf{r}}_a(t) = -\nabla V(\mathbf{r}_a) + \frac{q_a^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3} \ddot{\mathbf{r}}_a(t) + q_a \mathbf{E}_{\text{libre}}(\mathbf{0}, t) \quad (15)$$

où δm_a est donné par

$$\delta m_a = \frac{q_a^2 k_M}{3 \pi^2 \epsilon_0 c^2}. \quad (16)$$

Le terme en $\ddot{r}_a$ de (13) décrit donc une modification de masse de la particule qui peut être interprétée comme « l'inertie électromagnétique » de cette particule.

Il est possible d'ailleurs de relier δm_a à l'énergie de Coulomb ϵ_{Coul}^a de la particule. En effet, si l'on introduit la même coupure, à k_M , dans l'intégrale (B.36) donnant ϵ_{Coul}^a , on obtient

$$\epsilon_{\text{Coul}}^a = \frac{q_a^2 k_M}{4 \pi^2 \epsilon_0} = \frac{3}{4} \delta m_a c^2. \quad (17)$$

A un facteur 4/3 près, l'énergie $\delta m_a c^2$ associée à δm_a est donc l'énergie de Coulomb de la particule.

f) Si la particule effectue un mouvement oscillant de pulsation ω , on peut remplacer $\ddot{r}_a$ par $-\omega^2 \dot{r}_a$. Le second terme de (15) décrit alors une force de friction $-(q_a^2 \omega^2 / 6 \pi \epsilon_0 c^3) \dot{r}_a$ qui amortit le mouvement de la particule. Cette force n'est autre que la réaction de rayonnement décrivant la perte d'énergie d'une particule chargée en mouvement accéléré par suite du rayonnement qu'elle émet (voir exercice 7).

6. CHAMP PRODUIT PAR UN DIPÔLE ÉLECTRIQUE OSCILLANT

Un système microscopique émetteur est constitué d'une particule de charge $-q_a$ fixée à l'origine, et d'une charge q_a décrivant le mouvement

$$\mathbf{r}_a(t) = \mathbf{a}_0 \cos \omega_0 t. \quad (1)$$

On s'intéresse au champ produit par ce système loin de l'origine, c'est-à-dire à des distances $r \gg a_0$ (ce qui correspond dans l'espace réciproque, à des vecteurs d'onde tels que $ka_0 \ll 1$).

a) Déterminer les densités de charge et de courant associées au système, ainsi que leurs transformées de Fourier spatiales. Développer ces dernières à l'ordre 1 en a_0 . En déduire les expressions de $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ et $\rho(\mathbf{r}, t)$ à l'ordre 1 en a_0 .

b) En portant les expressions ainsi trouvées dans l'expression (1) de l'exercice 4, montrer que le champ $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ rayonné par le dipôle peut s'écrire

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{q_a}{4 \pi \epsilon_0} [k_0^2 \mathbf{a}_0 + \nabla(\mathbf{a}_0 \cdot \nabla)] \frac{\cos(k_0 r - \omega_0 t)}{r}. \quad (2)$$

Montrer que $\mathbf{E}$ est une somme de trois termes retardés en $1/r$, $1/r^2$, $1/r^3$ respectivement (*).

c) Montrer que $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ peut également s'écrire comme une onde dipolaire électrique telle qu'elles sont définies dans le complément B₁ avec $J = 1$, $M = 0$, Oz étant pris le long de $\mathbf{a}_0$. On donne l'expression de la fonction de Bessel sphérique d'ordre 1

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}. \quad (3)$$

(*) Voir Feynman Tome II, chapitre 21.

Solution

a) D'après les formules (A.5.a) et (A.5.b) du chapitre I

$$\begin{cases} \rho(\mathbf{r}, t) = q_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) - q_a \delta(\mathbf{r}) \\ \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = q_a \dot{\mathbf{r}}_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) \end{cases} \quad \begin{matrix} (4.a) \\ (4.b) \end{matrix}$$

Le développement à l'ordre 1 en a_0 des transformées de Fourier spatiales de (4) donne

$$\rho(\mathbf{k}, t) = \frac{q_a}{(2\pi)^{3/2}} (e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a} - 1) \simeq -\frac{q_a}{(2\pi)^{3/2}} (i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a) \quad (5.a)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{k}, t) = \frac{q_a}{(2\pi)^{3/2}} \dot{\mathbf{r}}_a e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a} \simeq \frac{q_a \dot{\mathbf{r}}_a}{(2\pi)^{3/2}} \quad (5.b)$$

On en déduit en revenant dans l'espace réel

$$\begin{cases} \rho(\mathbf{r}, t) = -q_a \nabla \cdot \mathbf{r}_a(t) \delta(\mathbf{r}) = -q_a \cos \omega_0 t \nabla \cdot \mathbf{a}_0 \delta(\mathbf{r}) \\ \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = q_a \dot{\mathbf{r}}_a(t) \delta(\mathbf{r}) = -q_a \omega_0 \sin \omega_0 t \mathbf{a}_0 \delta(\mathbf{r}) \end{cases} \quad \begin{matrix} (6.a) \\ (6.b) \end{matrix}$$

b) Insérons (6.a) et (6.b) dans l'expression (1) de l'exercice 4 et considérons tout d'abord la contribution de $\mathbf{j}$. La première intégrale en $\mathbf{r}'$ vaut, compte tenu de (6.b)

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0 c^2} \int d^3\mathbf{r}' \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}', t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{q_a \mathbf{a}_0}{4\pi\epsilon_0 c^2} \frac{\omega_0 \sin(k_0 r - \omega_0 t)}{r} \quad (7)$$

D'après l'exercice 4, la contribution de $\mathbf{j}$ à $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ s'obtient en faisant agir $-\partial/\partial t$ sur (7), ce qui donne

$$\frac{q_a \mathbf{a}_0 k_0^2 \cos(k_0 r - \omega_0 t)}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (8)$$

La deuxième intégrale en $\mathbf{r}'$ de la formule (1) de l'exercice 4 peut s'écrire, compte tenu de (6.a)

$$-\frac{q_a}{4\pi\epsilon_0} \int d^3\mathbf{r}' f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) [\nabla_{\mathbf{r}'} \cdot \mathbf{a}_0 \delta(\mathbf{r}')] \quad (9)$$

où

$$f(u) = \frac{\cos \omega_0 \left(t - \frac{u}{c} \right)}{u} \quad (10)$$

L'utilisation de l'identité

$$\lambda \nabla \cdot \mathbf{A} = \nabla \cdot (\lambda \mathbf{A}) - \mathbf{A} \cdot \nabla \lambda \quad (11)$$

permet de transformer (9) en

$$\frac{q_a}{4\pi\epsilon_0} \int d^3\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r}') \mathbf{a}_0 \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = -\frac{q_a}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{a}_0 \cdot \mathbf{r}}{r} f'(r) = -\frac{q_a}{4\pi\epsilon_0} \mathbf{a}_0 \cdot \nabla f(r) \quad (12)$$

D'après l'exercice 4, la contribution de ρ à $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ s'obtient en faisant agir $-\nabla$ sur (12), ce qui donne, compte tenu de (10)

$$\frac{q_a}{4\pi\epsilon_0} \nabla(\mathbf{a}_0 \cdot \nabla) \frac{\cos(k_0 r - \omega_0 t)}{r} \quad (13)$$

La somme de (8) et (13) redonne bien la formule (2) de l'énoncé.

Le calcul de la double dérivée spatiale donne

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = & \frac{q_a}{4 \pi \epsilon_0} \left[3 \frac{\mathbf{r}(\mathbf{a}_0 \cdot \mathbf{r})}{r^2} - \mathbf{a}_0 \right] \frac{\cos(k_0 r - \omega_0 t)}{r^3} + \\ & + \frac{q_0}{4 \pi \epsilon_0} \left[3 \frac{\mathbf{r}(\mathbf{a}_0 \cdot \mathbf{r})}{r^2} - \mathbf{a}_0 \right] k_0 \frac{\sin(k_0 r - \omega_0 t)}{r^2} + \\ & + \frac{q_a}{4 \pi \epsilon_0} \left[\mathbf{a}_0 - \frac{\mathbf{r}(\mathbf{a}_0 \cdot \mathbf{r})}{r^2} \right] k_0^2 \frac{\cos(k_0 r - \omega_0 t)}{r}. \end{aligned} \quad (14)$$

On retrouve les trois termes bien connus du rayonnement du dipôle, décroissant respectivement comme $1/r^3$, $1/r^2$ et $1/r$.

c) Pour faire le lien avec les ondes multipolaires définies dans le complément B₁, il est utile d'introduire les composantes radiales et tangentielles de $\mathbf{a}_0$ vis à vis de $\mathbf{r}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{0r} &= \frac{\mathbf{r}(\mathbf{a}_0 \cdot \mathbf{r})}{r^2} \\ \mathbf{a}_{0t} &= \mathbf{a}_0 - \mathbf{a}_{0r}. \end{aligned} \quad (15)$$

L'expression (14) peut ainsi être écrite sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = & \frac{q_a}{4 \pi \epsilon_0} \mathbf{a}_{0t} \left[\frac{k_0^2 \cos(k_0 r - \omega_0 t)}{r} - \frac{k_0 \sin(k_0 r - \omega_0 t)}{r^2} - \frac{\cos(k_0 r - \omega_0 t)}{r^3} \right] + \\ & + \frac{q_a}{4 \pi \epsilon_0} \mathbf{a}_{0r} \left[\frac{2 k_0 \sin(k_0 r - \omega_0 t)}{r^2} + \frac{2 \cos(k_0 r - \omega_0 t)}{r^3} \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

Comparons aux résultats du complément B₁. Le champ électrique d'une onde dipolaire électrique est, d'après (63), proportionnel à $\mathbf{I}_{k_0 J M Z}(\mathbf{r})$, avec $J = 1$, $M = 0$, l'axe Oz étant pris le long de $\mathbf{a}_0$. Explicitons dans ce cas particulier la formule (62) de ce complément. Les fonctions vectorielles sphériques $Y_{10}(\mathbf{r}/r)$ et $\mathbf{N}_{10}(\mathbf{r}/r)$ sont déduites de l'harmonique sphérique $Y_{10}(\mathbf{r}/r)$, qui vaut, à un facteur près :

$$Y_{10}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) \propto \frac{\mathbf{a}_0 \cdot \mathbf{r}}{a_0 r}. \quad (17)$$

D'après les formules (33) et (38) du complément, on trouve, compte tenu de (3)

$$\mathbf{N}_{10}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) = \frac{\mathbf{r}(\mathbf{a}_0 \cdot \mathbf{r})}{a_0 r^2} = \frac{\mathbf{a}_{0r}}{a_0} \quad (18.a)$$

$$\mathbf{Z}_{10}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} r \nabla \left(\frac{\mathbf{a}_0 \cdot \mathbf{r}}{a_0 r} \right) = \frac{1}{a_0 \sqrt{2}} \left[\mathbf{a}_0 - \frac{(\mathbf{a}_0 \cdot \mathbf{r}) \mathbf{r}}{r^2} \right] = \frac{\mathbf{a}_{0t}}{a_0 \sqrt{2}}. \quad (18.b)$$

La formule (62) s'écrit donc

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_{k_0 1 0 Z}(\mathbf{r}) \propto & \frac{1}{r} \left\{ \frac{\mathbf{a}_{0t}}{a_0 \sqrt{2}} \frac{d}{d(k_0 r)} \left[-\cos(k_0 r) + \frac{\sin k_0 r}{k_0 r} \right] + \right. \\ & \left. + \sqrt{2} \frac{\mathbf{a}_{0r}}{a_0} \left[-\frac{\cos k_0 r}{k_0 r} + \frac{\sin k_0 r}{(k_0 r)^2} \right] \right\} \\ \propto & \mathbf{a}_{0t} \left[\frac{\cos\left(k_0 r - \frac{\pi}{2}\right)}{r} - \frac{\sin\left(k_0 r - \frac{\pi}{2}\right)}{k_0 r^2} - \frac{\cos\left(k_0 r - \frac{\pi}{2}\right)}{k_0^2 r^3} \right] + \\ & + 2 \mathbf{a}_{0r} \left[\frac{\sin\left(k_0 r - \frac{\pi}{2}\right)}{k_0 r^2} + \frac{\cos\left(k_0 r - \frac{\pi}{2}\right)}{k_0^2 r^3} \right]. \end{aligned} \quad (19)$$

On retrouve donc, à un facteur multiplicatif et à une phase près, l'expression (16). Il faut toutefois noter que (16) est une onde progressive sortante, alors que (19) est l'amplitude d'une onde sphérique stationnaire, superposition d'une onde sortante et d'une onde entrante.

7. SECTION EFFICACE DE DIFFUSION DU RAYONNEMENT PAR UN ÉLECTRON CLASSIQUE ÉLASTIQUEMENT LIÉ

Un électron classique, de charge q et de masse m , élastiquement lié à l'origine par une force de rappel $-m\omega_0^2 \mathbf{r}$, est mis en mouvement forcé par une onde incidente monochromatique de fréquence ω et émet dans tout l'espace un rayonnement de même fréquence. Le but de cet exercice est de calculer la section efficace totale de diffusion $\sigma(\omega)$ d'un tel électron et de discuter son ordre de grandeur ainsi que ses variations avec ω (*).

a) L'électron effectue un mouvement forcé le long de Oz d'amplitude a et de fréquence ω

$$z = a \cos \omega t. \quad (1)$$

On rappelle que le champ électrique total rayonné en un point M très éloigné ($OM \gg \lambda = 2\pi c/\omega$) est dans le plan (Oz, OM), perpendiculaire à OM , et a une amplitude (**)

$$E = \frac{qa}{4\pi\epsilon_0 c^2} \frac{\sin \theta}{r} \omega^2 \cos \omega \left(t - \frac{r}{c} \right) \quad (2)$$

où r est la distance OM , θ l'angle entre Oz et OM . Le champ B a une amplitude E/c et une direction telle que $\mathbf{E}, \mathbf{B}, \mathbf{OM}$ forment un trièdre direct.

Calculer la valeur moyenne (sur une période $2\pi/\omega$) du flux du vecteur de Poynting $\epsilon_0 c^2 \mathbf{E} \times \mathbf{B}$ à travers une sphère de rayon r très grand et en déduire l'énergie moyenne rayonnée par une unité de temps dW/dt .

b) L'interaction de l'électron avec le champ qu'il crée en son propre emplacement peut être décrite par une force, appelée réaction de rayonnement (***), dont la composante sur Oz vaut

$$R = \frac{q^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \ddot{z}. \quad (3.a)$$

Pour le mouvement forcé (1), calculer la valeur moyenne (sur une période $2\pi/\omega$) du travail effectué par R sur l'électron. Comparer le résultat obtenu avec celui de a). Quelle est son interprétation physique ?

(*) Voir Jackson, chapitre 17.

(**) Ces propriétés peuvent être démontrées à partir des résultats de l'exercice 6.

(***) Voir l'exercice 5 pour une démonstration de ce résultat. L'interaction de l'électron avec son propre champ est également responsable d'une modification δm de sa masse qui est supposée réincorporée dans la masse m utilisée ici.

c) On écrit la réaction de rayonnement sous la forme

$$R = \frac{2}{3} \frac{r_0}{\lambda_0} \frac{m \ddot{z}}{\omega_0} \quad (3.b)$$

où r_0 est le rayon classique de l'électron égal à

$$r_0 = \frac{q^2}{4 \pi \epsilon_0 m c^2} \quad (4)$$

et $\lambda = c/\omega_0$.

En l'absence de rayonnement incident, l'équation de la dynamique pour l'électron s'écrit

$$m \ddot{z} = - m \omega_0^2 z + \frac{q^2}{6 \pi \epsilon_0 c^3} \dddot{z} \quad (5)$$

R (qui est proportionnel au facteur $r_0/\lambda_0 \ll 1$) peut être traité comme une perturbation. Chercher les solutions de (5) de la forme $e^{i\Omega t}$ et montrer, qu'à l'ordre 1 inclus en r_0/λ_0 , on a

$$\Omega = \pm \omega_0 + i \frac{\gamma_0}{2}. \quad (6)$$

Donner l'expression de γ_0 en fonction de r_0 , ω_0 et c . Que représente physiquement le temps $\tau_0 = \gamma_0^{-1}$?

d) En présence d'un champ incident polarisé le long de Oz et d'amplitude à l'origine $E \cos \omega t$, l'équation de la dynamique de l'électron s'écrit

$$m \ddot{z} = - m \omega_0^2 z + \frac{q^2}{6 \pi \epsilon_0 c^3} \dddot{z} + q E \cos \omega t. \quad (7)$$

Calculer le mouvement d'oscillation forcée de l'électron, et en déduire, à partir des résultats de a), l'énergie rayonnée par unité de temps par l'électron dans tout l'espace.

e) Calculer le flux d'énergie (moyenné sur une période $2\pi/\omega$) associé à l'onde incidente (supposée plane et se propageant suivant Ox). En utilisant les résultats de d), en déduire la section efficace totale de diffusion $\sigma(\omega)$. On exprimera $\sigma(\omega)$ en fonction de r_0^2 , ω , ω_0 , γ_0 .

f) On suppose $\omega \ll \omega_0$ (diffusion Rayleigh). Montrer que $\sigma(\omega)$ est alors proportionnelle à une puissance de ω que l'on déterminera.

g) On suppose $\omega_0 \ll \omega \ll c/r_0$ (diffusion Thomson). Montrer que $\sigma(\omega)$ est égale à une constante.

h) On suppose enfin ω voisin de ω_0 (diffusion résonnante). Montrer que les variations de $\sigma(\omega)$ avec $\omega - \omega_0$ mettent en évidence un phénomène de résonance. Quelle est la largeur de la résonance ? Que vaut la section efficace $\sigma(\omega_0)$ à résonance ?

Solution

a) Le flux du vecteur de Poynting à travers une sphère de rayon r est égal à

$$\phi = \cos^2 \omega \left(t - \frac{r}{c} \right) \int d\Omega r^2 \epsilon_0 \left(\frac{qa}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\omega^4}{c^3} \frac{\sin^2 \theta}{r^2}. \quad (8)$$

Après intégration angulaire, on trouve pour la moyenne de ϕ sur une période

$$\bar{\phi} = \frac{1}{3} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{a^2 \omega^4}{c^3} \quad (9)$$

$\bar{\phi}$ n'est autre que l'énergie rayonnée par unité de temps, $\overline{dW/dt}$, par la charge oscillante.

b) Pendant le temps dt , la charge se déplace de $dz = \dot{z} dt$ et le travail dW' effectué par R vaut

$$dW' = R \dot{z} dt = \frac{q^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \ddot{z} \dot{z} dt. \quad (10)$$

De (10) il découle que

$$\frac{dW'}{dt} = \frac{q^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \ddot{z} \dot{z} = \frac{q^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \left[\frac{d}{dt} (\dot{z} \ddot{z}) - \dot{z}^2 \right]. \quad (11)$$

Prenons la moyenne de (11) sur une période $2\pi/\omega$. Comme $\dot{z}$ est une fonction périodique de t de période $2\pi/\omega$, la moyenne de $d(\dot{z} \ddot{z})/dt$ est nulle. Quant à la moyenne de $(\dot{z})^2$, elle vaut, d'après (1), $a^2 \omega^4/2$. Finalement,

$$\overline{\frac{dW'}{dt}} = - \frac{q^2}{12\pi\epsilon_0 c^3} a^2 \omega^4 = - \bar{\phi} = - \overline{\frac{dW}{dt}}. \quad (12)$$

Le travail moyen par unité de temps que R effectue sur la charge oscillante est égal, au signe près, à l'énergie moyenne que cette charge rayonne dans tout l'espace par unité de temps. La réaction de rayonnement décrit donc bien, au niveau de l'électron, le phénomène dissipatif associé à la perte par rayonnement.

c) Le remplacement de z par $e^{i\Omega t}$ dans (5) donne, compte tenu de (3. b) et de $\lambda_0 = c/\omega_0$

$$\Omega^2 - \omega_0^2 = i \frac{2}{3} \frac{r_0}{\lambda_0} \frac{\Omega^3}{\omega_0}. \quad (13)$$

A l'ordre 0 en r_0/λ_0 , $\Omega = \pm \omega_0$. A l'ordre 1, on peut remplacer Ω^3 par $\pm \omega_0^3$ au second membre de (13) et $\Omega^2 - \omega_0^2$ par $(\Omega - \omega_0)(\Omega + \omega_0) \simeq \pm 2\omega_0(\Omega \mp \omega_0)$, ce qui donne (6) avec

$$\gamma_0 = \frac{2}{3} \frac{r_0}{\lambda_0} \omega_0 = \frac{2}{3} \frac{r_0 \omega_0^2}{c}. \quad (14)$$

Si ω_0 est une fréquence hertzienne ou optique, $r_0 \ll \lambda_0$ et $\gamma_0 \ll \omega_0$. Le temps $\tau_0 = \gamma_0^{-1}$ est le temps d'amortissement de l'énergie d'oscillation dû à la perte d'énergie par rayonnement. Comme $\omega_0 \tau_0 \gg 1$, l'électron effectue de nombreuses oscillations avant de s'amortir.

d) Posons

$$z = \operatorname{Re}(z_0 e^{i\omega t}). \quad (15)$$

On trouve alors, en portant (15) dans (7)

$$z_0 = \frac{qE}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma_0 \omega}. \quad (16)$$

Pour obtenir l'énergie moyenne rayonnée par unité de temps en régime stationnaire, il suffit de remplacer dans (9), a^2 par $|z_0|^2$, ce qui donne

$$\frac{\overline{dW}}{dt} = \frac{1}{3} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2 E^2}{m^2} \frac{\omega^4}{c^3} \frac{1}{[\omega_0^2 - \omega^2]^2 + \gamma_0^2 \frac{\omega^6}{\omega_0^4}}. \quad (17)$$

e) Le flux incident $\overline{\phi}_i$ est égal à

$$\overline{\phi}_i = \epsilon_0 c \frac{E^2}{2} \quad (18)$$

ce qui donne pour la section efficace totale $\sigma(\omega)$

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{\overline{\phi}_i} \frac{\overline{dW}}{dt} = \frac{8\pi}{3} r_0^2 \frac{\omega^4}{[\omega_0^2 - \omega^2]^2 + \gamma_0^2 \frac{\omega^6}{\omega_0^4}}. \quad (19)$$

f) Si $\omega \ll \omega_0$, le dénominateur de (19) est de l'ordre de ω_0^4 , ce qui donne

$$\omega \ll \omega_0 \Rightarrow \sigma(\omega) = \frac{8\pi}{3} r_0^2 \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^4. \quad (20)$$

La section efficace varie comme la puissance quatrième de la fréquence incidente.

g) La condition $\omega \ll c/r_0$, qui exprime que la longueur d'onde du rayonnement incident est très grande devant r_0 , entraîne, d'après (14), que $\omega^4 \gg \gamma_0^2 \omega^6/\omega_0^4$. Si de plus ω est très grand devant ω_0 , le dénominateur de (19) se réduit à ω^4 ce qui entraîne

$$\omega_0 \ll \omega \ll \frac{c}{r_0} \Rightarrow \sigma(\omega) = \frac{8\pi}{3} r_0^2 \quad (21)$$

qui n'est autre que la section efficace de diffusion Thomson.

h) Au voisinage de la résonance, on peut remplacer dans le dénominateur de (17) $\gamma_0^2 \omega^6/\omega_0^4$ par $\gamma_0^2 \omega_0^2 (\omega_0^2 - \omega^2)^2$ par $4\omega_0^2(\omega - \omega_0)^2$, et dans le numérateur ω^4 par ω_0^4 ce qui donne

$$\omega \simeq \omega_0 \Rightarrow \sigma(\omega) = \frac{2\pi}{3} r_0^2 \frac{\omega_0^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \frac{\gamma_0^2}{4}}. \quad (22)$$

Les variations résonnantes de $\sigma(\omega)$ sont celles d'une lorentzienne de largeur totale à mi-hauteur

$$\Delta\omega_0 = \gamma_0. \quad (23)$$

A résonance, $\sigma(\omega_0)$ vaut, compte tenu de (14)

$$\sigma(\omega_0) = \frac{8\pi}{3} r_0^2 \frac{\omega_0^2}{\gamma_0^2} = \frac{3}{2} \frac{\lambda_0^2}{\pi} \quad (24)$$

où

$$\lambda_0 = \frac{2\pi c}{\omega_0} \quad (25)$$

est la longueur d'onde de résonance.

Pour un rayonnement optique, λ_0 est de l'ordre de $5 \cdot 10^{-7}$ m alors que r_0 est de l'ordre de $2,8 \cdot 10^{-15}$ m. Il y a donc environ 16 ordres de grandeur de différence entre la section efficace à résonance (24) et la section efficace Thomson (21).

Approche lagrangienne et hamiltonienne de l'électrodynamique Lagrangien standard et jauge de Coulomb

L'électrodynamique classique, qui a été présentée au chapitre I à partir des équations de Maxwell-Lorentz, peut également être déduite d'un principe variationnel très général, le principe de moindre action.

En mécanique classique, le principe de moindre action permet de sélectionner, parmi tous les « chemins » possibles conduisant d'un état initial *donné* à un état final *donné*, celui qui correspond au chemin effectivement suivi par le système (cf. Fig. 1 correspondant à un système à un degré de liberté). On associe à chaque chemin un nombre, appelé *action*, qui est l'intégrale sur le temps d'une fonction importante, le *lagrangien*, et on recherche le chemin pour lequel l'action est extrémale.

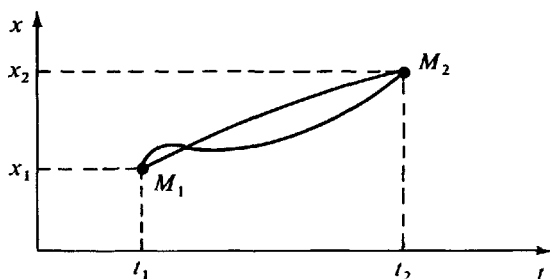


Figure 1. « Chemins » reliant l'état initial x_1, t_1 à l'état final x_2, t_2 . Le chemin réel, effectivement suivi par le système, est celui pour lequel l'action est extrémale.

La formulation lagrangienne de l'électrodynamique classique à partir du principe de moindre action a été proposée pour la première fois par Schwarzschild en 1903. Elle nécessite la généralisation du formalisme

lagrangien habituel au cas où le système dynamique a une infinité continue de degrés de liberté. En effet, pour repérer l'état du champ électromagnétique, il faut fixer les champs (ou les potentiels) en tous les points de l'espace. Outre un incontestable caractère esthétique et compact, cette formulation a l'avantage d'introduire sans ambiguïté toutes les quantités nécessaires à la *quantification canonique* (impulsion, hamiltonien). De plus, les progrès récents en théorie des champs, comme par exemple l'unification des interactions électromagnétiques et faibles, reposent sur une telle formulation de la théorie.

Dans la partie A de ce chapitre, nous rappelons tout d'abord brièvement l'essentiel du formalisme lagrangien sur le cas simple d'un système ayant un ensemble discret de degrés de liberté. La généralisation au cas d'un champ ayant une infinité continue de degrés de liberté est ensuite exposée ainsi que quelques résultats concernant l'utilisation de variables complexes dans le formalisme lagrangien. Il est apparu en effet au chapitre I que les équations de l'électromagnétisme sont souvent plus claires dans l'espace réciproque. Les variables qui repèrent les champs sont alors complexes.

La partie B est consacrée à une présentation de la formulation lagrangienne standard de l'électrodynamique classique, les particules étant décrites de manière non relativiste. On montre que les équations de Lagrange associées à un certain lagrangien (lagrangien standard) se réduisent aux équations de Maxwell-Lorentz. En fait, le lagrangien standard utilise les potentiels pour décrire le champ électromagnétique : il en résulte une redondance des degrés de liberté pour le champ, qui introduit des difficultés, notamment en ce qui concerne la quantification de la théorie. Une des façons de résoudre ces difficultés consiste à éliminer certains degrés de liberté comme le potentiel scalaire et à se placer dans la *jauge de Coulomb*.

La partie C est précisément consacrée à une présentation de l'électrodynamique en jauge de Coulomb et à une discussion de quelques caractéristiques importantes de cette théorie. On montre comment l'application, dans cette jauge, du formalisme lagrangien, puis hamiltonien, permet de procéder à la quantification canonique de l'électrodynamique classique et de justifier ainsi les relations de commutation introduites de manière heuristique au chapitre I.

A — RAPPEL SUR LE FORMALISME LAGRANGIEN ET HAMILTONIEN

Nous rappelons ici, sans entrer dans le détail des calculs, les grandes lignes du formalisme lagrangien et hamiltonien dans le cas d'un nombre fini (§ 1), puis dans le cas d'une infinité continue (§ 2) de degrés de liberté. Le lecteur peu familier avec les notions introduites dans le paragraphe 2 pourra se reporter utilement à l'exercice 2 consacré à l'étude d'une chaîne linéaire d'oscillateurs mécaniques couplés de proche en proche. Le passage à la limite continue d'un tel système lui rendra plus plausibles les résultats du paragraphe 2 (apparition de dérivées spatiales dans la densité de lagrangien, remplacement des symboles de Kronecker par des fonctions delta de Dirac...).

1. Systèmes ayant un nombre fini de degrés de liberté

a) VARIABLES DYNAMIQUES, LAGRANGIEN ET ACTION

Pour un système ayant N degrés de liberté, la donnée des N coordonnées généralisées $x_1 \dots x_N$ et des vitesses correspondantes $\dot{x}_1 \dots \dot{x}_N$ à un instant donné détermine entièrement le mouvement ultérieur. Les $2N$ grandeurs $x_1 \dots x_N, \dot{x}_1 \dots \dot{x}_N$ constituent un ensemble de *variables dynamiques*. Les accélérations $\ddot{x}_1 \dots \ddot{x}_N$ s'expriment à chaque instant en fonction de ces variables. Ce sont les équations du mouvement qui sont donc des équations différentielles du second ordre en temps. Le mouvement du système est déterminé par intégration de ces équations.

Il est également possible de spécifier l'évolution du système au moyen d'un principe variationnel. Dans l'approche lagrangienne, on postule qu'il existe une fonction $L(x_j, \dot{x}_j, t)$, appelée *lagrangien*, dépendant des coordonnées, des vitesses (et éventuellement explicitement du temps), telle que l'intégrale de L entre deux instants t_1 et t_2 soit extrémale quand $x_j(t)$ correspond à l'évolution *réelle* du système entre t_1 et t_2 (les coordonnées initiales et finales $x_j(t_1)$ et $x_j(t_2)$ étant supposés déterminées). L'intégrale :

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(x_j(t), \dot{x}_j(t), t) dt \quad (\text{A.1})$$

est l'*action*, et le principe variationnel correspondant, principe de moindre action.

Ainsi, en mécanique du point matériel, le lagrangien est égal à la différence entre l'énergie cinétique et l'énergie potentielle. En particulier, pour une particule évoluant dans un champ de forces indépendant du temps, le lagrangien ne dépend pas explicitement du temps. On conservera dans la suite, pour les systèmes isolés, cette invariance par translation

dans le temps et on ne mentionnera donc pas de dépendance explicite en temps dans le lagrangien qui sera noté $L(x_j, \dot{x}_j)$.

b) EQUATIONS DE LAGRANGE

Dans le paragraphe précédent, deux approches possibles à l'étude du mouvement ont été évoquées : l'une, locale en temps (équations du mouvement), l'autre globale (principe de moindre action). Rappelons brièvement comment les équations du mouvement peuvent être déduites du principe de moindre action.

En exprimant la stationnarité de l'action par rapport à toute variation de « chemin » $\delta x_j(t)$ (vérifiant $\delta x_j(t_1) = \delta x_j(t_2) = 0$) autour du chemin réel, effectivement suivi par le système, on démontre qu'à chaque instant, les variables dynamiques doivent vérifier, sur ce chemin, des relations qui sont équivalentes aux équations du mouvement. Ce sont les équations de Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} \right) = \frac{\partial L}{\partial x_j}. \quad (\text{A.2})$$

La dérivation explicite de ces équations peut être trouvée dans le complément A_{II} et dans de nombreux ouvrages (voir références à la fin du chapitre).

c) LAGRANGIENS ÉQUIVALENTS

Le lagrangien d'un système n'est pas déterminé de façon unique. Par exemple, si l'on rajoute au lagrangien L la dérivée totale par rapport au temps d'une fonction arbitraire f dépendant des coordonnées x_j et du temps, on obtient une nouvelle fonction L' :

$$L'(x_j, \dot{x}_j, t) = L(x_j, \dot{x}_j, t) + \frac{d}{dt} f(x_j, t) \quad (\text{A.3})$$

qui possède les mêmes propriétés que le lagrangien initial L vis-à-vis du principe de moindre action. En effet, l'intégrale d'action S' relative à L' s'écrit, d'après (A.1),

$$S' = \int_{t_1}^{t_2} L' dt = S + f(x_j(t_2), t_2) - f(x_j(t_1), t_1). \quad (\text{A.4})$$

Comme les positions initiales et finales, $x_j(t_1)$ et $x_j(t_2)$, sont fixées, il s'ensuit que S' et S ne diffèrent que d'une constante et ont donc même extréma. L' et L sont donc des lagrangiens équivalents pour étudier la dynamique du système. La transformation (A.3) permet ainsi de transformer un lagrangien en un autre lagrangien équivalent.

Remarque

La fonction f ne doit pas dépendre des vitesses $\dot{x}_j$, de manière que le nouveau lagrangien L' ne dépende, comme l'ancien, que des variables dynamiques x_j et $\dot{x}_j$ et non des accélérations $\ddot{x}_j$.

d) MOMENTS CONJUGUÉS ET HAMILTONIEN

Le moment conjugué (ou impulsion) relatif à la coordonnée x_j est défini comme étant la dérivée partielle du lagrangien par rapport à la vitesse $\dot{x}_j$

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j}. \quad (\text{A.5})$$

La dérivée par rapport au temps de p_j est obtenue à l'aide de l'équation de Lagrange (A.2)

$$\dot{p}_j = \frac{\partial L}{\partial x_j}. \quad (\text{A.6})$$

La simplicité de l'équation (A.6) incite à utiliser les coordonnées et les impulsions comme variables dynamiques plutôt que les coordonnées et les vitesses. Il est alors préférable de substituer au lagrangien une autre fonction, l'*hamiltonien*. Celui-ci est considéré comme une fonction de x_j et de p_j et est défini par :

$$H(x_j, p_j) = \sum_j \dot{x}_j p_j - L. \quad (\text{A.7})$$

Il suffit alors de différencier (A.7) et d'utiliser (A.5) pour constater que dH n'est fonction que des dx_j et dp_j , ce qui conduit, compte tenu de (A.6), aux équations suivantes, dites *équations de Hamilton*

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{x}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \end{array} \right. \quad (\text{A.8.a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{p}_j = - \frac{\partial H}{\partial x_j}. \end{array} \right. \quad (\text{A.8.b})$$

Pour décrire la dynamique du système, les N équations de Lagrange (A.2), qui sont des équations différentielles du 2^e ordre, ont été ainsi remplacées par un système de $2N$ équations différentielles du premier ordre (A.8.a) et (A.8.b). Par rapport au formalisme lagrangien introduit précédemment, le formalisme hamiltonien présente plusieurs avantages. Tout d'abord, si le lagrangien ne dépend pas explicitement du temps, H est une constante du mouvement qui correspond en général à l'énergie (*) et a donc une signification physique claire. Ensuite, coor-

(*) Dans certains cas, on peut trouver des hamiltoniens différents de l'énergie (voir exercice 1). Ce ne sera jamais le cas dans la suite.

données et impulsions jouent un rôle bien plus symétrique que coordonnées et vitesses (cela apparaît par exemple dans les équations du mouvement (A.8.a) et (A.8.b)). Il s'ensuit que les changements de variables sont a priori plus souples que dans le cadre du formalisme lagrangien, puisqu'on peut envisager de mélanger coordonnées et impulsions. Enfin, l'introduction des impulsions et de l'hamiltonien est indispensable pour la quantification de la théorie.

e) CHANGEMENT DE VARIABLES DYNAMIQUES

α) *Changement de coordonnées généralisées dans le lagrangien*

On peut être amené, pour résoudre un problème, à effectuer un changement de variables dynamiques. Dans le cadre du formalisme lagrangien, seuls les changements de coordonnées qui substituent aux coordonnées $x_1 \dots x_N$ les coordonnées $X_1 \dots X_N$ telles que :

$$x_j = f_j(X_1 \dots X_N) \quad (\text{A.9})$$

sont admis. Il suffit de dériver (A.9) par rapport au temps, pour obtenir la relation entre anciennes et nouvelles vitesses. Le nouveau lagrangien s'obtient en remplaçant dans $L(x_j, \dot{x}_j)$, les variables x_j et $\dot{x}_j$ en fonction de X_k et de $\dot{X}_k$ et la nouvelle action est égale à l'ancienne.

La transformation (A.9) ne peut pas en général faire intervenir les vitesses $\dot{X}_k$, car les accélérations $\ddot{X}_k$ apparaîtraient alors dans le lagrangien.

β) *Cas particulier où une vitesse n'apparaît pas dans le lagrangien*

Il y a cependant un cas où une transformation du type (A.9) incluant les vitesses est possible. C'est lorsqu'une des vitesses n'apparaît pas explicitement dans le lagrangien. Il est possible en effet dans ce cas d'éliminer complètement le degré de liberté correspondant et de substituer au lagrangien initial un lagrangien dépendant d'un nombre moins élevé de variables dynamiques.

Supposons, par exemple, que dans le lagrangien L , la vitesse $\dot{x}_N$ n'apparaisse pas explicitement. Le lagrangien L est alors fonction de N coordonnées et de $N - 1$ vitesses, et sera écrit, de façon abrégée, $L(x_j, x_N, \dot{x}_j)$. Montrons qu'il est possible de remplacer ce lagrangien par un autre lagrangien $\tilde{L}$ qui ne dépend que de $N - 1$ coordonnées $x_1 \dots x_{N-1}$ et de $N - 1$ vitesses $\dot{x}_1 \dots \dot{x}_{N-1}$. L'équation de Lagrange relative à x_N est :

$$\frac{\partial L}{\partial x_N} = 0. \quad (\text{A.10})$$

Cette équation permet d'exprimer x_N en fonction des $N - 1$ autres coordonnées x_j et des vitesses correspondantes $\dot{x}_j$, soit :

$$x_N = u(x_j, \dot{x}_j). \quad (\text{A.11})$$

Si l'on remplace, dans L , x_N par son expression (A.11), on obtient une fonction de x_j et de $\dot{x}_j$ qui est le lagrangien $\hat{L}$ cherché :

$$\hat{L}(x_j, \dot{x}_j) = L(x_j, u(x_j, \dot{x}_j), \dot{x}_j). \quad (\text{A.12})$$

Remarquons tout d'abord qu'aucune accélération n'apparaît dans L en dépit de la forme de la transformation (A.11). Cela est dû, bien entendu, au fait que L ne dépend pas de $\dot{x}_N$. Pour montrer que $\hat{L}$ a bien les propriétés d'un lagrangien, il suffit de remarquer que si l'action relative à L était extrémale pour toute variation indépendante des coordonnées x_j et x_N , il en ira de même pour l'action relative à $\hat{L}$ lorsque x_N est fixé par (A.11).

Remarque

Vérifions directement que les équations de Lagrange associées à $\hat{L}$ ont bien la forme attendue. Calculons, à cet effet, les dérivées partielles de $\hat{L}$ relatives à x_j et $\dot{x}_j$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \hat{L}}{\partial x_j} = \frac{\partial L}{\partial x_j} + \frac{\partial L}{\partial x_N} \frac{\partial x_N}{\partial x_j} \end{array} \right. \quad (\text{A.13.a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{x}_j} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} + \frac{\partial L}{\partial x_N} \frac{\partial x_N}{\partial \dot{x}_j} \end{array} \right. \quad (\text{A.13.b})$$

Lorsque l'équation de Lagrange (A.10) relative à x_N est vérifiée, L et $\hat{L}$ ont les mêmes dérivées partielles par rapport à x_j et $\dot{x}_j$. Les équations de Lagrange relatives aux x_j et déduites de L entraînent donc celles associées à $\hat{L}$. Notons également que, comme le dernier terme de (A.13.b) est nul, les moments conjugués de x_j par rapport à L et $\hat{L}$ sont alors égaux.

γ) Transformation des vitesses et des impulsions

Il est intéressant d'établir les lois de transformation des vitesses et des impulsions lors d'un changement de variables dans le lagrangien. Les relations (A.9), permettant de passer des anciennes coordonnées x_j aux nouvelles coordonnées X_k , donnent par différentiation :

$$\dot{x}_j = \sum_k a_{jk} \dot{X}_k \quad (\text{A.14})$$

avec

$$a_{jk} = \frac{\partial f_j}{\partial X_k}. \quad (\text{A.15})$$

Appelons respectivement p_j et P_k les moments conjugués de x_j et de X_k . Il vient :

$$P_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{X}_k} = \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} \frac{\partial \dot{x}_j}{\partial \dot{X}_k} \quad (\text{A.16})$$

c'est-à-dire encore, compte tenu de (A. 14) :

$$P_k = \sum_j p_j a_{jk} \quad (\text{A. 17})$$

Les relations (A. 14) et (A. 17) peuvent être réécrites de façon matricielle. En appelant A la matrice $N \times N$ dont les éléments sont a_{jk} puis $(\dot{x})$, $(\dot{X})$, (p) et (P) les vecteurs colonnes dont les éléments sont respectivement $\dot{x}_j$, X_k , p_j et P_k on trouve :

$$(\dot{x}) = A(\dot{X}) \quad (\text{A. 18. a})$$

$$(P) = A'(p). \quad (\text{A. 18. b})$$

La matrice transposée A' est évidemment supposée inversible de sorte que la relation entre les impulsions peut être réécrite en allant, comme pour les vitesses, des anciennes aux nouvelles variables

$$(p) = (A')^{-1} (P). \quad (\text{A. 19})$$

Il apparaît donc que les impulsions ne se transforment comme les vitesses que si la matrice A est orthogonale.

δ) Changement de variables dans le formalisme hamiltonien

Les changements de variables dans le cadre du formalisme hamiltonien sont a priori plus vastes que les transformations du type (A. 9) qui ne portent que sur les coordonnées. Certaines transformations du type :

$$X_i = g_i(x_1 \dots x_N, p_1 \dots p_N) \quad (\text{A. 20. a})$$

$$P_j = h_j(x_1 \dots x_N, p_1 \dots p_N) \quad (\text{A. 20. b})$$

sont a priori possibles. Les équations du mouvement pour les nouvelles variables X et P n'ont cependant une forme analogue à (A. 8) que si certaines restrictions sont imposées à ces transformations. On peut montrer que les conditions correspondantes s'écrivent :

$$\{X_i, X_j\} = 0 \quad (\text{A. 21. a})$$

$$\{P_i, P_j\} = 0 \quad (\text{A. 21. b})$$

$$\{X_i, P_j\} = \delta_{ij} \quad (\text{A. 21. c})$$

où le crochet de Poisson $\{a, b\}$ des deux fonctions a et b est défini par

$$\{a, b\} = \sum_k \left(\frac{\partial a}{\partial x_k} \frac{\partial b}{\partial p_k} - \frac{\partial a}{\partial p_k} \frac{\partial b}{\partial x_k} \right). \quad (\text{A. 22})$$

Les grandeurs X et P satisfaisant (A. 21) sont dites *canoniquement conjuguées*.

f) UTILISATION DE COORDONNÉES GÉNÉRALISÉES COMPLEXES

α) Introduction

Jusqu'ici nous avons envisagé exclusivement le cas où les coordonnées et les vitesses sont des quantités réelles. Il peut cependant être intéressant, pour résoudre certains problèmes, d'introduire des quantités complexes. Considérons, à titre d'exemple, un lagrangien dépendant de deux coordonnées x_1 et x_2 et de leurs vitesses et introduisons la variable complexe :

$$X = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + ix_2). \quad (\text{A.23})$$

Le lagrangien est maintenant une fonction de X et de X^* ainsi que de leurs dérivées par rapport au temps.

Nous allons montrer ci-dessous que le formalisme lagrangien et hamiltonien peut être généralisé aux coordonnées complexes X et X^* (reliées à x_1 et x_2 par (A.23)), et que tous les résultats obtenus précédemment demeurent valables (moyennant quelques aménagements des définitions, notamment pour l'impulsion), à condition de considérer formellement X et X^* comme des variables indépendantes.

Remarque

On pourrait aussi considérer d'emblée un lagrangien dépendant de variables dynamiques complexes. Il ne faut pas oublier alors que *l'action doit être réelle*, puisque le principe de moindre action consiste à trouver le minimum de l'action. Le lagrangien est donc aussi une quantité réelle, et dépend par suite nécessairement de X et de X^* .

β) Equations de Lagrange

Le passage des variables x_1 et x_2 aux variables X et X^* est linéaire et biunivoque. On en déduit les relations suivantes :

$$\frac{\partial L}{\partial X} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\partial L}{\partial x_1} - i \frac{\partial L}{\partial x_2} \right] \quad (\text{A.24.a})$$

$$\frac{\partial L}{\partial X^*} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\partial L}{\partial x_1} + i \frac{\partial L}{\partial x_2} \right] \quad (\text{A.24.b})$$

et des relations semblables pour les dérivées relatives aux vitesses. Les équations de Lagrange pour les variables complexes s'obtiennent alors en combinant les équations de Lagrange relatives à x_1 et x_2 . On obtient ainsi deux équations de Lagrange, l'une relative à X et l'autre relative à X^* qui ont la forme habituelle (A.2).

γ) Moments conjugués

Plutôt que de définir le moment conjugué de X par $\partial L / \partial \dot{X}$, nous préférons ici poser :

$$P = \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{X}} \right)^* . \quad (\text{A.25})$$

Pour justifier un tel choix, notons tout d'abord que les lois de transformation des dérivées partielles (A.24) entraînent que :

$$P = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_1 + i p_2) . \quad (\text{A.26})$$

La comparaison de (A.23) et de (A.26) montre alors que les parties réelle et imaginaire de l'impulsion P correspondent respectivement aux moments conjugués des parties réelle et imaginaire de la coordonnée généralisée X , ce qui justifie le choix de (A.25). Les formules (A.24) montrent par ailleurs que :

$$\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{X}} \right)^* = \frac{\partial L}{\partial \dot{X}^*} . \quad (\text{A.27})$$

En fait, cette propriété est générale et est une conséquence de la réalité du lagrangien. Une définition équivalente de P est donc :

$$P = \frac{\partial L}{\partial \dot{X}^*} . \quad (\text{A.28})$$

δ) Hamiltonien

L'hamiltonien introduit en (A.7) dépend de la quantité $\sum_j \dot{x}_j p_j$. En appliquant (A.23) et (A.26), on trouve sans difficulté :

$$\dot{x}_1 p_1 + \dot{x}_2 p_2 = \dot{X} P^* + \dot{X}^* P . \quad (\text{A.29})$$

Il s'ensuit que l'hamiltonien H , exprimé en fonction des variables complexes, s'écrit :

$$H = \dot{X} P^* + \dot{X}^* P - L \quad (\text{A.30})$$

H est évidemment réel.

ε) Changement de variables complexes

Il est possible, comme plus haut, d'envisager un changement de variables complexes, transformant un ensemble de coordonnées complexes $X_1 \dots X_N, X_1^* \dots X_N^*$ en un autre ensemble $Z_1 \dots Z_N, Z_1^* \dots Z_N^*$. Si l'on impose aux impulsions (définies en (A.25)) de se transformer comme

les vitesses, il en résulte certaines contraintes sur la matrice des dérivées partielles des anciennes coordonnées par rapport aux nouvelles. Une démarche analogue à celle du paragraphe 1. e. γ, permet de montrer que cette matrice doit être unitaire.

g) COORDONNÉES, IMPULSIONS ET HAMILTONIEN EN MÉCANIQUE QUANTIQUE

Les diverses grandeurs physiques du système deviennent en mécanique quantique des opérateurs. Ces opérateurs agissent dans un espace abstrait, appelé espace des états, qui a les propriétés d'un espace de Hilbert. Les relations de commutation canoniques entre composantes cartésiennes des opérateurs position x et impulsion p sont égales à :

$$\begin{cases} [x_n, x_m] = 0 & (A.31.a) \\ [p_n, p_m] = 0 & (A.31.b) \\ [x_n, p_m] = i\hbar \delta_{nm} & (A.31.c) \end{cases}$$

En mécanique quantique, l'état d'un système est décrit par un vecteur $|\psi\rangle$ de l'espace de Hilbert. On peut, à ce stade, adopter essentiellement deux points de vue : soit supposer que le vecteur d'état est fixe et que les opérateurs évoluent dans le temps (c'est le point de vue de Heisenberg), soit supposer que les opérateurs sont fixes et que le vecteur d'état évolue dans le temps (c'est le point de vue de Schrödinger).

Dans le premier point de vue, l'évolution d'une grandeur physique G est décrite par l'équation de Heisenberg :

$$i\hbar \frac{d}{dt} G = [G, H] \quad (A.32)$$

où H est l'opérateur quantique associé à l'hamiltonien. Dans le cas où l'opérateur G correspond à une coordonnée ou à une impulsion, les équations déduites de (A.32) sont les correspondants quantiques des équations de Hamilton (A.8).

Dans le second point de vue, les opérateurs sont fixes et l'évolution du vecteur d'état est déterminée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle. \quad (A.33)$$

Mathématiquement, le passage d'un point de vue à l'autre correspond à une transformation unitaire sur le vecteur d'état.

Remarque

Dans le cas où une vitesse n'apparaît pas dans le lagrangien initial, le moment conjugué associé à la coordonnée correspondante est identiquement nul. Ceci pose évidemment un sérieux problème pour la quantification puisqu'il

est alors impossible de postuler la relation de quantification canonique (A.31). On peut résoudre cette difficulté en transformant le lagrangien de façon à faire disparaître la coordonnée associée à cette vitesse (voir § A.1.e.β). Les moments conjugués sont alors calculés à partir du nouveau lagrangien (à nombre réduit de variables dynamiques) et les relations de quantification canoniques (A.31) sont ensuite imposées.

Nous avons introduit au paragraphe A.1.f des variables complexes. Etudions ce que deviennent les relations de commutation canoniques dans ce cas. Les relations (A.23) et (A.26) entraînent que :

$$[X, P] = \frac{1}{2} [x_1 + ix_2, p_1 + ip_2] \quad (\text{A.34.a})$$

$$[X, P^+] = \frac{1}{2} [x_1 + ix_2, p_1 - ip_2]. \quad (\text{A.34.b})$$

Il découle alors de (A.31) que :

$$[X, P] = 0 \quad (\text{A.35.a})$$

$$[X^+, P^+] = 0 \quad (\text{A.35.b})$$

$$[X, P^+] = i\hbar \quad (\text{A.35.c})$$

$$[X^+, P] = i\hbar \quad (\text{A.35.d})$$

(les autres commutateurs, entre deux X ou entre deux P , sont nuls). La définition (A.25) que nous avons choisie pour le moment conjugué mène ainsi à une relation de commutation non nulle entre l'opérateur X et l'adjoint de l'opérateur associé au moment conjugué.

2. Système ayant un ensemble continu de degrés de liberté

a) VARIABLES DYNAMIQUES

L'état du système est maintenant déterminé par un nombre, non plus discret, mais *continu* de variables dynamiques. Cette extension est nécessaire dans la mesure où nous voulons étudier le champ électromagnétique qui est défini par sa valeur en tous les points de l'espace. Nous considérons donc maintenant des coordonnées généralisées qui dépendent d'un *indice continu* (noté $\mathbf{r}$, point courant de l'espace à 3 dimensions, en prévision de l'application au champ électromagnétique) et d'un indice discret j (j variant de 1 à N).

Tout comme dans le cas discret, les coordonnées $A_j(\mathbf{r})$ et les vitesses $\dot{A}_j(\mathbf{r})$, définies par

$$\dot{A}_j(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} A_j(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A.36})$$

constituent un ensemble de variables dynamiques pour le système. Il

convient d'insister sur le fait que, dans le formalisme lagrangien développé ci-dessous, $\mathbf{r}$ n'est pas une variable dynamique, mais un indice (au même titre que j).

b) LAGRANGIEN

Le *lagrangien* L , qui est une fonction des variables dynamiques $A_j(\mathbf{r})$ et $\dot{A}_j(\mathbf{r})$ (où j et $\mathbf{r}$ prennent toutes les valeurs possibles), peut avoir une très grande variété de structures. Nous supposons ici qu'il peut s'écrire :

$$L = \int d^3r \mathcal{L} \quad (\text{A.37})$$

où la fonction $\mathcal{L}$ est appelée « densité de lagrangien ». $\mathcal{L}$ est une fonction réelle des coordonnées $A_j(\mathbf{r})$, des vitesses $\dot{A}_j(\mathbf{r})$ et également des dérivées spatiales (notées $\partial_i A_j$ avec $\partial_i = \partial_x, \partial_y, \partial_z$), dont la présence exprime simplement que l'évolution de la coordonnée $A_j(\mathbf{r}, t)$ est couplée à l'évolution de la coordonnée en un point voisin, de la même manière que, dans un problème à variables discrètes q_j , l'évolution de q_j peut dépendre de q_{j-1} et de q_{j+1} (voir exercice 2). Il doit être clair que ces dérivées spatiales ne sont pas des nouvelles variables dynamiques indépendantes, mais des combinaisons linéaires des coordonnées généralisées. On peut, a priori, inclure dans la densité de lagrangien des dérivées spatiales de tout ordre (rappelons que, seule, la dérivée temporelle d'ordre un est autorisée). Cependant, compte tenu de l'application ultérieure au champ électromagnétique, nous n'étudierons que des densités de lagrangien de la forme $\mathcal{L}(A_j, \dot{A}_j, \partial_i A_j)$.

Remarques

- (i) On peut envisager une dépendance explicite de $\mathcal{L}$ en fonction du point $\mathbf{r}$ et du temps t . Nous ne le ferons pas pour ne pas alourdir les notations.
- (ii) La densité de lagrangien que nous utiliserons en électrodynamique fait intervenir des dérivées spatiales. Une telle structure se comprend aisément. En effet, les équations de Maxwell décrivent l'évolution de champs couplés de proche en proche dans l'espace, et l'absence des dérivées spatiales dans la densité de lagrangien conduirait à une théorie où le champ évoluerait de façon indépendante en chaque point de l'espace. Le fait que les équations de Maxwell fassent intervenir les dérivées spatiales des champs nous oblige donc à prendre une densité de lagrangien dépendant également de ces dérivées spatiales. Cette remarque suggère évidemment d'étudier la densité de lagrangien dans l'espace réciproque plutôt que dans l'espace réel, puisque nous avons vu au chapitre I que les équations de Maxwell sont strictement locales dans l'espace réciproque. Nous reviendrons sur ce point dans la partie B de ce chapitre.

c) EQUATIONS DE LAGRANGE

Dans le passage du cas discret au cas continu, la plupart des équations écrites au paragraphe 1 restent formellement valables. Cependant, cer-

taines opérations (dérivée du lagrangien par rapport à des variables continues, par exemple) ne sont pas mathématiquement évidentes et il peut être utile de préciser certains points.

Notons d'abord que l'action S est, tout comme dans le cas discret, l'intégrale sur le temps du lagrangien. En raison de la forme que nous avons postulée pour la densité de lagrangien, nous pouvons donc écrire :

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \mathcal{L}(A_j, \dot{A}_j, \partial_i A_j). \quad (\text{A.38})$$

Le principe de moindre action est, bien entendu, inchangé : S est extrémal quand $A_j(\mathbf{r}, t)$ correspond à l'évolution réelle du champ entre les instants t_1 et t_2 .

Pour établir les équations du mouvement à partir du principe de moindre action, la même démarche que dans le cas discret peut être suivie : on étudie la modification de S quand on fait varier le champ d'une quantité $\delta A_j(\mathbf{r}, t)$ par rapport au « chemin » extrémal ($\delta A_j(\mathbf{r}, t)$ étant nul, d'une part aux bornes temporelles t_1 et t_2 de l'intégrale, d'autre part lorsque $|\mathbf{r}|$ tend vers l'infini). En exprimant que S est extrémal, on obtient alors (voir complément A_{II}) les équations de Lagrange qui peuvent s'écrire sous la forme :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_j} - \sum_{i=x,y,z} \partial_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i A_j)}. \quad (\text{A.39})$$

Remarque

L'équation (A.39) fait intervenir la densité de lagrangien $\mathcal{L}$ et non le lagrangien L , comme dans le cas discret (A.2). Cependant, il est possible d'écrire (A.39) sous une forme identique à (A.2). Il faut pour cela introduire la notion de « dérivée fonctionnelle » (extension de la notion de dérivée partielle au cas continu) qui est présentée dans le complément A_{II}. L'introduction de la densité de lagrangien $\mathcal{L}$ est mathématiquement commode en ce sens que, $\mathcal{L}$ ne dépendant que d'un ensemble fini de variables, la notion de dérivée partielle est parfaitement claire.

Le lagrangien d'un système continu, tout comme le lagrangien d'un système discret, n'est pas déterminé de façon univoque. On peut ajouter à la densité de lagrangien la dérivée temporelle d'une fonction et la divergence d'un champ arbitraire (mais tendant suffisamment vite vers 0 à l'infini), dépendant éventuellement des coordonnées généralisées $A_j(\mathbf{r})$:

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L} + \frac{d}{dt} f_0(A_j(\mathbf{r}), \mathbf{r}, t) + \sum_{i=x,y,z} \partial_i f_i(A_j(\mathbf{r}), \mathbf{r}, t). \quad (\text{A.40})$$

En effet, pour calculer le nouveau lagrangien L' , il faut intégrer $\mathcal{L}'$ sur l'espace. L'intégrale de $\nabla \cdot \mathbf{f}$ se transforme alors en une intégrale de sur-

face à l'infini qui s'annule par hypothèse et L' ne diffère de L que par la dérivée par rapport au temps d'une fonction. L' est donc équivalent à L .

d) MOMENTS CONJUGUÉS ET HAMILTONIEN

Le moment conjugué est défini, dans le cas continu, par généralisation des formules obtenues dans le cas discret. Pour un lagrangien du type (A.37), le moment conjugué associé à la variable $A_j(\mathbf{r})$ a une expression simple en fonction de la densité de lagrangien :

$$\Pi_j(\mathbf{r}) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j(\mathbf{r})}. \quad (\text{A.41})$$

Remarque

Il est assez facile de comprendre en quoi la formule (A.41) est la généralisation au cas continu de la formule (A.5) du cas discret. Transformons pour cela l'intégrale (A.37) définissant le lagrangien en une somme sur de petits éléments d'espace, de volume a^3 , centrés sur des points $\mathbf{r}_m$ (x_m, y_m, z_m) :

$$L_a = \sum_m a^3 \mathcal{L} \left[A_j(\mathbf{r}_m), \dot{A}_j(\mathbf{r}_m), \frac{A_j(x_{m+1}, y_m, z_m) - A_j(\mathbf{r}_m)}{a} \right]. \quad (\text{A.42})$$

Le dernier terme à l'intérieur du crochet symbolise les diverses quantités tendant, à la limite $a \rightarrow 0$, vers les dérivées partielles $\partial_i A_j$. Le moment conjugué associé à la variable $A_j(\mathbf{r}_m)$ peut, pour le lagrangien L_a , être calculé comme dans le cas discret et vaut :

$$\Pi_j^a(\mathbf{r}_m) = \frac{\partial L_a}{\partial \dot{A}_j(\mathbf{r}_m)} = a^3 \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j(\mathbf{r}_m)}. \quad (\text{A.43})$$

Il apparaît alors que le moment conjugué $\Pi_j(\mathbf{r})$ défini en (A.41) est égal à la valeur limite de $a^{-3} \Pi_j^a(\mathbf{r}_m)$ quand a tend vers 0. Or, la limite de $a^{-3} \partial L_a / \partial \dot{A}_j(\mathbf{r}_m)$, quand a tend vers zéro, n'est autre que la dérivée fonctionnelle $\partial L / \partial \dot{A}_j(\mathbf{r})$ du lagrangien (voir complément A_{II} pour plus de détails). L'équation (A.41) peut donc être écrite sous la forme équivalente :

$$\Pi_j(\mathbf{r}) = \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_j(\mathbf{r})}. \quad (\text{A.44})$$

Une démarche analogue à celle du cas discret permet de passer des couples de variables dynamiques coordonnée-vitesse ($A_j(\mathbf{r}), \dot{A}_j(\mathbf{r})$) à d'autres couples constitués de la coordonnée $A_j(\mathbf{r})$ et de son moment conjugué $\Pi_j(\mathbf{r})$, puis d'introduire l'hamiltonien H et la densité d'hamiltonien $\mathcal{H}$:

$$H = \int d^3r \sum_j \Pi_j(\mathbf{r}) \dot{A}_j(\mathbf{r}) - L = \int d^3r \mathcal{H} \quad (\text{A.45.a})$$

$$\mathcal{H} = \sum_j \Pi_j(\mathbf{r}) \dot{A}_j(\mathbf{r}) - \mathcal{L}. \quad (\text{A.45.b})$$

Remarque

Il est possible également d'introduire l'impulsion et la densité d'impulsion du champ, ainsi que le moment cinétique et la densité de moment cinétique (voir exercice 5).

Tout comme dans le cas discret, le passage au formalisme hamiltonien introduit de nouvelles équations pour la dynamique (équations de Hamilton). On peut exprimer simplement ces équations à l'aide de la densité d'hamiltonien $\mathcal{H}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{A}_j = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Pi_j} \end{array} \right. \quad (\text{A.46.a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\Pi}_j = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial A_j} + \sum_i \partial_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\partial_i A_j)}. \end{array} \right. \quad (\text{A.46.b})$$

Ces équations peuvent être écrites directement en fonction de l'hamiltonien H , à l'aide de la dérivée fonctionnelle (voir complément A_{II}). Elles sont alors identiques aux équations de Hamilton du cas discret (A.8).

e) QUANTIFICATION

Lors de la quantification, la relation de commutation fondamentale relie, comme dans le cas discret, les opérateurs associés à une coordonnée et à son moment conjugué. Dans le cas où le champ est exprimé en fonction de ses coordonnées cartésiennes, et où les trois coordonnées sont des variables dynamiques indépendantes, les relations de commutation canoniques s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{l} [A_n(\mathbf{r}), A_m(\mathbf{r}')] = 0 \\ [\Pi_n(\mathbf{r}), \Pi_m(\mathbf{r}')] = 0 \\ [A_n(\mathbf{r}), \Pi_m(\mathbf{r}')] = i\hbar \delta_{nm} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (\text{A.47.a}) \\ (\text{A.47.b}) \\ (\text{A.47.c}) \end{array}$$

Remarques

(i) Dans le cas continu, la distribution de Dirac $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ a remplacé le symbole de Kronecker du cas discret. Cela peut se comprendre si l'on revient à la situation envisagée dans la remarque du paragraphe précédent (§ A.2.d) où l'espace avait été découpé en cellules de dimension a^3 . Dans ce cas, les règles du cas discret donnent :

$$[A_n(\mathbf{r}_k), \Pi_m^a(\mathbf{r}_l)] = i\hbar \delta_{nm} \delta_{kl}. \quad (\text{A.48})$$

Puisque $\Pi_m(r_l)$ est la limite de $a^{-3} \Pi_m^a(r_l)$ quand a tend vers 0, il s'ensuit que :

$$[A_n(r_k), \Pi_m(r_l)] = i\hbar \delta_{nm} \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\delta_{kl}}{a^3} \quad (\text{A. 49})$$

δ_{kl} vaut 1 si r_k et r_l appartiennent à la même cellule de volume a^3 , et 0 ailleurs. Il apparaît donc, qu'exprimée en fonction de r_k et de r_l , la valeur limite de la fonction au second membre de (A. 49) n'est autre que la distribution de Dirac $\delta(r_k - r_l)$.

(ii) Les relations de commutation (A. 47) ne sont évidemment valables que si les trois composantes du champ A_x , A_y et A_z sont des variables dynamiques indépendantes. Nous verrons qu'il existe en électrodynamique des situations où ce n'est pas le cas. Il est important alors d'identifier les variables dynamiques réellement indépendantes afin d'écrire les relations de commutation correctes.

L'état du système est décrit par un vecteur d'un espace des états et, tout comme dans le cas discret, on peut décrire la dynamique dans le point de vue de Heisenberg ou dans le point de vue de Schrödinger.

f) FORMALISME LAGRANGIEN AVEC DES CHAMPS COMPLEXES

La généralisation des résultats précédents au cas d'un champ complexe est particulièrement importante, puisqu'en électrodynamique, il est souvent plus intéressant d'étudier les équations dans l'espace réciproque.

Considérons donc un lagrangien L et une densité de lagrangien $\mathcal{L}$ dépendant de champs complexes $\mathcal{A}_j$ et de leurs vitesses $\dot{\mathcal{A}}_j$. Comme L doit être réel, $\mathcal{L}$ doit aussi dépendre de $\mathcal{A}_j^*$ et de $\dot{\mathcal{A}}_j^*$, de sorte que :

$$L = \int d^3k \mathcal{L}(\mathcal{A}_j, \dot{\mathcal{A}}_j, \partial_i \mathcal{A}_j, \mathcal{A}_j^*, \dot{\mathcal{A}}_j^*, \partial_i \mathcal{A}_j^*) \quad (\text{A. 50})$$

le point courant de l'espace étant maintenant appelé k en vue d'applications ultérieures évidentes et ∂_i signifiant $\partial/\partial k_i$.

Remarque

Le lagrangien de l'électrodynamique est plus simple que (A. 50). En effet, comme les équations de Maxwell sont strictement locales dans l'espace réciproque, il en est de même pour la densité de lagrangien. Il n'y a donc pas de dérivées en $\partial/\partial k_i$ dans le lagrangien de l'électrodynamique (mais il y a, en revanche, une dépendance explicite en k qui provient de la transformation de Fourier des dérivées spatiales). Nous conserverons cependant la forme (A. 50) du lagrangien pour l'étude générale de ce paragraphe, les résultats pouvant, d'une part, s'appliquer à d'autres situations physiques (voir exercice 7 où l'équation de Schrödinger est déduite d'un principe variationnel) et permettant, d'autre part, une comparaison plus claire avec le cas des champs réels.

Introduisons les combinaisons linéaires suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{A}_j^R(\mathbf{k}) = \frac{\mathcal{A}_j(\mathbf{k}) + \mathcal{A}_j^*(\mathbf{k})}{\sqrt{2}} \end{array} \right. \quad (\text{A.51.a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{A}_j^I(\mathbf{k}) = \frac{\mathcal{A}_j(\mathbf{k}) - \mathcal{A}_j^*(\mathbf{k})}{i\sqrt{2}} \end{array} \right. \quad (\text{A.51.b})$$

qui permettent de remplacer dans (A.50) les variables complexes par les variables réelles $\mathcal{A}_j^R(\mathbf{k})$ et $\mathcal{A}_j^I(\mathbf{k})$. Il est alors possible de développer avec ces variables réelles le formalisme lagrangien et hamiltonien précédemment exposé, puis de réexprimer les équations obtenues en fonction de $\mathcal{A}_j$ et de $\mathcal{A}_j^*$. Une telle démarche a déjà été exposée dans le cas discret (§ A.1.f), et nous avons vu que l'on obtient le même résultat en considérant d'emblée formellement les variables dynamiques complexes et leurs complexes conjugués comme des variables dynamiques indépendantes. On établit ainsi deux équations de Lagrange relatives à $\mathcal{A}_j$ et $\mathcal{A}_j^*$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathcal{A}}_j} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathcal{A}_j} - \sum_i \partial_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \mathcal{A}_j)} \quad (\text{A.52.a})$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathcal{A}}_j^*} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathcal{A}_j^*} - \sum_i \partial_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \mathcal{A}_j^*)}. \quad (\text{A.52.b})$$

Pour le moment conjugué relatif à la variable $\mathcal{A}_j(\mathbf{k})$, il est défini de manière analogue au cas discret (A.25) :

$$\pi_j(\mathbf{k}) = \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathcal{A}}_j(\mathbf{k})} \right)^*. \quad (\text{A.53})$$

Ce choix assure, comme dans le cas discret, que les parties réelles et imaginaires de $\pi_j(\mathbf{k})$ sont bien les moments conjugués de $\mathcal{A}_j^R$ et de $\mathcal{A}_j^I$. C'est pour cette raison (voir aussi la remarque ci-dessous) que nous choisissons la définition (A.53) de préférence à la convention habituelle (où il n'y a pas de complexe conjugué au second membre de (A.53)).

La réalité de $\mathcal{L}$ entraîne que (A.53) peut encore s'écrire :

$$\pi_j(\mathbf{k}) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathcal{A}}_j^*(\mathbf{k})} \quad (\text{A.54})$$

ce qui permet de montrer que le moment conjugué associé à $\mathcal{A}_j^*$ est π_j^* .

Remarque

La définition (A.53) du moment conjugué présente un autre avantage lorsque les champs $\mathcal{A}_j(\mathbf{k})$ sont les transformées de Fourier des champs $A_j(\mathbf{r})$. Les impulsions $\pi_j(\mathbf{k})$ sont alors les transformées de Fourier des moments

conjugués $\Pi_j(\mathbf{r})$ des variables $A_j(\mathbf{r})$. Pour comprendre ce résultat, considérons tout d'abord le passage des coordonnées $A_j(\mathbf{r})$ aux coordonnées $\mathcal{A}_j(\mathbf{k})$ comme un changement de variables auquel peuvent être appliqués les résultats du paragraphe A.1.f. Nous avons alors mentionné, pour des variables discrètes, que les impulsions se transforment comme les vitesses si la matrice de transformation est unitaire. Cette propriété est généralisable au cas continu et est bien vérifiée par la transformation de Fourier. De surcroît, cette transformation étant linéaire, les coordonnées se transforment de la même façon que les vitesses et donc que les impulsions. Il est également possible de donner une démonstration directe de ce résultat en utilisant la définition du moment conjugué en termes de dérivée fonctionnelle (A.44). On peut, en effet, écrire :

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathcal{A}}_j(\mathbf{k})} = \int d^3r \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_j(\mathbf{r})} \frac{\partial \dot{A}_j(\mathbf{r})}{\partial \dot{\mathcal{A}}_j(\mathbf{k})}. \quad (\text{A.55})$$

Or, par dérivation de la relation liant le champ dans l'espace réel au champ dans l'espace réciproque (chap. I, formule (B.1)), il vient :

$$\frac{\partial \dot{A}_j(\mathbf{r})}{\partial \dot{\mathcal{A}}_j(\mathbf{k})} = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}}. \quad (\text{A.56})$$

Comme l'équation (A.53) peut encore s'écrire :

$$\pi_j(\mathbf{k}) = \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathcal{A}}_j(\mathbf{k})} \right)^*. \quad (\text{A.57})$$

Il s'ensuit que :

$$\pi_j(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r \Pi_j(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (\text{A.58})$$

ce qui démontre l'identité des transformations pour les variables et leurs moments conjugués.

g) FORMALISME HAMILTONIEN ET QUANTIFICATION AVEC DES CHAMPS COMPLEXES

Pour trouver les relations concernant tant la densité d'hamiltonien que les équations de Hamilton ou les relations de commutation canonique, il suffit de partir des expressions trouvées aux paragraphes A.2.d et A.2.e pour des champs réels $\mathcal{A}_j^R$ et $\mathcal{A}_j^I$, et de les combiner pour obtenir les expressions correspondantes avec des champs complexes. Cette démarche étant calquée sur celle réalisée dans le cas discret (§§ A.1.f et A.1.g), nous donnons directement les résultats en omettant les intermédiaires de calcul.

Pour la densité d'hamiltonien, nous trouvons ainsi :

$$\mathcal{H} = \sum_j (\pi_j \dot{\mathcal{A}}_j^* + \pi_j^* \dot{\mathcal{A}}_j) - \mathcal{L} \quad (\text{A.59})$$

qui généralise l'expression (A.30) relative au cas discret.

Les équations de Hamilton s'écrivent :

$$\dot{\mathcal{A}}_j^* = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_j} \quad (\text{A.60.a})$$

$$\dot{\pi}_j^* = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathcal{A}_j} + \sum_i \partial_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\partial_i \mathcal{A}_j)} \quad (\text{A.60.b})$$

Les relations de commutation canoniques, pour des champs quantiques, sont enfin :

$$[\mathcal{A}_n(\mathbf{k}), \pi_m(\mathbf{k}')] = 0 \quad (\text{A.61.a})$$

$$[\mathcal{A}_n(\mathbf{k}), \pi_m^+(\mathbf{k}')] = i\hbar \delta_{nm} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{A.61.b})$$

Les autres commutateurs, entre $\mathcal{A}_n(\mathbf{k})$ et $\mathcal{A}_m(\mathbf{k}')$, ou entre $\pi_n(\mathbf{k})$ et $\pi_m(\mathbf{k}')$ étant nuls. Tout comme dans le cas discret (A.35), on a une relation de commutation non nulle entre l'opérateur champ et l'adjoint de l'opérateur associé au moment conjugué.

Remarques

(i) Dans tout ce qui précède, la quantification a été réalisée en associant aux variables dynamiques et à leurs moments conjugués des opérateurs satisfaisant aux relations de commutation (A.61). En fait, l'exigence fondamentale à respecter en théorie quantique concerne les équations d'évolution quantiques des variables $\mathcal{A}_n$ et π_n . Ces équations, qui s'écrivent :

$$\begin{cases} \dot{\mathcal{A}}_n = \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{A}_n, H] \\ \dot{\pi}_n = \frac{1}{i\hbar} [\pi_n, H] \end{cases} \quad (\text{A.62})$$

expriment que l'hamiltonien H est le générateur des translations dans le temps. Elles doivent avoir une forme analogue à celle des équations classiques

$$\begin{cases} \dot{\mathcal{A}}_n = \partial H / \partial \pi_n^* \\ \dot{\pi}_n = -\partial H / \partial \mathcal{A}_n^* \end{cases} \quad (\text{A.63})$$

Une telle condition est satisfaite simplement si l'on impose les relations de commutation (A.61) entre les $\mathcal{A}_n$ et les π_n puisque ces relations entraînent que :

$$\begin{cases} [\mathcal{A}_n, H] = i\hbar \partial H / \partial \pi_n^* \\ [\pi_n, H] = -i\hbar \partial H / \partial \mathcal{A}_n^* \end{cases} \quad (\text{A.64})$$

Pour certains hamiltoniens quadratiques, il est également possible de satisfaire la même exigence en remplaçant dans (A.61) les commutateurs $[A, B] = AB - BA$ par des anticommutateurs $[A, B]_+ = AB + BA$

$$\begin{cases} [\mathcal{A}_n(\mathbf{k}), \pi_m(\mathbf{k}')]_+ = 0 \\ [\mathcal{A}_n(\mathbf{k}), \pi_m^+(\mathbf{k}')]_+ = i\hbar \delta_{nm} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \end{cases} \quad (\text{A.65})$$

les autres anticommutateurs étant nuls. Par exemple, nous montrons dans l'exercice 8 que la quantification de l'équation de Schrödinger, considérée comme équation d'évolution d'un champ classique $\psi(\mathbf{r})$, peut être effectuée de manière cohérente, soit avec des commutateurs, soit avec des anticommutateurs. Dans les deux cas, l'équation de Heisenberg pour le champ quantique $\Psi(\mathbf{r})$ associé au champ classique $\psi(\mathbf{r})$:

$$\dot{\Psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{i\hbar} [\Psi(\mathbf{r}), H] \quad (\text{A. 66})$$

a bien la forme d'une équation de Schrödinger :

$$i\hbar \dot{\Psi}(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}). \quad (\text{A. 67})$$

Notons que les postulats concernant la mesure des grandeurs physiques sont inchangés. Par exemple, deux grandeurs physiques relatives au champ quantifié ne peuvent être mesurées simultanément que si les deux opérateurs correspondants commutent, que la théorie soit quantifiée avec les relations de commutation (A. 61) ou d'anticommutation (A. 65) : il faut cependant mentionner ici que les champs eux-mêmes ne sont pas nécessairement des grandeurs physiques. Ainsi, dans l'exemple de la quantification de l'équation de Schrödinger par des anticommutateurs, on trouve qu'il n'est pas possible d'associer à l'opérateur $\Psi(\mathbf{r})$ (ou à ses parties réelle et imaginaire) un sens physique (comme celui d'un champ électrique ou magnétique). Seules les fonctions quadratiques et hermitiques de Ψ représentent des grandeurs physiques auxquelles s'appliquent les postulats de la mesure. Par exemple $q\Psi^+(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})$ est l'opérateur associé à la densité de charge au point $\mathbf{r}$. Le fait que $\Psi(\mathbf{r})$ ne soit pas physique rend moins troublantes certaines propriétés de $\Psi(\mathbf{r})$, comme par exemple le fait que $\Psi(\mathbf{r})$ anticommute avec lui-même.

(ii) Suivant que la quantification du champ repose sur des commutateurs ou des anticommutateurs, les particules associées aux excitations élémentaires du champ quantifié sont des bosons ou des fermions (voir par exemple l'exercice 8). Lorsque le champ est relativiste, il existe un lien profond entre le « spin » du champ et la statistique des particules qui lui sont associées. Des considérations très générales (invariance relativiste, causalité, positivité de l'énergie) permettent de montrer que la quantification d'un champ relativiste de spin entier ne peut être effectuée de manière satisfaisante (c'est-à-dire sans violer les grands principes précédents) que si elle repose sur des commutateurs. Par contre, si le spin est demi-entier, il faut utiliser des anticommutateurs (*). Ainsi, le champ électromagnétique, qui est vectoriel et donc de spin 1, doit être quantifié avec des commutateurs, de sorte que les particules qui lui sont associées, les photons, sont des bosons. Par contre, le champ de Dirac est spinoriel (spin 1/2), et les particules qui lui sont associées, les électrons et les positrons, sont des fermions. Le complément A_v du chapitre V donne une idée du lien qui existe dans ce cas entre la positivité de l'énergie et la nécessité d'une quantification par des anticommutateurs.

(*) Il s'agit-là du théorème « spin-statistique » démontré par W. Pauli, *Phys. Rev.* **58**, 716 (1940).

B — LE LAGRANGIEN STANDARD DE L'ÉLECTRODYNAMIQUE CLASSIQUE

Dans cette partie B, nous commençons (§ 1) par donner l'expression du lagrangien le plus couramment utilisé en électrodynamique classique et que nous appelons pour cette raison le « lagrangien standard ». Nous vérifions ensuite (§ 2) que les équations de Maxwell-Lorentz apparaissent bien comme les équations de Lagrange pour un tel lagrangien. Nous analysons enfin (§ 3) certaines propriétés générales du lagrangien standard : comportement vis-à-vis d'une transformation de symétrie et invariance de jauge, redondance des variables dynamiques du champ.

1. Expression du lagrangien standard

a) LE LAGRANGIEN STANDARD DANS L'ESPACE RÉEL

Le lagrangien du système formé par les particules et le champ électromagnétique en interaction s'exprime en fonction des variables dynamiques relatives à chacun de ces sous-systèmes. Les variables dynamiques des particules forment un ensemble discret : il s'agit des composantes de la position $\mathbf{r}_\alpha$ et de la vitesse $\dot{\mathbf{r}}_\alpha$ des diverses particules indicées par la lettre α . En ce qui concerne le champ électromagnétique, ce sont les potentiels, et non les champs, qui apparaissent comme les « bonnes » coordonnées généralisées dans le formalisme lagrangien. Ceci n'est pas étonnant dans la mesure où les équations du mouvement des potentiels sont des équations du deuxième ordre en temps, comme les équations de Lagrange, alors que les équations de Maxwell pour les champs sont du premier ordre. En chaque point $\mathbf{r}$ de l'espace, il faut donc se donner quatre coordonnées généralisées, qui sont les trois composantes $A_j(\mathbf{r})$ du potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, et le potentiel scalaire $U(\mathbf{r})$, et les quatre vitesses correspondantes $\dot{A}_j(\mathbf{r})$ et $\dot{U}(\mathbf{r})$ de sorte que les variables dynamiques du champ sont :

$$\{ \mathbf{A}(\mathbf{r}), U(\mathbf{r}); \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}), \dot{U}(\mathbf{r}) \} \quad \text{pour tout } \mathbf{r}. \quad (\text{B.1})$$

La dynamique du système particules + champ électromagnétique peut être déduite du lagrangien standard :

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 + \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3r [\mathbf{E}^2(\mathbf{r}) - c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{r})] + \sum_{\alpha} [q_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}) - q_{\alpha} U(\mathbf{r}_{\alpha})] \quad (\text{B.2})$$

les champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ étant exprimés en fonction des potentiels $\mathbf{A}$ et U :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla U(\mathbf{r}) - \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \quad (\text{B.3.a})$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (\text{B.3.b})$$

Nous verrons plus loin qu'un tel lagrangien redonne bien les équations de Maxwell-Lorentz, ce qui justifiera, a posteriori, le choix de (B.2). Ce lagrangien se compose de trois termes : le lagrangien propre des particules L_P (premier terme de (B.2)), le lagrangien du champ électromagnétique L_R (second terme de (B.2)), et le lagrangien d'interaction L_I (dernier terme de (B.2))

$$L = L_P + L_R + L_I \quad (\text{B.4.a})$$

$$L_P = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 \quad (\text{B.4.b})$$

$$L_R = \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3r [\mathbf{E}^2(\mathbf{r}) - c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{r})] \quad (\text{B.4.c})$$

$$L_I = \sum_{\alpha} [q_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}) - q_{\alpha} U(\mathbf{r}_{\alpha})]. \quad (\text{B.4.d})$$

En utilisant les densités de charge $\rho(\mathbf{r})$ et de courant $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ introduites dans le chapitre I (voir formules (A.5.a) et (A.5.b)), on peut d'ailleurs réécrire L_I sous la forme

$$L_I = \int d^3r [\mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \rho(\mathbf{r}) U(\mathbf{r})] \quad (\text{B.4.e})$$

Finalement, le regroupement de (B.4.c) et (B.4.e) permet d'introduire la densité de lagrangien $\mathcal{L}$

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_0}{2} [\mathbf{E}^2(\mathbf{r}) - c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{r})] + \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \rho(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \quad (\text{B.5.a})$$

et de réexprimer le lagrangien standard L sous la forme

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 + \int d^3r \mathcal{L}(\mathbf{r}) \quad (\text{B.5.b})$$

Notons que le lagrangien d'interaction (B.4.e) est local : la densité de courant (ou de charge) au point $\mathbf{r}$ est multipliée par le potentiel vecteur (ou scalaire) au même point. Dans le lagrangien propre du champ (B.4.c) apparaissent aussi, par l'intermédiaire de $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$, des dérivées spatiales des potentiels qui expriment un couplage de proche en proche entre les variables du champ, à l'origine de la propagation du champ.

b) LE LAGRANGIEN STANDARD DANS L'ESPACE RÉCIPROQUE

Nous avons vu au chapitre I que les équations de Maxwell sont beaucoup plus simples dans l'espace réciproque. De la même façon, il est intéressant d'exprimer le lagrangien standard en fonction des potentiels

dans l'espace réciproque. L'égalité de Parseval-Plancherel permet effectivement de réécrire (B.5) sous la forme :

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 + \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3k [|\mathcal{E}(\mathbf{k})|^2 - c^2 |\mathcal{B}(\mathbf{k})|^2] + \int d^3k [j^*(\mathbf{k}) \cdot \mathcal{A}(\mathbf{k}) - \rho^*(\mathbf{k}) \mathcal{U}(\mathbf{k})]. \quad (\text{B.6})$$

L'expression (B.6) suggère de choisir comme variables dynamiques les composantes des potentiels dans l'espace réciproque et leurs vitesses. Il faut prendre cependant quelques précautions. En effet, le passage de l'espace réel à l'espace réciproque correspond à un changement de variables qui transforme des quantités réelles en quantités complexes. Les nouvelles variables semblent donc avoir deux fois plus de degrés de liberté que les anciennes. En fait, il n'en est rien, car il existe entre elles des relations de contrainte liées à la réalité de $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ et $U(\mathbf{r})$:

$$\mathcal{A}(\mathbf{k}) = \mathcal{A}^*(-\mathbf{k}) \quad (\text{B.7.a})$$

$$\mathcal{U}(\mathbf{k}) = \mathcal{U}^*(-\mathbf{k}). \quad (\text{B.7.b})$$

Si les potentiels sont connus dans un « *demi-espace réciproque* », ils sont donc connus partout. On est ainsi amené à prendre comme variables indépendantes les potentiels et leurs complexes conjugués dans une moitié seulement de l'espace réciproque. Les égalités :

$$\mathcal{E}(-\mathbf{k}) \cdot \mathcal{E}^*(-\mathbf{k}) = \mathcal{E}^*(\mathbf{k}) \cdot \mathcal{E}(\mathbf{k}) \quad (\text{B.8.a})$$

$$j^*(-\mathbf{k}) \cdot \mathcal{A}(-\mathbf{k}) = j(\mathbf{k}) \cdot \mathcal{A}^*(\mathbf{k}) \quad (\text{B.8.b})$$

qui découlent de (B.7), permettent de réécrire le lagrangien (B.6) en fonction des variables du champ dans un demi-espace. En notant $\int d^3k$ l'intégrale étendue à un demi-volume de l'espace réciproque, et en appelant $\overline{\mathcal{L}}$ la densité de lagrangien dans l'espace réciproque, on obtient alors :

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 + \int d^3k \overline{\mathcal{L}} \quad (\text{B.9.a})$$

$$\overline{\mathcal{L}} = \varepsilon_0 [|\mathcal{E}(\mathbf{k})|^2 - c^2 |\mathcal{B}(\mathbf{k})|^2] + [j^*(\mathbf{k}) \cdot \mathcal{A}(\mathbf{k}) + j(\mathbf{k}) \cdot \mathcal{A}^*(\mathbf{k}) - \rho^*(\mathbf{k}) \mathcal{U}(\mathbf{k}) - \rho(\mathbf{k}) \mathcal{U}^*(\mathbf{k})] \quad (\text{B.9.b})$$

ou encore, en explicitant $\mathcal{E}$ et $\mathcal{B}$ en fonction de $\mathcal{A}$ et $\mathcal{U}$,

$$\mathcal{E} = -\dot{\mathcal{A}} - i\mathbf{k}\mathcal{U} \quad (\text{B.10.a})$$

$$\mathcal{B} = i\mathbf{k} \times \mathcal{A} \quad (\text{B.10.b})$$

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{L}} = & \varepsilon_0 [|\dot{\mathcal{A}}(\mathbf{k}) + i\mathbf{k}\mathcal{U}(\mathbf{k})|^2 - c^2 |\mathbf{k} \times \mathcal{A}(\mathbf{k})|^2] + \\ & + [\dot{j}^*(\mathbf{k}) \cdot \mathcal{A}(\mathbf{k}) + \dot{j}(\mathbf{k}) \cdot \mathcal{A}^*(\mathbf{k}) - \rho^*(\mathbf{k}) \mathcal{U}(\mathbf{k}) - \rho(\mathbf{k}) \mathcal{U}^*(\mathbf{k})]. \quad (\text{B.11}) \end{aligned}$$

Cette nouvelle forme équivalente du lagrangien standard présente un certain nombre d'avantages. Tout d'abord, la densité de lagrangien est *strictement locale* en $\mathbf{k}$: il n'apparaît pas de dérivées de $\mathcal{A}$ et $\mathcal{U}$ par rapport à $\mathbf{k}$ (il n'y a pas de couplage entre points voisins comme dans l'espace réel). Un autre intérêt de l'expression (B.9) est qu'y apparaissent explicitement les contributions des divers modes du champ. Comme nous le verrons plus loin, il est alors très simple de séparer la contribution des modes non relativistes, ou celle des modes de grande longueur d'onde pour lesquels une approximation dipolaire électrique est possible.

2. Dérivation des équations de l'électrodynamique classique à partir du lagrangien standard

a) EQUATION DE LAGRANGE POUR LES PARTICULES

Comme les variables associées aux particules sont discrètes, il faut appliquer l'équation de Lagrange (A.2) au lagrangien standard (B.2). Calculons tout d'abord $\partial L / \partial(\mathbf{r}_\alpha)_i$ et $\partial L / \partial(\dot{\mathbf{r}}_\alpha)_i$,

$$\frac{\partial L}{\partial(\mathbf{r}_\alpha)_i} = -q_\alpha \frac{\partial}{\partial(\mathbf{r}_\alpha)_i} U(\mathbf{r}_\alpha, t) + q_\alpha \frac{\partial}{\partial(\mathbf{r}_\alpha)_i} [\dot{\mathbf{r}}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha, t)] \quad (\text{B.12})$$

ce qui, compte tenu de l'identité vectorielle,

$$\nabla(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{A} + (\mathbf{A} \cdot \nabla) \mathbf{B} + \mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{A}) + \mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{B}) \quad (\text{B.13})$$

devient

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial(\mathbf{r}_\alpha)_i} = & -q_\alpha \frac{\partial}{\partial(\mathbf{r}_\alpha)_i} U(\mathbf{r}_\alpha, t) + q_\alpha (\dot{\mathbf{r}}_\alpha \cdot \nabla) A_i(\mathbf{r}_\alpha, t) + \\ & + q_\alpha [\dot{\mathbf{r}}_\alpha \times (\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha, t))]_i. \quad (\text{B.14}) \end{aligned}$$

Par ailleurs,

$$\frac{\partial L}{\partial(\dot{\mathbf{r}}_\alpha)_i} = m_\alpha (\dot{\mathbf{r}}_\alpha)_i + q_\alpha A_i(\mathbf{r}_\alpha, t). \quad (\text{B.15})$$

L'équation de Lagrange décrivant le mouvement de la particule α s'obtient en dérivant (B.15) par rapport au temps.

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial(\dot{\mathbf{r}}_\alpha)_i} = m_\alpha (\ddot{\mathbf{r}}_\alpha)_i + q_\alpha \frac{\partial}{\partial t} A_i(\mathbf{r}_\alpha, t) + q_\alpha (\dot{\mathbf{r}}_\alpha \cdot \nabla) A_i(\mathbf{r}_\alpha, t) \quad (\text{B.16})$$

et en égalant l'expression ainsi obtenue à (B.14). Nous trouvons finalement :

$$m_\alpha \ddot{\mathbf{r}}_\alpha = q_\alpha \left[- \frac{\partial A(\mathbf{r}_\alpha, t)}{\partial t} - \nabla U(\mathbf{r}_\alpha, t) \right] + q_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha \times (\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha, t)) \quad (\text{B.17.a})$$

$$m_\alpha \ddot{\mathbf{r}}_\alpha = q_\alpha \mathbf{E}(\mathbf{r}_\alpha) + q_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha) \quad (\text{B.17.b})$$

qui n'est autre que l'équation de Lorentz.

b) EQUATION DE LAGRANGE RELATIVE AU POTENTIEL SCALAIRE

Pour les équations relatives au champ, on peut utiliser la densité de lagrangien dans l'espace réel ou dans l'espace réciproque. Nous prendrons cette deuxième option, car elle conduit à des calculs plus rapides. A partir de (B.11), il vient :

$$\frac{\partial \overline{\mathcal{L}}}{\partial \dot{\mathcal{U}}^*} = - \varepsilon_0 \mathbf{i} \mathbf{k} \cdot [\dot{\mathcal{A}} + \mathbf{i} \mathbf{k} \mathcal{U}] - \rho. \quad (\text{B.18})$$

Par ailleurs, comme $\dot{\mathcal{U}}^*$ n'apparaît pas dans $\overline{\mathcal{L}}$,

$$\frac{\partial \overline{\mathcal{L}}}{\partial \dot{\mathcal{U}}^*} = 0. \quad (\text{B.19})$$

L'équation de Lagrange (A.52.b) s'écrit donc ici :

$$- \mathbf{i} \mathbf{k} \cdot [\dot{\mathcal{A}} + \mathbf{i} \mathbf{k} \mathcal{U}] = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (\text{B.20})$$

c'est-à-dire encore

$$\mathbf{i} \mathbf{k} \cdot \mathcal{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (\text{B.21})$$

et n'est autre que l'une des équations de Maxwell écrite dans l'espace réciproque (voir l'expression (B.5.a) du chapitre I).

c) EQUATION DE LAGRANGE RELATIVE AU POTENTIEL VECTEUR

Partant toujours de l'expression (B.11) de $\overline{\mathcal{L}}$, et utilisant l'identité

$$(\mathbf{k} \times \mathcal{A}) \cdot (\mathbf{k} \times \mathcal{A}^*) = [(\mathbf{k} \times \mathcal{A}) \times \mathbf{k}] \cdot \mathcal{A}^* \quad (\text{B.22})$$

on en déduit :

$$\frac{\partial \overline{\mathcal{L}}}{\partial \dot{\mathcal{A}}_i^*} = \varepsilon_0 c^2 [\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathcal{A})]_i + j_i. \quad (\text{B.23.a})$$

Par ailleurs

$$\frac{\partial \overline{\mathcal{L}}}{\partial \dot{\mathcal{A}}_i^*} = \varepsilon_0 [\dot{\mathcal{A}}_i + ik_i \mathcal{U}]. \quad (\text{B.23.b})$$

L'équation de Lagrange relative à $\mathcal{A}_i^*$ est donc :

$$\varepsilon_0 [\ddot{\mathcal{A}}_i + ik_i \dot{\mathcal{U}}] = - \varepsilon_0 c^2 [\mathbf{ik} \times (\mathbf{ik} \times \mathcal{A})]_i + j_i \quad (\text{B.24})$$

c'est-à-dire encore, d'après (B.10)

$$\mathbf{ik} \times \mathcal{B} = \frac{1}{c^2} \dot{\mathcal{E}} + \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \mathbf{j}. \quad (\text{B.25})$$

On retrouve ainsi une seconde équation de Maxwell exprimée dans l'espace réciproque (voir l'expression (B.5.d) du chap. I).

En conclusion, l'application du principe de moindre action au lagrangien standard nous a permis, d'une part, de retrouver l'équation de Lorentz d'une particule dans un champ électromagnétique (B.17), d'autre part, le second couple des équations de Maxwell, celui qui relie les champs à leurs sources. (Le premier couple d'équations de Maxwell résulte directement des équations (B.10) reliant les champs $\mathcal{E}$ et $\mathcal{B}$ aux potentiels $\mathcal{A}$ et $\mathcal{U}$).

3. Propriétés générales du lagrangien standard

a) SYMÉTRIES GLOBALES

La forme du lagrangien est invariante dans un certain nombre de transformations géométriques : translation, rotation, symétrie par rapport au système d'axes dans lequel sont repérés les particules et le champ. Le lagrangien est également invariant dans un changement de l'origine des temps. De ces propriétés d'invariance, il est possible de déduire l'expression d'un certain nombre de grandeurs conservatives : l'impulsion, le moment cinétique, l'énergie du système total champ + particules (une telle démarche est présentée dans le complément B_{II} sur la forme que prend le lagrangien standard en jauge de Coulomb).

Le lagrangien standard (B.2) ne se transforme pas simplement dans une transformation de Lorentz. En effet, il est clair que le lagrangien standard ne traite pas les particules de manière relativiste, le lagrangien propre des particules, égal à $\sum_a m_a \dot{\mathbf{r}}_a^2/2$, étant purement galiléen. Nous

allons montrer cependant que le lagrangien (B.2) peut être obtenu, à la limite des faibles vitesses ($v/c \ll 1$), à partir d'un lagrangien relativiste, c'est-à-dire conduisant à une action invariante relativiste.

Notons tout d'abord que la densité de lagrangien du champ électromagnétique est un champ scalaire relativiste : elle s'exprime en effet

en fonction du tenseur champ électromagnétique $F^{\mu\nu}$ (voir chap. I, formule (B.28)) sous la forme suivante :

$$\mathcal{L}_R = - \varepsilon_0 \frac{c^2}{4} \sum_{\mu\nu} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad (\text{B.26})$$

manifestement invariante dans une transformation de Lorentz. La contribution à l'action de la densité de lagrangien du champ libre s'écrit :

$$S_R = \int dt \int d^3r \mathcal{L}_R. \quad (\text{B.27})$$

Or, $\mathcal{L}_R$ d'une part, l'élément de volume $dt d^3r$ d'autre part, sont des invariants relativistes. Il apparaît ainsi clairement que l'action S_R est un invariant relativiste.

Montrons maintenant que le lagrangien d'interaction entre particules et champ contribue également à l'action de manière covariante. Il suffit pour cela de noter que la variation infinitésimale d'action, relative à l'interaction de la particule α avec le champ, apparaît comme le produit scalaire du quadrivecteur dx_α^μ par le quadripotential A_μ

$$dS_I = L_I dt = \sum_\alpha q_\alpha [d\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha, t) - dt U(\mathbf{r}_\alpha, t)] \quad (\text{B.28})$$

$$dS_I = - \sum_{\alpha\mu} q_\alpha dx_\alpha^\mu A_\mu. \quad (\text{B.29})$$

En définitive, il suffirait de transformer le lagrangien propre des particules L_P pour obtenir un lagrangien relativiste. Remplaçons à cette fin L_P par

$$L_P^{\text{rel}} = - \sum_\alpha m_\alpha c^2 \sqrt{1 - \frac{\dot{\mathbf{r}}_\alpha^2}{c^2}}. \quad (\text{B.30})$$

La variation infinitésimale d'action, correspondant à (B.30) s'écrit alors :

$$dS = L_P^{\text{rel}} dt = - \sum_\alpha m_\alpha c^2 \sqrt{1 - \frac{\dot{\mathbf{r}}_\alpha^2}{c^2}} dt = - \sum_\alpha m_\alpha c^2 d\tau_\alpha \quad (\text{B.31})$$

où

$$d\tau_\alpha = dt \sqrt{1 - \frac{\dot{\mathbf{r}}_\alpha^2}{c^2}} \quad (\text{B.32})$$

est le temps propre de la particule α . Comme $d\tau_\alpha$, et par suite dS , sont des invariants relativistes, le lagrangien (B.30) est bien un lagrangien relativiste. Par ailleurs, le développement de (B.30) en puissance de $\dot{\mathbf{r}}_\alpha^2/c^2$ redonne bien, au terme constant $-\sum_\alpha m_\alpha c^2$ près, le lagrangien L_P donné en (B.4. b).

Il apparaît donc possible, en conclusion, d'introduire un lagrangien entièrement relativiste :

$$L = - \sum_{\alpha} m_{\alpha} c^2 \sqrt{1 - \frac{\dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2}{c^2}} + \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3r [\mathbf{E}^2(\mathbf{r}) - c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{r})] + \sum_{\alpha} [q_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}) - q_{\alpha} U(\mathbf{r}_{\alpha})] \quad (\text{B.33})$$

pouvant servir de base à l'électrodynamique classique. Cependant, si l'on poursuivait dans cette voie, des difficultés apparaîtraient au niveau de la quantification de la théorie, par suite notamment de l'impossibilité de construire une théorie quantique relativiste à nombre déterminé de particules.

Remarques

(i) Il s'avère en fait que la démarche correcte, pour construire une théorie à la fois relativiste et quantique, consiste à partir d'une théorie classique où les particules sont décrites, comme le rayonnement, par un champ relativiste (champ de Klein-Gordon, champ de Dirac...), couplé au champ de Maxwell. Lors de la quantification d'une telle théorie, les particules, en nombre indéterminé, apparaissent comme les excitations élémentaires du champ de matière quantique, et interagissent avec les photons qui sont les excitations élémentaires du champ de Maxwell quantique (voir complément A_V).

(ii) Il est possible de justifier l'utilisation du lagrangien standard non relativiste (B.2), et par suite celle de l'hamiltonien en jauge de Coulomb que nous en déduirons plus loin, en partant de l'électrodynamique quantique relativiste et en étudiant la limite de cette théorie à basse énergie. On retrouve, à l'ordre le plus bas en v/c , la dynamique décrite par (B.2). On obtient également les termes d'interaction liés aux spins des particules (voir complément B_V).

b) INVARIANCE DE JAUGE

La théorie de Maxwell-Lorentz de l'électrodynamique est manifestement invariante dans un changement de jauge puisque, seuls, les champs électrique et magnétique apparaissent dans les équations de base. L'invariance de jauge est moins évidente pour la théorie lagrangienne qui utilise les potentiels comme variables pour décrire le champ. Il convient donc d'examiner comment se traduit dans le formalisme lagrangien un changement de jauge.

D'après les formules (A.12) du chapitre I, un changement de jauge est défini par :

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla F(\mathbf{r}, t) \quad (\text{B.34.a})$$

$$U'(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} F(\mathbf{r}, t) \quad (\text{B.34.b})$$

F peut être une fonction explicite de $\mathbf{r}$ et de t mais peut aussi dépendre des variables du champ qui sont, elles-mêmes, fonction de $\mathbf{r}$ et t .

Dans la transformation (B.34), le lagrangien des particules n'est évidemment pas modifié, le lagrangien propre du champ, qui ne dépend en fait que des champs électrique et magnétique, est lui aussi inchangé. Seul est donc transformé le lagrangien d'interaction. Le changement de jauge revient à ajouter à la densité de lagrangien $\mathcal{L}$ du champ donnée par (B.5.a), la quantité $\mathcal{L}_1$:

$$\mathcal{L}_1 = \mathbf{j} \cdot \nabla F + \rho \frac{\partial F}{\partial t} \quad (\text{B.35})$$

que l'on peut encore mettre sous la forme :

$$\mathcal{L}_1 = \nabla(\mathbf{j}F) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho F) - \left(\nabla \cdot \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) F. \quad (\text{B.36})$$

Les deux premiers termes rajoutent à la densité de lagrangien une divergence et une dérivée par rapport au temps. D'après (A.40), ils transforment le lagrangien en un lagrangien équivalent (voir toutefois la remarque ci-après). Quant au dernier terme de (B.36), il est nul d'après l'équation de conservation de la charge. Il apparaît ainsi clairement que la conservation de la charge est une condition nécessaire pour qu'il y ait invariance de jauge.

Remarques

(i) Il n'y a pas totale équivalence entre les changements de lagrangien et les transformations de jauge. Par exemple dans (B.34), F peut dépendre de $\mathbf{A}$, U , $\dot{\mathbf{A}}$, $\dot{U}$, qui sont eux-mêmes fonctions de $\mathbf{r}$ et t . Toutes ces transformations, qui laissent invariants les champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ et les équations de Maxwell, sont bien des transformations de jauge. En revanche, c'est seulement quand F ne dépend pas des vitesses $\dot{\mathbf{A}}$ et $\dot{U}$, qu'elles correspondent également à un changement de lagrangien, car autrement les accélérations $\ddot{\mathbf{A}}$ et $\ddot{U}$ apparaîtraient dans le lagrangien. Réciproquement, les changements de densité de lagrangien définis par (A.40) ne correspondent pas forcément à une transformation de jauge. En comparant (A.40) et (B.36), on voit qu'il faut pour cela qu'il existe une fonction F telle que :

$$\mathbf{f} = \mathbf{j}F \quad (\text{B.37.a})$$

$$f_0 = \rho F. \quad (\text{B.37.b})$$

Or, il n'est pas possible, en général, de satisfaire simultanément ces deux conditions.

(ii) Dans les théories de champs de jauge, l'invariance de jauge joue un rôle beaucoup plus fondamental. Partant des champs représentant les particules matérielles, on impose à la théorie d'être invariante dans un changement *local* de la phase des champs. Pour réaliser cette invariance, il apparaît alors qu'il faut introduire un champ vectoriel (le champ électromagnétique) couplé

au champ de particules d'une façon telle que les changements de phase du champ de matière se traduisent dans le lagrangien par des changements de jauge du champ vectoriel (voir exercice 9). On introduit ainsi un lien fondamental entre changement de phase du champ de matière et changement de jauge du champ électromagnétique.

c) REDONDANCE DES VARIABLES DYNAMIQUES

Dans la description de l'électrodynamique par le lagrangien standard, le champ est décrit, en chaque point $\mathbf{r}$, par les potentiels A et U et les vitesses correspondantes (B.1). En d'autres termes, les variables dynamiques pour le champ sont au nombre de *huit* en tout point de l'espace. Or, l'approche de l'électrodynamique du chapitre I, reposant sur les équations de Maxwell-Lorentz, introduit *six* degrés de liberté pour le champ en chaque point (les trois composantes des champs électrique et magnétique $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r})$). En outre, l'écriture des équations de Maxwell dans l'espace réciproque permet de montrer que les composantes longitudinales $\mathcal{E}_{\parallel}(\mathbf{k})$ et $\mathcal{B}_{\parallel}(\mathbf{k})$ sont fixées par des équations algébriques (équations (B.5.a) et (B.5.b) du chap. I), l'évolution des *quatre* autres variables dynamiques (les champs électrique et magnétique transverses) étant décrite par des équations différentielles du premier ordre en temps (équations (B.49.a) et (B.49.b) du chap. I). Il est donc évident qu'en décrivant le champ électromagnétique par les potentiels $\mathcal{A}$ et $\mathcal{U}$, on introduit des degrés de liberté surabondants. Des relations de contraintes doivent donc exister entre les variables dynamiques du champ.

Examinons maintenant comment apparaissent ces contraintes. L'analyse de la densité de lagrangien $\mathcal{L}$ écrite en (B.11) montre que $\mathcal{U}$ n'apparaît pas dans cette densité de lagrangien. Cela entraîne, d'une part, que le moment conjugué associé à la variable $\mathcal{U}$ est identiquement nul et que, d'autre part, l'équation de Lagrange (B.20) associée à $\mathcal{U}$ relie $\mathcal{U}$ aux autres variables dynamiques par une équation algébrique. Ce type de problème a déjà été envisagé au paragraphe A.1.c. Lorsque la vitesse associée à une coordonnée généralisée n'apparaît pas dans le lagrangien, il est possible d'éliminer cette coordonnée, en l'exprimant en fonction des autres variables dynamiques, et d'obtenir ainsi un lagrangien réduit. Une telle démarche nous permet ici d'éliminer le potentiel scalaire $\mathcal{U}$ et d'obtenir un lagrangien où ne figurent que les trois composantes du potentiel vecteur $\mathcal{A}$ et leurs dérivées temporelles. On peut réduire davantage le nombre de degrés de liberté du champ électromagnétique en faisant un choix de jauge. Il ressort en effet des formules (B.8.a) et (B.26) du chapitre I qu'un choix de jauge revient à déterminer la composante longitudinale du potentiel vecteur, $\mathcal{A}_{\parallel}$, qui peut donc être arbitrairement fixée. On aboutit ainsi à une situation physiquement satisfaisante, où le champ possède en chaque point *quatre* variables dynamiques indépendantes, qui correspondent aux deux composantes transverses orthogo-

nales du potentiel vecteur $\mathcal{A}_e(\mathbf{k})$ et $\mathcal{A}_e(\mathbf{k})$ et à leurs dérivées temporelles $\dot{\mathcal{A}}_e(\mathbf{k})$ et $\dot{\mathcal{A}}_e(\mathbf{k})$.

Remarques

(i) $\mathcal{A}_e(\mathbf{k})$ est considéré dans un demi-espace réciproque et vérifie

$$\mathcal{A}_e(\mathbf{k}) = \varepsilon \cdot \mathcal{A}(\mathbf{k}) \quad (\text{B.38})$$

où ε est l'un des deux vecteurs unitaires (réels) transverses. Dans l'autre demi-espace, nous définissons

$$\mathcal{A}_e(-\mathbf{k}) = \varepsilon \cdot \mathcal{A}(-\mathbf{k}) \quad (\text{B.39})$$

où ε est le même vecteur pour $\mathbf{k}$ et $-\mathbf{k}$.

(ii) Comme les champs dans l'espace réciproque sont complexes, on pourrait croire que la composante $\mathcal{A}_e(\mathbf{k})$, par exemple, correspond à deux degrés de liberté réels (parties réelle et imaginaire). En fait, comme

$$\mathcal{A}_e(-\mathbf{k}) = \varepsilon \cdot \mathcal{A}(-\mathbf{k}) = \varepsilon \cdot \mathcal{A}^*(\mathbf{k}) = \mathcal{A}_e^*(\mathbf{k}) \quad (\text{B.40})$$

il n'y a, pour l'ensemble des points $\mathbf{k}$ et $-\mathbf{k}$, que deux degrés de liberté réels, soit en tout un en chaque point.

La démarche exposée ci-dessus, consistant à aboutir à un lagrangien réduit où le champ n'est plus décrit que par quatre variables dynamiques, détruit la symétrie manifeste présente dans le lagrangien standard entre les quatre composantes du quadripotentiel. On peut donc se demander s'il ne serait pas possible de passer au stade de la quantification avec le lagrangien standard, quitte à introduire ensuite les relations de contrainte entre variables dynamiques. Une telle démarche est en fait impossible parce que le moment conjugué $\pi_{\mathcal{U}}$ associé à $\mathcal{U}$ est identiquement nul d'après (B.19). Il est alors exclu d'imposer aux opérateurs associés à $\mathcal{U}$ et $\pi_{\mathcal{U}}$ la relation de commutation canonique (A.61.b). La conservation de la symétrie entre les quatre composantes du quadripotentiel n'est donc possible que moyennant l'utilisation d'un autre lagrangien (voir chap. V).

La démarche naturelle pour procéder à la quantification à partir du lagrangien standard consiste donc à éliminer $\mathcal{U}$ pour avoir un lagrangien réduit, puis à choisir une jauge en fixant $\mathcal{A}_{||}$. Le choix le plus simple possible est évidemment $\mathcal{A}_{||} = 0$, ce qui correspond à la jauge de Coulomb (voir chap. I, § A.3). Nous sommes donc conduits naturellement à étudier l'électrodynamique en jauge de Coulomb. D'autres choix de jauge, correspondant à d'autres valeurs de $\mathcal{A}_{||}$, peuvent, bien sûr, être considérés (des exemples en sont donnés au chap. IV).

C — ÉLECTRODYNAMIQUE EN JAUGE DE COULOMB

Dans cette dernière partie C, nous montrons comment éliminer les variables dynamiques redondantes du lagrangien standard (§ 1), ce qui nous conduit au lagrangien en jauge de Coulomb dont nous étudions les propriétés (§ 2). Nous procédons ensuite au passage au formalisme hamiltonien (§ 3) et à la quantification canonique de la théorie (§ 4). Nous dégageons enfin les caractéristiques importantes de la théorie ainsi obtenue (§ 5).

1. Elimination des variables dynamiques redondantes du lagrangien standard

a) ELIMINATION DU POTENTIEL SCALAIRE

Suivant la démarche exposée au paragraphe B.3.c, nous utilisons l'équation de Lagrange relative à $\mathcal{U}$ pour exprimer le potentiel scalaire en fonction des autres variables dynamiques du système et obtenir ainsi un lagrangien dépendant d'un nombre plus petit de degrés de liberté.

L'équation de Lagrange (B.20) permet en effet d'écrire :

$$\mathcal{U} = \frac{1}{k^2} \left[ik \dot{\mathcal{A}}_{\parallel} + \frac{\rho}{\varepsilon_0} \right] \quad (\text{C.1})$$

où

$$\dot{\mathcal{A}}_{\parallel} = \mathbf{k} \cdot \dot{\mathcal{A}}. \quad (\text{C.2})$$

En remplaçant $\mathcal{U}$ par l'expression (C.1) dans le lagrangien standard (B.11), nous obtenons un lagrangien dépendant d'un nombre réduit de variables dynamiques (les composantes du potentiel vecteur et les vitesses associées) que nous notons encore L :

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 + \varepsilon_0 \int d^3k \left[\dot{\mathcal{A}}_{\perp}^* \cdot \dot{\mathcal{A}}_{\perp} + \frac{\rho^* \rho}{\varepsilon_0^2 k^2} - c^2 (\mathbf{k} \times \mathcal{A}_{\perp}^*) \cdot (\mathbf{k} \times \mathcal{A}_{\perp}) \right] \\ + \int d^3k \left[\mathbf{j}^* \cdot \mathcal{A} + \mathbf{j} \cdot \mathcal{A}^* - 2 \frac{\rho^* \rho}{\varepsilon_0 k^2} - \frac{i}{k} (\rho^* \dot{\mathcal{A}}_{\parallel} - \rho \dot{\mathcal{A}}_{\parallel}^*) \right]. \quad (\text{C.3})$$

De la même façon, on élimine $\mathcal{U}$ des expressions de toutes les grandeurs physiques qui en dépendaient. Ainsi, le champ électrique dans l'espace réciproque (B.10.a) s'exprime maintenant comme :

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = -\dot{\mathcal{A}}_{\perp}(\mathbf{k}) - \frac{i}{\varepsilon_0} \rho \frac{\mathbf{k}}{k^2}. \quad (\text{C.4})$$

Il dépend à la fois des variables du champ ($\dot{\mathcal{A}}_{\perp}$) et des positions des particules (qui figurent dans ρ).

En revenant au lagrangien (C.3) et en groupant les termes, nous obtenons :

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - \int d^3k \frac{\rho^* \rho}{\varepsilon_0 k^2} + \varepsilon_0 \int d^3k [\dot{\mathcal{A}}_{\perp}^* \cdot \dot{\mathcal{A}}_{\perp} - c^2 k^2 \mathcal{A}_{\perp}^* \cdot \mathcal{A}_{\perp}] + \\ + \int d^3k [j^* \cdot \mathcal{A}_{\perp} + j \cdot \mathcal{A}_{\perp}^*] + \int d^3k \left[j_{\parallel}^* \mathcal{A}_{\parallel} + j_{\parallel} \mathcal{A}_{\parallel}^* - \right. \\ \left. - \frac{i}{k} (\rho^* \dot{\mathcal{A}}_{\parallel} - \rho \dot{\mathcal{A}}_{\parallel}^*) \right]. \quad (\text{C.5})$$

b) CHOIX DE LA COMPOSANTE LONGITUDINALE DU POTENTIEL VECTEUR

La composante longitudinale $\mathcal{A}_{\parallel}$ de $\mathcal{A}$ n'apparaît que dans la densité $\overline{\mathcal{L}}_{\parallel}$ figurant dans le dernier terme de (C.5)

$$\overline{\mathcal{L}}_{\parallel} = j_{\parallel}^* \mathcal{A}_{\parallel} + j_{\parallel} \mathcal{A}_{\parallel}^* - \frac{i}{k} (\rho^* \dot{\mathcal{A}}_{\parallel} - \rho \dot{\mathcal{A}}_{\parallel}^*). \quad (\text{C.6})$$

L'équation de Lagrange pour $\mathcal{A}_{\parallel}$, déduite de (C.6), s'écrit

$$\dot{\rho} = -ikj_{\parallel} \quad (\text{C.7})$$

et n'est autre que l'équation bien connue de conservation de la charge (dans l'espace réciproque). Nous constatons ainsi qu'il n'y a pas d'équation du mouvement pour $\mathcal{A}_{\parallel}$, ce qui entraîne que $\mathcal{A}_{\parallel}$ peut prendre n'importe quelle valeur.

Ce dernier point apparaît encore plus clairement si l'équation de conservation de la charge (C.7) est utilisée pour exprimer $j_{\parallel}$ en fonction de $\dot{\rho}$. On trouve alors que (C.6) s'écrit :

$$\overline{\mathcal{L}}_{\parallel} = \frac{i}{k} [\dot{\rho} \mathcal{A}_{\parallel}^* + \rho \dot{\mathcal{A}}_{\parallel}^* - \rho^* \dot{\mathcal{A}}_{\parallel} - \dot{\rho}^* \mathcal{A}_{\parallel}] \\ = \frac{i}{k} \frac{d}{dt} [\rho \mathcal{A}_{\parallel}^* - \rho^* \mathcal{A}_{\parallel}] \quad (\text{C.8})$$

ce qui donne pour le lagrangien (C.5)

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - \int d^3k \frac{\rho^* \rho}{\varepsilon_0 k^2} + \varepsilon_0 \int d^3k [\dot{\mathcal{A}}_{\perp}^* \cdot \dot{\mathcal{A}}_{\perp} - c^2 k^2 \mathcal{A}_{\perp}^* \cdot \mathcal{A}_{\perp}] + \\ + \int d^3k [j^* \cdot \mathcal{A}_{\perp} + j \cdot \mathcal{A}_{\perp}^*] + \frac{d}{dt} \int d^3k \frac{i}{k} [\rho \mathcal{A}_{\parallel}^* - \rho^* \mathcal{A}_{\parallel}]. \quad (\text{C.9})$$

Comme deux lagrangiens qui ne diffèrent que d'une dérivée totale par rapport au temps d'une fonction des coordonnées sont équivalents, il

apparaît que l'évolution du système ne dépend pas de la valeur de $\mathcal{A}_{\parallel}$ qui intervient exclusivement dans une telle dérivée totale. $\mathcal{A}_{\parallel}$ n'est donc pas une *vraie variable dynamique* puisque sa valeur peut être arbitrairement choisie sans que la dynamique du système ne soit changée.

Remarque

La possibilité de choisir arbitrairement $\mathcal{A}_{\parallel}$ est évidemment reliée à l'invariance de jauge. En effet, dans un changement de jauge, $\mathcal{A}_{\perp}$ ne change pas et $\mathcal{A}_{\parallel}$ devient (voir (B.8), chap. I) :

$$\mathcal{A}'_{\parallel} = \mathcal{A}_{\parallel} + ik \mathcal{F}. \quad (\text{C.10})$$

Dans un changement de jauge, seul est donc modifié le dernier terme du lagrangien (C.9) qui est une dérivée totale par rapport au temps.

On peut imaginer divers choix possibles pour la composante longitudinale du potentiel vecteur. Le choix le plus simple est évidemment :

$$\mathcal{A}_{\parallel} = 0 \quad (\text{C.11})$$

ce qui revient à imposer à $\nabla \cdot \mathbf{A}$ d'être nul dans tout l'espace réel et donc à choisir la jauge de Coulomb.

A partir de maintenant, et sauf mention contraire, nous travaillons en jauge de Coulomb où le potentiel vecteur est purement transverse :

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_{\perp}. \quad (\text{C.12})$$

Pour simplifier les notations, nous omettrons désormais l'indice $\perp$.

2. Le lagrangien en jauge de Coulomb

Le lagrangien, dans l'espace réciproque, en jauge de Coulomb se déduit de (C.9) :

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - \int d^3k \frac{|\rho|^2}{\epsilon_0 k^2} + \int d^3k \overline{\mathcal{L}}_C \quad (\text{C.13.a})$$

$$\overline{\mathcal{L}}_C = \epsilon_0 [\dot{\mathcal{A}}^* \cdot \dot{\mathcal{A}} - c^2 k^2 \mathcal{A}^* \cdot \mathcal{A}] + j^* \cdot \mathcal{A} + j \cdot \mathcal{A}^*. \quad (\text{C.13.b})$$

Les variables dynamiques des particules, $\mathbf{r}_{\alpha}$ et $\dot{\mathbf{r}}_{\alpha}$, apparaissent, non seulement dans le terme $\sum_{\alpha} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2/2$, mais aussi dans la densité de charge ρ et le courant j . Le second terme de (C.13.a) peut être transformé en une intégrale sur tout l'espace grâce à la condition de réalité $\rho(\mathbf{k}) = \rho^*(-\mathbf{k})$.

On retrouve alors exactement l'intégrale (B.32) du chapitre I, qui n'est autre que l'énergie de Coulomb du système de charges :

$$\int d^3k \frac{|\rho|^2}{\epsilon_0 k^2} = V_{\text{Coul}} = \sum_{\alpha} e_{\text{Coul}}^{\alpha} + \sum_{\alpha > \beta} \frac{q_{\alpha} q_{\beta}}{4 \pi \epsilon_0 |\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}|} \quad (\text{C.14})$$

e_{Coul}^{α} étant l'énergie du champ de Coulomb de la particule α définie par l'expression (B.36) du chapitre I.

Le lagrangien propre du champ et le lagrangien d'interaction peuvent être également écrits en fonction des champs dans l'espace réel. Après transformation des intégrales sur un demi-espace réciproque en intégrale sur un espace entier et application de l'égalité de Parseval-Plancherel, nous obtenons :

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - V_{\text{Coul}} + \int d^3r \mathcal{L}_c \quad (\text{C.15.a})$$

$$\mathcal{L}_c = \frac{\epsilon_0}{2} [\dot{\mathbf{A}}^2 - c^2 (\nabla \times \mathbf{A})^2] + \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}. \quad (\text{C.15.b})$$

Il faut bien prendre garde cependant au fait qu'en chaque point $\mathbf{r}$ de l'espace, le potentiel vecteur $\mathbf{A}$ n'a que deux degrés de liberté. La relation de contrainte qui était d'un maniement simple dans l'espace réciproque (voir (C.11)), devient d'un emploi plus délicat dans l'espace réel puisqu'il faut imposer :

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (\text{C.16})$$

En conséquence, nous utiliserons le plus souvent la densité de lagrangien dans l'espace réciproque. Ainsi, dans l'exercice 4, les équations de Lagrange sont dérivées directement du lagrangien (C.13).

Remarque

Toutes les transformations qui ont permis de passer du lagrangien standard (B.2) aux lagrangiens (C.13) ou (C.15) en jauge de Coulomb n'ont jamais concerné le lagrangien des particules $\sum_{\alpha} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2/2$. La même démarche aurait donc pu être menée avec le lagrangien relativiste (B.33). Il s'ensuit que le lagrangien suivant :

$$L = - \sum_{\alpha} m_{\alpha} c^2 \sqrt{1 - \frac{\dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2}{c^2}} - V_{\text{Coul}} + \int d^3k \overline{\mathcal{L}}_c \quad (\text{C.17})$$

où $\overline{\mathcal{L}}_c$ a la même expression qu'en (C.13.b), est relativiste aussi bien pour les particules que pour le champ. En revanche, un tel lagrangien n'est pas manifestement covariant ; cela est lié au choix de jauge (C.16) qui n'est pas invariant par transformation de Lorentz.

3. Formalisme hamiltonien

a) MOMENTS CONJUGUÉS ASSOCIÉS AUX PARTICULES

Pour trouver le moment conjugué associé à la variable $\mathbf{r}_\alpha$, nous utilisons l'expression (C.15) du lagrangien où le courant $\mathbf{j}$ est remplacé par son expression en fonction de $\mathbf{r}_\alpha$ et $\dot{\mathbf{r}}_\alpha$

$$\mathbf{j} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}(t)). \quad (\text{C.18})$$

Les seuls termes dépendant de la vitesse des particules dans le lagrangien sont :

$$\sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 + \sum_{\alpha} q_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}).$$

Il s'ensuit que le moment conjugué associé à la variable discrète $(\mathbf{r}_{\alpha})_i$ est égal à :

$$(\mathbf{p}_{\alpha})_i = \frac{\partial L}{\partial (\dot{\mathbf{r}}_{\alpha})_i} = m_{\alpha} (\dot{\mathbf{r}}_{\alpha})_i + q_{\alpha} A_i(\mathbf{r}_{\alpha}). \quad (\text{C.19})$$

Le moment conjugué associé à $\mathbf{r}_{\alpha}$ est différent de la quantité de mouvement $m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}$. Nous aurons l'occasion de revenir sur ce point.

Remarque

Nous pouvons également calculer le moment conjugué à partir du lagrangien relativiste (C.17). Nous obtenons ainsi

$$\mathbf{p}_{\alpha} = \frac{m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}}{\sqrt{1 - \frac{\dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2}{c^2}}} + q_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}) \quad (\text{C.20})$$

qui correspond bien à (C.19) à la limite $v/c \ll 1$.

b) MOMENTS CONJUGUÉS ASSOCIÉS AUX VARIABLES DU CHAMP

Pour calculer les moments conjugués associés aux variables du champ, nous utilisons le lagrangien (C.13). En chaque point $\mathbf{k}$, le champ a deux coordonnées généralisées indépendantes $\mathcal{A}_{\mathbf{k}}$ et $\mathcal{A}_{\mathbf{k}'}$. La définition (A.53) du moment conjugué dans l'espace réciproque, conduit à :

$$\pi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 \dot{\mathcal{A}}_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}). \quad (\text{C.21})$$

Le vecteur complexe $\boldsymbol{\pi}$ dont les deux composantes sont $\pi_{\mathbf{k}}$ et $\pi_{\mathbf{k}'}$:

$$\boldsymbol{\pi} = \pi_{\mathbf{k}} \boldsymbol{\varepsilon} + \pi_{\mathbf{k}'} \boldsymbol{\varepsilon}' \quad (\text{C.22})$$

est le moment conjugué associé à $\mathcal{A}$ et peut donc être écrit d'après (C.21) :

$$\pi(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 \dot{\mathcal{A}}(\mathbf{k}). \quad (\text{C.23})$$

Remarques

(i) En toute rigueur, nous n'avons calculé $\pi(\mathbf{k})$ que dans un demi-espace, celui sur lequel portent les intégrales sur $\mathbf{k}$ de (C.13.a). On peut définir $\pi(\mathbf{k})$ pour tout $\mathbf{k}$ en étendant l'égalité (C.23) dans tout l'espace. La réalité de $\mathbf{A}$ entraîne alors que

$$\pi(-\mathbf{k}) = \pi^*(\mathbf{k}) \quad (\text{C.24})$$

soit encore, en dérivant (B.40) par rapport au temps et en utilisant (C.23)

$$\pi_\varepsilon(-\mathbf{k}) = \pi_\varepsilon^*(\mathbf{k}). \quad (\text{C.25})$$

(ii) Le moment conjugué dans l'espace réel s'obtient par transformation de Fourier de (C.23) défini dans tout l'espace (voir (A.58)). On obtient ainsi :

$$\Pi(\mathbf{r}) = \varepsilon_0 \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}). \quad (\text{C.26})$$

Notons qu'un tel résultat aurait pu être obtenu directement en dérivant la densité de lagrangien (C.15.b) par rapport à $\dot{\mathbf{A}}$. Une telle démarche n'est cependant pas correcte en toute rigueur puisque les trois composantes de $\mathbf{A}$ sont liées par la relation de contrainte (C.16) et ne peuvent donc être variées indépendamment.

c) HAMILTONIEN EN JAUGE DE COULOMB

La démarche des paragraphes A.2.d et A.2.g appliquée au lagrangien (C.13) conduit à l'hamiltonien suivant :

$$H = \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha} \cdot \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} + \int d^3k [\pi \cdot \dot{\mathcal{A}}^* + \pi^* \cdot \dot{\mathcal{A}}] - L. \quad (\text{C.27})$$

Utilisant les relations (C.19) et (C.23) pour éliminer les vitesses au profit des impulsions, nous trouvons alors :

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha})]^2 + V_{\text{Coul}} + \varepsilon_0 \int d^3k \left[\frac{\pi^* \cdot \pi}{\varepsilon_0^2} + c^2 k^2 \dot{\mathcal{A}}^* \cdot \dot{\mathcal{A}} \right]. \quad (\text{C.28})$$

Il est également possible d'exprimer l'hamiltonien en fonction des champs dans l'espace réel :

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha})]^2 + V_{\text{Coul}} + \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3r \left[\left(\frac{\Pi}{\varepsilon_0} \right)^2 + c^2 (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right]. \quad (\text{C.29})$$

Compte tenu de (C.19) et (C.26), l'hamiltonien en jauge de Coulomb apparaît bien comme la somme de l'énergie cinétique des particules, de leur énergie de Coulomb et de l'énergie des champs transverses.

Remarque

En utilisant (C.27) et l'expression relativiste (C.20) du moment conjugué $\mathbf{p}_\alpha$, nous trouvons l'hamiltonien :

$$H = \sum_{\alpha} m_{\alpha} c^2 \left[1 + \frac{[\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha})]^2}{m_{\alpha}^2 c^2} \right]^{1/2} + V_{\text{Coul}} + \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3 r \left[\left(\frac{\boldsymbol{\Pi}}{\epsilon_0} \right)^2 + c^2 (\mathbf{V} \times \mathbf{A})^2 \right] \quad (\text{C.30})$$

dont la limite non relativiste est (C.29).

d) LES GRANDEURS PHYSIQUES

Dans ce paragraphe, diverses grandeurs physiques relatives aux particules et au champ sont exprimées en fonction des variables et de leurs moments conjugués.

La vitesse des particules se déduit d'abord facilement de (C.19) :

$$\dot{\mathbf{r}}_{\alpha} = \frac{1}{m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha})]. \quad (\text{C.31})$$

En exprimant $\dot{\mathcal{A}}$ en fonction du moment conjugué $\boldsymbol{\pi}$ dans la formule (C.4), nous trouvons :

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_{\parallel}(\mathbf{k}) + \mathcal{E}_{\perp}(\mathbf{k}) \quad (\text{C.32.a})$$

$$\mathcal{E}_{\parallel}(\mathbf{k}) = -\frac{i}{\epsilon_0} \rho \frac{\mathbf{k}}{k^2} \quad (\text{C.32.b})$$

$$\mathcal{E}_{\perp}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\epsilon_0} \boldsymbol{\pi}(\mathbf{k}). \quad (\text{C.32.c})$$

Cette même expression devient, par transformation de Fourier, dans l'espace réel :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{\parallel}(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) \quad (\text{C.33.a})$$

$$\mathbf{E}_{\parallel}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\alpha} q_{\alpha} \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}|^3} \quad (\text{C.33.b})$$

$$\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\epsilon_0} \boldsymbol{\Pi}(\mathbf{r}). \quad (\text{C.33.c})$$

Pour le champ magnétique, les formules ne dépendent pas du moment conjugué et il suffit de reproduire (B.10.b) et (B.3.b)

$$\mathcal{B} = ik \times \mathcal{A} \quad (\text{C.34.a})$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (\text{C.34.b})$$

On peut enfin exprimer la quantité de mouvement $\mathbf{P}$ et le moment cinétique $\mathbf{J}$ du système global particules + rayonnement (qui sont définis au chap. I par les formules (A.8) et (A.9)) en fonction des variables et de leurs moments conjugués. On trouve

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha} - i \int d^3k [\boldsymbol{\pi}^* \times (\mathbf{k} \times \mathcal{A}) - \boldsymbol{\pi} \times (\mathbf{k} \times \mathcal{A}^*)] \quad (\text{C.35.a})$$

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha} - \int d^3r [\boldsymbol{\Pi} \times (\nabla \times \mathbf{A})] \quad (\text{C.35.b})$$

$$\mathbf{J} = \sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{p}_{\alpha} - \int d^3r \mathbf{r} \times [\boldsymbol{\Pi} \times (\nabla \times \mathbf{A})]. \quad (\text{C.36})$$

Notons d'ailleurs que les expressions (C.28), (C.29), (C.35) et (C.36) obtenues plus haut pour $\mathbf{H}$, $\mathbf{P}$, $\mathbf{J}$ peuvent être déduites directement des propriétés de symétrie du lagrangien en jauge de Coulomb (voir complément B_{II}).

4. Quantification canonique en jauge de Coulomb

a) RELATIONS DE COMMUTATION FONDAMENTALES

Les principes généraux de la quantification canonique ont été rappelés respectivement dans les paragraphes A.1.g et A.2.g pour les cas d'un nombre discret et continu de degrés de liberté. Il suffit donc d'appliquer ces résultats au cas particulier des variables et moments conjugués introduits au paragraphe précédent.

Dans le cas des particules, la relation de quantification fondamentale fait intervenir les opérateurs associés à $(\mathbf{r}_{\alpha})_i$ et $(\mathbf{p}_{\beta})_j$:

$$[(\mathbf{r}_{\alpha})_i, (\mathbf{p}_{\beta})_j] = i\hbar \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}. \quad (\text{C.37})$$

En ce qui concerne le champ électromagnétique, nous avons montré qu'en tout point $\mathbf{k}$ d'un demi-espace réciproque, il y a deux variables dynamiques complexes indépendantes, $\mathcal{A}_e(\mathbf{k})$ et $\mathcal{A}_c(\mathbf{k})$, auxquelles sont associés deux moments conjugués $\pi_e(\mathbf{k})$ et $\pi_c(\mathbf{k})$. Les relations de commutation entre les opérateurs associés à ces variables se déduisent

de (A.61) et s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{l} [\mathcal{A}_e(\mathbf{k}), \pi_e(\mathbf{k}')] = 0 \\ [\mathcal{A}_e(\mathbf{k}), \pi_e^+(\mathbf{k}')] = i\hbar \delta_{ee'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(C.38.a)} \\ \text{(C.38.b)} \end{array}$$

les autres commutateurs étant nuls.

Remarque

Dans les expressions (C.38), $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$ appartiennent à un même demi-espace. Il est possible de généraliser (C.38) dans tout l'espace réciproque, en utilisant les relations entre opérateurs

$$\mathcal{A}_e(-\mathbf{k}) = \mathcal{A}_e^+(\mathbf{k}) \quad \text{(C.39.a)}$$

$$\pi_e(-\mathbf{k}) = \pi_e^+(\mathbf{k}) \quad \text{(C.39.b)}$$

qui découlent des relations (B.40) et (C.25) entre grandeurs classiques. Les relations (C.38) deviennent alors

$$[\mathcal{A}_e(\mathbf{k}), \pi_e(\mathbf{k}')] = i\hbar \delta_{ee'} \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \quad \text{(C.40.a)}$$

$$[\mathcal{A}_e(\mathbf{k}), \pi_e^+(\mathbf{k}')] = i\hbar \delta_{ee'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad \text{(C.40.b)}$$

les autres commutateurs restant toujours nuls.

Pour démontrer (C.40.a), il suffit de noter que si $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$ sont dans un même demi-espace réciproque, $\mathbf{k} + \mathbf{k}'$ ne peut jamais être nul, de sorte que (C.40.a) se réduit à (C.38.a). Par contre, si $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$ ne sont pas dans le même demi-espace, il suffit, compte tenu de (C.39.b), de remplacer $\pi_e(\mathbf{k}')$ par $\pi_e^+(-\mathbf{k}')$ et d'utiliser (C.38.b) (ce qui est possible puisque $\mathbf{k}$ et $-\mathbf{k}'$ sont alors dans le même demi-espace) pour démontrer (C.40.a). Une même démarche peut être suivie pour démontrer (C.40.b).

b) IMPORTANCE DE LA TRANSVERSALITÉ DANS LE CAS DU CHAMP ÉLECTRO-MAGNÉTIQUE

Les relations de commutation (C.38) et (C.40) apparaissent comme la conséquence naturelle de la démarche poursuivie pour aboutir à la quantification. Il faut insister sur le fait qu'une des étapes les plus importantes dans cette démarche a été de dégager les variables dynamiques du champ réellement indépendantes. En particulier, le fait que le potentiel vecteur soit transverse (de divergence nulle dans l'espace réel) entraîne que les trois composantes $A_i(\mathbf{r})$ ($i = x, y, z$) ne sont pas indépendantes. Cette contrainte se manifeste au niveau de la relation de commutation entre $A_i(\mathbf{r})$ et $\Pi_j(\mathbf{r}')$. Nous allons voir, en effet, que :

$$[A_i(\mathbf{r}), \Pi_j(\mathbf{r}')] \neq i\hbar \delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad \text{(C.41)}$$

On ne peut pas appliquer brutalement les relations de commutation (A.47) tant que les variables dynamiques du champ indépendantes n'ont pas été clairement cernées.

Pour trouver quel est le commutateur entre $A_i(\mathbf{r})$ et $\Pi_j(\mathbf{r})$, nous partons du commutateur entre quantités correspondantes dans l'espace réciproque. La composante cartésienne $\mathcal{A}_i(\mathbf{k})$, en fonction des composantes transverses, est égale à :

$$\mathcal{A}_i(\mathbf{k}) = \varepsilon_i \mathcal{A}_e(\mathbf{k}) + \varepsilon'_i \mathcal{A}_{e'}(\mathbf{k}) \quad (\text{C.42. a})$$

avec

$$\varepsilon_i = \mathbf{e}_i \cdot \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (\text{C.42. b})$$

La composante cartésienne $\pi_j(\mathbf{k}')$ est définie par des relations analogues à (C.42). En utilisant le commutateur (C.40. b), on trouve :

$$[\mathcal{A}_i(\mathbf{k}), \pi_j^+(\mathbf{k}')] = i\hbar(\varepsilon_i \varepsilon_j + \varepsilon'_i \varepsilon'_j) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (\text{C.43})$$

Puisque $\{\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}', \boldsymbol{\kappa}\}$ forment une base de l'espace, l'expression (C.43) peut être remplacée par :

$$[\mathcal{A}_i(\mathbf{k}), \pi_j^+(\mathbf{k}')] = i\hbar \left[\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right] \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (\text{C.44})$$

Nous avons vu plus haut que la relation (C.40. b) est vraie pour toute valeur de $\mathbf{k}$ et de $\mathbf{k}'$. Il en est donc de même pour (C.44). En multipliant les deux membres de (C.44) par $e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} / (2\pi)^3$, et en intégrant deux fois sur tout l'espace réciproque, on obtient, par transformation de Fourier, dans le membre de gauche $[A_i(\mathbf{r}), \Pi_j^+(\mathbf{r}')] et dans le membre de droite la fonction $\delta_{ij}^\perp(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ introduite au chapitre I (voir formules (B.17) du chap. I et le complément A₁). En utilisant finalement le fait que $\Pi_j(\mathbf{r})$ est hermitique, nous trouvons :$

$$[A_i(\mathbf{r}), \Pi_j(\mathbf{r}')] = i\hbar \delta_{ij}^\perp(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (\text{C.45})$$

c) OPÉRATEURS DE CRÉATION ET D'ANNIHILATION

Nous avons introduit au chapitre I des variables normales classiques $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ qui sont des combinaisons linéaires de $\mathcal{A}(\mathbf{k})$ et de $\mathcal{E}_\perp(\mathbf{k})$ (voir équation (C.30) du chap. I). En utilisant la relation (C.32. c), nous pouvons exprimer $\mathcal{E}_\perp(\mathbf{k})$ en fonction du moment conjugué $\pi(\mathbf{k})$ et aboutir ainsi à l'expression suivante de $\alpha_e(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$

$$\alpha_e(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2\hbar\omega}} \left[\omega \mathcal{A}_e(\mathbf{k}) + \frac{i}{\varepsilon_0} \pi_e(\mathbf{k}) \right]. \quad (\text{C.46})$$

Comme nous l'avons déjà indiqué dans le chapitre I, l'intérêt des variables normales est qu'elles évoluent indépendamment les unes des autres en l'absence de sources. De plus, il n'y a pas de relations entre $\boldsymbol{\alpha}(-\mathbf{k})$ et $\boldsymbol{\alpha}^*(\mathbf{k})$, analogues aux relations de contrainte (B.7. a) et (C.24) liées à la

réalité de $\mathbf{A}$ et Π , de sorte que les variables normales α et α^* en chaque point $\mathbf{k}$ sont indépendantes des variables normales au point $-\mathbf{k}$.

Après quantification, $\mathcal{A}_\varepsilon(\mathbf{k})$ et $\pi_\varepsilon(\mathbf{k})$ deviennent des opérateurs. La même combinaison linéaire de ces opérateurs (celle écrite en (C.46)) permet de définir des opérateurs $a_\varepsilon(\mathbf{k})$ qui sont les correspondants quantiques des variables normales $\alpha_\varepsilon(\mathbf{k})$ (les opérateurs a_ε^+ étant associés à α_ε^*)

$$a_\varepsilon(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2\hbar\omega}} \left[\omega \mathcal{A}_\varepsilon(\mathbf{k}) + \frac{i}{\varepsilon_0} \pi_\varepsilon(\mathbf{k}) \right] \quad (\text{C.47.a})$$

$$a_\varepsilon^+(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2\hbar\omega}} \left[\omega \mathcal{A}_\varepsilon^+(\mathbf{k}) - \frac{i}{\varepsilon_0} \pi_\varepsilon^+(\mathbf{k}) \right]. \quad (\text{C.47.b})$$

Pour trouver les relations de commutation des opérateurs $a_\varepsilon(\mathbf{k})$ et $a_\varepsilon^+(\mathbf{k})$, il suffit d'utiliser leur définition (C.47) et les relations de commutation (C.40) (qui sont valables quels que soient $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$). Un tel calcul donne

$$[a_\varepsilon(\mathbf{k}), a_\varepsilon(\mathbf{k}')] = 0 \quad (\text{C.48.a})$$

$$[a_\varepsilon^+(\mathbf{k}), a_\varepsilon^+(\mathbf{k}')] = 0 \quad (\text{C.48.b})$$

$$[a_\varepsilon(\mathbf{k}), a_\varepsilon^+(\mathbf{k}')] = \delta_{\varepsilon\varepsilon'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (\text{C.48.c})$$

Ces relations sont identiques aux relations (D.4) postulées au chapitre I (au remplacement près des indices discrets par des indices continus). Elles montrent que les opérateurs $a_\varepsilon(\mathbf{k})$ et $a_\varepsilon^+(\mathbf{k})$ sont des opérateurs d'annihilation et de création de l'oscillateur harmonique associé au mode $\mathbf{k}\varepsilon$. Nous verrons dans le chapitre III que $a_\varepsilon(\mathbf{k})$ ou $a_\varepsilon^+(\mathbf{k})$ détruisent ou créent un photon $\mathbf{k}\varepsilon$.

Finalement, il est possible de réexprimer toutes les observables du système en fonction des opérateurs a et a^+ et de vérifier que l'on obtient ainsi les mêmes expressions que celles données dans le chapitre I (§ C.4).

5. Conclusion : quelques caractéristiques importantes de l'électrodynamique en jauge de Coulomb

Pour conclure ce paragraphe C consacré à l'électrodynamique en jauge de Coulomb, nous dégagons maintenant quelques caractéristiques importantes de la théorie qui vient d'être élaborée.

a) LES VARIABLES DYNAMIQUES SONT INDÉPENDANTES

Un des grands avantages de la théorie développée précédemment est que l'on a éliminé les variables redondantes du champ pour arriver, sans difficulté, à une situation où le nombre de variables dynamiques du champ est égal au nombre minimum nécessaire pour décrire la dynamique du champ. Il en est résulté la possibilité de quantifier le champ avec une grande économie de formalisme.

b) LE CHAMP ÉLECTRIQUE EST SÉPARÉ EN CHAMP DE COULOMB ET CHAMP TRANSVERSE

Les formules (C.4) et (C.33) montrent clairement que le champ électrique apparaît comme la somme de deux termes : l'un, dépendant des coordonnées des particules, est le champ de Coulomb, l'autre est le champ transverse. De façon identique, dans les autres grandeurs physiques, l'hamiltonien en particulier, les termes d'origine coulombienne sont séparés des termes liés au champ transverse. Cette séparation semble poser, au premier abord, un problème. En effet, l'interaction coulombienne est instantanée puisqu'elle dépend de la position des particules α et β à l'instant t . Il est clair cependant que l'interaction réelle entre les particules α et β s'effectue avec un retard lié à la propagation du champ à la vitesse c . En fait, le caractère retardé des interactions électromagnétiques résulte d'une *compensation exacte* entre les deux parties instantanées venant du champ coulombien et du champ transverse. Nous avons déjà discuté ce point au chapitre I (voir § B.6, et exercice 3). Globalement, le caractère retardé des interactions est conservé, mais il n'est pas manifeste.

En revanche, cette séparation a l'immense avantage pour la physique atomique et moléculaire de dégager d'emblée l'interaction coulombienne. Pour des particules animées de faibles vitesses ($v/c \ll 1$), ce terme est une excellente approximation de l'interaction entre particules et permet, en particulier, d'aborder simplement l'étude des états liés. Les termes correspondant au champ transverse apparaissent alors comme des corrections (en général d'ordre v^2/c^2 par rapport à l'interaction coulombienne), et décrivant des effets de retard ou magnétiques. Cette séparation est donc un avantage décisif pour la physique des basses énergies.

c) LE FORMALISME N'EST PAS MANIFESTEMENT COVARIANT

Dans un formalisme manifestement covariant, les trois composantes du potentiel vecteur et le potentiel scalaire forment un quadrivercteur. En éliminant U du lagrangien et en choisissant $\mathbf{A}_{||} = \mathbf{0}$, nous avons délibérément abandonné un tel point de vue. Néanmoins, il faut bien garder à l'esprit que perdre la covariance manifeste, n'est pas perdre l'invariance relativiste. Les prédictions sur le champ électromagnétique sont en accord avec la théorie de la relativité même dans le cadre de la jauge de Coulomb.

Il y a cependant des situations où il est nécessaire de ne manier que des expressions manifestement covariantes (par exemple pour éliminer sans ambiguïté des expressions infinies dans les problèmes de renormalisation). Dans ces conditions, U doit être conservé. Cependant, comme le moment conjugué de U est nul dans le lagrangien standard, il faut pour conserver la symétrie entre U et $\mathbf{A}$ modifier le lagrangien standard (voir chap. V). La quantification du rayonnement est alors effectuée dans un espace où le champ a plus de degrés de liberté qu'il n'en faut

physiquement. Ceci conduit à imposer des relations de contrainte sur les états possibles du champ dans cet espace trop grand. En outre, si l'on veut traiter correctement les particules, il faut les considérer comme des excitations d'un champ de matière relativiste (champ de Dirac, champ de Klein-Gordon...).

En définitive, pour les problèmes de la physique des basses énergies que nous traitons dans cet ouvrage, une telle approche entraînerait beaucoup de complications formelles sans aider réellement à la compréhension des processus physiques.

d) L'INTERACTION DES PARTICULES AVEC LES MODES RELATIVISTES N'EST PAS CORRECTEMENT DÉCRITE

Dans le lagrangien en jauge de Coulomb (C. 13), les particules peuvent interagir avec des modes de fréquence arbitrairement élevée. De façon analogue, l'interaction coulombienne (C. 14) est supposée exacte à des distances arbitrairement petites. Or, il est bien connu que dans une théorie quantique relativiste, l'interaction avec les modes de fréquence ν telle que $h\nu \gtrsim mc^2$ entraîne un certain nombre d'effets (création de paires électron-positron, polarisation du vide, recul relativiste) qui ne sont absolument pas inclus dans la théorie développée dans ce chapitre. Ces mêmes effets (polarisation du vide) font que l'interaction coulombienne est modifiée pour des distances petites devant $\hbar/mc$.

Pour résumer la situation, l'interaction résonnante avec des modes du champ de fréquence optique ou hertzienne ($h\nu \ll mc^2$) est correctement décrite dans le formalisme de ce chapitre. En ce qui concerne les processus d'émission et d'absorption virtuelles de photons par un atome isolé, seule est correctement évaluée la contribution des modes de basse fréquence. Par contre, le lagrangien (C. 13) ne peut rendre compte de manière satisfaisante des effets liés aux interactions avec les modes de fréquence élevée.

Remarque

Plutôt que de conserver dans (C. 13) les termes d'interaction avec les modes haute fréquence, qui conduiraient à des résultats erronés, il est possible de les découpler des particules en faisant une « coupure » qui annule ces termes d'interaction. Nous renonçons ainsi à inclure dans la théorie tout couplage avec ces modes de fréquence élevée. Pour effectuer la coupure de l'interaction avec les modes de fréquence élevée, nous multiplions le courant j et la densité de charge ρ du lagrangien standard (B. 11) par une fonction $g(k)$ dont l'allure est donnée sur la figure 2.

Par suite de l'introduction de la fonction $g(k)$, les intégrales du lagrangien d'interaction sont limitées à des valeurs de k inférieures à k_c où k_c est de l'ordre de $mc/\hbar$. Les particules ne peuvent donc plus interagir avec les modes relativistes. Il est également possible de visualiser l'effet de cette coupure dans l'espace réel : la transformée de Fourier de $\rho(k) g(k)$, par exemple, apparaît comme une fonction dont les contours sont dilués sur une distance

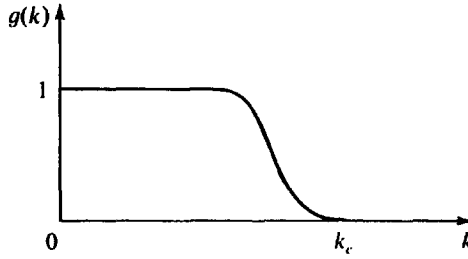


Figure 2. Fonction de coupure $g(k)$ introduite dans le lagrangien standard pour éliminer l'interaction avec les modes de haute fréquence.

de l'ordre de $1/k_c$. Une particule ponctuelle apparaît ainsi, après cette coupure, avec une charge répartie sur des dimensions de l'ordre de $1/k_c$. Cela ne correspond pas à la réalité physique, mais est seulement un moyen pour ne pas envisager de façon inexacte les effets se produisant à des distances petites devant $1/k_c$.

Étudions maintenant comment est modifié le développement menant du lagrangien standard au lagrangien en jauge de Coulomb après introduction de la coupure. Pour éliminer $\mathcal{U}$, il faut écrire l'équation de Lagrange relative à cette variable. Partant du lagrangien suivant déduit de (B.11)

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 + \int d^3k \bar{\mathcal{L}} \quad (\text{C.49.a})$$

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{L}} = \epsilon_0 [& |\dot{\mathcal{A}} + i\mathbf{k}\mathcal{U}|^2 - c^2 |\mathbf{k} \times \mathcal{A}|^2] + \\ & + (j^* \cdot \mathcal{A} + \mathcal{A}^* \cdot j - \rho^* \mathcal{U} - \rho \mathcal{U}^*) g(k). \end{aligned} \quad (\text{C.49.b})$$

Nous en déduisons :

$$-i\mathbf{k} \cdot [\dot{\mathcal{A}} + i\mathbf{k}\mathcal{U}] = \frac{1}{\epsilon_0} \rho g(k) \quad (\text{C.50})$$

expression qui diffère de (B.20) par le facteur $g(k)$. En éliminant $\mathcal{U}$ et en se plaçant en jauge de Coulomb, on obtient finalement :

$$\begin{aligned} L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - \int d^3k \frac{|\rho|^2}{\epsilon_0 k^2} [g(k)]^2 + \epsilon_0 \int d^3k [& \dot{\mathcal{A}}^* \cdot \dot{\mathcal{A}} - c^2 k^2 \mathcal{A}^* \cdot \mathcal{A}] \\ & + \int d^3k [j^* \cdot \mathcal{A} + j \cdot \mathcal{A}^*] g(k). \end{aligned} \quad (\text{C.51})$$

Nous trouvons ainsi que, dans le terme d'interaction avec le champ transverse (dernier terme de (C.51)), la fonction de coupure $g(k)$ découple les particules des modes transverses de fréquence élevée. La fonction $g(k)$ apparaît également dans le terme d'interaction coulombienne (deuxième terme de (C.51)) qui peut s'écrire

$$\tilde{V}_{\text{Coul}} = \sum_{\alpha} \tilde{v}_{\text{Coul}}^{\alpha} + \sum_{\alpha > \beta} \tilde{V}_{\alpha\beta} \quad (\text{C.52.a})$$

$$\tilde{\epsilon}_{\text{Coul}}^{\alpha} = \frac{q_a^2}{4\pi^2 \epsilon_0} \int_0^{\infty} [g(k)]^2 dk \sim \frac{q_a^2}{4\pi^2 \epsilon_0} k_c \quad (\text{C. 52. b})$$

$$\tilde{V}_{\alpha\beta} = \frac{q_a q_\beta}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta|} [1 - O(k_c |\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta|)] \quad (\text{C. 52. c})$$

où $O(x)$ est une fonction qui tend vers zéro quand x tend vers l'infini. Les résultats obtenus en (C. 52) sont conformes à l'image que nous donnions de l'effet de la coupure dans l'espace réel. Pour des distances grandes devant $1/k_c = \hbar/mc$, l'interaction entre particules chargées est l'interaction coulombienne avec une excellente précision. Ceci justifie pleinement l'utilisation de l'interaction coulombienne dans le traitement d'un système comme l'atome d'hydrogène où le rayon de Bohr est grand devant la longueur d'onde de Compton. La contribution des modes basse fréquence à la self-énergie coulombienne est donnée par (C. 52. b). Son ordre de grandeur est l'énergie coulombienne d'une sphère de charge q_a et de rayon $\hbar/mc$.

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES ET CONSEILS DE LECTURE

- Pour la description lagrangienne des systèmes à un nombre fini de degrés de liberté, voir Landau et Lifchitz (tome I), Goldstein.
- Pour la description lagrangienne des systèmes continus et la quantification canonique d'un champ, voir Goldstein (chap. XI), Schiff (chap. XIII), Messiah (chap. XXI, § I), Roman (chap. I).
- Pour la description lagrangienne du champ électromagnétique, voir Sommerfeld (§ 32), Landau et Lifchitz (tome II, chap. 4), Schiff (chap. XIV), Power (chap. 6), Kroll, Healy (chap. 3).
- Les ouvrages de niveau plus avancé, traitant des champs relativistes et utilisant des lagrangiens covariants, sont cités dans le chapitre V.

COMPLÉMENT A_{II}

DÉRIVÉE FONCTIONNELLE. INTRODUCTION SIMPLE ET QUELQUES APPLICATIONS

La notion de dérivée fonctionnelle généralise celle de dérivée partielle pour les fonctions dépendant d'une infinité continue de variables (§§ 1 et 2). Cet outil se révèle très utile toutes les fois qu'une loi physique peut se déduire d'un principe variationnel. Par exemple, le principe de moindre action se traduit mathématiquement par la nullité des dérivées fonctionnelles de l'action. Le calcul explicite de ces dérivées fonctionnelles redonne alors les équations de Lagrange (§ 3). Un autre intérêt de la dérivée fonctionnelle est qu'elle permet d'écrire les équations du mouvement d'un système continu (comme un champ) sous une forme analogue à celle d'un système discret, aussi bien dans le formalisme lagrangien (§ 4) qu'hamiltonien (§ 5).

1. Passage d'un système discret à un système continu. Limite des dérivées partielles

Considérons une chaîne de N points matériels de masse m , situés à une distance a les uns des autres le long de Ox , et se déplaçant parallèlement à une même direction Oy . Soit v_n la vitesse de la n -ième particule. Son énergie cinétique vaut :

$$T_n = \frac{1}{2} m v_n^2 \quad (1)$$

et l'énergie cinétique totale est égale à :

$$E_c = \sum_{n=1}^N T_n \quad (2)$$

E_c apparaît donc comme une fonction des N variables réelles v_n (les vitesses de chaque particule). Calculons alors la différentielle de E_c . Nous pouvons exprimer celle-ci sous diverses formes :

$$\begin{aligned} dE_c &= \sum_{n=1}^N \frac{\partial E_c}{\partial v_n} dv_n = \sum_{n=1}^N \frac{dT_n}{dv_n} dv_n \\ &= \sum_{n=1}^N m v_n dv_n. \end{aligned} \quad (3)$$

Étudions maintenant ce qui se passe quand le nombre de particules croît, mais que leur masse et leur distance décroissent, de manière à ce que la masse par unité de longueur $\mu = m/a$ et la longueur $l = Na$ restent

constantes. Schématiquement, on passe de la chaîne à un fil en mouvement dans la direction Oy . Lors du passage à la limite continue, les formules (2) et (1) deviennent respectivement :

$$E_c = \int_0^l dx T(x) \quad (4)$$

$$T(x) = \frac{1}{2} \mu v^2(x). \quad (5)$$

L'indice discret n a été remplacé par un indice continu x caractérisant la position de l'élément de longueur considéré. L'énergie cinétique T_n est remplacée par la densité d'énergie cinétique $T(x)$ et l'énergie cinétique totale devient fonction d'un ensemble continu de variables $\{v(x)\}$.

Etudions ce que devient la formule (3) donnant la différentielle de E_c à la limite continue. Aux variations indépendantes dv_n des N vitesses (Fig. 1a) se substitue maintenant une fonction $\delta v(x)$ décrivant des petites variations de v qui peuvent prendre des valeurs arbitraires en des points x différents (Fig. 1b).

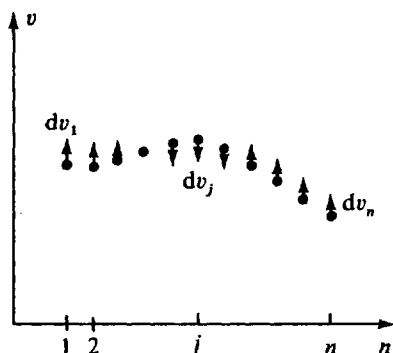


Figure 1a

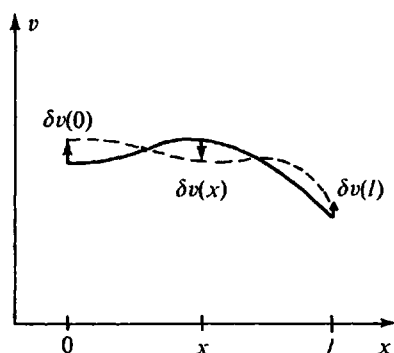


Figure 1b

La généralisation de (3) est alors :

$$\begin{aligned} \delta E_c &= \int_0^l dx \frac{\partial E_c}{\partial v(x)} \delta v(x) = \int_0^l dx \frac{dT(x)}{dv(x)} \delta v(x) \\ &= \int_0^l dx \mu v(x) \delta v(x). \end{aligned} \quad (6)$$

La notation $\partial E_c / \partial v(x)$ correspond à la dérivée fonctionnelle de E_c par rapport à $v(x)$. Cette dérivée fonctionnelle décrit comment E_c varie lorsque v varie de $\delta v(x)$ dans l'intervalle $[x, x + dx]$. Plus précisément, $\partial E_c / \partial v(x)$

est le coefficient de proportionnalité entre l'accroissement δE_c et la cause, $\delta v(x) dx$, de cet accroissement. Une telle dérivée fonctionnelle qui généralise l'ensemble des dérivées partielles $\partial E_c / \partial v_n$ quand n devient infiniment grand, est donc une fonction de x , qui vaut en l'occurrence $\mu v(x)$. Notons enfin, que, dans (6), $dT(x)/dv(x)$ est une dérivée au sens habituel puisque, d'après (5), la densité d'énergie cinétique $T(x)$ apparaît comme une fonction de la variable réelle $v(x)$.

2. Notion de dérivée fonctionnelle

Les notions précédentes peuvent être généralisées de manière élémentaire. Considérons une application qui associe un nombre $\phi(u)$ réel à toute fonction $u(x)$ de la variable réelle x . L'application ϕ est appelée « fonctionnelle ». Celle-ci est différentiable si, pour toute variation infinitésimale $\delta u(x)$ de $u(x)$, la variation correspondante $\delta\phi$ de ϕ peut s'exprimer comme une fonctionnelle linéaire de $\delta u(x)$ sous la forme :

$$\begin{aligned}\delta\phi &= \phi(u + \delta u) - \phi(u) \\ &= \int dx D(x) \delta u(x) + O(\delta u)^2.\end{aligned}\tag{7}$$

Si l'on suppose que les variations $\delta u(x)$ en des points différents peuvent être choisies indépendamment, la dérivée fonctionnelle de ϕ par rapport à $u(x)$ est :

$$\frac{\delta\phi}{\delta u(x)} = D(x).\tag{8}$$

Intuitivement, $\delta\phi/\delta u(x)$ est le coefficient de proportionnalité entre l'accroissement $\delta\phi$ et la variation $\delta u(x) dx$ qui lui donne naissance.

Remarques

- (i) La définition de la dérivée fonctionnelle par la relation (8) suppose que l'espace des fonctions $u(x)$ est suffisamment vaste pour qu'on puisse varier indépendamment $u(x)$ en des points différents. Une exigence analogue existe pour la définition des dérivées partielles d'une fonction de plusieurs variables $\phi(x_1, x_2, \dots, x_N)$: les variations $dx_1, dx_2, \dots, dx_N$ doivent être indépendantes.
- (ii) Les notions précédentes peuvent être généralisées aisément à des fonctions u de plusieurs variables réelles x, y, z et au cas où u est un vecteur de $\mathbb{R}^n$ ou $\mathbb{C}^n$. Dans ce dernier cas, $D(x)$ est un vecteur de même dimension.

3. Dérivée fonctionnelle de l'action et équations de Lagrange

La notion de dérivée fonctionnelle est particulièrement utile toutes les fois qu'une loi physique est décrite par un principe variationnel, en par-

tuculier, dans le cadre de la formulation lagrangienne de la mécanique, puisque les trajectoires réelles y apparaissent alors comme des extrema de l'action :

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L(x_j(t), \dot{x}_j(t), t). \quad (9)$$

(Nous adoptons les mêmes notations que dans le § A.1). La fonctionnelle S dépend ici de N fonctions indépendantes $x_j(t)$. En effet, la donnée de la trajectoire $x_j(t)$, t variant de t_1 à t_2 , impose automatiquement la donnée de la vitesse $\dot{x}_j(t)$ sur ce même domaine de variation de t . Le principe de moindre action exprime que l'accroissement δS de S , qui, d'après le paragraphe 2 précédent, peut s'écrire :

$$\delta S = \sum_{j=1}^N \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{\partial S}{\partial x_j(t)} \delta x_j(t) \quad (10)$$

doit être nul pour n'importe quelle variation $\delta x_j(t)$ autour de la trajectoire réelle. Il entraîne donc l'équation :

$$\frac{\partial S}{\partial x_j(t)} = 0. \quad (11)$$

Montrons que cette équation n'est autre que l'équation de Lagrange relative à x_j . Réexprimons pour cela δS en fonction de L . En utilisant (9), nous trouvons :

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{j=1}^N \left[\frac{\partial L}{\partial x_j} \delta x_j + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} \delta \dot{x}_j \right]. \quad (12)$$

Les variations δx_j et $\delta \dot{x}_j = d(\delta x_j)/dt$ ne sont pas indépendantes dans (12). Pour réexprimer les $\delta \dot{x}_j$ en fonction des δx_j , intégrons le second terme du crochet par parties. Il vient :

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{j=1}^N \left[\frac{\partial L}{\partial x_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} \right] \delta x_j(t) + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} \delta x_j(t) \right]_{t_1}^{t_2}. \quad (13)$$

Dans le cadre du principe de moindre action, les extrémités de la trajectoire sont supposées fixes. Il s'ensuit que l'on doit se restreindre à des variations telles que $\delta x_j(t_1) = \delta x_j(t_2) = 0$. Le second terme de (13) disparaît donc. La comparaison avec (10) et (11) donne alors :

$$\frac{\partial S}{\partial x_j(t)} = \left[\frac{\partial L}{\partial x_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} \right] = 0. \quad (14)$$

La condition (11) sur la dérivée fonctionnelle de l'action redonne ainsi les équations de Lagrange de la mécanique.

4. Dérivée fonctionnelle du lagrangien d'un système continu

Dans le cas d'un système dynamique dépendant d'un nombre continu de degrés de liberté, le lagrangien apparaît lui-même comme une fonctionnelle. Plus précisément, avec les notations du § A.2, L apparaît comme une fonctionnelle de $A_j(\mathbf{r})$ et de $\dot{A}_j(\mathbf{r})$ qui s'écrit :

$$L = \int d^3r \mathcal{L}(A_j, \dot{A}_j, \partial_i A_j). \quad (15)$$

Remarquons que, même si la densité de lagrangien dépend des dérivées spatiales $\partial_i A_j$, celles-ci ne doivent pas être considérées comme des variables indépendantes des A_j dans la fonctionnelle L . En effet, la donnée de $A_j(\mathbf{r})$ entraîne automatiquement celle de $\partial_i A_j(\mathbf{r})$. Par contre, à un instant donné, $A_j(\mathbf{r}, t)$ et $\dot{A}_j(\mathbf{r}, t)$ sont des variables indépendantes. Calculons la différentielle de L :

$$\delta L = \int d^3r \sum_{i,j} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_j} \delta A_j(\mathbf{r}) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j} \delta \dot{A}_j(\mathbf{r}) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i A_j)} \delta (\partial_i A_j(\mathbf{r})) \right]. \quad (16)$$

Pour réexprimer les $\delta (\partial_i A_j(\mathbf{r}))$ en fonction des δA_j , intégrons par parties le dernier terme du crochet et utilisons le fait que les $A_j(\mathbf{r})$ correspondent, en pratique, à des champs qui sont nuls à l'infini. Il vient :

$$\delta L = \int d^3r \sum_{i,j} \left\{ \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_j} - \partial_i \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i A_j)} \right) \right] \delta A_j(\mathbf{r}) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j} \delta \dot{A}_j(\mathbf{r}) \right\}. \quad (17)$$

En utilisant les dérivées fonctionnelles de L , nous pouvons également écrire la différentielle de L sous la forme :

$$\delta L = \int d^3r \sum_j \left[\frac{\delta L}{\delta A_j(\mathbf{r})} \delta A_j(\mathbf{r}) + \frac{\delta L}{\delta \dot{A}_j(\mathbf{r})} \delta \dot{A}_j(\mathbf{r}) \right]. \quad (18)$$

L'identification de (17) et (18) entraîne alors que

$$\frac{\delta L}{\delta A_j(\mathbf{r})} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_j} - \sum_i \partial_i \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i A_j)} \right) \quad (19)$$

$$\frac{\delta L}{\delta \dot{A}_j(\mathbf{r})} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j}. \quad (20)$$

Etablissons maintenant les équations de Lagrange pour un système continu à partir du principe de moindre action. L'action

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L(t) = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \mathcal{L}(A_j(\mathbf{r}, t), \dot{A}_j(\mathbf{r}, t), \partial_i A_j(\mathbf{r}, t)) \quad (21)$$

est une fonctionnelle des $A_j(\mathbf{r}, t)$. En effet, la donnée de $A_j(\mathbf{r}, t)$ entre t_1 et t_2 entraîne automatiquement celle de $\dot{A}_j(\mathbf{r}, t)$ dans le même intervalle de temps. Alors que le lagrangien L , défini à chaque instant par (15), est une fonctionnelle des A_j et $\dot{A}_j$, l'action S définie en (21) est une fonctionnelle des seuls A_j . Sa différentielle δS est égale à :

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \frac{\partial S}{\partial A_j(\mathbf{r}, t)} \delta A_j(\mathbf{r}, t) \quad (22)$$

et le principe de moindre action s'exprime par :

$$\frac{\partial S}{\partial A_j(\mathbf{r}, t)} = 0. \quad (23)$$

Pour calculer ces dérivées, faisons apparaître dans δS les dérivées fonctionnelles du lagrangien :

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \delta L = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \sum_j \left[\frac{\partial L}{\partial A_j(\mathbf{r})} \delta A_j(\mathbf{r}) + \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_j(\mathbf{r})} \delta \dot{A}_j(\mathbf{r}) \right] \quad (24)$$

et réexprimons $\delta \dot{A}_j = d(\delta A_j)/dt$ en fonction de δA_j en intégrant le dernier terme par parties par rapport au temps. En utilisant le fait que le principe de moindre action s'applique à des variations δA_j nulles aux instants t_1 et t_2 , nous trouvons :

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \sum_j \left[\frac{\partial L}{\partial A_j(\mathbf{r})} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_j(\mathbf{r})} \right] \delta A_j(\mathbf{r}). \quad (25)$$

La différentielle de l'action étant nulle le long d'un chemin réel, nous en déduisons les équations de Lagrange

$$\frac{\partial S}{\partial A_j(\mathbf{r}, t)} = \frac{\partial L}{\partial A_j(\mathbf{r})} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_j(\mathbf{r})} = 0. \quad (26)$$

L'utilisation de la dérivée fonctionnelle conduit donc à des équations formellement identiques à celles obtenues dans le cas discret (14). Pour obtenir les équations de Lagrange exprimées à l'aide de la densité de lagrangien (formule (A.39)), il faut bien sûr remplacer $\partial L / \partial A_j(\mathbf{r})$ et $\partial L / \partial \dot{A}_j(\mathbf{r})$ par leurs expressions (19) et (20). Il est cependant avantageux, dans le cadre de calculs formels, de conserver les dérivées fonctionnelles du lagrangien, puisque les équations (et les démonstrations) sont alors calquées sur celles développées dans le cas discret. Nous montrons au paragraphe suivant comment appliquer cette méthode pour passer au formalisme hamiltonien.

5. Dérivée fonctionnelle de l'hamiltonien d'un système continu

Dans le cas où le lagrangien dépend d'un nombre discret de variables, l'impulsion associée à la grandeur x_n est la dérivée partielle du lagrangien par rapport à $\dot{x}_n$ (cf. formule (A.5)). L'extension logique de cette formule au cas d'un ensemble continu de variables est :

$$\Pi_j(\mathbf{r}) = \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_j(\mathbf{r})} . \quad (27)$$

Remarquons que, sur l'exemple du paragraphe 1, une telle définition conduit à une impulsion égale à $\mu v(x)$, qui n'est autre que la valeur limite de l'impulsion par unité de longueur $a^{-1} m v_n$ du système discret quand a tend vers 0. Remarquons également que cette définition est identique à l'expression (A.41) à cause de l'égalité (20).

L'hamiltonien H est introduit par une relation identique à celle du cas discret :

$$H = \int d^3r \sum_j \Pi_j(\mathbf{r}) \dot{A}_j(\mathbf{r}) - L . \quad (28)$$

Cette relation peut ensuite être transformée (voir formules (A.45.a) et (A.45.b)) afin d'introduire une densité d'hamiltonien $\mathcal{H}$. Il est cependant plus simple de déduire directement les équations de Hamilton de la dynamique de la forme (28) de l'hamiltonien. Pour cela, calculons la différentielle de H , H étant considéré comme une fonction de $A_j(\mathbf{r})$ et de $\Pi_j(\mathbf{r})$. Nous avons d'une part

$$\delta H = \int d^3r \sum_j \left[\frac{\partial H}{\partial A_j(\mathbf{r})} \delta A_j(\mathbf{r}) + \frac{\partial H}{\partial \Pi_j(\mathbf{r})} \delta \Pi_j(\mathbf{r}) \right] \quad (29)$$

et d'autre part, en utilisant (28) :

$$\begin{aligned} \delta H = \int d^3r \sum_j \left[\Pi_j(\mathbf{r}) \delta \dot{A}_j(\mathbf{r}) + \dot{A}_j(\mathbf{r}) \delta \Pi_j(\mathbf{r}) - \right. \\ \left. - \frac{\partial L}{\partial A_j(\mathbf{r})} \delta A_j(\mathbf{r}) - \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_j(\mathbf{r})} \delta \dot{A}_j(\mathbf{r}) \right] . \quad (30) \end{aligned}$$

La définition (27) de $\Pi_j(\mathbf{r})$ entraîne que les termes linéaires en $\delta \dot{A}_j$ de (30) disparaissent. Par ailleurs, on peut, en vertu des relations (26) et (27), remplacer $\partial L / \partial A_j(\mathbf{r})$ par $\Pi_j(\mathbf{r})$. En identifiant alors les formes (29) et (30) de la différentielle δH , nous trouvons :

$$\dot{\Pi}_j(\mathbf{r}) = - \frac{\partial H}{\partial A_j(\mathbf{r})} \quad (31.a)$$

$$\dot{A}_j(\mathbf{r}) = \frac{\partial H}{\partial \Pi_j(\mathbf{r})} . \quad (31.b)$$

Ces équations peuvent être réexprimées en utilisant la densité d'hamiltonien $\mathcal{H}$ (tout comme l'équation de Lagrange (26) pouvait être réexprimée à l'aide de la densité de lagrangien grâce aux relations (19) et (20)). En procédant ainsi, on aboutit aux équations (A.46.a) et (A.46.b). Là encore, l'utilisation des dérivées fonctionnelles de H permet d'écrire les équations de Hamilton-Jacobi d'un système continu sous une forme analogue à celles du cas discret.

COMPLÉMENT B_{II}SYMÉTRIES DU LAGRANGIEN EN JAUGE DE COULOMB
ET CONSTANTES DU MOUVEMENT

Dans ce complément, nous montrons qu'il est possible de déduire du lagrangien en jauge de Coulomb l'expression de grandeurs physiques conservatives relatives au système particules + champ en interaction. Pour trouver l'expression de ces constantes du mouvement, nous calculons l'action le long d'un chemin réel et nous relierons les variations infinitésimales de cette action à l'hamiltonien et à l'impulsion. Nous utilisons ensuite l'invariance du lagrangien (et donc de l'action) dans certaines transformations (invariance par translation dans le temps, par translation dans l'espace, par rotation dans l'espace) pour trouver des constantes du mouvement (énergie totale, impulsion totale, moment cinétique total).

1. Variation de l'action entre deux mouvements réels infiniment voisins

Le principe de moindre action exprime que l'intégrale du lagrangien entre deux instants t_1 et t_2 est extrémale quand $x(t)$ correspond à l'évolution réelle de la coordonnée généralisée x entre les instants t_1 et t_2 , les valeurs extrêmes $x(t_1)$ et $x(t_2)$ étant préalablement fixées. Dans un tel point de vue, on évalue l'action S sur plusieurs *chemins fictifs* dans le plan (x, t) et on recherche celui qui minimise S . Une autre possibilité est de considérer tous les *chemins réels* partant de $x(t_1) = x_1$ et d'étudier la variation $S' - S$ de l'action lorsqu'on fait varier l'autre extrémité de (x_2, t_2) à (x'_2, t'_2) (Fig. 1). C'est ce point de vue que nous adoptons ici.

Calculons $S' - S$:

$$S' - S = \int_{t_1}^{t'_2} L(x', \dot{x}') dt - \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}) dt \quad (1)$$

$$S' - S = \int_{t_1}^{t'_2} [L(x', \dot{x}') - L(x, \dot{x})] dt + \int_{t_2}^{t'_2} L(x', \dot{x}') dt. \quad (2)$$

Supposons les deux chemins infiniment voisins et posons :

$$dS = S' - S \quad (3.a)$$

$$dt_2 = t'_2 - t_2 \quad (3.b)$$

$$dx_2 = x'_2 - x_2 = x'(t_2 + dt_2) - x(t_2) \quad (3.c)$$

$$\delta x(t) = x'(t) - x(t). \quad (3.d)$$

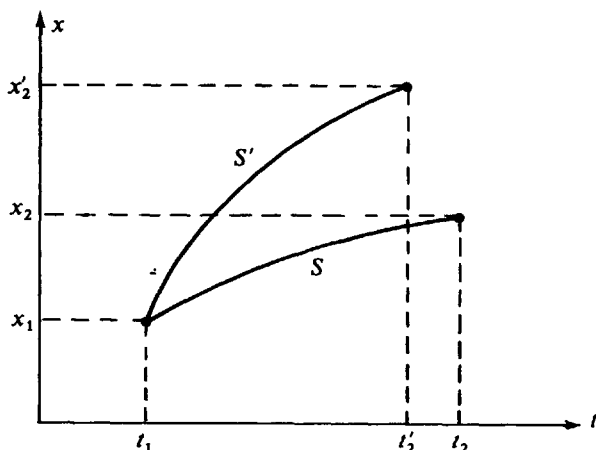


Figure 1. Deux mouvements réels du système partant tous deux de (x_1, t_1) et aboutissant respectivement en (x_2, t_2) et en (x'_2, t'_2) . $S' - S$ est la variation d'action d'un chemin à l'autre.

A des termes du second ordre près, la dernière intégrale de (2) s'écrit :

$$L(x(t_2), \dot{x}(t_2)) dt_2 = L(2) dt_2. \quad (4)$$

La première intégrale de (2) peut être transformée grâce à la formule (13) du complément A_{II}, de sorte que :

$$dS = \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right] \delta x(t) + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta x \right]_{t_1}^{t_2} + L(2) dt_2. \quad (5)$$

Comme le mouvement $x(t)$ est réel, les équations de Lagrange sont satisfaites et le premier terme de (5) est identiquement nul, de sorte que dS s'exprime simplement sous la forme :

$$dS = p(t_2) \delta x(t_2) + L(2) dt_2. \quad (6)$$

Nous avons utilisé la définition (A.5) de l'impulsion et le fait que $\delta x(t_1) = 0$. Relions enfin $\delta x(t_2)$ à dx_2 . Compte tenu de (3.d) et (3.c) nous avons :

$$\begin{aligned} \delta x(t_2) &= x'(t_2) - x(t_2) \\ &\simeq x'(t_2 + dt_2) - \dot{x}(t_2) dt_2 - x(t_2) \\ &\simeq dx_2 - \dot{x}(t_2) dt_2. \end{aligned} \quad (7)$$

Finalement, en regroupant (6) et (7), nous obtenons :

$$\begin{aligned} dS &= p(t_2) dx_2 - [p(t_2) \dot{x}(t_2) - L(2)] dt_2 \\ &= p(t_2) dx_2 - H(2) dt_2 \end{aligned} \quad (8)$$

où H est l'hamiltonien.

Plus généralement, si l'on varie non seulement x_2 et t_2 mais aussi x_1 et t_1 et s'il existe plusieurs coordonnées généralisées x_j , dS s'écrit :

$$dS = \sum_{j=1}^N p_j(t_2) dx_{2j} - \sum_{j=1}^N p_j(t_1) dx_{1j} - H(2) dt_2 + H(1) dt_1. \quad (9)$$

Nous allons montrer maintenant sur un cas simple comment la formule précédente peut être appliquée pour trouver des lois de conservation.

2. Constantes du mouvement dans un cas simple

Nous considérons dans ce paragraphe un ensemble de particules en interaction ayant pour lagrangien :

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - \sum_{\alpha < \beta} V(|\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}|). \quad (10)$$

Un tel lagrangien est manifestement invariant dans la transformation $t \rightarrow t + \varepsilon$ (translation de ε dans l'espace des temps). L'action ne change pas si les instants t_1 et t_2 sont déplacés de la même quantité ε , les coordonnées initiales et finales du chemin étant, par ailleurs, conservées. Pour une translation infinitésimale $dt_1 = dt_2 = \varepsilon$, nous obtenons donc d'une part :

$$dS = 0 \quad (11)$$

et d'autre part, d'après (9) :

$$dS = [H(1) - H(2)] \varepsilon. \quad (12)$$

Nous en déduisons donc que $H(1) = H(2)$. Il y a conservation de H pour un lagrangien indépendant du temps. L'hamiltonien H , dans ces conditions, correspond à l'énergie totale qui est donc une constante du mouvement.

Le lagrangien (10) est également invariant dans toute translation d'espace ($\mathbf{r}_{\alpha} \rightarrow \mathbf{r}_{\alpha} + \boldsymbol{\eta}$). Une telle opération ne change ni les vitesses des particules (et donc leur énergie cinétique), ni leurs positions relatives (et donc leur énergie potentielle). Pour une translation spatiale infinitésimale : $d\mathbf{r}_{1\alpha} = d\mathbf{r}_{2\alpha} = \boldsymbol{\eta}$ (pour tout α), $dt_1 = dt_2 = 0$, la variation infinitésimale de S s'écrit d'après (9) :

$$dS = \left[\sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha}(t_2) - \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha}(t_1) \right] \cdot \boldsymbol{\eta}. \quad (13)$$

Comme, par ailleurs, dS est nul par suite de l'invariance de L par translation, il s'ensuit que l'impulsion totale $\sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha}$ est une constante du mouvement.

Le lagrangien (10) est enfin invariant dans toute rotation. Si nous considérons une rotation infinitésimale d'angle $d\varphi$ autour d'un axe $\mathbf{n}$ ($\mathbf{r}_\alpha \rightarrow \mathbf{r}_\alpha + d\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{r}_\alpha$ pour tout α), un raisonnement analogue au précédent conduit à :

$$dS = \left[\sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha}(t_2) \cdot (\mathbf{n} \times \mathbf{r}_{\alpha}(t_2)) - \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha}(t_1) \cdot (\mathbf{n} \times \mathbf{r}_{\alpha}(t_1)) \right] d\varphi = 0. \quad (14)$$

L'axe $\mathbf{n}$ étant quelconque, on en déduit que le moment cinétique $\sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{p}_{\alpha}$ est une constante du mouvement.

En définitive, nous avons pu associer une constante du mouvement à chaque groupe continu de transformations de symétrie du lagrangien L .

3. Conservation de l'énergie totale pour le système charges + champ en interaction

La démarche que nous suivons dans ce paragraphe (et dans les paragraphes suivants) est conceptuellement identique à celle introduite précédemment dans le cas discret. Etendue au cas de l'électrodynamique en jauge de Coulomb, la formule (9) devient :

$$\begin{aligned} dS = & \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha}(t_2) \cdot d\mathbf{r}_{2\alpha} + \int d^3k [\pi^*(\mathbf{k}, t_2) \cdot d\mathcal{A}_2(\mathbf{k}) + \pi(\mathbf{k}, t_2) \cdot d\mathcal{A}_2^*(\mathbf{k})] - \\ & - \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha}(t_1) \cdot d\mathbf{r}_{1\alpha} - \int d^3k [\pi^*(\mathbf{k}, t_1) \cdot d\mathcal{A}_1(\mathbf{k}) + \pi(\mathbf{k}, t_1) \cdot d\mathcal{A}_1^*(\mathbf{k})] \\ & - H(2) dt_2 + H(1) dt_1 \end{aligned} \quad (15)$$

où H est l'hamiltonien du système particules + champ, $\mathbf{r}_{\alpha}$ et $\mathbf{p}_{\alpha}$ les coordonnées et moments conjugués des particules α , $\pi(\mathbf{k})$ les moments conjugués associés aux variables dynamiques $\mathcal{A}(\mathbf{k})$ du champ transverse. dS est la variation d'action entre deux « mouvements réels » dont les extrémités initiale et finale diffèrent respectivement de $d\mathbf{r}_{1\alpha}$, $d\mathcal{A}_1(\mathbf{k})$, dt_1 et $d\mathbf{r}_{2\alpha}$, $d\mathcal{A}_2(\mathbf{k})$, dt_2 .

Or, le lagrangien en jauge de Coulomb, étudié dans le paragraphe C du chapitre II, et dont nous rappelons ci-dessous l'expression :

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - \int d^3k \frac{|\rho|^2}{\epsilon_0 k^2} + \int d^3k \overline{\mathcal{L}}_c \quad (16.a)$$

$$\overline{\mathcal{L}}_c = \epsilon_0 [\dot{\mathcal{A}}^* \cdot \dot{\mathcal{A}} - c^2 k^2 \mathcal{A}^* \cdot \mathcal{A}] + j^* \cdot \mathcal{A} + j \cdot \mathcal{A}^* \quad (16.b)$$

est visiblement invariant par translation dans le temps. Un raisonnement analogue à celui du paragraphe précédent permet alors de montrer que $dS = 0$ si $dt_1 = dt_2$ et si toutes les autres variations $d\mathbf{r}_{1\alpha}$, $d\mathbf{r}_{2\alpha}$, $d\mathcal{A}_1(\mathbf{k})$, $d\mathcal{A}_2(\mathbf{k})$ sont nulles, ce qui donne, compte-tenu de (15), $H(2) = H(1)$.

Ainsi, l'invariance du lagrangien (16) par translation dans le temps entraîne que l'hamiltonien du système « particules + champ » est une constante du mouvement. Rappelons qu'un tel hamiltonien s'écrit (voir formule (C.28)).

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha})]^2 + V_{\text{Coul}} + \varepsilon_0 \int d^3k \left[\frac{\boldsymbol{\pi}^* \cdot \boldsymbol{\pi}}{\varepsilon_0^2} + c^2 k^2 \mathcal{A}^* \cdot \mathcal{A} \right] \quad (17)$$

et représente la somme des énergies cinétiques des particules, de leur énergie de Coulomb et de l'énergie du champ transverse.

4. Conservation de l'impulsion totale

Le lagrangien de l'électrodynamique est également invariant par translation dans l'espace. Vérifions le sur son expression (16.b) dans l'espace réciproque. Supposons que l'on translate simultanément les particules et le champ d'une même quantité $\boldsymbol{\eta}$. Les nouvelles coordonnées des particules sont :

$$\mathbf{r}'_{\alpha} = \mathbf{r}_{\alpha} + \boldsymbol{\eta} \quad (18)$$

quant au champ traduit $\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t)$, il est égal à :

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r} - \boldsymbol{\eta}, t) \quad (19)$$

soit, dans l'espace réciproque

$$\mathcal{A}'(\mathbf{k}, t) = \mathcal{A}(\mathbf{k}, t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\eta}}. \quad (20)$$

(Remarquons que $\mathcal{A}'$ est transverse tout comme $\mathcal{A}$.) Le lagrangien des particules (semblable à (10)) est inchangé dans la transformation (18). Le lagrangien propre du champ qui fait intervenir des quantités du type $\mathcal{A}'^* \cdot \mathcal{A}'$ est aussi inchangé d'après (20). Le lagrangien d'interaction n'est pas modifié pour la même raison, les termes $j'^* \cdot \mathcal{A}'$ étant inchangés puisque la loi de transformation de j' , a la même forme que (20). L'invariance de L par translation entraîne donc que S ne varie pas lors d'une translation.

Calculons maintenant dS en utilisant la formule (15). Pour cela, il faut auparavant relier $d\mathcal{A}$ à $\boldsymbol{\eta}$ grâce à l'équation (20) écrite pour $\boldsymbol{\eta}$ infinitésimal

$$d\mathcal{A} = -i(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\eta}) \mathcal{A}. \quad (21)$$

En portant cette valeur dans (15), en remplaçant $\boldsymbol{\pi}$ par $-\varepsilon_0 \mathcal{E}_{\perp}$ et en étendant l'intégrale sur $\mathbf{k}$ à tout l'espace réciproque, nous trouvons la grandeur conservative suivante :

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha} + \varepsilon_0 \int d^3k (\mathcal{E}_{\perp}^* \cdot \mathcal{A}) i\mathbf{k}. \quad (22)$$

Grâce à la transversalité de $\mathcal{E}_\perp$, le dernier terme de (22) peut être réécrit comme un double produit vectoriel et il vient finalement

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha} + \varepsilon_0 \int d^3\mathbf{k} \mathcal{E}_\perp^* \times (i\mathbf{k} \times \mathcal{A}). \quad (23)$$

Cette expression est identique à la formule donnant l'impulsion totale telle qu'elle a été évaluée au chapitre I (formule (B.45) et (B.39.b)). L'invariance par translation du lagrangien entraîne donc la conservation de l'impulsion totale du système particules + champ.

5. Conservation du moment cinétique total

Montrons d'abord que le lagrangien (16) est invariant dans une rotation $\mathcal{R}$ de l'ensemble des particules et du champ d'un angle $d\varphi$ autour de l'axe $\mathbf{n}$. Les nouvelles coordonnées des particules sont :

$$\mathbf{r}'_{\alpha} = \mathbf{r}_{\alpha} + d\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{r}_{\alpha}. \quad (24)$$

Le champ $\mathbf{A}'$ obtenu après rotation est égal à

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathcal{R} \mathbf{A}(\mathcal{R}^{-1} \mathbf{r}, t) \quad (25)$$

soit encore dans l'espace réciproque :

$$\mathcal{A}'(\mathbf{k}, t) = \mathcal{R} \mathcal{A}(\mathcal{R}^{-1} \mathbf{k}, t). \quad (26)$$

(Pour passer de (25) à (26), il suffit de noter que le produit scalaire $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ apparaissant dans la transformée de Fourier est inchangé dans une rotation simultanée de $\mathbf{k}$ et de $\mathbf{r}$. Remarquons également que la formule (26) assure la transversalité de $\mathcal{A}'$.) Notons enfin que, pour une rotation infinitésimale, (26) s'écrit :

$$\mathcal{A}'(\mathbf{k}, t) = \mathcal{A}(\mathbf{k} - d\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{k}, t) + d\varphi \mathbf{n} \times \mathcal{A}(\mathbf{k} - d\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{k}, t) \quad (27)$$

soit, à l'ordre 1 en $d\varphi$:

$$d\mathcal{A}(\mathbf{k}, t) = d\varphi \{ -[(\mathbf{n} \times \mathbf{k}) \cdot \nabla] \mathcal{A} + \mathbf{n} \times \mathcal{A} \} \quad (28)$$

où ∇ est l'opérateur gradient dans l'espace réciproque.

Dans la rotation, le lagrangien des particules est invariant puisque la distance relative des particules est inchangée (interaction de Coulomb). Le lagrangien propre du champ transverse fait intervenir des intégrales sur l'espace réciproque de quantités du type $\mathcal{A}^*(\mathbf{k}, t) \cdot \mathcal{A}'(\mathbf{k}, t)$ qui, d'après (26), sont encore égales à $\mathcal{A}^*(\mathcal{R}^{-1} \mathbf{k}, t) \cdot \mathcal{A}(\mathcal{R}^{-1} \mathbf{k}, t)$. Le changement de variable d'intégration $\mathbf{k}' = \mathcal{R}^{-1} \mathbf{k}$ montre alors l'invariance de ce terme. Enfin, le lagrangien d'interaction entre particules et champ

fait intervenir le produit scalaire $j'^*(\mathbf{k}, t) \cdot \mathcal{A}'(\mathbf{k}, t)$. Le courant $\mathbf{j}$ se transformant par rotation comme $\mathbf{A}$, l'invariance de ce terme se démontre de façon identique. En définitive, le lagrangien total (16) est invariant dans une rotation d'angle $d\varphi$ autour de $\mathbf{n}$. Il s'ensuit que la différentielle de l'action correspondant à cette transformation des coordonnées est nulle ($dS = 0$).

Evaluons maintenant dS en utilisant la formule (15). Pour cela, remplaçons $d\mathbf{r}_\alpha$ et $d\mathcal{A}$ par leurs valeurs exprimées en fonction de $d\varphi$. En exprimant de surcroît π en fonction de $\mathcal{E}_\perp$ et en étendant l'intégrale à tout l'espace réciproque, nous en déduisons que la quantité suivante :

$$\sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha} \cdot (\mathbf{n} \times \mathbf{r}_{\alpha}) + \int d^3k \varepsilon_0 [\mathcal{E}_{\perp}^* \cdot \{(\mathbf{n} \times \mathbf{k}) \cdot \nabla\} \mathcal{A} - \mathcal{E}_{\perp}^* \cdot (\mathbf{n} \times \mathcal{A})] \quad (29)$$

est conservée. L'expression (29) peut encore être écrite :

$$\mathbf{n} \cdot \left[\sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{p}_{\alpha} + \varepsilon_0 \int d^3k \left\{ \sum_{a=x,y,z} \mathcal{E}_{\perp a}^*(\mathbf{k} \times \nabla) \mathcal{A}_a + \mathcal{E}_{\perp}^* \times \mathcal{A} \right\} \right]. \quad (30)$$

Cette quantité étant conservée indépendamment de la direction du vecteur $\mathbf{n}$, on en déduit une nouvelle constante du mouvement :

$$\mathbf{J} = \sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{p}_{\alpha} + \varepsilon_0 \int d^3k \left\{ \sum_a \mathcal{E}_{\perp a}^*(\mathbf{k} \times \nabla) \mathcal{A}_a + \mathcal{E}_{\perp}^* \times \mathcal{A} \right\}. \quad (31)$$

On reconnaît le moment cinétique total qui est la somme du moment cinétique des particules et du champ longitudinal (premier terme, voir formule (8) du complément B₁) et du moment cinétique du champ transverse (second terme, voir formule (11) du complément B₁).

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES ET CONSEILS DE LECTURE

Les résultats obtenus dans ce complément constituent un exemple d'application du théorème de Noether qui relie les symétries du lagrangien aux constantes du mouvement. Le lecteur intéressé par ce théorème pourra se reporter à des ouvrages plus avancés de théorie des champs comme Bogolubov et Chirkov (chap. I), Itzykson et Zuber (chap. 1).

COMPLÉMENT C_{II}ÉLECTRODYNAMIQUE EN PRÉSENCE
D'UN CHAMP EXTÉRIEUR

Dans le chapitre II, les particules et le champ électromagnétique ont été considérés comme formant un système isolé. Or, il est souvent nécessaire de décrire la dynamique des particules et du champ électromagnétique en présence d'un champ extérieur appliqué. Nous montrons d'abord (§ 1) comment distinguer dans le formalisme le champ extérieur du champ total. Nous donnons ensuite le lagrangien (§ 2) puis l'hamiltonien (§ 3) du système constitué par les particules et le champ électromagnétique en présence d'un champ extérieur appliqué.

1. Séparation du champ extérieur

Dans la théorie de l'électrodynamique développée précédemment, le champ électromagnétique est une variable dynamique dont la valeur ne peut pas être fixée a priori. Si l'on veut étudier l'évolution du système particules + champ électromagnétique dans un champ extérieur appliqué, il faut procéder dans la théorie comme dans la pratique, c'est-à-dire disposer, autour du système, des sources extérieures qui seront déterminées par l'expérimentateur pour réaliser le champ extérieur souhaité. Les particules vont alors évoluer sous l'action simultanée du champ extérieur et du reste du champ électromagnétique, en particulier du champ créé par leur dynamique propre. En revanche, nous supposons que les sources du champ extérieur ne sont pas partie intégrante du système dynamique : les densités de charge et de courant de ces sources, $\rho_e(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{j}_e(\mathbf{r}, t)$, sont des fonctions données du temps, déterminées indépendamment du champ des particules. Nous supposons donc, soit que la réaction du champ sur les sources extérieures est négligeable, soit qu'elle est compensée automatiquement par le dispositif expérimental.

Le champ extérieur appliqué peut être décrit par les potentiels $A_e(\mathbf{r}, t)$ et $U_e(\mathbf{r}, t)$ qui sont solutions des équations (analogues aux équations (A. 11) du chapitre I)

$$\Delta U_e + \nabla \cdot \dot{\mathbf{A}}_e = -\frac{\rho_e}{\epsilon_0} \quad (1. a)$$

$$\ddot{\mathbf{A}}_e - c^2 \Delta \mathbf{A}_e + c^2 \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}_e) + \nabla \dot{U}_e = \frac{\mathbf{j}_e}{\epsilon_0} \quad (1. b)$$

(Remarquons qu'il n'est pas nécessaire de choisir la jauge de Coulomb pour décrire le champ des sources.)

Soient A_i et U_i les potentiels correspondent au champ électromagnétique total. Il est intéressant d'introduire de nouvelles variables dynamiques du champ A et U telles que :

$$A_i(\mathbf{r}, t) = A_e(\mathbf{r}, t) + A(\mathbf{r}, t) \quad (2.a)$$

$$U_i(\mathbf{r}, t) = U_e(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}, t). \quad (2.b)$$

La structure des équations (1) et (2) montre clairement que A et U sont les potentiels correspondant à la somme du champ libre et du champ créé par les particules. De la linéarité des équations de Maxwell, il résulte que A et U doivent vérifier des équations analogues à (1) mais où les densités de charge et de courant correspondent aux seules particules du système. Quant à la dynamique des particules, elle est déterminée par les équations de Lorentz où le champ est le champ total correspondant aux potentiels A_i et U_i .

Nous introduisons au paragraphe suivant un lagrangien dont les équations de Lagrange correspondent précisément à ces spécifications.

2. Lagrangien en présence d'un champ extérieur

a) INTRODUCTION D'UN LAGRANGIEN

Considérons le lagrangien suivant où les variables dynamiques du champ sont $\{ A(\mathbf{r}), U(\mathbf{r}), \dot{A}(\mathbf{r}), \dot{U}(\mathbf{r}) \}$

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 + \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3r [(-\nabla U - \dot{\mathbf{A}})^2 - c^2 (\nabla \times \mathbf{A})^2] + \int d^3r [\mathbf{j}_p \cdot (\mathbf{A}_e + \mathbf{A}) - \rho_p (U_e + U)]. \quad (3)$$

Dans ce lagrangien, $\rho_p(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{j}_p(\mathbf{r}, t)$ sont les densités de charge et de courant des particules du système exclusivement. Des calculs analogues à ceux du paragraphe B.2 donnent les équations de Lagrange suivantes, respectivement pour les particules et le champ

$$m_{\alpha} \ddot{\mathbf{r}}_{\alpha} = q_{\alpha} [\mathbf{E}_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t) + \mathbf{E}(\mathbf{r}_{\alpha}, t)] + q_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \times [\mathbf{B}_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t) + \mathbf{B}(\mathbf{r}_{\alpha}, t)] \quad (4.a)$$

$$\Delta U + \nabla \cdot \dot{\mathbf{A}} = - \frac{\rho_p}{\epsilon_0} \quad (4.b)$$

$$\ddot{\mathbf{A}} - c^2 \Delta \mathbf{A} + c^2 \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}) + \nabla \dot{U} = \frac{\mathbf{j}_p}{\epsilon_0}. \quad (4.c)$$

La dynamique des particules est donc bien liée à la valeur du champ électromagnétique total ($\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_e + \mathbf{E}$, $\mathbf{B}_i = \mathbf{B}_e + \mathbf{B}$) tandis que les variables

dynamiques du champ A et U ne sont reliées qu'aux densités de charge et de courant des particules.

b) LE LAGRANGIEN EN JAUGE DE COULOMB

L'élimination de U et le choix de la jauge de Coulomb pour les variables dynamiques du champ se font de la même façon que dans la partie C. Nous obtenons ainsi un lagrangien semblable à celui donné par la formule (C.13)

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - V_{\text{Coul}} + \int d^3k \overline{\mathcal{L}}_C \quad (5.a)$$

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{L}}_C = \varepsilon_0 [\dot{\mathcal{A}} \cdot \dot{\mathcal{A}}^* - c^2 k^2 \mathcal{A} \cdot \mathcal{A}^*] + j_P^* \cdot (\mathcal{A} + \mathcal{A}_e) + \\ + j_P \cdot (\mathcal{A}^* + \mathcal{A}_e^*) - \rho_P \mathcal{U}_e^* - \rho_P^* \mathcal{U}_e \end{aligned} \quad (5.b)$$

Dans ce lagrangien, le potentiel $\mathcal{A}$ est transverse (choix de la jauge de Coulomb)

$$\mathcal{A}_{\parallel} = 0. \quad (6)$$

En revanche, nous n'avons pas nécessairement choisi la même jauge pour le champ extérieur. C'est pourquoi dans la formule (5.b) peuvent apparaître $\mathcal{U}_e$ et $\mathcal{A}_{e\parallel}$. De la même façon, les relations (2) donnant les potentiels du champ électromagnétique total prennent maintenant, dans l'espace réciproque, la forme suivante :

$$\mathcal{A}_{t\perp} = \mathcal{A}_{e\perp} + \mathcal{A}_{\perp} \quad (7.a)$$

$$\mathcal{A}_{t\parallel} = \mathcal{A}_{e\parallel} \quad (7.b)$$

$$\mathcal{U}_t = \mathcal{U}_e + \frac{\rho_P}{\varepsilon_0 k^2}. \quad (7.c)$$

3. Hamiltonien en présence d'un champ extérieur

a) LES MOMENTS CONJUGUÉS

Pour trouver les moments conjugués, nous calquons notre démarche sur celle du paragraphe C.3. Nous trouvons ainsi de façon immédiate la formule généralisant (C.19) pour les particules :

$$\mathbf{p}_{\alpha} = m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} + q_{\alpha} [\mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}) + \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t)] \quad (8)$$

et la formule généralisant (C.21) pour le champ

$$\pi_{\epsilon}(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 \dot{\mathcal{A}}_{\epsilon}(\mathbf{k}) \quad (9)$$

où $\pi_{\epsilon} = \partial \overline{\mathcal{L}}_C / \partial \dot{\mathcal{A}}_{\epsilon}^*$ est le moment associé à la variable dynamique $\mathcal{A}_{\epsilon}$.

b) HAMILTONIEN

L'hamiltonien en jauge de Coulomb du système est calculé comme au paragraphe C.3. En utilisant la formule (C.27), nous trouvons

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} \{ \mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} [\mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}) + \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t)] \}^2 + \\ + V_{\text{Coul}} + \int d^3 k [\rho_P^* \mathcal{U}_e + \rho_P \mathcal{U}_e^*] \\ + \varepsilon_0 \int d^3 k \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\pi}^*}{\varepsilon_0^2} + c^2 k^2 \mathcal{A} \cdot \mathcal{A}^* \right]. \quad (10)$$

Il est possible de décomposer H en trois termes :

$$H = H_P + H_R + H_I \quad (11)$$

qui sont détaillés ci-dessous. Ces trois termes correspondent respectivement à l'hamiltonien H_P des particules évoluant dans le champ coulombien et dans le champ extérieur, à l'hamiltonien H_R du rayonnement libre, à l'hamiltonien d'interaction H_I décrivant le couplage entre le champ de rayonnement et les particules

$$H_P = \sum_{\alpha} \frac{(\mathbf{p}_{\alpha}^e)^2}{2 m_{\alpha}} + V_{\text{Coul}} + \int d^3 r \rho_P(\mathbf{r}) U_e(\mathbf{r}, t) \quad (12)$$

où nous avons noté

$$\mathbf{p}_{\alpha}^e = \mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t). \quad (13)$$

Précisons que c'est $\mathbf{p}_{\alpha}$ qui est le moment conjugué de $\mathbf{r}_{\alpha}$, et non $\mathbf{p}_{\alpha}^e$ qui est une grandeur physique utile qui lui est reliée.

H_R et H_I sont égaux à

$$H_R = \varepsilon_0 \int d^3 k \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\pi}^*}{\varepsilon_0^2} + c^2 k^2 \mathcal{A} \cdot \mathcal{A}^* \right] \quad (14)$$

$$H_I = - \frac{q_{\alpha}}{m_{\alpha}} \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha}^e \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}) + \frac{q_{\alpha}^2}{2 m_{\alpha}} A^2(\mathbf{r}_{\alpha}) \quad (15)$$

où $\mathbf{p}_{\alpha}^e$ a été introduite en (13).

c) QUANTIFICATION

La quantification de la théorie se fait comme au paragraphe C.4 et aboutit aux relations de commutation suivantes pour les particules et le

champ :

$$[(r_\alpha)_i, (p_\beta)_j] = i\hbar \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \quad (16.a)$$

$$[\mathcal{A}_e(\mathbf{k}), \pi_{e'}(\mathbf{k}')] = i\hbar \delta_{ee'} \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \quad (16.b)$$

$$[\mathcal{A}_e(\mathbf{k}), \pi_{e'}^\dagger(\mathbf{k}')] = i\hbar \delta_{ee'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (16.c)$$

Il convient de noter que les relations de commutation pour les particules sont données avec $\mathbf{p}_\alpha$ et non $\mathbf{p}_\alpha^e$. Remarquons, à titre d'exemple, que les composantes cartésiennes de $\mathbf{p}_\alpha^e$ ne commutent pas entre elles :

$$[(p_\alpha^e)_i, (p_\beta^e)_j] = i\hbar \delta_{\alpha\beta} q_\alpha \sum_l \varepsilon_{ijl} [\mathbf{B}_e(\mathbf{r}_\alpha, t)]_l. \quad (17)$$

Soulignons, pour terminer, qu'en l'absence de particules, le champ total ne se réduit pas à ce que nous appelons le champ extérieur. En effet, nous verrons dans le chapitre III suivant que le champ quantique associé au potentiel vecteur $\mathcal{A}_1$, figurant dans (7.a), et dont la dynamique est décrite par (14), n'est nul qu'en valeur moyenne. Les fluctuations de $\mathcal{A}_1$ constituent ce qu'on appelle les fluctuations du vide. En l'absence de particules, le champ total est donc la superposition du champ extérieur et des fluctuations du vide.

COMPLÉMENT D_{II}

EXERCICES

- Exercice 1 Exemple d'hamiltonien différent de l'énergie
 Exercice 2 Passage d'un système discret à un système continu : introduction des densités de lagrangien et d'hamiltonien
 Exercice 3 Equations de Lagrange pour les composantes du champ électromagnétique dans l'espace réel
 Exercice 4 Equations de Lagrange pour le lagrangien standard en jauge de Coulomb
 Exercice 5 Impulsion et moment cinétique d'un champ quelconque
 Exercice 6 Lagrangien de variables complexes, linéaire vis-à-vis des vitesses.
 Exercice 7 Description lagrangienne et hamiltonienne du champ de matière de Schrödinger
 Exercice 8 Quantification du champ de Schrödinger
 Exercice 9 Equation de Schrödinger d'une particule dans un champ électromagnétique : arbitraire de phase et invariance de jauge

1. EXEMPLE D'HAMILTONIEN DIFFÉRENT DE L'ÉNERGIE

On considère le lagrangien

$$L = m\dot{x}\dot{y} - m\omega_0^2 xy. \quad (1)$$

a) Ecrire les équations de Lagrange associées à L . A quel système physique est associé L ? Quelle est, a priori, l'expression de l'énergie E pour un tel système ?

b) Calculer l'hamiltonien H associé à L . Comparer H et E .

Solution

a) Nous déduisons de (1)

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{y} \quad (2.a)$$

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -m\omega_0^2 y \quad (2.b)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = m\dot{x} \quad (2.c)$$

$$\frac{\partial L}{\partial y} = -m\omega_0^2 x. \quad (2.d)$$

Les équations de Lagrange

$$m\ddot{y} = -m\omega_0^2 y \quad (3.a)$$

$$m\ddot{x} = -m\omega_0^2 x \quad (3.b)$$

sont celles de deux oscillateurs harmoniques de même fréquence ω_0 . L'énergie totale E pour

ces deux oscillateurs est a priori

$$E = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \dot{y}^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 y^2. \quad (4)$$

b) Les moments conjugués associés à x et y se déduisent de (2. a) et (2. c) et conduisent à l'hamiltonien suivant :

$$H = m \dot{x} \dot{y} + m \omega_0^2 xy \quad (5)$$

qui diffère de l'énergie (4).

2. PASSAGE D'UN SYSTÈME DISCRET À UN SYSTÈME CONTINU : INTRODUCTION DES DENSITÉS DE LAGRANGIEN ET D'HAMILTONIEN

Le but de l'exercice est d'introduire de façon intuitive les notions de densité de lagrangien et d'hamiltonien d'un système continu en étudiant comment évolue un système mécanique discret que l'on fait tendre vers un système continu.

A — ÉTUDE DU SYSTÈME DISCRET

On considère un ensemble infini de points matériels, de masse m , alignés le long de l'axe Ox , la distance à l'équilibre entre deux points voisins étant égale à a . Le déplacement, le long de Ox , du n -ième point matériel (dont la position à l'équilibre est na) est noté q_n . L'état du système à l'instant t est déterminé par la donnée des variables dynamiques $q_n(t)$ et $\dot{q}_n(t)$. L'énergie potentielle du système des points matériels dépend de leurs distances respectives et est égale à :

$$V = \frac{1}{2} m \omega_1^2 \sum_n (q_{n+1} - q_n)^2. \quad (1)$$

a) Ecrire le lagrangien de ce système. En déduire les équations du mouvement (équations de Lagrange).

b) Chercher une solution de la forme

$$q_n(t) = \delta e^{i(kna - \omega t)}. \quad (2)$$

Quelle relation existe-t-il entre ω et k ?

On appelle v la vitesse de phase $v = \omega/k$. Donner la valeur v_0 de v à la limite des grandes longueurs d'onde ($k \rightarrow 0$).

c) Calculer le moment conjugué p_n de la coordonnée q_n et établir l'expression de l'hamiltonien. Donner la relation de commutation canonique entre q_n et p_n .

B — SYSTÈME CONTINU OBTENU PAR PASSAGE À LA LIMITE

On fait tendre vers 0 la distance a entre deux points matériels consécutifs ainsi que la masse m de chaque point tout en conservant la masse par unité de longueur $\mu = m/a$ constante. De même, ω_1 varie de façon

que v_0 reste constant lorsque a tend vers 0. On obtient ainsi à la limite une tige continue de masse par unité de longueur μ et où la vitesse du son est v_0 .

La variable dynamique discrète $q_n(t)$, qui repérait le déplacement du point d'abscisse na , devient la variable continue $q(x, t)$ mesurant le déplacement du point de la tige dont la position à l'équilibre est x . De façon analogue, $\dot{q}_n(t)$ devient, à la limite continue, $\partial q(x, t)/\partial t$. On passe ainsi d'un indice discret n à un indice continu x .

a) Montrer qu'à la limite continue le lagrangien L peut se mettre sous la forme $L = \int dx \mathcal{L}$ où $\mathcal{L}$ est une fonction que l'on déterminera.

b) Quelle est la limite continue des équations du mouvement obtenues dans le cas discret. Ce résultat est-il identique à celui obtenu en utilisant la densité de lagrangien et les équations de Lagrange pour un système continu ?

c) Le moment conjugué $\Pi(x)$ de la variable continue $q(x)$ est défini par $\Pi(x) = \partial \mathcal{L} / \partial \dot{q}(x)$. Montrer que $\Pi(x)$ correspond à la limite de p_n/a quand a tend vers 0. Ecrire l'hamiltonien du système continu sous la forme

$H = \int dx \mathcal{H}$ et donner l'expression de la densité d'hamiltonien $\mathcal{H}$.

d) Indiquer pourquoi la relation de commutation $[q_n, p_n] = i\hbar \delta_{nn'}$ du cas discret devient $[q(x), \Pi(x')] = i\hbar \delta(x - x')$ dans le cas continu.

Solution

A - a) Le lagrangien de ce système de points matériels est

$$L = \sum_n \frac{1}{2} m \dot{q}_n^2 - \sum_n \frac{1}{2} m \omega_1^2 (q_{n+1} - q_n)^2. \quad (3)$$

Des relations

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_n} = m \dot{q}_n \quad (4.a)$$

$$\frac{\partial L}{\partial q_n} = m \omega_1^2 (q_{n+1} - q_n) - m \omega_1^2 (q_n - q_{n-1}) \quad (4.b)$$

nous déduisons les équations du mouvement :

$$\ddot{q}_n = \omega^2 (q_{n+1} - q_n) - \omega^2 (q_n - q_{n-1}). \quad (5)$$

b) L'expression (2) de q_n est solution de (5) si

$$-\omega^2 = \omega_1^2 [(e^{ika} - 1) - (1 - e^{-ika})] = -4 \omega_1^2 \sin^2 \frac{ka}{2}. \quad (6)$$

Calculons la vitesse de phase et sa limite v_0 quand $k \rightarrow 0$

$$v = \frac{2 \omega_1}{k} \sin \frac{ka}{2} \quad (7)$$

$$v_0 = \omega_1 a. \quad (8)$$

c) En utilisant les résultats de la partie A.1 du chapitre II, nous obtenons de façon immédiate

$$p_n = m\dot{q}_n \quad (9.a)$$

$$\begin{aligned} H &= \sum_n p_n \dot{q}_n - L \\ &= \sum_n \frac{1}{2} m \dot{q}_n^2 + \sum_n \frac{1}{2} m \omega_1^2 (q_{n+1} - q_n)^2 \end{aligned} \quad (9.b)$$

$$[q_n, p_{n'}] = i\hbar \delta_{nn'}. \quad (9.c)$$

B - a) Le lagrangien (3) peut encore s'écrire

$$L = \mu \sum_n a \left[\frac{\dot{q}_n^2}{2} - \frac{v_0^2}{2} \frac{(q_{n+1} - q_n)^2}{a^2} \right] \quad (10)$$

puisque $\mu = m/a$ et $v_0 = \omega_1 a$.

Quand a tend vers 0, $(q_{n+1} - q_n)/a$ tend vers $\partial q(x)/\partial x$ et l'expression (10) de L devient :

$$L = \int dx \frac{\mu}{2} \left[(\dot{q}(x))^2 - v_0^2 \left(\frac{\partial q(x)}{\partial x} \right)^2 \right]. \quad (11.a)$$

Il apparaît ainsi une densité de lagrangien $\mathcal{L}$ donnée par

$$\mathcal{L} = \frac{\mu}{2} \left[(\dot{q}(x))^2 - v_0^2 \left(\frac{\partial q(x)}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (11.b)$$

b) L'équation du mouvement (5) peut être réécrite sous la forme

$$\ddot{q}_n = \omega_1^2 a^2 \frac{[(q_{n+1} - q_n)/a] - [(q_n - q_{n-1})/a]}{a}. \quad (12)$$

Quand $a \rightarrow 0$

$$(q_{n+1} - q_n)/a \rightarrow \frac{\partial q(x)}{\partial x} \quad (13.a)$$

$$(q_n - q_{n-1})/a \rightarrow \frac{\partial q(x - a)}{\partial x} \quad (13.b)$$

et donc l'équation (12) tend vers

$$\ddot{q}(x) = v_0^2 \frac{\partial^2 q(x)}{\partial x^2} \quad (14)$$

équation que l'on trouve également en utilisant (11.b) et l'équation de Lagrange (A.39)

c) En utilisant (11), nous trouvons

$$\Pi(x) = \mu \dot{q}(x) \quad (15)$$

qui correspond bien à la limite de p_n/a quand a tend vers 0. L'hamiltonien H du système discret

$$H = \sum_n p_n \dot{q}_n - L = a \sum_n \frac{p_n}{a} \dot{q}_n - L \quad (16.a)$$

a pour limite quand $a \rightarrow 0$

$$H = \int dx \mathcal{H} \quad (16.b)$$

$$\mathcal{H} = \Pi(x) \dot{q}(x) - \mathcal{L} \quad (16.c)$$

soit en utilisant (11.b)

$$\mathcal{H} = \frac{\Pi^2(x)}{2\mu} + \mu \frac{v_0^2}{2} \left(\frac{\partial q(x)}{\partial x} \right)^2. \quad (17)$$

d) La relation de commutation (9.c) divisée par a devient :

$$[q_n, p_{n'}/a] = i\hbar \delta_{nn'}/a. \quad (18)$$

La fonction du second membre est nulle pour $n \neq n'$ et prend, à la limite $a \rightarrow 0$, une valeur infinie pour $n = n'$. En outre, nous avons

$$\sum_{n'} a \frac{\delta_{nn'}}{a} = 1 \quad (19)$$

ce qui correspond, à la limite continue, à $\int dx' \delta(x - x') = 1$. Nous en concluons que la limite continue de (18) est

$$[q(x), \Pi(x')] = i\hbar \delta(x - x') \quad (20)$$

qui est effectivement la relation de quantification canonique (A.47.c) pour un système continu.

3. EQUATIONS DE LAGRANGE POUR LES COMPOSANTES DU CHAMP ÉLECTRO-MAGNÉTIQUE DANS L'ESPACE RÉEL

On rappelle l'expression du lagrangien standard

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 + \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3r [\mathbf{E}^2(\mathbf{r}) - c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{r})] + \int d^3r [\mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \rho(\mathbf{r}) U(\mathbf{r})]. \quad (1)$$

Trouver les équations de Lagrange pour le champ et montrer qu'elles coïncident avec les équations de Maxwell. On utilisera les composantes des champs dans l'espace réel (et non dans l'espace réciproque comme cela a été fait dans le paragraphe B.2). Les variables dynamiques des champs sont les potentiels $U(\mathbf{r})$ et $A(\mathbf{r})$ et leurs dérivées temporelles $\dot{U}(\mathbf{r})$ et $\dot{A}(\mathbf{r})$.

Solution

On remplace dans (1) $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ par :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) - \nabla U(\mathbf{r}) \quad (2.a) \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (2.b)$$

L'équation de Lagrange relative à U se déduit de la donnée de $\partial \mathcal{L} / \partial \dot{U}$, $\partial \mathcal{L} / \partial U$, $\partial \mathcal{L} / \partial (\partial_i U)$, où $\mathcal{L}$ est la densité de lagrangien :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{U}} = 0 \quad (3.a) \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial U} = -\rho \quad (3.b) \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i U)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial E_i} \frac{\partial E_i}{\partial (\partial_i U)} = -\epsilon_0 E_i \quad (3.c)$$

d'où l'équation de Lagrange

$$-\rho + \epsilon_0 \sum_i \partial_i E_i = 0 \quad (4)$$

c'est-à-dire

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}. \quad (5)$$

L'équation de Lagrange relative à A_k nécessite la connaissance de $\partial \mathcal{L} / \partial \dot{A}_k$, $\partial \mathcal{L} / \partial A_k$, $\partial \mathcal{L} / \partial (\partial_j A_k)$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_k} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial E_k} \frac{\partial E_k}{\partial \dot{A}_k} = -\epsilon_0 E_k \quad (6.a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_k} = j_k \quad (6.b)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_j A_k)} = \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial B_i} \frac{\partial B_i}{\partial (\partial_j A_k)} = -\epsilon_0 c^2 \sum_i \epsilon_{ijk} B_i \quad (6.c)$$

d'où l'équation de Lagrange

$$-\epsilon_0 \dot{E}_k = j_k + \epsilon_0 c^2 \sum_{i,j} \epsilon_{jki} \partial_j B_i \quad (7)$$

qui est la projection sur e_k de l'équation :

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \dot{\mathbf{E}} + \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \mathbf{j}. \quad (8)$$

4. EQUATIONS DE LAGRANGE POUR LE LAGRANGIEN STANDARD EN JAUGE DE COULOMB

On considère le lagrangien de l'électrodynamique en jauge de Coulomb

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - \sum_{\alpha} e_{\text{Coul}}^{\alpha} - \sum_{\alpha > \beta} \frac{q_{\alpha} q_{\beta}}{4 \pi \epsilon_0 |\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}|} + L_C \quad (1)$$

avec

$$L_C = \int d^3k \overline{\mathcal{L}}_C = \int d^3r \mathcal{L}_C \quad (2.a)$$

$$\overline{\mathcal{L}}_C = \epsilon_0 [\dot{\mathcal{A}}^* \cdot \dot{\mathcal{A}} - c^2 k^2 \mathcal{A}^* \cdot \mathcal{A}] + \mathbf{j}^* \cdot \mathcal{A} + \mathbf{j} \cdot \mathcal{A}^* \quad (2.b)$$

$$\mathcal{L}_C = \frac{\epsilon_0}{2} [\dot{\mathbf{A}}^2 - c^2 (\nabla \times \mathbf{A})^2] + \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}. \quad (2.c)$$

Ecrire les équations de Lagrange et trouver les équations du mouvement pour les variables dynamiques $(\mathbf{r}_{\alpha})_i$ des particules et $\mathcal{A}_i(\mathbf{k})$ du champ électromagnétique. Montrer, en particulier, que le terme source de l'équation d'évolution de $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ est la composante transverse $\mathbf{j}_{\perp}(\mathbf{r})$ du courant.

Solution

Considérons d'abord les variables des particules et calculons $\partial L / \partial (\mathbf{r}_{\alpha})_i$ et $\partial L / \partial (\dot{\mathbf{r}}_{\alpha})_i$. En utilisant (1), (2.a) et (2.c), nous obtenons

$$\frac{\partial L}{\partial (\mathbf{r}_{\alpha})_i} = \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{q_{\alpha} q_{\beta}}{4 \pi \epsilon_0} \frac{(\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta})_i}{|\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}|^3} + q_{\alpha} \frac{\partial}{\partial (\mathbf{r}_{\alpha})_i} [\dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}, t)] \quad (3.a)$$

$$\frac{\partial L}{\partial (\dot{\mathbf{r}}_{\alpha})_i} = m_{\alpha} (\dot{\mathbf{r}}_{\alpha})_i + q_{\alpha} \mathbf{A}_i(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \quad (3.b)$$

les derniers termes de (3) provenant du remplacement de $\mathbf{j}$ par sa forme explicite. Nous en

déduisons, en utilisant une démarche analogue à celle du paragraphe B.2.a, l'équation de Lagrange associée à $\mathbf{r}_\alpha$. En réarrangeant les termes (comme dans le § B.2.a) nous trouvons l'équation suivante du mouvement :

$$m_\alpha \ddot{\mathbf{r}}_\alpha = q_\alpha \left[\sum_{\beta \neq \alpha} \frac{q_\beta (\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta)}{4 \pi \epsilon_0 |\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta|^3} - \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha, t)}{\partial t} \right] + q_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha, t). \quad (4)$$

Considérons maintenant les deux variables $\mathcal{A}_\epsilon(\mathbf{k})$ et $\mathcal{A}_\epsilon^*(\mathbf{k})$ du champ. Calculons $\partial \overline{\mathcal{L}}_C / \partial \mathcal{A}_\epsilon^*$ et $\partial \overline{\mathcal{L}}_C / \partial \mathcal{A}_\epsilon$ en utilisant (2.b) :

$$\frac{\partial \overline{\mathcal{L}}_C}{\partial \mathcal{A}_\epsilon^*} = -\epsilon_0 c^2 k^2 \mathcal{A}_\epsilon + j_\epsilon \quad (5.a)$$

$$\frac{\partial \overline{\mathcal{L}}_C}{\partial \mathcal{A}_\epsilon} = \epsilon_0 \dot{\mathcal{A}}_\epsilon. \quad (5.b)$$

L'équation de Lagrange (A.52.b) donne alors l'équation décrivant la dynamique de $\mathcal{A}_\epsilon$

$$\ddot{\mathcal{A}}_\epsilon + c^2 k^2 \mathcal{A}_\epsilon = \frac{j_\epsilon}{\epsilon_0}. \quad (6)$$

En regroupant cette équation et celle associée à $\mathcal{A}_\epsilon^*$, nous obtenons dans l'espace réel

$$\square \mathbf{A} = \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \mathbf{j}_1. \quad (7)$$

Le terme source de l'équation d'évolution de $\mathbf{A}$ est $\mathbf{j}_1$ qui dépend de $\mathbf{j}$ de façon non locale (voir formule (B.16) du chapitre I).

5. IMPULSION ET MOMENT CINÉTIQUE D'UN CHAMP QUELCONQUE

Soit un champ défini par ses composantes $A_j(\mathbf{r})$ ($j = 1, 2, \dots, n$) supposées indépendantes. Sa dynamique est décrite par une densité de lagrangien $\mathcal{L}[\dots A_j(\mathbf{r})\dots; \dots A_j(\mathbf{r})\dots; \dots \partial_i A_j(\mathbf{r})]$ ($\partial_i = \partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z$).

a) On considère un mouvement *réel* allant de l'état du champ défini par $A_j^{(1)}(\mathbf{r})$ à l'instant t_1 , à $A_j^{(2)}(\mathbf{r})$ à l'instant t_2 . Soit S l'intégrale d'action correspondante

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \mathcal{L}(\dots A_j \dots; \dots \dot{A}_j \dots; \dots \partial_i A_j \dots) \quad (1)$$

$$\text{avec} \quad A_j(\mathbf{r})|_{t=t_1} = A_j^{(1)}(\mathbf{r}) \quad \text{et} \quad A_j(\mathbf{r})|_{t=t_2} = A_j^{(2)}(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Un autre mouvement réel infiniment voisin va dans le même intervalle de temps, d'un état $A_j^{(1)}(\mathbf{r})$ à $A_j^{(2)}(\mathbf{r})$. S' est l'intégrale d'action correspondante. On pose

$$dS = S' - S \quad (3)$$

$$dA_j^{(1)}(\mathbf{r}) = A_j^{(1)}(\mathbf{r}) - A_j^{(1)}(\mathbf{r}); \quad \text{idem pour } dA_j^{(2)}(\mathbf{r}). \quad (4)$$

En s'inspirant du complément B_{II}, calculer dS en fonction de $dA_j^{(1)}(\mathbf{r})$ et $dA_j^{(2)}(\mathbf{r})$.

b) Calculer la variation dA_j de A_j correspondant à une translation infinitésimale du champ d'une quantité η . Montrer que, si $\mathcal{L}$ est invariant par translation spatiale,

$$\mathbf{P} = - \int d^3r \sum_j \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j} (\nabla A_j) \quad (5)$$

est une constante du mouvement. Par définition, la grandeur physique $\mathbf{P}$ est appelée impulsion du champ (même si $\mathcal{L}$ n'est plus invariant par translation spatiale). On pourra là aussi s'inspirer du complément B_{II}.

c) De façon analogue, montrer que le mouvement cinétique du champ est

$$\mathbf{J} = - \int d^3r \sum_j \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j} [(\mathbf{r} \times \nabla) A_j]. \quad (6)$$

Solution

a) Soit

$$dA_j(\mathbf{r}, t) = A'_j(\mathbf{r}, t) - A_j(\mathbf{r}, t)$$

$$dS = \sum_j \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_j} dA_j(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j} d\dot{A}_j(\mathbf{r}, t) + \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i A_j)} \partial_i dA_j(\mathbf{r}, t) \right\}. \quad (7)$$

Intégrons par parties le second terme par rapport à t et le dernier par rapport à x_i . Comme les champs s'annulent à l'infini, il vient

$$dS = \sum_j \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_j} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j} \right) - \sum_i \partial_i \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i A_j)} \right) \right\} dA_j(\mathbf{r}, t) + \sum_j \int d^3r \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_j} dA_j(\mathbf{r}, t) \Big|_{t_1}^{t_2}. \quad (8)$$

L'intégrand de l'intégrale restante est le produit de $dA_j(\mathbf{r}, t)$ par un terme identiquement nul pour un mouvement réel obéissant aux équations de Lagrange. Il reste seulement le terme tout intégré sur le temps

$$\begin{aligned} dS &= \sum_j \int d^3r \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_j} dA_j(\mathbf{r}, t) \Big|_{t_1}^{t_2} \\ &= \sum_j \int d^3r \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_j} \Big|_{t=t_2} dA_j^{(2)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_j} \Big|_{t=t_1} dA_j^{(1)} \right\}. \end{aligned} \quad (9)$$

b) Dans une translation infinitésimale η , le champ A_j devient A'_j avec

$$A'_j(\mathbf{r}) = A_j(\mathbf{r} - \eta) \quad (10)$$

de sorte que

$$dA_j = A'_j(\mathbf{r}) - A_j(\mathbf{r}) = -\eta \cdot \nabla A_j(\mathbf{r}). \quad (11)$$

En particulier

$$dA_j^{(2)} = -\eta \cdot \nabla A_j^{(2)}(\mathbf{r}) \quad dA_j^{(1)} = -\eta \cdot \nabla A_j^{(1)}(\mathbf{r}). \quad (12)$$

Si la forme de $\mathcal{L}$ est invariante par translation, dS est identiquement nul pour une telle transformation. L'équation (9) entraîne alors que

$$-\eta \cdot \int d^3r \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j} \bigg|_{t_2} \nabla A_j^{(2)}(\mathbf{r}) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j} \bigg|_{t_1} \nabla A_j^{(1)}(\mathbf{r}) \right\} = 0. \quad (13)$$

L'expression (5) de l'énoncé a donc bien la même valeur en t_1 et t_2 . C'est une constante du mouvement.

c) Les variations des champs dans une rotation $d\varphi$ autour de l'axe $\mathbf{u}$ valent

$$\begin{aligned} dA_j &= -[(\mathbf{u} d\varphi \times \mathbf{r}) \cdot \nabla] A_j(\mathbf{r}) \\ &= -\mathbf{u} d\varphi \cdot (\mathbf{r} \times \nabla) A_j(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (14)$$

Le même type de démonstration qu'en (b) permet alors de montrer que si $\mathcal{L}$ est invariant par rotation, le moment cinétique du champ, donné en (6), est une constante du mouvement.

Remarquons que le moment cinétique du champ s'exprime comme l'intégrale d'une densité de moment cinétique $\mathcal{J}$, de même que l'impulsion est la somme d'une densité d'impulsion $\mathcal{P}$:

$$\mathcal{P}(\mathbf{r}) = \sum_j -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j} (\nabla A_j) \quad (15. a)$$

$$\mathcal{J}(\mathbf{r}) = \sum_j -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j} [(\mathbf{r} \times \nabla) A_j] \quad (15. b)$$

$\mathcal{P}(\mathbf{r})$ et $\mathcal{J}(\mathbf{r})$ s'expriment en fonction du champ, de son gradient et de son moment conjugué au même point $\mathbf{r}$.

6. LAGRANGIEN DE VARIABLES COMPLEXES, LINÉAIRE VIS-À-VIS DES VITESSES

Cet exercice étudie un lagrangien L dépendant d'une variable complexe z . Comme la structure de L est analogue à celle des densités de lagrangien utilisées pour décrire la dynamique des champs de matière de Schrödinger et Dirac, l'étude du présent exercice doit faciliter la compréhension et la résolution des 3 exercices suivants et des exercices 5 et 6 du chapitre V.

On considère le lagrangien suivant L qui dépend de la variable complexe z :

$$L = \frac{i\hbar}{2} (z^* \dot{z} - \dot{z}^* z) - f(z, z^*) \quad (1)$$

où f est une fonction réelle de z et z^* .

a) Ecrire les équations de Lagrange relatives à L et montrer que la donnée de $z(t_0)$ détermine complètement l'évolution du système.

b) Calculer $\partial L / \partial \dot{z}$ et $\partial L / \partial \dot{z}^*$ ainsi que

$$\tilde{H} = \dot{z} \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} + \dot{z}^* \frac{\partial L}{\partial \dot{z}^*} - L. \quad (2)$$

c) En utilisant les résultats des deux questions précédentes, montrer qu'il y a redondance de variables dynamiques dans le lagrangien (1).

d) On pose $z = x + iy$. Ecrire le lagrangien en fonction de x , y , $\dot{x}$ et $\dot{y}$. (on posera $f(z, z^*) = g(x, y)$).

e) Montrer qu'en ajoutant à L la dérivée totale par rapport au temps d'une fonction de x et de y , on peut faire disparaître $\dot{y}$ du lagrangien. On appellera L' le lagrangien ainsi obtenu.

f) Montrer, sans entrer dans le détail des calculs, qu'il est possible de trouver un lagrangien $\tilde{L}'$ dépendant seulement de x et $\dot{x}$ en éliminant y de L' à l'aide de l'équation de Lagrange relative à y . En déduire que, le long d'un mouvement réel, on a :

$$\frac{\partial \tilde{L}'}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial L'}{\partial \dot{x}}. \quad (3)$$

Que vaut le moment conjugué de x pour le lagrangien $\tilde{L}'$? Trouver l'hamiltonien H' associé à $\tilde{L}'$.

g) On procède à la quantification de la théorie bâtie sur $\tilde{L}'$. Calculer le commutateur $[x, y]$.

h) On veut exprimer les résultats précédents en fonction des variables complexes initiales z et z^* . Montrer d'abord que H' coïncide avec $\tilde{H}$. Calculer ensuite la valeur du commutateur $[z, z^*]$ obtenue après quantification. Montrer que le résultat ainsi obtenu diffère de celui que l'on aurait trouvé en quantifiant hâtivement la théorie et en prenant $\partial L / \partial \dot{z}^*$ comme moment conjugué associé à z .

Solution

a) Calculons $\partial L / \partial z^*$ et $\partial L / \partial \dot{z}^*$:

$$\frac{\partial L}{\partial z^*} = \frac{i\hbar}{2} \dot{z} - \frac{\partial f}{\partial z^*} \quad (4.a) \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{z}^*} = -\frac{i\hbar}{2} z. \quad (4.b)$$

De l'équation de Lagrange, nous déduisons l'équation du mouvement suivante :

$$i\hbar \dot{z} = \frac{\partial f}{\partial z^*} \quad (5)$$

qui est une équation du premier ordre en temps. La donnée de $z(t_0)$ détermine donc totalement l'évolution ultérieure du système.

b) $\partial L / \partial \dot{z}^*$ est donné en (4. b) et coïncide, à un facteur multiplicatif près avec z . De même $\partial L / \partial \dot{z}$ est proportionnel à z^* . En utilisant ces expressions, nous obtenons :

$$\dot{z} \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} + \dot{z}^* \frac{\partial L}{\partial \dot{z}^*} = \frac{i\hbar}{2} (\dot{z} z^* - \dot{z}^* z) \quad (6)$$

$$\tilde{H} = f(z, z^*). \quad (7)$$

c) Dans le formalisme lagrangien, l'évolution du système est déterminée par la donnée des coordonnées et des vitesses à l'instant initial. Le fait que la donnée de $z(t_0)$ suffise à déterminer l'évolution du système prouve que l'on ne peut pas considérer z , z^* , $\dot{z}$ et $\dot{z}^*$ comme des variables indépendantes. De même, les moments conjugués des variables z et z^* coïncident (à un facteur multiplicatif près) avec ces variables et ne peuvent donc être considérés comme des variables indépendantes, ce qui empêche de bâtir une théorie hamiltonienne à partir de $\tilde{H}$.

d) En remplaçant z par $x + iy$, nous trouvons

$$z^* \dot{z} - \dot{z}^* z = -2i(y\dot{x} - x\dot{y}) \quad (8)$$

$$L = \hbar(y\dot{x} - x\dot{y}) - g(x, y). \quad (9)$$

e) Considérons $L' = L + du(x, y)/dt$ avec

$$u(x, y) = \hbar xy \quad (10)$$

on obtient immédiatement

$$L' = 2\hbar y\dot{x} - g(x, y). \quad (11)$$

f) L'équation de Lagrange relative à y s'écrit :

$$\frac{\partial L'}{\partial y} = 0 \quad (12)$$

c'est-à-dire

$$2\hbar\dot{x} - \frac{\partial}{\partial y}g(x, y) = 0. \quad (13)$$

La résolution de cette équation permet d'exprimer à chaque instant y en fonction de x et de $\dot{x}$. Si nous reportons cette valeur dans L' , nous obtenons un nouveau lagrangien $\tilde{L}$ qui est fonction exclusivement de x et de $\dot{x}$. Calculons $\partial \tilde{L}/\partial \dot{x}$

$$\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial L'}{\partial \dot{x}} + \frac{\partial L'}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \dot{x}}. \quad (14)$$

L'égalité (3) de l'énoncé découle de (14) et (12). Cette égalité permet d'obtenir, compte tenu de (11),

$$p_x = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial L'}{\partial \dot{x}} = 2\hbar y \quad (15)$$

où y est la fonction de x et $\dot{x}$ déterminée par (13). L'hamiltonien H' associé à $\tilde{L}$ est égal à :

$$\begin{aligned} H' &= \dot{x}p_x - \tilde{L} \\ &= 2\hbar\dot{x}y - (2\hbar\dot{x}y - g(x, y)) \\ &= g(x, y) = g(x, p_x/2\hbar). \end{aligned} \quad (16)$$

g) Sachant que $[x, p_x] = i\hbar$, nous obtenons en utilisant (15)

$$[x, y] = \frac{i}{2}. \quad (17)$$

h) La comparaison de (16) et de (7) montre que H' et $\tilde{H}$ sont égaux.

Calculons le commutateur $[z, z^+]$ en utilisant (17) :

$$[z, z^+] = [x + iy, x - iy] = i[y, x] - i[x, y] \quad (18)$$

soit

$$[z, z^+] = 1. \quad (19)$$

Si nous avions pris $\partial L/\partial \dot{z}^*$ comme moment conjugué de z , nous aurions obtenu en appliquant la relation (A. 35. c) un commutateur $[z, z^+]$ égal à 2 au lieu de 1. Ceci montre qu'il faut prendre des précautions au niveau de la quantification de la théorie quand il y a surabondance de variables dynamiques. En revanche, nous notons que, si l'on est conscient de ces difficultés, il est possible de calculer l'hamiltonien à l'aide de la formule (2), à condition de se souvenir que z et z^+ satisfont à la relation (19).

7. DESCRIPTION LAGRANGIENNE ET HAMILTONIENNE DU CHAMP DE MATIÈRE DE SCHRÖDINGER

On considère le lagrangien $L = \int d^3r \mathcal{L}$ avec

$$\mathcal{L} = \frac{i\hbar}{2} (\psi^* \dot{\psi} - \dot{\psi}^* \psi) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi - V(r) \psi^* \psi. \quad (1)$$

Dans ce lagrangien $\psi(r)$ est considéré comme un champ complexe classique, appelé champ de matière de Schrödinger. Le but de l'exercice est tout d'abord de dériver l'équation de Schrödinger du lagrangien (1), puis de montrer que les grandeurs physiques du champ (énergie, impulsion) apparaissent comme les valeurs moyennes dans l'état $\psi(r)$ des opérateurs habituels de la mécanique quantique.

a) Montrer que les équations de Lagrange associées à (1) coïncident avec l'équation de Schrödinger.

b) L'équation de Schrödinger étant une équation du premier ordre en temps, la donnée de $\psi(r, t_0)$ suffit à déterminer l'évolution ultérieure du système. Il s'ensuit que le lagrangien L considéré comme fonction de $\psi(r)$ et $\psi^*(r)$ et de leurs dérivées temporelles contient un nombre surabondant de variables dynamiques. Avant de chercher les moments conjugués et de passer au formalisme hamiltonien, il convient donc d'éliminer du lagrangien (1) les variables dynamiques redondantes. La démarche suivie ici étant très proche de celle effectuée sur un cas discret dans l'exercice 6, le lecteur peut avoir intérêt à étudier cet exercice au préalable.

α) Soient ψ_r et ψ_i les parties réelle et imaginaire de ψ

$$\psi(r) = \psi_r(r) + i\psi_i(r). \quad (2)$$

Exprimer $\mathcal{L}$ en fonction de $\psi_r(r)$, $\psi_i(r)$ et de leurs dérivées temporelles et spatiales.

β) Montrer qu'en ajoutant à L la dérivée par rapport au temps d'une fonction de $\psi_r(r)$ et $\psi_i(r)$ que l'on déterminera, on obtient un nouveau lagrangien L' équivalent à L et ne contenant plus $\dot{\psi}_i(r)$.

γ) Sans entrer dans le détail des calculs, montrer qu'il est possible d'utiliser l'équation de Lagrange relative à $\psi_i(r)$ pour éliminer $\dot{\psi}_i(r)$ du lagrangien L' . Le nouveau lagrangien ainsi obtenu, fonction exclusivement de $\psi_r(r)$ et $\dot{\psi}_r(r)$, est noté $\tilde{L}$.

δ) Montrer que, le long d'un mouvement réel, on a :

$$\frac{\partial L'}{\partial \dot{\psi}_r(r)} = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\psi}_r(r)} \quad (3)$$

et en déduire le moment conjugué $\Pi_r(r)$ de $\psi_r(r)$ vis-à-vis de $\tilde{L}$. Exprimer $\psi(r)$ en fonction de $\psi_r(r)$ et $\Pi_r(r)$.

c) Montrer que l'hamiltonien H associé à $\hat{L}$ peut s'écrire

$$H = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}). \quad (4)$$

d) On rappelle (voir exercice 5) que l'impulsion totale d'un champ $\psi_r(\mathbf{r})$ est égale à :

$$\mathbf{P} = - \int d^3r \Pi_r(\mathbf{r}) \nabla \psi_r(\mathbf{r}). \quad (5)$$

Montrer que l'impulsion totale du champ de matière de Schrödinger peut s'écrire :

$$\mathbf{P} = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\mathbf{r}). \quad (6)$$

On notera que les expressions (4) et (6) coïncident avec les valeurs moyennes des opérateurs hamiltonien et impulsion en mécanique quantique.

e) Pour procéder à la quantification canonique de la théorie, on remplace les champs classiques $\psi(\mathbf{r})$ et $\psi^*(\mathbf{r})$ par des opérateurs $\Psi(\mathbf{r})$ et $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$. Calculer, à l'aide des relations de commutation canoniques entre opérateurs associés à $\psi_r(\mathbf{r})$ et $\Pi_r(\mathbf{r})$, les commutateurs $[\Psi(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}')] et $[\Psi(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}')]$.$

Solution

a) Calculons les dérivées partielles de la densité de lagrangien apparaissant dans l'équation de Lagrange (A.52.b)

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*} = -\frac{i\hbar}{2} \dot{\psi} \quad (7.a) \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = \frac{i\hbar}{2} \dot{\psi}^* - V(\mathbf{r}) \psi \quad (7.b)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_j \psi)^*} = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_j \psi. \quad (7.c)$$

En portant ces expressions dans (A.52.b), nous obtenons l'équation

$$i\hbar \dot{\psi} - V(\mathbf{r}) \psi + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = 0 \quad (8)$$

qui n'est autre que l'équation de Schrödinger d'une particule de masse m dans le potentiel $V(\mathbf{r})$.

b) Pour résoudre les équations de Lagrange, il faut connaître les coordonnées et leurs vitesses à l'instant initial. Le fait que la seule donnée de $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ suffise à déterminer l'évolution ultérieure montre qu'il y a surabondance de variables dynamiques.

α) Compte tenu de (2), la densité de lagrangien (1) devient

$$\mathcal{L} = \hbar \psi_i \dot{\psi}_r - \psi_r \dot{\psi}_i - \frac{\hbar^2}{2m} [(\nabla \psi_r)^2 + (\nabla \psi_i)^2] - V(\mathbf{r}) (\psi_r^2 + \psi_i^2). \quad (9)$$

β) Considérons le lagrangien L' suivant :

$$L' = L + \frac{d}{dt} \int d^3r \hbar(\psi_r(r) \dot{\psi}_i(r)). \quad (10)$$

Il est clair que L' et L sont des lagrangiens équivalents puisque leur différence est la dérivée par rapport au temps d'une fonction des coordonnées. A partir de (9) et (10), nous obtenons pour la densité de lagrangien $\mathcal{L}'$ associée à L' :

$$\mathcal{L}' = 2 \hbar \dot{\psi}_i \dot{\psi}_r - \frac{\hbar^2}{2m} [(\nabla \psi_r)^2 + (\nabla \psi_i)^2] - V(r) (\psi_r^2 + \psi_i^2) \quad (11)$$

qui ne dépend pas de $\dot{\psi}_i$.

γ) L'équation de Lagrange relative à ψ_i

$$\frac{\partial L'}{\partial \psi_i(r)} = 0 \quad (12)$$

$$\hbar \dot{\psi}_r - V(r) \psi_i + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_i = 0 \quad (13)$$

permet d'exprimer à chaque instant $\psi_i(r)$ en fonction de $\dot{\psi}_r(r)$. En portant cette expression de $\psi_i(r)$ dans L' , nous obtenons un lagrangien $\tilde{L}$ qui ne dépend plus que de $\psi_r(r)$ et $\dot{\psi}_r(r)$.

δ) Calculons $\partial \tilde{L} / \partial \dot{\psi}_r(r)$ en fonction des dérivées fonctionnelles de L'

$$\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\psi}_r(r)} = \frac{\partial L'}{\partial \dot{\psi}_r(r)} + \frac{\partial L'}{\partial \psi_i(r)} \frac{\partial \psi_i(r)}{\partial \dot{\psi}_r(r)} \quad (14)$$

ce qui, compte tenu de l'équation de Lagrange (12), conduit bien à la relation (3). Le moment conjugué $\Pi_r(r)$ de $\psi_r(r)$ est donc égal à

$$\Pi_r(r) = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\psi}_r(r)} = \frac{\partial L'}{\partial \dot{\psi}_r(r)} \quad (15)$$

c'est-à-dire d'après (11) :

$$\Pi_r(r) = 2 \hbar \dot{\psi}_i(r). \quad (16)$$

Les équations (2) et (16) donnent alors

$$\psi(r) = \psi_r(r) + \frac{i}{2\hbar} \Pi_r(r). \quad (17)$$

c) La densité d'hamiltonien $\mathcal{H}$ est donnée par (A.45. b), ce qui, compte tenu de (11) et (16), donne :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \Pi_r(r) \dot{\psi}_r(r) - \mathcal{L}'[\psi_r, \dot{\psi}_r, \psi_i(\dot{\psi}_r)] \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} [(\nabla \psi_r)^2 + (\nabla \psi_i)^2] + V(r) [\psi_r^2 + \psi_i^2]. \end{aligned} \quad (18)$$

La formule donnant l'hamiltonien peut être transformée au moyen d'une intégration par parties

$$\int d^3r (\nabla \psi_r)^2 = - \int d^3r \psi_r \Delta \psi_r, \quad (19)$$

les champs ψ étant supposés nuls à l'infini. Nous obtenons ainsi :

$$H = \int d^3r \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi_r \Delta \psi_r + \psi_i \Delta \psi_i) + V(r) (\psi_r^2 + \psi_i^2) \right]. \quad (20)$$

En notant que :

$$\int d^3r (\psi, \Delta \psi_i - \psi_i \Delta \psi_r) = 0 \quad (21)$$

(résultat qui se démontre au moyen de deux intégrations par parties) nous pouvons réexprimer (20) en fonction de ψ et ψ^* et obtenir ainsi l'expression (4) de l'énoncé.

d) Remplaçons dans (5), $\Pi_r(r)$ par sa valeur (16). Nous obtenons ainsi :

$$P = - \int d^3r \, 2 \hbar \psi_r(r) \nabla \psi_r(r). \quad (22)$$

En exprimant $\psi_r(r)$ et $\psi_r(r)$ en fonction de $\psi(r)$ et $\psi^*(r)$, nous trouvons alors

$$P = \frac{\hbar}{2i} \left[\int d^3r \, \psi^* \nabla \psi - \int d^3r \, \psi \nabla \psi^* - \int d^3r \, \psi \nabla \psi + \int d^3r \, \psi^* \nabla \psi^* \right]. \quad (23)$$

Une intégration par parties permet de montrer que la seconde intégrale est l'opposée de la première. Quant aux deux dernières intégrales, elles conduisent à un résultat nul, puisque le terme à intégrer est de la forme $\nabla \psi^2/2$. En définitive, nous trouvons

$$P = \int d^3r \, \psi^*(r) \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(r) \quad (24)$$

formule qui coïncide avec celle de l'énoncé.

e) Partons de la relation de commutation canonique

$$[\Psi_r(r), \Pi_r(r')] = i\hbar \delta(r - r') \quad (25)$$

et exprimons, dans le commutateur $[\Psi(r), \Psi^+(r')]$, les opérateurs $\Psi(r)$ et $\Psi^+(r')$ en fonction de $\Psi_r(r)$ et $\Pi_r(r)$ à l'aide de (17). Il vient

$$\begin{aligned} [\Psi(r), \Psi^+(r')] &= [\Psi_r(r), \Psi_r(r')] + \frac{1}{4\hbar^2} [\Pi_r(r), \Pi_r(r')] - \\ &\quad - \frac{i}{2\hbar} [\Psi_r(r), \Pi_r(r')] + \frac{i}{2\hbar} [\Pi_r(r), \Psi_r(r')]. \end{aligned} \quad (26)$$

Les deux premiers commutateurs sont nuls. Les deux derniers commutateurs donnent, compte tenu de (25) :

$$[\Psi(r), \Psi^+(r')] = \delta(r - r'). \quad (27)$$

Le commutateur $[\Psi(r), \Psi(r')]$ peut être calculé de façon analogue, le résultat obtenu étant

$$[\Psi(r), \Psi(r')] = 0. \quad (28)$$

Les développements concernant les propriétés du champ de Schrödinger quantifié sont présentées dans l'exercice suivant 8. Dans la première partie de cet exercice, nous partons du commutateur (27) et montrons que les excitations élémentaires du champ quantifié ainsi obtenu correspondent à des bosons. Dans la seconde partie, nous substituons à la relation de commutation canonique (25), une relation d'anticommutation, ce qui conduit à remplacer (27) et (28) par :

$$[\Psi(r), \Psi^+(r')]_{+} = \delta(r - r') \quad (29.a)$$

$$[\Psi(r), \Psi(r')]_{+} = 0. \quad (29.b)$$

Nous montrons alors que les particules obtenues après quantification de la théorie sont des fermions.

8. QUANTIFICATION DU CHAMP DE SCHRÖDINGER

* Nous considérons le champ de matière de Schrödinger (dont les propriétés classiques ont été étudiées dans l'exercice 7). Après quantification de la théorie, les expressions classiques de l'énergie et de l'impulsion du champ deviennent des opérateurs donnés par :

$$H = \int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

$$\mathbf{P} = \int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

où $\Psi(\mathbf{r})$ est l'opérateur champ au point $\mathbf{r}$. Le but de cet exercice est de montrer que la quantification du champ peut être réalisée, soit à partir de relations de commutation entre opérateurs et moments conjugués (§ A), soit à partir de relations d'anticommutation (§ B). Un autre but de cet exercice est de montrer que les particules associées au champ sont des bosons dans le premier cas, des fermions dans le second (*).

A - Nous postulons dans cette partie que les champs Ψ et $\Psi^\dagger$ obéissent aux relations suivantes :

$$[\Psi(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.a)$$

$$[\Psi(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}')] = 0 \quad (3.b)$$

a) L'équation de Heisenberg pour l'opérateur Ψ s'écrit :

$$i\hbar \dot{\Psi}(\mathbf{r}) = [\Psi(\mathbf{r}), H]. \quad (4)$$

Calculer le commutateur de (4) en utilisant l'expression (1) de H et les relations (3) et montrer que l'équation (4) coïncide alors avec l'équation de Schrödinger pour l'opérateur Ψ .

b) Montrer que le commutateur $[\Psi(\mathbf{r}), \mathbf{P}]$, où $\mathbf{P}$ est défini par la relation (2), est égal à $-i\hbar \nabla \Psi(\mathbf{r})$. Quels sont les opérateurs de translation spatiale et temporelle pour le champ quantique $\Psi(\mathbf{r})$.

c) On pose $\rho(\mathbf{r}) = \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r})$. Montrer que $\rho(\mathbf{r})$ vérifie une équation de la forme

$$\frac{d}{dt} \rho(\mathbf{r}) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0 \quad (5)$$

où $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ est un opérateur que l'on calculera.

d) On appelle $\varphi_n(\mathbf{r})$ les fonctions propres de l'opérateur $[-(\hbar^2/2m) \Delta + V(\mathbf{r})]$ dont le spectre sera supposé discret :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi_n(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \varphi_n(\mathbf{r}) = E_n \varphi_n(\mathbf{r}). \quad (6)$$

(*) Voir aussi Schiff (chap. XIII).

Soient c_n et c_n^+ les opérateurs définis par la relation

$$c_n = \int d^3r \varphi_n^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \quad (7)$$

et la relation adjointe. Calculer les commutateurs $[c_n, c_m]$ et $[c_n, c_m^+]$.

e) Montrer que l'opérateur H , défini en (1), peut se mettre sous la forme

$$H = \sum_n E_n c_n^+ c_n. \quad (8)$$

f) On suppose que dans l'espace des états du champ quantique où agissent les opérateurs $\Psi(\mathbf{r})$, $\Psi^+(\mathbf{r})$, c_n , c_n^+ , il existe un état $|0\rangle$ appelé le vide tel que pour tout n

$$c_n |0\rangle = 0 \quad (9)$$

Cet état est supposé normé ($\langle 0|0\rangle = 1$). Montrer que $(c_n^+)^p |0\rangle$, où p est un entier positif, est un état propre de H , de valeur propre pE_n . En déduire une interprétation corpusculaire des excitations élémentaires du champ quantique.

g) Soit N l'opérateur défini par :

$$N = \int d^3r \Psi^+(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}). \quad (10)$$

Montrer que N est égal à $\sum_m N_m$ où $N_m = c_m^+ c_m$. A quoi est égal $\dot{N}$?

Comment interprétez-vous ce résultat ?

B - Nous postulons maintenant que les champs Ψ et Ψ^+ obéissent aux relations d'anticommutation :

$$[\Psi(\mathbf{r}), \Psi^+(\mathbf{r}')]_+ = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (11.a)$$

$$[\Psi(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}')]_+ = 0. \quad (11.b)$$

a) A partir de l'équation de Heisenberg (4) pour l'opérateur Ψ et des relations (11), montrer que $\Psi(\mathbf{r})$ est toujours solution de l'équation de Schrödinger. Calculer également le commutateur $[\Psi(\mathbf{r}), \mathbf{P}]$ et montrer qu'il a la même valeur que dans la partie précédente. Que peut-on en conclure ?

b) Montrer que la relation (5) demeure valable. Calculer le commutateur $[\rho(\mathbf{r}), \rho(\mathbf{r}')]$. Que peut-on en conclure sur la compatibilité des mesures de ces grandeurs ? Ce résultat dépend-il des relations de commutation ou d'anticommutation entre $\Psi(\mathbf{r})$ et $\Psi^+(\mathbf{r}')$ postulées pour quantifier le champ ?

c) En utilisant (6) et la définition (7) des opérateurs c_n , calculer les anti-commutateurs $[c_n, c_m]_+$ et $[c_n, c_m^\dagger]_+$. Montrer que l'expression (8) de H en fonction des opérateurs $c_n^\dagger c_n$ est encore valable.

d) On pose (comme dans la partie A) $N_m = c_m^\dagger c_m$. Montrer que cet opérateur vérifie la relation

$$N_m^2 = N_m. \quad (12)$$

En déduire que les valeurs propres de N_m ne peuvent être égales qu'à 0 ou 1.

e) Montrer que $c_m^\dagger |0\rangle$ (le vide $|0\rangle$ étant défini comme dans la partie A) est un état à une particule d'énergie E_m . Peut-il y avoir des états contenant plus d'une particule dans l'état E_m ? Que peut-on en conclure sur la nature (bosons ou fermions) des particules associées au champ?

Solution

A — CHAMP DE BOSONS

a) Pour calculer le commutateur $[\Psi(r), H]$, nous utilisons la relation

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \quad (13)$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} [\Psi(r), H] = & \int d^3r' [\Psi(r), \Psi^\dagger(r')] \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{r'} + V(r') \right) \Psi(r') + \\ & + \int d^3r' \Psi^\dagger(r') \left[\Psi(r), \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{r'} + V(r') \right) \Psi(r') \right]. \end{aligned} \quad (14)$$

La relation (3. b) entraîne que le second terme de (14) est nul. Le premier terme se calcule à l'aide de (3. a) et il vient :

$$[\Psi(r), H] = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right) \Psi(r) \quad (15)$$

c'est-à-dire encore, d'après (4)

$$i\hbar \dot{\Psi}(r) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right) \Psi(r). \quad (16)$$

L'équation d'évolution de l'opérateur champ $\Psi(r)$ a la même forme que l'équation d'évolution du champ classique $\psi(r)$ qui est l'équation de Schrödinger. Notons bien que $\Psi(r)$ est ici un opérateur de champ et non une fonction d'onde. C'est pourquoi la procédure que nous suivons ici est appelée parfois « seconde quantification ».

b) Le calcul de $[\Psi(r), \mathbf{P}]$ est analogue à celui de $[\Psi(r), H]$:

$$[\Psi(r), \mathbf{P}] = \int d^3r' [\Psi(r), \Psi^\dagger(r')] \frac{\hbar}{i} \nabla_{r'} \Psi(r') + \int d^3r' \Psi^\dagger(r') \left[\Psi(r), \frac{\hbar}{i} \nabla_{r'} \Psi(r') \right]. \quad (17)$$

Le second terme de (17) est nul à cause de (3. b) et le premier terme vaut, compte tenu de (3. a)

$$[\Psi(r), \mathbf{P}] = -i\hbar \nabla \Psi(r). \quad (18)$$

Cette relation montre que $\mathbf{P}$ est le générateur des translations spatiales de l'opérateur champ

Ψ (tout comme H est le générateur des translations temporelles). Il s'ensuit que

$$\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}, t) = e^{-i\mathbf{P} \cdot \mathbf{a}/\hbar} \Psi(\mathbf{r}, t) e^{i\mathbf{P} \cdot \mathbf{a}/\hbar} \quad (19.a)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \tau) = e^{iH\tau/\hbar} \Psi(\mathbf{r}, t) e^{-iH\tau/\hbar}. \quad (19.b)$$

c) Calculons $\dot{\rho}(\mathbf{r})$

$$\frac{d}{dt} \rho(\mathbf{r}) = \dot{\Psi}^+(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) + \Psi^+(\mathbf{r}) \dot{\Psi}(\mathbf{r}). \quad (20)$$

En utilisant (16) et l'équation adjointe, nous obtenons

$$\frac{d}{dt} \rho(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2mi} [(\Delta \Psi^+(\mathbf{r})) \Psi(\mathbf{r}) - \Psi^+(\mathbf{r}) \Delta \Psi(\mathbf{r})] \quad (21)$$

le terme dépendant de $V(\mathbf{r})$ disparaissant. Transformons le terme du second membre de (21) en introduisant

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^+(\mathbf{r}) (\nabla \Psi(\mathbf{r})) - (\nabla \Psi^+(\mathbf{r})) \Psi(\mathbf{r})]. \quad (22)$$

Il vient $\partial \rho / \partial t = -\nabla \cdot \mathbf{j}$, qui coïncide avec l'équation (5) de l'énoncé et qui généralise la relation de continuité (conservation de la probabilité) aux opérateurs quantiques.

d) Le commutateur $[c_n, c_m]$ est égal à :

$$[c_n, c_m] = \int d^3r d^3r' \varphi_n^*(\mathbf{r}) \varphi_m^*(\mathbf{r}') [\Psi(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}')] \quad (23)$$

et est donc nul d'après (3.b)

$$[c_n, c_m] = 0. \quad (24)$$

Le commutateur $[c_n, c_m^+]$ se calcule de façon analogue :

$$[c_n, c_m^+] = \int d^3r d^3r' \varphi_n^*(\mathbf{r}) \varphi_m(\mathbf{r}') [\Psi(\mathbf{r}), \Psi^+(\mathbf{r}')] \quad (25)$$

ce qui, d'après (3.a), est égal à

$$\begin{aligned} [c_n, c_m^+] &= \int d^3r d^3r' \varphi_n^*(\mathbf{r}) \varphi_m(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &= \int d^3r \varphi_n^*(\mathbf{r}) \varphi_m(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (26)$$

Comme les $\{\varphi_n(\mathbf{r})\}$ sont orthonormées, on a :

$$[c_n, c_m^+] = \delta_{n,m}. \quad (27)$$

e) Multiplions les deux membres de (7) par $\varphi_n(\mathbf{r})$ et sommons sur n . Compte tenu de la relation de fermeture, nous obtenons alors :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n \varphi_n(\mathbf{r}) c_n \quad (28)$$

équation qui ressemble beaucoup à celle donnant le développement d'une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$ sur une base orthonormée $\{\varphi_n(\mathbf{r})\}$. Notons bien cependant que, dans (28), $\Psi(\mathbf{r})$ et c_n sont des opérateurs. En portant cette expression dans (1) et en utilisant (6), nous trouvons

$$H = \sum_{n,m} \int d^3r \varphi_m^*(\mathbf{r}) E_n \varphi_n(\mathbf{r}) c_m^+ c_n \quad (29)$$

soit encore; en utilisant l'orthonormalisation des fonctions d'onde $\varphi_n(\mathbf{r})$,

$$H = \sum_n E_n c_n^+ c_n. \quad (30)$$

f) La forme (8) de H et les relations de commutation (24) et (27) sont celles d'un ensemble d'oscillateurs harmoniques indépendants. Une fois postulée l'existence du vide $|0\rangle$, les opérations mathématiques sont identiques à celles utilisées dans le cas de l'oscillateur harmonique. Nous savons alors que $[(c_n^\dagger)^p / \sqrt{p!}] |0\rangle$ est un état propre (normalisé) de H de valeur propre pE_n . En faisant agir p fois l'opérateur création $c_n^\dagger$ sur le vide, il est possible d'obtenir un état du système dont l'énergie est p fois l'énergie E_n . Ceci conduit à interpréter cet état du champ comme un état à p particules dans l'état E_n . Le fait que p puisse être un entier quelconque, positif ou nul, est caractéristique d'un système de bosons.

g) En utilisant (28), nous transformons (10) en :

$$N = \sum_{n,m} \int d^3r \varphi_m^*(\mathbf{r}) \varphi_n(\mathbf{r}) c_m^\dagger c_n. \quad (31)$$

L'orthonormalisation des fonctions d'onde donne alors :

$$N = \sum_m c_m^\dagger c_m = \sum_m N_m. \quad (32)$$

Pour calculer $\dot{N}_m$, partons de l'équation de Schrödinger (16) et décomposons $\Psi(\mathbf{r})$ selon la formule (28); nous trouvons

$$i\hbar \sum_m \varphi_m(\mathbf{r}) \dot{c}_m = \sum_m \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \varphi_m(\mathbf{r}) c_m \quad (33)$$

soit encore, en utilisant (6) et le fait que les $\{\varphi_m(\mathbf{r})\}$ forment une base

$$i\hbar \dot{c}_m = E_m c_m. \quad (34)$$

La dérivation de N_m par rapport au temps donne alors

$$\dot{N}_m = \dot{c}_m^\dagger c_m + c_m^\dagger \dot{c}_m \quad (35)$$

c'est-à-dire encore, compte tenu de (34),

$$\dot{N}_m = 0. \quad (36)$$

Nous avons vu dans la question f) que N_m pouvait être interprété comme l'opérateur nombre de particules dans l'état d'énergie E_m (puisque l'action de N_m sur $(c_m^\dagger)^p |0\rangle$ donne p fois ce même état). Il s'ensuit que $N = \sum_m N_m$ peut être interprété comme l'opérateur nombre total de particules. L'équation (36) montre que pour le champ de Schrödinger quantifié, le nombre de particules dans l'état d'énergie E_m reste constant. Notons aussi que N peut s'écrire $N = \int d^3r \rho(\mathbf{r})$ et que la conservation de N peut être déduite directement de l'équation de continuité (5).

B — CHAMP DE FERMIONS

a) Pour calculer $[\Psi(\mathbf{r}), H]$, nous utilisons la relation suivante reliant le commutateur $[A, BC]$ aux anticommutateurs $[A, B]_+$ et $[A, C]_+$

$$[A, BC] = [A, B]_+ C - B[A, C]_+. \quad (37)$$

Nous obtenons ainsi

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\Psi}(\mathbf{r}) &= [\Psi(\mathbf{r}), H] \\ &= \int d^3r' [\Psi(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}')]_+ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{r'} + V(\mathbf{r}') \right) \Psi(\mathbf{r}') - \\ &\quad - \int d^3r' \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \left[\Psi(\mathbf{r}), \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{r'} + V(\mathbf{r}') \right) \Psi(\mathbf{r}') \right]_+. \end{aligned} \quad (38)$$

Le second terme de (38) est nul à cause de (11 . b), le premier se calcule à l'aide de (11 . a) et conduit à

$$i\hbar \dot{\Psi}(\mathbf{r}) = [\Psi(\mathbf{r}), H] = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}). \quad (39)$$

Il apparaît ainsi que, tout comme dans la partie A, l'opérateur $\Psi(\mathbf{r})$ obéit à l'équation de Schrödinger.

Le calcul de $[\Psi(\mathbf{r}), \mathbf{P}]$ est analogue au précédent

$$[\Psi(\mathbf{r}), \mathbf{P}] = \int d^3r' [\Psi(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}')]_+ \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}'} \Psi(\mathbf{r}') - \int d^3r' \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \left[\Psi(\mathbf{r}), \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}'} \Psi(\mathbf{r}') \right]_+. \quad (40)$$

Le second terme est nul par suite de la relation (11 . b); le premier se calcule à l'aide de (11 . a) :

$$[\Psi(\mathbf{r}), \mathbf{P}] = -i\hbar \nabla \Psi(\mathbf{r}). \quad (41)$$

Nous trouvons là aussi une relation identique à celle de la partie A. Il apparaît ainsi clairement que la quantification de la théorie au moyen des anticommutateurs est compatible avec le fait que les opérateurs H et $\mathbf{P}$ introduits en (1) et (2) doivent être les générateurs des translations temporelles et spatiales.

b) La démonstration de la relation (5) ne fait intervenir que l'équation de Schrödinger (39). Elle est donc identique à celle de la partie A. Calculons maintenant le commutateur $[\rho(\mathbf{r}), \rho(\mathbf{r}')]$

$$[\rho(\mathbf{r}), \rho(\mathbf{r}')] = [\Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}')] \\ = \Psi^\dagger(\mathbf{r}) [\Psi(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}')] + [\Psi^\dagger(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}')] \Psi(\mathbf{r}). \quad (42)$$

En utilisant la relation (37), nous réécrivons (42)

$$[\rho(\mathbf{r}), \rho(\mathbf{r}')] = \Psi^\dagger(\mathbf{r}) [\Psi(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}')]_+ \Psi(\mathbf{r}') - \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}') [\Psi(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}')]_+ + \\ + [\Psi^\dagger(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}')]_+ \Psi(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}) - \Psi^\dagger(\mathbf{r}') [\Psi^\dagger(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}')]_+ \Psi(\mathbf{r}) \quad (43)$$

que nous simplifions en utilisant les relations d'anticommutation (11) :

$$[\rho(\mathbf{r}), \rho(\mathbf{r}')] = \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0. \quad (44)$$

On constate donc que $\rho(\mathbf{r})$ et $\rho(\mathbf{r}')$ commutent, bien que $\Psi(\mathbf{r})$ et $\Psi(\mathbf{r}')$ anticommulent. Ce résultat sur l'opérateur associé à la densité de particules se comprend bien physiquement. Il est en effet satisfaisant que deux opérateurs associés à des grandeurs physiques locales, pris au même instant et en des points différents, commutent entre eux (voir la remarque (i) à la fin du § A . 2 . g). Un résultat identique pour $[\rho(\mathbf{r}), \rho(\mathbf{r}')]_+$ aurait bien entendu été obtenu si l'on avait postulé les relations de commutation (3) au lieu des relations (11).

c) L'anticommutateur $[c_n, c_m]_+$ est égal à

$$[c_n, c_m]_+ = \int d^3r d^3r' \varphi_n^*(\mathbf{r}) \varphi_m^*(\mathbf{r}') [\Psi(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}')]_+ = 0. \quad (45)$$

à cause de (11 . b). Pour l'anticommutateur $[c_n, c_m^\dagger]_+$, un calcul analogue, utilisant (11 . a), donne

$$[c_n, c_m^\dagger]_+ = \delta_{n,m}. \quad (46)$$

La démonstration de l'égalité (8) faite dans la question e) de la partie A ne fait pas intervenir les relations de commutation et reste donc valable.

d) D'après la définition de N_m , nous avons

$$N_m^2 = c_m^\dagger c_m c_m^\dagger c_m. \quad (47)$$

En utilisant l'anticommutateur $[c_m, c_m^+]_+ = 1$, nous obtenons

$$N_m^2 = c_m^+ c_m - c_m^+ c_m^+ c_m c_m \quad (48)$$

Or, le fait que l'anticommutateur $[c_m, c_m^+]_+$ soit nul entraîne que $c_m c_m = 0$, ce qui démontre (12). Les valeurs propres de l'opérateur hermitique N_m vérifient donc l'équation

$$\lambda^2 = \lambda \quad (49)$$

et ne peuvent valoir que 0 ou 1.

e) Calculons l'action de N_m sur $c_m^+ |0\rangle$

$$N_m c_m^+ |0\rangle = c_m^+ c_m c_m^+ |0\rangle. \quad (50)$$

En utilisant la relation d'anticommutation $[c_m, c_m^+]_+ = 1$ et le fait que $c_m |0\rangle = 0$, nous obtenons

$$N_m c_m^+ |0\rangle = c_m^+ |0\rangle \quad (51)$$

$c_m^+ |0\rangle$ est donc état propre de N_m associé à la valeur propre 1. Il est clair en outre que $c_m^+ |0\rangle$ est non nul : sa norme $\langle 0 | c_m c_m^+ |0\rangle$ peut être calculée à l'aide de $[c_m, c_m^+]_+ = 1$ et est égale à 1. Par contre, comme c_m^+ anticommute avec lui-même, $(c_m^+)^2 = 0$, et plus généralement $(c_m^+)^p = 0$ si $p > 1$. Il est donc impossible de construire, comme nous l'avons fait dans la partie A, des états contenant plus d'une particule dans le même état E_m . Un tel résultat ne fait que traduire le fait que les valeurs propres de N_m se réduisent à 0 et 1. Il exprime que les particules associées au champ quantifié sont des fermions.

9. EQUATION DE SCHRÖDINGER D'UNE PARTICULE DANS UN CHAMP ÉLECTRO-MAGNÉTIQUE : ARBITRAIRE DE PHASE ET INVARIANCE DE JAUGE

On considère le lagrangien $L = \int d^3r \mathcal{L}$ où $\mathcal{L}$ est la densité de lagrangien réelle

$$\mathcal{L} = \frac{i\hbar}{2} (\psi^* \dot{\psi} - \dot{\psi}^* \psi) - \frac{1}{2m} \left[\left(-\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right) \psi^* \right] \cdot \left[\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right) \psi \right] - (V(r) + qU) \psi^* \psi. \quad (1)$$

Dans ce lagrangien, $\psi(\mathbf{r})$ est un champ classique complexe. Le but de l'exercice est de montrer d'abord que les équations de Lagrange associées à L coïncident avec l'équation de Schrödinger d'une particule dans un champ électromagnétique défini par les potentiels $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ et $U(\mathbf{r}, t)$. On montrera ensuite que toute modification de la phase du champ de matière $\psi(\mathbf{r})$ est équivalente à un changement de jauge du champ électromagnétique.

- Trouver les équations de Lagrange associées à (1).
- On effectue le changement de variable

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi'(\mathbf{r}, t) e^{-iqF(\mathbf{r}, t)/\hbar} \quad (2)$$

où $F(\mathbf{r}, t)$ est une fonction quelconque de $\mathbf{r}$ et de t . Exprimer $\mathcal{L}$ en fonction de ψ' et F et montrer que ce changement de phase de ψ est mathématiquement équivalent à un changement de jauge.

Solution

a) Pour expliciter l'équation de Lagrange (A.52.b), il faut calculer les dérivées partielles suivantes :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*} = -\frac{i\hbar}{2} \dot{\psi} \quad (3.a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} = \frac{i\hbar}{2} \ddot{\psi} + \sum_j \frac{qA_j}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} - qA_j \right) \dot{\psi} - (V + qU) \psi \quad (3.b)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_j \psi^*)} = \frac{\hbar}{2m} i \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} - qA_j \right) \dot{\psi}. \quad (3.c)$$

Nous obtenons alors l'équation de Lagrange

$$i\hbar \ddot{\psi} - (V + qU) \psi - \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right)^2 \dot{\psi} = 0 \quad (4)$$

qui est bien l'équation de Schrödinger d'une particule dans un champ électromagnétique extérieur.

b) Dans la transformation (2), les dérivées temporelles et spatiales de ψ deviennent :

$$\dot{\psi} = \dot{\psi}' e^{-iqF/\hbar} - i \frac{q}{\hbar} \dot{F} \psi' e^{-iqF/\hbar} \quad (5.a)$$

$$\partial_j \psi = (\partial_j \psi') e^{-iqF/\hbar} - i \frac{q}{\hbar} \frac{\partial F}{\partial x_j} \psi' e^{-iqF/\hbar}. \quad (5.b)$$

Le report de ces expressions dans la densité de lagrangien (1) donne

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = \frac{i\hbar}{2} (\dot{\psi}'^* \dot{\psi}' - \dot{\psi}'^* \dot{\psi}') - \frac{1}{2m} \left[\left(-\frac{\hbar}{i} \nabla - q(\mathbf{A} + \nabla F) \right) \dot{\psi}'^* \right] \cdot \left[\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q(\mathbf{A} + \nabla F) \right) \dot{\psi}' \right] \\ - [V + q(U - \dot{F})] \dot{\psi}'^* \dot{\psi}'. \quad (6) \end{aligned}$$

Nous constatons que la même densité de lagrangien aurait pu être obtenue en conservant le champ ψ et en faisant un changement de jauge sur les potentiels $\mathbf{A}$ et U

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla F \quad (7.a) \quad U' = U - \dot{F}. \quad (7.b)$$

CHAPITRE III

Electrodynamique quantique en jauge de Coulomb

Ce chapitre est consacré à une présentation générale de l'électrodynamique quantique en jauge de Coulomb. Il s'agit de mettre en place les éléments de base d'une description *quantique* des interactions entre particules chargées (non relativistes) et photons et de souligner quelques aspects physiques importants de la théorie ainsi obtenue.

Nous commençons dans la partie A par introduire le cadre général d'une telle théorie quantique. Nous rappelons les *relations de commutation fondamentales* (introduites de manière élémentaire à la fin du chapitre I, et justifiées de manière rigoureuse au chapitre II), explicitons l'expression des opérateurs quantiques associés aux diverses grandeurs physiques du système, et analysons la structure de *l'espace des états* dans lequel agissent ces opérateurs.

Le problème de *l'évolution temporelle* est abordé ensuite dans la partie B. Dans le *point de vue de Schrödinger*, le vecteur d'état du système global évolue au cours du temps. Les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution entre deux états du système sont les amplitudes de transition entre ces deux états. Le *point de vue de Heisenberg* conduit à des équations d'évolution des diverses observables du système qui sont très analogues aux équations classiques. En particulier, les équations de Maxwell-Lorentz demeurent valables entre opérateurs. Un autre intérêt de ce point de vue est de permettre d'introduire aisément des fonctions statistiques importantes comme les fonctions de corrélation symétriques ou les susceptibilités linéaires.

La partie suivante C est consacrée à une discussion de quelques aspects physiques importants du champ libre quantifié. Divers types de mesures possibles et divers types d'états quantiques sont passés en revue et analysés. On montre en particulier que les excitations élémentaires du champ quantique peuvent être analysées en termes de particules ayant une

énergie et une impulsion bien définies, *les photons*. Un état particulièrement important est l'état fondamental du champ, appelé encore le « *vide* » (de photons). On introduit également les *états cohérents ou quasi classiques* qui sont les états quantiques du champ qui se rapprochent le plus possible d'un état classique donné. Mentionnons enfin que la discussion de la partie C est prolongée, dans le complément A_{III}, par une analyse des phénomènes *d'interférence* (à un ou plusieurs photons) et de *la dualité onde-corpuscule* dans le cadre de la théorie quantique du rayonnement.

On aborde enfin, dans la partie D, l'étude de *l'hamiltonien d'interaction entre matière et rayonnement*. Les divers termes de cet hamiltonien sont explicités et leurs ordres de grandeur évalués. Les règles de sélection auxquelles obéissent les éléments de matrice sont également précisées.

Mentionnons pour terminer que l'hamiltonien global du système particules + champ peut être transformé et mis sous forme plus commode à *la limite des grandes longueurs d'onde*. Les compléments A_{IV} et B_{IV} du chapitre suivant introduisent et utilisent de manière élémentaire la transformation unitaire qui permet de passer de l'hamiltonien habituel (« en $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ ») à l'hamiltonien dipolaire électrique (« en $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$ »). Il s'agit là d'un exemple de transformation permettant de passer de l'électrodynamique en jauge de Coulomb à une autre formulation équivalente, problème qui est étudié de manière plus approfondie dans le chapitre IV lui-même.

A — CADRE GÉNÉRAL

1. Variables dynamiques fondamentales. Relations de commutation

Les variables dynamiques fondamentales de chaque particule α sont la position $\mathbf{r}_\alpha$ et l'impulsion $\mathbf{p}_\alpha$ de cette particule, satisfaisant aux relations de commutation

$$\begin{cases} [r_{\alpha i}, r_{\beta j}] = [p_{\alpha i}, p_{\beta j}] = 0 \\ [r_{\alpha i}, p_{\beta j}] = i\hbar \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

$i, j = x, y, z.$

Comme nous l'avons déjà indiqué à la fin du chapitre I (puis justifié au chapitre II), les variables normales $\{\alpha_i, \alpha_i^*\}$, qui caractérisent l'état du champ transverse classique, deviennent, lors de la quantification, les opérateurs de destruction et de création a_i et a_i^+ des oscillateurs harmoniques fictifs associés aux divers modes du champ, et satisfont aux relations de commutation

$$\begin{cases} [a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0 \\ [a_i, a_j^+] = \delta_{ij}. \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Remarque

Nous utilisons implicitement, dans ce qui précède, le point de vue de Schrödinger, où les opérateurs sont indépendants du temps. Les relations de commutation (A.1) et (A.2) demeurent cependant valables dans le point de vue de Heisenberg pourvu toutefois que les deux opérateurs apparaissant dans le commutateur soient pris au même instant.

2. Expression des opérateurs associés aux diverses grandeurs physiques du système

Commençons par les diverses observables de champ. Les opérateurs associés aux champs transverses $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r})$, $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, $\mathbf{A}_\perp(\mathbf{r})$, en chaque point $\mathbf{r}$ de l'espace, s'obtiennent en remplaçant, dans les développements des grandeurs classiques correspondantes (voir expressions (C.38), (C.39) et (C.37) du chap. I), α_i par a_i et α_i^* par a_i^+

$$\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}) = \sum_i i\mathcal{E}_{\omega_i} [a_i \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} - a_i^+ \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}] \quad (\text{A.3})$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \sum_i i\mathcal{B}_{\omega_i} [a_i (\boldsymbol{\kappa}_i \times \boldsymbol{\varepsilon}_i) e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} - a_i^+ (\boldsymbol{\kappa}_i \times \boldsymbol{\varepsilon}_i) e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}] \quad (\text{A.4})$$

$$\mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}) = \sum_i \mathcal{A}_{\omega_i} [a_i \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + a_i^+ \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}] \quad (\text{A.5})$$

avec

$$\mathcal{E}_{\omega_i} = \left[\frac{\hbar \omega_i}{2 \varepsilon_0 L^3} \right]^{1/2} \quad \mathcal{B}_{\omega_i} = \frac{\mathcal{E}_{\omega_i}}{c} \quad \mathcal{A}_{\omega_i} = \frac{\mathcal{E}_{\omega_i}}{\omega_i}. \quad (\text{A.6})$$

Le champ électrique total $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ est donné par

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_\parallel(\mathbf{r}) \quad (\text{A.7})$$

où

$$\mathbf{E}_\parallel(\mathbf{r}) = \frac{1}{4 \pi \varepsilon_0} \sum_\alpha q_\alpha \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha|^3}. \quad (\text{A.8})$$

La position $\mathbf{r}_\alpha$ de la particule α dans la formule (A.8) est maintenant un opérateur.

Comme nous avons respecté l'ordre entre α_i et α_i^* dans les calculs conduisant aux expressions (C.16) et (C.17) du chapitre I pour l'hamiltonien H_{trans} et l'impulsion $\mathbf{P}_{\text{trans}}$ du champ transverse, il n'est pas nécessaire de refaire de tels calculs dans le cas quantique, et nous pouvons donc écrire l'opérateur H_{trans} sous la forme

$$\begin{aligned} H_{\text{trans}} &= \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3r [\mathbf{E}_\perp^2(\mathbf{r}) + c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{r})] \\ &= \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2} [a_i^+ a_i + a_i a_i^+] = \sum_i \hbar \omega_i \left[a_i^+ a_i + \frac{1}{2} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

(nous avons utilisé (A.2) pour remplacer $a_i a_i^+$ par $a_i^+ a_i + 1$). De même,

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\text{trans}} &= \varepsilon_0 \int d^3r \mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_i \frac{\hbar \mathbf{k}_i}{2} [a_i^+ a_i + a_i a_i^+] = \sum_i \hbar \mathbf{k}_i a_i^+ a_i \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

(nous avons utilisé la relation $\sum_i \hbar \mathbf{k}_i / 2 = 0$).

Enfin, puisque nous sommes en jauge de Coulomb (*), nous avons

$$\mathbf{A}_\parallel(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{A.11})$$

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{4 \pi \varepsilon_0} \sum_\alpha \frac{q_\alpha}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha|} \quad (\text{A.12})$$

U est simplement le potentiel électrostatique de la distribution de charges.

(*) Comme dans le chapitre II (voir encadré de la page 115), nous omettrons désormais l'indice $\perp$ dans $\mathbf{A}_\perp$ puisqu'en jauge de Coulomb $\mathbf{A}$ coïncide avec $\mathbf{A}_\perp$.

Remarques

(i) A partir des développements (A.3) à (A.5) des champs transverses en a_i et a_i^+ et des relations de commutation (A.2), on peut établir les expressions suivantes pour les commutateurs entre deux composantes de champs prises en deux points différents $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$ (voir exercice 1) :

$$[A_i(\mathbf{r}), A_j(\mathbf{r}')] = 0 \quad (\text{A.13})$$

$$[A_i(\mathbf{r}), E_{\perp j}(\mathbf{r}')] = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{A.14})$$

où $i, j = x, y, z$ et où $\delta_{ij}^{\perp}$ est la « fonction delta transverse » définie par la formule (B.17. b) du chapitre I

$$[E_{\perp x}(\mathbf{r}), B_y(\mathbf{r}')] = -\frac{i\hbar}{\epsilon_0} \frac{\partial}{\partial z} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (\text{A.15})$$

Il apparaît en particulier sur (A.15) que, la dérivée de $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ s'annulant en $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ par suite du caractère pair de $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, $\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ commutent lorsqu'ils sont pris au même point. C'est cette propriété qui rend inutile la symétrisation de $\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r})$ dans l'expression de $\mathbf{P}_{\text{trans}}$ et $\mathbf{J}_{\text{trans}}$.

Comme $\mathbf{E}_{\parallel}(\mathbf{r})$ peut être réexprimé en fonction des $\mathbf{r}_\alpha$ [voir (A.8)], qui commutent avec a_i et a_i^+ , les équations (A.14) et (A.15) demeurent valables si $\mathbf{E}_{\perp}$ est remplacé par le champ total $\mathbf{E}$.

(ii) Tous les commutateurs (A.13) à (A.15) sont évalués dans le point de vue de Schrödinger. Ils demeurent valables dans le point de vue de Heisenberg si les deux champs figurant dans le commutateur sont pris au même temps.

(iii) En fait, les commutateurs (A.13) et (A.14) ont été établis directement dans le chapitre II, avant les relations de commutation (A.2) qui apparaissent alors comme une conséquence des précédents (voir § C.4, chapitre II). La raison en est que, dans la formulation lagrangienne de l'électrodynamique en jauge de Coulomb, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ et $-\epsilon_0 \mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r})$ apparaissent comme des grandeurs canoniquement conjuguées, de sorte que la quantification canonique de la théorie conduit directement à (A.13) et (A.14) (le fait que ce soit $\delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, et non $\delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, qui apparaisse dans (A.14) est lié au caractère transverse des champs — voir le § C.4. b du chapitre II).

Un opérateur particulièrement important de la théorie est l'hamiltonien, dont nous rappelons l'expression en jauge de Coulomb

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha})]^2 + \\ & + \sum_{\alpha} \mathcal{E}_{\text{Coul}}^{\alpha} + \frac{1}{8 \pi \epsilon_0} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{q_{\alpha} q_{\beta}}{|\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}|} + \\ & + \sum_i \hbar \omega_i \left(a_i^{\dagger} a_i + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Physiquement, l'opérateur (A.16) est associé à l'énergie totale du système, la première ligne de (A.16) représentant l'énergie cinétique des particules,

la seconde leur énergie d'interaction coulombienne ($\epsilon_{\text{Coul}}^\alpha$ étant l'énergie coulombienne propre de la particule α donnée par la formule (B.36) du chapitre I), la troisième, l'énergie du champ transverse.

Remarques

(i) L'expression (A.16) de l'hamiltonien en jauge de Coulomb, qui a été postulée à la fin du chapitre I, trouve sa justification dans l'approche lagrangienne et hamiltonienne du chapitre II (voir § C.3 de ce chapitre). Pour les lecteurs n'ayant pas lu le chapitre II, le fait que l'hamiltonien (A.16) conduise, compte tenu des relations (A.1) et (A.2), aux équations de Maxwell-Lorentz quantiques (comme nous le montrerons dans la partie B suivante) pourra être considéré comme une justification a posteriori de (A.1), (A.2) et (A.16).

(ii) Il sera utile, pour la suite, de donner l'expression de l'hamiltonien H en présence de champs extérieurs, c'est-à-dire de champs statiques ou dépendant du temps, dont l'évolution est imposée de l'extérieur. Soient $A_e(r, t)$ et $U_e(r, t)$ les potentiels vecteur et scalaire décrivant de tels champs extérieurs (la jauge de Coulomb n'est pas forcément utilisée pour A_e et U_e). Nous avons montré dans le complément C_{II} que l'expression de H est alors

$$\begin{aligned}
 H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} [p_{\alpha} - q_{\alpha} A(r_{\alpha}) - q_{\alpha} A_e(r_{\alpha}, t)]^2 + \\
 + \sum_{\alpha} \epsilon_{\text{Coul}}^{\alpha} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{q_{\alpha} q_{\beta}}{|r_{\alpha} - r_{\beta}|} + \sum_{\alpha} q_{\alpha} U_e(r_{\alpha}, t) + \\
 + \sum_i \hbar \omega_i \left(a_i^{\dagger} a_i + \frac{1}{2} \right). \quad (\text{A.17})
 \end{aligned}$$

Nous montrerons plus loin (voir remarques à la fin des §§ B.2.a et B.2.b) que l'hamiltonien (A.17) conduit, avec les relations de commutation (A.1) et (A.2), aux « bonnes » équations du mouvement pour les particules et pour le champ.

Nous terminerons cette revue des divers opérateurs de la théorie quantique en donnant l'expression de l'impulsion totale $\mathbf{P}$

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha} + \sum_i \hbar \mathbf{k}_i a_i^{\dagger} a_i \quad (\text{A.18})$$

et celle du moment cinétique total $\mathbf{J}$

$$\mathbf{J} = \sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{p}_{\alpha} + \mathbf{J}_{\text{trans}} \quad (\text{A.19})$$

où l'expression de l'opérateur $\mathbf{J}_{\text{trans}}$ est donnée par la formule (C.18) du chapitre I (les α et α^* étant remplacés par a et $a^{\dagger}$).

3. Espace des états

L'espace des états $\mathcal{E}$ du système est le produit tensoriel de l'espace des états $\mathcal{E}_p$ des particules, dans lequel agissent $\mathbf{r}_\alpha, \mathbf{p}_\alpha \dots$ par l'espace des états du rayonnement $\mathcal{E}_R$ dans lequel agissent les opérateurs $a_i, a_i^+ \dots$

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_p \otimes \mathcal{E}_R. \quad (\text{A.20})$$

L'espace $\mathcal{E}_R$ est lui-même le produit des espaces des états $\mathcal{E}_i$ des divers oscillateurs i associés aux modes du champ

$$\mathcal{E}_R = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \dots \otimes \mathcal{E}_i \otimes \dots \quad (\text{A.21})$$

Une base orthonormée possible de $\mathcal{E}_i$ est $\{|n_i\rangle\}$, où $n_i = 0, 1, 2, 3 \dots$ repère les niveaux d'énergie de l'oscillateur i . Si $\{|s\rangle\}$ est une base orthonormée de $\mathcal{E}_p$, nous pourrions prendre dans l'espace total $\mathcal{E}$ la base suivante

$$\{|s\rangle |n_1\rangle |n_2\rangle \dots |n_i\rangle \dots\} = \{|s; n_1, n_2 \dots n_i \dots\rangle\} \quad (\text{A.22})$$

et le vecteur d'état le plus général de $\mathcal{E}$ est une superposition linéaire des vecteurs de base (A.22).

B — ÉVOLUTION TEMPORELLE

1. Point de vue de Schrödinger

Dans ce point de vue, les diverses observables du système particules + champ sont fixes, et c'est le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ qui évolue conformément à l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (\text{B.1})$$

où H est l'hamiltonien global donné en (A.16).

Si $|\psi(t)\rangle$ est développé sur la base orthonormée (A.22)

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{s n_1 n_2 \dots} c_{s n_1 n_2 \dots}(t) |s; n_1, n_2 \dots\rangle \quad (\text{B.2})$$

et si le développement (B.2) est porté dans (B.1), on obtient un système linéaire d'équations différentielles pour les coefficients $c_{s n_1 n_2 \dots}(t)$.

Le point de vue de Schrödinger est très commode pour introduire les amplitudes de transition

$$\langle \psi_f | U(t) | \psi_i \rangle \quad (\text{B.3})$$

où

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} \quad (\text{B.4})$$

est l'opérateur d'évolution. Physiquement, l'expression (B.3) représente l'amplitude de probabilité pour que le système, partant de l'état initial $|\psi_i\rangle$, aboutisse, au bout d'un temps t , dans l'état final $|\psi_f\rangle$. Ces amplitudes permettent de décrire diverses manifestations de l'interaction entre matière et rayonnement (absorption, émission ou diffusion de photons par des atomes, photoionisation, corrections radiatives...). L'un des objectifs essentiels de la théorie sera le calcul de ces amplitudes de transition, soit de manière perturbative, soit de manière plus élaborée (*).

Dans le présent chapitre, qui se situe à un niveau plus général, nous insisterons davantage sur le point de vue de Heisenberg qui se prête mieux à des comparaisons entre théories classique et quantique.

2. Point de vue de Heisenberg. Les équations de Maxwell-Lorentz quantiques

Dans le point de vue de Heisenberg, c'est au contraire le vecteur d'état $|\psi\rangle$ du système global qui reste fixe alors que les observables $G(t)$ de ce système évoluent conformément à l'équation de Heisenberg

$$\frac{d}{dt} G(t) = \frac{1}{i\hbar} [G(t), H(t)] \quad (\text{B.5})$$

(*) Voir par exemple « Photons et Atomes — Les processus d'interaction » (chapitres I et III).

Dans cette formule, H est l'hamiltonien donné en (A.16) dans lequel tous les opérateurs sont pris à l'instant t .

a) EQUATIONS DE HEISENBERG POUR LES PARTICULES

L'équation de Heisenberg pour $\mathbf{r}_\alpha$

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}}_\alpha &= \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{r}_\alpha, H] = \frac{1}{i\hbar} \left[\mathbf{r}_\alpha, \frac{1}{2m_\alpha} (\mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha))^2 \right] \\ &= \frac{1}{m_\alpha} (\mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha))\end{aligned}\quad (\text{B.6})$$

n'est autre que la relation bien connue entre la quantité de mouvement $m_\alpha \mathbf{v}_\alpha$ de la particule α et son impulsion $\mathbf{p}_\alpha$

$$\mathbf{p}_\alpha = m_\alpha \mathbf{v}_\alpha + q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha) \quad (\text{B.7})$$

($\mathbf{v}_\alpha = \dot{\mathbf{r}}_\alpha$ est la vitesse de la particule α). L'équation (B.44) du chapitre I apparaît donc ici comme une équation du mouvement.

Pour les calculs qui suivent, il sera utile d'évaluer le commutateur entre les deux composantes $v_{\alpha j}$ et $v_{\alpha l}$ de $\mathbf{v}_\alpha$ ($j, l = x, y, z$)

$$\begin{aligned}m_\alpha^2 [v_{\alpha j}, v_{\alpha l}] &= -q_\alpha [p_{\alpha j}, A_l(\mathbf{r}_\alpha)] - q_\alpha [A_j(\mathbf{r}_\alpha), p_{\alpha l}] \\ &= i\hbar q_\alpha [\partial_j A_l(\mathbf{r}_\alpha) - \partial_l A_j(\mathbf{r}_\alpha)] \\ &= i\hbar q_\alpha \sum_k \varepsilon_{jlk} B_k(\mathbf{r}_\alpha).\end{aligned}\quad (\text{B.8})$$

Considérons maintenant l'équation de Heisenberg pour $m_\alpha v_{\alpha j}$

$$m_\alpha \dot{v}_{\alpha j} = m_\alpha \ddot{\mathbf{r}}_{\alpha j} = \frac{m_\alpha}{i\hbar} [v_{\alpha j}, H] \quad (\text{B.9})$$

et calculons les contributions des trois termes apparaissant dans l'expression (A.16) de H . La contribution du premier terme de H (énergie cinétique) s'écrit, compte tenu de (B.8)

$$\begin{aligned}\frac{m_\alpha}{i\hbar} \left[v_{\alpha j}, \sum_l m_\alpha v_{\alpha l}^2 / 2 \right] &= \\ &= \frac{m_\alpha^2}{2i\hbar} \sum_l \{ v_{\alpha l} [v_{\alpha j}, v_{\alpha l}] + [v_{\alpha j}, v_{\alpha l}] v_{\alpha l} \} \\ &= \frac{q_\alpha}{2} \sum_k \sum_l \varepsilon_{jlk} \{ v_{\alpha l} B_k(\mathbf{r}_\alpha) + B_k(\mathbf{r}_\alpha) v_{\alpha l} \}\end{aligned}\quad (\text{B.10})$$

et peut être considérée comme la composante sur l'axe j de la partie magnétique de la force de Lorentz symétrisée

$$\frac{q_\alpha}{2} \{ \mathbf{v}_\alpha \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha) - \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha) \times \mathbf{v}_\alpha \}. \quad (\text{B.11})$$

Le second terme de H (énergie de Coulomb) donne

$$\frac{m_\alpha}{i\hbar} [v_{\alpha j}, V_{\text{Coul}}] = \frac{1}{i\hbar} [p_{\alpha j}, V_{\text{Coul}}] = - \frac{\partial}{\partial r_{\alpha j}} V_{\text{Coul}} \quad (\text{B.12})$$

qui n'est autre que la composante sur l'axe j de la force électrique longitudinale $q_\alpha \mathbf{E}_\parallel(\mathbf{r}_\alpha)$. Enfin, le dernier terme de H (énergie du champ transverse) donne

$$\frac{m_\alpha}{i\hbar} \left[v_{\alpha j}, \sum_i \hbar \omega_i \left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right) \right] = i q_\alpha \sum_i \omega_i [A_j(\mathbf{r}_\alpha), a_i^\dagger a_i]. \quad (\text{B.13})$$

En utilisant, d'une part le commutateur $[a_i, a_i^\dagger a_i] = a_i$, d'autre part les développements (A.3) et (A.5) de $\mathbf{E}_\perp$ et $\mathbf{A}$, on montre que (B.13) n'est autre que la composante de la force électrique transverse $q_\alpha \mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}_\alpha)$ sur l'axe j .

En regroupant tous les résultats précédents, nous obtenons finalement

$$m_\alpha \ddot{\mathbf{r}}_\alpha = q_\alpha \mathbf{E}(\mathbf{r}_\alpha) + \frac{q_\alpha}{2} [\mathbf{v}_\alpha \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha) - \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha) \times \mathbf{v}_\alpha] \quad (\text{B.14})$$

où $\mathbf{E} = \mathbf{E}_\parallel + \mathbf{E}_\perp$ est le champ électrique total. L'équation (B.14) est la forme quantique de l'équation de Newton-Lorentz

Remarque

En présence de champs extérieurs, il faut partir de l'hamiltonien (A.17). L'équation (B.6) devient alors

$$m_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha = m_\alpha \mathbf{v}_\alpha = \mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha) - q_\alpha \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_\alpha, t) \quad (\text{B.15})$$

et contient le potentiel vecteur extérieur $\mathbf{A}_e$. Avec cette nouvelle expression de $m_\alpha \mathbf{v}_\alpha$, le calcul du commutateur (B.8) fait apparaître le rotationnel de $\mathbf{A} + \mathbf{A}_e$, c'est-à-dire le champ magnétique total

$$\mathbf{B}_t = \mathbf{B} + \mathbf{B}_e \quad (\text{B.16})$$

somme du champ magnétique quantique $\mathbf{B}$ et du champ magnétique extérieur $\mathbf{B}_e$

$$m_\alpha^2 [v_{\alpha j}, v_{\alpha l}] = i \hbar q_\alpha \sum_k \varepsilon_{jlk} B_{lk}(\mathbf{r}_\alpha). \quad (\text{B.17})$$

De plus, comme la nouvelle expression (B.15) de $m_\alpha \mathbf{v}_\alpha$ contient un terme

dépendant *explicitement* du temps, $-q_\alpha \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_\alpha, t)$, l'équation de Heisenberg (B.9) de $m_\alpha \mathbf{v}_\alpha$ est modifiée et devient

$$\begin{aligned} m_\alpha \dot{\mathbf{v}}_\alpha &= m_\alpha \frac{\partial \mathbf{v}_\alpha}{\partial t} + \frac{m_\alpha}{i\hbar} [\mathbf{v}_\alpha, H] \\ &= -q_\alpha \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_\alpha, t) + \frac{m_\alpha}{i\hbar} [\mathbf{v}_\alpha, H]. \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Le calcul du commutateur de (B.18) est très analogue au précédent. Comme il faut utiliser (B.17) au lieu de (B.8), c'est le champ total $\mathbf{B}_t$ qui figure maintenant dans la force magnétique de Lorentz (B.11). L'autre terme nouveau qui apparaît dans ce calcul provient du couplage des charges avec le potentiel scalaire extérieur (terme $\sum_\alpha q_\alpha U_e(\mathbf{r}_\alpha, t)$ de (A.17)). Il s'écrit

$$\frac{m_\alpha}{i\hbar} [\mathbf{v}_\alpha, q_\alpha U_e(\mathbf{r}_\alpha, t)] = -q_\alpha \nabla U_e(\mathbf{r}_\alpha, t). \quad (\text{B.19})$$

En regroupant (B.19) avec le premier terme de (B.18), on fait apparaître

$$q_\alpha \left[-\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_\alpha, t) - \nabla U_e(\mathbf{r}_\alpha, t) \right] = q_\alpha \mathbf{E}_e(\mathbf{r}_\alpha, t) \quad (\text{B.20})$$

c'est-à-dire la force due au champ électrique extérieur. Les équations (B.12) et (B.13) demeurent inchangées et donnent naissance à la force due au champ électrique quantique $\mathbf{E}_q$, $q_\alpha \mathbf{E}_q(\mathbf{r}_\alpha, t)$, qui s'ajoute à (B.20) pour faire apparaître le champ électrique total

$$\mathbf{E}_t = \mathbf{E} + \mathbf{E}_e. \quad (\text{B.21})$$

Finalement, en regroupant tous les résultats précédents, on obtient la nouvelle équation de Newton-Lorentz

$$m_\alpha \ddot{\mathbf{r}}_\alpha = q_\alpha \mathbf{E}_t(\mathbf{r}_\alpha) + \frac{q_\alpha}{2} [\mathbf{v}_\alpha \times \mathbf{B}_t(\mathbf{r}_\alpha) - \mathbf{B}_t(\mathbf{r}_\alpha) \times \mathbf{v}_\alpha] \quad (\text{B.22})$$

qui fait intervenir maintenant les champs totaux $\mathbf{E}_t$ et $\mathbf{B}_t$.

b) EQUATIONS DE HEISENBERG POUR LES CHAMPS

Les mêmes relations linéaires existent entre les champs transverses classiques et $\{\alpha_i, \alpha_i^*\}$ d'une part, les champs transverses quantiques et $\{a_i, a_i^+\}$ d'autre part. Si nous montrons que α_i et a_i obéissent à des équations similaires, nous aurons du même coup montré que les équations du mouvement des champs sont les mêmes dans les théories classique et quantique. Au lieu d'écrire les équations de Heisenberg pour $\mathbf{E}_\perp$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{A}$, il est donc plus simple de considérer une telle équation pour a_i

$$\dot{a}_i = \frac{1}{i\hbar} [a_i, H]. \quad (\text{B.23})$$

Comme pour $m_\alpha \mathbf{v}_\alpha$, calculons maintenant les contributions des trois

termes de H . Le dernier terme donne $-\imath\omega_i a_i$. Le second commute avec a_i et sa contribution est nulle. Finalement, le premier terme donne

$$\begin{aligned} \frac{1}{\imath\hbar} \left[a_i, \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}^2}{2} \right] &= \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}}{2\imath\hbar} \left\{ \mathbf{v}_{\alpha} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{\alpha}}{\partial a_i^+} + \frac{\partial \mathbf{v}_{\alpha}}{\partial a_i^+} \cdot \mathbf{v}_{\alpha} \right\} = \\ &= \sum_{\alpha} \frac{\imath q_{\alpha}}{2\hbar} \mathcal{A}_{\omega_i} \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot [\mathbf{v}_{\alpha} e^{-\imath \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} + e^{-\imath \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} \mathbf{v}_{\alpha}]. \quad (\text{B.24}) \end{aligned}$$

Nous avons utilisé $[a_i, f(a_i^{\dagger})] = \partial f / \partial a_i^{\dagger}$ qui découle de (A.2). Si l'on introduit le courant symétrisé

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} q_{\alpha} [\mathbf{v}_{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \mathbf{v}_{\alpha}] \quad (\text{B.25})$$

on peut alors transformer (B.24) en

$$\frac{\imath}{\sqrt{2 \varepsilon_0 \hbar \omega_i}} j_i \quad (\text{B.26})$$

où

$$j_i = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \int d^3r e^{-\imath \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) \quad (\text{B.27})$$

est la composante de Fourier de $\mathbf{j}$ (sur le mode i). Finalement, l'équation du mouvement de a_i s'écrit

$$\dot{a}_i + \imath\omega_i a_i = \frac{\imath}{\sqrt{2 \varepsilon_0 \hbar \omega_i}} j_i \quad (\text{B.28})$$

et a exactement la même forme que l'équation du mouvement de α_i (équation (C.41) du chapitre I). Le raisonnement donné au début de ce paragraphe permet alors de montrer que les équations de Maxwell demeurent valables entre opérateurs.

Finalement, toutes les équations de base de l'électrodynamique classique peuvent être généralisées au domaine quantique (pourvu toutefois que l'on symétrise les produits d'opérateurs hermitiques ne commutant pas entre eux, comme la force de Lorentz magnétique ou le courant des particules chargées).

Remarques

(i) En présence de champs extérieurs, l'équation d'évolution de a_i garde la même forme (B.28). En effet, la troisième ligne de (A.17) donne toujours $-\imath\omega_i a_i$, la contribution de la deuxième est nulle et celle de la première est la même que plus haut. (Il faut noter toutefois que les vitesses $\mathbf{v}_{\alpha}$ apparaissant dans l'expression (B.25) du courant sont maintenant reliées aux impulsions $\mathbf{p}_{\alpha}$ par l'équation (B.15), et non plus par (B.7).) En étudiant

l'équation du mouvement de a_i , on ne s'intéresse en fait qu'à l'évolution du champ transverse quantifié. Ceci est bien normal puisque l'évolution de A_e et U_e est supposée imposée de l'extérieur. Comme le terme source de l'équation (B.28) ne dépend que du courant des particules, le champ extérieur ne peut influencer l'évolution du champ transverse quantifié que par l'intermédiaire du courant. Plus précisément, la présence du champ extérieur modifie le mouvement des particules (voir équation (B.22)), donc le courant qui leur est associé, et par suite le champ qu'elles rayonnent.

(ii) En l'absence de particules ($j_i = 0$), la solution de l'équation (B.28) est très simple :

$$a_i(t) = a_i(0) e^{-i\omega_i t}. \quad (\text{B.29})$$

Les expressions des champs *libres* dans le point de vue de Heisenberg s'obtiennent donc en remplaçant dans les développements (A.3), (A.4) et (A.5) de $E_\perp$, B , A , a_i par (B.29) et $a_i^\dagger$ par l'expression adjointe. Par exemple

$$E_\perp^{\text{libre}}(\mathbf{r}, t) = \sum_i i \mathcal{E}_{\omega_i} [a_i(0) \varepsilon_i e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} - a_i^\dagger(0) \varepsilon_i e^{-i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)}]. \quad (\text{B.30})$$

On obtient ainsi un développement des champs libres en ondes planes progressives, dont les coefficients $a_i(0)$ et $a_i^\dagger(0)$ sont maintenant des opérateurs satisfaisant aux relations de commutation (A.2). A partir de (B.30) et de l'équation analogue pour $B^{\text{libre}}(\mathbf{r}, t)$, on peut calculer les commutateurs entre composantes de champs libres prises en deux points d'espace-temps différents $\mathbf{r}, t$ et $\mathbf{r}', t'$ (voir complément C_{III}). On trouve en particulier que les commutateurs des champs électrique et magnétique sont toujours nuls dès que $\mathbf{r}, t$ et $\mathbf{r}', t'$ sont séparés par un intervalle genre espace. Un tel résultat exprime physiquement que deux mesures de champ en $\mathbf{r}, t$ et $\mathbf{r}', t'$ ne peuvent alors se perturber mutuellement puisqu'aucun signal physique ne peut relier les deux événements $\mathbf{r}, t$ et $\mathbf{r}', t'$.

c) AVANTAGES DU POINT DE VUE DE HEISENBERG

Un premier avantage de ce point de vue est qu'il permet de discuter simplement les analogies et différences entre théories classique et quantique. Comme nous venons de le voir, il conduit en effet à des équations du mouvement analogues, mais ces équations concernent désormais des opérateurs et non plus des grandeurs classiques.

Un second avantage du point de vue de Heisenberg est qu'il permet de définir des « moyennes à deux temps », c'est-à-dire des valeurs moyennes, dans l'état $|\psi\rangle$ du système (rappelons que $|\psi\rangle$ est indépendant du temps), d'un produit de deux opérateurs $F(t)$ et $G(t')$ pris à deux instants différents t et t'

$$\langle \psi | F(t) G(t') | \psi \rangle. \quad (\text{B.31})$$

D'importants exemples de moyennes à deux temps sont donnés par les fonctions de corrélation symétriques ou les fonctions de réponse

linéaire, qui décrivent respectivement la dynamique des fluctuations existant au sein d'un système et la réponse linéaire du système à une petite perturbation extérieure. Nous reviendrons plus loin (§ C.3.c et complément C_{III}) sur les fonctions de corrélation symétriques et les susceptibilités linéaires du champ libre quantique (voir aussi l'exercice 6 du chapitre IV).

C — OBSERVABLES ET ÉTATS DU CHAMP QUANTIQUE LIBRE

Pour pouvoir discuter des propriétés physiques d'un système quantique, il faut connaître à la fois les *observables* G associées aux diverses grandeurs physiques du système, et le *vecteur d'état* $|\psi\rangle$ (ou l'*opérateur densité* ρ) décrivant l'état du système au moment où l'on effectue la mesure. C'est à partir de ces deux objets mathématiques distincts, G et $|\psi\rangle$ (ou G et ρ) que l'on peut ensuite faire des prévisions sur les divers résultats qui peuvent être observés lors d'une mesure de la grandeur physique étudiée sur le système.

Ainsi, si $|\psi\rangle$ coïncide avec l'un des états propres de G , le résultat est certain : c'est la valeur propre correspondante de G . Si $|\psi\rangle$ n'est pas un état propre de G , le résultat de la mesure peut être a priori n'importe quelle valeur propre de G , avec des probabilités bien définies, la valeur moyenne des résultats obtenus sur un grand nombre de mesures identiques (répétées sur le même état $|\psi\rangle$) étant $\langle\psi|G|\psi\rangle$. Si deux grandeurs physiques sont incompatibles, c'est-à-dire si les observables correspondantes G et F ne commutent pas, il est impossible de trouver une base de vecteurs propres communs à F et à G : il n'y a pas d'état $|\psi\rangle$ qui soit à la fois bien « adapté » à F et à G . On peut dans ce cas chercher à réaliser un compromis, par exemple chercher un état $|\psi\rangle$ tel que les valeurs moyennes de F et G dans cet état soient égales aux valeurs correspondantes de ces grandeurs physiques dans un système classique.

La démarche générale précédente s'applique bien sûr au champ électromagnétique, et nous allons la suivre dans ce paragraphe C pour étudier quelques propriétés importantes du champ quantifié. Afin de centrer la discussion sur les grandeurs physiques du champ, nous considérerons uniquement le champ libre, c'est-à-dire le champ en l'absence de sources.

1. Revue de quelques observables du champ libre

a) ÉNERGIE TOTALE ET IMPULSION TOTALE DU CHAMP

En l'absence de particules, H et $\mathbf{P}$ se réduisent à H_{trans} et $\mathbf{P}_{\text{trans}}$ dont nous avons donné plus haut les expressions en (A.9) et (A.10). Notons qu'il s'agit là d'observables de type *global*, dans la mesure où elles s'expriment comme intégrales dans tout l'espace (espace libre ou volume du cube de quantification) de fonctions des champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$.

b) CHAMPS EN UN POINT DONNÉ $\mathbf{r}$ DE L'ESPACE

Contrairement à H_{trans} et $\mathbf{P}_{\text{trans}}$, ces observables sont « *locales* ». La mesure d'un champ en un point donné nécessite de placer en ce point une

« charge d'épreuve ». Les expressions de $E_{\perp}(\mathbf{r})$ (qui est égal à $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ en l'absence de particules, puisque $E_{\parallel}$ est alors nul), $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ sont données plus haut en (A.3), (A.4), (A.5).

Etudions plus précisément le champ électrique et considérons la contribution d'un mode à $\mathbf{E}(\mathbf{r})$. Au lieu d'utiliser les opérateurs a et a^+ , on peut leur substituer des combinaisons linéaires $a_p = (a + a^+)/2$ et $a_q = (a - a^+)/2i$ analogues à la position x et l'impulsion p d'un oscillateur harmonique. Il est facile de voir que a_p et a_q correspondent à deux composantes en quadrature du champ électrique (voir exercice 6). On peut alors utiliser l'analogie avec l'oscillateur harmonique pour établir des résultats relatifs au champ de rayonnement quantique. Par exemple, la relation de Heisenberg pour $\Delta x \Delta p$ devient ici $\Delta a_p \Delta a_q \geq 1/4$ et exprime que les mesures du champ sur deux composantes en quadrature ne sont pas compatibles. Si l'on veut mesurer une composante avec une grande précision, il en résultera une augmentation de l'indétermination sur la composante en quadrature. Un autre résultat intéressant concerne la distribution des valeurs possibles de chaque composante a_p et a_q lorsque le mode est dans l'état fondamental (pas de photon dans le mode). Cette distribution est une gaussienne tout comme la distribution des valeurs possibles de x et p dans l'état fondamental d'un oscillateur harmonique.

c) OBSERVABLES CORRESPONDANT À DES MESURES PHOTOÉLECTRIQUES

Dans le domaine optique, on utilise le plus souvent, pour faire des mesures *locales* sur le champ, des détecteurs basés sur l'*effet photoélectrique*. Très schématiquement, on place un atome dans le rayonnement, au point $\mathbf{r}$, et on observe les photo-électrons produits par la photoionisation de cet atome. De telles mesures sont *destructives* dans la mesure où les photons responsables du signal photoélectrique disparaissent.

Nous utilisons ci-dessous les résultats de la théorie des signaux photo-électriques qui relient ces signaux à des observables locales du champ (voir les références à la fin du chapitre). Ces résultats nous seront utiles pour les discussions physiques de ce chapitre et celles du complément A_{III}.

(i) Signaux de comptage simple

Supposons qu'un détecteur à large bande spectrale soit placé au point $\mathbf{r}$ dans un champ de rayonnement libre dans l'état $|\psi\rangle$. On peut montrer que la probabilité d'observer une photoionisation dans ce détecteur entre les instants t et $t + dt$ est proportionnelle à $w_1(\mathbf{r}, t) dt$ où

$$w_1(\mathbf{r}, t) = \langle \psi | \mathbf{E}^{(-)}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{r}, t) | \psi \rangle \quad (\text{C.1})$$

$\mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{E}^{(-)}(\mathbf{r}, t)$ sont les composantes de fréquence positive et négative du champ libre (B.30), ne contenant respectivement que des opérateurs

de destruction a_i ou de création a_i^+

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{r}, t) &= \sum_i i\mathcal{E}_{\omega_i} a_i \mathbf{e}_i e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} \\ \mathbf{E}^{(-)}(\mathbf{r}, t) &= [\mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{r}, t)]^+ = - \sum_i i\mathcal{E}_{\omega_i} a_i^+ \mathbf{e}_i e^{-i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)}. \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

(Pour simplifier les notations, nous omettons l'indice libre et écrivons a_i et a_i^+ pour $a_i(0)$ et $a_i^+(0)$.)

Le « taux de comptage simple » w_1 est la valeur moyenne, dans l'état $|\psi\rangle$ du champ, de l'observable

$$I(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}^{(-)}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{C.3})$$

exprimée dans le point de vue de Heisenberg. $I(\mathbf{r}, t)$ est un opérateur hermitique, rangé dans l'ordre normal (c'est-à-dire avec tous les opérateurs de destruction à droite, tous les opérateurs de création à gauche), qu'on peut appeler « l'intensité lumineuse » au point $\mathbf{r}$ à l'instant t .

Remarque

Il est également possible de donner un traitement semiclassique de l'effet photoélectrique, où seul le détecteur est quantifié et non le champ (voir les références à la fin du chapitre). Pour le taux de comptage simple, on trouve, au lieu de (C.1)

$$w_1^{cl}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{cl}^{(-)}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{E}_{cl}^{(+)}(\mathbf{r}, t) = I_{cl}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{C.4})$$

où $\mathbf{E}_{cl}^{(+)}$ et $\mathbf{E}_{cl}^{(-)}$ sont les composantes de fréquence positive et négative du champ électrique classique, et où $I_{cl} = |\mathbf{E}_{cl}^{(+)}|^2$ est l'intensité classique.

(ii) Signaux de comptage double

Considérons maintenant deux photodétecteurs en $\mathbf{r}$ et en $\mathbf{r}'$. La probabilité d'observer une photoionisation au point $\mathbf{r}'$ entre t' et $t' + dt'$, et une autre au point $\mathbf{r}$ entre t et $t + dt$, se trouve être proportionnelle à $w_{11}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') dt dt'$ où

$$\begin{aligned} w_{11}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \\ &= \sum_{m,n} \langle \psi | E_m^{(-)}(\mathbf{r}', t') E_n^{(-)}(\mathbf{r}, t) E_n^{(+)}(\mathbf{r}, t) E_m^{(+)}(\mathbf{r}', t') | \psi \rangle \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

avec $m, n = x, y, z$. Le « taux de comptage double » w_{11} est égal à la valeur moyenne de l'observable rangée dans l'ordre normal

$$\sum_m \sum_n E_m^{(-)}(\mathbf{r}', t') E_n^{(-)}(\mathbf{r}, t) E_n^{(+)}(\mathbf{r}, t) E_m^{(+)}(\mathbf{r}', t'). \quad (\text{C.6})$$

Comme $\mathbf{E}^{(-)}(\mathbf{r}', t')$ et $\mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ ne commutent pas, il n'est pas possible d'écrire une telle observable sous la forme $I(\mathbf{r}, t) I(\mathbf{r}', t')$, c'est-à-dire comme le produit des deux intensités lumineuses en $\mathbf{r}, t$ et $\mathbf{r}', t'$.

Remarque

L'expression semiclassical du taux de comptage double est

$$w_{II}^{cl}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = I_{cl}(\mathbf{r}, t) I_{cl}(\mathbf{r}', t'). \quad (C.7)$$

Pour un champ classique fluctuant, il faut prendre la moyenne de (C.7) sur toutes les réalisations possibles du champ. Le taux de comptage double est alors égal à la fonction de corrélation de l'intensité lumineuse.

2. Excitations élémentaires du champ quantique libre. Photons

a) ETATS PROPRES DE L'ÉNERGIE ET DE L'IMPULSION TOTALES

Considérons tout d'abord l'oscillateur i (mode i). Les valeurs propres de $a_i^+ a_i$ sont tous les entiers positifs ou nuls n_i

$$a_i^+ a_i |n_i\rangle = n_i |n_i\rangle \quad n_i = 0, 1, 2, \dots \quad (C.8)$$

et les vecteurs propres $|n_i\rangle$ obéissent aux relations bien connues

$$\begin{cases} a_i^+ |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle \\ a_i |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle \\ a_i |0_i\rangle = 0 \end{cases} \quad (C.9)$$

$$|n_i\rangle = \frac{(a_i^+)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |0_i\rangle. \quad (C.10)$$

Comme $a_i^+ a_i$ commute avec $a_j^+ a_j$, les états propres de H_{trans} et $\mathbf{P}_{\text{trans}}$ sont les produits tensoriels des états propres $|n_i\rangle$ de $a_i^+ a_i$

$$\left\{ \begin{aligned} H_R |n_1 \dots n_i \dots\rangle &= \sum_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle \\ \mathbf{P}_R |n_1 \dots n_i \dots\rangle &= \sum_i n_i \hbar \mathbf{k}_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle. \end{aligned} \right. \quad (C.11.a)$$

$$\left\{ \begin{aligned} H_R |n_1 \dots n_i \dots\rangle &= \sum_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle \\ \mathbf{P}_R |n_1 \dots n_i \dots\rangle &= \sum_i n_i \hbar \mathbf{k}_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle. \end{aligned} \right. \quad (C.11.b)$$

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

$$|0\rangle = |0_1 \dots 0_i \dots\rangle. \quad (C.12)$$

De (C.10) il résulte que tous les états propres $|n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle$ peuvent être obtenus en faisant agir un certain nombre d'opérateurs de création sur l'état fondamental $|0\rangle$

$$|n_1 \dots n_i \dots\rangle = \frac{(a_1^+)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \dots \frac{(a_i^+)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} \dots |0\rangle. \quad (C.13)$$

b) INTERPRÉTATION EN TERMES DE PHOTONS

Par rapport à l'état fondamental $|0\rangle$, l'état $|n_1 \dots n_i \dots\rangle$ a une énergie $\sum_i n_i \hbar \omega_i$ et une impulsion $\sum_i n_i \hbar \mathbf{k}_i$. Tout se passe comme si cet état représentait un ensemble de n_1 particules d'énergie $\hbar \omega_1$ et d'impulsion $\hbar \mathbf{k}_1$, ..., n_i particules d'énergie $\hbar \omega_i$ et d'impulsion $\hbar \mathbf{k}_i$, ... Ces particules sont appelées des « photons ». Elles décrivent les excitations élémentaires des divers modes du champ électromagnétique quantifié.

L'état fondamental ne contient aucun photon (tous les n_i sont nuls) et est donc appelé le *vide*. De (C. 9) il résulte que a_i^+ crée un photon i alors que a_i détruit un photon i . Le nombre total de photons est décrit par l'opérateur

$$N = \sum_i a_i^+ a_i. \quad (\text{C. 14})$$

Finalement, comme le champ a été quantifié avec des commutateurs, les photons sont des bosons. Effectivement le nombre de photons i , n_i , peut être supérieur à 1.

Remarques

(i) Les énergies des états ont été repérées par rapport au vide. Mais l'énergie *absolue* du vide, égale à $\sum_i \hbar \omega_i/2$, est infinie. Nous reviendrons plus loin sur ce point à propos de l'étude des fluctuations du vide.

(ii) Au lieu de développer le champ en ondes planes transverses, on pourrait aussi le développer en ondes multipolaires (voir complément B₁). On obtiendrait alors, lors de la quantification, des excitations élémentaires (photons), caractérisées par une valeur bien définie de l'énergie ($\hbar \omega$), du carré du moment cinétique $J^2(J(J+1)\hbar^2)$, de $J_z(M\hbar)$ et de la parité (+ ou -).

(iii) Une équation d'onde relativiste, comme les équations de Maxwell, l'équation de Klein-Gordon, ou l'équation de Dirac, a des solutions en $e^{-i\omega t}$ et $e^{+i\omega t}$, qu'on peut aussi interpréter comme des solutions d'énergie positive et négative. Lors de la seconde quantification d'une telle équation, les coefficients du développement du champ sur les solutions d'énergie négative deviennent des opérateurs de destruction d'une particule d'énergie négative qu'on réinterprète comme des opérateurs création d'une *antiparticule* d'énergie positive. L'opérateur champ apparaît alors comme une superposition linéaire de a (opérateur de destruction d'une particule) et de b^+ (opérateur de création d'une antiparticule). Pour le champ de Maxwell n'apparaissent que des a et a^+ . Ceci est dû au fait que le champ de Maxwell est réel et que le photon coïncide avec son antiparticule ($b^+ = a^+$).

c) ETATS À UN PHOTON. PROPAGATION

L'opérateur de création a_k^+ agissant sur le vide $|0\rangle$ donne un état à un photon $\mathbf{k}$. De tels états peuvent être superposés linéairement pour donner

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle. \quad (\text{C. 15})$$

Une telle combinaison linéaire est un état propre de l'opérateur N donné en (C.14)

$$N |\psi\rangle = |\psi\rangle \quad (\text{C.16})$$

mais *non* de H_{trans} et P_{trans} (car plusieurs valeurs de k apparaissent dans (C.15)). Il s'ensuit que $|\psi\rangle$ décrit en général un état non stationnaire à un photon.

Pour discuter la propagation d'un tel état, considérons un modèle simple à une dimension. Tous les modes apparaissant dans le développement (C.15) sont supposés avoir leurs vecteurs d'onde parallèles à l'axe Ox , et la même polarisation, de sorte que $E^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ sera noté simplement $E^{(+)}(x, t)$

$$E^{(+)}(x, t) = \sqrt{\frac{\hbar c}{2 \varepsilon_0 L^3}} \sum_k \sqrt{k} a_k e^{i(kx - \omega t)}. \quad (\text{C.17})$$

Le taux de comptage simple $w_1(x, t)$ dans l'état (C.15) est alors donné par

$$w_1(x, t) = \frac{\hbar c}{2 \varepsilon_0 L^3} \left| \sum_k \sqrt{k} c_k e^{i(kx - \omega t)} \right|^2. \quad (\text{C.18})$$

Il apparaît clairement sur (C.18) que $w_1(x, t)$ ne dépend que de $x - ct$ et se propage donc sans déformation à la vitesse c .

Remarques

(i) Une mesure de P_{trans} sur le champ dans l'état (C.15) donne (pour la composante x) la valeur $\hbar k$ avec la probabilité $|c_k|^2$. [Nous supposons $\langle \psi | \psi \rangle = \sum_k |c_k|^2 = 1$.] La quantité $|c_k|^2$ peut donc être considérée comme une distribution de probabilité pour P_{trans} .

(ii) Le taux de comptage simple $w_1(x, t)$ est proportionnel à la probabilité d'observer un photoélectron au point x . Il serait tentant de considérer $w_1(x, t)$, dans le sous-espace à un photon, comme la probabilité pour le photon d'être au point x . Ceci introduirait l'idée d'une « position » pour le photon. Pour confirmer une telle interprétation, il serait nécessaire de montrer qu'il est possible de construire un ensemble complet d'états localisés pour le photon, c'est-à-dire un ensemble complet d'états pour lesquels $w_1(\mathbf{r}, t)$ est partout nul sauf en un point. En fait, ceci est impossible à cause du caractère transverse du champ. Supposons par exemple que l'on veuille localiser un photon de polarisation parallèle à l'axe Oz . La transversalité impose de n'utiliser que des ondes planes ayant leurs vecteurs d'onde dans le plan xOy , ce qui entraîne alors que $w_1(\mathbf{r}, t)$ est complètement délocalisé le long de Oz . En fait, il est impossible de définir un opérateur position pour le photon, comme nous l'avons déjà indiqué dans le paragraphe C.5 du chapitre I.

3. Etude de quelques propriétés du vide

a) DISCUSSION QUALITATIVE

Pour un oscillateur harmonique réel, il est bien connu que la relation de commutation fondamentale $[x, p] = i\hbar$ empêche d'annuler *simultanément* l'énergie potentielle (proportionnelle à x^2) et l'énergie cinétique (proportionnelle à p^2). L'état d'énergie le plus bas résulte d'un « compromis » entre ces deux énergies qui varient en sens inverse en fonction de la largeur de la fonction d'onde. On comprend ainsi pourquoi l'état fondamental a une énergie absolue non nulle (« énergie de point zéro » $\hbar\omega/2$) et pourquoi dans cet état, les variances Δx^2 et Δp^2 de x et p sont non nulles.

Les mêmes phénomènes se produisent pour le champ quantique. Les relations de commutation fondamentales (A.2) entre a_i et a_j^+ (voir aussi (A.15)) empêchent d'annuler simultanément les énergies électrique et magnétique. Il s'ensuit que l'état fondamental du champ quantique, c'est-à-dire le vide $|0\rangle$, a une énergie absolue non nulle, et que, dans cet état, les variances de $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ sont non nulles. Il s'agit là d'un effet *purement quantique*.

b) VALEURS MOYENNES ET VARIANCES DES CHAMPS DANS LE VIDE

A partir du développement (A.3) de $\mathbf{E}$ en a_i et a_i^+ et de

$$a_i |0\rangle = 0 \quad \langle 0 | a_j a_i^+ | 0 \rangle = \delta_{ij} \quad (\text{C.19})$$

on démontré que

$$\langle 0 | \mathbf{E}(\mathbf{r}) | 0 \rangle = 0 \quad (\text{C.20})$$

$$\langle 0 | [\mathbf{E}(\mathbf{r})]^2 | 0 \rangle = \sum_i \mathcal{E}_{\omega_i}^2 = \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2 \varepsilon_0 L^3} \quad (\text{C.21})$$

c'est-à-dire encore, en remplaçant la somme discrète par une intégrale (voir la formule (C.34) du chapitre I)

$$\Delta \mathbf{E}^2(\mathbf{r}) = \frac{\hbar c}{2 \varepsilon_0 \pi^2} \int_0^{k_M} k^3 dk. \quad (\text{C.22})$$

La variance du champ électrique en un point donné $\mathbf{r}$ est donc, dans le vide, proportionnelle à $\hbar$ (effet quantique) et diverge en k_M^4 si la borne supérieure k_M de l'intégrale (C.22) tend vers l'infini. Des résultats analogues peuvent être établis pour $c\mathbf{B}(\mathbf{r})$ qui a, dans le vide, même valeur moyenne et même variance que $\mathbf{E}(\mathbf{r})$.

Ainsi, la théorie quantique du rayonnement prédit que, même dans le vide de photons, existe en tout point de l'espace un champ électromagnétique, de valeur moyenne nulle et de variance infinie.

Remarque

Au lieu de considérer les champs en un point $\mathbf{r}$ de l'espace, moyennons les champs dans un volume fini, entourant le point $\mathbf{r}$, et d'extension linéaire r_0 . Plus précisément, introduisons le champ moyenné

$$\bar{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = \int d^3\rho f(\rho) \mathbf{E}(\mathbf{r} + \rho) \quad (\text{C.23})$$

où $f(\rho)$ est une fonction réelle (Fig. 1a), ne dépendant que de $|\rho|$, de largeur r_0 , telle que

$$\int d^3\rho f(\rho) = 1. \quad (\text{C.24})$$

En utilisant le développement (A.3) de $\mathbf{E}$, on transforme alors (C.23) en

$$\bar{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = i \sum_i \mathcal{E}_{\omega_i} a_i g(\mathbf{k}_i) \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \text{herm. conj.} \quad (\text{C.25})$$

où $g(\mathbf{k})$ est, à un facteur près, la transformée de Fourier de $f(\rho)$

$$g(\mathbf{k}) = \int d^3\rho e^{i\mathbf{k} \cdot \rho} f(\rho) \quad (\text{C.26})$$

$g(\mathbf{k})$ ne dépend que de $|\mathbf{k}|$, tend vers zéro quand $|\mathbf{k}| \gg 1/r_0$. De plus, d'après (C.24) et (C.26)

$$g(0) = 1. \quad (\text{C.27})$$

L'allure de $g(\mathbf{k})$ est représentée sur la figure 1b.

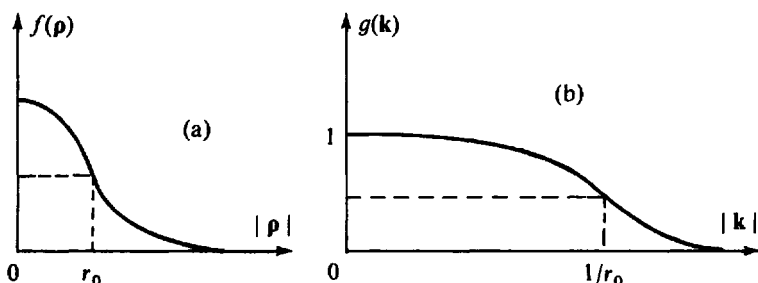


Figure 1. Allures de la fonction $f(\rho)$ servant à définir le champ moyen, et de sa transformée de Fourier $g(\mathbf{k})$.

On voit ainsi que moyennner les champs sur un volume fini, d'extension linéaire r_0 autour de $\mathbf{r}$, revient à introduire une « fonction de coupure » $g(\mathbf{k})$ dans le développement du champ en modes, qui supprime les contributions des modes de vecteurs d'onde supérieurs à $1/r_0$. Les mêmes calculs que plus haut donnent alors

$$\langle 0 | \bar{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) | 0 \rangle = 0 \quad (\text{C.28})$$

$$\Delta \bar{\mathbf{E}}^2(\mathbf{r}) = \frac{\hbar c}{2 \varepsilon_0 \pi^2} \int_0^\infty k^3 g(|\mathbf{k}|)^2 dk. \quad (\text{C.29})$$

L'intégrale de (C.29) converge si $g(|\mathbf{k}|)$ tend suffisamment vite vers zéro quand $|\mathbf{k}| \rightarrow \infty$. Ainsi, la variance dans le vide du champ moyenné $\bar{E}$ peut rester finie.

c) FLUCTUATIONS DU VIDE

Dans le paragraphe précédent, nous avons calculé les valeurs moyennes des champs et des carrés des champs à un instant donné. Pour étudier la *dynamique* du champ existant en un point $\mathbf{r}$ dans le vide, il vaut mieux utiliser le point de vue de Heisenberg et calculer les *fonctions de corrélation symétriques*

$$C_{mn}(\mathbf{r}; t + \tau, t) = \frac{1}{2} \langle 0 | E_m(\mathbf{r}, t + \tau) E_n(\mathbf{r}, t) + E_n(\mathbf{r}, t) E_m(\mathbf{r}, t + \tau) | 0 \rangle \quad (\text{C.30})$$

où $m, n = x, y, z$.

En utilisant le développement (B.30) du champ libre $E(\mathbf{r}, t)$ dans le point de vue de Heisenberg, on trouve que (voir aussi le complément C_{III}) :

$$C_{mn}(\mathbf{r}; t + \tau, t) = \delta_{mn} \frac{\hbar c}{12 \varepsilon_0 \pi^2} \int_{-k_M}^{+k_M} |k|^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} dk. \quad (\text{C.31})$$

La fonction de corrélation C_{mn} est réelle, et ne dépend que de τ (ceci est dû au fait que le vide est un état stationnaire, dont les propriétés sont invariantes par translation dans le temps). La largeur en τ de $C_{mn}(\tau)$ est de l'ordre de $1/ck_M$ et est donc très faible (rappelons qu'il faudrait faire tendre k_M vers l'infini, à moins que l'on ne moyenne les champs sur un volume fini, d'extension linéaire r_0 , ce qui revient à prendre k_M de l'ordre de $1/r_0$). Il s'ensuit que les fluctuations du vide ont un *temps de corrélation* très court. Il apparaît aussi sur (C.31) que $C_{mn}(\tau)$ est la transformée de Fourier d'une « *densité spectrale* » proportionnelle à $|\omega|^3$. Nous précisons dans le complément C_{III} l'allure des variations de $C_{mn}(\tau)$ avec τ , pour τ court (de l'ordre ou inférieur à $1/ck_M$) et pour τ long devant $1/ck_M$ (auquel cas $C_{mn}(\tau)$ décroît en τ^{-4}).

La présence dans le vide d'un champ fluctuant très rapidement autour de zéro suggère des images physiques intéressantes pour interpréter l'émission spontanée de rayonnement par un atome excité et les corrections radiatives comme le déplacement de Lamb (*).

(*) Voir par exemple J. Dalibard, J. Dupont-Roc et C. Cohen-Tannoudji, *J. Physique*, 43 (1982), 1617 et les références qui y sont citées.

4. Etats quasi classiques

a) IDÉE GÉNÉRALE

Considérons le champ libre *classique*. D'après les résultats du chapitre I, l'état de ce champ est caractérisé par l'ensemble $\{\alpha_i\}$ des variables normales. Une fois l'ensemble $\{\alpha_i\}$ connu, toutes les quantités relatives au champ sont connues. Par exemple :

$$H_{\text{trans}}^{\text{cl}}(\{\alpha_i\}) = \sum_i \hbar \omega_i \alpha_i^* \alpha_i \quad (\text{C.32})$$

$$\mathbf{P}_{\text{trans}}^{\text{cl}}(\{\alpha_i\}) = \sum_i \hbar \mathbf{k}_i \alpha_i^* \alpha_i \quad (\text{C.33})$$

$$\mathbf{E}_{\text{cl}}(\{\alpha_i\}; \mathbf{r}, t) = i \sum_i (\mathcal{E}_{\omega_i} \alpha_i \mathbf{e}_i e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} - \text{c.c}) \quad (\text{C.34})$$

et ainsi de suite...

Pour le champ quantique libre, la situation est plus complexe. Comme les diverses observables de champ ne commutent pas entre elles, il est impossible de trouver des états propres communs à ces observables avec des valeurs propres égales aux valeurs des grandeurs classiques correspondantes.

Dans ce paragraphe, nous allons essayer de trouver l'état quantique $|\{\alpha_i\}\rangle$ qui « reproduit » de la meilleure manière possible les propriétés de l'état classique $\{\alpha_i\}$. L'idée générale est de rechercher un état quantique $|\{\alpha_i\}\rangle$ tel que, pour toutes les observables importantes, les valeurs moyennes de ces observables dans l'état $|\{\alpha_i\}\rangle$ coïncident avec les grandeurs classiques correspondantes. Plus précisément, nous voulons avoir

$$\langle \{\alpha_i\} | H_{\text{trans}} | \{\alpha_i\} \rangle - E_{\text{vide}} = H_{\text{trans}}^{\text{cl}}(\{\alpha_i\}) \quad (\text{C.35})$$

(nous avons retranché l'énergie E_{vide} du vide car toutes les énergies sont repérées par rapport au vide).

$$\langle \{\alpha_i\} | \mathbf{P}_{\text{trans}} | \{\alpha_i\} \rangle = \mathbf{P}_{\text{trans}}^{\text{cl}}(\{\alpha_i\}) \quad (\text{C.36})$$

$$\langle \{\alpha_i\} | \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) | \{\alpha_i\} \rangle = \mathbf{E}_{\text{cl}}(\{\alpha_i\}; \mathbf{r}, t) \quad (\text{C.37})$$

pour tout $\mathbf{r}$ et tout t , plus des équations analogues pour $\mathbf{B}$ et $\mathbf{A}$.

b) CARACTÉRISATION DES ÉTATS QUASI CLASSIQUES

Si les développements (A.9), (A.10), (B.30) de H_{trans} , $\mathbf{P}_{\text{trans}}$, $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ en a_i et a_i^+ sont reportés dans le membre de gauche de (C.35), (C.36), (C.37), et comparés aux expressions (C.32), (C.33), (C.34) de $H_{\text{trans}}^{\text{cl}}$, $\mathbf{P}_{\text{trans}}^{\text{cl}}$, $\mathbf{E}_{\text{cl}}(\{\alpha_i\}; \mathbf{r}, t)$, on trouve que les conditions (C.35) à (C.37) sont

équivalentes à

$$\langle \{ \alpha_i \} | a_i | \{ \alpha_i \} \rangle = \alpha_i \quad \forall i \quad (\text{C. 38})$$

$$\langle \{ \alpha_i \} | a_i^+ a_i | \{ \alpha_i \} \rangle = \alpha_i^* \alpha_i \quad \forall i. \quad (\text{C. 39})$$

Introduisons alors l'opérateur

$$b_i = a_i - \alpha_i \mathbb{1} \quad (\text{C. 40})$$

où $\mathbb{1}$ est l'opérateur unité. Les équations (C. 38) et (C. 39) peuvent s'écrire

$$\langle \{ \alpha_i \} | b_i | \{ \alpha_i \} \rangle = 0 \quad \forall i \quad (\text{C. 41})$$

$$\langle \{ \alpha_i \} | b_i^+ b_i | \{ \alpha_i \} \rangle = 0 \quad \forall i. \quad (\text{C. 42})$$

L'équation (C. 42) exprime que la norme de $b_i | \{ \alpha_i \} \rangle$ est nulle, de sorte que la solution de (C. 41) et (C. 42) est

$$b_i | \{ \alpha_i \} \rangle = 0 \quad (\text{C. 43})$$

c'est-à-dire encore

$$a_i | \{ \alpha_i \} \rangle = \alpha_i | \{ \alpha_i \} \rangle. \quad (\text{C. 44})$$

Il s'ensuit que l'état $| \{ \alpha_i \} \rangle$ est un produit

$$| \{ \alpha_i \} \rangle = | \alpha_1 \rangle | \alpha_2 \rangle \dots | \alpha_i \rangle \dots \quad (\text{C. 45})$$

avec

$$a_i | \alpha_i \rangle = \alpha_i | \alpha_i \rangle. \quad (\text{C. 46})$$

L'état quasi classique $| \{ \alpha_i \} \rangle$, appelé encore état cohérent, est donc le produit tensoriel des états propres des divers opérateurs de destruction a_i , les valeurs propres α_i étant précisément les variables normales classiques correspondantes.

De (C. 46) il découle que

$$\langle \alpha_i | a_i^+ = \alpha_i^* \langle \alpha_i | \quad (\text{C. 47})$$

ainsi que

$$\mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{r}, t) | \{ \alpha_i \} \rangle = \mathbf{E}_{\text{cl}}^{(+)}(\{ \alpha_i \}; \mathbf{r}, t) | \{ \alpha_i \} \rangle \quad (\text{C. 48})$$

$$\langle \{ \alpha_i \} | \mathbf{E}^{(-)}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{\text{cl}}^{(-)}(\{ \alpha_i \}; \mathbf{r}, t) \langle \{ \alpha_i \} | \quad (\text{C. 49})$$

où $\mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{E}^{(-)}(\mathbf{r}, t)$ sont les composantes de fréquence positive et négative du champ libre dans le point de vue de Heisenberg, données en (C. 2). Plus généralement, toutes les observables rangées dans l'ordre normal ont une valeur moyenne dans l'état $| \{ \alpha_i \} \rangle$ égale à la valeur de la grandeur classique correspondante dans l'état classique $\{ \alpha_i \}$.

c) QUELQUES PROPRIÉTÉS DES ÉTATS QUASI CLASSIQUES

Nous passons maintenant en revue quelques propriétés importantes des états $|\{\alpha_i\}\rangle$, et plus précisément de l'état propre $|\alpha_i\rangle$ de l'opérateur a_i . Pour simplifier les notations, nous omettrons l'indice i . Pour plus de détails, le lecteur intéressé pourra se reporter aux références à la fin du chapitre.

En projetant (C.46) sur le bra $\langle n-1|$, on obtient la relation de récurrence

$$\sqrt{n} \langle n | \alpha \rangle = \alpha \langle n-1 | \alpha \rangle \quad (\text{C.50})$$

d'où l'on déduit

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (\text{C.51})$$

La probabilité $\mathcal{P}(n)$ d'avoir n photons dans un état quasi classique $|\alpha\rangle$ est donc donnée par une loi de Poisson

$$\mathcal{P}(n) = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \quad (\text{C.52})$$

de valeur moyenne

$$\langle n \rangle = |\alpha|^2 \quad (\text{C.53})$$

et de variance

$$\Delta n^2 = \langle n \rangle = |\alpha|^2. \quad (\text{C.54})$$

Les relations d'orthonormalisation et de fermeture des états quasi classiques peuvent être déduits de (C.51):

$$|\langle \beta | \alpha \rangle|^2 = e^{-|\beta-\alpha|^2} \quad (\text{C.55})$$

$$\frac{1}{\pi} \int d^2\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| = \mathbb{1} \quad (\text{C.56})$$

Dans (C.56) nous avons noté $d^2\alpha = d\text{Re}(\alpha) d\text{Im}(\alpha)$.

Finalement, il est possible de montrer que, en représentation x , un état quasi classique est représenté par un paquet d'ondes gaussien qui oscille sans se déformer.

Remarque

Les états quasi classiques $|\alpha\rangle$ forment une base (surcomplète) sur laquelle il est possible de développer l'opérateur densité ρ du mode. Dans de nombreux cas, ρ peut être écrit sous la forme

$$\rho = \int d^2\alpha P(\alpha, \alpha^*) |\alpha\rangle \langle \alpha| \quad (\text{C.57})$$

où $P(\alpha, \alpha^*)$ est une fonction de α et α^* qui est *réelle et normalisée*

$$\int d^2\alpha P(\alpha, \alpha^*) = 1 \quad (\text{C.58})$$

(ceci résulte de $\rho = \rho^+$ et $\text{Tr } \rho = 1$). La fonction $P(\alpha, \alpha^*)$ est appelée la « représentation P » de l'opérateur densité (voir références à la fin du chapitre ainsi que l'exercice 5). L'intérêt essentiel de la représentation P est qu'elle conduit à des formules simples pour les valeurs moyennes d'opérateurs rangés dans l'ordre *normal*, comme $(a^+)^m (a)^l$. Ainsi, l'utilisation de (C.57) dans

$$\langle (a^+)^m (a)^l \rangle = \text{Tr} \{ \rho (a^+)^m (a)^l \} \quad (\text{C.59})$$

conduit, compte tenu de (C.46) et (C.47), à

$$\begin{aligned} \langle (a^+)^m (a)^l \rangle &= \int d^2\alpha P(\alpha, \alpha^*) \text{Tr} \{ |\alpha\rangle \langle \alpha| (a^+)^m (a)^l \} \\ &= \int d^2\alpha P(\alpha, \alpha^*) \langle \alpha | (a^+)^m (a)^l | \alpha \rangle \\ &= \int d^2\alpha P(\alpha, \alpha^*) (\alpha^*)^m (\alpha)^l. \end{aligned} \quad (\text{C.60})$$

Les relations (C.58) et (C.60) font apparaître $P(\alpha, \alpha^*)$ comme une densité de probabilité donnant la distribution des valeurs possibles de α et α^* . Une telle analogie est cependant trompeuse. Tout d'abord, des résultats aussi simples que (C.60) ne peuvent être obtenus que pour des opérateurs rangés dans l'ordre *normal*. Ils ne seraient pas valables par exemple pour $\langle (a)^l (a^+)^m \rangle$. Ensuite, on peut montrer qu'il existe des états ρ pour lesquels $P(\alpha, \alpha^*)$ peut prendre des valeurs négatives. C'est la raison pour laquelle $P(\alpha, \alpha^*)$ est appelée parfois « densité de *quasi-probabilité* ».

La représentation P permet une discussion simple des effets purement quantiques. Une vraie densité de probabilité est en effet une fonction définie positive, ce qui permet d'établir certaines inégalités. Pour certains états quantiques du champ, les valeurs négatives prises par $P(\alpha, \alpha^*)$ peuvent entraîner une violation de ces inégalités. Mentionnons enfin que l'équation pilote décrivant l'amortissement de ρ sous l'effet de processus de relaxation prend souvent la forme d'une équation de Fokker-Planck pour $P(\alpha, \alpha^*)$.

d) OPÉRATEUR DE TRANSLATION POUR a ET a^+

Considérons l'opérateur $T(\alpha)$ défini par

$$T(\alpha) = e^{\alpha^* a - \alpha a^+} \quad (\text{C.61})$$

où α est un nombre complexe. Cet opérateur est unitaire puisque

$$T^+(\alpha) = e^{\alpha a^+ - \alpha^* a} = T^{-1}(\alpha). \quad (\text{C.62})$$

Un premier intérêt des opérateurs $T(\alpha)$ et $T^+(\alpha)$ est qu'ils permettent de relier simplement l'état cohérent $|\alpha\rangle$ au vide $|0\rangle$

$$\left\{ \begin{array}{l} |\alpha\rangle = T^+(\alpha) |0\rangle \\ |0\rangle = T(\alpha) |\alpha\rangle. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(C.63.a)} \\ \text{(C.63.b)} \end{array}$$

Pour démontrer (C.63.a), il suffit d'utiliser l'identité

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]} \quad \text{(C.64)}$$

valable si A et B commutent avec $[A, B]$. En prenant $A = \alpha a^+$, $B = -\alpha^* a$, et par suite $[A, B] = -|\alpha|^2 [a^+, a] = |\alpha|^2$ qui commute bien avec a et a^+ , nous pouvons en effet transformer (C.62) en

$$T^+(\alpha) = e^{\alpha a^+} e^{-\alpha^* a} e^{-|\alpha|^2/2} \quad \text{(C.65)}$$

Faisons alors agir (C.65) sur le vide après avoir développé en série les deux premières exponentielles de (C.65). En utilisant $a|0\rangle = 0$ et $(a^+)^n |0\rangle = \sqrt{n!} |n\rangle$, nous retrouvons bien le développement (C.51), ce qui démontre (C.63).

Un autre intérêt de la transformation unitaire T est qu'elle conduit à des résultats très simples pour les transformées de a et a^+ :

$$\left\{ \begin{array}{l} T(\alpha) a T^+(\alpha) = a + \alpha \\ T(\alpha) a^+ T^+(\alpha) = a^+ + \alpha^*. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(C.66.a)} \\ \text{(C.66.b)} \end{array}$$

Pour démontrer (C.66.a), partons de :

$$a T^+(\alpha) = T^+(\alpha) a + [a, T^+(\alpha)] \quad \text{(C.67)}$$

et utilisons (C.65) ainsi que $[a, f(a^+)] = df/da^+$ pour calculer le commutateur de (C.67). Il vient :

$$a T^+(\alpha) = T^+(\alpha) a + \alpha T^+(\alpha). \quad \text{(C.68)}$$

Il suffit alors de multiplier à gauche les deux membres de (C.68) par T et d'utiliser $TT^+ = 1$ pour obtenir (C.66.a). Nous aurons l'occasion, dans la suite de cet ouvrage, d'utiliser à plusieurs reprises les égalités (C.66) qui expriment que T est un opérateur de translation pour a et a^+ .

D — HAMILTONIEN D'INTERACTION ENTRE PARTICULES ET CHAMP

1. Hamiltonien des particules. Hamiltonien du rayonnement. Hamiltonien d'interaction

Il sera intéressant pour la suite de décomposer l'hamiltonien H du système global en trois parties :

$$H = H_P + H_R + H_I \quad (D.1)$$

où H_P ne dépend que des variables $\mathbf{r}_\alpha$ et $\mathbf{p}_\alpha$ des particules (hamiltonien des particules), H_R ne dépend que des variables a_i et a_i^+ du champ (hamiltonien du rayonnement), H_I dépend *à la fois* de $\mathbf{r}_\alpha$, $\mathbf{p}_\alpha$ et de a_i , a_i^+ (hamiltonien d'interaction). A partir de l'expression (A.16) de H , on obtient :

$$H_P = \sum_\alpha \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} + V_{\text{Coul}} \quad (D.2)$$

$$H_R = H_{\text{trans}} = \sum_i \hbar \omega_i \left(a_i^+ a_i + \frac{1}{2} \right) \quad (D.3)$$

$$H_I = H_{I1} + H_{I2} \quad (D.4)$$

où H_{I1} est linéaire par rapport aux champs :

$$H_{I1} = - \sum_\alpha \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha). \quad (D.5)$$

(Nous avons utilisé la transversalité de $\mathbf{A}$, en jauge de Coulomb, qui entraîne $\mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha) = \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha) \cdot \mathbf{p}_\alpha$), et H_{I2} quadratique :

$$H_{I2} = \sum_\alpha \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha} [\mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha)]^2. \quad (D.6)$$

Jusqu'ici, nous avons considéré uniquement des particules chargées, sans degrés de liberté internes. Il est possible de lever cette restriction en ajoutant aux observables $\mathbf{r}_\alpha$ et $\mathbf{p}_\alpha$ de la particule α l'opérateur de spin $\mathbf{S}_\alpha$. A cause du moment magnétique associé à un tel spin :

$$\mathbf{M}_\alpha^S = g_\alpha \frac{q_\alpha}{2m_\alpha} \mathbf{S}_\alpha \quad (D.7)$$

où g_α est le facteur de Landé intrinsèque de la particule α , un nouveau terme doit être ajouté à H_I :

$$H_{I1}^S = - \sum_\alpha \mathbf{M}_\alpha^S \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha) \quad (D.8)$$

représentant les couplages des moments magnétiques de spin des diverses

particules avec le champ magnétique du rayonnement $\mathbf{B}$, évalué aux points où se trouvent ces particules.

Remarques

(i) En présence de champs extérieurs, il faut, d'une part, partir de l'expression (A.17) de H , d'autre part, ajouter les couplages des moments magnétiques de spin avec le champ magnétique extérieur. Comme $\mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t)$, $U_e(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{B}_e(\mathbf{r}, t)$ sont des grandeurs *classiques*, imposées de l'extérieur, les opérateurs obtenus en remplaçant dans ces grandeurs le point courant $\mathbf{r}$ par l'opérateur $\mathbf{r}_\alpha$ sont des opérateurs atomiques. On obtient ainsi pour H_p et H_l les nouvelles expressions suivantes :

$$H_p = \sum_{\alpha} (\mathbf{p}_\alpha^e)^2 / 2 m_\alpha + V_{\text{Coul}} + \sum_{\alpha} q_\alpha U_e(\mathbf{r}_\alpha, t) - \sum_{\alpha} \mathbf{M}_\alpha^S \cdot \mathbf{B}_e(\mathbf{r}_\alpha, t) \quad (\text{D.9})$$

où

$$\mathbf{p}_\alpha^e = \mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_\alpha, t) \quad (\text{D.10})$$

$$H_l = H_{l1} + H_{l1}^S + H_{l2} \quad (\text{D.11})$$

avec

$$H_{l1} = - \sum_{\alpha} \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{p}_\alpha^e \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha) \quad (\text{D.12})$$

H_{l1}^S et H_{l2} gardant les mêmes expressions qu'en (D.8) et (D.6).

(ii) Tous les termes dépendant du spin introduits dans ce paragraphe l'ont été de manière heuristique. Pour des électrons, ils peuvent être justifiés par l'étude de la limite non relativiste de l'équation de Dirac (voir aussi complétement B_v). On trouve alors que le facteur g d'un électron est égal à 2.

2. Ordres de grandeur des divers termes d'interaction pour des systèmes de particules liées

Considérons tout d'abord le rapport H_{l2}/H_{l1} . Les ordres de grandeur de A et p sont pris égaux à leur écart quadratique moyen dans l'état considéré :

$$\frac{H_{l2}}{H_{l1}} \simeq \frac{q^2 A^2/m}{qAp/m} = \frac{qAp/m}{p^2/m} \simeq \frac{H_{l1}}{H_p}. \quad (\text{D.13})$$

Pour de faibles intensités du rayonnement, le rapport H_{l1}/H_p est petit, ce qui entraîne que H_{l2}/H_{l1} l'est aussi. En revanche, à très haute intensité (quand le champ de rayonnement incident devient de l'ordre du champ intra-atomique), H_{l2} peut devenir du même ordre ou plus grand que H_{l1} .

Il convient de noter toutefois que, dans certains processus de diffusion, comme la diffusion Rayleigh, Thomson ou Compton, H_{l2} peut intervenir dès l'ordre 1 de la théorie des perturbations (un seul élément de matrice de H_{l2} suffit en effet pour décrire le processus à deux photons corres-

pendant à la destruction du photon incident et à la création du photon diffusé), alors que H_{I1} ne peut jouer un rôle qu'à l'ordre 2 (les éléments de matrice de H_{I1} correspondent à des processus à un photon et il en faut deux pour décrire un processus de diffusion). Même si H_{I2} est plus petit que H_{I1} , la contribution de H_{I2} à l'ordre 1 peut être de l'ordre de celle de H_{I1} à l'ordre 2, et même parfois supérieure.

Remarque

Pour une particule libre, ou une particule faiblement liée, H_{I2} (plus précisément, les éléments de matrice diagonaux de H_{I2}) peut être interprété comme étant l'énergie cinétique de vibration de la particule dans le champ de rayonnement. En effet, pour un champ de fréquence ω , $A \simeq E/\omega$, et par suite

$$H_{I2} \simeq \frac{q^2 A^2}{2m} \simeq \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2}. \quad (\text{D.14})$$

On reconnaît en (D.14) l'énergie cinétique d'une particule vibrant dans un champ E de fréquence ω , avec une amplitude $qE/m\omega^2$ et une vitesse $qE/m\omega$. Notons qu'une telle image demeure valable dans le vide de photons. Il faut dans ce cas remplacer E par $\mathcal{E}_\omega$, et H_{I2} représente alors l'énergie cinétique de vibration de la particule dans les fluctuations du vide.

Considérons maintenant le rapport H_{I1}^S/H_{I1} . En utilisant (D.7), (D.8) et le fait que $B \sim kA$ (puisque $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$), on obtient :

$$\frac{H_{I1}^S}{H_{I1}} \simeq \frac{q\hbar B/m}{qAp/m} \simeq \frac{\hbar k A}{pA} = \frac{\hbar k}{p} \quad (\text{D.15})$$

c'est-à-dire le rapport entre l'impulsion $\hbar k$ du photon et celle, p , de la particule. Pour des photons de faible énergie et un électron lié (par exemple, dans le domaine optique ou microonde), un tel rapport est très petit devant 1.

3. Règles de sélection

En l'absence de champs extérieurs (ou en présence de champs extérieurs invariants par translation spatiale), on peut montrer, à partir des relations de commutation (A.1) et (A.2), que :

$$[\mathbf{P}, H] = 0 = [\mathbf{P}, H_p] = [\mathbf{P}, H_R] = [\mathbf{P}, H_I] \quad (\text{D.16})$$

où $\mathbf{P}$ est l'impulsion totale donnée en (A.18) (voir exercice 3).

Un tel résultat peut se comprendre physiquement si l'on note que $\mathbf{P}$ est le générateur infinitésimal des translations spatiales du système global champ + particules. Le fait qu'un opérateur commute avec $\mathbf{P}$ exprime

donc que la grandeur physique correspondante est invariante dans une translation du système global. Ainsi, la vitesse de chaque particule ne change pas lors d'une translation, de sorte que l'énergie cinétique totale (première ligne de (A.16)) reste inchangée. De même, une translation globale ne change pas les distances entre particules, donc leur énergie coulombienne (deuxième ligne de (A.16)), ainsi que l'intégrale dans tout l'espace de $\mathbf{E}^2 + c^2 \mathbf{B}^2$ (troisième ligne de (A.16)). Enfin, pour comprendre pourquoi H_I commute avec $\mathbf{P}$, il suffit de noter que $\mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha)$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha)$ ne changent pas quand on translate de la même quantité les champs $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$ et le point $\mathbf{r}_\alpha$ où l'on évalue ces champs.

Il découle de (D.16) que, dans le point de vue de Heisenberg, l'impulsion totale est une constante du mouvement, comme en théorie classique :

$$\frac{d}{dt} \mathbf{P}(t) = \mathbf{0} . \quad (\text{D.17})$$

Une autre conséquence de (D.16) est que H_I n'a d'éléments de matrice non nuls qu'entre états propres de $H_P + H_R$ ayant la même impulsion totale. (Comme $\mathbf{P}$ commute avec $H_P + H_R$, on peut en effet utiliser une base de vecteurs propres communs à $\mathbf{P}$ et $H_P + H_R$.) Une telle règle de sélection exprime la conservation de l'impulsion globale lors des processus d'absorption ou d'émission de photons par des systèmes de particules chargées. Combinée avec la conservation de l'énergie qui apparaît lorsqu'on résout l'équation de Schrödinger sur des temps assez longs, la conservation de l'impulsion globale permet de comprendre des effets physiques importants comme l'effet Doppler et l'énergie de recul.

On pourrait, de la même manière, montrer que le moment cinétique total donné en (A.19) commute avec H , H_P , H_R , H_I (en l'absence de champs extérieurs ou en présence de champs extérieurs invariants par rotation). Une conséquence de ce résultat est que H_I n'a d'éléments de matrice non nuls qu'entre états propres de $H_P + H_R$ ayant même moment cinétique total (conservation du moment cinétique lors de l'absorption ou de l'émission de photons par des systèmes de particules chargées).

4. Introduction d'une coupure (*)

Les hamiltoniens (A.16) ou (A.17) étudiés dans ce chapitre ne sont bien sûr valables que pour des particules lentes (non relativistes). Ils ne peuvent donc pas décrire correctement l'interaction de telles particules avec les « modes relativistes » du champ (c'est-à-dire les modes tels que

(*) Une coupure analogue a déjà été introduite au paragraphe C.5.d du chapitre II sur le lagrangien standard d'interaction. Pour le lecteur n'ayant pas lu le chapitre II, nous suivons ici une démarche analogue, mais directement sur l'hamiltonien d'interaction, sans passer par le lagrangien.

$\hbar\omega \gtrsim mc^2$), puisque de telles interactions pourraient communiquer aux particules des vitesses élevées, ou même créer de nouvelles particules, comme des paires électron-positron.

Or, le développement en modes des champs **A** et **B** apparaissant dans l'hamiltonien d'interaction étudié plus haut contient des modes de fréquence arbitrairement élevée. Plutôt que de conserver les termes de couplage avec les modes relativistes, qui sont certainement inexacts, nous préférons ici les éliminer de l'hamiltonien d'interaction. Une telle élimination est réalisée en introduisant une coupure dans tous les développements des champs apparaissant dans H_I . Plus précisément, toutes les sommations sur k_i sont limitées à :

$$|k_i| = k_i \leq k_c \quad (\text{D.18})$$

avec

$$\hbar k_c = \hbar\omega_c \ll m_\alpha c^2. \quad (\text{D.19})$$

La fréquence de coupure ω_c est choisie cependant grande devant les fréquences caractéristiques ω_0 du mouvement des particules :

$$\omega_0 \ll \omega_c \ll m_\alpha c^2 / \hbar \quad (\text{D.20})$$

de manière à conserver dans H_I un intervalle spectral suffisamment étendu, et pouvoir décrire ainsi correctement les interactions électromagnétiques importantes des particules, en particulier les processus d'absorption ou d'émission résonnantes de photons. En fait, avec la coupure (D.18), nous renonçons pour l'instant à décrire l'effet sur les particules d'émissions et de réabsorptions « virtuelles » de photons haute fréquence.

A ce stade de la discussion, il convient de se souvenir, qu'en réexprimant le champ longitudinal en fonction des coordonnées $\mathbf{r}_\alpha$ des particules, nous avons en fait inclus dans l'hamiltonien des particules une partie des interactions électromagnétiques des particules (terme d'interaction coulombienne de (A.16)). Pour être cohérent avec ce qui précède, il convient donc d'introduire la même coupure dans V_{Coul} . Revenons pour cela au calcul de V_{Coul} dans l'espace réciproque, c'est-à-dire à la formule (B.35) du chapitre I donnant V_{Coul} sous forme d'intégrales sur k , et introduisons une borne supérieure k_c dans ces intégrales. L'énergie coulombienne propre de la particule α , $\varepsilon_{\text{Coul}}^\alpha$, devient finie et égale à :

$$\varepsilon_{\text{Coul}}^\alpha = \frac{q_\alpha^2 k_c}{4 \pi^2 \varepsilon_0}. \quad (\text{D.21})$$

On obtient en fait l'énergie de Coulomb d'une charge q_α répartie dans un volume d'extension linéaire $1/k_c$, ce qui n'est pas surprenant puisqu'une coupure à k_c est équivalente à un moyennage spatial sur un volume k_c^{-3} (voir remarque du § C.3.b ci-dessus). Quant au terme d'interaction coulombienne entre particules, il demeure pratiquement inchangé si $1/k_c$

est petit devant les distances entre particules, ce que nous supposons réalisé ici.

Illustrons la discussion précédente sur le système atomique le plus simple, à savoir l'atome d'hydrogène. La figure 2, qui n'est pas à l'échelle, donne quelques énergies caractéristiques importantes $\hbar\omega$ et les longueurs d'ondes correspondantes $\lambda = c/\omega = 1/k$.

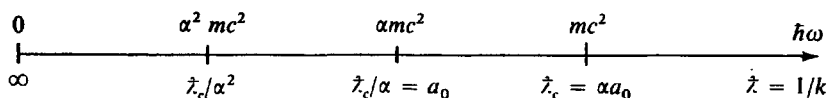


Figure 2. Quelques énergies et longueurs d'onde caractéristiques pour l'atome d'hydrogène (figure non à l'échelle).

Une première énergie importante est l'énergie au repos mc^2 de l'électron. D'après (D.19), l'énergie de coupure $\hbar\omega_c$ doit être à gauche de mc^2 . La longueur d'onde correspondant à mc^2 est la longueur d'onde de Compton λ_c , plus petite que le rayon de Bohr a_0 par un facteur $\alpha = 1/137$ (α est la constante de structure fine). Pour une énergie de coupure $\hbar\omega_c$ de l'ordre de mc^2 , les charges sont donc réparties sur un volume d'extension linéaire $1/k_c = \lambda_c$ petit devant la distance moyenne a_0 entre les deux charges, et il est donc légitime de négliger les modifications de l'énergie d'interaction coulombienne entre l'électron et le proton.

Les énergies atomiques caractéristiques (notées $\hbar\omega_0$ plus haut) sont ici de l'ordre de l'énergie d'ionisation, c'est-à-dire de l'ordre de $\alpha^2 mc^2$. Une telle énergie est plus petite que mc^2 par au moins quatre ordres de grandeur, et il n'y a donc aucune difficulté à trouver une fréquence de coupure ω_c , satisfaisant (D.20).

Finalement, comme le rayon de Bohr a_0 est égal à λ_c/α , une longueur d'onde de l'ordre de a_0 correspond à une énergie $\hbar\omega$ de l'ordre de αmc^2 , beaucoup plus petite que mc^2 , mais également beaucoup plus grande que $\alpha^2 mc^2$. L'intervalle $[0 - \alpha mc^2]$ de la figure 2, qui est très grand devant l'énergie atomique typique $\alpha^2 mc^2$, correspond donc à des longueurs d'ondes grandes devant les dimensions atomiques. Si l'on s'intéresse uniquement à l'interaction de l'atome d'hydrogène avec des photons d'énergie tombant dans cet intervalle, il est possible de faire « l'approximation des grandes longueurs d'onde », qui consiste à négliger la variation spatiale du champ électromagnétique sur l'étendue du système atomique (*). Les conséquences d'une telle approximation sur l'hamiltonien

(*) Il existe bien sûr des effets physiques, comme l'existence des transitions quadrupolaires, qui sont liés aux premières corrections à l'approximation des grandes longueurs d'ondes.

d'un ou plusieurs systèmes de charges localisés sont étudiées dans le complément A_{IV}.

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES ET CONSEILS DE LECTURE

Ouvrages généraux : Kroll ; Heitler ; Power ; Loudon ; Haken.

Pour la théorie quantique des signaux photoélectriques, voir Glauber, Nussenzweig. Voir également le complément A_{II} de « Photons et Atomes — Les processus d'interaction »: Pour la théorie semi-classique des mêmes signaux, voir W. E. Lamb et M. O. Scully (*Polarisation, Matière et Rayonnement*, p. 363, Presses Universitaires de France (1969), L. Mandel (*Progress in Optics*, **XIII**, 27 (1976)) ; L. Mandel, E.C.G. Sudarshan et E. Wolf (*Proc. Phys. Soc.*, **84**, 435 (1964)).

Pour les états quasi classiques et les densités de quasi-probabilité : voir Glauber ; Cohen-Tannoudji, Diu et Laloë (Complément G_V) ; Sargent, Scully et Lamb (chap. XI et XVI) ; Klauder et Skagerstam.

COMPLÉMENT A_{III}ANALYSE DES PHÉNOMÈNES D'INTERFÉRENCE
EN THÉORIE QUANTIQUE DU RAYONNEMENT

L'aspect ondulatoire de la lumière est révélé expérimentalement par son aptitude à donner naissance à des phénomènes d'interférence. Un autre aspect, tout aussi essentiel, se manifeste par le caractère discret des échanges d'énergie et d'impulsion entre matière et rayonnement : c'est l'aspect corpusculaire.

C'est à propos de la lumière que l'idée de dualité onde-corpuscule a été introduite pour la première fois en physique par Einstein en 1909, avant d'être étendue ensuite, avec le succès que l'on connaît, à tous les objets physiques. Il n'est donc pas étonnant que la plupart des ouvrages de physique quantique commencent par une discussion du caractère indissociable des aspects ondulatoire et corpusculaire de la lumière, pour introduire ensuite l'idée simple que ces deux aspects peuvent être intégrés dans une description quantique des phénomènes où « l'onde permet de calculer la probabilité pour que le corpuscule se manifeste ».

Si elle a l'avantage de faire appel à des phénomènes physiques bien connus, une telle discussion a toutefois l'inconvénient de pouvoir faire croire au lecteur (malgré les mises en garde qui lui sont adressées) que les ondes de Maxwell sont des fonctions d'onde pour le photon. Il est en quelque sorte dommage que les phénomènes d'interférences les plus familiers des physiciens soient relatifs à un système, la lumière, pour lequel il n'existe pas d'approximation non relativiste : on peut introduire des fonctions d'onde non relativistes $\psi(\mathbf{r})$ pour un électron (lent), mais pas pour le photon qui est fondamentalement relativiste.

Il n'est donc pas sans intérêt de reprendre ici l'analyse des phénomènes d'interférence et de la dualité onde-corpuscule pour le champ électromagnétique dans le cadre général de la théorie quantique du rayonnement qui a été mis en place dans ce chapitre. Nous avons en effet maintenant à notre disposition tous les éléments nous permettant de discuter valablement d'un certain nombre de problèmes relatifs aux phénomènes d'interférence. Peut-on construire des états $|\psi\rangle$ du champ quantique tels que des signaux locaux, comme les signaux de détection photoélectrique $w_i(\mathbf{r}, t)$, varient sinusoidalement en fonction de $\mathbf{r}$ à t fixé (ou en fonction de t à $\mathbf{r}$ fixé) ? Peut-on observer également des franges d'interférence sur les signaux de comptage double w_{ij} ? Peut-on observer des franges avec deux faisceaux indépendants ? Que se passe-t-il s'il n'y a qu'un seul photon dans le champ ? Puisque l'onde de Maxwell n'est pas la fonction d'onde du photon, quelles sont les grandeurs qui interfèrent ?

Nous commençons (§ 1) par préciser le modèle simple utilisé dans ce

complément pour discuter les phénomènes d'interférence. Nous analysons ensuite les phénomènes d'interférence observables sur des signaux de comptage simple (§ 2) et double (§ 3). Nous pourrions alors interpréter les résultats obtenus en termes d'interférences entre amplitudes de transition (§ 4) et conclure sur la description de la dualité onde corpuscule donnée par la théorie quantique du rayonnement (§ 5).

1. Présentation d'un modèle simple

Afin de simplifier au maximum les calculs, nous supposons que le champ *libre* a été préparé dans un état où *deux modes seulement*, 1 et 2, contiennent des photons, tous les autres modes $i \neq 1, 2$ étant vides.

$$|\psi\rangle = |\psi_{12}\rangle \otimes \prod_{i \neq 1,2} |0_i\rangle. \quad (1)$$

Concrètement, une telle situation peut être réalisée en faisant réfléchir un faisceau de lumière parallèle sur deux miroirs plans, faisant entre eux un petit angle (miroirs de Fresnel), ou encore en utilisant deux faisceaux laser indépendants. Les deux modes 1 et 2 sont supposés avoir même polarisation, de sorte que le caractère vectoriel du champ sera ignoré dans tout ce qui suit.

La forme la plus générale du vecteur d'état $|\psi_{12}\rangle$ apparaissant dans (1) est une superposition linéaire des états de base $|n_1, n_2\rangle$ relatifs à l'ensemble des deux modes 1 et 2.

$$|\psi_{12}\rangle = \sum_{n_1, n_2} c_{n_1, n_2} |n_1, n_2\rangle. \quad (2)$$

Il peut se produire que $|\psi_{12}\rangle$ soit factorisé (c'est ce qui se passe notamment lorsqu'on utilise deux faisceaux laser indépendants)

$$|\psi_{12}\rangle = |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle. \quad (3)$$

Un état quasi classique est un cas particulier de (3) (voir le § C.4 de ce chapitre)

$$|\psi_{12}\rangle = |\alpha_1\rangle |\alpha_2\rangle. \quad (4)$$

Il sera utile enfin de considérer des états à un photon :

$$|\psi_{12}\rangle = c_1 |1, 0\rangle + c_2 |0, 1\rangle \quad (5)$$

dans lesquels le photon a une amplitude de probabilité c_1 d'être dans le mode 1, c_2 d'être dans le mode 2.

Remarque

L'état du champ est décrit en (1) par un vecteur d'état (cas pur). Plus géné-

ralement, il faudrait utiliser un opérateur densité ρ (mélange statistique d'états)

$$\rho = \rho(1, 2) \otimes \prod_{i \neq 1, 2} (|0_i\rangle \langle 0_i|). \quad (6)$$

Si $\rho(1, 2)$ admet une représentation P (voir remarque à la fin du § C.4. c), on a

$$\rho(1, 2) = \int d^2\alpha_1 d^2\alpha_2 P(\alpha_1, \alpha_2) |\alpha_1, \alpha_2\rangle \langle \alpha_1, \alpha_2| \quad (7)$$

où $|\alpha_1, \alpha_2\rangle$ est l'état quasi classique (4), et où $P(\alpha_1, \alpha_2)$ (notation simplifiée pour $P(\alpha_1, \alpha_1^*, \alpha_2, \alpha_2^*)$) est une densité de quasi-probabilité pour α_1, α_2 , réelle, normée, mais non nécessairement positive. L'état du champ apparaît alors comme un « mélange statistique » d'états quasi classiques avec une « fonction poids » $P(\alpha_1, \alpha_2)$ non nécessairement positive.

Le champ libre étant dans l'état (1) (ou (6)), nous supposons maintenant que nous plaçons un photodétecteur en $\mathbf{r}$. Comment varie le taux de comptage simple $w_1(\mathbf{r}, t)$ (voir § C.1. c) en fonction de $\mathbf{r}$ pour t fixé (ou en fonction de t pour $\mathbf{r}$ fixé) ? Nous pouvons également placer deux photodétecteurs, l'un en $\mathbf{r}$ et l'autre en $\mathbf{r}'$, et étudier les *corrélations* entre les signaux qu'ils fournissent. Plus précisément, comment varie le taux de comptage double $w_{11}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ (défini lui aussi dans le § C.1. c) en fonction de $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ pour $t = t'$ (ou en fonction de $t - t'$ pour $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$) ?

Comme w_1 et w_{11} sont des valeurs moyennes de produits d'opérateurs rangés dans l'ordre normal (voir expressions (C.1) et (C.5)), et que tous les modes $i \neq 1, 2$ sont vides, la contribution des modes $i \neq 1, 2$, dans le développement (en a_i et a_i^+) des opérateurs de champs $E^{(+)}$ et $E^{(-)}$ apparaissant dans w_1 et w_{11} , s'annule. En effet, les opérateurs a_i , avec $i \neq 1, 2$, apparaissant dans $E^{(+)}$, donnent zéro lorsqu'ils agissent sur $|0_i\rangle$. Il en est de même pour les opérateurs a_i^+ apparaissant dans $E^{(-)}$ et agissant sur $\langle 0_i|$. Pour tous les calculs de signaux qui suivent, il est donc suffisant de ne garder que les modes 1 et 2 dans le développement de $E^{(+)}$ et $E^{(-)}$. Nous pouvons donc écrire :

$$E^{(+)}(\mathbf{r}, t) = E_1^{(+)}(\mathbf{r}, t) + E_2^{(+)}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}_1 a_1 e^{i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} - \omega_1 t)} + \mathcal{E}_2 a_2 e^{i(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r} - \omega_2 t)} \quad (8)$$

où, d'après les formules (B.30) et (A.6) :

$$\mathcal{E}_1 = i \left[\frac{\hbar \omega_1}{2 \varepsilon_0 L^3} \right]^{1/2}, \quad \mathcal{E}_2 = i \left[\frac{\hbar \omega_2}{2 \varepsilon_0 L^3} \right]^{1/2}. \quad (9)$$

2. Phénomènes d'interférence observables sur les signaux de photo-détection simple

a) CAS GÉNÉRAL

En reportant (8), et la formule adjointe pour $E^{(-)}$, dans l'expression de w_1 , on obtient :

$$\begin{aligned} w_1 &= \langle \psi_{12} | (E_1^{(-)} + E_2^{(-)}) (E_1^{(+)} + E_2^{(+)}) | \psi_{12} \rangle = \\ &= \langle \psi_{12} | E_1^{(-)} E_1^{(+)} | \psi_{12} \rangle + \langle \psi_{12} | E_2^{(-)} E_2^{(+)} | \psi_{12} \rangle + \\ &\quad + \langle \psi_{12} | E_1^{(-)} E_2^{(+)} | \psi_{12} \rangle + \langle \psi_{12} | E_2^{(-)} E_1^{(+)} | \psi_{12} \rangle \quad (10) \end{aligned}$$

qui peut encore s'écrire :

$$\begin{aligned} w_1(\mathbf{r}, t) &= |\mathcal{E}_1|^2 \langle \psi_{12} | a_1^+ a_1 | \psi_{12} \rangle + 1 \mp 2 + \\ &\quad + 2 \operatorname{Re} \mathcal{E}_1^* \mathcal{E}_2 \langle \psi_{12} | a_1^+ a_2 | \psi_{12} \rangle \times \\ &\quad \times e^{i[(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r} - (\omega_2 - \omega_1)t]}. \quad (11) \end{aligned}$$

Si $\langle \psi_{12} | a_1^+ a_2 | \psi_{12} \rangle$ est non nul, il apparaît sur (11) que le signal de comptage simple a une dépendance sinusoïdale en $\mathbf{r}$ pour t fixé, et qu'il permet donc d'observer des phénomènes d'interférence.

b) ETATS QUASI CLASSIQUES

Supposons que $|\psi_{12}\rangle$ soit un état quasi classique (4). Comme $|\alpha_1, \alpha_2\rangle$ est ket propre de $E_1^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ et $E_2^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ avec des valeurs propres respectivement égales à $E_{1cl}^{+}(\{\alpha_1\}; \mathbf{r}, t)$ et $E_{2cl}^{+}(\{\alpha_2\}; \mathbf{r}, t)$, et que $\langle \alpha_1, \alpha_2 |$ est bra propre des opérateurs adjoints avec les valeurs propres conjuguées (voir (8) et les formules (C. 48) et (C. 49)), il vient :

$$w_1(\mathbf{r}, t) = |E_{1cl}^{+}(\{\alpha_1\}; \mathbf{r}, t) + E_{2cl}^{+}(\{\alpha_2\}; \mathbf{r}, t)|^2. \quad (12)$$

Pour un état quasi classique, $w_1(\mathbf{r}, t)$ apparaît donc bien comme le carré du module de la superposition de deux ondes de Maxwell classiques. Dans ce cas particulier, il est possible de raisonner sur des ondes électromagnétiques classiques et de les faire interférer pour calculer la probabilité pour que le photon manifeste sa présence en $\mathbf{r}, t$.

c) ETATS FACTORISÉS

Supposons maintenant que $|\psi_{12}\rangle$ soit un état factorisé (3) (cas de deux faisceaux lasers indépendants). L'expression générale (11) devient alors :

$$\begin{aligned} w_1(\mathbf{r}, t) &= |\mathcal{E}_1|^2 \langle \psi_1 | a_1^+ a_1 | \psi_1 \rangle + 1 \mp 2 + \\ &\quad + 2 \operatorname{Re} \mathcal{E}_1^* \mathcal{E}_2 \langle \psi_1 | a_1^+ | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | a_2 | \psi_2 \rangle \times \\ &\quad \times e^{i[(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r} - (\omega_2 - \omega_1)t]}. \quad (13) \end{aligned}$$

Les franges d'interférence n'existent que si $\langle \psi_1 | a_1 | \psi_1 \rangle$ et $\langle \psi_2 | a_2 | \psi_2 \rangle$ sont simultanément non nuls, c'est-à-dire si les valeurs moyennes des champs $\langle E_1 \rangle$ et $\langle E_2 \rangle$ sont toutes deux non nulles.

En particulier, si

$$| \psi_{12} \rangle = | n_1 \rangle | n_2 \rangle, \quad (14)$$

c'est-à-dire si le nombre de photons dans chaque mode a une valeur bien définie, il n'y a pas de franges car $\langle n_1 | a_1 | n_1 \rangle = \langle n_2 | a_2 | n_2 \rangle = 0$. Un état $| n \rangle$ est en quelque sorte l'analogue quantique d'un champ mono-mode classique d'énergie bien définie, mais de phase aléatoire, équipartie entre 0 et 2π . Or, pour observer des interférences entre deux faisceaux, les phases relatives des champs des deux faisceaux doivent être bien définies.

La discussion qui précède montre qu'il est en principe possible d'observer des franges d'interférence sur w_1 avec deux faisceaux lasers *indépendants*. En effet, à un instant donné, les phases des champs des deux lasers ont une valeur bien définie. Cependant, dans la pratique, ces phases changent *indépendamment* l'une de l'autre au cours du temps (par suite de phénomènes de bruit), et au bout d'un temps de l'ordre de τ_d (temps de diffusion de la phase), la phase relative entre les deux lasers a perdu tout souvenir de sa valeur initiale (*). Pour observer des franges, il faut donc que le temps d'observation soit court devant τ_d de manière que le phénomène de diffusion de phase ne brouille pas les franges en les faisant glisser de plusieurs interfranges.

Notons enfin que, en général :

$$\langle \psi_1 | a_1^\dagger a_1 | \psi_1 \rangle \neq \langle \psi_1 | a_1^\dagger | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | a_1 | \psi_1 \rangle \quad (15)$$

de sorte que

$$w_1(\mathbf{r}, t) \neq | \langle E_1 \rangle + \langle E_2 \rangle |^2. \quad (16)$$

Le taux de comptage simple ne peut donc pas être considéré comme résultant de l'interférence entre les deux champs moyens $\langle E_1 \rangle$ et $\langle E_2 \rangle$.

d) ETATS À UN SEUL PHOTON

Considérons enfin les états à un seul photon (5). L'action de $E_1^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ sur un tel état donne

$$E_1^{(+)}(\mathbf{r}, t) | \psi_{12} \rangle = c_1 \mathcal{E}_1 e^{i[\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} - \omega_1 t]} | 0_1, 0_2 \rangle. \quad (17)$$

Détruire un photon dans un état qui contient un seul photon donne en effet le vide. Une formule analogue peut être établie pour $E_2^{(+)}(\mathbf{r}, t)$, de sorte qu'il vient finalement

$$w_1(\mathbf{r}, t) = | c_1 \mathcal{E}_1 e^{i[\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} - \omega_1 t]} + c_2 \mathcal{E}_2 e^{i[\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r} - \omega_2 t]} |^2. \quad (18)$$

(*) Dans l'expérience des miroirs de Fresnel, les deux faisceaux qui interfèrent proviennent du dédoublement d'un *même* faisceau initial. La phase *relative* de ces deux faisceaux reste fixe même si la phase du faisceau initial fluctue. C'est ce qui explique pourquoi les franges d'interférence sont beaucoup plus faciles à observer dans ce cas.

Il apparaît ainsi qu'il est tout à fait possible d'observer des interférences sur un champ quantique qui ne contient qu'un photon, pourvu toutefois que ce photon ait une amplitude non nulle d'être dans deux modes différents (concrètement, l'expérience doit être recommencée un grand nombre de fois avec les mêmes conditions initiales, puisque chaque détection fait disparaître le photon).

Remarques

(i) Pour l'état à un seul photon (5), on peut montrer que

$$\langle \psi_{12} | E_1 | \psi_{12} \rangle = \langle \psi_{12} | E_2 | \psi_{12} \rangle = 0. \quad (19)$$

Il s'ensuit que l'onde $c_1 \mathcal{E}_1 e^{i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} - \omega_1 t)}$ apparaissant dans (18) n'est pas le champ électrique moyen dans le mode 1, qui est nul (il en est de même pour l'autre terme de (18)). Les deux ondes qui interfèrent dans (18) ne sont donc pas reliées à des champs moyens.

(ii) Les franges d'interférence n'apparaîtraient pas dans un état qui serait un mélange statistique des états $|1_1, 0_2\rangle$ et $|0_1, 1_2\rangle$ avec des poids $|c_1|^2$ et $|c_2|^2$. La relation de phase entre les deux états apparaissant dans le développement (5), (reliée à l'argument du nombre complexe $c_1^* c_2$) est essentielle pour l'apparition des franges.

3. Phénomènes d'interférence observables sur les signaux de photodétection double

Si l'on remplace les quatre opérateurs $E^{(\pm)}$ apparaissant dans l'expression de w_{II} par $E_1^{(\pm)} + E_2^{(\pm)}$, on obtient $2^4 = 16$ termes présentant des dépendances sinusoïdales variées par rapport aux variables $(\mathbf{r}, t)$, $(\mathbf{r}', t')$, $(\mathbf{r} + \mathbf{r}', t + t')$, $(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')$. Il apparaît ainsi très généralement que des phénomènes d'interférence peuvent être observés sur des signaux de comptage double. Examinons plus en détail quelques cas particuliers.

a) ETATS QUASI CLASSIQUES

A partir de (4), (8) et des formules (C.48) et (C.49), on obtient pour de tels états

$$w_{II} = I_{cl}(\{\alpha_1, \alpha_2\}; \mathbf{r}, t) I_{cl}(\{\alpha_1, \alpha_2\}; \mathbf{r}', t') \quad (20)$$

où $I_{cl}(\{\alpha_1, \alpha_2\}; \mathbf{r}, t)$ est l'intensité classique

$$I_{cl}(\{\alpha_1, \alpha_2\}; \mathbf{r}, t) = |E_{cl}^{(+)}(\{\alpha_1\}; \mathbf{r}, t) + E_{cl}^{(+)}(\{\alpha_2\}; \mathbf{r}, t)|^2. \quad (21)$$

Dans ce cas particulier, w_{II} est tout simplement le produit des deux intensités classiques en $\mathbf{r}, t$ et $\mathbf{r}', t'$. Il apparaît donc ainsi que, lorsque le champ est dans un état quasi classique, les résultats de la théorie quantique du rayonnement coïncident avec ceux des théories semi classiques (voir remarque à la fin du § C.1.c).

b) ETATS À UN SEUL PHOTON

Pour de tels états, on trouve que

$$w_{II}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = 0 \quad \forall \mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t'. \quad (22)$$

En effet, le premier des deux opérateurs $E^{(+)}$ apparaissant dans l'expression de w_I donne le vide $|0_1, 0_2\rangle$ lorsqu'il agit sur l'état à un seul photon (5). Le second opérateur $E^{(+)}$, agissant sur le vide, donne alors zéro. Ce résultat exprime physiquement qu'il est impossible de détecter deux photons dans un état qui n'en contient qu'un.

Alors qu'il est possible d'observer des signaux de comptage simple w_I non nuls dans l'état (5) (voir le § 2. d ci-dessus), les signaux de comptage double w_{II} sont identiquement nuls pour toutes les valeurs de $\mathbf{r}, t$ et $\mathbf{r}', t'$. Une telle situation ne pourrait jamais se produire avec un champ classique. Il est en effet impossible de trouver un champ classique E_{cl} , tel que $w_I^{cl} \neq 0$ et $w_{II}^{cl} \equiv 0$ pour tout $\mathbf{r}, t$ et tout $\mathbf{r}', t'$.

Donnons un autre exemple de situation typiquement quantique. Dans l'expérience représentée sur la figure 1, un photon unique émis par un atome unique initialement excité, est envoyé vers une lame séparatrice, et les signaux donnés par deux photomultiplicateurs A et B placés symétriquement de part et d'autre de la lame sont enregistrés. La théorie quantique prédit que l'on peut observer un photoélectron en A ou en B , mais jamais en A et en B . Une théorie semi classique prédirait au contraire des coïncidences possibles entre A et B , car les deux photodétecteurs sont soumis simultanément aux deux paquets d'ondes résultant de la division en deux du paquet d'ondes incident après traversée de la lame séparatrice.

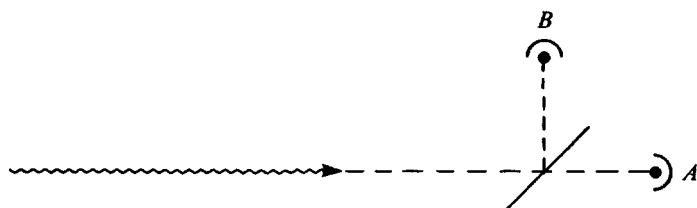


Figure 1. Schéma d'une expérience de comptage double sur un photon unique.

Remarques

(i) Notons qu'une expérience voisine de celle représentée sur la figure 1 a été réalisée sur la lumière de fluorescence émise par un jet atomique très dilué excité par un faisceau laser résonnant (références à la fin du complément). Au lieu d'avoir un photon unique émis par un atome unique, on a une suite de photons émis par un atome unique réexcité en permanence par un faisceau laser. On peut alors observer en A et B un taux de comptage double non nul. Mais, comme l'atome ne peut émettre qu'un seul photon à la fois, et qu'un certain temps sépare deux émissions successives, on trouve

que w_{II} est nul pour $t = t'$, et est une fonction *croissante* de $|t - t'|$ au voisinage de $t - t' = 0$ (rappelons que A et B sont symétriques par rapport à la lame semi transparente de la figure 1, de sorte que tout se passe comme si l'on avait $r = r'$ dans w_{II}). Un tel effet de « dégroupement » des photoélectrons (« antibunching ») est typiquement quantique, car on peut montrer qu'il viole des inégalités semi classiques prévoyant que w_{II}^{cl} est, pour $r = r'$, une fonction non croissante de $|t - t'|$.

(ii) A ce stade de la discussion, il peut être utile de préciser comment apparaissent les différences entre prédictions quantiques et semi classiques. Supposons tout d'abord que l'opérateur densité ρ_{12} du champ admette une représentation P (voir remarque du § 1 ci-dessus). En reportant l'expression (7) de ρ_{12} dans les expressions de w_I et w_{II} , on trouve que ces quantités sont données par une « moyenne » des résultats (12) et (20) trouvés plus haut pour les états quasi classiques $|\alpha_1, \alpha_2\rangle$, « pondérés » par la fonction $P(\alpha_1, \alpha_2)$ (qui, rappelons-le, est réelle et normée du fait que $\rho_{12} = \rho_{12}^\dagger$ et $\text{Tr } \rho_{12} = 1$)

$$w_I(r, t) = \iint d^2\alpha_1 d^2\alpha_2 P(\alpha_1, \alpha_2) I_{cl}(\{\alpha_1, \alpha_2\}; r, t) \quad (23)$$

$$w_{II}(r, t; r', t') = \iint d^2\alpha_1 d^2\alpha_2 P(\alpha_1, \alpha_2) \times \\ \times I_{cl}(\{\alpha_1, \alpha_2\}; r, t) I_{cl}(\{\alpha_1, \alpha_2\}; r', t'). \quad (24)$$

Si la fonction $P(\alpha_1, \alpha_2)$ est positive, les signaux (23) et (24) sont alors identiques à ceux que donnerait une théorie semi classique (voir § C.1.c) pour un mélange statistique d'états classiques $\{\alpha_1, \alpha_2\}$ avec des *vrais poids* $P(\alpha_1, \alpha_2)$. Il n'y a alors pas de différence entre théories quantique et semi classique. Les effets typiquement quantiques apparaissent lorsque $P(\alpha_1, \alpha_2)$ n'existe pas ou prend des valeurs *negatives*. Les signaux (23) et (24) peuvent alors violer des inégalités semi classiques déduites du caractère défini positif de la densité classique $P_{cl}(\alpha_1, \alpha_2)$. On peut donc dire en conclusion que l'ensemble des états quantiques du rayonnement est beaucoup plus vaste que celui des mélanges statistiques d'états classiques. Il s'ensuit en particulier qu'il n'est pas possible d'interpréter tous les phénomènes d'interférence observables en optique en termes de superposition d'ondes de Maxwell classiques, ou de mélanges statistiques de telles superpositions.

c) ETATS À 2 PHOTONS

Nous considérerons ici un exemple très simple d'état à deux photons

$$|\psi_{12}\rangle = |1_1\rangle |1_2\rangle \quad (25)$$

à savoir un état où il y a un photon dans le mode 1 et un autre dans le mode 2.

En reportant (25) dans les expressions de w_I et w_{II} , on obtient, compte tenu de (8)

$$w_I(r, t) = |\mathcal{E}_1|^2 + |\mathcal{E}_2|^2, \quad (26)$$

$$w_{II}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = 2 |\mathcal{E}_1|^2 |\mathcal{E}_2|^2 \times \\ \times \{ 1 + \operatorname{Re} e^{i[(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - (\omega_1 - \omega_2)(t - t')] } \} . \quad (27)$$

Il apparaît ainsi qu'il est possible d'observer des effets d'interférence sur les signaux de comptage double (associés au dernier terme de (27)) dans des conditions où ils ne sont pas observables sur les signaux de comptage simple. L'absence de termes d'interférences dans (26) est due au fait, mentionné plus haut, que dans un état comme (25), où le nombre de photons dans chaque mode est bien défini, les champs moyens $\langle E_1 \rangle$ et $\langle E_2 \rangle$ dans chaque mode sont nuls (phases aléatoires). Aucun point de l'espace n'est privilégié par rapport aux autres pour détecter un photoélectron : d'après (26), $w_1(\mathbf{r}, t)$ est indépendant de $\mathbf{r}$. Par contre, *une fois* qu'on a détecté un photoélectron en un point $\mathbf{r}'$, la probabilité d'en détecter un second tout de suite après en un autre point $\mathbf{r}$ dépend de $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Les détections des deux photons ne sont donc pas indépendantes et donnent lieu à un phénomène d'interférence. C'est ce qu'exprime (27).

Le signal de comptage double w_{II} est également très utile lorsque les phases des champs dans les deux modes fluctuent indépendamment avec un temps de diffusion τ_d (cas de deux faisceaux lasers indépendants). Nous avons vu plus haut (§ 2.c) qu'il est possible, dans ce cas, d'observer des franges sur w_1 , à condition toutefois que le temps d'observation soit court devant τ_d . Le signal accumulé pendant un tel temps est cependant en général très faible, de sorte qu'il est nécessaire de recommencer l'expérience plusieurs fois. On se heurte alors à la difficulté que, d'une expérience à l'autre, il n'est pas aisé de contrôler la phase relative entre les deux faisceaux laser. Un signal comme w_{II} , qui contient des termes, comme (27), indépendants des phases des deux faisceaux, est beaucoup plus commode car il peut être accumulé sur de nombreuses expériences. Ceci explique pourquoi les phénomènes d'interférence entre deux faisceaux laser indépendants ont été observés expérimentalement, non sur w_1 , mais sur des signaux de comptage double, et même multiple (voir références à la fin du complément). Un autre exemple intéressant est celui de l'observation du rayonnement venant d'une étoile. Le signal w_1 est très facilement brouillé par les fluctuations de phase introduites par l'atmosphère (*), alors que w_{II} contient des termes indépendants de ces fluctuations de phase. La mesure des variations de w_{II} avec $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ permet de déterminer le diamètre apparent de l'étoile.

(*) Dans l'interférométrie de tavelures (« speckle interferometry »), le temps d'observation est court devant le temps de corrélation de ces fluctuations de phase, et il est possible alors d'extraire des informations intéressantes de w_1 .

4. Interprétation physique en termes d'interférences entre amplitudes de transition

Dans le paragraphe 2 ci-dessus, nous avons mentionné à plusieurs reprises que w_1 n'apparaissait pas en général comme le carré du module de la somme de deux ondes classiques. On peut donc se demander quelles sont les entités qui, dans le cas général, interfèrent dans w_1 .

Pour le voir, insérons la relation de fermeture

$$\sum_f |\psi_f\rangle \langle \psi_f| = \mathbb{1} \quad (28)$$

relative à un ensemble orthonormé complet d'états du champ $\{|\psi_f\rangle\}$ entre les deux opérateurs $E^{(-)}$ et $E^{(+)}$ apparaissant dans l'expression de w_1 . Il vient

$$\begin{aligned} w_1(\mathbf{r}, t) &= \sum_f \langle \psi | E^{(-)}(\mathbf{r}, t) | \psi_f \rangle \langle \psi_f | E^{(+)}(\mathbf{r}, t) | \psi \rangle \\ &= \sum_f |\langle \psi_f | E^{(+)}(\mathbf{r}, t) | \psi \rangle|^2 \\ &= \sum_f |\langle \psi_f | [E_1^{(+)}(\mathbf{r}, t) + E_2^{(+)}(\mathbf{r}, t)] | \psi \rangle|^2. \end{aligned} \quad (29)$$

Il est possible alors d'interpréter l'expression (29) de la manière suivante. Il y a deux « chemins » différents permettant de passer de l'état « initial » $|\psi\rangle$ du champ à l'état « final » $|\psi_f\rangle$ (Fig. 2). Le premier chemin correspond à l'absorption d'un photon du mode 1 en $\mathbf{r}, t$, le second à l'absorption d'un photon du mode 2 en $\mathbf{r}, t$. Les amplitudes associées à ces deux chemins sont $\langle \psi_f | E_1^{(+)}(\mathbf{r}, t) | \psi \rangle$ et $\langle \psi_f | E_2^{(+)}(\mathbf{r}, t) | \psi \rangle$, de sorte que l'amplitude totale pour aller de $|\psi\rangle$ à $|\psi_f\rangle$ s'écrit

$$\langle \psi_f | E_1^{(+)}(\mathbf{r}, t) | \psi \rangle + \langle \psi_f | E_2^{(+)}(\mathbf{r}, t) | \psi \rangle. \quad (30)$$

La probabilité de transition $|\psi\rangle \rightarrow |\psi_f\rangle$ s'obtient en élevant au carré le module de la somme des deux amplitudes apparaissant en (30). Comme on n'observe pas l'état final du champ, il faut sommer ces probabilités sur tous les états possibles $|\psi_f\rangle$. (Eventuellement, si l'état initial n'était pas un état pur $|\psi\rangle$ mais un mélange statistique d'états, il faudrait en plus moyenner (29) sur tous les états possibles de ce mélange.) Les franges d'interférence observables sur w_1 sont donc dues aux interférences entre les amplitudes de transition associées aux deux « chemins » de la figure 2.

Une interprétation analogue peut être donnée pour w_{11} . En insérant la relation de fermeture (28) entre les deux opérateurs $E^{(-)}$ et les deux opérateurs $E^{(+)}$ apparaissant dans l'expression de w_{11} , on peut montrer que l'amplitude $|\psi\rangle \rightarrow |\psi_f\rangle$, dans un processus de détection double, est la somme de quatre amplitudes correspondant aux quatre chemins différents représentés sur la figure 3. Pour chacun de ces chemins, nous avons absorption de deux photons, l'un en $\mathbf{r}', t'$ l'autre en $\mathbf{r}, t$, chacun de

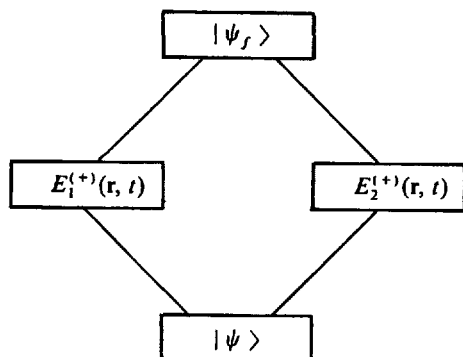


Figure 2. Représentation schématique des deux amplitudes qui interfèrent dans une expérience de comptage simple. $|\psi\rangle$ est l'état initial, $|\psi_f\rangle$ l'état final. $E_i^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ représente l'absorption d'un photon du mode i au point $\mathbf{r}$ à l'instant t .

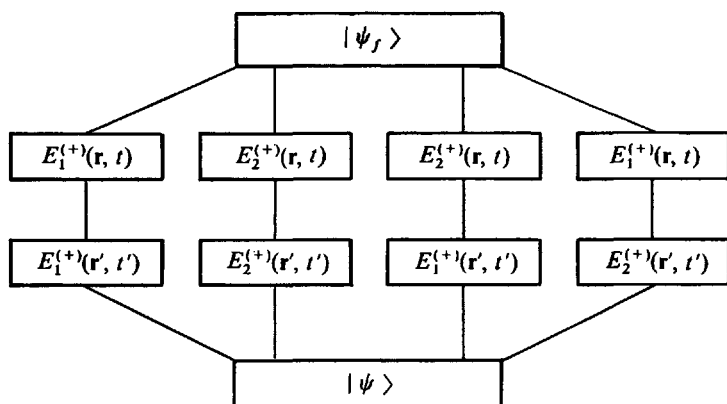


Figure 3. Représentation schématique des quatre amplitudes qui interfèrent dans une expérience de comptage double. Les symboles ont la même signification que sur la figure 2.

ces deux photons pouvant appartenir soit au mode 1, soit au mode 2, d'où les $2^2 = 4$ possibilités. Ces quatre amplitudes interfèrent lorsque le module de l'amplitude globale est élevé au carré, pour obtenir la probabilité de transition $|\psi\rangle \rightarrow |\psi_f\rangle$, puis sommée sur les états non observés $|\psi_f\rangle$. En particulier, les franges dépendant de $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ et $t - t'$, et apparaissant par exemple dans l'expression (27) de w_{II} pour l'état à deux photons (25), correspondent à une interférence entre deux processus où les deux photons des modes 1 et 2 sont absorbés dans des ordres différents : 1 en $\mathbf{r}', t'$ et 2 en $\mathbf{r}, t$ ou 2 en $\mathbf{r}', t'$ et 1 en $\mathbf{r}, t$.

L'idée générale qui ressort de la discussion précédente est que ce sont les *amplitudes de transition* qui interfèrent en théorie quantique. Souvent, pour expliquer que les franges d'interférence sur w_I sont observables même lorsque les photons arrivent un par un, on dit avec un abus de langage, que « chaque photon n'interfère qu'avec lui-même », et que « des interférences entre 2 photons différents sont impossibles ». La discussion précédente montre que ce ne sont pas les photons qui interfèrent, mais des amplitudes de transition, et que ces amplitudes peuvent mettre en jeu plusieurs photons. Ainsi, les franges observables sur w_{II} révèlent des interférences entre amplitudes à deux photons (Fig. 3). On pourrait aisément généraliser et montrer que des amplitudes à trois, quatre... photons peuvent aussi interférer.

5. Conclusion : la dualité onde-corpuscule en théorie quantique du rayonnement

Les calculs présentés dans ce complément permettent de mieux préciser comment apparaît la dualité onde-corpuscule en théorie quantique du rayonnement.

L'*aspect ondulatoire* est lié au fait que les opérateurs E des divers modes se superposent linéairement, et ont chacun une dépendance sinusoïdale en r et t . C'est parce que $E^{(\pm)} = E_1^{(\pm)} + E_2^{(\pm)}$ que, dans les signaux de détection quadratique $E^{(-)} E^{(+)}$, apparaissent, en plus des termes carrés $E_1^{(-)} E_1^{(+)}$ et $E_2^{(-)} E_2^{(+)}$, des termes rectangles $E_1^{(-)} E_2^{(+)}$ et $E_2^{(-)} E_1^{(+)}$. Les calculs ressemblent beaucoup aux calculs classiques correspondants. Il ne faut pas oublier cependant que E est un opérateur, et non un nombre.

L'*aspect corpusculaire* est contenu dans les états $|\psi\rangle$ du champ, qui indiquent en quelque sorte quels sont les modes peuplés et combien de photons ils contiennent. Il ne faut pas oublier d'ailleurs que les états aussi sont linéairement superposables, et que cette propriété peut être très importante pour l'observation des effets d'interférence. Les états $|\psi\rangle$ et $|\psi_f\rangle$ des figures 2 et 3 ne peuvent pas être quelconques en général si l'on veut que plus d'un chemin permette d'aller de l'un à l'autre. Par exemple, un état à 1 photon qui est un mélange statistique de $|1_1, 0_2\rangle$ et $|0_1, 1_2\rangle$ avec des poids $|c_1|^2$ et $|c_2|^2$ ne donne pas de franges sur w_I alors que ces dernières sont observables sur l'état $c_1 |1_1, 0_2\rangle + c_2 |0_1, 1_2\rangle$.

On voit ainsi la richesse du formalisme quantique liée à la description des systèmes physiques par deux objets différents, les observables pour les grandeurs physiques, le vecteur $|\psi\rangle$ (ou l'opérateur densité ρ) pour l'état du système.

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES ET CONSEILS DE LECTURE

Pour le dégroupement de photons, voir H. J. Kimble, M. Dagenais and L. Mandel, *Phys. Rev. Lett.*, **39**, 691 (1977) et J. D. Cresser, J. Hager,

G. Leuchs, M. Rateike and H. Walther in « *Dissipative Systems in Quantum Optics* », ed. R. Bonifacio (Springer Verlag, Berlin (1982)).

Pour les interférences à un seul photon, voir F. M. Pipkin, *Adv. At. Mol. Phys.*, **14**, 281 (1978) (Academic Press) et P. Grangier, G. Roger and A. Aspect, *Europhysics Letters*, **1**, 173 (1986).

Pour les interférences avec deux faisceaux indépendants, voir G. Magyar and L. Mandel, *Nature*, **198**, 255 (1963) et R. L. Pfleegor and L. Mandel, *J.O.S.A.*, **58**, 946 (1968).

Pour les corrélations d'intensité et les interférences entre amplitudes à plusieurs photons, voir R. Hanbury Brown and R. Q. Twiss, *Nature*, **177**, 27 (1956); E. R. Pike, in *Quantum Optics*, ed. S. M. Kay and A. Mairland, (Academic Press (1970)), U. Fano, *Am. J. Phys.*, **29**, 539 (1961).

COMPLÉMENT B_{III}CHAMP QUANTIQUE RAYONNÉ PAR
DES SOURCES CLASSIQUES

Le but de ce complément est d'étudier un problème simple d'électrodynamique montrant l'importance des états cohérents introduits dans le paragraphe C.4 de ce chapitre. Nous nous proposons de calculer le champ quantique rayonné par des sources classiques, dont le mouvement est très peu perturbé par le champ, et de montrer que l'état d'un tel champ est, à tout instant, un état cohérent.

1. Hypothèses sur les sources

Nous supposons qu'avant l'instant initial $t = 0$, aucune source n'est présente. Le rayonnement est donc initialement dans l'état vide

$$|\psi(0)\rangle = |0\rangle. \quad (1)$$

A partir de $t = 0$, des sources sont « branchées ». Les courants $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ qui leur sont associés sont supposés très peu affectés par les rayonnements qu'ils créent (éventuellement, on peut imaginer que l'amortissement radiatif des sources est compensé par le dispositif expérimental qui pilote ces sources). L'hypothèse précédente revient donc à supposer que les sources n'ont pas de dynamique propre, et que cette dynamique est imposée de l'extérieur. De plus, nous supposons que les sources sont macroscopiques, c'est-à-dire que les fluctuations quantiques des courants autour de leurs valeurs moyennes sont négligeables. L'ensemble de ces deux hypothèses permet donc d'approximer les courants quantiques $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ par des fonctions *classiques données* de $\mathbf{r}$ et t , $\mathbf{j}_{cl}(\mathbf{r}, t)$. Compte tenu de cette approximation, quel est alors l'état $|\psi(t)\rangle$ du champ pour $t > 0$?

Telle qu'elle est posée, la question précédente privilégie le point de vue de Schrödinger, dans lequel l'évolution temporelle ne concerne que le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ du système, et non les opérateurs. En fait, par suite des approximations faites plus haut sur les courants, le calcul de l'évolution temporelle est beaucoup plus simple dans le point de vue de Heisenberg, où ce sont les opérateurs qui évoluent et le vecteur d'état qui reste fixe et égal à (1). Nous utiliserons donc un tel point de vue dans le paragraphe suivant 2, pour calculer l'évolution de l'opérateur d'annihilation $a_i(t)$ du mode i . Une transformation unitaire nous permettra ensuite au paragraphe 3 de passer du point de vue de Heisenberg au point de vue de Schrödinger et de déterminer ainsi le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ du système à l'instant t .

2. Étude de l'évolution des champs dans le point de vue de Heisenberg

L'équation d'évolution de $a_i(t)$ (équation (B.28)) peut s'écrire

$$\dot{a}_i + i\omega_i a_i = s_i \quad (2)$$

où

$$s_i = \frac{i}{\sqrt{2 \epsilon_0 \hbar \omega_i L^3}} \int d^3 r e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon}_i \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}). \quad (3)$$

En toute rigueur, le courant $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ s'exprime en fonction des variables des particules formant les sources (voir équation (A.5.b), chapitre I), qui elles-mêmes évoluent sous l'effet des forces exercées sur elles par les champs. L'évolution du second membre s_i de (2) est donc en fait couplée à celle de tous les a_j , et la solution de l'équation (2) n'est pas simple à trouver dans le cas général. Il faudrait adjoindre à (2) l'équation du mouvement des particules, et essayer de résoudre ces équations couplées.

La situation est beaucoup plus simple, s'il est possible, comme nous le supposons ici, de remplacer l'opérateur $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ par la fonction $\mathbf{j}_{cl}(\mathbf{r}, t)$. L'équation (2) devient alors

$$\dot{a}_i + i\omega_i a_i = s_i^{cl}(t) \quad (4)$$

où le second membre $s_i^{cl}(t)$ est, en ce qui concerne les particules, une fonction classique donnée de t

$$s_i^{cl}(t) = \frac{i}{\sqrt{2 \epsilon_0 \hbar \omega_i L^3}} \int d^3 r e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon}_i \cdot \mathbf{j}_{cl}(\mathbf{r}, t). \quad (5)$$

L'équation (4) s'intègre alors immédiatement pour donner

$$a_i(t) = a_i(0) e^{-i\omega_i t} + \int_0^t dt' s_i^{cl}(t') e^{-i\omega_i(t-t')}. \quad (6)$$

Le premier terme figurant au second membre de (6) est le champ quantique initial $a_i(0)$ ayant évolué librement de 0 à t , le second terme le champ rayonné par les sources.

Remarques

(i) Au lieu d'introduire les hypothèses simplificatrices sur $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ au niveau de l'équation d'évolution (2) de a_i , on pourrait le faire plus tôt, au niveau de l'hamiltonien. L'hamiltonien d'un champ quantique couplé à des courants classiques donnés $\mathbf{j}_{cl}(\mathbf{r}, t)$ s'écrit en effet, en jauge de Coulomb

$$H = H_R - \int d^3 r \mathbf{j}_{cl}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (7)$$

où H_R est l'hamiltonien du rayonnement quantique libre, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ l'opérateur potentiel vecteur transverse (donnés respectivement par les expressions

(A.9) et (A.5)). L'opérateur (7) n'agit donc que sur les variables de rayonnement et il est facile de vérifier que l'équation de Heisenberg pour a_i déduite de cet hamiltonien coïncide avec (4).

(ii) L'expression (6) de $a_i(t)$ permet de déterminer le champ transverse quantique à l'instant t . Il suffit de reporter (6) et l'expression adjointe dans les développements des champs transverse en a_i et a_i^+ . Pour avoir le champ total, il faut ajouter à ces champs transverse les champs longitudinaux, c'est-à-dire le champ de Coulomb de la densité des charges $\rho_{ei}(r, t)$ associée aux sources, qui est supposée, comme $j_{ei}(r, t)$, être une fonction classique donnée de r et t .

Avant d'aller plus loin, écrivons également l'équation d'évolution des *champs classiques* couplés aux courants classiques $j_{ei}(r, t)$. Il suffit pour cela de remplacer, dans l'équation (4), l'opérateur a_i par la variable normale classique $\alpha_i(t)$ du mode i . On obtient ainsi l'équation

$$\dot{\alpha}_i + i\omega_i \alpha_i = s_i^{cl}(t) \quad (8)$$

dont la solution, correspondant à la condition initiale $\alpha_i(0) = 0$ (pas de rayonnement à l'instant initial) s'écrit

$$\alpha_i(t) = \int_0^t dt' s_i^{cl}(t') e^{-i\omega_i(t-t')}. \quad (9)$$

Le dernier terme du second membre de (6) peut donc s'interpréter comme le champ classique $\alpha_i(t)$ rayonné par les sources classiques données, et nous réécrivons (6), compte tenu de (9)

$$a_i(t) = a_i(0) e^{-i\omega_i t} + \alpha_i(t). \quad (10)$$

Appliquons enfin les deux membres de l'équation opératorielle (10) sur l'état (1), qui est l'état du système pour tout t dans le point de vue de Heisenberg. Comme

$$a_i(0) |\psi(0)\rangle = a_i |0\rangle = 0 \quad (11)$$

on obtient

$$a_i(t) |\psi(0)\rangle = \alpha_i(t) |\psi(0)\rangle. \quad (12)$$

Il apparaît ainsi que l'état $|\psi(0)\rangle$ du rayonnement est état propre de l'opérateur $a_i(t)$ avec, comme valeur propre, la variable normale classique $\alpha_i(t)$ du champ classique rayonné par les sources.

3. Point de vue de Schrödinger. Etat quantique du champ à l'instant t

Soit $U(t, 0)$ l'opérateur d'évolution de 0 à t dans le point de vue de Schrödinger. Appliquons $U(t, 0)$ aux deux membres de l'équation (12)

et, dans le premier membre, insérons $U^+(t, 0) U(t, 0) = 1$ entre $a_i(t)$ et $|\psi(0)\rangle$. Il vient

$$U(t, 0) a_i(t) U^+(t, 0) U(t, 0) |\psi(0)\rangle = \alpha_i(t) U(t, 0) |\psi(0)\rangle. \quad (13)$$

Le vecteur $U(t, 0) |\psi(0)\rangle$ n'est autre que le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ du système à l'instant t dans le point de vue de Schrödinger. Comme $U(t, 0)$ peut être aussi considéré comme l'opérateur unitaire permettant de passer, à l'instant t , du point de vue de Heisenberg au point de vue de Schrödinger (les deux points de vue coïncidant à $t=0$), $U(t, 0) a_i(t) U^+(t, 0)$ coïncide avec l'opérateur d'annihilation a_i , indépendant du temps, du point de vue de Schrödinger. Finalement, l'équation (13) devient

$$a_i |\psi(t)\rangle = \alpha_i(t) |\psi(t)\rangle \quad (14)$$

et exprime que l'état quantique du champ à l'instant t n'est autre que l'état cohérent associé au champ classique rayonné par les sources au même instant t .

Un tel résultat est satisfaisant physiquement. Lorsque les sources sont quasi classiques, l'état quantique du champ qu'elles rayonnent est l'état quantique qui se rapproche le plus du champ classique rayonné $\{\alpha_i(t)\}$, c'est-à-dire l'état cohérent $|\{\alpha_i(t)\}\rangle$. Il ne s'en écarte que par les fluctuations quantiques qui, dans un état cohérent, sont minimales et égales à celles du vide.

RÉFÉRENCES

Voir Glauber.

COMPLÉMENT C_{III}

**RELATIONS DE COMMUTATION DES CHAMPS LIBRES
A DES INSTANTS DIFFÉRENTS.
SUSCEPTIBILITÉS ET FONCTIONS DE CORRÉLATION
DES CHAMPS DANS LE VIDE**

A partir des relations de commutation fondamentales entre a_i et a_i^+ , nous avons établi dans la partie A (voir aussi exercice 1) les relations de commutation entre les observables $A_1(\mathbf{r})$, $E_1(\mathbf{r})$, et $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ prises en des points différents, mais au même instant. Il est intéressant de considérer ces relations pour les mêmes champs, pris dans le point de vue de Heisenberg à des instants différents. Il faut pour cela connaître l'évolution temporelle des champs. Ce complément a pour objet de déterminer ces relations de commutation dans le cas du champ *libre*, pour lequel l'évolution temporelle a été déterminée au paragraphe B.2.b (équation (B.29)).

Après avoir introduit au paragraphe 1 les fonctions singulières caractéristiques du champ électromagnétique dont nous aurons besoin, nous évaluons les divers commutateurs au paragraphe 2.

Physiquement, ces relations permettent de déterminer les observables du champ qui peuvent être mesurées indépendamment l'une de l'autre. Les commutateurs jouent par ailleurs un rôle fondamental dans la théorie de la réponse linéaire : si le champ, initialement libre, est couplé à une source extérieure $j(t)$ par un terme de couplage $-j(t)M$, où M est une observable du champ, l'évolution de la valeur moyenne d'une autre observable du champ, N , dans l'état ainsi perturbé est donnée à l'ordre 1 en j par

$$\langle N(t) \rangle^{(1)} = \int_0^t dt' \chi_{NM}(t, t') j(t') \quad (1)$$

où la « susceptibilité » χ_{NM} n'est autre que la moyenne, dans l'état quantique initial, du commutateur des champs libres $N(t)$ et $M(t')$

$$\chi_{NM}(t, t') = \frac{i}{\hbar} \langle [N(t), M(t')] \rangle. \quad (2)$$

La dénomination champs libres signifie que l'évolution temporelle des opérateurs $N(t)$ et $M(t')$ apparaissant dans (2) est calculée en l'absence de sources j . La connaissance des commutateurs des champs libres à deux instants différents permet donc de déterminer au premier ordre les champs moyens créés par une source quelconque. Une application de cette démarche est présentée dans l'exercice 6 du chapitre IV.

Nous avons déjà rencontré au paragraphe C.3.c une autre fonction importante relative aux champs libres, la fonction de corrélation symétrique. Pour des raisons fondamentales (théorème fluctuation-dissipa-

tion), le calcul de ces fonctions de corrélation dans le vide se présente de façon très semblable à celui des commutateurs et nous en donnerons l'expression au paragraphe 3.

1. Calcul préliminaire

Nous aurons dans la suite à utiliser la fonction $D_+(\mathbf{p}, \tau)$ définie par sa transformée de Fourier

$$D_+(\mathbf{p}, \tau) = ic \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} - \omega\tau)}}{\omega} \quad (3)$$

où $\omega = ck$. On peut remarquer sur l'expression (3) que D_+ est solution de l'équation d'onde

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta_{\mathbf{p}} \right) D_+(\mathbf{p}, \tau) = 0 \quad (4)$$

et se propage donc à la vitesse c .

Pour calculer explicitement (3), plaçons-nous en coordonnées sphériques et appelons u le cosinus de l'angle entre $\mathbf{k}$ et $\mathbf{p}$. L'intégrale devient

$$\begin{aligned} D_+(\mathbf{p}, \tau) &= i \int_0^\infty \frac{k dk}{(2\pi)^3} 2\pi \int_0^1 du e^{i(k\rho u - c\tau k)} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2 \rho} \int_0^\infty dk [e^{ik(\rho - c\tau)} - e^{-ik(\rho + c\tau)}]. \end{aligned} \quad (5)$$

En régularisant les intégrales par un facteur de convergence $e^{-k\eta}$ (où η est un infiniment petit positif), on obtient :

$$\begin{aligned} D_+(\mathbf{p}, \tau) &= \frac{1}{(2\pi)^2 \rho} \left[\frac{1}{\eta - i(\rho - c\tau)} - \frac{1}{\eta + i(\rho + c\tau)} \right] \\ &= \frac{i}{2\pi^2} \frac{1}{\rho^2 - (c\tau - i\eta)^2}. \end{aligned} \quad (6)$$

Il est intéressant de séparer les parties réelle et imaginaire de D_+ dans (6) :

$$D_+(\mathbf{p}, \tau) = D(\mathbf{p}, \tau) + iD_1(\mathbf{p}, \tau), \quad (7)$$

$$D = \frac{1}{(2\pi)^2 \rho} \left[\frac{\eta}{\eta^2 + (\rho - c\tau)^2} - \frac{\eta}{\eta^2 + (\rho + c\tau)^2} \right] \quad (8)$$

$$D_1 = \frac{1}{(2\pi)^2 \rho} \left[\frac{\rho - c\tau}{\eta^2 + (\rho - c\tau)^2} + \frac{\rho + c\tau}{\eta^2 + (\rho + c\tau)^2} \right]. \quad (9)$$

La fonction D est infiniment petite en dehors du cône de lumière ($\rho^2 = c^2 \tau^2$) et est impaire en τ . Elle est donc nulle pour $\tau = 0$, et sa dérivée par rapport à τ en ce point se calcule directement sur l'expression (3) et vaut $c \delta(\rho)$:

$$D(\rho, \tau = 0) = 0; \quad \left. \frac{\partial}{\partial \tau} D(\rho, \tau) \right|_{\tau=0} = c \delta(\rho). \quad (10)$$

De la relation (8), nous déduisons également que D peut s'exprimer, à la limite où $\eta \rightarrow 0$, comme une somme de deux fonctions δ :

$$D = \frac{1}{4\pi\rho} [\delta(\rho - c\tau) - \delta(\rho + c\tau)] \quad (11)$$

D_1 est paire en τ , diverge comme une partie principale au voisinage du cône de lumière et décroît en dehors comme $[\rho^2 - c^2 \tau^2]^{-1}$. On peut regrouper les deux termes de l'expression (9) pour exprimer D_1 en fonction de ρ^2

$$D_1 = \frac{1}{2\pi^2} \frac{\rho^2 - c^2 \tau^2 + \eta^2}{(\rho^2 - c^2 \tau^2)^2 + 2\eta^2(\rho^2 + c^2 \tau^2) + \eta^4}. \quad (12)$$

2. Commutateurs des champs

Partons de l'expression des champs libres dans le point de vue de Heisenberg

$$\mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \varepsilon} \mathcal{A}_\omega [a_{\mathbf{k}\varepsilon} \varepsilon e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} + a_{\mathbf{k}\varepsilon}^+ \varepsilon e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}] \quad (13.a)$$

$$\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \varepsilon} i \mathcal{E}_\omega [a_{\mathbf{k}\varepsilon} \varepsilon e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} - a_{\mathbf{k}\varepsilon}^+ \varepsilon e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}] \quad (13.b)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \varepsilon} i \mathcal{B}_\omega [a_{\mathbf{k}\varepsilon} \mathbf{k} \times \varepsilon e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} - a_{\mathbf{k}\varepsilon}^+ \mathbf{k} \times \varepsilon e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}] \quad (13.c)$$

où

$$\mathcal{E}_\omega = \left[\frac{\hbar \omega}{2 \varepsilon_0 L^3} \right]^{1/2} \quad \mathcal{B}_\omega = \frac{\mathcal{E}_\omega}{c} \quad \mathcal{A}_\omega = \frac{\mathcal{E}_\omega}{\omega}. \quad (14)$$

Les commutateurs des composantes m et n ($m, n = x, y, z$) de deux quelconques de ces champs se présentent sous forme d'une combinaison linéaire des commutateurs $[a_{\mathbf{k}\varepsilon}, a_{\mathbf{k}'\varepsilon'}]$, $[a_{\mathbf{k}\varepsilon}^+, a_{\mathbf{k}'\varepsilon'}^+]$ et $[a_{\mathbf{k}\varepsilon}, a_{\mathbf{k}'\varepsilon'}^+]$. Les deux premiers sont nuls et le dernier vaut $\delta_{\varepsilon\varepsilon'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$. On obtient ainsi :

$$[E_m(\mathbf{r}_1, t_1), E_n(\mathbf{r}_2, t_2)] = \sum_{\mathbf{k}\varepsilon} \mathcal{E}_\omega^2 \varepsilon_m \varepsilon_n e^{i[\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \omega(t_1 - t_2)]} - \text{c.c.} \quad (15.a)$$

$$[E_m(\mathbf{r}_1, t_1), B_n(\mathbf{r}_2, t_2)] = \sum_{\mathbf{k}\varepsilon} \mathcal{E}_\omega \mathcal{B}_\omega \varepsilon_m (\mathbf{k} \times \varepsilon)_n e^{i[\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \omega(t_1 - t_2)]} - \text{c.c.} \quad (15.b)$$

$$[B_m(\mathbf{r}_1, t_1), B_n(\mathbf{r}_2, t_2)] = \sum_{\mathbf{k}\varepsilon} \mathcal{B}_\omega^2 (\mathbf{k} \times \varepsilon)_m (\mathbf{k} \times \varepsilon)_n e^{i[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \omega(t_1 - t_2)]} - \text{c.c.} \quad (15.c)$$

$$[A_{\perp m}(\mathbf{r}_1, t_1), E_n(\mathbf{r}_2, t_2)] = \sum_{\mathbf{k}\varepsilon} -i \mathcal{A}_\omega \mathcal{E}_\omega \varepsilon_m \varepsilon_n e^{i[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \omega(t_1 - t_2)]} - \text{c.c.} \quad (15.d)$$

a) RÉDUCTION DES EXPRESSIONS EN FONCTION DE D

Dans chacune des expressions (15), la somme $\sum_{\mathbf{k}\varepsilon}$ se décompose en une somme sur les deux polarisations transverses ε et ε' , puis une somme sur $\mathbf{k}$. Les sommations sur les polarisations ont déjà été effectuées dans le paragraphe 1. a du complément A_I et donnent :

$$\sum_{\varepsilon \perp \mathbf{k}} \varepsilon_m \varepsilon_n = \delta_{mn} - \kappa_m \kappa_n \quad (16.a)$$

$$\sum_{\varepsilon \perp \mathbf{k}} \varepsilon_m (\mathbf{k} \times \varepsilon)_n = \sum_l \varepsilon_{mnl} \kappa_l \quad (16.b)$$

$$\sum_{\varepsilon \perp \mathbf{k}} (\mathbf{k} \times \varepsilon)_m (\mathbf{k} \times \varepsilon)_n = \delta_{mn} - \kappa_m \kappa_n \quad (16.c)$$

ε_{mnl} étant le tenseur complètement antisymétrique.

Pour simplifier les notations, nous noterons simplement (1) l'ensemble $(\mathbf{r}_1, t_1)$ et (2) l'ensemble $(\mathbf{r}_2, t_2)$. Les différences entre (1) et (2) seront notés :

$$\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \boldsymbol{\rho}; \quad t_1 - t_2 = \tau. \quad (17)$$

En utilisant les sommes (16), ces notations et les expressions (14) de $\mathcal{A}_\omega$, $\mathcal{E}_\omega$, $\mathcal{B}_\omega$, on obtient

$$[E_m(1), E_n(2)] = \frac{\hbar}{2\varepsilon_0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\omega}{L^3} \left(\delta_{mn} - \frac{k_m k_n}{k^2} \right) e^{i(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho} - \omega\tau)} - \text{c.c.} \quad (18.a)$$

$$[E_m(1), B_n(2)] = \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 c} \sum_{\mathbf{k}, l} \frac{\omega}{L^3} \varepsilon_{mnl} \frac{k_l}{k} e^{i(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho} - \omega\tau)} - \text{c.c.} \quad (18.b)$$

$$[B_m(1), B_n(2)] = \frac{1}{c^2} [E_m(1), E_n(2)] \quad (18.c)$$

$$[A_{\perp m}(1), E_n(2)] = \frac{\hbar}{2\varepsilon_0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{-i}{L^3} \left(\delta_{mn} - \frac{k_m k_n}{k^2} \right) e^{i(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho} - \omega\tau)} - \text{c.c.} \quad (18.d)$$

La somme discrète sur $\mathbf{k}$ peut être remplacée par une intégrale (voir la formule (C.34), chapitre I). On peut ensuite faire apparaître la fonction

$D_+(\mathbf{p}, \tau)$ (ou ses dérivées et primitives par rapport à $\mathbf{p}$ ou τ) de la façon suivante

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{\omega}{L^3} \left(\delta_{mn} - \frac{k_m k_n}{k^2} \right) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} - \omega \tau)} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} (\omega^2 \delta_{mn} - c^2 k_m k_n) \frac{e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} - \omega \tau)}}{\omega} =$$

$$= - \left(\delta_{mn} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - c^2 \frac{\partial}{\partial \rho_m} \frac{\partial}{\partial \rho_n} \right) \frac{D_+(\mathbf{p}, \tau)}{ic} \quad (19.a)$$

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{\omega}{L^3} \frac{k_l}{k} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} - \omega \tau)} = c \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \omega k_l \frac{e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} - \omega \tau)}}{\omega}$$

$$= \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial}{\partial \rho_l} D_+(\mathbf{p}, \tau) \quad (19.b)$$

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{L^3} \left(\delta_{mn} - \frac{k_m k_n}{k^2} \right) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} - \omega \tau)} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left[\omega \delta_{mn} - c^2 \frac{k_m k_n}{\omega} \right] \frac{e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} - \omega \tau)}}{\omega} =$$

$$= i \delta_{mn} \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{D_+(\mathbf{p}, \tau)}{ic} + \frac{c^2}{i} \frac{\partial}{\partial \rho_m} \frac{\partial}{\partial \rho_n} \int_{-\infty}^{\tau} d\tau' \frac{D_+(\mathbf{p}, \tau')}{ic} \quad (19.c)$$

Dans (19. c), nous avons utilisé le fait que D_+ décroît comme $1/\tau^2$ à l'infini, de sorte que sa primitive donne une contribution nulle à la borne inférieure de l'intégrale. La contribution du terme complexe conjugué apparaissant dans (18) fait disparaître la partie imaginaire de D_+ , de sorte que finalement c'est sa partie réelle $D(\mathbf{p}, \tau)$ qui apparaît :

$$[E_m(1), E_n(2)] = c^2 [B_m(1), B_n(2)] =$$

$$= \frac{i\hbar}{\varepsilon_0 c} \left[\delta_{mn} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - c^2 \frac{\partial}{\partial \rho_m} \frac{\partial}{\partial \rho_n} \right] D(\mathbf{p}, \tau) \quad (20.a)$$

$$[E_m(1), B_n(2)] = \frac{-i\hbar}{\varepsilon_0 c} \sum_l \varepsilon_{mnt} \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial}{\partial \rho_l} D(\mathbf{p}, \tau) \quad (20.b)$$

$$[A_{\perp m}(1), E_n(2)] = \frac{-i\hbar}{\varepsilon_0 c} \left[\delta_{mn} \frac{\partial}{\partial \tau} D(\mathbf{p}, \tau) - c^2 \frac{\partial}{\partial \rho_m} \frac{\partial}{\partial \rho_n} \int_{-\infty}^{\tau} d\tau' D(\mathbf{p}, \tau') \right]$$

$$(20.c)$$

$\mathbf{p}$ et τ sont définis en (17).

b) EXPRESSIONS EXPLICITES DES COMMUTATEURS

Les expressions (20) permettent de discuter l'essentiel des propriétés des commutateurs en les reliant à celles de la fonction D étudiées au paragraphe 1. On peut néanmoins aller plus loin en reportant dans (20 a, b, c)

l'expression (11) de D et en calculant explicitement les dérivées. Les dérivations en ρ_m ou ρ_n se font en utilisant

$$\frac{\partial}{\partial \rho_m} f(\rho) = \frac{\rho_m}{\rho} f'(\rho). \quad (21)$$

On obtient ainsi :

$$\begin{aligned} [E_m(1), E_n(2)] &= \frac{i\hbar c}{4\pi\epsilon_0} \left(\delta_{mn} \frac{\partial^2}{c^2 \partial \tau^2} - \frac{\partial}{\partial \rho_m} \frac{\partial}{\partial \rho_n} \right) \left[\frac{\delta(\rho - c\tau) - \delta(\rho + c\tau)}{\rho} \right] \\ &= \frac{i\hbar c}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \left(\frac{3\rho_m \rho_n}{\rho^2} - \delta_{mn} \right) \left[\frac{\delta'(\rho - c\tau) - \delta'(\rho + c\tau)}{\rho^2} - \frac{\delta(\rho - c\tau) - \delta(\rho + c\tau)}{\rho^3} \right] \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\rho_m \rho_n}{\rho^2} - \delta_{mn} \right) \left[\frac{\delta''(\rho - c\tau) - \delta''(\rho + c\tau)}{\rho} \right] \right\} \quad (22) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [E_m(1), B_n(2)] &= \frac{-i\hbar}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \epsilon_{mni} \frac{\partial}{c \partial \tau} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \left[\frac{\delta(\rho - c\tau) - \delta(\rho + c\tau)}{\rho} \right] \\ &= \frac{i\hbar}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \epsilon_{mni} \frac{\rho_i}{\rho} \left[\frac{\delta''(\rho - c\tau) + \delta''(\rho + c\tau)}{\rho} - \frac{\delta'(\rho - c\tau) + \delta'(\rho + c\tau)}{\rho^2} \right] \quad (23) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [A_{1m}(1), E_n(2)] &= \frac{-i\hbar}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \delta_{mn} \frac{\partial}{c \partial \tau} \left[\frac{\delta(\rho - c\tau) - \delta(\rho + c\tau)}{\rho} \right] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial}{\partial \rho_m} \frac{\partial}{\partial \rho_n} \int_{-\infty}^{\tau} c \, d\tau' \left[\frac{\delta(c\tau' - \rho) - \delta(c\tau' + \rho)}{\rho} \right] \right\} \\ &= \frac{i\hbar}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \delta_{mn} \frac{\delta'(\rho - c\tau) + \delta'(\rho + c\tau)}{\rho} - \frac{\partial}{\partial \rho_m} \frac{\partial}{\partial \rho_n} \frac{\theta(c\tau - \rho) - \theta(c\tau + \rho)}{\rho} \right\} \\ &= \frac{i\hbar}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \left(\frac{3\rho_m \rho_n}{\rho^2} - \delta_{mn} \right) \left[\frac{\theta(c\tau - \rho) - \theta(c\tau + \rho)}{\rho^3} + \frac{\delta(\rho - c\tau) - \delta(\rho + c\tau)}{\rho^2} \right] \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\rho_m \rho_n}{\rho^2} - \delta_{mn} \right) \left[\frac{\delta'(\rho - c\tau) + \delta'(\rho + c\tau)}{\rho} \right] \right\} \quad (24) \end{aligned}$$

$\theta(x)$ est la fonction de Heaviside ($\theta(x) = 0$ pour $x < 0$, $\theta(x) = 1$ pour $x > 0$).

Remarque

Les expressions (22), (23), (24) sont ambiguës lorsque $\tau \rightarrow 0$. En effet, elles font intervenir dans ce cas des produits de fonctions $\delta(\rho)$ avec des fonctions divergentes en $\rho = 0$. Il faut donc revenir à des expressions avec η fini, ou bien aux expressions (18). Ainsi, avec η fini, l'expression (20a) n'est plus singulière. Comme $D(\rho, \tau)$ est impaire en τ , elle est nulle en $\tau = 0$, ainsi que ses dérivées secondes :

$$[E_m(\mathbf{r}_1, t), E_n(\mathbf{r}_2, t)] = [B_m(\mathbf{r}_1, t), B_n(\mathbf{r}_2, t)] = 0 \quad (25)$$

d'après (20b) et (10)

$$[E_m(\mathbf{r}_1, t), B_n(\mathbf{r}_2, t)] = \frac{-i\hbar}{\varepsilon_0} \sum_l \varepsilon_{mnl} \frac{\partial}{\partial \rho_l} \delta(\boldsymbol{\rho}). \quad (26)$$

Enfin, d'après (18d), pour $\tau = 0$,

$$[A_{lm}(\mathbf{r}_1, t), E_n(\mathbf{r}_2, t)] = \frac{-i\hbar}{\varepsilon_0} \delta_{mn}^\perp(\boldsymbol{\rho}). \quad (27)$$

Nous retrouvons ainsi les résultats établis de manière plus élémentaire dans l'exercice 1.

c) PROPRIÉTÉS DES COMMULATEURS

Tous les commutateurs (20) ne dépendent que de $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ et $\tau = t_1 - t_2$. Cette propriété reflète l'invariance de la théorie dans les translations d'espace et de temps. Vis-à-vis des rotations, les commutateurs sont des tenseurs d'ordre 2.

Tous les commutateurs sont des nombres, et non des opérateurs. Cette propriété est directement reliée à la linéarité des équations des champs. On peut aussi la formuler en disant que la « susceptibilité » du champ est indépendante de son état : le champ créé par une source connue est indépendant du champ antérieur.

Les commutateurs des champs électrique et magnétique sont nuls en dehors du cône de lumière défini par $\rho^2 = c^2 \tau^2$ (seules apparaissent des fonctions $\delta(\rho \pm c\tau)$ ou leurs dérivées). Les grandeurs physiques correspondantes peuvent être mesurées indépendamment les unes des autres. Enfin, même sur le cône de lumière, les composantes de **E** et **B** sur un même axe commutent toujours : elles correspondent à des degrés de liberté du champ indépendants.

Les commutateurs de $A_\perp$ et **E** se présentent de façon différente : outre une partie nulle en dehors du cône de lumière comme pour les commutateurs des champs, ils comportent un terme, produit d'une fonction de $\boldsymbol{\rho}$ par $(\theta(c\tau - \rho) - \theta(c\tau + \rho))$. Ce facteur est nul pour les intervalles genre temps ($c^2 \tau^2 > \rho^2$) et vaut -1 pour les intervalles genre espace ($\rho^2 > c^2 \tau^2$). Les commutateurs sont donc non nuls en dehors du cône de lumière. Cela met en évidence une fois encore l'existence dans $A_\perp$ d'une partie instantanée.

3. Fonctions de corrélation symétriques des champs dans le vide

Le produit de deux champs exprimé en fonction des opérateurs création et annihilation fait apparaître quatre types de produit

$$a_{\mathbf{k}\varepsilon} a_{\mathbf{k}'\varepsilon'}, \quad a_{\mathbf{k}\varepsilon} a_{\mathbf{k}'\varepsilon'}^+, \quad a_{\mathbf{k}\varepsilon}^+ a_{\mathbf{k}'\varepsilon'}, \quad a_{\mathbf{k}\varepsilon}^+ a_{\mathbf{k}'\varepsilon'}^+.$$

Lorsqu'on prend la moyenne *dans le vide*, tous donnent une contribution nulle, sauf le second, qui vaut $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$.

$$\langle 0 | E_m(1) E_n(2) + E_n(2) E_m(1) | 0 \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \mathcal{E}_\omega^2 \varepsilon_m \varepsilon_n e^{i[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \omega(t_1 - t_2)]} + \text{c.c.} \quad (28. a)$$

$$\langle 0 | E_m(1) B_n(2) + B_n(2) E_m(1) | 0 \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \mathcal{E}_\omega \mathcal{B}_\omega \varepsilon_m (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\varepsilon})_n \times \\ \times e^{i[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \omega(t_1 - t_2)]} + \text{c.c.} \quad (28. b)$$

$$\langle 0 | B_m(1) B_n(2) + B_n(2) B_m(1) | 0 \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \mathcal{B}_\omega^2 (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\varepsilon})_m (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\varepsilon})_n \times \\ \times e^{i[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \omega(t_1 - t_2)]} + \text{c.c.} \quad (28. c)$$

Les expressions au second membre sont identiques à celles des formules (15, a, b, c), au remplacement près de $- \text{c.c.}$ par $+ \text{c.c.}$ Il est donc inutile de refaire les calculs; il suffit de remplacer dans le second membre de (20. a, b) la partie réelle D de D_+ par sa partie imaginaire iD_1 . On obtient :

$$\langle 0 | E_m(1) E_n(2) + E_n(2) E_m(1) | 0 \rangle = c^2 \langle 0 | B_m(1) B_n(2) + B_n(2) B_m(1) | 0 \rangle \\ = - \frac{\hbar}{\varepsilon_0 c} \left(\delta_{mn} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - c^2 \frac{\partial}{\partial \rho_m} \frac{\partial}{\partial \rho_n} \right) D_1(\boldsymbol{\rho}, \tau) \quad (28. d)$$

$$\langle 0 | E_m(1) B_n(2) + B_n(2) E_m(1) | 0 \rangle = \frac{\hbar}{\varepsilon_0 c} \sum_l \varepsilon_{mnl} \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial}{\partial \rho_l} D_1(\boldsymbol{\rho}, \tau) \quad (28. e)$$

où D_1 est donné par les expressions (9) et (12).

En dehors du cône de lumière ($\rho^2 \neq c^2 \tau^2$), D_1 est fini et vaut simplement, quand on fait $\eta = 0$ dans (12) :

$$D_1(\boldsymbol{\rho}, \tau) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{\rho^2 - c^2 \tau^2} \quad (\rho^2 \neq c^2 \tau^2). \quad (29)$$

Les dérivations ne présentent pas de difficulté et on obtient :

$$\langle 0 | E_m(1) E_n(2) + E_n(2) E_m(1) | 0 \rangle = \frac{2\hbar c}{\pi^2 \varepsilon_0} \frac{\rho_m \rho_n - \delta_{mn}(\rho^2 + c^2 \tau^2)}{(\rho^2 - c^2 \tau^2)^3} \quad (30. a)$$

$$\langle 0 | E_m(1) B_n(2) + B_n(2) E_m(1) | 0 \rangle = - \frac{2\hbar c}{\pi^2 \varepsilon_0} \sum_l \varepsilon_{mnl} \frac{2\rho_l c\tau}{(\rho^2 - c^2 \tau^2)^3}. \quad (30. b)$$

Les fonctions d'autocorrélation de $\mathbf{E}$ ou de $\mathbf{B}$, décroissent à l'infini, comme $1/\rho^4$ ou $1/\tau^4$; entre composantes différentes ($m \neq n$), la décroissance est plus rapide, en $1/\tau^6$. Les fonctions de corrélation entre $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ décroissent comme $1/\rho^5$ et $1/\tau^5$.

La forme explicite des fonctions de corrélation au voisinage du cône de lumière est assez complexe. Pour les obtenir, il faut partir de l'expression (12) en gardant η fini et dériver deux fois en ρ et τ . Le résultat est une fraction rationnelle en ρ et $c\tau$ dont le numérateur est de degré 8 et le dénominateur de degré 12 dans le cas général. Nous donnerons simplement le résultat dans le cas particulier des fonctions de corrélation temporelles des champs en un point donné ($\rho = 0$). On peut les calculer à partir de (28. d et e) ou bien revenir aux sommes du type (28. a) et (28. b), qui se simplifient notablement pour $\rho = 0$. On obtient :

$$\begin{aligned} \langle 0 | E_m(\mathbf{r}, t_1) E_n(\mathbf{r}, t_2) + E_n(\mathbf{r}, t_2) E_m(\mathbf{r}, t_1) | 0 \rangle = \\ = \frac{2 \hbar c}{\pi^2 \varepsilon_0} \delta_{mn} \frac{c^4 \tau^4 - 6 \eta^2 c^2 \tau^2 + \eta^4}{(\eta^2 + c^2 \tau^2)^4} \quad (31. a) \end{aligned}$$

$$\langle 0 | E_m(\mathbf{r}, t_1) B_n(\mathbf{r}, t_2) + B_n(\mathbf{r}, t_2) E_m(\mathbf{r}, t_1) | 0 \rangle = 0. \quad (31. b)$$

Le second résultat est évident : puisque D_1 est paire en ρ , sa dérivée par rapport à ρ_i est impaire en ρ_i , donc nulle en $\rho = 0$. La fonction d'autocorrélation des champs (31. a) est évidemment paire en τ . Elle décroît comme $1/\tau^4$ à l'infini, et son allure générale est représentée sur la figure 1.

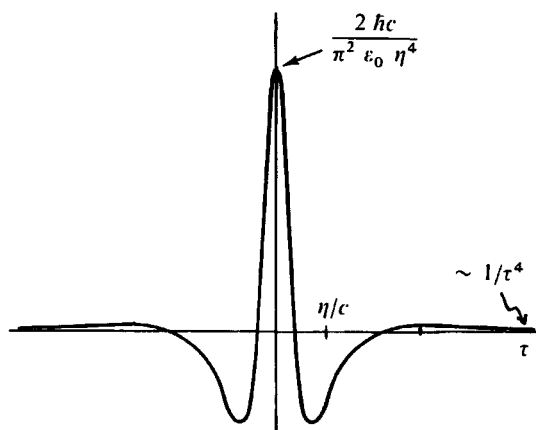


Figure 1. Variation avec τ de la fonction d'autocorrélation du champ électrique dans le vide (formule (31. a)). η est infiniment petit. Pour $\tau \gg \eta/c$, la fonction est positive et décroît comme $|\tau|^{-4}$.

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES ET CONSEILS DE LECTURE

Les commutateurs entre les composantes du champ libre et les propriétés des fonctions spéciales comme D , D_1 ... sont étudiés dans la plupart des ouvrages d'électrodynamique quantique relativiste, par exemple Akhiezer et Berestetskii (§ 13), Heitler (chap. II, §§ 8 et 9).

COMPLÉMENT D_{III}

EXERCICES

- Exercice 1 Commutateurs de A , E_L , B en jauge de Coulomb
- Exercice 2 Hamiltonien d'un système de 2 particules de charges opposées couplées au champ électromagnétique
- Exercice 3 Relations de commutation de l'impulsion totale P avec H_P , H_R , H_I
- Exercice 4 Distribution de Bose-Einstein
- Exercice 5 Densités de quasi-probabilité et fonctions caractéristiques
- Exercice 6 Composantes en quadrature d'un champ monomode. Représentation graphique de l'état du champ
- Exercice 7 Etats comprimés du rayonnement
- Exercice 8 Génération d'états comprimés du rayonnement dans une interaction à deux photons
- Exercice 9 Densité de quasi-probabilité d'un état comprimé

1. COMMUTATEURS DE A , E_L , B EN JAUGE DE COULOMB

Exprimer les commutateurs $[A_m(\mathbf{r}), A_n(\mathbf{r}')]$, $[A_m(\mathbf{r}), E_{Ln}(\mathbf{r}')]$, $[E_{Lm}(\mathbf{r}), E_{Ln}(\mathbf{r}')] et $[E_{Lm}(\mathbf{r}), B_n(\mathbf{r}')] (m, n = x, y, z)$ en fonction de ceux des opérateurs création et annihilation a_i^+ et a_i des différents modes. En déduire leur valeur.$

Solution

Soient v_m et w_n , deux composantes quelconques des différents champs. Elles s'expriment comme des combinaisons linéaires des a_i et a_i^+ (cf. (A.3) (A.4) (A.5))

$$V_m = \sum_i v_{mi} a_i + v_{mi}^* a_i^+ \quad (1.a)$$

$$W_n = \sum_j w_{nj} a_j + w_{nj}^* a_j^+ \quad (1.b)$$

$$[V_m, W_n] = \sum_{i,j} v_{mi} w_{nj} [a_i, a_j] + v_{mi} w_{nj}^* [a_i, a_j^+] + v_{mi}^* w_{nj} [a_i^+, a_j] + v_{mi}^* w_{nj}^* [a_i^+, a_j^+] \quad (2)$$

D'après les relations de commutations fondamentales (A.2), cette expression se réduit à

$$[V_m, W_n] = \sum_i (v_{mi} w_{ni}^* - v_{mi}^* w_{ni}) \quad (3)$$

Appliquons cette formule dans différents cas :

$$V_m = A_m(\mathbf{r}) \rightarrow v_{mi} = \mathcal{A}_{\omega_i} \varepsilon_{im} e^{ik_i \cdot \mathbf{r}} \quad (4.a)$$

$$W_n = A_n(\mathbf{r}') \rightarrow w_{ni} = \mathcal{A}_{\omega_i} \varepsilon_{in} e^{ik_i \cdot \mathbf{r}'} \quad (4.b)$$

$$[A_m(\mathbf{r}), A_n(\mathbf{r}')] = \sum_{\mathbf{k}, \epsilon} \mathcal{A}_\omega^2 \epsilon_m \epsilon_n (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} - e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'}) = 0 \quad (5)$$

car les contributions des modes $\mathbf{k}$ et $-\mathbf{k}$ sont opposées dans la sommation qui apparaît dans (5). Le calcul est identique pour le commutateur entre composantes du champ électrique, à la multiplication près de $\mathcal{A}_\omega$ par $i\omega$.

$$[E_{1m}(\mathbf{r}), E_{1n}(\mathbf{r}')] = 0. \quad (6)$$

Pour le commutateur entre A_m et E_{1n} , (4. a) reste inchangé et

$$w_{ni} = i\omega_i \mathcal{A}_{\omega_i} \epsilon_{in} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} \quad (7)$$

Il vient :

$$\begin{aligned} [A_m(\mathbf{r}), E_{1n}(\mathbf{r}')] &= \sum_{\mathbf{k}, \epsilon} -i\omega \mathcal{A}_\omega^2 \epsilon_m \epsilon_n (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \epsilon} -2i \frac{\hbar}{2\epsilon_0 L^3} \epsilon_m \epsilon_n e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \end{aligned} \quad (8)$$

Nous avons utilisé l'expression (A. 6) de $\mathcal{A}_\omega$ et le fait que les contributions des deux termes de la parenthèse du second membre de (8) sont égales (il suffit, pour le voir, de changer $\mathbf{k}$ en $-\mathbf{k}$ dans la sommation sur les modes). Remplaçons maintenant cette sommation discrète sur les modes par une intégrale (voir formule (C. 34) du chapitre I), et utilisons la formule (1) du complément A_r. Il vient

$$\begin{aligned} [A_m(\mathbf{r}), E_{1n}(\mathbf{r}')] &= \frac{\hbar}{i\epsilon_0} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \sum_{\epsilon} \epsilon_m \epsilon_n \\ &= \frac{\hbar}{i\epsilon_0} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \left(\delta_{mn} - \frac{k_m k_n}{k^2} \right) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \end{aligned} \quad (9)$$

On voit apparaître la fonction $\delta_{mn}^\perp(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ définie par la formule (B. 17) du chapitre I, ce qui donne

$$[A_m(\mathbf{r}), E_{1n}(\mathbf{r}')] = \frac{\hbar}{i\epsilon_0} \delta_{mn}^\perp(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (10)$$

Calculons enfin le dernier commutateur :

$$\begin{aligned} [E_{1m}(\mathbf{r}), B_n(\mathbf{r}')] &= [E_{1m}(\mathbf{r}), (\nabla' \times \mathbf{A}(\mathbf{r}'))_n] \\ &= \sum_{pq} \epsilon_{npq} \nabla'_p [E_{1m}(\mathbf{r}), A_q(\mathbf{r}')] \\ &= \frac{-\hbar}{i\epsilon_0} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \sum_{\epsilon} \left(\sum_{pq} \epsilon_{npq} i k_p \epsilon_q \right) \epsilon_m e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})}. \end{aligned} \quad (11)$$

La somme sur ϵ de $\epsilon_m i(\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon})_n$ vaut, d'après la formule (4) du complément A₁, $i \sum_l \epsilon_{mnl} k_l$.

Le facteur ik_l peut être remplacé par l'action de l'opérateur $-\nabla_l$ sur la fonction de $\mathbf{r}$ résultant de l'intégration sur $\mathbf{k}$. Il vient ainsi

$$\begin{aligned} [E_{1m}(\mathbf{r}), B_n(\mathbf{r}')] &= \frac{\hbar}{i\epsilon_0} \sum_l \epsilon_{mnl} \nabla_l \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \\ &= \frac{-i\hbar}{\epsilon_0} \sum_l \epsilon_{mnl} \nabla_l \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned} \quad (12)$$

qui redonne (A. 15).

Remarquons enfin que (5), (6), (10) et (12) sont des cas particuliers des relations de commutations entre champs à deux instants différents discutées dans le complément C_{III}.

2. HAMILTONIEN D'UN SYSTÈME DE 2 PARTICULES DE CHARGES OPPOSÉES COUPLÉES AU CHAMP ÉLECTROMAGNÉTIQUE

On considère un système de deux particules 1 et 2, de masses m_1 et m_2 , de charges opposées $q_1 = -q_2 = q$, de positions $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$ et d'impulsions $\mathbf{p}_1$ et $\mathbf{p}_2$. Ces deux particules sont supposées former un état lié dont les dimensions, de l'ordre de a , sont petites devant la longueur d'onde λ des modes du champ de rayonnement qui seront pris en compte dans l'hamiltonien d'interaction. Tous les calculs seront faits à l'ordre 0 en a/λ (approximation des grandes longueurs d'onde) et les couplages magnétiques des spins seront négligés.

a) Ecrire l'hamiltonien en jauge de Coulomb pour un tel système de deux particules interagissant avec le champ électromagnétique, décrit par le potentiel transverse $\mathbf{A}$. On exprimera les résultats en fonction des variables du centre de masse des deux particules (variables externes)

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (1.a) \quad \mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \quad (1.b)$$

et des variables relatives (variables internes)

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (2.a) \quad \frac{\mathbf{p}}{m} = \frac{\mathbf{p}_1}{m_1} - \frac{\mathbf{p}_2}{m_2} \quad (2.b)$$

où m est la masse réduite

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (3)$$

On appellera $M = m_1 + m_2$ la masse totale

b) Calculer l'élément de matrice de l'hamiltonien d'interaction entre l'état $|\mathbf{K}, b; 0\rangle$ (centre de masse dans un état d'impulsion $\hbar\mathbf{K}$, état atomique interne b , 0 photon) et l'état $|\mathbf{K}', a; \mathbf{k}\epsilon\rangle$ (centre de masse dans un état d'impulsion $\hbar\mathbf{K}'$, état atomique interne a , un photon $\mathbf{k}\epsilon$). Comment la conservation de l'impulsion globale apparaît-elle sur cet élément de matrice ?

Solution

a) L'expression de l'hamiltonien des particules

$$H_p = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (4)$$

(on a omis les énergies de Coulomb propres des deux particules, qui sont des constantes) en fonction des variables (1) et (2) est bien connue (*) :

$$H_p = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (5)$$

(*) Cohen-Tannoudji, Diu, Laloë, chapitre VII, paragraphe B.

Dans l'hamiltonien d'interaction $H_{I1} + H_{I2}$ avec

$$H_{I1} = -\frac{q_1}{m_1} \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_1) - \frac{q_2}{m_2} \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_2) \quad (6)$$

$$H_{I2} = \frac{q_1^2}{2m_1} A^2(\mathbf{r}_1) + \frac{q_2^2}{2m_2} A^2(\mathbf{r}_2), \quad (7)$$

on peut, à l'ordre 0 en a/λ , remplacer $\mathbf{A}(\mathbf{r}_1)$ et $\mathbf{A}(\mathbf{r}_2)$ par $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ puisque $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}|$ et $|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}|$ sont de l'ordre de a et que $\mathbf{A}$ varie très peu sur cette distance. Comme $q_1 = -q_2 = q$, il vient alors

$$H_{I1} = -q \left(\frac{\mathbf{p}_1}{m_1} - \frac{\mathbf{p}_2}{m_2} \right) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}) = -q \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}) \quad (8)$$

$$H_{I2} = \frac{q^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) A^2(\mathbf{R}) = \frac{q^2}{2m} A^2(\mathbf{R}). \quad (9)$$

Les variables externes n'apparaissent que dans $\mathbf{A}$, qui est évalué au centre de masse $\mathbf{R}$ du système. Les variables internes n'apparaissent que dans H_{I1} , par l'intermédiaire de la vitesse relative $\mathbf{p}/m$.

b) Dans l'élément de matrice

$$\langle \mathbf{K}', a; \mathbf{k}\epsilon | H_I | \mathbf{K}, b; 0 \rangle, \quad (10)$$

seul intervient H_{I1} (terme linéaire en a et a^+). De plus, pour créer un photon $\mathbf{k}\epsilon$, il faut prendre dans le développement de $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ le coefficient de $a_{\mathbf{k}\epsilon}^+$. On obtient alors pour (10)

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega L^3}} \langle \mathbf{K}', a; \mathbf{k}\epsilon | -\frac{q}{m} \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\epsilon} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} a_{\mathbf{k}\epsilon}^+ | \mathbf{K}, b; 0 \rangle. \quad (11)$$

Les éléments de matrice de $\mathbf{p}$, $e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}$, $a_{\mathbf{k}\epsilon}^+$ se factorisent pour donner

$$-\frac{q}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega L^3}} \langle a | \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p} | b \rangle \langle \mathbf{K}' | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} | \mathbf{K} \rangle. \quad (12)$$

Le dernier élément de matrice est proportionnel à $\int d^3R e^{-i\mathbf{K}' \cdot \mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}$, c'est-à-dire encore à $\delta(\mathbf{K} - \mathbf{k} - \mathbf{K}')$, qui exprime que l'impulsion totale de l'état initial, $\hbar\mathbf{K}$, doit être égale à l'impulsion totale de l'état final, $\hbar\mathbf{K}' + \hbar\mathbf{k}$.

3. RELATIONS DE COMMUTATION DE L'IMPULSION TOTALE $\mathbf{P}$ AVEC H_P, H_R, H_I

Soit $\mathbf{P}$ l'impulsion totale du système particules chargées + champ électromagnétique quantifié. Soit H son hamiltonien. On rappelle que $\mathbf{P}$ et H sont donnés respectivement par

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha} + \sum_i \hbar \mathbf{k}_i a_i^+ a_i \quad (1)$$

$$H = H_P + H_R + H_{I1} + H_{I2} \quad (2)$$

$$H_P = \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \sum_{\alpha > \beta} \frac{q_{\alpha} q_{\beta}}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}|} + \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha}^{\text{coul}} \quad (3.a)$$

$$H_R = \sum_i \hbar \omega_i \left(a_i^+ a_i + \frac{1}{2} \right) \quad (3.b)$$

$$H_{I1} = - \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}}{m_{\alpha}} \mathbf{p}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}) \quad (3.c)$$

$$H_{I2} = \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}^2}{2 m_{\alpha}^2} A^2(\mathbf{r}_{\alpha}) \quad (3.d)$$

Vérifier en utilisant les relations de commutation fondamentales que **P** commute avec H_P , H_R , H_{I1} et H_{I2} .

Solution

Pour résoudre l'exercice, nous aurons besoin des relations de commutation suivantes entre $\mathbf{p}_{\alpha}$, a_i , a_i^+ et un opérateur quelconque M :

$$[(\mathbf{p}_{\alpha})_j, M] = -i\hbar \frac{\partial M}{\partial (\mathbf{r}_{\alpha})_j} \quad j = x, y, z \quad (4.a)$$

$$[a_i, M] = \frac{\partial M}{\partial a_i^+} \quad (4.b) \quad [a_i^+, M] = -\frac{\partial M}{\partial a_i} \quad (4.c)$$

Étudions d'abord $[\mathbf{P}, H_P]$. Comme a_i et a_i^+ commutent avec les opérateurs dépendant des particules, nous avons :

$$[\mathbf{P}, H_P] = \left[\sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha}, H_P \right] = \left[\sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha}, \sum_{\beta > \gamma} \frac{q_{\beta} q_{\gamma}}{4 \pi \epsilon_0 |\mathbf{r}_{\beta} - \mathbf{r}_{\gamma}|} \right]. \quad (5)$$

Pour une paire donnée β, γ de particules dans V_{coul} , les commutateurs relatifs à $\mathbf{p}_{\beta}$ et $\mathbf{p}_{\gamma}$ ont des signes opposés, de sorte que (5) est nul.

Le commutateur $[\mathbf{P}, H_R]$ est nul de façon évidente puisque l'opérateur $N_i = a_i^+ a_i$ apparaît à la fois dans $\mathbf{P}$ et H_R .

Pour étudier les commutateurs $[\mathbf{P}, H_{I1}]$ et $[\mathbf{P}, H_{I2}]$, nous allons au préalable montrer que $[\mathbf{P}, A_j(\mathbf{r}_{\alpha})] = 0$. Pour cela, étudions séparément les 2 termes de (1) et utilisons le développement (A.5) de $A(\mathbf{r}_{\alpha})$:

$$\left[\sum_{\beta} \mathbf{p}_{\beta}, A_j(\mathbf{r}_{\alpha}) \right] = -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}_{\alpha}} A_j(\mathbf{r}_{\alpha}) = \sum_i \hbar \mathbf{k}_i \mathcal{A}_{\omega_i}(\epsilon_i) f(a_i) e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} - a_i^+ e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \left[\sum_i \hbar \mathbf{k}_i a_i^+ a_i, A_j(\mathbf{r}_{\alpha}) \right] &= \sum_i \hbar \mathbf{k}_i \left(a_i^+ \frac{\partial A_j}{\partial a_i^+} - \frac{\partial A_j}{\partial a_i} a_i \right) = \\ &= \sum_i \hbar \mathbf{k}_i \mathcal{A}_{\omega_i}(\epsilon_i) f(a_i^+) e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} - a_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_{\alpha}}. \quad (7) \end{aligned}$$

En sommant (6) et (7), il apparaît que $[\mathbf{P}, A_j(\mathbf{r}_{\alpha})]$ est nul. Les expressions (3.c) et (3.d) montrent que H_{I1} et H_{I2} sont construits à partir des opérateurs $(\mathbf{p}_{\alpha})_i$ et $A_j(\mathbf{r}_{\alpha})$ qui commutent, l'un et l'autre, avec $\mathbf{P}$. Il en résulte qu'ils commutent eux-mêmes avec $\mathbf{P}$.

4. DISTRIBUTION DE BOSE-EINSTEIN

On considère un mode du champ électromagnétique à l'équilibre thermodynamique à la température T . La matrice densité du champ est

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} \quad (1)$$

avec $\beta = 1/kT$ et

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right). \quad (2)$$

a) Calculer Z en utilisant la propriété $\text{Tr } \rho = 1$.

b) Calculer la valeur moyenne $\langle N \rangle$ et la variance $(\Delta N)^2 = \langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle$ du nombre de photons dans le mode.

c) Exprimer la probabilité $\mathcal{P}(n)$ d'avoir n photons dans le mode en fonction de n et $\langle N \rangle$ (loi de distribution de Bose).

Solution

a) La condition de normalisation de ρ

$$\text{Tr } \rho = 1 \quad (3)$$

s'écrit

$$\frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta \hbar \omega (n + \frac{1}{2})} = 1 \quad (4.a)$$

c'est-à-dire encore, en faisant la sommation sur n

$$\frac{1}{Z} \left(\frac{e^{-\beta \hbar \omega / 2}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} \right) = 1 \quad (4.b)$$

d'où nous déduisons

$$Z = \frac{e^{-\beta \hbar \omega / 2}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}}. \quad (5)$$

b) Le nombre moyen de photons dans le mode n est donné par

$$\langle N \rangle = \sum_n n \rho_{nn} \quad (6)$$

où ρ_{nn} est évalué en utilisant (5)

$$\rho_{nn} = e^{-\beta \hbar \omega (n + \frac{1}{2})} (1 - e^{-\beta \hbar \omega}). \quad (7)$$

Pour calculer $\langle N \rangle$, partons de la relation suivante utilisée pour passer de (4.a) à (4.b)

$$\sum_n e^{-nx} = \frac{1}{1 - e^{-x}} \quad (8)$$

où $x = \beta \hbar \omega$ et dérivons les deux membres par rapport à x . Il vient :

$$\sum_n n e^{-nx} = \frac{e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2}. \quad (9)$$

En comparant cette expression à celle déduite de (6) et (7), nous trouvons que le nombre moyen de photons dans le mode considéré est

$$\langle N \rangle = \frac{e^{-\beta \hbar \omega}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}. \quad (10)$$

Pour obtenir la variance $(\Delta N)^2$, il faut calculer au préalable

$$\langle N^2 \rangle = \sum_n n^2 \rho_{nn} = \sum_n n^2 e^{-\beta \hbar \omega (n + \frac{1}{2})} (1 - e^{-\beta \hbar \omega}). \quad (11)$$

Pour cela, il suffit de dériver (9) par rapport à x :

$$\sum_n n^2 e^{-nx} = \frac{e^{-x}(1 + e^{-x})}{(1 - e^{-x})^3} \quad (12)$$

ce qui donne

$$\langle N^2 \rangle = \frac{e^{-\beta\hbar\omega}(1 + e^{-\beta\hbar\omega})}{(1 - e^{-\beta\hbar\omega})^2} = \frac{1}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2} + \frac{e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2}. \quad (13)$$

Le premier terme de (13) n'est autre que $\langle N \rangle^2$, de sorte que :

$$(\Delta N)^2 = \frac{e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2} = \frac{(e^{\beta\hbar\omega} - 1) + 1}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2} = \frac{1}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)} + \frac{1}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2} \quad (14)$$

expression que l'on transforme au moyen de (10) en

$$\Delta N = [\langle N \rangle^2 + \langle N \rangle]^{1/2}. \quad (15)$$

Nous en concluons que ΔN est de l'ordre de $\langle N \rangle$ pour $\langle N \rangle$ grand et est de l'ordre de $\sqrt{\langle N \rangle}$ pour $\langle N \rangle$ petit.

c) La probabilité $\mathcal{P}(n)$ est donnée en (7). Pour l'exprimer en fonction de $\langle N \rangle$, nous utilisons (10) pour éliminer $e^{-\beta\hbar\omega}$ au profit de $\langle N \rangle$ et obtenons ainsi

$$\mathcal{P}(n) = \frac{1}{1 + \langle N \rangle} \left(\frac{\langle N \rangle}{1 + \langle N \rangle} \right)^n. \quad (16)$$

On remarque que, contrairement à la distribution de Poisson (C. 52) obtenue pour un état quasi-classique, $\mathcal{P}(n)$ décroît toujours avec n .

5. DENSITÉS DE QUASI-PROBABILITÉ ET FONCTIONS CARACTÉRISTIQUES

Dans tout cet exercice, on se limite à un seul mode du champ électromagnétique dont les opérateurs de création et d'annihilation sont a^+ et a . Soit ρ l'opérateur densité du champ dans ce mode. Le but de l'exercice est de présenter quelques propriétés de deux densités de quasi-probabilité $P_A(\alpha, \alpha^*)$ et $P_N(\alpha, \alpha^*)$ et des « fonctions caractéristiques » associées.

a) λ étant un nombre complexe, on définit à partir de ρ les fonctions $C_N(\lambda, \lambda^*)$ et $C_A(\lambda, \lambda^*)$ par les relations :

$$C_N(\lambda, \lambda^*) = \text{Tr}(\rho e^{\lambda a^+} e^{-\lambda^* a}) \quad (1)$$

$$C_A(\lambda, \lambda^*) = \text{Tr}(\rho e^{-\lambda^* a} e^{\lambda a^+}). \quad (2)$$

En utilisant la relation de Glauber

$$e^{\lambda a^+ - \lambda^* a} = e^{\lambda a^+} e^{-\lambda^* a} e^{-|\lambda|^2/2} = e^{-\lambda^* a} e^{\lambda a^+} e^{|\lambda|^2/2} \quad (3)$$

établir la relation existant entre $C_N(\lambda, \lambda^*)$ et $C_A(\lambda, \lambda^*)$.

b) On considère les fonctions classiques $f(\lambda, \lambda^*)$ et $g(\alpha, \alpha^*)$ telles que

$$f(\lambda, \lambda^*) = \int d^2\alpha g(\alpha, \alpha^*) e^{(\lambda\alpha^* - \lambda^*\alpha)} \quad (4)$$

où $d^2\alpha = d\operatorname{Re}\alpha d\operatorname{Im}\alpha$. En posant

$$\alpha = \alpha_P + i\alpha_Q \quad (5.a)$$

$$\lambda = \frac{1}{2}(v - iu) \quad (5.b)$$

où α_P , α_Q , u et v sont réels, montrer que f et g sont liés par une transformée de Fourier à deux dimensions et que

$$g(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{\pi^2} \int d^2\lambda f(\lambda, \lambda^*) e^{-(\lambda\alpha^* - \lambda^*\alpha)}. \quad (6)$$

c) On considère la fonction de α

$$P_A(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{\pi} \langle \alpha | \rho | \alpha \rangle \quad (7)$$

où $|\alpha\rangle$ est un état quasi classique. Démontrer les deux relations suivantes :

$$\int d^2\alpha P_A(\alpha, \alpha^*) = 1 \quad (8.a)$$

$$\langle (a)^m (a^+)^l \rangle = \int d^2\alpha P_A(\alpha, \alpha^*) (\alpha)^m (\alpha^*)^l \quad (8.b)$$

En déduire que $P_A(\alpha, \alpha^*)$ est une densité de quasi-probabilité bien adaptée à l'ordre antinormal.

d) En utilisant la définition (2) de $C_A(\lambda, \lambda^*)$, montrer qu'il existe entre $C_A(\lambda, \lambda^*)$ et $P_A(\alpha, \alpha^*)$ des relations de transformation de Fourier du type (4) et (6).

On dit que $C_A(\lambda, \lambda^*)$ est la fonction caractéristique de $P_A(\alpha, \alpha^*)$. Comment peut-on exprimer $\langle (a)^m (a^+)^l \rangle$ en fonction des dérivées de $C_A(\lambda, \lambda^*)$ par rapport à λ et λ^* (considérées comme variables indépendantes) et évaluées en $\lambda = \lambda^* = 0$?

e) On suppose que ρ admet une représentation P , c'est-à-dire qu'il existe une fonction réelle $P_N(\alpha, \alpha^*)$ telle que :

$$\rho = \int d^2\alpha P_N(\alpha, \alpha^*) |\alpha\rangle \langle \alpha| \quad (9)$$

où $|\alpha\rangle$ est un état quasi classique. Montrer que

$$\int d^2\alpha P_N(\alpha, \alpha^*) = 1 \quad (10.a)$$

$$\langle (a^+)^l (a)^m \rangle = \int d^2\alpha P_N(\alpha, \alpha^*) (\alpha^*)^l (\alpha)^m. \quad (10.b)$$

En déduire que $P_N(\alpha, \alpha^*)$ est une distribution de quasi-probabilité bien adaptée à l'ordre normal.

f) En utilisant (1) et (9), montrer que $C_N(\lambda, \lambda^*)$ et $P_N(\alpha, \alpha^*)$ sont liés par des relations de transformation de Fourier du type (4) et (6). $C_N(\lambda, \lambda^*)$ est, pour cette raison, appelée fonction caractéristique pour l'ordre normal.

Exprimer $\langle (a^+)^l a^m \rangle$ en fonction des dérivées partielles de $C_N(\lambda, \lambda^*)$ par rapport à λ et λ^* (considérées comme variables indépendantes) et évaluées en $\lambda = \lambda^* = 0$.

g) Calculer $\langle \beta | \rho | \beta \rangle$ à l'aide de la relation (9) ($|\beta\rangle$ étant un état quasi classique) et en déduire la relation liant $P_A(\beta, \beta^*)$ et $P_N(\alpha, \alpha^*)$.

Pouvait-on établir directement cette relation à partir des résultats de la question a) sur les transformées de Fourier $C_N(\lambda, \lambda^*)$ et $C_A(\lambda, \lambda^*)$ de $P_N(\alpha, \alpha^*)$ et $P_A(\alpha, \alpha^*)$?

h) Pour illustrer, sur un exemple concret, les développements précédents, on se propose de calculer les fonctions $P_A(\alpha, \alpha^*)$ et $P_N(\alpha, \alpha^*)$ pour un rayonnement en équilibre thermodynamique à la température T pour lequel (voir exercice 4)

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hbar \omega (a^+ a + \frac{1}{2})} \quad (11)$$

où $\beta = 1/kT$, Z étant tel que $\text{Tr } \rho = 1$.

Calculer, dans ce cas particulier, $P_A(\alpha, \alpha^*)$ et $P_N(\alpha, \alpha^*)$ en utilisant les résultats des questions précédentes.

Solution

a) La relation (3) donne immédiatement l'égalité

$$e^{\lambda a^+} e^{-\lambda^* a} = e^{-\lambda^* a} e^{\lambda a^+} e^{|\lambda|^2} \quad (12)$$

qui, portée dans (1), conduit à :

$$C_N(\lambda, \lambda^*) = C_A(\lambda, \lambda^*) e^{|\lambda|^2}. \quad (13)$$

b) En utilisant les relations (5. a) et (5. b), nous réécrivons (4) sous la forme :

$$f(\lambda, \lambda^*) = \frac{1}{2\pi} \iint d\alpha_p d\alpha_q (2\pi g(\alpha, \alpha^*)) e^{-i\alpha_p u} e^{-i\alpha_q v}. \quad (14)$$

Nous en déduisons que $f(\lambda, \lambda^*)$ et $2\pi g(\alpha, \alpha^*)$ sont reliées par une transformation de Fourier. La transformation inverse de (14) s'écrit :

$$2\pi g(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{2\pi} \int du dv f(\lambda, \lambda^*) e^{i\alpha_p u} e^{i\alpha_q v} \quad (15)$$

ce qui coïncide avec la formule (6) de l'énoncé puisque $\int d^2\lambda = \iint (du dv)/4$.

c) Pour démontrer (8. a), nous partons de

$$\text{Tr } \rho = \sum_n \langle n | \rho | n \rangle = 1 \quad (16)$$

et introduisons la relation de fermeture (C.56) entre $\langle n |$ et ρ

$$\begin{aligned} \text{Tr } \rho &= \frac{1}{\pi} \int d^2 \alpha \left(\sum_n \langle n | \alpha \rangle \langle \alpha | \rho | n \rangle \right) = \frac{1}{\pi} \int d^2 \alpha \left(\sum_n \langle \alpha | \rho | n \rangle \langle n | \alpha \rangle \right) = \\ &= \frac{1}{\pi} \int d^2 \alpha \langle \alpha | \rho | \alpha \rangle \end{aligned} \quad (17)$$

ce qui correspond à (8. a). Calculons maintenant $\langle a^m (a^+)^l \rangle$

$$\langle (a^+)^m (a^+)^l \rangle = \text{Tr } \rho (a^+)^m (a^+)^l = \sum_n \langle n | \rho (a^+)^m (a^+)^l | n \rangle \quad (18)$$

soit, en introduisant la relation de fermeture (C.56) entre a^m et $(a^+)^l$

$$\begin{aligned} \langle (a^+)^m (a^+)^l \rangle &= \frac{1}{\pi} \int d^2 \alpha \left(\sum_n \langle n | \rho (a^+)^m | \alpha \rangle \langle \alpha | (a^+)^l | n \rangle \right) \\ &= \frac{1}{\pi} \int d^2 \alpha (\alpha^*)^m (\alpha^*)^l \left(\sum_n \langle n | \rho | \alpha \rangle \langle \alpha | n \rangle \right) \\ &= \frac{1}{\pi} \int d^2 \alpha (\alpha^*)^m (\alpha^*)^l \langle \alpha | \rho | \alpha \rangle \end{aligned} \quad (19)$$

qui coïncide bien avec (8. b).

Les relations (8. a) et (8. b), jointes au fait que $P_A(\alpha, \alpha^*)$ est réel et positif par suite des propriétés générales de la matrice densité, montrent que $P_A(\alpha, \alpha^*)$ a des propriétés proches de celles d'une densité de probabilité. En fait, il ne s'agit pas d'une vraie densité de probabilité, mais d'une densité de quasi-probabilité. En effet, pour un système dans l'état quasi classique $|\beta\rangle$, on s'attendrait à trouver une densité de probabilité nulle quand α est différent de β . Cette propriété n'est pas vraie pour $P_A(\alpha, \alpha^*)$ qui est égal, d'après (C.55), à $(1/\pi) e^{-|\alpha-\beta|^2}$ quand $\rho = |\beta\rangle\langle\beta|$. $P_A(\alpha, \alpha^*)$ est une densité de quasi-probabilité bien adaptée à l'ordre antinormal, car la valeur moyenne de l'opérateur $(a^+)^m (a^+)^l$, où les a et a^+ sont rangés dans l'ordre antinormal, s'exprime très facilement (voir (8. b)) en fonction de $P_A(\alpha, \alpha^*)$.

d) Introduisons la relation de fermeture (C.56) entre $e^{-\lambda a}$ et $e^{\lambda a^+}$ dans la formule (2) :

$$\begin{aligned} C_A(\lambda, \lambda^*) &= \sum_n \frac{1}{\pi} \int d^2 \alpha \langle n | \rho e^{-\lambda a} | \alpha \rangle \langle \alpha | e^{\lambda a^+} | n \rangle \\ &= \frac{1}{\pi} \int d^2 \alpha \left(\sum_n \langle n | \rho | \alpha \rangle \langle \alpha | n \rangle \right) e^{-\lambda a} e^{\lambda a^+} \\ &= \int d^2 \alpha P_A(\alpha, \alpha^*) e^{-\lambda a} e^{\lambda a^+}. \end{aligned} \quad (20)$$

Ceci montre que $C_A(\lambda, \lambda^*)$ est relié à $P_A(\alpha, \alpha^*)$ par une relation de la forme (4).

Calculons $\partial^{m+l} C_A / (\partial \lambda^*)^m (\partial \lambda)^l$ en utilisant (2) :

$$\frac{\partial^{m+l} C_A}{(\partial \lambda^*)^m (\partial \lambda)^l} = \text{Tr}(\rho e^{-\lambda a} (-a)^m e^{\lambda a^+} (a^+)^l) \quad (21)$$

donc la valeur prise en $\lambda = \lambda^* = 0$ est :

$$\text{Tr}(\rho (-a)^m (a^+)^l) = (-1)^m \langle (a^+)^l (a^+)^m \rangle \quad (22)$$

ce qui montre la relation existant entre les dérivées de la fonction caractéristique et les valeurs moyennes des puissances des opérateurs a et a^+ rangés dans l'ordre antinormal.

e) Les relations (10. a) et (10. b) sont démontrées dans la remarque du paragraphe C.4. c. $P_N(\alpha, \alpha^*)$ est une distribution de quasi-probabilité bien adaptée à l'ordre normal car la valeur

moyenne d'un produit d'opérateurs a et a^+ rangés dans l'ordre normal s'exprime simplement au moyen de (10. b).

f) Calculons $C_N(\lambda, \lambda^*)$, ρ étant défini par la relation (9).

En portant cette relation dans (1), nous trouvons :

$$C_N(\lambda, \lambda^*) = \int d^2\alpha P_N(\alpha, \alpha^*) \text{Tr}(|\alpha\rangle\langle\alpha| e^{\lambda a^+} e^{-\lambda^* a}). \quad (23)$$

La propriété cyclique de la trace permet d'écrire

$$\begin{aligned} \text{Tr}(|\alpha\rangle\langle\alpha| e^{\lambda a^+} e^{-\lambda^* a}) &= \text{Tr}(e^{-\lambda^* a} |\alpha\rangle\langle\alpha| e^{\lambda a^+}) = e^{-\lambda^* \alpha} e^{\lambda \alpha^*} \text{Tr}(|\alpha\rangle\langle\alpha|) = \\ &= e^{-\lambda^* \alpha} e^{\lambda \alpha^*} \end{aligned} \quad (24)$$

ce qui donne pour $C_N(\lambda, \lambda^*)$

$$C_N(\lambda, \lambda^*) = \int d^2\alpha P_N(\alpha, \alpha^*) e^{\lambda \alpha^*} e^{-\lambda^* \alpha} \quad (25)$$

qui coïncide avec (4).

En procédant comme dans la question d), nous trouvons

$$\frac{\partial^{l+m} C_N(\lambda, \lambda^*)}{(\partial \lambda)^l (\partial \lambda^*)^m} = \text{Tr}(\rho e^{\lambda a^+} (a^+)^l e^{-\lambda^* a} (-a)^m) \quad (26)$$

dont la valeur prise pour $\lambda = \lambda^* = 0$ est égale à $(-1)^m \langle (a^+)^l (a)^m \rangle$.

g) Calculons l'élément de matrice diagonale $\langle \beta | \rho | \beta \rangle$ en utilisant (9) et (C.55) :

$$\langle \beta | \rho | \beta \rangle = \int d^2\alpha P_N(\alpha, \alpha^*) |\langle \beta | \alpha \rangle|^2 = \int d^2\alpha P_N(\alpha, \alpha^*) e^{-|\beta - \alpha|^2} \quad (27)$$

ce qui montre, compte tenu de (7), que $P_A(\beta, \beta^*)$ est le produit de convolution de $P_N(\alpha, \alpha^*)$ et d'une fonction gaussienne :

$$P_A(\beta, \beta^*) = \frac{1}{\pi} \int d^2\alpha P_N(\alpha, \alpha^*) e^{-|\beta - \alpha|^2}. \quad (28)$$

Ce résultat peut être trouvé par une autre méthode. En effet, la relation (13) montre que $C_A(\lambda, \lambda^*)$ est le produit de $C_N(\lambda, \lambda^*)$ par $\exp(-|\lambda|^2)$. En prenant la transformée de Fourier des deux membres, on trouve d'une part P_A et d'autre part le produit de convolution des transformées de Fourier de C_N et de $\exp(-|\lambda|^2)$, c'est-à-dire, comme dans (28), le produit de convolution de P_N et de la distribution gaussienne.

h) Partons de la forme suivante de ρ

$$\rho = \frac{1}{1 + \langle N \rangle} \sum_n \left(\frac{\langle N \rangle}{1 + \langle N \rangle} \right)^n |n\rangle\langle n| \quad (29)$$

déduite de la formule (16) de l'exercice 4 et calculons $\langle \alpha | \rho | \alpha \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \rho | \alpha \rangle &= \frac{1}{1 + \langle N \rangle} \sum_n \left(\frac{\langle N \rangle}{1 + \langle N \rangle} \right)^n |\langle n | \alpha \rangle|^2 \\ &= \frac{e^{-|\alpha|^2}}{1 + \langle N \rangle} \sum_n \left(\frac{\langle N \rangle}{1 + \langle N \rangle} \right)^n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \\ &= \frac{e^{-|\alpha|^2}}{1 + \langle N \rangle} \exp \frac{\langle N \rangle |\alpha|^2}{1 + \langle N \rangle} \end{aligned} \quad (30)$$

d'où nous déduisons :

$$P_A(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{\pi(1 + \langle N \rangle)} \exp \frac{-|\alpha|^2}{1 + \langle N \rangle} \quad (31)$$

En utilisant (20) et le fait que la transformée de Fourier d'une fonction gaussienne est une gaussienne, nous trouvons :

$$C_A(\lambda, \lambda^*) = \exp[-(1 + \langle N \rangle) |\lambda|^2] \quad (32)$$

$C_N(\lambda, \lambda^*)$ se calcule alors en utilisant (13)

$$C_N(\lambda, \lambda^*) = e^{-\langle N \rangle |\lambda|^2} \quad (33)$$

et on en déduit $P_N(\alpha, \alpha^*)$ par transformation de Fourier

$$\begin{aligned} P_N(\alpha, \alpha^*) &= \frac{1}{\pi^2} \int d^2 \lambda C_N(\lambda, \lambda^*) e^{(\lambda^* \alpha - \lambda \alpha^*)} \\ &= \frac{1}{\pi \langle N \rangle} e^{-|\alpha|^2 / \langle N \rangle}. \end{aligned} \quad (34)$$

La représentation $P_N(\alpha, \alpha^*)$ d'un rayonnement à l'équilibre thermodynamique est donc une gaussienne centrée à l'origine et dont la largeur est de l'ordre de $\sqrt{\langle N \rangle}$.

6. COMPOSANTES EN QUADRATURE D'UN CHAMP MONOMODE. REPRÉSENTATION GRAPHIQUE DE L'ÉTAT DU CHAMP

Dans tout l'exercice, on suppose qu'un seul mode du champ $\mathbf{k}\mathbf{e}$ contient des photons, tous les autres modes étant vides (champ « monomode »), et on ne s'intéresse qu'à la contribution de ce mode au champ électrique libre, qui s'écrit dans le point de vue de Heisenberg

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = i\mathcal{E}_\omega \varepsilon [a e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} - a^\dagger e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}] \quad (1)$$

avec

$$\mathcal{E}_\omega = [\hbar\omega/2 \varepsilon_0 L^3]^{1/2}.$$

a) On introduit les deux combinaisons linéaires hermitiques des opérateurs de création et d'annihilation $a^\dagger$ et a du mode, définies par

$$a_P = \frac{1}{2}(a + a^\dagger) \quad (2.a)$$

$$a_Q = \frac{1}{2i}(a - a^\dagger). \quad (2.b)$$

Calculer le commutateur $[a_P, a_Q]$ et en déduire que $\Delta a_P \Delta a_Q \geq 1/4$, où Δa_P et Δa_Q sont les dispersions de a_P et a_Q dans l'état considéré du mode.

Montrer que l'hamiltonien H du mode peut s'écrire

$$\frac{H}{\hbar\omega} = \frac{1}{2}(a^\dagger a + a a^\dagger) = a_P^2 + a_Q^2. \quad (3)$$

b) Exprimer le champ électrique $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ en fonction de a_P et a_Q . Montrer que les opérateurs a_P et a_Q représentent physiquement deux composantes en quadrature du champ. Quelle est la conséquence physique de la valeur non nulle du commutateur $[a_P, a_Q]$?

c) Montrer que

$$a_\theta = a_p \cos \theta + a_Q \sin \theta \quad (4)$$

représente physiquement la composante du champ déphasée de θ par rapport à celle décrite par a_p . Montrer que $H/\hbar\omega$ peut s'écrire aussi

$$\frac{H}{\hbar\omega} = a_\theta^2 + a_{\theta+\pi/2}^2. \quad (5)$$

d) On suppose que l'état du champ est un état quasi classique $|\alpha\rangle$, et l'on pose

$$\begin{cases} \alpha_p = \frac{1}{2}(\alpha + \alpha^*) & (6.a) \\ \alpha_Q = \frac{1}{2i}(\alpha - \alpha^*) & (6.b) \\ \alpha_\theta = \alpha_p \cos \theta + \alpha_Q \sin \theta. & (6.c) \end{cases}$$

Calculer les valeurs moyennes $\langle a_p \rangle$, $\langle a_Q \rangle$, $\langle a_\theta \rangle$ des opérateurs a_p , a_Q , a_θ dans l'état $|\alpha\rangle$, ainsi que les dispersions Δa_p , Δa_Q , Δa_θ . Montrer que ces trois dispersions sont égales et déterminer leur valeur commune δ . En utilisant des résultats bien connus pour un oscillateur harmonique, montrer que les distributions des valeurs possibles de a_p , a_Q , a_θ dans l'état $|\alpha\rangle$ sont des gaussiennes.

e) Soit un champ classique monomode dont l'état est décrit par la variable normale α . On convient de représenter un tel état par un point M , d'abscisse α_p et d'ordonnée α_Q dans un plan rapporté à 2 axes orthogonaux Ox et Oy . Ce plan peut également être considéré comme le plan complexe, α_p et α_Q étant les parties réelle et imaginaire du nombre complexe α . Montrer que α_θ s'obtient en projetant M sur un axe $O\theta$ passant par O et faisant un angle θ avec Ox . Comment peut-on caractériser graphiquement la phase φ et l'énergie $H_{cl}/\hbar\omega$ (exprimée en unités de $\hbar\omega$) du champ classique dans l'état α ?

f) On considère maintenant un champ quantique dans l'état quasi classique $|\alpha\rangle$. L'incompatibilité de a_p et a_Q suggère de représenter l'état de ce champ, non plus par un point, mais par une surface centrée autour du point M représentant l'état classique α . Montrer que si l'on prend une surface circulaire de rayon δ , où δ a été calculé plus haut en d), on obtient, en projetant tous les points de cette surface sur les axes Ox , Oy , $O\theta$, 3 segments correctement centrés en $\langle a_p \rangle$, $\langle a_Q \rangle$, $\langle a_\theta \rangle$, et dont la largeur 2δ donne une bonne idée des dispersions Δa_p , Δa_Q , Δa_θ .

g) Le champ quantique est toujours dans l'état $|\alpha\rangle$, mais on suppose maintenant en plus que $|\alpha| \gg 1$.

En utilisant les résultats relatifs à un état quasi classique, montrer que

la dispersion ΔN du nombre de photons dans l'état $|\alpha\rangle$ est simplement reliée à la longueur du segment OM .

Soit $2\Delta\varphi$ l'angle sous lequel on voit de l'origine la surface circulaire centrée en M et associée à l'état $|\alpha\rangle$. Justifier de manière qualitative (et sans chercher à définir un opérateur phase de manière précise) pourquoi $\Delta\varphi$ donne un ordre de grandeur de la dispersion de phase dans l'état $|\alpha\rangle$. Exprimer (à la limite $|\alpha| \gg 1$) $\Delta\varphi$ en fonction de δ et OM . Quelle relation existe-t-il entre $\Delta\varphi$ et ΔN ?

h) Il existe des états du champ qui, tout en étant minimaux comme l'état $|\alpha\rangle$ (c'est-à-dire tels que $\Delta a_p \Delta a_Q = 1/4$), et tout en conduisant aux mêmes valeurs moyennes de a_p , a_Q , a_θ que l'état $|\alpha\rangle$, n'ont pas des dispersions égales pour ces diverses observables. Ces états peuvent être représentés qualitativement par des ellipses centrées en M , de même surface que les cercles considérés en *f* et *g*. Ils sont appelés états « comprimés ». Des exemples de tels états sont étudiés dans l'exercice 7.

Pour un rapport donné entre le grand axe et le petit axe de l'ellipse, dessiner les ellipses représentant les états comprimés correspondant aux divers cas suivants :

- (i) la dispersion est minimale sur a_p
- (ii) la dispersion est minimale sur a_Q
- (iii) la dispersion est minimale sur a_θ
- (iv) la dispersion est minimale sur φ
- (v) la dispersion est minimale sur l'amplitude.

Solution

a) De $[a, a^\dagger] = 1$ et des équations (2), il découle que

$$[a_p, a_Q] = \frac{i}{2}. \quad (7)$$

La relation générale

$$\Delta a_p \Delta a_Q \geq \frac{1}{2} | \langle [a_p, a_Q] \rangle | \quad (8)$$

donne alors

$$\Delta a_p \Delta a_Q \geq 1/4. \quad (9)$$

Enfin, la relation (3) est une conséquence de (2).

b) En remplaçant $e^{\pm i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$ par $\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \pm i \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ dans (1), et en utilisant (2), nous pouvons écrire $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ sous la forme

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -2 \mathcal{E}_\omega \varepsilon [a_p \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) + a_Q \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (10)$$

ce qui montre que a_p et a_Q décrivent deux composantes en quadrature du champ.

La relation (7) exprime que ces grandeurs physiques sont incompatibles. Toute augmentation de la précision sur une composante du champ se traduit par une augmentation de l'incertitude sur la composante en quadrature.

c) Le changement de θ en $\theta + \frac{\pi}{2}$ dans (4) donne

$$a_{\theta+\pi/2} = -a_p \sin \theta + a_Q \cos \theta. \quad (11)$$

A partir de (4) et (11), il est possible d'exprimer a_p et a_Q en fonction de a_θ et $a_{\theta+\pi/2}$. Le report de ces expressions dans (10) donne alors

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -2 \mathcal{E}_0 \varepsilon [a_\theta \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \theta) + a_{\theta+\pi/2} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \theta)] \quad (12)$$

ce qui montre que les composantes du champ associées à a_p et a_Q sont déphasées de θ .

Il découle également de (4) et (11) que

$$a_\theta^2 + a_{\theta+\pi/2}^2 = a_p^2 + a_Q^2 \quad (13)$$

ce qui, compte tenu de (3), redonne bien (5).

d) Le calcul des valeurs moyennes des opérateurs (2. a), (2. b) et (4) dans l'état $|\alpha\rangle$ donne, compte tenu des relations $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ et $\langle\alpha|a^\dagger = \alpha^*\langle\alpha|$ et des définitions (6)

$$\langle a_p \rangle = \alpha_p \quad (14.a)$$

$$\langle a_Q \rangle = \alpha_Q \quad (14.b)$$

$$\langle a_\theta \rangle = \alpha_\theta. \quad (14.c)$$

Calculons maintenant Δa_p^2

$$\begin{aligned} \Delta a_p^2 &= \langle \alpha | a_p^2 | \alpha \rangle - (\langle \alpha | a_p | \alpha \rangle)^2 \\ &= \frac{1}{4} \langle \alpha | a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a | \alpha \rangle - \alpha_p^2 \\ &= \frac{1}{4} \langle \alpha | a^2 + a^{\dagger 2} + 2a^\dagger a + 1 | \alpha \rangle - \alpha_p^2 \\ &= \frac{1}{4} (\alpha^2 + \alpha^{*2} + 2\alpha^* \alpha + 1) - \alpha_p^2 \\ &= \alpha_p^2 + \frac{1}{4} - \alpha_p^2 = \frac{1}{4} \end{aligned} \quad (15)$$

Des calculs analogues peuvent être faits pour Δa_Q^2 et Δa_θ^2 . On trouve ainsi que

$$\Delta a_p = \Delta a_Q = \Delta a_\theta = \delta = \frac{1}{2}. \quad (16)$$

Les équations (3) et (5), jointes à l'équation (7) et une équation analogue pour $[a_\theta, a_{\theta+\pi/2}]$, montrent que les opérateurs hermitiques a_p et a_Q , ou a_θ et $a_{\theta+\pi/2}$, sont analogues à la position x et à l'impulsion p d'un oscillateur harmonique à une dimension. Comme les distributions de x et p dans un état quasi classique sont des gaussiennes et que cet état est un état minimal, il s'ensuit que les distributions de a_p , a_Q , a_θ sont des gaussiennes, dont la dispersion a la valeur minimale (16) compatible avec la relation d'incertitude (9).

e) La définition (6. c) de a_θ entraîne que a_θ est bien la projection de $\mathbf{OM} = \alpha_p \mathbf{e}_x + \alpha_Q \mathbf{e}_y$ sur l'axe $O\theta$ (Fig. 1).

La phase φ du champ est décrite par l'angle φ entre Ox et OM . Enfin, d'après (3), $H_{cl}/\hbar\omega$ est égal à OM^2 , carré de la distance de O à M .

f) La projection du cercle de centre M et de rayon $\delta = 1/2$ sur Ox , Oy , $O\theta$ donne bien 3 segments de largeur $2\delta = 1$, centrés en α_p , α_Q , α_θ . On obtient ainsi une bonne représentation des valeurs moyennes et des dispersions de a_p , a_Q , a_θ dans l'état $|\alpha\rangle$.

g) Dans un état quasi classique (voir § C. 4. c)

$$\Delta N = \sqrt{\langle N \rangle} = \sqrt{|\alpha|^2} = |\alpha|. \quad (17)$$

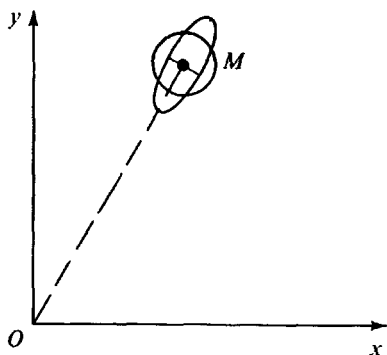


Figure 2

7. ETATS COMPRIMÉS DU RAYONNEMENT

Le but de cet exercice est d'introduire des états du champ qui ont des dispersions inégales sur deux composantes en quadrature du champ, le produit de ces dispersions ayant la valeur minimale compatible avec la relation d'incertitude (*).

On considère l'opérateur suivant agissant sur un mode du champ

$$B = \frac{r}{2}(a^2 - a^{+2}) \quad (1)$$

où r est un nombre réel et a^+ et a sont les opérateurs de création et d'annihilation du mode.

- Calculer les commutateurs $[a, B]$ et $[a^+, B]$.
- Soit $T = e^B$. Montrer que T est un opérateur unitaire.
- En utilisant la relation entre opérateurs

$$e^B X e^{-B} = X + [B, X] + \frac{1}{2!} [B, [B, X]] + \dots + \frac{1}{n!} [B, [B, \dots [B, X] \dots]] + \dots \quad (2)$$

calculer TaT^+ et Ta^+T^+ .

d) On introduit les opérateurs a_p et a_q caractérisant des composantes en quadrature du champ par les relations (voir exercice précédent) :

$$a_p = \frac{1}{2}(a + a^+) \quad (3.a) \quad a_q = \frac{1}{2i}(a - a^+) \quad (3.b)$$

(*) Voir par exemple D. F. Walls, *Nature* 306, 141 (1983).

Calculer $b_P = T a_P T^+$, $b_Q = T a_Q T^+$ ainsi que $T a_P^2 T^+$ et $T a_Q^2 T^+$.

e) On suppose que le champ est dans l'état $|c\rangle = T^+ |\alpha\rangle$, où $|\alpha\rangle$ est un état quasi classique. Calculer les valeurs moyennes de a_P et a_Q dans l'état $|c\rangle$, ainsi que les dispersions Δa_P et Δa_Q correspondantes.

Solution

a) Calculons d'abord $[a, B]$

$$\left[a, \frac{r}{2}(a^2 - a^{+2}) \right] = -\frac{r}{2}[a, a^{+2}] = -ra^+ . \quad (4)$$

Considérons maintenant $[a^+, B]$

$$\left[a^+, \frac{r}{2}(a^2 - a^{+2}) \right] = \frac{r}{2}[a^+, a^2] = -ra . \quad (5)$$

b) L'expression de T^+

$$T^+ = e^{r(a^{+2} - a^2)/2} = e^{-B} \quad (6)$$

montre que $TT^+ = T^+T = 1$.

c) Calculons TaT^+ en utilisant la relation (2)

$$e^B a e^{-B} = a + [B, a] + \frac{1}{2!}[B, [B, a]] + \frac{1}{3!}[B, [B, [B, a]]] + \dots \quad (7)$$

que l'on peut transformer en utilisant (4) et (5)

$$\begin{aligned} e^B a e^{-B} &= a + ra^+ + \frac{r^2}{2!}a + \frac{r^3}{3!}a^+ + \dots \\ &= a \left(1 + \frac{r^2}{2!} + \dots \right) + a^+ \left(r + \frac{r^3}{3!} + \dots \right) . \end{aligned} \quad (8)$$

Il est facile de s'assurer en étudiant les termes suivants du développement que le facteur de a est bien $\text{ch } r$ et celui de a^+ , $\text{sh } r$

$$e^B a e^{-B} = a \text{ch } r + a^+ \text{sh } r . \quad (9)$$

La relation adjointe de (9) s'écrit :

$$e^B a^+ e^{-B} = a^+ \text{ch } r + a \text{sh } r . \quad (10)$$

d) En combinant (9) et (10), nous obtenons :

$$\begin{aligned} b_P &= \frac{1}{2}(TaT^+ + Ta^+T^+) \\ &= (a + a^+) \frac{\text{ch } r + \text{sh } r}{2} = a_P e^r \end{aligned} \quad (11)$$

et de façon analogue

$$b_Q = \frac{1}{2i}(TaT^+ - Ta^+T^+) = a_Q e^{-r} \quad (12)$$

Les relations (11) et (12) définissent des changements d'échelle sur les observables a_P et a_Q . Calculons maintenant $Ta_P^2T^+$

$$Ta_P^2T^+ = Ta_P T^+ Ta_P T^+ = b_P^2 = a_P^2 e^{2r} \quad (13)$$

et de façon identique

$$T a_Q^2 T^+ = b_Q^2 = a_Q^2 e^{-2r}. \quad (14)$$

e) La moyenne de a_p, a_Q, a_p^2, a_Q^2 dans l'état $|\alpha\rangle$ est identique à celle de b_p, b_Q, b_p^2, b_Q^2 dans l'état $|\alpha\rangle$. En utilisant (11) et (3.a), ainsi que (C.46) et (C.47), nous trouvons :

$$\langle c | a_p | c \rangle = \langle \alpha | b_p | \alpha \rangle = \frac{\alpha + \alpha^*}{2} e^r \quad (15)$$

et en utilisant (12) et (3.b) :

$$\langle c | a_Q | c \rangle = \langle \alpha | b_Q | \alpha \rangle = \frac{\alpha - \alpha^*}{2i} e^{-r}. \quad (16)$$

Quant à $\langle b_p^2 \rangle$, il vaut d'après (13) et (3.a)

$$\begin{aligned} \langle c | a_p^2 | c \rangle &= \langle \alpha | b_p^2 | \alpha \rangle = \frac{1}{4} \langle \alpha | a^2 + a^{+2} + 2 a^+ a + 1 | \alpha \rangle e^{2r} \\ &= \frac{\alpha^2 + \alpha^{*2} + 2 \alpha^* \alpha + 1}{4} e^{2r} \end{aligned} \quad (17)$$

ce qui donne finalement, compte tenu de (15) et (17)

$$\Delta a_p = \frac{e^r}{2}. \quad (18)$$

Un calcul analogue fait pour b_Q et utilisant (3.b), (14) et (16) donne

$$\Delta a_Q = \frac{e^{-r}}{2}. \quad (19)$$

Nous en concluons que l'état $T^+ |\alpha\rangle$ est un état minimal (puisque $\Delta a_p \Delta a_Q = 1/4$) mais pour lequel les incertitudes sur a_p et a_Q sont différentes. Dans la représentation graphique de l'exercice 6, on obtient la surface représentant l'état $T^+ |\alpha\rangle$ en effectuant sur le cercle associé à $|\alpha\rangle$ une dilatation le long de Ox d'amplitude e^r , et une contraction le long de Oy d'amplitude e^{-r} . Le cercle associé à l'état $|\alpha\rangle$ se transforme ainsi en une ellipse dont le grand axe est parallèle à Ox et le petit axe parallèle à Oy .

8. GÉNÉRATION D'ÉTATS COMPRIMÉS DU RAYONNEMENT DANS UNE INTERACTION À DEUX PHOTONS

Le but de cet exercice est de montrer comment il est théoriquement possible de générer des états comprimés du champ de rayonnement pour lesquels les dispersions sur deux composantes en quadrature du champ sont différentes, le produit de ces dispersions étant égal à la valeur minimale compatible avec la relation d'Heisenberg. (Il est conseillé au lecteur d'avoir au préalable résolu les exercices 6 et 7.)

On considère un mode k du champ électromagnétique, de fréquence ω , dont l'hamiltonien H s'écrit :

$$H = \hbar \omega a^+ a + i \hbar \Lambda (a^{+2} e^{-2i\omega t} - a^2 e^{2i\omega t}) \quad (1)$$

où a^+ et a sont les opérateurs de création et d'annihilation du mode. Le

premier terme de (1) est l'énergie du mode pour le champ libre. Quant au second, il schématise un processus d'interaction à 2 photons tel que l'amplification paramétrique (une onde classique de fréquence 2ω générant deux photons de fréquence ω). A est une quantité réelle caractérisant la force de l'interaction.

a) Ecrire, dans le point de vue de Heisenberg, l'équation d'évolution de $a(t)$. On pose

$$a(t) = b(t) e^{-i\omega t}. \quad (2)$$

Quelles sont les équations d'évolution de $b(t)$ et $b^+(t)$?

b) La contribution du mode $\mathbf{k}\epsilon$ au champ électrique s'écrit dans le point de vue de Heisenberg

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = i\mathcal{E}_\omega \epsilon [a(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - a^+(t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] \quad (3)$$

où $a(t)$ est la solution de l'équation étudiée en a). Montrer que

$$b_P(t) = \frac{b(t) + b^+(t)}{2} \quad (4.a); \quad b_Q(t) = \frac{b(t) - b^+(t)}{2i} \quad (4.b)$$

où $b(t)$ est défini en (2), représentent physiquement deux composantes en quadrature du champ. Trouver les équations d'évolution de $b_P(t)$ et $b_Q(t)$ et donner leur solution sachant que $b_P(0)$ et $b_Q(0)$ sont connus.

c) On suppose qu'à l'instant $t = 0$, l'état du champ électromagnétique est le vide. Calculer à l'instant t le nombre de photons $\langle N \rangle$ dans le mode $\mathbf{k}\epsilon$ ainsi que les dispersions $\Delta b_P(t)$ et $\Delta b_Q(t)$ sur les deux composantes du champ en quadrature. Commenter ce résultat.

Solution

a) L'équation de Heisenberg pour a

$$i\hbar \dot{a} = [a, H] \quad (5.a)$$

s'écrit, compte tenu de (1)

$$i\hbar \dot{a} = \hbar\omega a + 2i\hbar A a^+ e^{-2i\omega t} \quad (5.b)$$

$$\dot{a} = -i\omega a + 2A a^+ e^{-2i\omega t} \quad (5.c)$$

Avec le changement de variables (2), l'équation (5.c) devient alors :

$$\dot{b} = 2Ab^+ \quad (6.a)$$

l'équation adjointe s'écrivant

$$\dot{b}^+ = 2Ab. \quad (6.b)$$

b) Exprimons $a(t)$ et $a^+(t)$ en fonction de $b(t)$ et $b^+(t)$ au moyen de (2) et de l'équation adjointe, puis en fonction de $b_P(t)$ et $b_Q(t)$ au moyen de (4.a) et (4.b). Reportons enfin les valeurs ainsi obtenues dans l'expression (3) de $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$. Un calcul analogue à celui de l'exercice 6 donne

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -2\mathcal{E}_\omega \epsilon [b_P(t) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) + b_Q(t) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (3')$$

ce qui montre que $b_p(t)$ et $b_Q(t)$ représentent deux composantes en quadrature du champ (dont l'amplitude varie au cours du temps à cause de l'interaction paramétrique décrite par le dernier terme de (1)).

Des équations d'évolution (6) de $b(t)$ et $b^+(t)$ et des définitions (4), nous déduisons

$$\dot{b}_p(t) = 2 \Lambda b_p(t) \quad (7.a); \quad \dot{b}_Q(t) = -2 \Lambda b_Q(t) \quad (7.b)$$

dont la solution est

$$b_p(t) = b_p(0) e^{2\Lambda t} \quad (8.a); \quad b_Q(t) = b_Q(0) e^{-2\Lambda t}. \quad (8.b)$$

c) Le nombre de photons dans le mode k est donné par l'opérateur

$$N(t) = a^+(t) a(t) = b^+(t) b(t). \quad (9)$$

En inversant les relations (4), nous pouvons exprimer $b(t)$ et $b^+(t)$ en fonction de $b_p(t)$ et $b_Q(t)$, soit encore, compte tenu de (8.a) et (8.b)

$$b(t) = b_p(0) e^{2\Lambda t} + i b_Q(0) e^{-2\Lambda t} \quad (10.a)$$

$$b^+(t) = b_p(0) e^{2\Lambda t} - i b_Q(0) e^{-2\Lambda t} \quad (10.b)$$

$$b(t) = b(0) \operatorname{ch} \Lambda t + b^+(0) \operatorname{sh} \Lambda t \quad (11.a)$$

$$b^+(t) = b(0) \operatorname{sh} \Lambda t + b^+(0) \operatorname{ch} \Lambda t. \quad (11.b)$$

Nous en déduisons, puisque $b(0) = a(0)$

$$N(t) = (a^+(0) \operatorname{ch} \Lambda t + a(0) \operatorname{sh} \Lambda t) (a(0) \operatorname{ch} \Lambda t + a^+(0) \operatorname{sh} \Lambda t) \quad (12)$$

dont la valeur moyenne dans le vide est égale à

$$\langle N(t) \rangle = \operatorname{sh}^2 \Lambda t. \quad (13)$$

L'expression E du champ électrique à l'instant t se déduit de (3') et (8) :

$$E(\mathbf{r}, t) = -2 \mathcal{E}_\omega \varepsilon [b_p(0) e^{2\Lambda t} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) + b_Q(0) e^{-2\Lambda t} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]. \quad (14)$$

Il apparaît ainsi que l'effet de l'interaction paramétrique est d'augmenter une quadrature du champ et de diminuer l'autre quadrature. Plus précisément, nous avons d'après (8.a) et (8.b) :

$$(\Delta b_p(t))^2 = \langle 0 | b_p^2(0) | 0 \rangle e^{4\Lambda t} - \langle 0 | b_p(0) | 0 \rangle^2 e^{4\Lambda t} \quad (15.a)$$

$$(\Delta b_Q(t))^2 = \langle 0 | b_Q^2(0) | 0 \rangle e^{-4\Lambda t} - \langle 0 | b_Q(0) | 0 \rangle^2 e^{-4\Lambda t} \quad (15.b)$$

En utilisant (4), nous trouvons alors

$$\Delta b_p(t) = \frac{e^{2\Lambda t}}{2} \quad (16.a); \quad \Delta b_Q(t) = \frac{e^{-2\Lambda t}}{2}. \quad (16.b)$$

Ceci montre bien que l'incertitude sur l'une des composantes du champ, en l'occurrence b_Q , peut être rendue extrêmement petite. Ce résultat est obtenu au détriment de la composante en quadrature en bon accord avec la relation d'Heisenberg $\Delta b_p \Delta b_Q \geq 1/4$ (voir exercice 6). Notons enfin que le résultat obtenu ici réalise le minimum de cette inégalité et que cette compression de l'incertitude sur l'une des composantes du champ s'accompagne d'une augmentation du nombre moyen de photons (13).

9. DENSITÉ DE QUASI-PROBABILITÉ D'UN ÉTAT COMPRIMÉ

Le but de cet exercice est de calculer, pour un état comprimé du rayonnement, les fonctions caractéristiques et distributions de quasi-probabilité adaptées à l'ordre normal et antinormal. La résolution de l'exercice nécessite l'étude préalable des exercices 5 et 7.

a) Soit un mode du champ du rayonnement et $|0\rangle$ l'état vide de ce mode. On peut construire un état comprimé en faisant agir l'opérateur e^{-B}

sur $|0\rangle$ où $B = r(a^2 - a^{+2})/2$, r étant un nombre réel et a et a^+ les opérateurs d'annihilation et de création du mode. L'opérateur densité pour le champ est alors

$$\rho = e^{-B} |0\rangle \langle 0| e^B. \quad (1)$$

Calculer, pour un tel champ, les fonctions caractéristiques $C_N(\lambda, \lambda^*)$ et $C_A(\lambda, \lambda^*)$ respectivement adaptées à l'ordre normal et antinormal et introduites dans l'exercice 5. On pourra utiliser la relation de Glauber

$$e^X e^Y = e^{(X+Y)} e^{[X,Y]/2} \quad (2)$$

valable si X et Y commutent avec $[X, Y]$.

b) Calculer la distribution de quasi-probabilité $P_A(\alpha, \alpha^*)$ associée à un tel état du rayonnement. On exprimera $P_A(\alpha, \alpha^*)$ en fonction des parties réelle α_r et imaginaire α_o de α .

Peut-on trouver une distribution de quasi-probabilité $P_N(\alpha, \alpha^*)$ décrivant un tel état du rayonnement ?

Solution

a) Partons de la définition de $C_N(\lambda, \lambda^*)$ donnée dans l'exercice 5 (formule (1)) et introduisons l'opérateur densité ρ de l'énoncé

$$C_N(\lambda, \lambda^*) = \text{Tr} (e^{-B} |0\rangle \langle 0| e^B e^{\lambda a^+} e^{-\lambda^* a}). \quad (3)$$

En utilisant la propriété cyclique de la trace et en introduisant $e^{-B} e^B = 1$ entre $e^{\lambda a^+}$ et $e^{-\lambda^* a}$, nous obtenons :

$$\begin{aligned} C_N(\lambda, \lambda^*) &= \text{Tr} (|0\rangle \langle 0| e^B e^{\lambda a^+} e^{-B} e^B e^{-\lambda^* a} e^{-B}) \\ &= \langle 0| e^B e^{\lambda a^+} e^{-B} e^B e^{-\lambda^* a} e^{-B} |0\rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Les relations (9) et (10) de l'exercice 7 donnent alors

$$e^B e^{\lambda a^+} e^{-B} = e^{\lambda(a^+ \text{chr} + a \text{shr})} \quad (5.a)$$

$$e^B e^{-\lambda^* a} e^{-B} = e^{-\lambda^*(a \text{chr} + a^+ \text{shr})} \quad (5.b)$$

ce qui permet d'obtenir pour (4)

$$C_N(\lambda, \lambda^*) = \langle 0| e^{\lambda(a^+ \text{chr} + a \text{shr})} e^{-\lambda^*(a \text{chr} + a^+ \text{shr})} |0\rangle. \quad (6)$$

Notons e^X et e^Y les opérateurs du second membre de (5.a) et (5.b). Le commutateur $[X, Y]$ est un nombre égal à

$$[X, Y] = -|\lambda|^2 (\text{ch}^2 r [a^+, a] + \text{sh}^2 r [a, a^+]) = |\lambda|^2 \quad (7)$$

ce qui permet d'utiliser la relation de Glauber et de transformer (6) en :

$$C_N(\lambda, \lambda^*) = e^{|\lambda|^2/2} \langle 0| \exp[a^+(\lambda \text{ch } r - \lambda^* \text{sh } r) + a(\lambda \text{sh } r - \lambda^* \text{ch } r)] |0\rangle. \quad (8)$$

Utilisons à nouveau la relation de Glauber pour séparer les exponentielles relatives à a^+ des exponentielles relatives à a .

$$\begin{aligned} \exp[a^+(\lambda \text{ch } r - \lambda^* \text{sh } r) + a(\lambda \text{sh } r - \lambda^* \text{ch } r)] &= \exp[a^+(\lambda \text{ch } r - \lambda^* \text{sh } r) \times \\ &\times \exp[a(\lambda \text{sh } r - \lambda^* \text{ch } r)] \exp[-|\lambda|^2 (\text{ch}^2 r + \text{sh}^2 r)/2] \times \\ &\times \exp[(\lambda^2 + \lambda^{*2}) (\text{ch } r \text{sh } r)/2]. \end{aligned} \quad (9)$$

En portant cette expression dans (8), nous trouvons alors :

$$C_N(\lambda, \lambda^*) = \exp[-|\lambda|^2 \operatorname{sh}^2 r] \exp[(\lambda^2 + \lambda^{*2}) (\operatorname{ch} r \operatorname{sh} r)/2] \quad (10)$$

puisque

$$e^{a(\lambda \operatorname{sh} r - \lambda^* \operatorname{ch} r)} |0\rangle = |0\rangle \quad (11.a)$$

$$\langle 0 | e^{a^* (\lambda \operatorname{ch} r - \lambda^* \operatorname{sh} r)} = \langle 0 |. \quad (11.b)$$

La relation (13) de l'exercice 5 permet de trouver $C_A(\lambda, \lambda^*)$

$$\begin{aligned} C_A(\lambda, \lambda^*) &= C_N(\lambda, \lambda^*) \exp[-|\lambda|^2] \\ &= \exp[-|\lambda|^2 \operatorname{ch}^2 r] \exp[(\lambda^2 + \lambda^{*2}) (\operatorname{ch} r \operatorname{sh} r)/2]. \end{aligned} \quad (12)$$

b) Nous avons montré dans l'exercice 5 que P_A et C_A sont reliés par une transformation de Fourier

$$P_A(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{\pi^2} \int d^2 \lambda C_A(\lambda, \lambda^*) e^{i\alpha \alpha^* - \lambda \alpha^*}. \quad (13.a)$$

Les notations (5.a) et (5.b) de l'exercice 5, permettent de réécrire (13.a) sous la forme :

$$P_A(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{4\pi^2} \int du dv C_A(\lambda, \lambda^*) e^{i\alpha u} e^{i\alpha^* v} \quad (13.b)$$

$C_A(\lambda, \lambda^*)$ étant déduit de (12)

$$\begin{aligned} C_A(\lambda, \lambda^*) &= \exp\left[-\frac{u^2 + v^2}{4} \operatorname{ch}^2 r\right] \exp\left[-\frac{u^2 - v^2}{4} \operatorname{ch} r \operatorname{sh} r\right] \\ &= \exp\left[-\frac{u^2}{4} \operatorname{ch} r (\operatorname{ch} r + \operatorname{sh} r)\right] \exp\left[-\frac{v^2}{4} \operatorname{ch} r (\operatorname{ch} r - \operatorname{sh} r)\right] \\ &= \exp\left[-\frac{u^2}{8} (1 + e^{2r})\right] \exp\left[-\frac{v^2}{8} (1 + e^{-2r})\right]. \end{aligned} \quad (14)$$

Il faut donc calculer la transformée de Fourier de deux fonctions gaussiennes de largeur différentes. Nous obtenons

$$P_A(\alpha, \alpha^*) = \frac{2}{\pi[(1 + e^{2r})(1 + e^{-2r})]^{1/2}} \exp[-2\alpha_P^2/(1 + e^{2r})] \exp[-2\alpha_Q^2/(1 + e^{-2r})] \quad (15)$$

c'est-à-dire un produit de deux gaussiennes de largeur très différente en α_P et α_Q (ce qui reflète le comportement différent des deux quadratures du champ, voir exercice 7).

Les mêmes calculs menés dans le cas de $C_N(\lambda, \lambda^*)$ conduisent à

$$C_N(\lambda, \lambda^*) = \exp\left[\frac{u^2}{8} (1 - e^{2r})\right] \exp\left[\frac{v^2}{8} (1 - e^{-2r})\right]. \quad (16)$$

Il apparaît clairement que pour $r \neq 0$, une des composantes de $C_N(\lambda, \lambda^*)$ diverge à l'infini. Le calcul de la transformée de Fourier de $C_N(\lambda, \lambda^*)$ n'est alors pas possible dans le cadre habituel. Cet état du champ n'a pas de représentation P au sens des fonctions.

Pour comprendre ce point, on peut noter que l'état $|0\rangle$ est représenté par une densité de quasi-probabilité $P_N(\alpha, \alpha^*)$ qui est une distribution de Dirac $\delta^{(2)}(\alpha)$. Un état pour lequel $\Delta\alpha_P = \Delta\alpha_Q = 1/2$ est donc représenté par une distribution ponctuelle. Dans l'état comprimé du rayonnement considéré, on réduit l'indétermination sur l'une des quadratures du champ. Le long de cette direction, la distribution de quasi-probabilité doit être plus étroite que pour l'état $|0\rangle$. Ceci n'est évidemment pas possible à partir d'une distribution ponctuelle. En revanche, dans le cas de la distribution correspondant à l'ordre antinormal, l'état $|0\rangle$ est représenté par une distribution gaussienne dont il est possible de réduire la largeur.

Autres formulations équivalentes de l'électrodynamique

Dans les chapitres précédents, et notamment dans le chapitre II, nous avons suivi la démarche la plus simple possible pour construire l'électrodynamique quantique. Partant du lagrangien standard, nous avons éliminé le potentiel scalaire en le réexprimant en fonction des autres variables dynamiques, puis nous avons choisi la jauge de Coulomb, ce qui revient à prendre le potentiel vecteur longitudinal $A_{\parallel}$ nul. Le formalisme ainsi obtenu peut être utilisé dans n'importe quelle situation, pourvu que les vitesses des particules et les fréquences des champs soient dans le domaine non relativiste.

Il est clair cependant qu'une telle description n'est pas la seule possible. On peut en construire d'autres, équivalentes quant à leurs prévisions physiques, mais différentes formellement. Le but recherché est en général d'obtenir une nouvelle formulation dans laquelle tel ou tel type de problème puisse se traiter plus commodément que dans le formalisme standard. Le but de ce chapitre est de présenter et d'étudier des exemples de telles démarches (*).

Nous commençons, dans la partie A, par passer en revue diverses méthodes qui peuvent être suivies pour construire d'autres descriptions de l'électrodynamique. Une première possibilité est d'utiliser l'arbitraire de jauge, et de choisir $A_{\parallel}$ différent de zéro. On peut également ajouter au lagrangien standard en jauge de Coulomb la dérivée par rapport au temps d'une fonction des coordonnées généralisées du système. Le nouveau lagrangien est équivalent à l'ancien et donne les mêmes équations du mouvement. Cependant, les nouveaux moments conjugués qui en résultent sont en général différents des anciens, et lorsqu'on applique la procédure de quantification canonique, les mêmes opérateurs mathé-

(*) Nous n'aborderons pas ici la formulation de l'électrodynamique en jauge de Lorentz, qui fera l'objet du chapitre V.

matiques représentent dans le nouveau point de vue des grandeurs physiques généralement différentes. La relation entre les deux points de vue sera étudiée en détail et nous montrerons que les deux représentations quantiques se déduisent l'une de l'autre par une *transformation unitaire*. Le changement de jauge évoqué précédemment n'est en fait qu'un cas particulier de ce type de transformation. On peut enfin obtenir une nouvelle description de l'électrodynamique en effectuant sur la représentation standard en jauge de Coulomb une transformation unitaire plus générale que celle qui correspond au passage à un lagrangien équivalent. Il s'agit là d'une méthode plus puissante que les précédentes, de la même façon qu'en mécanique classique, les transformations canoniques sont plus générales que les changements de lagrangien.

Nous présentons ensuite, dans la partie B, quelques exemples simples de telles transformations s'appliquant au cas d'un système localisé de charges (comme un atome ou une molécule) interagissant avec une onde électromagnétique extérieure de grande longueur d'onde : un changement de jauge d'abord, puis la transformation de Göppert-Mayer qui permet de passer du point de vue standard, où l'hamiltonien d'interaction entre le système de charges et le champ est en « $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ » au point de vue où l'hamiltonien d'interaction est en « $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$ » (« hamiltonien dipolaire électrique »). L'équivalence entre les deux points de vue sera discutée à nouveau, étant donné l'importance pratique de cette transformation. Un exemple de transformation sur l'hamiltonien, ne se ramenant pas à un changement de lagrangien, est fourni par la transformation de Henneberger, qui est utilisée pour étudier certains processus d'interaction avec des ondes électromagnétiques intenses.

Dans la partie C, nous revenons au cas général où le champ électromagnétique est considéré, non comme un champ extérieur de dépendance temporelle donnée, mais comme un système dynamique couplé aux particules. Nous présentons la transformation de Power-Zienau-Woolley qui généralise celle de Göppert-Mayer et donne pour hamiltonien d'interaction du système de charges avec le champ électromagnétique le développement multipolaire complet sous une forme compacte. Le système de charges est décrit par une densité de polarisation et de magnétisation et l'induction électrique s'introduit naturellement comme moment conjugué du potentiel vecteur transverse.

Nous étudions enfin dans la partie D comment l'équivalence entre deux points de vue se déduisant l'un de l'autre par une transformation unitaire se traduit sur les matrices S de diffusion. Nous montrons que l'égalité des amplitudes de transition prend, dans ce cas, une forme plus simple dans la mesure où les mêmes kets peuvent être utilisés pour décrire l'état initial et l'état final dans les deux points de vue. Cette propriété de la matrice S justifie la pratique courante consistant à attribuer (à tort !) la même signification physique à l'hamiltonien « non perturbé » quel que soit le point de vue utilisé.

A — COMMENT OBTENIR D'AUTRES FORMULATIONS ÉQUIVALENTES DE L'ÉLECTRODYNAMIQUE

Nous passons en revue dans cette partie A différentes méthodes qui peuvent être utilisées pour obtenir des formulations de l'électrodynamique équivalentes à celle construite dans les chapitres II et III. L'accent sera mis ici sur les correspondances entre les différentes descriptions ainsi obtenues et sur l'équivalence des théories quantiques qui leur sont associées.

1. Changement de jauge et changement de lagrangien

Rappelons brièvement la démarche suivie au chapitre II. Comme le lagrangien standard ne dépend pas de la vitesse $\mathcal{U}$ relative au potentiel scalaire $\mathcal{U}$, l'équation de Lagrange relative à $\mathcal{U}$ fournit une relation (relation (C.1) du chapitre II)

$$\mathcal{U} = \frac{1}{k^2} \left[ik \dot{\mathcal{A}}_{\parallel} + \frac{\rho}{\epsilon_0} \right] \quad (\text{A.1})$$

qui permet de réexprimer $\mathcal{U}$ en fonction des autres variables dynamiques. Une fois que $\mathcal{U}$ a été ainsi éliminé, le lagrangien standard ne dépend plus que de $\mathbf{r}_\alpha, \dot{\mathbf{r}}_\alpha, \mathcal{A}_\perp, \dot{\mathcal{A}}_\perp, \mathcal{A}_\parallel, \dot{\mathcal{A}}_\parallel$ et se met sous la forme (équation (C.5) du chapitre II) :

$$\begin{aligned} L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - \int d^3k \frac{\rho^* \rho}{\epsilon_0 k^2} + \epsilon_0 \int d^3k [\dot{\mathcal{A}}_{\perp}^* \cdot \dot{\mathcal{A}}_{\perp} - c^2 k^2 \mathcal{A}_{\perp}^* \cdot \mathcal{A}_{\perp}] + \\ + \int d^3k [j^* \cdot \mathcal{A}_{\perp} + j \cdot \mathcal{A}_{\perp}^*] + \\ + \int d^3k \left[j_{\parallel}^* \mathcal{A}_{\parallel} + j_{\parallel} \mathcal{A}_{\parallel}^* - \frac{i}{k} (\rho^* \dot{\mathcal{A}}_{\parallel} - \rho \dot{\mathcal{A}}_{\parallel}^*) \right]. \quad (\text{A.2}) \end{aligned}$$

Nous avons alors constaté que $\mathcal{A}_{\parallel}$ n'est pas une vraie variable dynamique, dans la mesure où l'équation de Lagrange qui lui est associée n'est pas une équation du mouvement pour $\mathcal{A}_{\parallel}$ (*), qui peut donc prendre n'importe quelle valeur. Le choix de la jauge de Coulomb ($\mathcal{A}_{\parallel} = 0$) apparaît alors comme le plus simple possible, mais il n'est nullement obligatoire. Il est tout à fait possible à ce stade de garder $\mathcal{A}_{\parallel} \neq 0$ (en modifiant le potentiel scalaire conformément à (A.1)), et de continuer la procédure de quantification canonique. On peut par exemple prendre pour $\mathcal{A}_{\parallel}$ une fonction arbitraire de $\mathbf{k}$ et t , qui peut également dépendre

(*) En fait, cette équation de Lagrange se réduit à l'équation de conservation de la charge qui n'apporte rien de nouveau dans la mesure où elle découle directement de la définition de ρ et $\mathbf{j}$ en fonction des variables dynamiques $\mathbf{r}_\alpha$ et $\dot{\mathbf{r}}_\alpha$ des particules.

éventuellement des autres (vraies) variables dynamiques du système, $\mathbf{r}_\alpha$ et $\mathcal{A}_\perp$ (*). Les conséquences de ce choix peuvent être entrevues dès maintenant : $\dot{\mathbf{r}}_\alpha$ figurant dans le dernier terme de (A.2), par l'intermédiaire de $j_\parallel$ et éventuellement de $\mathcal{A}_\parallel$, le moment conjugué de $\mathbf{r}_\alpha$ sera modifié. Si $\mathcal{A}_\parallel$ dépend de $\mathcal{A}_\perp$, il en sera de même du moment conjugué de $\mathcal{A}_\perp(\mathbf{k})$.

Une autre manière de comprendre pourquoi $\mathcal{A}_\parallel$ n'est pas une vraie variable dynamique consiste à noter, comme nous l'avons fait dans le paragraphe C.1.b du chapitre II, que le dernier terme de (A.2) (où apparaissent $\mathcal{A}_\parallel$ et $\mathcal{A}_\parallel$) peut s'exprimer également comme la dérivée totale par rapport au temps de la fonction :

$$F = \int d^3k \left[\frac{\rho^*}{ik} \mathcal{A}_\parallel - \frac{\rho}{ik} \mathcal{A}_\parallel^* \right]. \quad (\text{A.3})$$

Ainsi, le passage de la jauge de Coulomb à une autre jauge est une illustration de la règle générale qui permet de passer d'un lagrangien à un lagrangien équivalent en ajoutant la dérivée par rapport au temps d'une fonction des coordonnées généralisées. Nous allons étudier maintenant comment de telles transformations se traduisent dans le formalisme quantique et montrer qu'elles reviennent à faire une transformation unitaire sur la représentation quantique initiale.

2. Changement de lagrangien et transformation unitaire associée

Le problème posé n'est pas spécifique du système constitué par le champ électromagnétique et les particules chargées. Nous allons donc l'étudier sur le cas beaucoup plus simple d'un système à un seul degré de liberté, repéré par la coordonnée x , et nous généraliserons ensuite les résultats obtenus. L'intérêt de commencer par un cas simple est que nous pourrions utiliser des notations évitant toute ambiguïté. Ensuite, pour simplifier l'écriture dans le cas du champ électromagnétique, nous reviendrons à des notations plus compactes.

Soit donc $L(x, \dot{x})$ un lagrangien décrivant la dynamique de ce système. Comme nous envisagerons d'autres lagrangiens, nous prenons la précaution de noter p_L le moment conjugué de x par rapport au lagrangien L :

$$p_L = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}. \quad (\text{A.4})$$

C'est une grandeur qui s'exprime en fonction de x et $\dot{x}$. L'équation du mouvement est l'équation de Lagrange :

$$\dot{p}_L \equiv \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = \frac{\partial L}{\partial x}. \quad (\text{A.5})$$

(*) Par contre, $\mathcal{A}_\parallel$ ne peut pas dépendre des vitesses $\dot{\mathbf{r}}_\alpha$ et $\dot{\mathbf{r}}_1$, car il apparaîtrait alors des accélérations dans le lagrangien (A.2).

a) CHANGEMENT DE LAGRANGIEN

En ajoutant à L la dérivée par rapport au temps d'une fonction $F(x, t)$, on obtient un nouveau lagrangien L' :

$$\begin{aligned} L'(x, \dot{x}) &= L(x, \dot{x}) + \frac{d}{dt} F(x, t) \\ &= L(x, \dot{x}) + \dot{x} \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial t} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

équivalent à L , dans la mesure où il donne pour x la même équation du mouvement (A.5) (voir § A.1.c du chapitre II). Le moment conjugué de x par rapport au nouveau lagrangien L' est :

$$p_{L'} = \frac{\partial L'}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \frac{\partial F}{\partial x}. \quad (\text{A.7})$$

L'expression de $p_{L'}$ en fonction de x et $\dot{x}$ est différente de celle de p_L . Passer d'un lagrangien L à un lagrangien équivalent L' a donc pour conséquence de changer le moment conjugué de x . En tant que fonctions de x et $\dot{x}$, l'ancien et le nouveau moments conjugués sont liés par la relation

$$p_{L'} = p_L + \frac{\partial F}{\partial x}. \quad (\text{A.8})$$

Un même état dynamique du système, caractérisé par la donnée des valeurs de x et $\dot{x}$, sera donc décrit par des valeurs différentes des moments conjugués p_L et $p_{L'}$, liées par la relation (A.8). On peut vérifier, que si cette relation est vérifiée à un instant, les équations de la dynamique assurent qu'elle le reste ultérieurement.

Les grandeurs physiques du système sont des fonctions de x et $\dot{x}$. Leurs valeurs ne dépendent que de l'état dynamique du système, caractérisé par x et $\dot{x}$. Considérons une telle grandeur (par exemple l'énergie cinétique) décrite par la fonction $\mathcal{G}(x, \dot{x})$. Dans le formalisme hamiltonien, on utilise, comme variables dynamiques, x et son moment conjugué p_L . La valeur de la grandeur physique $\mathcal{G}$ sera une fonction $G_L(x, p_L)$. L'indice L rappelle que cette fonction dépend du lagrangien qui a été utilisé pour définir p_L . La valeur de G_L lorsqu'on remplace p_L par son expression (A.4) doit coïncider avec $\mathcal{G}(x, \dot{x})$:

$$G_L\left(x, \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) = \mathcal{G}(x, \dot{x}) \quad (\text{A.9})$$

ce qui détermine entièrement G_L . Pour le nouveau lagrangien L' , $G_{L'}$ est différent de G_L et la relation (A.9) s'écrit :

$$G_{L'}\left(x, \frac{\partial L'}{\partial \dot{x}}\right) = \mathcal{G}(x, \dot{x}). \quad (\text{A.10})$$

Les relations (A. 8), (A. 9) et (A. 10) permettent d'ailleurs d'exprimer simplement le lien entre $G_{L'}$ et G_L :

$$G_{L'}\left(x, p_L + \frac{\partial F}{\partial x}\right) = G_L(x, p_L). \quad (\text{A. 11})$$

Cette relation assure que, pour un même état dynamique, les valeurs de $G_{L'}(x, p_{L'})$ et de $G_L(x, p_L)$ sont identiques, p_L et $p_{L'}$ étant liés par (A. 8). Les prévisions physiques concernant la grandeur $\mathcal{G}$ sont identiques dans les deux points de vue.

Considérons maintenant l'hamiltonien. Sa forme, en tant que fonction de x et de $p_{L'}$, dépend du lagrangien choisi. De plus, sa valeur pour un état dynamique donné, n'est *pas forcément identique* dans les deux points de vue, puisque :

$$\begin{aligned} H_{L'}(x, p_{L'}) &= \dot{x}p_{L'} - L' = \dot{x}\left(p_L + \frac{\partial F}{\partial x}\right) - \left(L + \dot{x}\frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial t}\right) \\ &= H_L(x, p_L) - \frac{\partial F}{\partial t} \end{aligned} \quad (\text{A. 12})$$

où $p_{L'}$ et p_L sont liés par (A. 8). Il apparaît ainsi que l'hamiltonien ne se comporte comme une grandeur physique que si F est indépendant du temps (comparer (A. 12) et (A. 11)).

b) LES DEUX DESCRIPTIONS QUANTIQUES

Lorsqu'on applique la procédure de quantification canonique standard à partir des lagrangiens L d'une part et L' d'autre part, on obtient deux descriptions quantiques du système. Pour éviter toute ambiguïté, nous notons avec l'indice supérieur ⁽¹⁾ tous les éléments de la première représentation, et avec l'indice ⁽²⁾ ceux de la seconde. Ainsi, $X^{(1)}$ est l'opérateur représentant la grandeur physique « position » dans la première représentation ; $|\psi^{(2)}\rangle$ est le vecteur d'état repérant l'état dynamique du système dans la deuxième représentation. Enfin, nous introduisons les deux opérateurs *mathématiques* fondamentaux, l'opérateur « multiplication par x » que nous notons X , et l'opérateur $(\hbar/i) \partial/\partial x$ que nous notons P :

$$X = x \quad (\text{A. 13})$$

$$P = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}. \quad (\text{A. 14})$$

Si l'on applique la procédure de quantification canonique standard à partir du lagrangien L , on obtient une première description quantique. La coordonnée x est représentée par l'opérateur « multiplication par x », et son moment conjugué p_L par l'opérateur $(\hbar/i) \partial/\partial x$. On a donc :

$$X^{(1)} = X \quad (\text{A. 15})$$

$$P_L^{(1)} = P. \quad (\text{A. 16})$$

La grandeur physique $\mathcal{G}$ est représentée par l'observable :

$$G^{(1)} = G_L(X, P) \quad (\text{A. 17})$$

où G_L est la fonction définie par la relation (A. 9). L'hamiltonien est :

$$H_L^{(1)} = H_L(X, P). \quad (\text{A. 18})$$

Nous avons gardé l'indice L pour $H_L^{(1)}$ et pour $P_L^{(1)}$ pour rappeler que le moment conjugué de x et l'hamiltonien dépendent dans le cas général du lagrangien à partir duquel ils ont été définis. L'état du système à un instant donné est repéré par le vecteur d'état $|\psi^{(1)}\rangle$.

En appliquant la même procédure de quantification à partir de L' , on obtient une deuxième description du système, dans laquelle la coordonnée est toujours représentée par l'opérateur X et le nouveau moment conjugué $P_{L'}$ par l'opérateur P :

$$X^{(2)} = X \quad (\text{A. 19})$$

$$P_{L'}^{(2)} = P. \quad (\text{A. 20})$$

La grandeur physique $\mathcal{G}$ est représentée par

$$G^{(2)} = G_{L'}(X, P) \quad (\text{A. 21})$$

où la fonction $G_{L'}$ est définie par (A. 10). Le nouvel hamiltonien $H_{L'}$ est représenté par :

$$H_{L'}^{(2)} = H_{L'}(X, P). \quad (\text{A. 22})$$

En général, les fonctions G_L et $G_{L'}$ sont différentes de sorte que *la même grandeur physique $\mathcal{G}$ est représentée par des opérateurs mathématiques différents dans les deux représentations* :

$$G^{(1)} \neq G^{(2)}. \quad (\text{A. 23})$$

Partant des lagrangiens L ou L' , on aboutit ainsi à des descriptions des observables du système qui sont différentes. De la même façon, les vecteurs d'états qui décrivent l'état du système ne sont pas les mêmes :

$$|\psi^{(1)}\rangle \neq |\psi^{(2)}\rangle. \quad (\text{A. 24})$$

Rappelons qu'il en est de même classiquement : un même état dynamique du système est repéré par des valeurs différentes de p_L et de $p_{L'}$.

c) CORRESPONDANCE ENTRE LES DEUX DESCRIPTIONS QUANTIQUES

Etudions maintenant la correspondance entre les deux descriptions quantiques. De façon évidente, la coordonnée est représentée par le même opérateur (cf. (A. 15) et (A. 19)). Pour les moments conjugués, il faut se souvenir que nous en avons introduit deux, p_L et $p_{L'}$, et qu'ils repré-

sentent des grandeurs physiques différentes, ainsi qu'on peut le voir sur leur expression en fonction de x et $\dot{x}$. Nous aurons donc à considérer les quatre opérateurs $P_L^{(1)}$, $P_L^{(2)}$, $P_L^{(1)}$, $P_L^{(2)}$. Le premier et le dernier sont déjà connus (relations (A.16) et (A.20)). Les deux autres peuvent se déduire de la relation (A.8) entre p_L et p_L . Si on la traduit dans la représentation (1), on obtient par exemple :

$$P_L^{(1)} = P_L^{(1)} + \frac{\partial F}{\partial X} = P + \frac{\partial F}{\partial X} \quad (\text{A.25.a})$$

en utilisant (A.16). De la même façon, en exprimant la relation (A.8) dans la représentation (2), et en utilisant (A.20), on obtient l'expression de $P_L^{(2)}$:

$$P_L^{(2)} = P_L^{(2)} - \frac{\partial F}{\partial X} = P - \frac{\partial F}{\partial X}. \quad (\text{A.25.b})$$

Récapitulons les expressions des opérateurs représentant les différentes grandeurs dans les deux représentations :

représentation (1)	représentation (2)
$\left\{ \begin{array}{ll} X^{(1)} = X & (\text{a}) \\ P_L^{(1)} = P & (\text{b}) \\ P_L^{(1)} = P + \frac{\partial F}{\partial X} & (\text{c}) \end{array} \right. \quad (\text{A.26})$	$\left\{ \begin{array}{ll} X^{(2)} = X & (\text{a}) \\ P_L^{(2)} = P - \frac{\partial F}{\partial X} & (\text{b}) \\ P_L^{(2)} = P & (\text{c}) \end{array} \right. \quad (\text{A.27})$

La comparaison des deux représentations suggère que le passage de l'une à l'autre se fait par la transformation unitaire

$$T = \exp \frac{i}{\hbar} F(X) \quad (\text{A.28})$$

qui revient à traduire P de $-\partial F/\partial X$. Il est possible en effet de passer des expressions (A.26) de $X^{(1)}$, $P_L^{(1)}$, $P_L^{(1)}$ aux expressions (A.27) de $X^{(2)}$, $P_L^{(2)}$, $P_L^{(2)}$ par les relations

$$\begin{aligned} X^{(2)} &= T X^{(1)} T^+ & (\text{a}) \\ P_L^{(2)} &= T P_L^{(1)} T^+ & (\text{b}) \\ P_L^{(2)} &= T P_L^{(1)} T^+ & (\text{c}) \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

où T est l'opérateur unitaire (A.28).

Plus généralement, vérifions que la transformation T met bien en correspondance les deux représentations $G^{(1)}$ et $G^{(2)}$ d'une même grandeur physique $\mathcal{G}$ quelconque :

$$G^{(2)} = T G^{(1)} T^+ \quad (\text{A.30})$$

$G^{(1)}$ et $G^{(2)}$ étant définis par les relations (A.17) et (A.21). La relation (A.11) qui existe entre les deux fonctions G_L et G_L peut être écrite en

remplaçant les variables classiques x et p_L par les opérateurs X et P . On obtient ainsi la relation :

$$G_L\left(X, P + \frac{\partial F}{\partial X}\right) = G_L(X, P). \quad (\text{A. 31})$$

Transformons les deux membres de cette équation par T , et faisons agir dans le premier membre la transformation sur les opérateurs à l'intérieur de la fonction. X est inchangé et $P + \frac{\partial F}{\partial X}$ est transformé en P de sorte que :

$$G_L(X, P) = T G_L(X, P) T^+. \quad (\text{A. 32})$$

Compte tenu de (A. 17) et (A. 21), ceci n'est autre que (A. 30). La représentation (2) des observables du système s'obtient donc simplement en effectuant sur la représentation (1) la transformation T .

Les vecteurs d'état se correspondent par la même transformation :

$$|\psi^{(2)}\rangle = T |\psi^{(1)}\rangle. \quad (\text{A. 33})$$

En effet, si l'on imagine que l'état du système résulte de la mesure d'une grandeur physique $\mathcal{G}$ (ou d'un ensemble de telles grandeurs) $|\psi^{(1)}\rangle$ et $|\psi^{(2)}\rangle$ sont respectivement les vecteurs propres de $G^{(1)}$ et de $G^{(2)}$ correspondant à la même valeur propre, ce qui implique, d'après (A. 30), la relation (A. 33). Les relations (A. 30) et (A. 33) suffisent ainsi à assurer l'identité des valeurs moyennes et des mesures dans les deux points de vue.

Les évolutions temporelles de $|\psi^{(1)}\rangle$ et $|\psi^{(2)}\rangle$ sont respectivement gouvernées par $H_L^{(1)}$ et $H_L^{(2)}$; la relation entre ces deux opérateurs n'est pas du type (A. 30). En partant de la relation (A. 12) entre les fonctions classiques et en faisant la même démarche que pour G , on trouve en effet que :

$$H_L^{(2)} = T H_L^{(1)} T^+ - \frac{\partial F}{\partial t}. \quad (\text{A. 34})$$

Cette relation est précisément celle qui assure que la relation (A. 33) entre $|\psi^{(1)}\rangle$ et $|\psi^{(2)}\rangle$ subsiste au cours du temps. En effet, si l'on compare les vitesses de variations de $|\psi^{(2)}\rangle$ d'une part, et de $T |\psi^{(1)}\rangle$ d'autre part, on trouve :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi^{(2)}\rangle = H_L^{(2)} |\psi^{(2)}\rangle \quad (\text{A. 35})$$

et

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} T |\psi^{(1)}\rangle &= T H_L^{(1)} |\psi^{(1)}\rangle + \left(i\hbar \frac{dT}{dt}\right) |\psi^{(1)}\rangle \\ &= \left(T H_L^{(1)} T^+ - \frac{\partial F}{\partial t}\right) T |\psi^{(1)}\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A. 36})$$

Les deux vitesses sont égales, compte tenu de (A.33) et (A.34). Ainsi, la correspondance (A.33) entre les deux points de vue est préservée au cours du temps.

d) APPLICATION AU CHAMP ÉLECTROMAGNÉTIQUE

Les considérations précédentes se généralisent aisément pour un système plus complexe, et en particulier au cas du champ électromagnétique interagissant avec un ensemble de particules.

Ainsi, tout changement de jauge ($A_{||} \neq 0$), ou tout passage du lagrangien de Coulomb à un lagrangien équivalent, se traduit par *un changement de représentation quantique*. A chacune de ces transformations, est associée une transformation unitaire T de la forme :

$$T = \exp \frac{i}{\hbar} F(\dots, \mathbf{r}_\alpha, \dots; \dots, \mathcal{A}_\perp(\mathbf{k}), \dots; t) \quad (\text{A.37})$$

où F est une fonction des coordonnées généralisées du système $\mathbf{r}_\alpha$ et $\mathcal{A}_\perp(\mathbf{k})$, et éventuellement du temps. Pour simplifier l'écriture, nous n'utilisons plus, comme dans le paragraphe précédent, des notations différentes pour les coordonnées généralisées (position $\mathbf{r}_\alpha$, potentiel vecteur transverse $\mathcal{A}_\perp(\mathbf{k})$...) et les opérateurs correspondants.

Toutes les équations établies dans le paragraphe précédent et reliant les descriptions du système dans un point de vue et dans l'autre (équations (A.30), (A.33), (A.34), reliant $G^{(2)}$ à $G^{(1)}$, $|\psi^{(2)}\rangle$ à $|\psi^{(1)}\rangle$, $H_L^{(2)}$ à $H_L^{(1)}$) demeurent valables à condition de remplacer (A.28) par (A.37). Nous étudierons en détail des exemples concrets de transformation (A.37) dans les parties B et C qui suivent. Auparavant, nous allons introduire des transformations unitaires plus générales que (A.37) puis montrer l'équivalence entre les amplitudes de transition calculées dans deux points de vue qui se déduisent l'un de l'autre par une transformation unitaire.

3. Transformation unitaire générale. L'équivalence entre les différentes formulations de l'électrodynamique quantique

La transformation unitaire T , définie par (A.37), ne dépend que des coordonnées généralisées. On peut envisager des transformations plus générales, dépendant également des moments conjugués du type (*) :

$$T(t) = \exp \frac{i}{\hbar} F(\dots, \mathbf{r}_\alpha, \mathbf{p}_\alpha, \dots; \dots, \mathcal{A}_\perp(\mathbf{k}), \boldsymbol{\pi}(\mathbf{k}), \dots; t). \quad (\text{A.38})$$

La présence des moments conjugués dans (A.38) entraîne qu'une telle transformation n'est pas associée à un changement de lagrangien. Elle

(*) Pour les calculs qui suivent, il est commode d'utiliser la notation $T(t)$ exprimant que T dépend explicitement de t si c'est le cas aussi pour F .

est appliquée directement aux états et observables du système, suivant les relations

$$|\psi^{(2)}(t)\rangle = T(t) |\psi^{(1)}(t)\rangle \quad (\text{A. 39})$$

$$G^{(2)}(t) = T(t) G^{(1)}(t) T^+(t) \quad (\text{A. 40})$$

qui sont analogues à (A.33) et (A.30). Notons en passant que la présence de $\mathbf{p}_\alpha$ dans (A.38) entraîne que la transformation $T(t)$ ne laisse pas en général les coordonnées invariantes : dans le nouveau point de vue, l'opérateur « multiplication par $\mathbf{r}_\alpha$ » ne représente plus la position de la particule α , mais une autre grandeur physique.

Soit $H^{(1)}(t)$ l'hamiltonien décrivant l'évolution temporelle dans le point de vue (1) (*). Pour obtenir l'équation de Schrödinger satisfaite par le vecteur $|\psi^{(2)}(t)\rangle$ relié à chaque instant t à $|\psi^{(1)}(t)\rangle$ par (A.39), il suffit de dériver les deux membres de (A.39) par rapport à t et d'utiliser l'équation de Schrödinger pour $|\psi^{(1)}(t)\rangle$. Il vient :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi^{(2)}(t)\rangle &= \left[i\hbar \frac{dT(t)}{dt} + T(t) H^{(1)}(t) \right] |\psi^{(1)}(t)\rangle \\ &= \left[i\hbar \frac{dT(t)}{dt} T^+(t) + T(t) H^{(1)}(t) T^+(t) \right] |\psi^{(2)}(t)\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A. 41})$$

L'hamiltonien $H^{(2)}$ dans le point de vue (2) s'écrit donc

$$H^{(2)}(t) = T(t) H^{(1)}(t) T^+(t) + i\hbar \frac{dT(t)}{dt} T^+(t). \quad (\text{A. 42})$$

La présence simultanée des coordonnées généralisées et des moments conjugués dans l'opérateur F de (A.38) entraîne que $\partial F/\partial t$ ne commute pas en général avec F . C'est ce qui explique pourquoi le dernier terme de (A.42) ne peut pas être écrit $-\partial F/\partial t$ comme dans (A.34).

Établissons maintenant une relation importante entre les opérateurs d'évolution $U^{(1)}(t, t_0)$ et $U^{(2)}(t, t_0)$ des deux points de vue. Comme la relation (A.39) est valable quel que soit t , nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} |\psi^{(2)}(t)\rangle &= T(t) |\psi^{(1)}(t)\rangle = T(t) U^{(1)}(t, t_0) |\psi^{(1)}(t_0)\rangle \\ &= T(t) U^{(1)}(t, t_0) T^+(t_0) |\psi^{(2)}(t_0)\rangle \\ &= U^{(2)}(t, t_0) |\psi^{(2)}(t_0)\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A. 43})$$

On en déduit que

$$U^{(2)}(t, t_0) = T(t) U^{(1)}(t, t_0) T^+(t_0). \quad (\text{A. 44})$$

Une telle relation, jointe à (A.39), assure l'identité des prévisions physiques dans les deux points de vue. Pour le montrer, considérons l'ampli-

(*) Comme les deux points de vue (1) et (2) ne sont plus maintenant associés à 2 lagrangiens L et L' , il n'est plus justifié d'utiliser la notation $H_L^{(1)}$ et $H_{L'}^{(2)}$.

tude de probabilité pour que, partant à l'instant t_0 d'un état initial, décrit respectivement par

$$|\varphi^{(1)}(t_0)\rangle \quad (\text{A.45.a})$$

$$|\varphi^{(2)}(t_0)\rangle = T(t_0) |\varphi^{(1)}(t_0)\rangle \quad (\text{A.45.b})$$

dans chacune des deux représentations, on se trouve à l'instant t dans un état final

$$|\chi^{(1)}(t)\rangle \quad (\text{A.46.a})$$

$$|\chi^{(2)}(t)\rangle = T(t) |\chi^{(1)}(t)\rangle. \quad (\text{A.46.b})$$

Les relations (A.44), (A.45) et (A.46) entraînent l'égalité des amplitudes de transition calculées dans les deux représentations

$$\langle \chi^{(2)}(t) | U^{(2)}(t, t_0) | \varphi^{(2)}(t_0) \rangle = \langle \chi^{(1)}(t) | U^{(1)}(t, t_0) | \varphi^{(1)}(t_0) \rangle \quad (\text{A.47})$$

et donc l'égalité de toutes les prévisions physiques. L'identité (A.47) établie pour la transformation unitaire générale (A.38) est bien sûr valable aussi pour (A.37).

Ainsi, l'équivalence de toutes les descriptions différentes de l'électrodynamique quantique que l'on peut construire en utilisant les procédés décrits dans cette section A est assurée de façon fondamentale par l'existence d'une transformation unitaire reliant ces diverses descriptions.

Les considérations précédentes sur l'équivalence entre les diverses descriptions peuvent paraître à première vue bien élémentaires et mêmes superflues. En fait il n'en est rien. Leur traduction dans un cas concret est loin d'être toujours facile, et donne lieu quelquefois à des interprétations incorrectes ou à des erreurs subtiles. Il convient, dans chaque cas, de bien préciser quels opérateurs représentent les différentes grandeurs physiques dans l'une et l'autre des représentations, et de s'assurer que les vecteurs d'état utilisés pour représenter le système dans les 2 points de vue décrivent bien le même état physique (par exemple, sont états propres de la même grandeur physique avec la même valeur propre) (*).

Remarques

(i) La correspondance entre la description de l'électrodynamique en jauge de Coulomb et celle que l'on obtient par la quantification covariante décrite au chapitre V n'est pas aussi simple que celle associée aux transformations unitaires précédentes. En effet, dans la description covariante, le champ électromagnétique est décrit avec un plus grand nombre de degrés de liberté, et l'espace des états n'a pas la même structure. Nous reviendrons sur ce problème dans le complément B_v.

(ii) Une erreur subtile peut par exemple s'introduire lorsqu'on fait interagir soudainement à l'instant $t = 0$ le système avec un champ décrit par un

(*) Voir par exemple la discussion présentée dans Y. Aharonov et C. K. Au, *Phys. Lett.*, **86A**, 269 (1981).

potentiel. Faire passer brusquement un potentiel vecteur de 0 à une valeur finie s'accompagne en fait d'une impulsion de champ électrique. Cette impulsion serait absente si l'on décrivait le champ électrique par un potentiel scalaire. Ainsi, on peut avoir l'impression que des calculs menés dans deux jaugees différentes donnent des résultats non identiques, alors qu'en réalité on a fait interagir le système avec des champs électriques *différents* dans les deux cas. (Un exemple concret est discuté dans l'exercice 1.)

B — QUELQUES EXEMPLES SIMPLES POUR DES CHARGES COUPLÉES A UN CHAMP EXTÉRIEUR

Avant d'envisager des transformations concernant l'ensemble du champ et des particules considéré comme un système dynamique, nous allons tout d'abord étudier des situations plus simples relatives à un système de particules chargées localisées autour de l'origine des coordonnées (constituant par exemple un atome ou une molécule) et interagissant avec une onde électromagnétique extérieure. Nous commençons (§ 1) par rappeler l'expression du lagrangien et de l'hamiltonien d'un tel système. Nous illustrons ensuite les considérations générales de la partie A au moyen de trois exemples : un changement de jauge simple qui nous permet de préciser ce que l'on entend par invariance de jauge (§ 2), la transformation de Göppert-Mayer qui fait apparaître explicitement l'interaction dipolaire électrique à la limite des grandes longueurs d'onde (§ 3), la transformation de Henneberger qui est une transformation unitaire dépendant des moments conjugués (§ 4).

1. Lagrangien et hamiltonien du système

Le lagrangien et l'hamiltonien d'un système de charges en présence d'un champ extérieur ont été introduits dans le complément C_{II}. Supposons que les particules soient suffisamment proches les unes des autres pour que l'interaction de Coulomb soit une très bonne approximation de leurs interactions réelles. Dans le lagrangien et l'hamiltonien du problème, il est alors possible de négliger les termes relatifs au champ transverse libre et à l'interaction entre les particules et ce champ transverse. Par contre, nous gardons les termes de couplage avec le champ extérieur décrit par les potentiels :

$$\mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t), \quad U_e(\mathbf{r}, t). \quad (\text{B.1})$$

Le lagrangien L et l'hamiltonien H , qui sont alors des fonctions des seules variables dynamiques des particules, s'écrivent :

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - V_{\text{Coul}} + \sum_{\alpha} [q_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t) - q_{\alpha} U_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t)] \quad (\text{B.2})$$

$$H_L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha L} - q_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t)]^2 + V_{\text{Coul}} + \sum_{\alpha} q_{\alpha} U_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t). \quad (\text{B.3})$$

Le moment conjugué $\mathbf{p}_{\alpha L}$ de $\mathbf{r}_{\alpha}$ a pour expression :

$$\mathbf{p}_{\alpha L} = m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} + q_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t). \quad (\text{B.4})$$

En théorie quantique, les opérateurs fondamentaux vérifiant les relations de commutation canoniques sont $\mathbf{r}_{\alpha}$ et $\mathbf{p}_{\alpha} = -i\hbar \nabla_{\alpha}$. Dans la repré-

sensation quantique standard construite à partir de L , que nous noterons (1) et qui nous servira de référence, l'opérateur représentant la position de la particule α est :

$$\mathbf{r}_\alpha^{(1)} = \mathbf{r}_\alpha \quad (\text{B.5})$$

et celui qui représente son moment conjugué $\mathbf{p}_{\alpha L}$ est :

$$\mathbf{p}_{\alpha L}^{(1)} = \mathbf{p}_\alpha = \frac{\hbar}{i} \nabla_\alpha. \quad (\text{B.6})$$

L'opérateur hamiltonien s'obtient en remplaçant dans (B.3) $\mathbf{r}_\alpha$ et $\mathbf{p}_{\alpha L}$ par les opérateurs correspondants (B.5) et (B.6). En séparant « l'hamiltonien des particules » et « l'hamiltonien d'interaction », on obtient :

$$H_L^{(1)} = H_{PL}^{(1)} + h_{IL}^{(1)} \quad (\text{B.7})$$

$$H_{PL}^{(1)} = \sum_\alpha \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} + V_{\text{Coul}}(\dots, \mathbf{r}_\alpha, \dots) \quad (\text{B.8})$$

$$h_{IL}^{(1)} = \sum_\alpha \left[-\frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_\alpha, t) + \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha} A_e^2(\mathbf{r}_\alpha, t) + q_\alpha U_e(\mathbf{r}_\alpha, t) \right]. \quad (\text{B.9})$$

Nous allons considérer maintenant d'autres descriptions du même système construites en utilisant les méthodes discutées dans la partie A.

2. Changement de jauge simple, invariance de jauge

Considérons tout d'abord la transformation de jauge définie par la fonction $\chi(\mathbf{r}, t)$, qui ne dépend que de $\mathbf{r}$ et t . Le champ extérieur est maintenant décrit par :

$$\mathbf{A}'_e(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t) + \nabla \chi(\mathbf{r}, t) \quad (\text{B.10a})$$

$$U'_e(\mathbf{r}, t) = U_e(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{r}, t). \quad (\text{B.10b})$$

a) LE NOUVEAU POINT DE VUE

Le nouveau lagrangien s'écrit :

$$\begin{aligned} L' &= \sum_\alpha \frac{1}{2} m_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha^2 - V_{\text{Coul}} + \sum_\alpha [q_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha \cdot \mathbf{A}'_e(\mathbf{r}_\alpha, t) - q_\alpha U'_e(\mathbf{r}_\alpha, t)] \\ &= L + \frac{d}{dt} \left[\sum_\alpha q_\alpha \chi(\mathbf{r}_\alpha, t) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Les nouveaux moments conjugués définis par :

$$\mathbf{p}_{\alpha L'} = m_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha + q_\alpha \mathbf{A}'_e(\mathbf{r}_\alpha, t) = \mathbf{p}_{\alpha L} + q_\alpha \nabla \chi(\mathbf{r}_\alpha, t) \quad (\text{B.12})$$

sont différents des anciens. L'hamiltonien $H_{L'}$ a une expression semblable

à H_L , mais dans laquelle $\mathbf{p}_{\alpha L}$, A_e , U_e sont remplacés respectivement par $\mathbf{p}_{\alpha L'}$, A'_e , U'_e .

Dans la nouvelle représentation quantique, la position de la particule est toujours représentée par $\mathbf{r}_\alpha$, et $\mathbf{p}_{\alpha L'}$ par $\mathbf{p}_\alpha = -i\hbar \nabla_\alpha$:

$$\mathbf{r}_\alpha^{(2)} = \mathbf{r}_\alpha \quad (\text{B.13.a})$$

$$\mathbf{p}_{\alpha L'}^{(2)} = \mathbf{p}_\alpha. \quad (\text{B.13.b})$$

Le nouvel opérateur hamiltonien est donc :

$$H_L^{(2)} = H_{PL'}^{(2)} + h_{IL}^{(2)} \quad (\text{B.14.a})$$

$$H_{PL'}^{(2)} = \sum_\alpha \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} + V_{\text{Coul}}(\dots, \mathbf{r}_\alpha, \dots) \quad (\text{B.14.b})$$

$$h_{IL}^{(2)} = \sum_\alpha \left[-\frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}'_e(\mathbf{r}_\alpha, t) + \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha} A_e'^2(\mathbf{r}_\alpha, t) + q_\alpha U'_e(\mathbf{r}_\alpha, t) \right]. \quad (\text{B.14.c})$$

b) TRANSFORMATION UNITAIRE RELIANT LES DEUX POINTS DE VUE. INVARIANCE DE JAUGE (*)

D'après (B.11), le nouveau lagrangien L' diffère de l'ancien par une dérivée totale. La démarche du paragraphe A.2 ci-dessus montre alors que l'on passe de la représentation (1) à la représentation (2) par la transformation unitaire

$$T = \exp \frac{i}{\hbar} \sum_\alpha q_\alpha \chi(\mathbf{r}_\alpha, t). \quad (\text{B.15})$$

Ainsi, si $\psi^{(1)}(\dots, \mathbf{r}_\alpha, \dots)$ est la fonction d'onde représentant l'état des particules dans le premier point de vue, le même état est représenté dans le nouveau point de vue par :

$$\psi^{(2)}(\dots, \mathbf{r}_\alpha, \dots) = \psi^{(1)}(\dots, \mathbf{r}_\alpha, \dots) \exp \frac{i}{\hbar} \sum_\alpha q_\alpha \chi(\mathbf{r}_\alpha, t). \quad (\text{B.16})$$

Les opérateurs représentant une même grandeur physique dans les deux points de vue se correspondent également par T . Considérons par exemple la vitesse de la particule α . D'après (B.4) et (B.6) :

$$m_\alpha \mathbf{v}_\alpha^{(1)} = \mathbf{p}_{\alpha L}^{(1)} - q_\alpha \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_\alpha, t) = \mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_\alpha, t). \quad (\text{B.17})$$

De même

$$m_\alpha \mathbf{v}_\alpha^{(2)} = \mathbf{p}_{\alpha L'}^{(2)} - q_\alpha \mathbf{A}'_e(\mathbf{r}_\alpha, t) = \mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_\alpha, t) - q_\alpha \nabla \chi(\mathbf{r}_\alpha, t) \quad (\text{B.18})$$

et on vérifie alors que :

$$\mathbf{v}_\alpha^{(2)} = T \mathbf{v}_\alpha^{(1)} T^+. \quad (\text{B.19})$$

(*) Cohen-Tannoudji, Diu et Laloë (complément H_{III}).

Par contre, il n'en est pas de même pour les hamiltoniens :

$$H_L^{(2)} = T H_L^{(1)} T^+ - \sum_{\alpha} q_{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{r}_{\alpha}, t). \quad (\text{B.20})$$

De la même façon, $H_{PL}^{(1)}$ et $H_{PL}^{(2)}$, ou $h_{IL}^{(1)}$ et $h_{IL}^{(2)}$, ne se correspondent pas par T . Ainsi l'opérateur mathématique :

$$\sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha}^2}{2 m_{\alpha}} + V_{\text{Coul}}(\dots, \mathbf{r}_{\alpha}, \dots) \quad (\text{B.21})$$

appelé hamiltonien des particules, $H_{PL}^{(1)}$ ou $H_{PL}^{(2)}$, selon (B.8) ou (B.14. b), ne représente pas la même grandeur physique dans l'un et l'autre point de vue. Un état propre de cet opérateur ne décrit donc pas le même état physique dans l'une et l'autre des deux représentations. De plus, l'hamiltonien des particules (B.21) ne coïncide généralement pas avec l'énergie propre des particules, définie comme la somme de leur énergie cinétique et de leur énergie potentielle mutuelle, puisque l'opérateur $\mathbf{p}_{\alpha}/m_{\alpha}$ ne décrit pas en général la vitesse de la particule (voir (B.17) et (B.18)).

Notons enfin que la démonstration générale du paragraphe A.3 ci-dessus concernant l'équivalence des prédictions physiques s'applique ici. Comme le changement de jauge est décrit en théorie quantique par une transformation unitaire, les amplitudes de transition calculées avec une jauge ($\mathbf{A}_e$, U_e) et l'autre ($\mathbf{A}'_e$, U'_e) sont identiques (voir équation (A.47)). Il faut bien sûr que les kets décrivant l'état initial et l'état final dans une jauge et l'autre se correspondent bien par la transformation unitaire (B.15) (voir équations (A.45) et (A.46)). Le fait que les amplitudes de transition, et par suite toutes les prévisions physiques, soient les mêmes quelle que soit la jauge reflète l'*invariance de jauge* de l'électrodynamique quantique.

3. La transformation de Göppert-Mayer (*)

a) L'APPROXIMATION DES GRANDES LONGUEURS D'ONDE

Supposons que les charges q_{α} , localisées au voisinage de l'origine, forment un système globalement neutre

$$\sum_{\alpha} q_{\alpha} = 0 \quad (\text{B.22})$$

dont l'extension spatiale a est petite devant la distance caractéristique des variations spatiales de $\mathbf{A}_e$ et U_e (par exemple, la longueur d'onde pour un rayonnement incident). On peut alors, dans l'expression (B.2) du lagrangien, développer les potentiels $\mathbf{A}_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t)$ et $U_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t)$ en puissances de $\mathbf{r}_{\alpha}$, ce qui fait apparaître les moments multipolaires d'ordre

(*) M. Göppert-Mayer, *Ann. Phys.*, (Leipzig) 9, 273 (1931).

croissant du système de charges par rapport à l'origine. L'approximation dipolaire électrique consiste à ne retenir dans ce développement que les termes d'ordre le plus bas, qui font intervenir le *moment dipolaire électrique* du système par rapport à l'origine :

$$\mathbf{d} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha}. \quad (\text{B.23})$$

Avec cette approximation, le lagrangien (B.2) s'écrit, compte tenu de (B.22)

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - V_{\text{Coul}} + \dot{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) - \mathbf{d} \cdot \nabla U_e(\mathbf{0}, t). \quad (\text{B.24})$$

On en déduit l'expression du moment conjugué $\mathbf{p}_{\alpha L}$ de $\mathbf{r}_{\alpha}$

$$\mathbf{p}_{\alpha L} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}} = m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} + q_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) \quad (\text{B.25})$$

et celle de l'hamiltonien H_L

$$\begin{aligned} H_L &= \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha L} \cdot \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} - L \\ &= \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha L} - q_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)]^2 + V_{\text{Coul}} + \mathbf{d} \cdot \nabla U_e(\mathbf{0}, t). \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

b) CHANGEMENT DE JAUGE FAISANT APPARAÎTRE L'INTERACTION DIPOLAIRE ÉLECTRIQUE

Choisissons une nouvelle jauge $\mathbf{A}'_e$, U'_e . Les nouvelles expressions de L' , $\mathbf{p}_{\alpha L'}$, $H_{L'}$, s'obtiennent en remplaçant dans (B.24), (B.25) et (B.26), $\mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)$ par $\mathbf{A}'_e(\mathbf{0}, t)$, et $\nabla U_e(\mathbf{0}, t)$ par $\nabla U'_e(\mathbf{0}, t)$. La transformation de Göppert-Mayer vise à obtenir $\mathbf{A}'_e(\mathbf{0}, t) = \mathbf{0}$, de façon à simplifier au maximum l'expression de $\mathbf{p}_{\alpha L'}$ et, par suite, celle du premier terme de $H_{L'}$. Elle utilise pour cela le changement de jauge défini par

$$\chi(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) \quad (\text{B.27})$$

où, ce qui revient au même, le changement de lagrangien obtenu en ajoutant à (B.24), la dérivée totale

$$\frac{d}{dt} \left[-\sum_{\alpha} q_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) \right] = \frac{d}{dt} [-\mathbf{d} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)]. \quad (\text{B.28})$$

Les nouveaux potentiels $\mathbf{A}'_e$ et U'_e valent en effet, compte tenu de (B.10) et (B.27)

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{A}'_e(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t) - \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) \end{array} \right. \quad (\text{B.29.a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} U'_e(\mathbf{r}, t) = U_e(\mathbf{r}, t) + \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{A}}_e(\mathbf{0}, t) \end{array} \right. \quad (\text{B.29.b})$$

ce qui donne

$$\begin{cases} \mathbf{A}'_e(\mathbf{0}, t) = \mathbf{0} & (\text{B.30.a}) \\ \nabla U'_e(\mathbf{0}, t) = \nabla U_e(\mathbf{0}, t) + \dot{\mathbf{A}}_e(\mathbf{0}, t) = -\mathbf{E}_e(\mathbf{0}, t) & (\text{B.30.b}) \end{cases}$$

où $\mathbf{E}_e(\mathbf{0}, t)$ est le champ électrique extérieur total en $\mathbf{0}$. Il suffit alors de reporter (B.30) dans les équations (B.24), (B.25), (B.26) écrites dans la nouvelle jauge pour obtenir

$$L' = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - V_{\text{Coul}} + \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_e(\mathbf{0}, t) \quad (\text{B.31})$$

$$\mathbf{p}_{\alpha L'} = m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \quad (\text{B.32})$$

$$H_{L'} = \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha L'}^2}{2 m_{\alpha}} + V_{\text{Coul}} - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_e(\mathbf{0}, t). \quad (\text{B.33})$$

Outre leur forme plus simple, les équations (B.31) et (B.33) ont l'avantage de faire apparaître explicitement l'interaction dipolaire électrique entre $\mathbf{d}$ et $\mathbf{E}_e$.

En théorie quantique, le passage du point de vue habituel (1) au point de vue de Göppert-Mayer (2) est réalisé, d'après (A.28) et (B.28), par la transformation unitaire

$$T(t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \mathbf{d} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) \right\} = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha} q_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) \right\}. \quad (\text{B.34})$$

Il est possible d'ailleurs d'étudier directement l'effet de la transformation unitaire (B.34) sur la représentation initiale. C'est ce qui est fait dans le complément A_{IV} pour introduire de manière élémentaire l'hamiltonien dipolaire électrique sans utiliser le formalisme lagrangien.

c) AVANTAGES DU NOUVEAU POINT DE VUE

Dans le nouveau point de vue, l'opérateur $\mathbf{p}_{\alpha} = -i\hbar \nabla_{\alpha}$ décrit la grandeur physique $\mathbf{p}_{\alpha L'}$, donnée en (B.32), c'est-à-dire la *quantité de mouvement* de la particule. Il s'ensuit que l'hamiltonien des particules $H_{PL'}^{(2)}$, donné en (B.14.b), représente, dans le nouveau point de vue, l'énergie du système de particules, c'est-à-dire la *somme de leur énergie cinétique et de leur énergie de Coulomb*. Par conséquent, les états propres $|\varphi_a\rangle$ de $H_{PL'}^{(2)}$, de valeur propre E_a , sont, dans le nouveau point de vue, des états physiques où l'énergie des particules a une valeur bien définie, E_a . Les amplitudes

$$\langle \varphi_b | U^{(2)}(t_f, t_0) | \varphi_a \rangle \quad (\text{B.35})$$

sont les amplitudes de transition entre un état initial d'énergie E_a à l'instant t_0 et un état final d'énergie E_b à l'instant t_f . Notons enfin que le calcul de $U^{(2)}(t, t_0)$ fait intervenir l'hamiltonien d'interaction du point

de vue (2)

$$h_{IL}^{(2)} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_e(\mathbf{0}, t) \quad (\text{B.36.a})$$

qui est beaucoup plus simple que celui du point de vue (1) qui, d'après (B.26), s'écrit

$$h_{IL}^{(1)} = -\sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}}{m_{\alpha}} \mathbf{p}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) + \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}^2}{2 m_{\alpha}} A_e^2(\mathbf{0}, t) + \mathbf{d} \cdot \nabla U_e(\mathbf{0}, t) \quad (\text{B.36.b})$$

$h_{IL}^{(2)}$ ne contient en effet qu'un terme. De plus, il est linéaire en champ et ne dépend que du champ $\mathbf{E}_e$ et non des potentiels.

Il apparaît ainsi clairement que les calculs sont plus simples et plus directs dans le nouveau point de vue. Ceci ne doit pas faire oublier cependant que, s'ils sont menés correctement, les calculs doivent conduire aux mêmes résultats dans le point de vue initial. Etant donnée l'importance pratique des hamiltoniens d'interaction « $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ » et « $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$ », nous allons discuter en détail leur équivalence.

d) EQUIVALENCE ENTRE LES HAMILTONIENS D'INTERACTION $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ ET $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$

α) Cas simple où les potentiels sont nuls aux instants initial et final

Supposons tout d'abord que les potentiels $A_e(\mathbf{0}, t)$ et $U_e(\mathbf{0}, t)$ soient nuls aux instants initial t_0 et final t_f . Il en est alors de même pour le champ $\mathbf{E}_e(\mathbf{0}, t)$. Une telle situation correspond par exemple au passage d'un paquet d'ondes incident sur l'atome, les instants t_0 et t_f étant respectivement antérieur et postérieur au passage du paquet d'ondes en $\mathbf{0}$.

Comme $A_e(\mathbf{0}, t)$ est nul pour $t = t_0$ et $t = t_f$, il découle de (B.34) que

$$T(t_0) = T(t_f) = 1. \quad (\text{B.37})$$

La nullité de $A_e(\mathbf{0}, t_0)$ et $A_e(\mathbf{0}, t_f)$ entraîne également que $\mathbf{p}_{\alpha L}$ coïncide à $t = t_0$ et $t = t_f$ avec la quantité de mouvement de la particule α (voir (B.25)), de sorte que les états propres $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$ de $H_{pL}^{(1)}$ (voir (B.8)) représentent bien à $t = t_0$ et $t = t_f$ des états d'énergie bien définie E_a et E_b dans le point de vue (1). Il s'ensuit que l'amplitude de transition entre un état initial d'énergie E_a à $t = t_0$ et un état final d'énergie E_b à $t = t_f$ s'écrit dans le point de vue (1) :

$$\langle \varphi_b | U^{(1)}(t_f, t_0) | \varphi_a \rangle. \quad (\text{B.38})$$

L'égalité entre les deux amplitudes (B.35) et (B.38) découle d'ailleurs directement de (A.44) et (B.37).

Il est possible également de vérifier directement l'égalité des amplitudes (B.35) et (B.38) en les calculant explicitement. C'est ce qui est fait dans le complément B_{IV} pour des processus à un ou deux photons induits par un paquet d'ondes quasi monochromatique dont la durée de passage T tend vers l'infini. Les amplitudes (B.35) et (B.38) (évaluées en représentation d'interaction par rapport à l'hamiltonien des particules)

sont alors les éléments de la *matrice S de diffusion*. Le problème de l'équivalence des matrices S de diffusion dans deux points de vue qui sont reliés par une transformation unitaire est repris de manière plus générale dans la partie D de ce chapitre (le champ de rayonnement n'est plus décrit comme un champ extérieur, mais comme un système dynamique quantique).

β) Cas général

Si $A_e(\mathbf{0}, t)$ n'est pas nul en t_0 et t_f , l'expression (B.38) de l'amplitude de transition n'est plus correcte, car les états $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$ ne représentent plus alors, dans le point de vue (1), des états d'énergie bien définie (d'après (B.25), $\mathbf{p}_{aL}$ diffère de la quantité de mouvement $m_a \dot{\mathbf{r}}_a$ dès que $A_e(\mathbf{0}, t)$ est non nul). Par contre, comme $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$ représentent toujours dans le point de vue (2) des états d'énergie E_a et E_b , que A_e soit nul ou non (voir (B.32) et (B.33)), il est toujours possible d'obtenir l'expression des états correspondants dans le point de vue (1) au moyen des transformations $T^+(t_0)$ et $T^+(t_f)$ qui font passer de (2) à (1). Les états initial et final s'écrivent donc dans le point de vue (1)

$$\begin{cases} |\psi^{(1)}(t_0)\rangle = T^+(t_0) |\varphi_a\rangle & \text{(B.39. a)} \\ |\psi^{(1)}(t_f)\rangle = T^+(t_f) |\varphi_b\rangle & \text{(B.39. b)} \end{cases}$$

et l'amplitude de transition vaut alors

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_b | T(t_f) U^{(1)}(t_f, t_0) T^+(t_0) | \varphi_a \rangle = \\ & = \left\langle \varphi_b \left| \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \mathbf{d} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t_f) \right\} U^{(1)}(t_f, t_0) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathbf{d} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t_0) \right\} \right| \varphi_a \right\rangle. \end{aligned} \quad \text{(B.40)}$$

Il ne faut pas commettre l'erreur consistant à oublier les deux exponentielles de (B.40).

L'égalité entre les amplitudes (B.35) et (B.40) découle de la propriété générale (A.47) qui a été établie plus haut. Il est possible également de vérifier directement une telle égalité en calculant explicitement ces amplitudes, par exemple à un ordre donné en q_a . Le lecteur intéressé pourra trouver un exemple de tel calcul dans le paragraphe γ) qui suit.

γ) Vérification directe de l'égalité des deux amplitudes de transition au premier ordre

Développons en puissance de q_a les deux exponentielles de (B.40) et utilisons le développement perturbatif bien connu de l'opérateur d'évolution U associé à $H_L^{(1)}$

$$U(t_f, t_0) = U_0(t_f, t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t_f} U_0(t_f, \tau) V(\tau) U_0(\tau, t_0) d\tau + \dots \quad \text{(B.41)}$$

où U_0 est l'opérateur d'évolution non perturbé associé à $H_{PL}^{(1)}$ et $V(t)$ la « perturbation » $h_{IL}^{(1)}$ donnée par (B.36.b). A l'ordre 1 en q_α , (B.40) s'écrit

$$\begin{aligned} \langle \psi^{(1)}(t_f) | U^{(1)}(t_f, t_0) | \psi^{(1)}(t_0) \rangle &\simeq \delta_{ba} e^{-i\omega_a(t_f - t_0)} + \\ &+ \frac{1}{i\hbar} \langle \varphi_b | \mathbf{d} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t_f) e^{-i\omega_a(t_f - t_0)} - e^{-i\omega_b(t_f - t_0)} \mathbf{d} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t_0) | \varphi_a \rangle + \\ &+ \frac{1}{i\hbar} e^{-i(\omega_b t_f - \omega_a t_0)} \int_{t_0}^{t_f} d\tau e^{-i\omega_{ab}\tau} \times \\ &\times \left\langle \varphi_b \left| \sum_{\alpha} \frac{-q_{\alpha}}{m_{\alpha}} \mathbf{p}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, \tau) + \mathbf{d} \cdot \nabla U_e(\mathbf{0}, \tau) \right| \varphi_a \right\rangle + \dots \quad (\text{B.42.a}) \end{aligned}$$

où $\omega_a = E_a/\hbar$, $\omega_b = E_b/\hbar$, $\omega_{ab} = \omega_a - \omega_b$. Un calcul analogue donne pour l'amplitude (B.35), $V(t)$ étant remplacé maintenant dans (B.41) par l'hamiltonien $h_{IL}^{(2)}$ écrit en (B.36.a)

$$\begin{aligned} \langle \varphi_b | U^{(2)}(t_f, t_0) | \varphi_a \rangle &\simeq \delta_{ba} e^{-i\omega_a(t_f - t_0)} + \\ &+ \frac{1}{i\hbar} e^{-i(\omega_b t_f - \omega_a t_0)} \int_{t_0}^{t_f} d\tau e^{-i\omega_{ab}\tau} \langle \varphi_b | -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_e(\mathbf{0}, \tau) | \varphi_a \rangle. \quad (\text{B.42.b}) \end{aligned}$$

Remplaçons dans (B.42.a) l'élément de matrice de $\mathbf{p}_{\alpha}$ par celui de $\mathbf{r}_{\alpha}$, grâce à la relation algébrique :

$$\left\langle \varphi_b \left| \frac{\mathbf{p}_{\alpha}}{m_{\alpha}} \right| \varphi_a \right\rangle = i\omega_{ba} \langle \varphi_b | \mathbf{r}_{\alpha} | \varphi_a \rangle \quad (\text{B.43})$$

obtenue en prenant les éléments de matrice entre $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$ de l'identité :

$$[\mathbf{r}_{\alpha}, H_{PL}^{(1)}] = i\hbar \frac{\partial H_{PL}^{(1)}}{\partial \mathbf{p}_{\alpha}} = i\hbar \frac{\mathbf{p}_{\alpha}}{m_{\alpha}}. \quad (\text{B.44})$$

Intégrons également par parties le terme en $\mathbf{p}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, \tau)$ de (B.42.a) pour faire apparaître $\mathbf{A}_e$. Le terme tout intégré compense alors la deuxième ligne de (B.42.a) et les termes restants coïncident exactement avec (B.42.b). Nous avons ainsi démontré l'identité des amplitudes (B.35) et (B.40) à l'ordre 1 en q_{α} . Des relations similaires entre éléments de matrice de transition existent à tous les ordres.

e) GÉNÉRALISATION

La transformation que nous avons présentée en a) peut être généralisée dans deux directions. Il est possible tout d'abord d'introduire une transformation analogue pour les modes de grande longueur d'onde du champ transverse, considéré comme un système dynamique : la fonction χ dépend

alors des variables du champ et la transformation modifie les moments conjugués du champ. Une telle approche est étudiée en détail dans le complément A_{IV}.

On peut également essayer de s'affranchir de l'approximation des grandes longueurs d'onde, et chercher un changement de jauge qui élimine A au profit des champs électrique et magnétique. Nous verrons dans la partie C de ce chapitre qu'il est possible de réaliser un tel objectif au moyen d'un changement de lagrangien. Nous verrons également dans le complément D_{IV} qu'un tel changement de lagrangien est, dans certains cas, équivalent à un changement de jauge, caractérisé par la fonction

$$\chi(\mathbf{r}) = - \int_0^1 \mathbf{r} \cdot \mathbf{A}_1(r\mathbf{u}) du \quad (\text{B. 45})$$

qui généralise (B. 27).

4. Une transformation ne se ramenant pas à un changement de lagrangien : la transformation de Henneberger (*)

a) MOTIVATION

L'un des intérêts de la transformation de Göppert-Mayer est de rétablir entre la vitesse d'une particule et le moment conjugué de sa coordonnée une relation plus simple que dans le point de vue standard, grâce à un changement de ce moment conjugué. On peut atteindre le même but en changeant de « coordonnée » pour les particules. Plus précisément, cherchons dans la théorie classique quelle est la grandeur $\mathbf{R}_\alpha$ dont la vitesse soit $\mathbf{p}_\alpha/m_\alpha$ (dans le point de vue standard). Nous supposons toujours les particules localisées près de l'origine et les conditions de validité de l'approximation des grandes longueurs d'onde remplies. L'équation (B. 4) donne alors

$$m_\alpha \dot{\mathbf{R}}_\alpha = m_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha + q_\alpha \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t). \quad (\text{B. 46})$$

Si l'on introduit le nouveau potentiel $\mathbf{Z}_e(\mathbf{r}, t)$ défini par :

$$\mathbf{Z}_e(\mathbf{r}, t) = - \int^t d\tau \mathbf{A}_e(\mathbf{r}, \tau) \quad (\text{B. 47})$$

l'expression de $\mathbf{R}_\alpha$ devient alors :

$$\mathbf{R}_\alpha = \mathbf{r}_\alpha - \xi_\alpha(t) \quad (\text{B. 48. a})$$

avec

$$\xi_\alpha(t) = \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{Z}_e(\mathbf{0}, t). \quad (\text{B. 48. b})$$

(*) W. C. Henneberger, *Phys. Rev. Lett.*, **21**, 838 (1968).

La signification physique de $\mathbf{R}_\alpha$ est simple : si la particule α n'était soumise qu'à l'action du champ électrique dérivant de $\mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)$, l'équation de son mouvement serait :

$$m_\alpha \ddot{\mathbf{r}}_\alpha = -q_\alpha \dot{\mathbf{A}}_e(\mathbf{0}, t) \quad (\text{B. 49})$$

et l'on aurait donc

$$m_\alpha \ddot{\mathbf{R}}_\alpha = 0. \quad (\text{B. 50})$$

La grandeur $\mathbf{R}_\alpha$ décrirait alors le mouvement d'une particule libre. Si $\mathbf{A}_e$ correspond à un champ oscillant, $\mathbf{R}_\alpha$ représente en quelque sorte la « position moyenne » autour de laquelle la particule exécute un mouvement d'oscillation forcée décrit par $\xi_\alpha(t)$. En présence d'autres forces, celles créées par U_e et l'interaction entre particules V_{Coul} , le mouvement de $\mathbf{R}_\alpha$ ne sera pas si simple. Mais, si l'action de $\mathbf{A}_e$ est dominante, le choix de $\mathbf{R}_\alpha$ comme variable dynamique s'impose, puisqu'il prend déjà en compte la dynamique de la particule dans $\mathbf{A}_e$.

b) DÉTERMINATION DE LA TRANSFORMATION UNITAIRE. TRANSFORMÉS DES DIVERS OPÉRATEURS

Dans le paragraphe précédent, nous avons montré l'intérêt qu'il y avait à considérer la grandeur physique $\mathbf{R}_\alpha$, « position moyenne » de la particule α . Nous recherchons maintenant une transformation unitaire T telle que, dans le nouveau point de vue (2), l'opérateur $\mathbf{R}_\alpha^{(2)}$ représentant cette position moyenne $\mathbf{R}_\alpha$ soit simplement l'opérateur « multiplication par $\mathbf{r}_\alpha$ »

$$\mathbf{R}_\alpha^{(2)} = \mathbf{r}_\alpha \quad (\text{B. 51})$$

alors que, dans le point de vue (1), ce même opérateur représente la position instantanée $\mathbf{r}_\alpha^{(1)}$

$$\mathbf{r}_\alpha^{(1)} = \mathbf{r}_\alpha. \quad (\text{B. 52})$$

En utilisant (B. 48), (B. 51) et (B. 52), nous obtenons pour T l'équation

$$\mathbf{r}_\alpha = T[\mathbf{r}_\alpha - \xi_\alpha(t)] T^+ = T\left[\mathbf{r}_\alpha - \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{Z}_e(\mathbf{0}, t)\right] T^+ \quad (\text{B. 53})$$

qui exprime que T est un opérateur de translation spatiale

$$T = \exp \sum_\alpha \frac{i}{\hbar} \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{Z}_e(\mathbf{0}, t). \quad (\text{B. 54})$$

La transformation laisse le moment $\mathbf{p}_\alpha$ inchangé :

$$\mathbf{p}_\alpha^{(2)} = \mathbf{p}_\alpha = \mathbf{p}_\alpha^{(1)}. \quad (\text{B. 55})$$

D'après (A.42), l'hamiltonien de la nouvelle représentation est :

$$H^{(2)} = TH^{(1)}T^+ + i\hbar \frac{\partial T}{\partial t} T^+. \quad (\text{B.56})$$

Partant des expressions (B.8) et (B.36.b) de $H_{PL}^{(1)}$ et $h_{IL}^{(1)}$, et utilisant le fait que T ne change pas $\mathbf{p}_\alpha$ et change $\mathbf{r}_\alpha$ en $\mathbf{r}_\alpha + (q_\alpha/m_\alpha) \mathbf{Z}_e(\mathbf{0}, t)$, on obtient :

$$TH_{PL}^{(1)}T^+ = \sum_\alpha \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} + V_{\text{Coul}}\left(\dots, \mathbf{r}_\alpha + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{Z}_e(\mathbf{0}, t), \dots\right) \quad (\text{B.57.a})$$

$$Th_{IL}^{(1)}T^+ = \sum_\alpha \left[-\frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) + \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha} A_e^2(\mathbf{0}, t) + q_\alpha \left(\mathbf{r}_\alpha + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{Z}_e(\mathbf{0}, t) \right) \cdot \nabla U_e(\mathbf{0}, t) \right]. \quad (\text{B.57.b})$$

De (B.54) et (B.47), il découle que :

$$i\hbar \frac{\partial T}{\partial t} T^+ = \sum_\alpha \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t). \quad (\text{B.58})$$

Au total, (B.56) devient :

$$H^{(2)} = \sum_\alpha \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} + \sum_\alpha \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha} A_e^2(\mathbf{0}, t) + V_{\text{Coul}}\left(\dots, \mathbf{r}_\alpha + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{Z}_e(\mathbf{0}, t), \dots\right) + \sum_\alpha \left[q_\alpha \mathbf{r}_\alpha \cdot \nabla U_e(\mathbf{0}, t) + \frac{q_\alpha^2}{m_\alpha} \mathbf{Z}_e(\mathbf{0}, t) \cdot \nabla U_e(\mathbf{0}, t) \right]. \quad (\text{B.59})$$

c) DISCUSSION PHYSIQUE

L'interprétation physique de $H^{(2)}$ est simple : le premier terme représente l'énergie cinétique associée au mouvement de la « position moyenne ». Pour le voir, il suffit de noter que l'équation de Heisenberg pour $\mathbf{r}_\alpha$ s'écrit

$$\dot{\mathbf{r}}_\alpha = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{r}_\alpha, H^{(2)}] = \frac{\partial H^{(2)}}{\partial \mathbf{p}_\alpha} = \frac{\mathbf{p}_\alpha}{m_\alpha} \quad (\text{B.60})$$

et de se souvenir que $\mathbf{r}_\alpha$ représente dans le point de vue (2) la position moyenne (voir (B.51)). Le deuxième terme, qui est un nombre, et qui a donc la même expression dans les deux points de vue, peut être écrit, d'après (B.47) et (B.48.b), $\sum_\alpha m_\alpha \xi_\alpha^2(t)/2$. Il représente donc l'énergie cinétique du mouvement d'oscillation forcée sous l'effet de $\mathbf{A}_e$. Le troisième terme représente l'énergie coulombienne du système de charges, dépendant de la position moyenne $\mathbf{r}_\alpha$ des particules et de leur écart

$q_\alpha Z_e(0, t)/m_\alpha$ par rapport à cette position moyenne. Les quatrième et cinquième termes représentent le couplage du potentiel extérieur avec respectivement la « position moyenne » et « le mouvement d'oscillation » (toujours dans l'approximation des grandes longueurs d'onde).

Notons enfin que dans le nouveau point de vue, le seul terme où apparaissent à la fois $\mathbf{r}_\alpha$ et les champs dérivant de $\mathbf{A}_e$ fait intervenir V_{Coul} (troisième terme de (B. 59)) : le mouvement de $\mathbf{r}_\alpha$ n'est couplé au champ que par l'intermédiaire de V_{Coul} . C'est d'ailleurs ce dernier point qui explique l'intérêt de la transformation de Henneberger. Considérons en effet un électron soumis à un rayonnement incident de fréquence ω . Si l'électron est libre, il ne peut absorber de manière réelle (avec conservation simultanée de l'énergie et de l'impulsion) un ou plusieurs photons incidents. Par contre, si l'électron est soumis simultanément au potentiel coulombien d'autres charges, de telles transitions réelles peuvent se produire, le potentiel fournissant l'impulsion nécessaire. Le point de vue de Henneberger, qui sépare clairement le mouvement de vibration de l'électron dans l'onde incidente (qui peut être aussi interprété en termes d'absorptions et de réémissions « virtuelles » de photons incidents), de son mouvement moyen (qui change sous l'effet de transitions réelles) se prête bien à l'analyse de tels processus. L'exercice 4 montre notamment comment le troisième terme de (B. 59) permet de calculer simplement (à tous les ordres vis-à-vis du champ transverse et à l'ordre 1 vis-à-vis de V_{Coul}) la section efficace de diffusion d'un électron par un potentiel coulombien en présence d'un rayonnement laser intense.

d) GÉNÉRALISATION À UN CHAMP QUANTIQUE : LA TRANSFORMATION DE PAULI-FIERZ-KRAMERS

Considérons à présent le champ électromagnétique comme un système quantique ayant sa dynamique propre et supposons que l'on s'intéresse à l'interaction du système de charges localisées autour de l'origine avec les seuls modes de grande longueur d'onde. Dans ces conditions, nous pouvons, dans l'hamiltonien en jauge de Coulomb (formule (A. 16) du chapitre III), remplacer $\mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha)$ par $\mathbf{A}(\mathbf{0})$ et obtenir ainsi :

$$H = \sum_\alpha \frac{1}{2m_\alpha} [\mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{0})]^2 + V_{\text{Coul}} + \sum_i \hbar \omega_i \left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right). \quad (\text{B. 61})$$

La généralisation au cas quantique de la transformation (B. 54) est (*)

$$T = \exp \left\{ \sum_\alpha \frac{i}{\hbar} \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{Z}(\mathbf{0}) \right\} \quad (\text{B. 62})$$

(*) Cette transformation a, en fait, été introduite par Pauli et Fierz bien avant celle de Henneberger et avec des motivations tout à fait différentes : W. Pauli, M. Fierz, *Nuovo Cimento*, 15, 167 (1938).

où $Z(\mathbf{r})$ est le champ quantique

$$Z(\mathbf{r}) = \int d^3k \sum_{\varepsilon} \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega (2\pi)^3}} \varepsilon \left[\frac{a_{\varepsilon}(\mathbf{k})}{i\omega} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \frac{a_{\varepsilon}^+(\mathbf{k})}{i\omega} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right]. \quad (\text{B. 63})$$

Ce champ est l'analogie quantique du potentiel extérieur introduit en (B. 47). En effet, pour des champs libres, dans le point de vue de Heisenberg, on trouve la relation suivante :

$$Z(\mathbf{r}, t) = - \int^t d\tau A(\mathbf{r}, \tau) \quad (\text{B. 64})$$

qui généralise (B. 47).

Les opérateurs relatifs aux particules se transforment selon des lois qui généralisent simplement (B. 53) et (B. 55). Cependant, c'est au niveau de la transformation des opérateurs relatifs au champ que la transformation de Pauli-Fierz se révèle particulièrement intéressante. Il est en effet possible de vérifier, qu'à l'approximation des grandes longueurs d'onde, la transformation de Pauli-Fierz permet de soustraire du champ transverse une partie du champ lié aux particules. Dans le formalisme du chapitre III, le champ transverse ne décrit pas seulement le rayonnement libre (en particulier les fluctuations du vide) et le rayonnement émis par les particules. Il contient aussi la partie du champ dépendant de la vitesse des particules (par exemple, le champ magnétique produit par leur mouvement). Ce champ est en quelque sorte lié aux particules, tant que leurs vitesses ne changent pas. C'est cette dernière contribution au champ transverse qui peut, en première approximation, être soustraite de la dynamique du champ transverse par la transformation (B. 62). On conçoit donc qu'une telle séparation constitue une première approche de l'idée de « renormalisation ». Même si une telle démarche, tentée par Kramers, ne peut pas être menée à son terme, elle permet cependant de comprendre, au moins qualitativement, certaines propriétés de corrections radiatives (*).

(*) Une étude détaillée de la transformation de Pauli-Fierz est présentée dans le complément B_{II} de « Photons et Atomes — Les processus d'interaction ».

C — LA TRANSFORMATION DE POWER-ZIENAU-WOOLLEY : FORME MULTIPOLAIRE DE L'INTERACTION ENTRE CHARGES ET CHAMP

Revenant à l'électrodynamique proprement dite, où le champ est considéré comme un système dynamique, nous allons maintenant construire une généralisation de la transformation de Göppert-Mayer, qui ne se contente pas de décrire le système de charges par son moment dipolaire, mais qui tient compte de la distribution exacte des charges (et des courants). Une telle transformation, qui a été introduite par Power et Zienau, et d'un point de vue différent par Woolley, conduit à une nouvelle description de l'électrodynamique, rigoureusement équivalente à la description standard.

Cette nouvelle description présente deux avantages : tout d'abord, le couplage entre le champ et les charges s'exprime en fonction des champs électrique et magnétique eux-mêmes, et non plus en fonction du potentiel vecteur. Ensuite, le système de charges est décrit par des densités de polarisation et de magnétisation, qui s'expriment directement en fonction des observables microscopiques (position et vitesse des particules). On dispose ainsi d'une base rigoureuse pour l'électrodynamique des milieux matériels ; en particulier, l'induction électrique $\mathbf{D}$ s'introduit naturellement comme moment conjugué du potentiel vecteur $\mathbf{A}$.

On peut également utiliser ce nouveau point de vue pour introduire les différents moments multipolaires électriques et magnétiques du système de charges et obtenir ainsi un développement multipolaire de l'interaction entre le système de charges et les champs électriques et magnétiques. En revanche, il est également clair que ces différents moments, et donc l'hamiltonien de couplage, sont d'autant plus grands (en ordre de grandeur) que le système est plus étendu. Il en résulte que, bien qu'en principe valable en toute circonstance, le point de vue exposé ci-après n'est utilisable en pratique que pour des systèmes localisés de charges, ou des ensembles de tels systèmes.

Nous commençons (§ 1) par décrire le système localisé de charges par une densité de polarisation et de magnétisation, ce qui nous permet d'introduire simplement la transformation de Power-Zienau-Woolley et l'expression correspondante du nouveau lagrangien (§ 2). Nous en déduisons alors l'expression des nouveaux moments conjugués et du nouvel hamiltonien auxquels cette transformation conduit (§ 3). Nous analysons enfin la nouvelle description de l'électrodynamique quantique qui en résulte (§ 4) et son équivalence avec la description en jauge de Coulomb (§ 5).

1. Description des sources par une densité de polarisation et de magnétisation (*)

Dans le paragraphe 3 de la section B précédente, le système de charges était assimilé à un dipôle ponctuel localisé à l'origine. Pour décrire complètement une répartition des charges d'extension finie a , il faut introduire une densité de polarisation $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ qui lui soit strictement équivalente.

a) DENSITÉ DE POLARISATION ASSOCIÉE À UN SYSTÈME DE CHARGES

Construisons tout d'abord le champ de polarisation associé à une seule charge q_a de position $\mathbf{r}_a$. La notion de polarisation suppose que l'on considère l'écart de la distribution de charge par rapport à une distribution de référence. Prenons pour origine O le point par rapport auquel est repéré l'écart de la charge q_a . La distribution de charge de référence est donc la charge q_a en O . La distribution de charge réelle (Fig. 1a) peut être obtenue en ajoutant à la distribution de référence une ligne de n dipôles électriques (non ponctuels) constitués chacun de deux charges, $-q_a$ et $+q_a$ distantes de $\mathbf{r}_a/n$, et disposés de façon que la charge $-q_a$ d'un dipôle soit superposée à la charge $+q_a$ du précédent (Fig. 1b). En faisant tendre n vers l'infini, on obtient une distribution continue de dipôles *ponctuels*, ou densité de polarisation, donnée par

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{p=0}^{n-1} q_a \frac{\mathbf{r}_a}{n} \delta\left(\mathbf{r} - \frac{p + \frac{1}{2}}{n} \mathbf{r}_a\right) = \int_0^1 du q_a \mathbf{r}_a \delta(\mathbf{r} - u \mathbf{r}_a). \quad (\text{C.1})$$



Figure 1. La distribution de charge réelle, q_a en $\mathbf{r}_a$, représentée en (a) est équivalente à la distribution de référence (q_a en O), plus n dipôles $q_a \mathbf{r}_a/n$, (b).

Par construction, la densité de charge correspondant à q_a en O , plus la densité de polarisation $\mathbf{P}$ est strictement identique à celle qui correspond à q_a en $\mathbf{r}_a$. La densité de polarisation est répartie uniformément sur le segment de droite entre O et $\mathbf{r}_a$. Il apparaît donc d'emblée que la description de la charge q_a en $\mathbf{r}_a$ à l'aide d'une densité de polarisation n'est vraiment intéressante que si la charge ne s'éloigne pas à une trop grande distance du point O , c'est-à-dire si la charge est liée.

(*) La définition microscopique de ces notions est discutée en détail par S. R. de Groot « The Maxwell Equations » North Holland, 1969.

Remarque

Au lieu de disposer les dipôles le long de la droite joignant O à $\mathbf{r}_\alpha$, on aurait pu les aligner tangentiellement à n'importe quelle courbe ayant les mêmes extrémités. On pourrait également ajouter un nombre arbitraire de courbes fermées du même type. Toutes ces distributions de polarisation correspondraient à la même densité de charge. Il y a donc un certain arbitraire dans la définition du champ de polarisation correspondant à une densité de charge donnée (outre la définition même de la distribution de référence par rapport à laquelle on mesure l'écart), de la même façon qu'un même champ électromagnétique peut être décrit par toute une classe de potentiels. Le choix consistant à aligner les dipôles sur le segment de droite est en quelque sorte le champ de polarisation minimum.

La même démarche permet de décrire un système de charges par sa charge totale $\sum_\alpha q_\alpha$ au point O , et la distribution de polarisation

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \sum_\alpha \int_0^1 du q_\alpha \mathbf{r}_\alpha \delta(\mathbf{r} - u\mathbf{r}_\alpha) \quad (\text{C.2})$$

répartie sur tous les segments $O\mathbf{r}_\alpha$ et donc localisée dans un domaine d'extension a . Nous utiliserons également la transformée de Fourier de $\mathbf{P}(\mathbf{r})$

$$\mathcal{P}(\mathbf{k}) = \sum_\alpha \int_0^1 du \frac{q_\alpha \mathbf{r}_\alpha}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha u}. \quad (\text{C.3})$$

Bien que cette intégrale puisse être évaluée facilement, il est plus commode pour la suite de la conserver sous la forme (C.3).

Remarque

Lorsque k est petit devant $1/a$, on peut faire $\exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha u) = 1$ dans (C.3). On retrouve alors l'expression approchée de la densité de polarisation utilisée dans le complément A_{IV} (formule (24. b) de ce complément).

b) L'INDUCTION ÉLECTRIQUE

La divergence de $\mathbf{P}$ est directement reliée à la densité de charge. De (C.3), il découle en effet que :

$$\begin{aligned} i\mathbf{k} \cdot \mathcal{P} &= \sum_\alpha \int_0^1 du \frac{q_\alpha}{(2\pi)^{3/2}} (i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha u} \\ &= \sum_\alpha \frac{-q_\alpha}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha u} \Big|_0^1 \\ &= - \sum_\alpha q_\alpha \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha}}{(2\pi)^{3/2}} + \sum_\alpha q_\alpha \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

ce qui donne, dans l'espace réel

$$\nabla \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}) = -\rho(\mathbf{r}) + \rho_0(\mathbf{r}) \quad (\text{C.5})$$

où $\rho_0(\mathbf{r})$ est la densité de charge de référence

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \left(\sum_{\alpha} q_{\alpha} \right) \delta(\mathbf{r}) \quad (\text{C.6})$$

et $\rho(\mathbf{r})$ la densité de charge réelle donnée par la formule (A.5.a) du chapitre I. En rapprochant (C.5) de l'équation

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{\rho(\mathbf{r})}{\varepsilon_0} \quad (\text{C.7})$$

on voit que l'on peut construire un champ, l'induction électrique,

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \mathbf{P}(\mathbf{r}) \quad (\text{C.8})$$

dont la divergence est

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}) = \rho_0(\mathbf{r}). \quad (\text{C.9.a})$$

Contrairement à $\mathbf{E}$, dont la divergence est reliée à la densité de charge réelle ρ qui dépend des variables dynamiques $\mathbf{r}_{\alpha}$, la divergence de $\mathbf{D}$ est reliée à la densité ρ_0 , qui a le double avantage d'être connue et statique. Si $\mathbf{E}_0$ est le champ électrique statique produit par ρ_0 , alors :

$$\mathbf{D}_{\parallel}(\mathbf{r}) = \varepsilon_0 \mathbf{E}_0(\mathbf{r}). \quad (\text{C.9.b})$$

Remarque

Si certaines charges du système ne sont pas liées et peuvent se déplacer très loin de l'origine, on ne peut pas les inclure dans la définition de $\mathbf{P}$. On les retrouve alors avec ρ_0 au deuxième membre de (C.9.a). C'est la densité de « charges libres » de l'électrodynamique des milieux matériels. Nous supposons ici que toutes les charges sont liées.

Pour un système globalement *neutre*, ρ_0 est identiquement nul et $\mathbf{D}$ est alors un champ transverse.

$$\begin{cases} \mathbf{D}_{\parallel} = 0 \\ \mathbf{D} = \mathbf{D}_{\perp} \end{cases} \quad (\text{C.10})$$

Il en résulte alors, d'après (C.8), que

$$\varepsilon_0 \mathbf{E}_{\parallel}(\mathbf{r}) = -\mathbf{P}_{\parallel}(\mathbf{r}). \quad (\text{C.11})$$

On peut tirer parti de cette relation pour exprimer l'énergie coulombienne du système de charges (qui est aussi l'énergie du champ longitudinal, voir (B.31.a), chapitre I), sous une forme qui nous sera utile par la suite

$$V_{\text{Coul}} = \frac{1}{2\varepsilon_0} \int d^3r \mathbf{P}_{\parallel}^2(\mathbf{r}). \quad (\text{C.12})$$

c) COURANT DE POLARISATION ET COURANT DE MAGNÉTISATION

Le mouvement des charges q_α , qui est à l'origine des courants décrits par $\mathbf{j}$ entraîne également un mouvement de la densité de polarisation $\mathbf{P}$. Il y a donc nécessairement une relation entre la densité de courant $\mathbf{j}$ et la vitesse de variation $\dot{\mathbf{P}}$ de $\mathbf{P}$.

Pour établir une telle relation, dérivons (C.5) par rapport au temps. Comme la densité de référence ρ_0 est indépendante du temps, il vient :

$$\dot{\rho} + \nabla \cdot \dot{\mathbf{P}} = 0. \quad (\text{C.13})$$

La comparaison de (C.13) et de l'équation de conservation de la charge, $\dot{\rho} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$, montre alors que $\mathbf{j} - \dot{\mathbf{P}}$ est un vecteur de divergence nulle. Nous pouvons donc écrire le courant $\mathbf{j}$ sous la forme d'une somme de deux termes :

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}_p(\mathbf{r}) + \mathbf{j}_m(\mathbf{r}) \quad (\text{C.14})$$

où le premier terme

$$\mathbf{j}_p(\mathbf{r}) = \dot{\mathbf{P}}(\mathbf{r}) \quad (\text{C.15})$$

qui est lié au mouvement de $\mathbf{P}$, est appelé *courant de polarisation*, et où l'autre terme, $\mathbf{j}_m$, de divergence nulle, est appelé *courant de magnétisation* pour des raisons qui apparaîtront plus loin.

Pour obtenir l'expression de $\mathbf{j}_m$, réécrivons (C.14) dans l'espace réciproque, en utilisant (C.3) et l'expression de la transformée de Fourier de $\mathbf{j}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_m(\mathbf{k}) &= \mathbf{j}(\mathbf{k}) - \dot{\mathbf{P}}(\mathbf{k}) = \\ &= \sum_{\alpha} q_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}}}{(2\pi)^{3/2}} - \sum_{\alpha} \int_0^1 du q_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha} u}}{(2\pi)^{3/2}} - \\ &\quad - \sum_{\alpha} \int_0^1 u du q_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} (-i\mathbf{k} \cdot \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}) \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha} u}}{(2\pi)^{3/2}}. \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

Une intégration par parties dans le deuxième terme donne comme terme tout intégré l'opposé du premier terme. L'intégrale restante se regroupe avec le troisième pour donner :

$$\mathbf{j}_m(\mathbf{k}) = i\mathbf{k} \times \sum_{\alpha} \int_0^1 u du q_{\alpha} (\mathbf{r}_{\alpha} \times \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}) \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha} u}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (\text{C.17})$$

soit encore, dans l'espace réel :

$$\mathbf{j}_m(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}) \quad (\text{C.18})$$

où

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \int_0^1 u du q_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \times \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \delta(\mathbf{r} - u\mathbf{r}_{\alpha}). \quad (\text{C.19})$$

Le courant $\mathbf{j}_m$ apparaît ainsi comme le rotationnel d'un champ vectoriel $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ qui peut être interprété comme une *densité de magnétisation*. Pour voir l'origine physique de cette densité, revenons à la définition de la polarisation $\mathbf{P}$. Elle est constituée par un ensemble des dipôles élémentaires. Le dipôle élémentaire $q_\alpha \mathbf{r}_\alpha du$, localisé en $u\mathbf{r}_\alpha$, est représenté par la petite flèche le long de $\mathbf{r}_\alpha$ sur la figure 2.

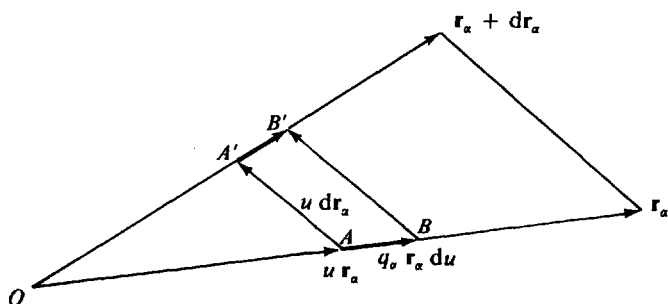


Figure 2. Lorsque la particule α se déplace de $\mathbf{r}_\alpha$ en $\mathbf{r}_\alpha + d\mathbf{r}_\alpha$, le dipôle élémentaire $q_\alpha \mathbf{r}_\alpha du$, localisé en $u\mathbf{r}_\alpha$ se déplace de AB en $A'B'$. Ce transport est équivalent à un courant q_α/dt parcourant le quadrilatère $ABB'A'$, auquel est associé un dipôle magnétique, et deux éléments de courant radiaux BA et $A'B'$, qui forment le courant de polarisation.

Quand la particule α se déplace de $\mathbf{r}_\alpha$ en $\mathbf{r}_\alpha + d\mathbf{r}_\alpha$ pendant le temps dt , les charges $-q_\alpha$ et $+q_\alpha$ du dipôle se déplacent respectivement de A en A' , et de B en B' . Les courants associés à ces déplacements sont de sens opposés et valent q_α/dt . On peut refermer l'un sur l'autre ces deux éléments de courant en introduisant des courants de même intensité le long de $\mathbf{r}_\alpha du$ et $(\mathbf{r}_\alpha + d\mathbf{r}_\alpha) du$. Au circuit ainsi formé, est associé un moment magnétique $(q_\alpha/dt) (\mathbf{r}_\alpha du) \times (u d\mathbf{r}_\alpha)$, localisé en $u\mathbf{r}_\alpha$. C'est le moment magnétique élémentaire de la densité de magnétisation (C. 19). Les éléments de courant radiaux en AB et $B'A'$ doivent être compensés par deux densités localisées en $u\mathbf{r}_\alpha$ et $u(\mathbf{r}_\alpha + d\mathbf{r}_\alpha)$, respectivement proportionnelles à $-q_\alpha \mathbf{r}_\alpha du/dt$ et $q_\alpha(\mathbf{r}_\alpha + d\mathbf{r}_\alpha) du/dt$. La densité de courant correspondante

$$\begin{aligned} d\mathbf{j}_p &= q_\alpha [(\mathbf{r}_\alpha + d\mathbf{r}_\alpha) du \delta(\mathbf{r} - u(\mathbf{r}_\alpha + d\mathbf{r}_\alpha)) - \mathbf{r}_\alpha du \delta(\mathbf{r} - u\mathbf{r}_\alpha)]/dt \\ &= q_\alpha du \frac{d}{dt} [\mathbf{r}_\alpha \delta(\mathbf{r} - u\mathbf{r}_\alpha)] \end{aligned}$$

est le courant de polarisation élémentaire $d\dot{\mathbf{P}}$.

Remarques

- (i) Nous avons supposé la distribution de charges de référence immobile. On peut généraliser les expressions précédentes lorsque ce n'est pas le cas.

A côté de la densité de courant de polarisation et de magnétisation, il apparaît alors d'autres densités de courant correspondant au transport de la charge totale et de la densité de polarisation (*).

(ii) Si les particules portent des moments magnétiques μ_α , il faut ajouter $\sum_\alpha \mu_\alpha \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha)$ à la densité de magnétisation (C.19).

(iii) Suivant Power et Woolley, nous avons défini les densités de polarisation et de magnétisation sous forme d'intégrales sur la variable muette u . Pour retrouver les expressions données par de Groot, il faut développer les fonctions $\delta(\mathbf{r} - u\mathbf{r}_\alpha)$ en puissance des composantes de $u\mathbf{r}_\alpha$, et effectuer les intégrales sur u . Le résultat est un développement infini en puissances de $\mathbf{r}_\alpha$, faisant intervenir toutes les dérivées de la fonction $\delta(\mathbf{r})$.

2. Changement de lagrangien

a) LA TRANSFORMATION DE POWER-ZIENAU-WOOLLEY

Cette transformation consiste à ajouter au lagrangien standard L en jauge de Coulomb, donné par l'expression (C.15) du chapitre II, la dérivée par rapport au temps d'une fonction F des coordonnées $\dots \mathbf{r}_\alpha \dots, \mathbf{A}(\mathbf{r}) \dots$, qui généralise (B.28), dans la mesure où le système de charges n'est plus assimilé à un dipôle électrique.

La fonction F , introduite par Power, Zienau et Woolley a pour expression :

$$F = - \int d^3r \mathbf{P}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (\text{C.20})$$

$$F = - \int d^3k \mathcal{P}^*(\mathbf{k}) \cdot \mathcal{A}(\mathbf{k}). \quad (\text{C.21})$$

C'est, au signe près, le produit scalaire de $\mathbf{P}$ et $\mathbf{A}$. Le potentiel vecteur $\mathbf{A}$ étant transverse, seule la partie transverse $\mathbf{P}_\perp$ de $\mathbf{P}$ contribue en fait à l'intégrale.

Remarque

Dans le cas où les écarts de toutes les charges sont repérés par rapport au même point (ici l'origine), on peut montrer (voir complément D_{IV}) que la transformation précédente est équivalente à un changement de jauge.

b) LE NOUVEAU LAGRANGIEN

Dans l'expression du nouveau lagrangien

$$L' = L + \frac{dF}{dt}, \quad (\text{C.22})$$

(*) E. A. Power, T. Thirunamachandran, *Proc. Roy. Soc. Lond.*, A, 372, 265 (1980).

il est intéressant de regrouper dF/dt avec le lagrangien d'interaction L_I des particules avec le champ transverse. Le nouveau lagrangien d'interaction L'_I s'écrit :

$$\begin{aligned} L'_I &= L_I + \frac{dF}{dt} \\ &= \int d^3r \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} - \int d^3r (\dot{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{P} \cdot \dot{\mathbf{A}}). \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

On voit apparaître le produit scalaire de $\mathbf{A}$ avec $\mathbf{j} - \dot{\mathbf{P}}$ qui, d'après (C.14), (C.15) et (C.18), n'est autre que $\nabla \times \mathbf{M}$:

$$L'_I = \int d^3r (\nabla \times \mathbf{M}) \cdot \mathbf{A} - \int d^3r \mathbf{P} \cdot \dot{\mathbf{A}}. \quad (\text{C.24})$$

Une intégration par parties du premier terme permet de reporter l'action du rotationnel sur $\mathbf{A}$ et d'obtenir le champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r})$. Comme $\dot{\mathbf{A}}$ n'est autre que $-\mathbf{E}_\perp$, il vient finalement :

$$L'_I = \int d^3r \mathbf{M} \cdot \mathbf{B} + \int d^3r \mathbf{P} \cdot \mathbf{E}_\perp \quad (\text{C.25})$$

qui fait apparaître l'interaction de la densité de magnétisation avec le champ magnétique et celle de la densité de polarisation avec le champ électrique transverse.

L'expression complète du nouveau lagrangien L' est donc :

$$\begin{aligned} L' &= \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2}{2} - \sum_{\alpha < \beta} \frac{q_{\alpha} q_{\beta}}{4 \pi \epsilon_0 |\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}|} - \sum_{\alpha} \epsilon_{\text{Coul}}^{\alpha} + \\ &+ \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3r [\mathbf{E}_{\perp}^2 - c^2 \mathbf{B}^2] + \int d^3r \mathbf{M} \cdot \mathbf{B} + \int d^3r \mathbf{P} \cdot \mathbf{E}_{\perp}. \end{aligned} \quad (\text{C.26})$$

c) DÉVELOPPEMENT MULTIPOLAIRE DE L'INTERACTION ENTRE LES PARTICULES CHARGÉES ET LE CHAMP

Pour pouvoir ultérieurement faire des développements de type multipolaire en puissances de a/λ , il peut être utile de limiter la transformation du lagrangien aux seuls modes de grande longueur d'onde, c'est-à-dire dont le module du vecteur d'onde $\mathbf{k}$ est inférieur à une borne k_M , telle que $k_M a \ll 1$.

Distinguons pour cela dans le développement du champ transverse $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ les contributions des modes de grande longueur d'onde et celle des autres :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}^{<}(\mathbf{r}) + \mathbf{A}^{>}(\mathbf{r}) \quad (\text{C.27})$$

où

$$A^{<}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{<} d^3k \mathcal{A}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{C.28. a})$$

$$A^{>}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{>} d^3k \mathcal{A}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{C.28. b})$$

les symboles $<$ (resp. $>$) signifiant que la somme sur $\mathbf{k}$ porte sur toutes les valeurs de $\mathbf{k}$ de module inférieur (resp. supérieur) à k_M . La fonction F est alors choisie de manière à ne porter que sur les modes de grande longueur d'onde :

$$F = - \int d^3r \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}^{<} \quad (\text{C.29})$$

et permet d'aboutir à :

$$L_I' = L_I'^{<} + L_I'^{>} \quad (\text{C.30. a})$$

$$L_I'^{>} = \int d^3r \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}^{>} \quad (\text{C.30. b})$$

$$L_I'^{<} = \int d^3r \mathbf{M} \cdot \mathbf{B}^{<} + \int d^3r \mathbf{P} \cdot \mathbf{E}_\perp^{<} \quad (\text{C.30. c})$$

Comme par définition $\mathbf{B}^{<}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{E}^{<}(\mathbf{r})$ varient peu sur une distance de l'ordre de a , on peut développer ces champs en série de Taylor au voisinage de l'origine. Les intégrales sur $\mathbf{r}$ de (C.30. c) reviennent à projeter les densités de magnétisation et de polarisation $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ sur des monômes de degré croissant en x, y, z . Ces projections sont les moments multipolaires du système de charges et de courants. Compte tenu des fonctions $\delta(\mathbf{r} - u\mathbf{r}_\alpha)$ apparaissant dans les définitions (C.2) et (C.19) de $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{M}(\mathbf{r})$, l'intégrale sur $\mathbf{r}$ est immédiate. Il ne reste plus qu'à intégrer sur u pour obtenir l'expression de ces moments multipolaires en fonction de $\mathbf{r}_\alpha$ et $\dot{\mathbf{r}}_\alpha$. Le lagrangien d'interaction s'écrit alors sous forme d'un développement multipolaire dont nous ne donnons ici que les trois premiers termes

$$L_I'^{<} = \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp^{<}(\mathbf{0}) + \mathbf{m} \cdot \mathbf{B}^{<}(\mathbf{0}) + \sum_{ij} q_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} E_{\perp j}^{<}(\mathbf{0}) + \dots \quad (\text{C.31})$$

avec

$$\mathbf{d} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \quad (\text{C.32. a})$$

$$\mathbf{m} = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} q_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \times \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \quad (\text{C.32. b})$$

$$q_{ij} = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} q_{\alpha} \left(r_{\alpha i} r_{\alpha j} - \frac{1}{3} \delta_{ij} r_{\alpha}^2 \right). \quad (\text{C.32. c})$$

On retrouve évidemment l'interaction du dipôle électrique $\mathbf{d}$ avec le champ électrique transverse en $\mathbf{0}$, comme au paragraphe B.3, mais apparaissent également les termes suivants, du 2^e ordre en a : interaction du moment magnétique $\mathbf{m}$ avec le champ magnétique en $\mathbf{0}$, et du moment quadrupolaire électrique q_{ij} avec le gradient du champ électrique transverse en $\mathbf{0}$ (on a retiré au tenseur $r_{ai} r_{aj}$ sa trace qui ne contribue pas à (C.31) puisque $\mathbf{E}_\perp$ est de divergence nulle).

3. Nouveaux moments conjugués et nouvel hamiltonien

a) EXPRESSION DE CES GRANDEURS

Dans l'expression (C.26) de L' , la vitesse $\dot{\mathbf{r}}_\alpha$ apparaît dans l'énergie cinétique et dans le terme d'interaction magnétique. Ce dernier s'explicité sous la forme :

$$\begin{aligned} \int d^3r \mathbf{M} \cdot \mathbf{B} &= \sum_\alpha \int d^3r \int_0^1 u du q_\alpha (\mathbf{r}_\alpha \times \dot{\mathbf{r}}_\alpha) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha u) \\ &= \sum_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha \cdot \int_0^1 u du q_\alpha [\mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha u) \times \mathbf{r}_\alpha]. \end{aligned} \quad (\text{C.33})$$

La dérivée de L' par rapport à $\dot{\mathbf{r}}_\alpha$ donne donc :

$$\mathbf{p}_{\alpha L'} = m_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha + \int_0^1 u du q_\alpha \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha u) \times \mathbf{r}_\alpha. \quad (\text{C.34})$$

Dans la même expression (C.26) de L' , $\dot{\mathbf{A}}$, qui n'est autre que $-\mathbf{E}_\perp$, figure dans l'énergie du champ et dans le lagrangien d'interaction où il est multiplié par $\mathbf{P}$. Comme cela a été fait au paragraphe C.3 du chapitre II, il convient, avant d'en prendre la dérivée, de bien exprimer L' en fonction des variables dynamiques indépendantes du champ transverse, c'est-à-dire des $\mathcal{A}(\mathbf{k})$ et $\mathcal{A}^*(\mathbf{k})$ pris sur un demi-espace réciproque. On a alors :

$$\pi_{L'}(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 \dot{\mathcal{A}}(\mathbf{k}) - \mathcal{P}_\perp(\mathbf{k}). \quad (\text{C.35})$$

En effet, $\mathcal{A}$ étant transverse, seul $\mathcal{P}_\perp$ contribue à l'interaction et apparaît donc dans la dérivée.

Le nouvel hamiltonien a pour expression :

$$H_{L'} = \sum_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha \cdot \mathbf{p}_{\alpha L'} + \int d^3k (\dot{\mathcal{A}} \cdot \pi_{L'}^* + \dot{\mathcal{A}}^* \cdot \pi_{L'}) - L'. \quad (\text{C.36})$$

On peut vérifier que $H_{L'}$ coïncide bien avec H_L lorsqu'il est réexprimé en fonction des vitesses (voir (A.12) avec $\partial F / \partial t = 0$) : c'est la somme de l'énergie cinétique des particules, de l'énergie du champ transverse et de

l'énergie du champ longitudinal (énergie coulombienne). En fonction des nouvelles variables canoniques, $H_{L'}$, s'écrit :

$$\begin{aligned}
 H_{L'} = & \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} \left[\mathbf{p}_{\alpha L'} - \int_0^1 u \, du \, q_{\alpha} \mathbf{B}(\mathbf{r}_{\alpha} u) \times \mathbf{r}_{\alpha} \right]^2 + \\
 & + \int d^3 k \left[\frac{(\boldsymbol{\pi}_{L'} + \mathcal{P}_{\perp}) \cdot (\boldsymbol{\pi}_{L'} + \mathcal{P}_{\perp})^*}{\varepsilon_0} + \varepsilon_0 c^2 k^2 \mathcal{A} \cdot \mathcal{A}^* \right] + \\
 & + \sum_{\alpha} \varepsilon_{\text{Coul}}^{\alpha} + \sum_{\alpha < \alpha'} \frac{q_{\alpha} q_{\alpha'}}{4 \pi \varepsilon_0 |\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\alpha'}|} \quad (C.37)
 \end{aligned}$$

$\varepsilon_{\text{Coul}}^{\alpha}$ est défini par la formule (B.36) du chapitre I. On peut séparer dans $H_{L'}$, une première partie, $H_{PL'}$, qui ne dépend que des variables des particules $\mathbf{r}_{\alpha}$ et $\mathbf{p}_{\alpha L'}$, une deuxième partie, $H_{RL'}$, qui ne dépend que des nouvelles variables du champ transverse $\mathcal{A}$ et $\boldsymbol{\pi}_{L'}$, et un hamiltonien d'interaction, $H_{IL'}$, qui dépend des deux à la fois :

$$H_{PL'} = \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha L'}^2}{2 m_{\alpha}} + \sum_{\alpha} \varepsilon_{\text{Coul}}^{\alpha} + \sum_{\alpha < \alpha'} \frac{q_{\alpha} q_{\alpha'}}{4 \pi \varepsilon_0 |\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\alpha'}|} + \int d^3 k \frac{|\mathcal{P}_{\perp}|^2}{\varepsilon_0} \quad (C.38)$$

$$\begin{aligned}
 H_{RL'} &= \int d^3 k \left(\frac{\boldsymbol{\pi}_{L'} \cdot \boldsymbol{\pi}_{L'}^*}{\varepsilon_0} + \varepsilon_0 \omega^2 \mathcal{A} \cdot \mathcal{A}^* \right) = \\
 &= \int d^3 k \frac{\varepsilon_0}{2} \left[\left| \frac{\boldsymbol{\pi}_{L'}}{\varepsilon_0} \right|^2 + \omega^2 |\mathcal{A}|^2 \right] \quad (C.39)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 H_{IL'} &= \int d^3 k \left(\frac{\boldsymbol{\pi}_{L'} \cdot \mathcal{P}_{\perp}^*}{\varepsilon_0} + \frac{\boldsymbol{\pi}_{L'}^* \cdot \mathcal{P}_{\perp}}{\varepsilon_0} \right) - \\
 &- \sum_{\alpha} \int_0^1 u \, du \, q_{\alpha} \left(\mathbf{r}_{\alpha} \times \frac{\mathbf{p}_{\alpha L'}}{m_{\alpha}} \right) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}_{\alpha} u) + \\
 &+ \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}^2}{2 m_{\alpha}} \left[\int_0^1 u \, du \, \mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_{\alpha} u) \right]^2. \quad (C.40)
 \end{aligned}$$

b) SIGNIFICATION PHYSIQUE DES NOUVEAUX MOMENTS CONJUGUÉS

Dans l'approximation où les effets magnétiques sont négligés ($\mathbf{B}=\mathbf{0}$), $\mathbf{p}_{\alpha L'}$ coïncide avec la quantité de mouvement $m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}$ comme à l'approximation dipolaire électrique. La différence entre $\mathbf{p}_{\alpha L'}$ et $m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}$ est d'autant plus petite que l'extension du système de charges est plus faible (l'écart est proportionnel à $\mathbf{r}_{\alpha}$). Enfin, cet écart est exprimé directement en fonction du champ magnétique et non plus du potentiel vecteur.

Remarque

En fait l'expression (C. 34) peut être réécrite sous la forme

$$\mathbf{p}_{\alpha L'} = m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} + q_{\alpha} \mathbf{A}'(\mathbf{r}_{\alpha}) \quad (\text{C. 41. a})$$

où

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}) = \int_0^1 u \, du \, \mathbf{B}(u\mathbf{r}) \times \mathbf{r}. \quad (\text{C. 41. b})$$

On peut vérifier en calculant son rotationnel que $\mathbf{A}'(\mathbf{r})$ est un potentiel vecteur particulier du champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r})$. Il s'agit d'une généralisation du potentiel vecteur $\mathbf{B} \times \mathbf{r}/2$ d'un champ constant. Il a la propriété d'être nul à l'origine, de s'exprimer en fonction de $\mathbf{B}$ lui-même et d'être en tout point perpendiculaire à $\mathbf{r}$ (Jauge de Poincaré, voir complément D_{IV}).

Le moment conjugué $\pi_{L'}(\mathbf{k})$ du potentiel vecteur est transverse d'après (C. 35). Comme $\mathbf{A}$ est égal à $-\mathbf{E}_{\perp}$ l'expression (C. 35) peut s'écrire

$$\begin{aligned} \Pi_{L'}(\mathbf{r}) &= -[\varepsilon_0 \mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) + \mathbf{P}_{\perp}(\mathbf{r})] \\ &= -\mathbf{D}_{\perp}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{C. 42})$$

où $\mathbf{D}$ est l'induction électrique définie par (C. 8). Le moment conjugué de $\mathbf{A}$ apparaît ainsi comme étant la partie transverse de l'induction $\mathbf{D}$, alors que dans le point de vue standard, il correspondait à la partie transverse du champ électrique $\mathbf{E}$. Comme, d'après (C. 9), $\mathbf{D}_{\parallel}$ est en fait un champ coulombien indépendant du temps (celui créé par la distribution de charge de référence ρ_0), on peut dire qu'à un champ constant près, $\Pi_{L'}$ représente l'induction électrique $\mathbf{D}$ dans sa totalité. L'induction $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ étant reliée de façon *locale* au champ électrique *total* par la relation (C. 8), il en est donc de même pour $\Pi_{L'}$, alors que dans la représentation standard, Π_L est relié à $\mathbf{E}_{\perp}$ et non pas au champ électrique total. Ce lien entre $\Pi_{L'}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ est encore plus manifeste pour un système globalement neutre ($\rho_0 = 0$). On a alors :

$$\text{Système neutre} \Rightarrow \Pi_{L'}(\mathbf{r}) = -[\varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \mathbf{P}(\mathbf{r})]. \quad (\text{C. 43})$$

En dehors du système de charge ($\mathbf{P} = 0$), il y a même identité (au facteur $-\varepsilon_0$ près) entre $\Pi_{L'}$ et $\mathbf{E}$. On peut dire encore que $\Pi_{L'}(\mathbf{r})$ représente la meilleure description possible du champ électrique total (qui a une partie longitudinale) par un champ transverse. Cette description est exacte dans tout l'espace, sauf dans le volume fini occupé par le système de charges.

Cette relation locale entre $\Pi_{L'}$ et $\mathbf{E}$ fait tout l'intérêt du nouveau point de vue : en dehors du système de charges, $\mathbf{P}$ est identiquement nul et $\Pi_{L'}$ se propage, comme $\mathbf{E}$, à la vitesse c . Il ne contient aucune partie instantanée, comme c'était le cas de Π_L dans le point de vue standard. Cette propriété a des conséquences importantes pour l'étude de l'interaction entre deux systèmes de charges éloignés (voir complément C_{IV}).

Remarque

En toute rigueur, il subsiste à l'intérieur du système de charges des effets de propagation instantanée pour $\Pi_{L'}$: en effet $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ est relié de façon non locale et instantanée à la position des charges. Il en résulte que, $\mathbf{E}$ se propageant à la vitesse c , $\Pi_{L'}$ a aussi une partie instantanée. Mais, sauf dans cette petite région de l'espace où les effets de retard seront de toute façon faibles, la nouvelle variable dynamique $\Pi_{L'}$ se propage à la vitesse c .

c) STRUCTURE DU NOUVEL HAMILTONIEN

L'hamiltonien du champ transverse, $H_{RL'}$, est, comme dans le point de vue standard, la somme d'hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques indépendants correspondant à chacun des modes. La dynamique propre du champ, décrite en termes des variables conjuguées, est donc la même que dans le point de vue standard. Cependant, le champ électrique lui-même ne s'exprime pas de la même façon en fonction de $\Pi_{L'}$ et Π_L , de sorte qu'à un même mouvement de Π_L et $\Pi_{L'}$, correspondent des mouvements différents du champ électrique.

L'hamiltonien propre des particules, $H_{PL'}$, exprimé en termes des variables canoniques est peu modifié. Seul est ajouté le dernier terme de (C.38) qui apparaît comme une correction à l'énergie coulombienne. Il doit être regroupé avec les corrections radiatives résultant du couplage du système de charges avec le champ libre. Notons cependant que ce terme joue un rôle important quand on considère le cas de 2 systèmes de charges séparés $\mathcal{S}_A$ et $\mathcal{S}_B$. Il apparaît alors (voir complément C_{IV}) que la contribution à l'intégrale sur $\mathbf{k}$ de $\mathcal{P}_{\perp A}^* \cdot \mathcal{P}_{\perp B} + c.c.$ annule l'interaction de Coulomb instantanée entre les deux systèmes de charges. Il n'y a plus de termes d'interaction directe entre $\mathcal{S}_A$ et $\mathcal{S}_B$; l'interaction s'effectue via les champs $\mathbf{B}$ et $\Pi_{L'}$, qui se propagent à la vitesse c .

L'hamiltonien d'interaction $H_{IL'}$, entre les particules et les champs $\mathbf{B}$ et $\Pi_{L'}$, est donné par (C.40). Il comprend trois termes.

Le premier terme peut être réécrit dans l'espace réel sous la forme :

$$\int d^3r \frac{\Pi_{L'}}{\varepsilon_0} \cdot \mathbf{P} = - \int d^3r \frac{\mathbf{D}_{\perp}}{\varepsilon_0} \cdot \mathbf{P} \quad (\text{C.44})$$

($\Pi_{L'}$ étant lui-même transverse, on peut dans l'intégrale remplacer $\mathbf{P}_{\perp}$ par $\mathbf{P}$). Ce premier terme décrit l'interaction de la densité de polarisation $\mathbf{P}$ du système de charges avec $\mathbf{D}_{\perp}$ (ou encore $\mathbf{D}$ pour un système globalement neutre).

Le deuxième terme peut être réécrit à l'aide d'une densité de magnétisation :

$$\mathbf{M}'(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \int_0^1 u \, du \, q_{\alpha} \left(\mathbf{r}_{\alpha} \times \frac{\mathbf{p}_{\alpha L'}}{m_{\alpha}} \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha} u) \quad (\text{C.45})$$

sous la forme :

$$- \int d^3r \mathbf{M}'(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}). \quad (\text{C. 46})$$

Il décrit l'interaction paramagnétique entre la densité de magnétisation $\mathbf{M}'(\mathbf{r})$ du système de charges et le champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r})$. Il est à noter que, dans la mesure où $\mathbf{p}_{\alpha L'}$ est différent de $m_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha$ (cf. C. 34), $\mathbf{M}'(\mathbf{r})$ est différent de la *vraie* densité de magnétisation $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ introduite en (C. 19). Mais la densité $\mathbf{M}'(\mathbf{r})$ est plus commode à utiliser dans le formalisme hamiltonien que $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ dans la mesure où elle s'exprime directement en fonction des variables dynamiques $\mathbf{r}_\alpha$ et $\mathbf{p}_{\alpha L'}$.

Le dernier terme, quadratique en $\mathbf{B}$, représente l'énergie diamagnétique du système de charges dans le champ magnétique $\mathbf{B}$, c'est-à-dire l'énergie associée à la variation des densités de courant lorsqu'on branche le champ. Nous noterons $H_{IL'}$ (dia) ce dernier terme.

Au total :

$$H_{IL'} = \int d^3r \frac{\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\Pi}_{L'}}{\varepsilon_0} - \int d^3r \mathbf{M}' \cdot \mathbf{B} + H_{IL'}(\text{dia}) \quad (\text{C. 47})$$

$$= \int d^3k \frac{\mathcal{P}^* \cdot \boldsymbol{\pi}_{L'}}{\varepsilon_0} - \int d^3k \mathcal{M}'^* \cdot \mathcal{B} + H_{IL'}(\text{dia}). \quad (\text{C. 48})$$

Les deux premiers termes de $H_{IL'}$ pourraient aussi se mettre sous la forme d'une somme de termes décrivant l'interaction des moments multipolaires électriques et magnétiques du système de charges avec les ondes multipolaires électromagnétiques correspondantes.

4. L'électrodynamique quantique dans le nouveau point de vue

On peut maintenant procéder à la quantification canonique de la théorie précédente, exactement de la même manière qu'au chapitre II (§ C. 4).

a) QUANTIFICATION

Pour la particule α , la position $\mathbf{r}_\alpha$ et son moment conjugué $\mathbf{p}_{\alpha L'}$ deviennent des opérateurs $\mathbf{r}_\alpha^{(2)}$ et $\mathbf{p}_{\alpha L'}^{(2)}$, satisfaisant aux relations de commutation fondamentales. Une façon commode de satisfaire ces relations de commutation est de prendre pour $\mathbf{r}_\alpha^{(2)}$ et $\mathbf{p}_{\alpha L'}^{(2)}$ les mêmes opérateurs $\mathbf{r}_\alpha$ (multiplication par $\mathbf{r}_\alpha$) et $\mathbf{p}_\alpha = -i\hbar \nabla_\alpha$ que ceux qui ont été utilisés dans le premier point de vue pour représenter les variables conjuguées $\mathbf{r}_\alpha^{(1)}$ et $\mathbf{p}_{\alpha L'}^{(1)}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{r}_\alpha^{(2)} = \mathbf{r}_\alpha \\ \mathbf{p}_{\alpha L'}^{(2)} = \mathbf{p}_\alpha \end{array} \right. \quad (\text{C. 49. a})$$

$$(\text{C. 49. b})$$

De façon plus générale, quand nous utiliserons dans la suite un opérateur mathématique G sans indice supérieur, il s'agira toujours de l'opérateur qui représente la grandeur physique $G^{(1)}$ dans le premier point de vue

$$G \equiv G^{(1)}. \quad (\text{C. 50})$$

De la même façon, le champ électromagnétique est décrit dans le nouveau point de vue par les deux champs transverses conjugués $\mathcal{A}$ et π_L , qui deviennent des opérateurs $\mathcal{A}^{(2)}$ et $\pi_L^{(2)}$ satisfaisant aux relations de commutation canoniques (C. 44) du chapitre II. Comme plus haut, il est commode de prendre pour $\mathcal{A}^{(2)}$ et $\pi_L^{(2)}$ les mêmes opérateurs $\mathcal{A}$ et π que ceux qui représentaient $\mathcal{A}^{(1)}$ et $\pi_L^{(1)}$ dans le premier point de vue

$$\begin{cases} \mathcal{A}^{(2)}(\mathbf{k}) = \mathcal{A}(\mathbf{k}) \\ \pi_L^{(2)}(\mathbf{k}) = \pi(\mathbf{k}). \end{cases} \quad (\text{C. 51. a})$$

$$(\text{C. 51. b})$$

Comme dans le paragraphe C. 4. c du chapitre II, l'opérateur d'annihilation $a_e(\mathbf{k})$ est introduit comme combinaison linéaire de $\mathcal{A}_e(\mathbf{k})$ et $\pi_e(\mathbf{k})$. Les transformées de Fourier $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ et $\Pi(\mathbf{r})$ de $\mathcal{A}(\mathbf{k})$ et $\pi(\mathbf{k})$ s'écrivent alors

$$\left\{ \begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}) &= \int d^3k \sum_e \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega (2\pi)^3}} \\ &\quad \times [\varepsilon a_e(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \varepsilon a_e^+(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}] \quad (\text{C. 52. a}) \\ \Pi(\mathbf{r}) &= -i\varepsilon_0 \int d^3k \sum_e \sqrt{\frac{\hbar \omega}{2 \varepsilon_0 (2\pi)^3}} \times \\ &\quad \times [\varepsilon a_e(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \varepsilon a_e^+(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}]. \quad (\text{C. 52. b}) \end{aligned} \right.$$

Ces divers opérateurs mathématiques, ainsi que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$, seront utilisés dans la suite pour exprimer les diverses observables dans le nouveau point de vue. Ainsi, les relations (C. 51) deviennent dans l'espace réel

$$\begin{cases} \mathbf{A}^{(2)}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) \\ \Pi_L^{(2)}(\mathbf{r}) = \Pi(\mathbf{r}). \end{cases} \quad (\text{C. 53. a})$$

$$(\text{C. 53. b})$$

b) EXPRESSION DE QUELQUES GRANDEURS PHYSIQUES

Comme nous l'avons expliqué au paragraphe A. 2 ci-dessus, une même grandeur physique est généralement représentée par 2 opérateurs différents $G^{(2)}$ et $G^{(1)}$, liés par $G^{(2)} = T G^{(1)} T^+$, dans les points de vue nouveau (2) et ancien (1).

Considérons par exemple la grandeur physique vitesse de la particule α .

Dans le point de vue de Coulomb, cette grandeur est représentée par l'opérateur

$$\mathbf{v}_\alpha^{(1)} = \frac{1}{m_\alpha} [\mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha)] \quad (\text{C.54. a})$$

alors que, dans le point de vue de Power-Zienau-Woolley, on a d'après (C.34)

$$\mathbf{v}_\alpha^{(2)} = \frac{1}{m_\alpha} \left[\mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \int_0^1 du u \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha u) \times \mathbf{r}_\alpha \right]. \quad (\text{C.54. b})$$

Un autre exemple de grandeur physique est le champ électrique total qui s'écrit, dans le point de vue (1)

$$\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\varepsilon_0} \mathbf{\Pi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_\alpha q_\alpha \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha|^3} \quad (\text{C.55. a})$$

et dans le point de vue (2), compte tenu de (C.8), (C.9. b) et (C.42)

$$\mathbf{E}^{(2)}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\varepsilon_0} \mathbf{\Pi}(\mathbf{r}) - \frac{1}{\varepsilon_0} \mathbf{P}(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \quad (\text{C.55. b})$$

où $\mathbf{E}_0(\mathbf{r})$ est le champ statique créé par la distribution de charge de référence $\rho_0(\mathbf{r})$

Inversement, un même opérateur mathématique n'a pas le même sens physique suivant qu'on le considère dans un point de vue ou dans l'autre. Ainsi, l'opérateur $\mathbf{\Pi}(\mathbf{r})$ écrit en (C.52. b) est lié soit au champ électrique transverse, soit à l'induction transverse (voir (C.42)).

$$\mathbf{\Pi}(\mathbf{r}) = \mathbf{\Pi}_L^{(1)}(\mathbf{r}) = -\varepsilon_0 \mathbf{E}_\perp^{(1)}(\mathbf{r}) \quad (\text{C.56. a})$$

$$\mathbf{\Pi}(\mathbf{r}) = \mathbf{\Pi}_L^{(2)}(\mathbf{r}) = -\mathbf{D}_\perp^{(2)}(\mathbf{r}). \quad (\text{C.56. b})$$

Donnons enfin l'expression, $H^{(2)}$, de l'hamiltonien dans le nouveau point de vue. Il suffit de remplacer dans (C.38), (C.39), (C.40) les divers variables et moments conjugués $\mathbf{r}_\alpha$, $\mathbf{p}_{\alpha L}$, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, $\mathbf{\Pi}_L(\mathbf{r})$ par les opérateurs correspondants $\mathbf{r}_\alpha$, $\mathbf{p}_\alpha$, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, $\mathbf{\Pi}(\mathbf{r})$. On obtient ainsi

$$H^{(2)} = H'_P + H_R + H'_I \quad (\text{C.57})$$

avec

$$H'_P = H_{PL}^{(2)} = \sum_\alpha \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} + \sum_\alpha \varepsilon_{\text{Coul}}^\alpha + \sum_{\alpha < \alpha'} \frac{q_\alpha q_{\alpha'}}{4\pi\varepsilon_0 |\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_{\alpha'}|} + \int d^3k \frac{|\mathcal{P}_\perp|^2}{\varepsilon_0} \quad (\text{C.58. a})$$

$$\begin{aligned}
 H_R = H_{RL}^{(2)} &= \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3r \left[\frac{\Pi^2(\mathbf{r})}{\varepsilon_0} + c^2 (\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 \right] \\
 &= \int d^3k \sum \hbar \omega \left[a_{\mathbf{k}}^+ (\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}} (\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right]
 \end{aligned} \tag{C.58.b}$$

$$\begin{aligned}
 H_I' = H_{IL}^{(2)} &= \frac{1}{\varepsilon_0} \int d^3r \mathbf{P}(\mathbf{r}) \cdot \Pi(\mathbf{r}) \\
 &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \int_0^1 u du q_{\alpha} \left[\left(\mathbf{r}_{\alpha} \times \frac{\mathbf{p}_{\alpha}}{m_{\alpha}} \right) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}_{\alpha} u) + \mathbf{B}(\mathbf{r}_{\alpha} u) \cdot \left(\mathbf{r}_{\alpha} \times \frac{\mathbf{p}_{\alpha}}{m_{\alpha}} \right) \right] \\
 &\quad + \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}^2}{2 m_{\alpha}} \left[\int_0^1 u du \mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_{\alpha} u) \right]^2.
 \end{aligned} \tag{C.58.c}$$

Le nouvel hamiltonien des particules $H_p' = H_{pL}^{(2)}$, diffère de l'ancien $H_p = H_{pL}^{(1)}$ par le dernier terme de (C.58.a). Par contre les hamiltoniens de rayonnement coïncident $H_{RL}^{(2)} = H_{RL}^{(1)} = H_R$. Enfin, dans le nouvel hamiltonien d'interaction : $H_I' = H_{IL}^{(2)}$, qui diffère de l'ancien $H_I = H_{IL}^{(1)}$, nous avons symétrisé correctement, dans le terme de couplage paramagnétique, le produit de $\mathbf{p}_{\alpha}$ par la fonction de $\mathbf{r}_{\alpha}$ qui le multiplie.

5. Equivalence entre les deux points de vue. Quelques écueils à éviter

Les deux formulations de l'électrodynamique quantique, construites à partir du lagrangien standard en jauge de Coulomb et du lagrangien de Power-Zienau-Woolley, sont bien sûr équivalentes puisque, d'après les considérations générales de la partie A ci-dessus, elles sont reliées par une transformation unitaire T, dont l'expression s'écrit, compte tenu de (A.37) et (C.21) :

$$T = \exp \left[- \frac{i}{\hbar} \int d^3k \mathcal{P}^* \cdot \mathcal{A} \right]. \tag{C.59}$$

Il arrive cependant que le caractère général de cette équivalence soit oublié et que des erreurs de calcul ou d'interprétation donnent l'illusion qu'un des deux points de vue est plus valable que l'autre.

Pour éviter de telles erreurs, il convient tout d'abord de bien identifier les états physiques et les grandeurs physiques qui interviennent dans le processus étudié. Par exemple, si l'état initial du processus est un état où les particules ont une vitesse bien définie, il faut identifier l'opérateur associé à la grandeur physique vitesse car l'état initial est un état propre de cet opérateur.

Une fois que le problème est bien posé en termes physiques, il ne faut pas oublier ensuite que sa formulation mathématique est généralement différente dans un point de vue et dans l'autre. Par exemple, l'opérateur associé à la vitesse n'a pas la même forme dans le point de vue de Coulomb

et dans le point de vue de Power-Zienau-Woolley (voir (C. 54. a) et (C. 54. b)). Plus généralement, les opérateurs $G^{(1)}$ et $G^{(2)}$ associés à une même grandeur physique dans les points de vue 1 et 2 doivent se correspondre par T et sont donc le plus souvent différents. Il se peut que l'opérateur associé à une grandeur physique ait une forme plus simple dans un point de vue que dans l'autre. Les vecteurs propres associés à cette grandeur physique sont alors plus simples à trouver dans ce point de vue, et il est toujours possible de leur appliquer T ou T^+ pour obtenir leur expression dans l'autre point de vue. Il se peut également que la diagonalisation exacte de l'opérateur associé à une grandeur physique ne soit possible dans aucun point de vue, et qu'il soit alors nécessaire d'avoir recours à des développements perturbatifs en puissances d'un paramètre de couplage comme la charge q_α des particules. Il convient alors, si l'on veut comparer les prédictions des deux points de vue, de bien pousser les développements au même ordre de perturbation dans un point de vue et dans l'autre. Par exemple, les amplitudes de transition, qui sont les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution entre un état physique initial et un état physique final, n'auront la même valeur dans les deux points de vue, à un ordre donné s en q_α , que si les développements de l'état initial, de l'état final et de l'opérateur d'évolution sont poussés partout jusqu'au même ordre s .

Revenons enfin sur la décomposition de l'hamiltonien total en trois parties relatives aux particules, au champ et à l'interaction. Comme T ne dépend pas explicitement du temps, les hamiltoniens totaux $H^{(2)}$ et $H^{(1)}$ se correspondent dans la transformation unitaire (voir A. 34) :

$$H^{(2)} = T H^{(1)} T^+ . \quad (\text{C. 60})$$

En revanche, des relations analogues n'existent pas entre $H_{PL}^{(2)}$ et $H_{PL}^{(1)}$, $H_{IL}^{(2)}$ et $H_{IL}^{(1)}$ ou $H_{RL}^{(2)}$ et $H_{RL}^{(1)}$. En d'autres termes, la transformation unitaire redistribue de façon différente certains termes de l'hamiltonien entre les trois parties que nous avons distinguées en (C. 58. a, b, c). Une conséquence importante est que les états propres de $H_{PL}^{(1)}$ et $H_{PL}^{(2)}$ ne se correspondent pas par T : l'état fondamental de $H_{PL}^{(1)}$ ne représente pas le même état physique que celui de $H_{PL}^{(2)}$. On peut alors se poser la question : quel est le « vrai » état fondamental d'un atome ou d'une molécule ? Celui de $H_{PL}^{(1)}$ ou celui de $H_{PL}^{(2)}$? Ce n'est en fait ni l'un ni l'autre. En effet, dans la réalité, on ne peut pas « supprimer » l'interaction des charges avec le champ transverse et observer l'état fondamental de $H_{PL}^{(1)}$ ou $H_{PL}^{(2)}$. Ce que nous appelons état fondamental d'un système de charges est en fait l'état fondamental du système total « charges + champ transverse », donc un état propre de $H^{(1)}$ ou de $H^{(2)}$. Ces opérateurs se correspondent bien par T , d'après (C. 60), de sorte que les états fondamentaux dans les deux points de vue décrivent bien le même état physique. Les états propres de $H_{PL}^{(1)}$ ou $H_{PL}^{(2)}$ sont des approximations différentes des états réels, consistant à négliger telle ou telle partie des effets du champ transverse sur le système de charges.

D — FORME SIMPLIFIÉE DE L'ÉQUIVALENCE POUR LES MATRICES S DE DIFFUSION

L'approche rigoureuse du problème de l'équivalence entre deux points de vue que nous avons évoquée dans le paragraphe (C.5) précédent est valable dans tous les cas. Comme nous l'avons vu dans la partie A, elle s'applique de façon générale à toute transformation se traduisant finalement par une transformation unitaire dans l'espace des états. Elle peut cependant conduire à des calculs complexes. Nous allons voir dans cette dernière partie que, si le problème physique peut être posé en termes de collisions, des simplifications importantes apparaissent. Les amplitudes de transition sont égales dans les deux points de vue, même si l'on ne prend pas la peine de transformer les vecteurs d'états représentant l'état initial et l'état final.

Pour le montrer, nous allons suivre une méthode qui généralise en quelque sorte celle du paragraphe B.3.d. α ci-dessus où les potentiels extérieurs étaient pris nuls à l'instant initial t_i et à l'instant final t_f , et n'étaient « branchés » qu'entre t_i et t_f , de sorte que la transformation unitaire $T(t)$ reliant les deux points de vue se réduisait à l'identité pour $t < t_i$ et $t > t_f$. Une telle méthode n'est pas directement applicable à l'électrodynamique quantique que nous étudions ici, puisque les champs quantiques sont des opérateurs et non des fonctions données du temps. On peut néanmoins s'en inspirer pour « brancher » et « débrancher adiabatiquement » le couplage entre les particules et le champ, grâce à un paramètre $\lambda(t)$ qui est introduit formellement dans l'hamiltonien d'interaction, et dont les variations avec t correspondent au déroulement temporel d'un processus de collision.

1. Introduction de la matrice S

Commençons par expliquer comment il est possible d'analyser de cette façon un processus de collision dans le premier point de vue. De manière plus générale, considérons un hamiltonien $H^{(1)}$ qui peut être décomposé sous la forme :

$$H^{(1)} = H_0 + H_I \quad (\text{D.1})$$

où H_0 est un hamiltonien « non perturbé » décrivant l'énergie propre de systèmes physiques dont l'interaction est décrite par H_I . Introduisons alors formellement un nouvel hamiltonien $H^{(1)}(\lambda)$ défini par :

$$H^{(1)}(\lambda) = H_0 + \lambda H_I \quad (\text{D.2})$$

où λ est un paramètre réel compris entre 0 et 1. Pour $\lambda = 0$, $H^{(1)}(\lambda)$ se réduit à H_0 alors que pour $\lambda = 1$, $H^{(1)}(\lambda)$ est égal à $H^{(1)}$. Pour décrire

un processus de collision, il est commode alors de prendre pour λ une fonction $\lambda(t)$ croissant lentement de 0 à 1 entre t'_i et t_i puis décroissant lentement de 1 à 0 entre t_f et t'_f (Fig. 3).

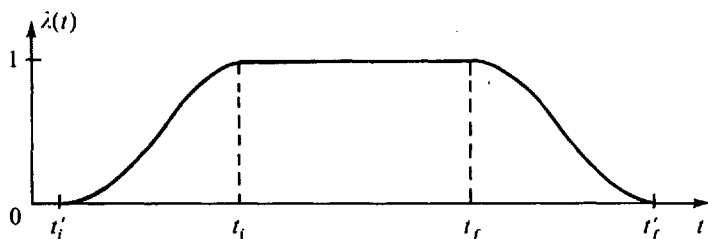


Figure 3. Evolution temporelle du paramètre de couplage.

En effet, supposons que le système global parte à l'instant t'_i d'un état propre $|\varphi_a\rangle$ de H_0 , d'énergie E_a , décrivant des systèmes non perturbés. Le passage de $\lambda(t)$ de 0 à 1 entre t'_i et t_i est une manière commode de simuler l'arrivée l'un sur l'autre de deux paquets d'onde « quasimonochromatiques » qui, au début, n'interagissent pas parce qu'ils sont trop éloignés. De même, le passage de $\lambda(t)$ de 1 à 0 entre t_f et t'_f simule la fin de la collision, les paquets d'ondes se séparant et n'interagissant plus. L'interaction entre les systèmes s'établit donc entre t'_i et t_i , agit entre t_i et t_f , puis disparaît entre t_f et t'_f . A t'_f , le système a évolué vers un état $|\psi_f\rangle$ qui, $\lambda(t)$ variant très lentement, se trouve sur la même « couche d'énergie » que $|\varphi_a\rangle$. Le produit scalaire de $|\psi_f\rangle$ avec un autre état propre $|\varphi_b\rangle$ de H_0 n'est alors différent de zéro que si $E_b = E_a$ et représente l'amplitude de diffusion de $|\varphi_a\rangle$ vers $|\varphi_b\rangle$.

Le branchement et le débranchement du couplage par la fonction $\lambda(t)$ de la figure 3 n'est en fait qu'une manière commode et intuitive (*) d'introduire la matrice S de diffusion, en prenant pour états asymptotiques des états propres de H_0 comme $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$. Le calcul de l'élément de matrice entre $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$ de l'opérateur d'évolution (**) $U^{(1)}(t'_f, t'_i)$ associé à l'hamiltonien $H_0 + \lambda(t) H_I$ donne l'élément de matrice de S entre $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$ dont on démontre qu'il peut s'écrire :

$$S_{ba}^{(1)} = \delta_{ba} - 2\pi i \delta(E_b - E_a) \mathcal{T}_{ba}^{(1)}. \quad (D.3)$$

La fonction $\delta(E_b - E_a)$ exprime le fait déjà mentionné plus haut que l'état final $|\varphi_b\rangle$ doit être sur la même couche d'énergie que l'état initial

(*) Il existe bien sûr des méthodes plus rigoureuses sur le plan mathématique comme la théorie formelle des collisions (voir références à la fin du chapitre).

(**) En fait, cet opérateur d'évolution doit être pris en représentation d'interaction par rapport à H_0 , de manière à éliminer les exponentielles d'évolution non perturbée, qui n'ont pas de limite bien définie quand $t'_f - t'_i \rightarrow \infty$.

$|\varphi_a\rangle$. $\mathcal{T}_{ba}^{(1)}$ est la matrice de transition qui peut être calculée perturbativement en puissances de H_I (développement de Born) :

$$\mathcal{T}_{ba}^{(1)} = \langle \varphi_b | H_I | \varphi_a \rangle + \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \sum_c \times \frac{\langle \varphi_b | H_I | \varphi_c \rangle \langle \varphi_c | H_I | \varphi_a \rangle}{E_a - E_c + i\epsilon} + \dots \quad (\text{D.4})$$

2. Matrice S dans un autre point de vue. Etude de l'équivalence

Considérons maintenant un deuxième point de vue, déduit du premier par la transformation unitaire $\exp(iF/\hbar)$, où F est indépendant du temps. Le nouvel hamiltonien $H^{(2)}$ est donc relié à $H^{(1)}$ par :

$$H^{(2)} = T H^{(1)} T^+ \quad (\text{D.5})$$

Il est très commode pour la suite d'introduire formellement dans T le même paramètre λ que celui qui a permis de définir $H^{(1)}(\lambda)$ en (D.2). Nous poserons donc :

$$T(\lambda) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \lambda F\right) \quad (\text{D.6})$$

et nous définirons l'hamiltonien $H^{(2)}(\lambda)$ comme étant le transformé de $H^{(1)}(\lambda)$ par $T(\lambda)$:

$$H^{(2)}(\lambda) = T(\lambda) H^{(1)}(\lambda) T^+(\lambda) = T(\lambda) [H_0 + \lambda H_I] T^+(\lambda) \quad (\text{D.7})$$

Pour $\lambda = 0$, $T(\lambda)$ est égal à l'identité et $H^{(2)}(\lambda)$ se réduit à H_0 tout comme $H^{(1)}(\lambda)$. Pour $\lambda = 1$ on retrouve (D.5). Il est donc possible d'écrire :

$$H^{(2)}(\lambda) = H_0 + \lambda H_I'(\lambda) \quad (\text{D.8})$$

où nous avons regroupé tous les termes dépendant de λ dans $\lambda H_I'(\lambda)$. Ce dernier terme (pris pour $\lambda = 1$) constitue donc l'hamiltonien d'interaction dans le second point de vue que nous noterons H_I' . Notons que cet hamiltonien n'est pas en général le transformé de H_I par T .

Ayant ainsi introduit une correspondance entre les deux points de vue pour chaque valeur de λ , nous pouvons maintenant analyser comment le processus de collision associé à la fonction $\lambda(t)$ de la figure 3 apparaît dans le second point de vue. A l'instant initial t_i' , $\lambda(t_i') = 0$ et $T(\lambda(t_i'))$ se réduit à l'identité. L'état initial est donc décrit par le même ket $|\varphi_a\rangle$ dans les deux points de vue puisque $|\varphi_a\rangle$ coïncide alors avec son transformé. Il en est de même à l'instant final t_f' , puisque $\lambda(t_f') = 0$: l'état final est donc également décrit par le même vecteur $|\varphi_b\rangle$ dans les deux points de vue. Entre t_i' et t_f' , le vecteur d'état évolue dans le premier point de vue sous l'effet de l'hamiltonien $H_0 + \lambda(t) H_I$. Comme la transformation unitaire $T(\lambda(t))$ dépend du temps *via* $\lambda(t)$, l'évolution dans le second point de vue

est régie, d'après (A. 42) et (D. 6), par l'hamiltonien :

$$H_0 + \lambda(t) H_I'(\lambda(t)) + i\hbar \left[\frac{d}{dt} T(\lambda(t)) \right] T^\dagger(\lambda(t)) = \\ = H_0 + \lambda(t) H_I'(\lambda(t)) - \dot{\lambda}(t) F. \quad (D. 9)$$

L'élément de matrice entre $\langle \varphi_b |$ et $|\varphi_a \rangle$ de l'opérateur d'évolution associé à l'hamiltonien $H_0 + \lambda(t) H_I'$ est donc identique à l'élément de matrice entre les *mêmes* états $\langle \varphi_b |$ et $|\varphi_a \rangle$ de l'opérateur d'évolution associé à (D. 9) :

$$U_{ba}^{(1)}(t_f', t_i') = U_{ba}^{(2)}(t_f', t_i'). \quad (D. 10)$$

En fait, comme $\lambda(t)$ varie très lentement avec t , le dernier terme de (D. 9), $\dot{\lambda}(t) F$, est beaucoup plus petit que le second. Sa contribution à l'opérateur d'évolution associé à (D. 9) peut donc en général être négligée (*). L'opérateur $U^{(2)}$ peut alors être calculé en ne considérant que la perturbation $\lambda(t) H_I'(\lambda(t))$ qui croît lentement de 0 à H_I' entre t_i' et t_i , reste égale à H_I' entre t_i et t_f , et décroît ensuite lentement de H_I' à 0 entre t_f et t_f' . On retrouve ainsi pour l'hamiltonien d'interaction à prendre en compte pour $U^{(2)}$ un comportement temporel semblable à celui qui nous a permis d'introduire dans le premier point de vue la matrice S . A la limite $t_f - t_i \rightarrow \infty$, l'égalité (D. 10) devient :

$$S_{ba}^{(1)} = S_{ba}^{(2)} \quad (D. 11)$$

où

$$S_{ba}^{(2)} = \delta_{ba} - 2\pi i \delta(E_b - E_a) \mathcal{T}_{ba}^{(2)} \quad (D. 12. a)$$

$$\mathcal{T}_{ba}^{(2)} = \langle \varphi_b | H_I' | \varphi_a \rangle + \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \sum_c \frac{\langle \varphi_b | H_I' | \varphi_c \rangle \langle \varphi_c | H_I' | \varphi_a \rangle}{E_a - E_c + i\epsilon} + \dots \quad (D. 12. b)$$

L'identité (D. 11) entre (D. 3) et (D. 12. a) entraîne finalement l'identité entre $\mathcal{T}_{ba}^{(1)}$ et $\mathcal{T}_{ba}^{(2)}$, lorsque $E_a = E_b$ (par suite de la présence des fonctions delta) :

$$\mathcal{T}_{ba}^{(1)} = \mathcal{T}_{ba}^{(2)} \quad \text{lorsque} \quad E_a = E_b. \quad (D. 13)$$

L'égalité (D. 13) peut être établie de façon plus rigoureuse à partir de la théorie formelle des collisions, pour toutes les transformations F du type de celles rencontrées dans ce chapitre (voir références à la fin du chapitre).

(*) Il est possible de construire (K. Haller, communication privée) des transformations F suffisamment singulières pour que $\dot{\lambda}(t) F$ ne puisse pas être négligé. Nous supposons que ce n'est pas le cas pour les transformations envisagées ici.

L'identité (D.13) entre les matrices de transitions $\mathcal{T}^{(1)}$ et $\mathcal{T}^{(2)}$ sur la couche d'énergie est un résultat remarquable, qui simplifie considérablement les calculs pratiques. En effet, la plupart des paramètres physiques accessibles expérimentalement (sections efficaces, probabilités de transition...), s'expriment directement en fonction des éléments de la matrice de transition, et il est bien commode de pouvoir les calculer soit avec H_I , soit avec H'_I , dans la même base d'états, celle des états propres de H_0 , sans se préoccuper du fait que H_0 n'est pas invariant par T et que ses états propres ne représentent donc pas les mêmes états physiques dans les deux points de vue.

Remarque

Pour insister sur le fait que l'hamiltonien est changé quand on passe du membre de gauche au membre de droite de (D.13) mais pas les états, certains auteurs parlent de « transformation hybride ». D'autres auteurs appellent $H'_I - H_I$ une « pseudo perturbation » puisque cette différence n'a aucun effet sur la matrice de transition.

3. Commentaires sur l'utilisation de l'équivalence entre les matrices S

Pour conclure cette partie, il nous semble utile d'attirer l'attention du lecteur sur quelques dangers que comporterait une utilisation trop hâtive de (D.13).

Tout d'abord, il ne faut pas oublier que (D.13) n'est applicable que si le problème étudié peut être posé en termes de collisions. Le fait de pouvoir prendre le même ket $|\varphi_a\rangle$ (ou $|\varphi_b\rangle$) pour décrire l'état initial (ou final) dans les deux points de vue ne résulte pas d'un « miracle » mais de ce que, dans une collision, l'interaction peut être ignorée loin dans le passé et loin dans le futur. C'est d'ailleurs pour faire sentir physiquement ce point précis que nous avons préféré suivre ici une approche qualitative basée sur le branchement et le débranchement de λ plutôt que de donner une démonstration plus rigoureuse basée sur la théorie formelle des collisions.

Il est clair que si $|\varphi_b\rangle$ n'est pas l'état final d'un processus de diffusion, par exemple si $|\varphi_b\rangle$ est un état atomique excité susceptible de se désintégrer par émission spontanée, le raisonnement précédent n'est plus valable car on ne peut plus faire tendre t_f et t'_f vers l'infini et garder le même état $|\varphi_b\rangle$. Il faut donc bien s'assurer avant d'appliquer (D.13) que les états physiques initial et final sont stables (ou tout au moins que leur instabilité peut être négligée dans le problème étudié). Sinon, il faut « inclure » le processus étudié dans un processus plus complexe correspondant à une vraie diffusion (*), ou revenir à la méthode générale du paragraphe C.5 ci-dessus.

(*) Il est possible de résoudre ainsi complètement les contradictions apparentes dans les résultats donnés par les deux points de vue sur la forme de la raie $2s \rightarrow 2p$ de l'hydrogène (transition de Lamb). (Voir complément B_{IV}, § 3. b).

Une autre erreur à éviter serait d'appliquer (D.13) en dehors de la couche d'énergie. $\mathcal{G}_{ba}^{(1)}$ n'a aucune raison d'être égal à $\mathcal{G}_{ba}^{(2)}$ si E_b est différent de E_a . Par contre, le système peut très bien passer intermédiairement par des états $|\varphi_c\rangle$ d'énergie non perturbée E_c différente de $E_a = E_b$. C'est ce qu'expriment les termes d'ordre supérieur des développements de Born (D.4) et (D.12.b)

Notons enfin que l'identité entre $\mathcal{G}_{ba}^{(1)}$ et $\mathcal{G}_{ba}^{(2)}$ sur la couche d'énergie n'implique pas l'identité séparée des contributions d'un chemin intermédiaire donné dans les termes d'ordre supérieur des développements (D.4) et (D.12.b). En particulier, même si un état intermédiaire semble jouer un rôle prépondérant par suite d'une quasi résonance, il serait incorrect de négliger systématiquement tous les autres états intermédiaires. Les deux éléments de matrice de transition calculés dans les deux points de vue en ne gardant que l'état intermédiaire quasi résonnant sont en général différents. Il est possible bien sûr que l'approximation consistant à négliger tous les autres états intermédiaires soit valable dans l'un des deux points de vue. Il est rare qu'elle le soit dans les deux à la fois (voir exercice 2).

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES ET CONSEILS DE LECTURE

Pour la transformation de Power-Zienau-Woolley, voir les articles originaux : E. A. Power et S. Zienau, *Philos. Trans. Roy. Soc. A* **251**, 427 (1959) et R. G. Woolley, *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **321**, 557 (1971). Voir aussi Power (chap. 8) et Healy (chap. 7). Une discussion simple est donnée dans E. A. Power et T. Thirunamachandran, *Am. J. Phys.* **46**, 370 (1976).

Pour l'introduction de la matrice S et la théorie formelle des collisions voir Goldberger et Watson (chap. 5) et Schweber (chap. 11).

Pour l'étude de l'équivalence des matrices S au moyen de la théorie formelle des collisions (transformations hybrides, pseudo-perturbations...) voir K. Haller et S. B. Sohn, *Phys. Rev. A* **20**, 1541 (1979); Y. Aharonov et C. K. Au *Phys. Rev. A* **20**, 1553 (1979); E. Kazes, T. E. Feuchtwang, P. H. Cutler et H. Grotch, *Annals of Physics* **142**, 80 (1982).

COMPLÉMENT A_{IV}INTRODUCTION ÉLÉMENTAIRE DE L'HAMILTONIEN
DIPOLAIRE ÉLECTRIQUE

Considérons un ensemble de particules chargées formant un système localisé, d'extension spatiale de l'ordre de a . C'est le cas par exemple d'atomes ou de molécules, constitués d'électrons et de noyaux associés dans des états liés dont les dimensions spatiales sont de l'ordre de quelques rayons de Bohr. Si un tel système interagit avec des rayonnements de longueur d'onde λ grande devant a , il est légitime de négliger les variations spatiales du champ électromagnétique sur l'étendue du système. Cette approximation, dite « des grandes longueurs d'onde », a été utilisée dans le paragraphe B.3 du chapitre pour obtenir une formulation équivalente et plus simple de l'électrodynamique d'un système localisé de charges couplées à un champ extérieur. La transformation correspondante (transformation de Göppert-Mayer) a été présentée comme un changement de lagrangien ou un changement de jauge. Nous reprenons ici (§ 1) le même problème en étudiant directement la transformation unitaire qui permet d'obtenir l'hamiltonien dipolaire électrique en « $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$ » à partir de l'hamiltonien habituel en « $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ » (*). Nous généralisons ensuite la transformation de Göppert-Mayer au cas où le champ électromagnétique n'est plus un champ extérieur mais un système quantique ayant sa dynamique propre (§ 2). Nous envisageons enfin quelques prolongements possibles de la méthode utilisée (§ 3).

1. Hamiltonien dipolaire électrique pour un système localisé de charges couplées à un champ extérieur

a) TRANSFORMATION UNITAIRE SUGGÉRÉE PAR L'APPROXIMATION DES GRANDES LONGUEURS D'ONDE

Soit $A_e(\mathbf{r}, t)$ le potentiel vecteur décrivant le rayonnement extérieur (le potentiel scalaire $U_e(\mathbf{r}, t)$ est supposé nul). L'approximation des grandes longueurs d'onde consiste à négliger dans l'hamiltonien du système les variations spatiales de $A_e(\mathbf{r}, t)$. On peut donc remplacer, dans le terme d'énergie cinétique, les quantités $A_e(\mathbf{r}_a, t)$ par $A_e(\mathbf{R}, t)$, où $\mathbf{R}$ est un point pris à l'intérieur du système de charges. Nous considérons dans ce qui suit $\mathbf{R}$ comme un point fixe que nous prendrons pour origine des coordonnées ($\mathbf{R} = \mathbf{0}$), ce qui revient à ignorer tout déplacement d'ensemble de l'atome ou de la molécule (voir cependant la remarque du § 1. b plus loin).

(*) Comme nous n'utilisons pas ici le formalisme lagrangien, la lecture de ce complément ne nécessite pas la connaissance des notions introduites dans les chapitres II et IV.

Dans ces conditions, l'hamiltonien s'écrit

$$H(t) = \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)]^2 + V_{\text{Coul}} \quad (1)$$

où V_{Coul} est l'énergie de Coulomb du système.

La forme simple que prend le terme d'énergie cinétique à l'approximation des grandes longueurs d'onde suggère d'appliquer une transformation unitaire $T(t)$ qui translate chaque opérateur $\mathbf{p}_{\alpha}$ d'une quantité $q_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)$.

$$T(t) \mathbf{p}_{\alpha} T^+(t) = \mathbf{p}_{\alpha} + q_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t). \quad (2)$$

L'opérateur de translation $T(t)$ qui réalise cette transformation a pour expression

$$\begin{aligned} T(t) &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha} q_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) \right] \\ &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{d} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) \right] \end{aligned} \quad (3)$$

où

$$\mathbf{d} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \quad (4)$$

est le moment dipolaire électrique de la distribution de charges par rapport à l'origine. L'expression (3) coïncide avec celle trouvée dans le chapitre à partir du formalisme lagrangien (voir formule (B. 34)).

Remarque

Nous n'avons pas inclus dans (1) les termes d'interaction des moments magnétiques de spin des particules avec le champ magnétique du rayonnement extérieur. Ces termes sont en effet plus petits que les termes d'interaction en $\mathbf{A}_e \cdot \mathbf{p}$ par un facteur de l'ordre de $\hbar k/p$ (voir formule (D. 15) du chap. III), c'est-à-dire encore de l'ordre de a/λ , puisque $\hbar/p \sim a$. Ils sont donc du même ordre de grandeur que les termes d'interaction qui ont été négligés en remplaçant $\mathbf{A}_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t)$ par $\mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)$.

b) HAMILTONIEN TRANSFORMÉ

Dans le nouveau point de vue, l'évolution temporelle du vecteur d'état transformé, $|\psi'(t)\rangle = T(t) |\psi(t)\rangle$, est régie par l'hamiltonien

$$H'(t) = T(t) H(t) T^+(t) + i\hbar \left[\frac{dT(t)}{dt} \right] T^+(t). \quad (5)$$

En utilisant (1) et (2), nous trouvons

$$T(t) H(t) T^+(t) = \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha}^2}{2 m_{\alpha}} + V_{\text{Coul}} \quad (6)$$

et en utilisant (3)

$$i\hbar \left[\frac{dT(t)}{dt} \right] T^+(t) = \mathbf{d} \cdot \dot{\mathbf{A}}_e(0, t) = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_e(0, t) \quad (7)$$

ce qui donne en définitive

$$H'(t) = \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + V_{\text{Coul}} - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_e(0, t). \quad (8)$$

Nous trouvons ainsi qu'à l'approximation des grandes longueurs d'onde, l'interaction avec le champ extérieur est simplement décrite, dans le nouveau point de vue, par un terme de couplage entre le moment dipolaire $\mathbf{d}$ de l'atome et le champ électrique extérieur évalué à l'emplacement de l'atome.

Remarque

Il est possible de ne pas négliger le mouvement global de l'atome et de repérer les positions des charges q_{α} par rapport à un point $\mathbf{R}$ qui, au lieu d'être un point fixe, est pris au centre de masse de l'atome (voir exercice 3). On trouve alors que, si la charge totale $Q = \sum_{\alpha} q_{\alpha}$ est nulle, l'expression (8) demeure

valable (au remplacement près de $\mathbf{0}$ par $\mathbf{R}$ dans $\mathbf{E}_e(0, t)$). Par contre, si le système étudié est un ion ($Q \neq 0$), des termes nouveaux apparaissent dans l'hamiltonien $H'(t)$. Ils décrivent le couplage du mouvement global de l'ion avec le champ extérieur $\mathbf{A}_e$. Dans toute la suite de ce complément, nous ne considérons que des systèmes globalement neutres :

$$Q = \sum_{\alpha} q_{\alpha} = 0. \quad (9)$$

c) L'OPÉRATEUR VITESSE DANS LE NOUVEAU POINT DE VUE

Dans le point de vue initial, la vitesse de la particule est représentée par l'opérateur

$$\mathbf{v}_{\alpha} = \frac{1}{m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}_e(0, t)] \quad (10)$$

alors que dans le nouveau point de vue elle est représentée par

$$\mathbf{v}'_{\alpha} = T(t) \mathbf{v}_{\alpha} T^+(t) \quad (11.a)$$

qui est égal d'après (2) et (10) à

$$\mathbf{v}'_{\alpha} = \frac{\mathbf{p}_{\alpha}}{m_{\alpha}}. \quad (11.b)$$

Nous trouvons ainsi dans le nouveau point de vue une relation beaucoup plus simple entre vitesse et impulsion.

2. Hamiltonien dipolaire électrique pour un système localisé de charges couplées au rayonnement quantique

Nous considérons maintenant le champ de rayonnement comme un système quantique ayant sa dynamique propre.

a) ETUDE DE LA TRANSFORMATION UNITAIRE

Si le couplage entre particules et rayonnement fait intervenir de façon prépondérante les modes du rayonnement dont la longueur d'onde est grande devant a , nous pouvons, en première approximation, négliger la contribution des autres modes. L'opérateur $A(\mathbf{r}_\alpha)$

$$A(\mathbf{r}_\alpha) = \sum_j \mathcal{A}_{\omega_j} [a_j \boldsymbol{\varepsilon}_j e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_\alpha} + a_j^\dagger \boldsymbol{\varepsilon}_j e^{-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_\alpha}] \quad (12)$$

peut alors être remplacé par $A(0)$ puisque, pour tous les modes considérés, $|\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_\alpha| \ll 1$. A cette approximation, l'hamiltonien en jauge de Coulomb s'écrit

$$H = \sum_\alpha \frac{1}{2m_\alpha} [\mathbf{p}_\alpha - q_\alpha A(0)]^2 + V_{\text{Coul}} + \sum_j \hbar \omega_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} \right). \quad (13)$$

Un argument similaire à celui présenté au paragraphe 1 suggère alors d'appliquer à (13) la transformation unitaire

$$T = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \sum_\alpha q_\alpha \mathbf{r}_\alpha \cdot A(0) \right] = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{d} \cdot A(0) \right] \quad (14)$$

qui, tout en rappelant l'expression (3), diffère de cette dernière. Dans (14), $A(0)$ est en effet un opérateur champ, indépendant du temps, alors que $A_\alpha(0, t)$ dans (3) était une fonction classique dépendant du temps. Il est d'ailleurs intéressant pour la suite de réexprimer (14) à l'aide des opérateurs a_j et $a_j^\dagger$ en utilisant le développement (12) de $A(0)$. Nous obtenons ainsi

$$T = \exp \left\{ \sum_j (\lambda_j^* a_j - \lambda_j a_j^\dagger) \right\} \quad (15)$$

avec

$$\lambda_j = \frac{i}{\sqrt{2} \varepsilon_0 \hbar \omega_j L^3} \boldsymbol{\varepsilon}_j \cdot \mathbf{d}. \quad (16)$$

b) TRANSFORMATION DES GRANDEURS PHYSIQUES

Considérons d'abord les opérateurs relatifs aux particules. Comme $\mathbf{r}_\alpha$ commute avec T , c'est le même opérateur qui représente la position de la particule dans les deux points de vue. En ce qui concerne la vitesse, l'opé-

rateur $A(0)$ agissant comme un nombre vis-à-vis des particules, nous obtenons de façon identique à (10) et (11)

$$v'_\alpha = T v_\alpha T^+ = \frac{p_\alpha}{m_\alpha} \quad (17)$$

Etudions maintenant les opérateurs relatifs au champ. Notons d'abord que les quantités λ_j , introduites en (16), sont des opérateurs purement atomiques commutant entre eux, qui peuvent donc être considérés comme des nombres vis-à-vis des opérateurs de rayonnement a_j et a_j^+ . L'opérateur T , exprimé sous la forme (15), apparaît alors comme un opérateur de translation pour a_j et a_j^+ (voir les formules (C.61) et (C.66) du chapitre III)

$$\left\{ \begin{array}{l} T a_j T^+ = a_j + \lambda_j \\ T a_j^+ T^+ = a_j^+ + \lambda_j^* \end{array} \right. \quad (18.a)$$

$$\quad (18.b)$$

Nous allons utiliser ces relations pour calculer l'opérateur $E'_\perp(\mathbf{r})$ décrivant le champ électrique transverse dans le nouveau point de vue. Partant de l'expression du champ électrique transverse en jauge de Coulomb.

$$E_\perp(\mathbf{r}) = i \sum_j \mathcal{E}_{\omega_j} [a_j \varepsilon_j e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} - a_j^+ \varepsilon_j e^{-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}}] \quad (19)$$

nous trouvons

$$\begin{aligned} E'_\perp(\mathbf{r}) &= T E_\perp(\mathbf{r}) T^+ \\ &= i \sum_j \mathcal{E}_{\omega_j} [(a_j + \lambda_j) \varepsilon_j e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} - (a_j^+ + \lambda_j^*) \varepsilon_j e^{-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}}] \\ &= E_\perp(\mathbf{r}) - \sum_{\mathbf{k}_j \varepsilon_j} \left[\frac{1}{2 \varepsilon_0 L^3} \varepsilon_j (\varepsilon_j \cdot \mathbf{d}) e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} + c.c. \right] \end{aligned} \quad (20)$$

où $E_\perp(\mathbf{r})$ est l'opérateur mathématique donné en (19). Le dernier terme de (20) sera interprété plus loin. Considérons enfin le champ magnétique. Comme $A(\mathbf{r})$ et $A(\mathbf{r}')$ commutent entre eux pour tout $\mathbf{r}$ et tout $\mathbf{r}'$ (voir relation (A.13) du chap. III), $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$ commute également avec $A(\mathbf{r}')$. Il s'ensuit que $A(\mathbf{r})$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ commutent avec T . En particulier, le champ magnétique reste décrit par le même opérateur dans les deux points de vue

$$\mathbf{B}'(\mathbf{r}) = T \mathbf{B}(\mathbf{r}) T^+ = \mathbf{B}(\mathbf{r}). \quad (21)$$

c) DENSITÉ DE POLARISATION ET INDUCTION ÉLECTRIQUE

Pour interpréter physiquement le dernier terme de (20) et pour identifier la grandeur physique représentée, dans le nouveau point de vue, par l'opérateur mathématique $E_\perp(\mathbf{r})$ donné en (19), il est commode de décrire le

système de charges localisées par une densité de polarisation $\mathbf{P}(\mathbf{r})$, puis d'introduire à partir du champ électrique et de la densité de polarisation $\mathbf{P}(\mathbf{r})$, l'induction électrique $\mathbf{D}(\mathbf{r})$. Pour une discussion plus complète de ce problème (non limitée à l'ordre le plus bas en a/λ , comme nous le faisons ici), le lecteur intéressé pourra se reporter au paragraphe C.1 du chapitre qui peut être étudié indépendamment des autres parties de ce chapitre.

La densité de charge associée au système localisé de charges q_α s'écrit, dans l'espace réel

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \quad (22. a)$$

et dans l'espace réciproque

$$\rho(\mathbf{k}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \sum_{\alpha} q_{\alpha} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}}. \quad (22. b)$$

Comme les charges sont localisées près de l'origine ($|\mathbf{r}_{\alpha}| \lesssim a$) et que nous supposons que le couplage avec le rayonnement fait intervenir essentiellement les modes de grande longueur d'onde ($ka \ll 1$), il est justifié de développer l'exponentielle de (22. b) et de ne garder que le premier terme non nul (calcul d'ordre le plus bas en a/λ). On obtient ainsi, compte tenu de (9) et (4)

$$\rho(\mathbf{k}) = -\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d} \quad (23. a)$$

et par transformée de Fourier

$$\rho(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot [\mathbf{d} \delta(\mathbf{r})]. \quad (23. b)$$

L'expression (23. b) suggère d'introduire la densité de polarisation

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \mathbf{d} \delta(\mathbf{r}) \quad (24. a)$$

correspondant à un dipôle $\mathbf{d}$ localisé en $\mathbf{r} = \mathbf{0}$, ainsi que sa transformée de Fourier spatiale

$$\mathcal{P}(\mathbf{k}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \mathbf{d}. \quad (24. b)$$

L'équation (23. b) s'écrit ainsi

$$\rho(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}). \quad (25)$$

La forme simple de l'équation (25) montre alors que, si l'on introduit l'induction électrique $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ par

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \mathbf{P}(\mathbf{r}), \quad (26)$$

où $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ est le champ électrique total, l'équation de Maxwell $\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho/\epsilon_0$ et l'équation (25) entraînent que

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}) = 0 \quad (27. a)$$

ce qui montre que $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ est un champ transverse. L'équation (27. a) peut encore s'écrire, compte tenu de (26)

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \mathbf{D}_\perp(\mathbf{r}) = \epsilon_0 \mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}) + \mathbf{P}_\perp(\mathbf{r}). \quad (27. b)$$

L'importance de $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ tient au fait que, en dehors de l'origine, $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ est nul (voir (24. a)), de sorte que d'après (26) $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ coïncide avec $\epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r})$. Ainsi, $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ est un champ transverse qui, en dehors du système de charges, coïncide avec le champ électrique total (à un facteur ϵ_0 près). Comme le champ électrique total est purement retardé, il s'ensuit que l'induction électrique est, en dehors de l'atome, un champ transverse retardé.

Revenons maintenant à l'équation (20). En transformant la somme discrète de la dernière ligne en une intégrale nous obtenons

$$-\frac{1}{\epsilon_0} \int d^3k \sum_{\mathbf{r} \perp \mathbf{k}} \frac{1}{(2\pi)^3} \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{d}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (28)$$

La comparaison avec (24. b) montre que (28) n'est autre que la transformée de Fourier de $-\mathcal{P}_\perp(\mathbf{k})/\epsilon_0$, de sorte que l'équation (20) peut s'écrire

$$\mathbf{E}'_\perp(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}) - \frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{P}_\perp(\mathbf{r}). \quad (29)$$

Calculons enfin l'opérateur $\mathbf{D}'(\mathbf{r})$ qui représente l'induction électrique dans le nouveau point de vue. Compte tenu de (27. b), $\mathbf{D}'(\mathbf{r})$ s'écrit

$$\mathbf{D}'(\mathbf{r}) = T\mathbf{D}(\mathbf{r})T^+ = \epsilon_0 T\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r})T^+ + T\mathbf{P}_\perp(\mathbf{r})T^+. \quad (30)$$

En utilisant (19), (20), (29) et le fait que $\mathbf{P}_\perp(\mathbf{r})$ commute avec T , on obtient alors

$$\frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{D}'(\mathbf{r}) = i \sum_j \mathcal{E}_{\omega_j} [a_j \boldsymbol{\varepsilon}_j e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} - a_j^+ \boldsymbol{\varepsilon}_j e^{-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}}]. \quad (31)$$

Il apparaît ainsi que le même opérateur mathématique, à savoir la combinaison linéaire des a_j et a_j^+ figurant au second membre de (31), décrit deux grandeurs physiques différentes suivant la représentation utilisée : le champ électrique transverse dans l'ancienne représentation, l'induction électrique (divisée par ϵ_0) dans la nouvelle. L'avantage du nouveau point de vue est que, comme nous l'avons souligné plus haut, un tel opérateur mathématique décrit un champ transverse qui, en dehors de l'atome, est purement retardé.

d) EXPRESSION DE L'HAMILTONIEN DANS LE NOUVEAU POINT DE VUE

L'hamiltonien H' dans la nouvelle représentation est donné par

$$H' = THT^+ . \quad (32)$$

Dans ce dernier paragraphe, nous allons calculer la transformée par T de l'expression approchée (13) de H . L'interprétation physique des résultats obtenus sera alors dégagée, en attribuant aux opérateurs apparaissant dans l'expression mathématique de H' le sens physique qu'ils ont dans la nouvelle représentation. La transformée du premier terme de (13) est simplement

$$\sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} \quad (33)$$

et représente d'après (17) l'énergie cinétique des particules. Le second terme de (13) est un opérateur atomique qui ne dépend que des positions $\mathbf{r}_{\alpha}$ des particules et est donc inchangé dans la transformation. Il reste donc à calculer la transformée du troisième terme de (13), c'est-à-dire de l'opérateur appelé H_R dans le point de vue initial et qui décrit, dans ce point de vue, l'énergie du champ transverse. En utilisant (18), nous obtenons

$$\begin{aligned} H'_R &= TH_R T^+ = T \sum_j \hbar \omega_j \left(a_j^+ a_j + \frac{1}{2} \right) T^+ \\ &= \sum_j \hbar \omega_j \left[(a_j^+ + \lambda_j^*) (a_j + \lambda_j) + \frac{1}{2} \right] \\ &= H_R + \sum_j \hbar \omega_j (\lambda_j a_j^+ + \lambda_j^* a_j) + \sum_j \hbar \omega_j \lambda_j^* \lambda_j . \end{aligned} \quad (34)$$

En plus de l'opérateur H_R , nous obtenons un opérateur linéaire en λ_j et λ_j^* et un opérateur bilinéaire en λ_j et λ_j^* . Considérons tout d'abord le terme linéaire qui, d'après (16), peut encore s'écrire

$$- \mathbf{d} \cdot \sum_j i \sqrt{\frac{\hbar \omega_j}{2 \epsilon_0 L^3}} (a_j \boldsymbol{\epsilon}_j - a_j^+ \boldsymbol{\epsilon}_j) . \quad (35)$$

Nous obtenons le produit scalaire de $\mathbf{d}$ (qui est égal à $\mathbf{d}'$ puisque $\mathbf{r}'_{\alpha} = \mathbf{r}_{\alpha}$) avec un opérateur coïncidant avec $\mathbf{D}'(0)/\epsilon_0$. L'opérateur mathématique apparaissant dans la formule (35) doit, en effet, être interprété comme étant l'induction électrique (divisé par ϵ_0) puisque nous étudions l'hamiltonien dans le nouveau point de vue. Nous obtenons donc pour le terme de H'_R linéaire en a_j et a_j^+

$$- \mathbf{d} \cdot \frac{\mathbf{D}'(0)}{\epsilon_0} . \quad (36)$$

Considérons finalement le dernier terme de (34). D'après (16), il est égal à

$$\sum_j \hbar \omega_j \lambda_j^* \lambda_j = \sum_{\mathbf{k}, j} \frac{1}{2 \varepsilon_0 L^3} (\boldsymbol{\varepsilon}_j \cdot \mathbf{d})^2. \quad (37)$$

Ce terme ne dépend que de l'opérateur $\mathbf{d}$ (égal à $\mathbf{d}'$). Il représente physiquement une énergie propre dipolaire du système de particules que nous noterons ε_{dip} . L'expression (37) donnant ε_{dip} semble divergente. En fait, il faut limiter la somme aux valeurs de k_j pour lesquelles l'approximation des grandes longueurs d'onde est valable.

En regroupant les différents termes, nous obtenons l'expression suivante pour H'

$$H' = \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha}^2}{2 m_{\alpha}} + V_{\text{Coul}} + \varepsilon_{\text{dip}} + \sum_j \hbar \omega_j \left(a_j^{\dagger} a_j + \frac{1}{2} \right) - \mathbf{d} \cdot \frac{\mathbf{D}'(\mathbf{0})}{\varepsilon_0}. \quad (38)$$

La structure du nouvel hamiltonien H' est très simple. Nous avons d'abord un hamiltonien purement atomique représentant la somme de l'énergie cinétique, de l'énergie coulombienne et de l'énergie propre dipolaire. Puis, nous avons un hamiltonien propre du rayonnement H_R et enfin un hamiltonien d'interaction dipolaire électrique couplant le moment dipolaire du système de charges à l'induction électrique en $\mathbf{0}$. Le fait que le nouvel hamiltonien d'interaction soit purement linéaire en champ, et ne contienne plus, comme l'ancien, de terme quadratique (terme H_{12} introduit dans le paragraphe D.1 du chapitre III) constitue un avantage important du nouveau point de vue.

Remarque

Dans le nouveau point de vue, H_R ne représente plus l'énergie du champ transverse puisque celle-ci est décrite dans la nouvelle représentation par H'_R qui diffère de H_R par les deux derniers termes de (34). Les opérateurs $\mathbf{D}'(\mathbf{r})/\varepsilon_0$ (31) et $\mathbf{B}'(\mathbf{r})$ (21) ayant dans le nouveau point de vue la même expression mathématique que $\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ dans le point de vue initial, nous avons

$$H_R = \frac{1}{2} \int d^3r \left[\frac{\mathbf{D}'^2(\mathbf{r})}{\varepsilon_0} + \frac{\mathbf{B}'^2(\mathbf{r})}{\mu_0} \right] \quad (39)$$

(on a remplacé $\varepsilon_0 c^2$ par $1/\mu_0$).

3. Quelques prolongements

Nous envisageons maintenant deux extensions possibles du traitement précédent.

a) CAS DE DEUX SYSTÈMES SÉPARÉS DE CHARGES

Considérons deux systèmes de charges $\mathcal{S}_A$ et $\mathcal{S}_B$ localisés autour des points $\mathbf{R}_A$ et $\mathbf{R}_B$ bien séparés, chacun des systèmes étant globalement neutre.

La transformation T qui généralise (14) est

$$T = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{d}_A \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}_A) + \mathbf{d}_B \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}_B)] \right\} \quad (40)$$

$\mathbf{d}_A$ et $\mathbf{d}_B$ étant les moments dipolaires des deux systèmes de charges.

L'hamiltonien en jauge de Coulomb décrivant ce système est, à l'approximation des grandes longueurs d'onde, égal à

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{R}_{\alpha})]^2 + \sum_{\beta} \frac{1}{2 m_{\beta}} [\mathbf{p}_{\beta} - q_{\beta} \mathbf{A}(\mathbf{R}_{\beta})]^2 \\ & + V_{\text{Coul}}^{AA} + V_{\text{Coul}}^{BB} + V_{\text{dip dip}}^{AB} \\ & + \sum_i \hbar \omega_i \left(a_i^{\dagger} a_i + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (41)$$

où V_{Coul}^{AA} et V_{Coul}^{BB} sont les énergies coulombiennes des systèmes de charges $\mathcal{S}_A$ et $\mathcal{S}_B$ et où $V_{\text{dip dip}}^{AB}$ est l'énergie d'interaction électrostatique entre les dipôles $\mathbf{d}_A$ et $\mathbf{d}_B$ des deux systèmes de charges.

L'hamiltonien H' dans le nouveau point de vue s'obtient à l'aide de la transformation unitaire (40) et on trouve qu'il est égal à

$$H' = THT^{\dagger}$$

$$\begin{aligned} = & \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha}^2}{2 m_{\alpha}} + V_{\text{Coul}}^{AA} + \varepsilon_{\text{dip}}^A + \sum_{\beta} \frac{\mathbf{p}_{\beta}^2}{2 m_{\beta}} + V_{\text{Coul}}^{BB} + \varepsilon_{\text{dip}}^B \\ & + H_R - \mathbf{d}'_A \cdot \frac{\mathbf{D}'(\mathbf{R}_A)}{\varepsilon_0} - \mathbf{d}'_B \cdot \frac{\mathbf{D}'(\mathbf{R}_B)}{\varepsilon_0}. \end{aligned} \quad (42)$$

La structure du nouvel hamiltonien H' est très simple. Nous avons tout d'abord deux hamiltoniens *purement atomiques* pour $\mathcal{S}_A$ et $\mathcal{S}_B$ représentant, pour chacun de ces deux systèmes, la somme de l'énergie cinétique, de l'énergie coulombienne (à l'intérieur de $\mathcal{S}_A$ ou $\mathcal{S}_B$), et de l'énergie propre dipolaire. Puis nous avons un hamiltonien de rayonnement H_R , et enfin, un *hamiltonien d'interaction dipolaire électrique*, couplant les dipôles de $\mathcal{S}_A$ et $\mathcal{S}_B$ à l'induction électrique en $\mathbf{R}_A$ et $\mathbf{R}_B$. Le point important est qu'il n'y a plus dans (42) de termes d'interaction électrostatique instantanée entre les deux systèmes de charges. Le terme $V_{\text{dip dip}}^{AB}$ a, en fait, été compensé par le terme dipolaire (37) qui contient, outre les termes d'énergie propre $\varepsilon_{\text{dip}}^A$ ou $\varepsilon_{\text{dip}}^B$, des termes croisés faisant intervenir simultanément $\mathbf{d}_A$ et $\mathbf{d}_B$. Les calculs correspondant ne sont pas détaillés ici puisqu'ils sont repris dans le cas général dans le complément C_{IV}. On peut cependant comprendre ce point en notant que le nouvel hamiltonien contient le couplage entre le moment dipolaire électrique $\mathbf{d}'_A$ de $\mathcal{S}_A$ et l'induction électrique totale en $\mathbf{R}_A$, $\mathbf{D}'(\mathbf{R}_A)$, qui inclut en particulier l'induction électrique créée en $\mathbf{R}_A$ par $\mathcal{S}_B$. Or, l'induction créée par $\mathcal{S}_B$ en dehors de $\mathcal{S}_B$ coïncide

avec le champ électrique total créé par $\mathcal{S}_B$ en dehors de $\mathcal{S}_B$. Il s'ensuit que le terme de couplage $-\mathbf{d}'_A \cdot \mathbf{D}'(\mathbf{R}_A)/\epsilon_0$ de (42) contient l'interaction de $\mathcal{S}_A$ avec le champ électrique aussi bien transverse que longitudinal créé par $\mathcal{S}_B$ en $\mathbf{R}_A$.

b) CAS D'UN CHAMP QUANTIQUE COUPLÉ À DES SOURCES CLASSIQUES

Dans le paragraphe 1 ci-dessus, nous avons étudié le couplage d'un système de particules quantiques avec un champ classique. Le problème symétrique, que nous envisageons maintenant, est celui d'un champ quantique interagissant avec des courants classiques. L'hamiltonien en jauge de Coulomb pour un tel système a été donné dans le complément B_{III} (formule (7)); nous le rappelons ici :

$$H = H_R - \int d^3r \mathbf{j}_{cl}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (43)$$

Le courant $\mathbf{j}_{cl}(\mathbf{r}, t)$ est produit par des particules classiques de charge q_α , dont les positions et les vitesses sont décrites par des fonctions classiques $\mathbf{r}_\alpha(t)$ et $\dot{\mathbf{r}}_\alpha(t)$ dont la dépendance en t est donnée

$$\mathbf{j}_{cl}(\mathbf{r}, t) = \sum_\alpha q_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha(t)). \quad (44)$$

Si les charges créant ce courant évoluent au voisinage de l'origine dans un volume d'extension a et si l'on ne considère dans (43) que la dynamique des modes de longueur d'onde grande devant a , il est possible de simplifier l'hamiltonien d'interaction

$$H_I = - \int d^3r \mathbf{j}_{cl}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = - \sum_\alpha q_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha(t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha) \quad (45)$$

en remplaçant $\mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha)$ par sa valeur à l'origine. Nous obtenons ainsi :

$$H_I \simeq - \sum_\alpha q_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha(t) \cdot \mathbf{A}(0) = - \dot{\mathbf{d}}(t) \cdot \mathbf{A}(0) \quad (46)$$

$\mathbf{d}(t)$ étant le moment dipolaire électrique de la distribution de charges égal à $\sum_\alpha q_\alpha \mathbf{r}_\alpha(t)$. Appliquons alors à l'hamiltonien

$$H = H_R - \dot{\mathbf{d}}(t) \cdot \mathbf{A}(0) \quad (47)$$

une transformation unitaire semblable aux transformations étudiées dans les paragraphes 1 et 2 et visant à faire apparaître un terme d'interaction dipolaire électrique. Nous considérons la transformation

$$T = \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \mathbf{d}(t) \cdot \mathbf{A}(0) \right\} \quad (48)$$

analogue à (3) et (14) mais où $\mathbf{d}(t)$ est maintenant une fonction classique

dépendant du temps et $A(0)$ un opérateur agissant sur les variables du rayonnement. L'hamiltonien transformé est donné par la formule (5). Le calcul de $TH_R T^+$ est identique à celui présenté en (34) et donne

$$TH_R T^+ = H_R - \mathbf{d}(t) \cdot \frac{\mathbf{D}'(0)}{\varepsilon_0} + \varepsilon_{\text{dip}} \quad (49)$$

où $\mathbf{D}'(0)/\varepsilon_0$ correspond à l'opérateur mathématique de la formule (31) calculé en $\mathbf{r} = 0$ et où ε_{dip} est maintenant une fonction classique du temps obtenu en remplaçant l'opérateur $\mathbf{d}$ de la formule (37) par la fonction $\mathbf{d}(t)$. $TH_I T^+$ est inchangé puisque H_I commute avec T . Enfin, le terme en $i\hbar(\partial T/\partial t) T^+$ est égal à $\dot{\mathbf{d}}(t) \cdot \mathbf{A}(0)$ et compense donc H_I (voir (46)). Le nouvel hamiltonien est donc

$$H = H_R - \mathbf{d}(t) \cdot \frac{\mathbf{D}'(0)}{\varepsilon_0} + \varepsilon_{\text{dip}}. \quad (50)$$

Le dernier terme est ici une fonction classique du temps et peut éventuellement être omis.

Notons que, tout comme dans le paragraphe 2, $\mathbf{D}'(\mathbf{r})$ représente l'induction électrique. L'interaction entre champ quantique et source classique est donc, dans la nouvelle représentation, proportionnelle au produit du dipôle électrique classique par l'induction électrique au point autour duquel est localisé le dipôle.

COMPLÈMENT B_{IV}

**PROCESSUS A UN OU DEUX PHOTONS :
ÉQUIVALENCE ENTRE LES HAMILTONIENS
D'INTERACTION EN $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ ET $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$**

Nous montrons dans ce complément que les amplitudes de transition, calculées à partir des hamiltoniens d'interaction en $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$, sont identiques pour un processus d'absorption résonnante à un ou deux photons. L'égalité entre les deux amplitudes est vérifiée par un calcul direct des éléments de matrice de l'opérateur d'évolution. Nous considérons ensuite quelques extensions possibles de cette démonstration et montrons en particulier comment les processus non résonnants à un photon se ramènent souvent à des processus résonnants à deux photons. Ceci permet de résoudre plusieurs paradoxes concernant l'équivalence des deux hamiltoniens pour le calcul des formes de raies.

1. Notations. Principe du calcul

Considérons un atome, placé en $\mathbf{R} = \mathbf{0}$, qui interagit avec un paquet d'ondes incident de fréquence centrale ω . Le champ extérieur associé à ce paquet d'ondes est décrit par un potentiel vecteur dont la valeur en $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ est de la forme :

$$\mathbf{A}(\mathbf{0}, t) = A(t) \boldsymbol{\varepsilon}_i = \tilde{A}(t) \cos \omega t \boldsymbol{\varepsilon}_i \quad (1)$$

où $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ est le vecteur polarisation de l'onde et $\tilde{A}(t)$ l'enveloppe de $A(t)$ (voir fig. 1). La durée de passage du paquet d'ondes est caractérisée par un temps T , qui est de l'ordre de la largeur à mi-hauteur de $\tilde{A}(t)$. Nous supposons que le champ oscille un grand nombre de fois pendant le temps T , c'est-à-dire que

$$\omega T \gg 1. \quad (2)$$

Nous nous proposons d'étudier l'absorption résonnante à un ou deux photons induite par un tel champ entre deux niveaux atomiques a et b tels que

$$E_b - E_a = \hbar \omega \quad (3.a)$$

ou

$$E_b - E_a = 2 \hbar \omega. \quad (3.b)$$

Pour cela, considérons l'élément de matrice entre a et b de l'opérateur d'évolution $\langle b | U(t_2, t_1) | a \rangle$, t_1 et t_2 étant des instants respectivement antérieur et postérieur au passage du paquet d'ondes (fig. 1). Il est clair que $\langle b | U(t_2, t_1) | a \rangle$ doit présenter un caractère résonnant pour

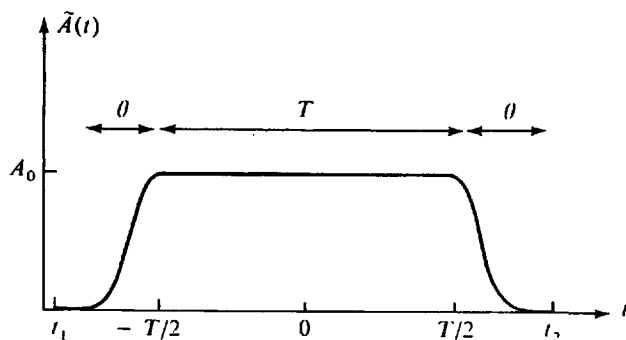


Figure 1. Allure de l'enveloppe $\tilde{A}(t)$ de $A(t)$. Le temps θ de branchement et de coupure du champ incident est supposé petit devant la durée de l'interaction T . Entre $-T/2$ et $+T/2$, $\tilde{A}(t)$ est constant et égal à A_0 . On suppose que T et θ sont très grands devant $1/\omega$.

$\omega_{ba} \simeq \omega$ ou $\omega_{ba} \simeq 2\omega$ (on a posé $\omega_{ba} = (E_b - E_a)/\hbar$). En fait, pour les développements ultérieurs, nous calculerons plutôt la matrice S dont l'élément de matrice S_{ba} est égal à :

$$S_{ba} = \lim_{\substack{t_2 \rightarrow +\infty \\ t_1 \rightarrow -\infty}} \langle b | e^{iH_0 t_2/\hbar} U(t_2, t_1) e^{-iH_0 t_1/\hbar} | a \rangle \quad (4)$$

où H_0 est l'hamiltonien non perturbé (hamiltonien atomique en l'absence de champ incident).

Un tel calcul peut être fait, soit à partir de l'hamiltonien en jauge de Coulomb, soit à partir de l'hamiltonien de Göppert-Mayer (voir la formule (B.33) du chapitre ou la formule (8) du complément A_{IV}). Soit $U'(t_2, t_1)$ l'opérateur d'évolution dans le nouveau point de vue, conduisant à la nouvelle matrice S' . Si nous supposons que $\tilde{A}(t)$ est nul pour $t \leq t_1$ et $t \geq t_2$ (voir fig. 1), les hamiltoniens et les vecteurs d'états coïncident dans les deux points de vue pour $t \leq t_1$ et $t \geq t_2$. Il s'ensuit que la démonstration générale du chapitre (§ B.3.d. α) conduit alors à l'identité :

$$S_{ba} = S'_{ba}. \quad (5)$$

Plutôt que d'utiliser cette démonstration générale, nous allons, dans ce complément, calculer S_{ba} , S'_{ba} et vérifier *directement*, sur les expressions obtenues, l'égalité entre ces deux amplitudes de transition.

2. Calcul des amplitudes de transition dans les deux points de vue

a) HAMILTONIEN D'INTERACTION EN $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$

Considérons tout d'abord le cas d'une transition résonnante à un seul photon, $\omega_{ba} \simeq \omega$. A l'ordre 1 en q , et à l'approximation dipolaire élec-

trique, l'élément de matrice S_{ba} vaut

$$S_{ba} = \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{q}{m} \right) \int_{t_1}^{t_2} d\tau e^{i\omega_{ba}\tau} \langle b | \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}, \tau) | a \rangle \quad (6)$$

Le caractère résonnant de S_{ba} au voisinage de $\omega = \omega_{ba}$ provient du terme en $\exp(-i\omega\tau)$ du $\cos \omega\tau$ apparaissant dans l'expression (1) de $\mathbf{A}(\mathbf{0}, \tau)$. Si l'on néglige la contribution du terme en $\exp(i\omega\tau)$ (qui, au voisinage de $\omega = \omega_{ba}$, est beaucoup plus petite et varie peu), il vient en effet

$$S_{ba} = \frac{1}{i\hbar} M_{ba} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \frac{\tilde{A}(\tau)}{2} e^{i(\omega_{ba} - \omega)\tau} \quad (7.a)$$

où

$$M_{ba} = -\frac{q}{m} \langle b | \varepsilon_i \cdot \mathbf{p} | a \rangle = -\frac{q}{m} (p_i)_{ba}. \quad (7.b)$$

Précisons la valeur de S_{ba} quand $\tilde{A}(t)$ correspond à la courbe représentée sur la figure 1 ($\tilde{A}(t)$ croît de 0 à A_0 sur un intervalle de temps θ , reste constant entre $-T/2$ et $T/2$, puis décroît de A_0 à 0 sur le même intervalle θ). Quand la durée T de l'interaction (que nous supposons très supérieure à θ) devient très grande, l'intégrale en τ de (7. a) tend vers une fonction delta de largeur $1/T$ (que nous notons $\delta^{(T)}$), et l'expression (7. a) s'écrit

$$S_{ba} = \frac{2\pi}{i\hbar} M_{ba} \frac{A_0}{2} \delta^{(T)}(\omega_{ba} - \omega). \quad (7.c)$$

Il apparaît clairement sur (7. c) que S_{ba} n'est important qu'à résonance.

Supposons maintenant que les niveaux a et b ne puissent pas être reliés par une transition à un photon. Par exemple, a et b sont de même parité, de sorte que l'élément de matrice de l'opérateur impair $\varepsilon_i \cdot \mathbf{p}$ entre a et b est nul. Il faut alors calculer S_{ba} à des ordres supérieurs en q . A l'ordre 2, il vient ainsi (la contribution du terme en A^2 étant nulle à l'approximation dipolaire électrique, car proportionnelle à $\langle b | a \rangle$)

$$S_{ba} = \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \left(-\frac{q}{m} \right)^2 \int_{t_1}^{t_2} d\tau \int_{t_1}^{t_2} d\tau' \theta(\tau - \tau') \times \\ \times e^{i\omega_b\tau} \sum_r [\langle b | \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}, \tau) | r \rangle e^{-i\omega_r(\tau - \tau')} \langle r | \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}, \tau') | a \rangle] e^{-i\omega_a\tau'} \quad (8)$$

La somme $\sum_r$ porte sur tous les niveaux intermédiaires $|r\rangle$ qui sont couplés à $|a\rangle$ et à $|b\rangle$ à l'approximation dipolaire électrique. $\theta(\tau - \tau')$ est la fonction de Heaviside qui est nulle quand $\tau < \tau'$ et égale à 1 quand $\tau > \tau'$. On a posé $\omega_i = E_i/\hbar$ ($i = a, b, r$). En ne conservant que les termes

en $\exp(-i\omega\tau)$ et $\exp(-i\omega\tau')$ de $\cos \omega\tau$ et $\cos \omega\tau'$ qui donnent naissance à une résonance en $\omega_{ba} = 2\omega$, nous obtenons alors pour S_{ba}

$$S_{ba} = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \left(-\frac{q}{m}\right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau' \theta(\tau - \tau') e^{i(\omega_{ba} - 2\omega)\tau} \times \\ \times \sum_r (p_i)_{br} (p_i)_{ra} \frac{\tilde{A}(\tau)}{2} \frac{\tilde{A}(\tau')}{2} e^{-i(\omega_{ra} - \omega)(\tau - \tau')} \quad (9)$$

Pour pouvoir intégrer indépendamment sur τ et τ' dans (9), il est commode d'introduire la représentation intégrale suivante :

$$e^{-i(\omega_{ra} - \omega)(\tau - \tau')} \theta(\tau - \tau') = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega \frac{e^{-i\Omega(\tau - \tau')}}{(\Omega - \omega_{ra} + \omega) + i\varepsilon} \quad (10)$$

où ε est un nombre positif infiniment petit. Notons que l'équation (10) peut être vérifiée très simplement en intégrant le second membre par la méthode des résidus. Compte tenu de (10), l'expression (9) devient

$$S_{ba} = \left(\frac{q}{\hbar m}\right)^2 \frac{1}{2\pi i} \sum_r (p_i)_{br} (p_i)_{ra} \times \\ \int \int \int d\Omega d\tau d\tau' \frac{\tilde{A}(\tau) \tilde{A}(\tau')}{4} \times \frac{e^{i(\omega_{ba} - 2\omega - \Omega)\tau} e^{i\Omega\tau'}}{(\Omega - \omega_{ra} + \omega) + i\varepsilon} \quad (11)$$

Transformons enfin l'expression (11) en introduisant la transformée de Fourier $\tilde{\mathcal{A}}(\Omega)$ de $\tilde{A}(t)$ définie par :

$$\tilde{\mathcal{A}}(\Omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{A}(t) e^{i\Omega t} dt \quad (12)$$

Il vient :

$$S_{ba} = \left(\frac{q}{\hbar m}\right)^2 \frac{1}{i} \sum_r (p_i)_{br} (p_i)_{ra} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega \frac{\tilde{\mathcal{A}}(\Omega) \tilde{\mathcal{A}}(\omega_{ba} - 2\omega - \Omega)}{4[(\Omega - \omega_{ra} + \omega) + i\varepsilon]} \quad (13)$$

La fonction $\tilde{\mathcal{A}}(\Omega)$ est centrée autour de $\Omega = 0$. S'il n'y a pas de transition résonnante à un photon ($\omega - \omega_{ra} \neq 0$), et si la largeur de $\tilde{\mathcal{A}}(\Omega)$ est suffisamment étroite, on peut remplacer Ω par 0 au dénominateur de (13) et supprimer le facteur $i\varepsilon$. Si la fonction $\tilde{A}(t)$ a la forme représentée sur la figure 1, la fonction $\tilde{\mathcal{A}}(\Omega)$ comporte un pic de largeur $1/T$ superposé à un fond de largeur $1/\theta$. Pour que les calculs qui suivent soient valables, nous supposons $|\omega - \omega_{ra}| \gg 1/\theta$. En utilisant cette approximation, nous trouvons alors

$$S_{ba} = \frac{1}{i\hbar} \left(\frac{q}{m}\right)^2 \left[\sum_r \frac{(p_i)_{br} (p_i)_{ra}}{\hbar(\omega - \omega_{ra})} \right] \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega \frac{\tilde{\mathcal{A}}(\Omega) \tilde{\mathcal{A}}(\omega_{ba} - 2\omega - \Omega)}{4} \quad (14)$$

Il ne reste plus qu'à utiliser la transformée de Fourier d'un produit de convolution pour obtenir

$$S_{ba} = \frac{1}{i\hbar} Q_{ba} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \left[\frac{\tilde{A}(\tau)}{2} \right]^2 e^{i(\omega_{ba} - 2\omega)\tau} \quad (15.a)$$

avec

$$Q_{ba} = \left(\frac{q}{m} \right)^2 \sum_r \frac{(p_i)_{br} (p_i)_{ra}}{\hbar(\omega - \omega_{ra})}. \quad (15.b)$$

La comparaison de (7.a) et (15.a) montre que, au niveau de l'amplitude de transition, tout se passe comme si l'on avait une perturbation $[\tilde{A}(t)/2]^2 \exp(-2i\omega t)$ couplant les niveaux a et b via tous les niveaux relais r , avec un élément de matrice effectif Q_{ba} donné en (15.b).

En prenant comme enveloppe $\tilde{A}(t)$ la courbe de la figure 1, nous trouvons

$$S_{ba} = \frac{2\pi}{i\hbar} Q_{ba} \left(\frac{A_0}{2} \right)^2 \delta^{(T)}(\omega_{ba} - 2\omega). \quad (15.c)$$

Il apparaît clairement sur cette formule que S_{ba} n'est important qu'à résonance ($\omega_{ba} = 2\omega$). S_{ba} est donc bien une amplitude de transition résonnante à deux photons.

Remarque

La formule (15.a) montre que, dans le cas où il n'y a pas de niveau intermédiaire r qui puisse être excité de façon résonnante à un photon, l'amplitude de transition fait intervenir le carré du potentiel vecteur plutôt que le produit des potentiels vecteurs à deux instants différents. Un tel résultat correspond au fait que, dans ces conditions, l'absorption des deux photons est pratiquement simultanée.

b) HAMILTONIEN D'INTERACTION EN $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$

Pour comparer les résultats obtenus avec les deux hamiltoniens d'interaction en $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$, il faut que $\mathbf{A}(t)$ et $\mathbf{E}(t)$ représentent les mêmes champs physiques. De la forme (1) postulée pour $\mathbf{A}(\mathbf{0}, t)$, nous déduisons :

$$\mathbf{E}(\mathbf{0}, t) = [\tilde{A}(t) \omega \sin \omega t - \dot{\tilde{A}}(t) \cos \omega t] \mathbf{e}_1. \quad (16)$$

Remarque

Il serait a priori plus satisfaisant de partir de la dépendance temporelle du champ électrique, qui est la quantité ayant un sens physique clair, et d'en déduire la dépendance temporelle du potentiel vecteur. Une telle démarche conduirait bien sûr à des résultats équivalents, mais peut soulever une difficulté. Le fait que le champ électrique soit nul pour $t'_1 \leq t_1$ et $t'_2 \geq t_2$ n'assure pas effet que le potentiel vecteur soit également nul dans les mêmes inter-

valles de temps. Puisque $A(t)$ est obtenu par intégration de $E(t)$, $A(t'_2) - A(t'_1)$ peut être égal à une constante non nulle. Il n'est pas alors possible d'annuler l'hamiltonien d'interaction dans le point de vue $A \cdot p$ à la fois pour $t \leq t_1$ et pour $t \geq t_2$. Dans le cas général, ceci n'est évidemment qu'une difficulté formelle. Le champ électrique oscille un très grand nombre de fois entre t_1 et t_2 , et la constante ne dépend en fait que de la contribution d'une fraction de période, dont l'effet relatif devient négligeable lorsque $T \rightarrow \infty$.

Le calcul de l'amplitude S'_{ba} est analogue à celui du paragraphe précédent, l'hamiltonien d'interaction étant désormais égal à $-qr \cdot E$ où E est donné par (16). Notons que E est la somme de deux termes et que le second terme de E est, en ordre de grandeur, égal à $(\tilde{A}(t)/\theta) \cos \omega t$. Il est donc, en moyenne, plus petit que le premier par un facteur $\omega\theta$ et sa contribution dans le calcul de la probabilité d'excitation sera négligeable. A la limite où $T \gg \theta \gg 1/\omega$, nous pouvons donc calquer la démonstration sur celle du paragraphe précédent, en ne retenant que le premier terme de (16). Nous obtenons ainsi, pour les transitions résonnantes à un photon, les expressions

$$S'_{ba} = \frac{2\pi}{i\hbar} M'_{ba} \frac{A_0}{2} \delta^{(T)}(\omega_{ba} - \omega) \quad (17.a)$$

$$M'_{ba} = -i\omega q \langle b | \varepsilon_i \cdot r | a \rangle = -i\omega q (r_i)_{ba} \quad (17.b)$$

qui correspondent à (7.c) et (7.b), et pour les transitions résonnantes à deux photons

$$S'_{ba} = \frac{2\pi}{i\hbar} Q'_{ba} \left(\frac{A_0}{2} \right)^2 \delta^{(T)}(\omega_{ba} - 2\omega) \quad (18.a)$$

$$Q'_{ba} = -\omega^2 q^2 \sum_r \frac{(r_i)_{br} (r_i)_{ra}}{\hbar(\omega - \omega_{ra})} \quad (18.b)$$

qui correspondent à (15.c) et (15.b).

c) VÉRIFICATION DIRECTE DE L'IDENTITÉ ENTRE LES DEUX AMPLITUDES

Nous partons de la relation :

$$(p_i)_{ba} = i\omega_{ba} m(r_i)_{ba} \quad (19)$$

liant les éléments de matrice des opérateurs p et r (voir B.43).

La comparaison de (7.b) et (17.b) montre alors, compte tenu de (19), que

$$M_{ba} = \frac{\omega_{ba}}{\omega} M'_{ba} \quad (20.a)$$

c'est-à-dire que

$$M_{ba} = M'_{ba} \quad \text{si} \quad \omega_{ba} = \omega. \quad (20.b)$$

Les deux amplitudes (7.c) et (17.a) sont donc identiques : en effet, à résonance, l'égalité résulte de la relation (20.b) et hors résonance, les fonctions delta étant égales à 0, l'amplitude de transition est nulle dans les deux points de vue.

Montrons maintenant que les deux amplitudes à deux photons (15.c) et (18.a) sont identiques. Pour cela, il suffit de vérifier que

$$Q_{ba} = Q'_{ba} \quad \text{si} \quad \omega_{ba} = 2\omega. \quad (21)$$

Utilisons pour cela l'identité (19) pour transformer (15.b). Q_{ba} n'est égal à Q'_{ba} que si

$$\sum_r \frac{\omega_{br} \omega_{ra} (r_i)_{br} (r_i)_{ra}}{\omega - \omega_{ra}} = \omega^2 \sum_r \frac{(r_i)_{br} (r_i)_{ra}}{\omega - \omega_{ra}}. \quad (22)$$

Pour démontrer algébriquement la relation (22), introduisons la différence D entre les deux membres de (22) :

$$D = \sum_r \frac{\omega_{br} \omega_{ra} - \omega^2}{\omega - \omega_{ra}} (r_i)_{br} (r_i)_{ra} \quad (23)$$

et montrons que, lorsque $\omega_{ba} = 2\omega$, D est égal à 0. La condition de résonance entraîne que :

$$\omega_{br} = 2\omega - \omega_{ra} \quad (24)$$

et donc :

$$\omega_{br} \omega_{ra} - \omega^2 = -(\omega - \omega_{ra})^2 \quad (25)$$

D , défini en (23), peut donc être transformé en :

$$D = - \sum_r (\omega - \omega_{ra}) (r_i)_{br} (r_i)_{ra}. \quad (26)$$

Considérons maintenant le commutateur $[r_i, p_i] = i\hbar$, et calculons $\langle b | [r_i, p_i] | a \rangle$. Nous trouvons :

$$\sum_r [(r_i)_{br} (p_i)_{ra} - (p_i)_{br} (r_i)_{ra}] = i\hbar \langle b | a \rangle = 0 \quad (27)$$

puisque $|b\rangle$ et $|a\rangle$ correspondent à des états propres distincts de H_0 . Compte tenu de (19), il vient :

$$\sum_r (\omega_{br} - \omega_{ra}) (r_i)_{br} (r_i)_{ra} = 0. \quad (28)$$

En utilisant la condition de résonance à deux photons (24), nous trouvons finalement :

$$\sum_r (\omega - \omega_{ra}) (r_i)_{br} (r_i)_{ra} = 0. \quad (29)$$

La comparaison de (26) et (29) montre donc que $D = 0$, ce qui entraîne que $Q_{ba} = Q'_{ba}$ si $\omega_{ba} = 2\omega$, et donc l'identité des amplitudes S_{ba} donnée en (15.c) et S'_{ba} donnée en (18.a).

Remarques

(i) Dans tout ce qui précède, nous avons calculé uniquement des amplitudes. Pour obtenir la probabilité de transition de a vers b , il faut prendre le carré du module de (7.c) ou (17.a) pour une excitation à un photon, de (15.c) ou (18.a) pour une excitation à deux photons. On trouve alors le carré d'une fonction $\delta^{(T)}(x)$. A des termes en θ/T près, négligeables puisque nous avons supposé $T \gg \theta$, $\delta^{(T)}(x)$ s'écrit

$$\delta^{(T)}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-T/2}^{+T/2} e^{ixt} dt = \frac{1}{\pi} \frac{\sin xT/2}{x}. \quad (30)$$

Nous constatons que $[\delta^{(T)}(x)]^2$ est une fonction valant $T^2/4\pi^2$ au sommet en $x = 0$ et dont la largeur est de l'ordre de $2\pi/T$. La surface de cette courbe étant proportionnelle à T , nous pouvons prévoir qu'aux grandes valeurs de T , $[\delta^{(T)}(x)]^2$ est proportionnel à $T \delta^{(T)}(x)$. Un calcul plus précis mené à partir de (30) donne

$$[\delta^{(T)}(x)]^2 \simeq \frac{T}{2\pi} \delta^{(T)}(x). \quad (31)$$

Il apparaît ainsi qu'au voisinage de la résonance ($\omega_{ba} = \omega$ ou $\omega_{ba} = 2\omega$), la probabilité de transition de a vers b , $|S_{ba}|^2 = |S'_{ba}|^2$, est proportionnelle à la durée T de l'excitation, ce qui permet de définir une probabilité de transition par unité de temps

$$w_{ba} = \frac{|S_{ba}|^2}{T} = \frac{|S'_{ba}|^2}{T}. \quad (32)$$

Pour les transitions résonnantes à un photon, on obtient ainsi compte tenu de (7.c), (17.a) et (31)

$$\begin{aligned} w_{ba} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{A_0}{2} \right)^2 |M_{ba}|^2 \delta^{(T)}(\hbar\omega_{ba} - \hbar\omega) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{A_0}{2} \right)^2 |M'_{ba}|^2 \delta^{(T)}(\hbar\omega_{ba} - \hbar\omega) \end{aligned} \quad (33)$$

(où l'on a remplacé $\delta^{(T)}(\omega_{ba} - \omega)$ par $\hbar \delta^{(T)}(\hbar\omega_{ba} - \hbar\omega)$) et pour les transitions résonnantes à deux photons, compte tenu de (15.c), (18.a) et (31)

$$\begin{aligned} w_{ba} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{A_0}{2} \right)^4 |Q_{ba}|^2 \delta^{(T)}(\hbar\omega_{ba} - 2\hbar\omega) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{A_0}{2} \right)^4 |Q'_{ba}|^2 \delta^{(T)}(\hbar\omega_{ba} - 2\hbar\omega). \end{aligned} \quad (34)$$

Les résultats (33) et (34) ont une forme analogue à celle de la « règle d'or de Fermi ».

(ii) Dans la pratique, il est évidemment exceptionnel que l'on puisse effectuer la sommation sur tous les niveaux relais dans les séries (15. b) et (18. b). Il est donc utile de savoir quelle formule donnera la meilleure approximation de la réalité quand la sommation est limitée à quelques niveaux relais. Dans le cas d'une transition à deux photons entre deux niveaux liés, la formule déduite de l'hamiltonien d'interaction $-qr \cdot E$ donnera le plus souvent la meilleure approximation si on se limite aux niveaux relais essentiels. Cela tient au fait que le rapport entre deux termes correspondant au même niveau relais et déduits respectivement des hamiltoniens $A \cdot p$ et $E \cdot r$ est $(\omega_{br} \omega_{ra})/\omega^2$. Tous les niveaux relais situés au-dessus des niveaux $|a\rangle$ et $|b\rangle$ (voir fig. 2)

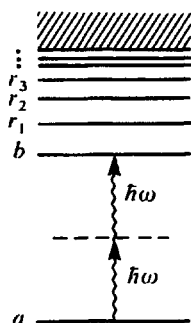


Figure 2. Transitions à deux photons entre les niveaux a et b .
Les niveaux non résonnants $r_1, r_2, \dots$ servent de relais.

auront une contribution plus importante dans la série correspondant à l'hamiltonien $A \cdot p$ que dans celle correspondant à $E \cdot r$. Comme les deux sommes sont égales, il s'ensuit que la convergence de la première série est généralement plus lente que celle de la seconde. Un exemple classique est celui de la transition $1s - 2s$ de l'atome d'hydrogène (*). Si on se limite au seul niveau relais $2p$ dans la somme, on obtient un résultat nul avec $A \cdot p$, alors qu'avec $E \cdot r$, le terme obtenu diffère de moins de 50 % du résultat exact. Si la somme porte sur les trois premiers niveaux p ($2p, 3p, 4p$), on obtient avec $E \cdot r$ un résultat qui diffère de moins de 20 % du résultat exact, alors qu'avec $A \cdot p$ cette somme est trois fois plus petite que le résultat exact (voir exercice 2).

(iii) L'égalité entre les amplitudes de transition à résonance suppose bien entendu que l'on utilise des fonctions d'onde exactes pour les niveaux $|a\rangle$ et $|b\rangle$. Il est clair que si l'on utilise des fonctions d'onde approchées, des résultats différents peuvent être obtenus dans un point de vue et dans l'autre. Il est possible que l'un des hamiltoniens d'interaction soit mieux adapté aux approximations faites sur les fonctions d'onde et conduise ainsi à des résultats plus précis.

(*) La contribution de chaque niveau relais dans les approches $A \cdot p$ et $E \cdot r$ a été étudiée par F. Bassani, J. J. Forney et A. Quattropani (*Phys. Rev. Lett.* **39**, 1070 (1977)).

3. Généralisations

a) EXTENSION À D'AUTRES PROCESSUS

Les démonstrations précédentes peuvent être étendues à d'autres processus, par exemple des absorptions résonnantes à deux photons, où l'atome interagit avec deux champs électromagnétiques de fréquences ω_1 et ω_2 différentes, la condition de résonance devenant $\omega_{ba} = \omega_1 + \omega_2$. Il apparaît dans ce cas deux types d'amplitudes correspondant à des ordres temporels différents pour les deux interactions, d'abord avec le champ ω_1 puis avec le champ ω_2 , ou l'ordre inverse. C'est uniquement quand ces deux ordres sont pris en compte que les prédictions des points de vue $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$ coïncident.

D'autres exemples importants de processus à deux photons, sont les processus de *diffusion* : un photon incident ω disparaît et un photon nouveau ω' apparaît, l'atome passant du niveau a au niveau a' . La condition de résonance s'écrit alors $E_a + \hbar\omega = E_{a'} + \hbar\omega'$. L'exercice 7 propose une vérification directe de l'égalité entre les deux amplitudes de transition, en utilisant l'expression générale de ces amplitudes donnée par les expressions (D. 3), (D. 4) et (D. 12) du chapitre.

D'autres processus impliquant plus de deux photons peuvent être également envisagés.

b) PROCESSUS NON RÉSONNANTS

L'identité entre les éléments de matrice de transition M_{ba} et M'_{ba} donnés par (7. b) et (17. b) pour les transitions à un photon, Q_{ba} et Q'_{ba} donnés par (15. b) et (18. b) pour les transitions à deux photons, et calculés à partir des hamiltoniens $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$, n'est valable qu'à *résonance*. La démonstration directe du paragraphe 2 ci-dessus repose en effet sur l'utilisation de l'équation (19) et des conditions de résonance (3. a) ou (3. b) qui expriment la conservation de l'énergie. Rappelons également que le raisonnement général de la partie D conclut à l'identité des matrices de transition sur la couche d'énergie.

Que se passe-t-il alors hors résonance ? On peut très bien imaginer par exemple qu'un atome est excité à partir d'un état a par un photon $\hbar\omega$ qui n'a pas tout à fait la bonne énergie $\hbar\omega_{ba}$ pour le porter dans un état excité b . Si les états a et b sont stables, la probabilité de transition par unité de temps (33) est nulle lorsque $\omega \neq \omega_{ba}$ à cause de la fonction delta. Si le niveau b est instable et a une largeur Γ , il peut être tentant de généraliser (33) en remplaçant la fonction de Dirac $\delta^{(T)}(\hbar\omega_{ba} - \hbar\omega)$ par une lorentzienne de largeur $\hbar\Gamma$. Cependant, une telle démarche conduit immédiatement à une difficulté puisque les éléments de matrice M_{ba} et M'_{ba} ne sont pas égaux quand $\omega \neq \omega_{ba}$ (voir équation (20. a)). Les deux lignes de (33) ne sont alors plus égales. Peut-on envisager hors résonance, des probabilités d'excitation non identiques dans les deux points de vue ?

La réponse à une telle question est évidemment négative. L'utilisation de la matrice S pour calculer le taux de transition suppose implicitement que la durée d'interaction avec le champ électromagnétique a été assez longue pour que la définition de sa fréquence soit meilleure que Γ . Cela entraîne donc que la durée du processus a été plus longue que la durée de vie du niveau b . Il n'est donc pas correct dans ce cas de calculer la probabilité de transition vers le niveau b , puisque ce dernier s'est désintégré vers d'autres états, par exemple par émission spontanée. Le processus réel est donc, non pas une transition à un photon vers l'état instable b , mais un processus à deux photons de diffusion Rayleigh (Fig. 3 α) ou Raman (Fig. 3 β), l'atome aboutissant dans un état final stable a' (*).

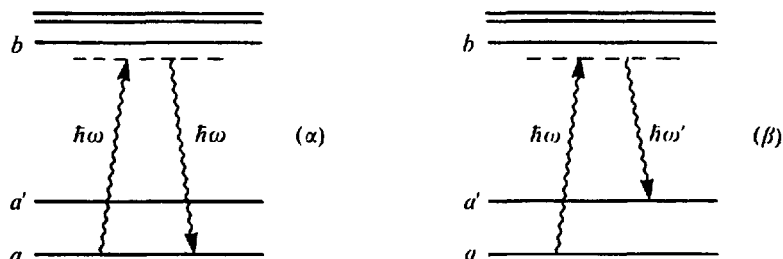


Figure 3. Excitation non résonnante. Dans le processus complet, le photon incident $\hbar\omega$ disparaît, et un nouveau photon apparaît, de même fréquence (diffusion Rayleigh, Fig. 3 α), ou de fréquence différente (diffusion Raman, Fig. 3 β).

En cherchant à définir de manière précise, expérimentale, l'absorption d'un photon non résonnant, nous sommes ainsi conduits tout naturellement à substituer au processus non résonnant à un photon, un processus à deux photons conservant l'énergie, pour lequel nous savons que la probabilité de transition est identique dans les points de vue $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$. Il serait incorrect dans cet exemple de calculer les amplitudes non résonnantes à un photon, car l'état « final » apparaissant dans ces amplitudes (atome dans l'état excité b) n'est pas un véritable état final mais un état intermédiaire. Il convient de noter également que les amplitudes associées aux processus des figures 3 α et 3 β comportent une sommation sur *tous* les états intermédiaires b . Même si un niveau excité particulier est très proche de résonance, le fait de négliger les autres conduirait à des prédictions incorrectes et différentes dans les deux points de vue. Le processus non résonnant n'étant qu'une étape dans un processus résonnant d'ordre plus élevé, il n'est pas possible de préciser avec certitude par quel niveau intermédiaire l'atome est passé et, seule la somme sur tous les « chemins » possibles a un sens physique.

(*) Un problème analogue est analysé par G. Grynberg et E. Giacobino, *J. Phys. B* **12**, L 93 (1979) et par Y. Aharanov et C. K. Au *Phys. Rev.*, **A 20**, 1553 (1979).

Un autre exemple important, qui a fait l'objet de nombreuses études, est celui de la *forme de raie* de la transition $2s_{1/2} - 2p_{1/2}$ de l'hydrogène (*). Rappelons brièvement la situation expérimentale. Des atomes d'hydrogène, initialement dans le niveau métastable $2s_{1/2}$, sont soumis à un champ microonde de fréquence ω voisine de celle, ω_0 , de la transition $2s_{1/2} - 2p_{1/2}$. La résonance microonde est détectée sur les photons Lyman α émis spontanément sur la transition $2p_{1/2} - 1s_{1/2}$. Telle que nous venons de la décrire, l'expérience ne semble concerner que les états $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$. Un calcul limité à ces deux états ne donne pas cependant le même résultat (dans les deux points de vue $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$) pour la forme de raie, c'est-à-dire pour les variations de la probabilité de transition $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ en fonction de $\omega - \omega_0$. Une telle anomalie est due au fait que l'état $2p_{1/2}$ n'est pas un véritable état final, mais un état intermédiaire *parmi d'autres*, dans un processus résonnant à deux photons, émission induite d'un photon ω , émission spontanée d'un photon ω' (de fréquence proche de celle de Lyman α) avec $\hbar\omega + \hbar\omega' = E(2s_{1/2}) - E(1s_{1/2})$ (voir Fig. 4). Même si le niveau $2p_{1/2}$ semble avoir une importance prépondérante dans le processus d'émission à deux photons, il est incorrect de négliger la contribution des autres niveaux intermédiaires np (**).

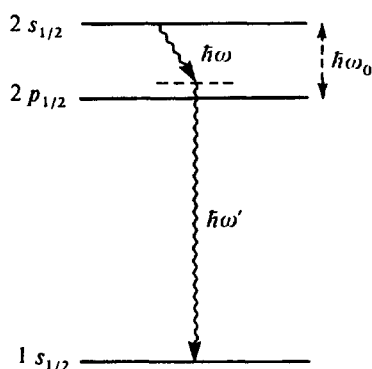


Figure 4. Transition non résonnante entre les états $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ (transition de Lamb). L'émission stimulée du photon microonde $\hbar\omega$ est accompagnée de l'émission spontanée du photon ultraviolet $\hbar\omega'$.

(*) Ce problème a été soulevé par W. E. Lamb., *Phys. Rev.*, **85**, 259 (1952).

(**) Voir Z. Fried, *Phys. Rev.*, **A 8**, 2835 (1973).

COMPLÉMENT C_{IV}INTERACTION ENTRE DEUX SYSTÈMES LOCALISÉS
DE CHARGES DANS LE POINT DE VUE DE
POWER-ZIENAU-WOOLLEY

La transformation de Power-Zienau-Woolley a été présentée au chapitre IV dans le cas où toutes les charges sont repérées par rapport à un même point de référence pris pour origine des coordonnées. La généralisation au cas de deux sous-systèmes $\mathcal{S}_A$ et $\mathcal{S}_B$, séparés spatialement et localisés autour de deux points différents $\mathbf{R}_A$ et $\mathbf{R}_B$, ne présente pas de difficultés. Nous donnons, dans ce complément, l'expression de l'hamiltonien de Power-Zienau-Woolley pour un tel système, dans l'hypothèse où $\mathcal{S}_A$ et $\mathcal{S}_B$ sont chacun globalement neutres. La motivation essentielle de ce complément est de montrer que, dans le nouvel hamiltonien, tous les termes d'interaction instantanée entre particules de $\mathcal{S}_A$ et particules de $\mathcal{S}_B$ ont disparu. Les deux systèmes $\mathcal{S}_A$ et $\mathcal{S}_B$ interagissent uniquement via des champs retardés qui sont l'induction électrique et le champ magnétique.

1. Notations

Les charges du système $\mathcal{S}_A$, repérées par l'indice α , sont regroupées autour du point $\mathbf{R}_A$; leur écart par rapport à ce point est noté s_α :

$$\mathbf{s}_\alpha = \mathbf{r}_\alpha - \mathbf{R}_A. \quad (1)$$

De façon analogue, les charges du système $\mathcal{S}_B$, repérées par l'indice β , sont confinées autour de $\mathbf{R}_B$ et leur écart par rapport à ce point est noté s_β :

$$\mathbf{s}_\beta = \mathbf{r}_\beta - \mathbf{R}_B. \quad (2)$$

La répartition des charges du système $\mathcal{S}_A$ peut être décrite par sa charge totale en $\mathbf{R}_A$, que nous avons d'ailleurs supposée nulle, et par la densité de polarisation :

$$\mathbf{P}_A(\mathbf{r}) = \sum_\alpha \int_0^1 du q_\alpha s_\alpha \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A - u \mathbf{s}_\alpha) \quad (3)$$

formule qui généralise (C.2). Le champ électrique longitudinal créé par $\mathcal{S}_A$ est donné par (C.11) :

$$\mathbf{E}_{A\parallel}(\mathbf{r}) = - \frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{P}_A(\mathbf{r}). \quad (4)$$

Des formules analogues peuvent être écrites pour la polarisation $\mathbf{P}_B(\mathbf{r})$ du système $\mathcal{S}_B$ et pour le champ électrique longitudinal créé par $\mathcal{S}_B$.

La densité de polarisation totale $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ est la somme des polarisations relatives à $\mathcal{S}_A$ et $\mathcal{S}_B$:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \mathbf{P}_A(\mathbf{r}) + \mathbf{P}_B(\mathbf{r}). \quad (5)$$

De la même façon, la densité de magnétisation totale est la somme des contributions des systèmes $\mathcal{S}_A$ et $\mathcal{S}_B$:

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \mathbf{M}_A(\mathbf{r}) + \mathbf{M}_B(\mathbf{r}). \quad (6)$$

2. Expression de l'hamiltonien

Dans la partie C du chapitre, nous avons obtenu le lagrangien de Power-Zienau-Woolley (C.26) en ajoutant dF/dt au lagrangien en jauge de Coulomb, F étant égal à (C.20) :

$$F = - \int d^3r \mathbf{P}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Dans le cas envisagé ici de deux systèmes localisés de charges, il faut utiliser la même transformation, mais $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ est maintenant la polarisation totale donnée en (5). Tous les résultats obtenus dans la partie C demeurent donc valables à condition de remplacer $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ par leurs expressions (5) et (6). Nous obtenons en particulier, pour l'hamiltonien, l'expression suivante qui généralise (C.37) :

$$\begin{aligned} H_{L'} = & \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} \left[\mathbf{p}_{\alpha L'} - \int_0^1 u du q_{\alpha} \mathbf{B}(\mathbf{R}_A + u \mathbf{s}_{\alpha}) \times \mathbf{s}_{\alpha} \right]^2 + \\ & + \sum_{\beta} \frac{1}{2 m_{\beta}} \left[\mathbf{p}_{\beta L'} - \int_0^1 u du q_{\beta} \mathbf{B}(\mathbf{R}_B + u \mathbf{s}_{\beta}) \times \mathbf{s}_{\beta} \right]^2 + \\ & + \int d^3k \left[\frac{|\pi_{L'} + \mathcal{P}_{\perp A} + \mathcal{P}_{\perp B}|^2}{\epsilon_0} + \epsilon_0 c^2 k^2 |\mathcal{M}|^2 \right] + \sum_{\alpha} e_{\text{Coul}}^{\alpha} + \sum_{\beta} e_{\text{Coul}}^{\beta} + \\ & + \sum_{\alpha < \alpha'} \frac{q_{\alpha} q_{\alpha'}}{4 \pi \epsilon_0 |\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\alpha'}|} + \sum_{\beta < \beta'} \frac{q_{\beta} q_{\beta'}}{4 \pi \epsilon_0 |\mathbf{r}_{\beta} - \mathbf{r}_{\beta'}|} + \sum_{\alpha, \beta} \frac{q_{\alpha} q_{\beta}}{4 \pi \epsilon_0 |\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}|}. \quad (8) \end{aligned}$$

Les différents termes de $H_{L'}$ peuvent être regroupés sous la forme suivante :

$$H_{L'} = H_{RL'} + H_{IL'}^A + H_{IL'}^B + H_{PL'}^A + H_{PL'}^B + V^{AB} \quad (9)$$

$H_{RL'}$ est identique à l'hamiltonien donné par la formule (C.39). $H_{IL'}^A$ et $H_{IL'}^B$ sont les transcriptions, pour chacun des systèmes $\mathcal{S}_A$ et $\mathcal{S}_B$, de l'hamiltonien d'interaction (C.40). De même, $H_{PL'}^A$ et $H_{PL'}^B$ sont les hamiltoniens respectifs des particules de $\mathcal{S}_A$ et des particules de $\mathcal{S}_B$, donnés par des expressions analogues à (C.38). Le seul terme nouveau est V^{AB} qui vaut :

$$V^{AB} = \frac{1}{2 \epsilon_0} \int d^3k [\mathcal{P}_{\perp A} \cdot \mathcal{P}_{\perp B}^* + \mathcal{P}_{\perp A}^* \cdot \mathcal{P}_{\perp B}] + \sum_{\alpha, \beta} \frac{q_{\alpha} q_{\beta}}{4 \pi \epsilon_0 |\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}|}. \quad (10)$$

C'est la somme d'un terme d'énergie propre de la polarisation transverse et de l'énergie d'interaction coulombienne V_{Coul}^{AB} entre les charges du système $\mathcal{S}_A$ et celles du système $\mathcal{S}_B$.

Nous allons maintenant montrer que V^{AB} est identiquement nul. Pour cela, notons que le dernier terme de (10) peut s'écrire :

$$\begin{aligned} V_{\text{Coul}}^{AB} &= V_{\text{Coul}}^{\text{Tot}} - V_{\text{Coul}}^{AA} - V_{\text{Coul}}^{BB} \\ &= \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3r [(\mathbf{E}_{\parallel A} + \mathbf{E}_{\parallel B})^2 - \mathbf{E}_{\parallel A}^2 - \mathbf{E}_{\parallel B}^2] \\ &= \varepsilon_0 \int d^3r \mathbf{E}_{\parallel A} \cdot \mathbf{E}_{\parallel B}. \end{aligned} \quad (11)$$

En utilisant (4) et l'expression analogue pour $\mathbf{E}_{\parallel B}$, nous obtenons finalement :

$$V_{\text{Coul}}^{AB} = \frac{1}{\varepsilon_0} \int d^3r \mathbf{P}_{\parallel A} \cdot \mathbf{P}_{\parallel B} \quad (12)$$

de sorte que l'expression (10) peut se réécrire dans l'espace réel :

$$\begin{aligned} V^{AB} &= \frac{1}{\varepsilon_0} \int d^3r [\mathbf{P}_{\perp A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{P}_{\perp B}(\mathbf{r}) + \mathbf{P}_{\parallel A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{P}_{\parallel B}(\mathbf{r})] \\ &= \frac{1}{\varepsilon_0} \int d^3r \mathbf{P}_A(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{P}_B(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (13)$$

Comme $\mathbf{P}_A(\mathbf{r})$ est rigoureusement nul en dehors du système de charges $\mathcal{S}_A$, et $\mathbf{P}_B(\mathbf{r})$ en dehors de $\mathcal{S}_B$, nous en déduisons que V^{AB} se réduit à un terme de contact, nul dès que la distance $|\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B|$ est supérieure à la somme des rayons des systèmes de charges. Ainsi, dans le nouveau point de vue, il n'y a plus d'interaction de Coulomb instantanée entre deux systèmes de charges séparés et globalement neutres. L'interaction entre ces deux systèmes se fait uniquement via les champs $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{\Pi}_L(\mathbf{r})$ qui se propagent tous deux à la vitesse finie c . (Rappelons que, en dehors des systèmes de charges, $\mathbf{\Pi}_L$ coïncide, au facteur $-\varepsilon_0$ près, avec le champ électrique total.)

Remarque

Les résultats précédents peuvent être généralisés au cas où les systèmes de charges $\mathcal{S}_A$ et $\mathcal{S}_B$ ne sont pas globalement neutres : il faut alors ajouter à V^{AB} l'énergie de la densité de polarisation $\mathbf{P}_A$ de $\mathcal{S}_A$ dans le champ statique produit par la distribution de référence ρ_{0B} de $\mathcal{S}_B$ et le terme symétrique, ainsi que l'énergie coulombienne d'interaction entre les distributions de référence ρ_{0A} et ρ_{0B} .

COMPLÉMENT D_{IV}TRANSFORMATION DE POWER-ZIENAU-WOOLLEY
ET JAUGE DE POINCARÉ

Nous montrons dans ce complément que, lorsque la polarisation du système de charges est définie par rapport à un seul centre de référence, la transformation de Power-Zienau-Woolley se ramène à un changement de jauge faisant passer de la jauge de Coulomb ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$) à une autre jauge, la jauge de Poincaré, dans laquelle $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ est orthogonal à $\mathbf{r}$ en tout point $\mathbf{r}$. En outre, dans cette jauge, $\mathbf{A}$ et U s'expriment de façon simple en fonction des champs $\mathbf{B}$ et $\mathbf{E}$. Les formules donnant $\mathbf{A}$ et U généralisent les expressions $\mathbf{A} = \mathbf{B}_0 \times \mathbf{r}/2$ et $U = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_0$ valables pour des champs statiques et uniformes $\mathbf{B}_0$ et $\mathbf{E}_0$.

1. La transformation de Power-Zienau-Woolley considérée comme un changement de jauge (*)

Dans une transformation de jauge définie par une fonction $\chi(\mathbf{r}, t)$, les potentiels deviennent :

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla \chi(\mathbf{r}, t) \quad (1.a)$$

$$U'(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{r}, t). \quad (1.b)$$

Le lagrangien est lui aussi transformé et devient (voir B. 11) :

$$L' = L + \frac{d}{dt} \left[\sum_{\alpha} q_{\alpha} \chi(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \right]. \quad (2)$$

Nous savons par ailleurs que le lagrangien de Power-Zienau-Woolley se déduit du lagrangien standard en jauge de Coulomb, L , par la transformation (**) (voir (C. 20) et (C. 22)) :

$$L' = L - \frac{d}{dt} \int d^3\mathbf{r} \mathbf{P}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}). \quad (3)$$

En utilisant la relation (C. 2) donnant $\mathbf{P}(\mathbf{r})$, nous obtenons :

$$L' = L - \frac{d}{dt} \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int_0^1 du \mathbf{r}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha} u). \quad (4)$$

(*) R. G. Woolley, *J. Phys.*, B 7, 488 (1974). M. Babiker et R. Loudon, *Proc. Roy. Soc.*, A 385, 439 (1983).

(**) Nous utilisons de nouveau la notation $\mathbf{A}_{\perp}$ car, dans la jauge de Poincaré, $\mathbf{A}'$ n'est plus transverse.

Il apparaît alors clairement que les équations (2) et (4) peuvent être identifiées si l'on choisit la fonction $\chi(\mathbf{r}, t)$ suivante :

$$\chi(\mathbf{r}, t) = - \int_0^1 d\mathbf{u} \, \mathbf{r} \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{ru}) . \quad (5)$$

(La dépendance en t de la fonction $\chi(\mathbf{r}, t)$ est associée aux variations temporelles des variables dynamiques $\mathbf{A}_\perp(\mathbf{r})$.) Notons bien que, pour trouver la fonction de jauge (5), nous avons utilisé la définition (C.2) de la polarisation valable pour un système de charges repérées par rapport à un seul point de référence, pris comme origine des coordonnées. Dans le cas où le système de charges comprend plusieurs sous-systèmes localisés autour de plusieurs points différents $\mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B, \dots$ (ce qui est, par exemple, la situation du complément C_{IV}), la démonstration précédente ne peut pas être généralisée. En effet, la formule qui généralise (C.2) est alors :

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\mathbf{r}) = & \sum_\alpha \int_0^1 d\mathbf{u} \, q_\alpha(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{R}_A) \delta[\mathbf{r} - \mathbf{R}_A - \mathbf{u}(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{R}_A)] + \\ & + \sum_\beta \int_0^1 d\mathbf{u} \, q_\beta(\mathbf{r}_\beta - \mathbf{R}_B) \delta[\mathbf{r} - \mathbf{R}_B - \mathbf{u}(\mathbf{r}_\beta - \mathbf{R}_B)] + \dots \quad (6) \end{aligned}$$

où l'indice α désigne les particules localisées autour de $\mathbf{R}_A$ et l'indice β celles localisées autour de $\mathbf{R}_B$. Quand on reporte (6) dans (3), on constate, à cause de la multiplicité des points de référence, que l'identification entre (3) et (2) n'est plus possible. La transformation de Power-Zienau-Woolley ne se réduit donc à un changement de jauge que si toutes les charges sont repérées par rapport à un seul point de référence. Nous n'envisageons que cette situation dans la suite du complément.

2. Propriétés du potentiel vecteur dans la nouvelle jauge

Dans la nouvelle jauge, le potentiel vecteur n'est plus transverse puisque nous trouvons, en utilisant (1.a) et (5), l'expression suivante pour $\mathbf{A}'_\parallel$:

$$\mathbf{A}'_\parallel(\mathbf{r}) = - \nabla \int_0^1 d\mathbf{u} \, \mathbf{r} \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{ru}) . \quad (7.a)$$

La partie transverse $\mathbf{A}_\perp$ de $\mathbf{A}'$ reste inchangée :

$$\mathbf{A}'_\perp(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}) . \quad (7.b)$$

Calculons le produit scalaire de $\mathbf{r}$ et de $\mathbf{A}'$:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} \cdot \mathbf{A}'(\mathbf{r}) &= \mathbf{r} \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}) + \mathbf{r} \cdot \mathbf{A}'_\parallel(\mathbf{r}) \\ &= \mathbf{r} \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}) - \int_0^1 d\mathbf{u} (\mathbf{r} \cdot \nabla) (\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{ru})) . \quad (8) \end{aligned}$$

Pour transformer (8), utilisons l'identité :

$$u \frac{\partial}{\partial u} f(\mathbf{ru}) = (\mathbf{r} \cdot \nabla) f(\mathbf{ru}) \quad (9)$$

qui permet de réécrire (8) sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathbf{r} \cdot \mathbf{A}'(\mathbf{r}) &= \mathbf{r} \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}) - \int_0^1 du \frac{1}{u} (\mathbf{r} \cdot \nabla) (\mathbf{ru} \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{ru})) \\ &= \mathbf{r} \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}) - \int_0^1 du \frac{\partial}{\partial u} [\mathbf{ru} \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{ru})] . \end{aligned} \quad (10)$$

L'intégrale de la formule (10) se calcule immédiatement. Sa valeur $(-\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}))$ annule exactement le premier terme de (10) de sorte que :

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}'(\mathbf{r}) = 0 . \quad (11)$$

Il apparaît ainsi que le nouveau potentiel vecteur est perpendiculaire en tout point au rayon vecteur $\mathbf{r}$. La nouvelle jauge, appelée jauge de Poincaré (*), apparaît en quelque sorte comme symétrique de la jauge de Coulomb : dans l'une, $\mathbf{A}(\mathbf{k})$ est perpendiculaire à $\mathbf{k}$ en tout point $\mathbf{k}$, dans l'autre, $\mathbf{A}'(\mathbf{r})$ est perpendiculaire à $\mathbf{r}$ en tout point $\mathbf{r}$.

3. Les potentiels dans la jauge de Poincaré

Un intérêt majeur de la jauge de Poincaré est que les potentiels s'expriment simplement en fonction des champs magnétique $\mathbf{B}$ et électrique $\mathbf{E}$. Nous allons en effet montrer que :

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}) = - \int_0^1 u \, du \, \mathbf{r} \times \mathbf{B}(\mathbf{ru}) \quad (12.a)$$

$$U'(\mathbf{r}) = - \int_0^1 du \, \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{ru}) . \quad (12.b)$$

Il est d'ores et déjà intéressant de constater que ces potentiels généralisent les potentiels bien connus d'un champ magnétique uniforme $\mathbf{A}_0 = -\mathbf{r} \times \mathbf{B}_0/2$ et d'un champ électrique uniforme $U_0 = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_0$. Il est clair également que (12.a) vérifie bien la relation d'orthogonalité (11) entre $\mathbf{A}'$ et $\mathbf{r}$.

Détaillons maintenant les calculs permettant de trouver les formules (12) à partir de (1) et (5). Considérons tout d'abord le potentiel scalaire. Dans la jauge de Coulomb, nous avons :

$$\mathbf{E}_\parallel(\mathbf{r}) = -\nabla U(\mathbf{r}) \quad (13)$$

(*) B. S. Skagerstam, *Am. J. Phys.*, **51**, 1148 (1983).

$U(\mathbf{r})$ peut donc être obtenu comme étant, à une constante globale près, la circulation de $-\mathbf{E}_{\parallel}$ sur la droite joignant l'origine O au point $\mathbf{r}$

$$U(\mathbf{r}) = - \int_0^1 d(\mathbf{ru}) \cdot \mathbf{E}_{\parallel}(\mathbf{ru}). \quad (14)$$

En utilisant (1.b), (5), (14) et le fait que $\mathbf{E}_{\perp} = -\dot{\mathbf{A}}_{\perp}$, nous obtenons :

$$\begin{aligned} U'(\mathbf{r}) &= - \int_0^1 du \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_{\parallel}(\mathbf{ru}) - \int_0^1 du \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{ru}) \\ &= - \int_0^1 du \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{ru}). \end{aligned} \quad (15)$$

Etudions maintenant le potentiel vecteur et calculons tout d'abord le gradient de χ qui apparaît dans l'expression (1.a) de $\mathbf{A}'$:

$$\begin{aligned} \nabla \chi(\mathbf{r}) &= - \nabla \int_0^1 du \mathbf{r} \cdot \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{ru}) \\ &= - \int_0^1 du \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{ru}) - \sum_i \int_0^1 du r_i \nabla A_{\perp i}(\mathbf{ru}). \end{aligned} \quad (16)$$

L'intégration par parties du premier terme de (16) donne :

$$\begin{aligned} - \int_0^1 du \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{ru}) &= - u \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{ru}) \Big|_0^1 + \int_0^1 du u \frac{\partial}{\partial u} \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{ru}) \\ &= - \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}) + \int_0^1 du (\mathbf{r} \cdot \nabla) \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{ru}) \end{aligned} \quad (17)$$

le second terme de (17) ayant été obtenu à l'aide de l'égalité (9). Exprimons $\mathbf{A}'$ à l'aide de (1.a), (16) et (17). Le premier terme de (17) annule le premier terme de (1.a). Il reste :

$$\begin{aligned} \mathbf{A}'(\mathbf{r}) &= \int_0^1 du \left[(\mathbf{r} \cdot \nabla) \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{ru}) - \sum_i r_i \nabla A_{\perp i}(\mathbf{ru}) \right] \\ &= - \int_0^1 du \mathbf{r} \times (\nabla \times \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{ru})). \end{aligned} \quad (18)$$

Il suffit alors de noter que :

$$\nabla_{\mathbf{r}} \times \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{ru}) = u \nabla_{\mathbf{ru}} \times \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{ru}) = u \mathbf{B}(\mathbf{ru}) \quad (19)$$

pour obtenir finalement :

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}) = - \int_0^1 u \, du \, \mathbf{r} \times \mathbf{B}(u\mathbf{r}) \quad (20)$$

qui coïncide bien avec la formule annoncée en (12. a).

Remarque

Il est possible de vérifier directement sur les équations (12) que :

$$\nabla \times \mathbf{A}'(\mathbf{r}) = \mathbf{B}(\mathbf{r}) \quad (21. a)$$

$$- \nabla U'(\mathbf{r}) - \dot{\mathbf{A}}'(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) . \quad (21. b)$$

Les champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ dérivent donc bien des potentiels $\mathbf{A}'$ et U' . De plus, il est évident sur (12. a) que $\mathbf{A}'(\mathbf{r})$ est perpendiculaire à $\mathbf{r}$ en tout point $\mathbf{r}$. Montrons que cette dernière condition définit de manière unique la jauge de Poincaré (à une constante globale près). Supposons en effet qu'une autre jauge $\{\mathbf{A}'', U''\}$, reliée à la première $\{\mathbf{A}', U'\}$ par la fonction χ' , possède la même propriété. La relation $\mathbf{A}'' = \mathbf{A}' + \nabla \chi'$ jointe à $\mathbf{A}'' \cdot \mathbf{r} = 0$ et $\mathbf{A}' \cdot \mathbf{r} = 0$ entraîne que :

$$\mathbf{r} \cdot \nabla \chi' = 0 \quad (22)$$

ce qui donne, en coordonnées sphériques :

$$\frac{\partial \chi'}{\partial r} = 0 . \quad (23)$$

La fonction χ' en un point quelconque de l'espace est donc égale à sa valeur à l'origine des coordonnées. Elle se réduit à une constante.

COMPLÉMENT E_{IV}

EXERCICES

- Exercice 1 Exemple d'effet produit par un branchement soudain du potentiel vecteur
- Exercice 2 Excitation à deux photons de l'atome d'hydrogène : calculs approchés faits à partir des hamiltoniens en $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$
- Exercice 3 Hamiltonien dipolaire électrique pour un ion couplé à un champ extérieur
- Exercice 4 Diffusion d'une particule par un potentiel en présence d'un rayonnement laser
- Exercice 5 Equivalence entre les hamiltoniens d'interaction en $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et $\mathbf{Z} \cdot (\nabla V)$ pour le calcul des amplitudes de transition
- Exercice 6 Réponse linéaire et susceptibilité ; application au calcul du rayonnement d'un dipôle
- Exercice 7 Diffusion non résonnante : vérification directe de l'égalité des amplitudes de transition calculées dans les points de vue $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$

1. EXEMPLE D'EFFET PRODUIT PAR UN BRANCHEMENT SOUDAIN DU POTENTIEL VECTEUR

On considère un atome placé en $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ dont les niveaux $|a\rangle, |b\rangle, \dots$ ont pour énergie $E_a, E_b, \dots$

a) Cet atome interagit avec un champ dont le potentiel vecteur en $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ est

$$\mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) = \tilde{A}(t) \mathbf{e}_z \cos \omega t \quad (1)$$

avec :

$$\tilde{A}(t) = 0 \quad \text{pour } t \leq -T/2 \text{ ou } t \geq T/2$$

$$\tilde{A}(t) = A_0 \quad \text{pour } -T/2 < t < T/2.$$

Calculer l'amplitude de transition de $|a\rangle$ vers $|b\rangle$, $U_{ba}(T'/2, -T'/2)$, au premier ordre en champ, en utilisant l'hamiltonien $-(q/m) \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)$. (On prendra $T' > T$.)

b) On suppose maintenant que l'atome interagit avec le champ électrique

$$\mathbf{E}'_e(\mathbf{0}, t) = \omega \tilde{A}(t) \mathbf{e}_z \sin \omega t. \quad (2)$$

Calculer l'amplitude de transition $U'_{ba}(T'/2, -T'/2)$, au premier ordre en champ, en utilisant l'hamiltonien $-qr \cdot \mathbf{E}_e(\mathbf{0}, t)$.

c) Montrer qu'à l'instant $t = -T'/2$, le ket $|a\rangle$ représente le même état physique dans les deux points de vue. Montrer que cette même propriété reste vraie pour le ket $|b\rangle$ à l'instant $T'/2$. Comparer les amplitudes de transition calculées en a) et b). Pourquoi différent-elles quand $\omega \neq \omega_{ba}$?

Solution

a) En appliquant la théorie des perturbations dépendant du temps au premier ordre, nous trouvons en représentation d'interaction

$$\begin{aligned} U_{ba}\left(\frac{T'}{2}, -\frac{T'}{2}\right) &= \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{q}{m}\right) \langle b | p_z | a \rangle A_0 \int_{-T/2}^{T/2} dt e^{i\omega_{ba}t} \cos \omega t \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{q}{m}\right) \langle b | p_z | a \rangle A_0 \left(\frac{\sin(\omega_{ba} - \omega) T/2}{(\omega_{ba} - \omega)} + \frac{\sin(\omega_{ba} + \omega) T/2}{(\omega_{ba} + \omega)} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

b) En procédant de la même façon avec l'hamiltonien $-qr \cdot \mathbf{E}'_e(\mathbf{0}, t)$, nous trouvons

$$\begin{aligned} U'_{ba}\left(\frac{T'}{2}, -\frac{T'}{2}\right) &= \frac{1}{i\hbar} (-q) \langle b | z | a \rangle \omega A_0 \int_{-T/2}^{T/2} dt e^{i\omega_{ba}t} \sin \omega t \\ &= -\frac{q}{\hbar} \langle b | z | a \rangle \omega A_0 \left(\frac{\sin(\omega_{ba} - \omega) T/2}{(\omega_{ba} - \omega)} - \frac{\sin(\omega_{ba} + \omega) T/2}{(\omega_{ba} + \omega)} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

c) Aux instants $-T'/2$ et $T'/2$, le potentiel vecteur $\mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)$ est nul. L'opérateur $\mathbf{p}/m$ représente alors la grandeur physique vitesse et l'hamiltonien des particules est associé à la même grandeur physique (la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle) dans les points de vue $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$. Il s'ensuit que $|a\rangle$ et $|b\rangle$ représentent les mêmes états physiques dans les deux points de vue à $-T'/2$ et $T'/2$. Si $\mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)$ et $\mathbf{E}'_e(\mathbf{0}, t)$ correspondaient au même champ physique, les amplitudes de transition $U_{ba}(T'/2, -T'/2)$ et $U'_{ba}(T'/2, -T'/2)$ devraient être identiques, quel que soit ω , d'après (A.47).

Or, si nous transformons (3) en utilisant la relation (B.43) reliant les éléments de matrice de p_z à ceux de z , nous trouvons

$$U_{ba}\left(\frac{T'}{2}, -\frac{T'}{2}\right) = -\frac{q}{\hbar} \langle b | z | a \rangle \omega_{ba} A_0 \left(\frac{\sin(\omega_{ba} - \omega) T/2}{(\omega_{ba} - \omega)} + \frac{\sin(\omega_{ba} + \omega) T/2}{(\omega_{ba} + \omega)} \right) \quad (5)$$

qui ne coïncide manifestement pas avec (4) lorsque $\omega_{ba} \neq \omega$. Cette différence provient du fait que $\mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)$ et $\mathbf{E}'_e(\mathbf{0}, t)$ ne représentent pas le même champ. Plus précisément

$$\mathbf{E}'_e(\mathbf{0}, t) \neq -\dot{\mathbf{A}}_e(\mathbf{0}, t). \quad (6)$$

La différence entre $-\dot{\mathbf{A}}_e$ et $\mathbf{E}'_e$ provient des discontinuités de $\mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)$ à $-T/2$ et $T/2$ qui introduisent dans $\mathbf{A}_e$ des fonctions $\delta(t + T/2)$ et $\delta(t - T/2)$. Le champ $\mathbf{E}_e(\mathbf{0}, t)$ associé à $\mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)$ s'écrit

$$\mathbf{E}_e(\mathbf{0}, t) = \mathbf{E}'_e(\mathbf{0}, t) + A_0 \mathbf{e}_z (\delta(t - T/2) - \delta(t + T/2)) \cos \omega T/2. \quad (7)$$

Le second terme de (7) donne une contribution $U''_{ba}(T'/2, -T'/2)$ à l'amplitude de transition, égale au premier ordre à :

$$\begin{aligned} U''_{ba}\left(\frac{T'}{2}, -\frac{T'}{2}\right) &= \frac{1}{i\hbar} (-q) \langle b | z | a \rangle A_0 \left(2i \sin \omega_{ba} \frac{T}{2} \right) \cos \frac{\omega T}{2} \\ &= -\frac{q}{\hbar} \langle b | z | a \rangle A_0 [\sin(\omega_{ba} - \omega) T/2 + \sin(\omega_{ba} + \omega) T/2] \end{aligned} \quad (8)$$

que l'on peut encore écrire

$$U''_{ba}\left(\frac{T'}{2}, -\frac{T'}{2}\right) = -\frac{q}{\hbar} \langle b | z | a \rangle A_0 \left[\frac{\omega_{ba} - \omega}{\omega_{ba} - \omega} \sin(\omega_{ba} - \omega) T/2 + \right. \\ \left. + \frac{\omega_{ba} + \omega}{\omega_{ba} + \omega} \sin(\omega_{ba} + \omega) T/2 \right]. \quad (9)$$

En additionnant (4) et (9), on trouve un résultat identique à (5). Ceci montre bien que l'amplitude de transition est la même dans les deux points de vue, à résonance et hors résonance, à condition que A_e et E_e correspondent au même champ physique.

2. EXCITATION À DEUX PHOTONS DE L'ATOME D'HYDROGÈNE : CALCULS APPROCHÉS FAITS À PARTIR DES HAMILTONIENS EN $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ ET $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$

Le but de l'exercice est de comparer diverses approximations utilisées dans le calcul de la probabilité d'excitation à deux photons du niveau métastable $2s$ de l'atome d'hydrogène à partir du niveau fondamental $1s$.

On rappelle que lorsqu'un atome interagit avec une onde incidente de fréquence ω , il peut être excité d'un niveau $|a\rangle$ à un niveau $|b\rangle$ lorsque $E_b - E_a = 2\hbar\omega$. L'amplitude de transition est proportionnelle à un élément de matrice effectif dont l'expression, dans le cas d'une onde polarisée le long de l'axe Oz , est :

$$Q_{ba} = -q^2 \sum_r \omega_{br} \omega_{ra} \frac{\langle b | z | r \rangle \langle r | z | a \rangle}{\hbar(\omega - \omega_{ra})} \quad (1.a)$$

dans le point de vue $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$, et

$$Q'_{ba} = -q^2 \omega^2 \sum_r \frac{\langle b | z | r \rangle \langle r | z | a \rangle}{\hbar(\omega - \omega_{ra})} \quad (1.b)$$

dans le point de vue $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$ (voir complément B_{IV}, § 2). Les valeurs de Q_{ba} et Q'_{ba} sont égales quand on somme sur tous les niveaux relais $|r\rangle$, mais peuvent différer si la somme est limitée à un nombre fini de niveaux relais. Il est alors important de savoir lequel des résultats est le plus proche du résultat exact.

a) Montrer que les seuls états discrets qui contribuent aux sommes (1.a) et (1.b) dans le cas de la transition $1s - 2s$, sont les états np , $m = 0$ (on négligera le spin de l'électron).

b) Evaluer la contribution de l'état discret np , $m = 0$ aux sommes (1.a) et (1.b). On écrira cette contribution sous la forme

$$-q^2 \frac{\omega^2}{3 E_i} a_0^2 J_n \quad (2)$$

pour la somme (2.a) et une expression analogue où J_n est remplacé par J'_n pour la somme (2.b) (a_0 étant le rayon de Bohr et E_i l'énergie d'ionisa-

tion de l'atome d'hydrogène). On exprimera les quantités sans dimension J'_n et J_n en fonction de n et des intégrales radiales

$$\int dr r^3 R_{n'l}(r) R_{n'l}(r) = a_0 R_{n'l}'' \quad (3)$$

faisant intervenir les fonctions d'ondes radiales de l'atome d'hydrogène (voir la fin de l'énoncé).

c) Comparer les valeurs approchées obtenues pour Q_{ba} et Q'_{ba} en ne tenant compte que d'un seul état relais, l'état $2p$, ou de deux états relais $2p$ et $3p$. Comparer ces diverses valeurs approchées à la valeur exacte tenant compte de tous les états relais du spectre discret et continu (*)

$$Q_{ba} = Q'_{ba} = -q^2 \frac{\omega^2}{3 E_I} a_0^2 \times (11,8). \quad (4)$$

d) Une approximation fréquemment utilisée pour calculer des sommes de la forme (1.a) ou (1.b) consiste à remplacer tous les dénominateurs d'énergie $\hbar(\omega - \omega_{ra})$ par un seul que l'on notera $x E_I$ où x est une quantité sans dimension. Montrer que Q'_{ba} et Q_{ba} sont alors respectivement proportionnels à $\langle 2s | r^2 | 1s \rangle$ et $\langle 2s | p^2 | 1s \rangle$.

On prend $x = -0,5$. Ce choix vous semble-t-il raisonnable ? Calculer alors Q_{ba} et Q'_{ba} et comparer les résultats obtenus au résultat exact.

Données sur l'atome d'hydrogène

— Energie d'un état nlm : $E_n = -E_I/n^2$

— Quelques fonctions d'onde radiales

$$R_{10}(r) = 2(a_0)^{-3/2} e^{-r/a_0} \quad (5.a)$$

$$R_{20}(r) = 2(2 a_0)^{-3/2} (1 - (r/2 a_0)) e^{-r/2a_0}. \quad (5.b)$$

— Quelques intégrales radiales (**)

$$R_{10}^{n1} = 2^4 n^{7/2} \frac{(n-1)^{n-(5/2)}}{(n+1)^{n+(5/2)}} \quad (6.a)$$

$$R_{20}^{n1} = 2^8 n^{7/2} \sqrt{2(n^2-1)} \frac{(n-2)^{n-3}}{(n+2)^{n+3}} \quad \text{pour } n \neq 2 \quad (6.b)$$

$$R_{20}^{21} = -3\sqrt{3}. \quad (6.c)$$

(*) F. Bassani, J. J. Forney et A. Quattropani, *Phys. Rev. Lett.*, **39**, 1070 (1977).

(**) H. A. Bethe et E. E. Salpeter *Quantum mechanics of one and two electron atoms*, (§ 63), Springer-Verlag (1957).

Solution

a) L'opérateur vectoriel r ne peut coupler un niveau s ($l = 0$) qu'à un niveau p ($l = 1$). Les niveaux r des sommes (1.a) et (1.b) sont donc nécessairement des niveaux p . Le calcul de l'élément de matrice $\langle r | z | a \rangle$ se décompose en un produit d'une intégrale radiale et d'une intégrale angulaire qui est différente de 0 seulement pour $m = 0$. Plus précisément, dans le cas d'un niveau relais discret

$$\begin{aligned} \langle r | z | a \rangle &= \int r^2 dr d\Omega R_{n1}(r) Y_1^m(\theta, \varphi) r \cos \theta R_{10}(r) Y_0^0(\theta, \varphi) \\ &= \int dr r^3 R_{n1}(r) R_{10}(r) \int d\Omega Y_1^m(\theta, \varphi) \cos \theta Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{R_{10}^{n1} a_0}{\sqrt{3}} \delta_{m,0}. \end{aligned} \quad (7)$$

De façon identique, nous trouvons

$$\langle b | z | r \rangle = \frac{R_{20}^{n1} a_0}{\sqrt{3}} \delta_{m,0}. \quad (8)$$

b) La contribution d'un niveau relais à la somme (1.b) est

$$Q'_{ba}(r) = -q^2 \omega^2 \frac{\langle b | z | r \rangle \langle r | z | a \rangle}{\hbar(\omega - \omega_{ra})}. \quad (9)$$

Le produit des éléments de matrice se calcule à partir de (7) et (8). Pour calculer le dénominateur d'énergie, rappelons la condition de résonance à deux photons

$$2 \hbar \omega = -\frac{E_I}{4} + E_I = \frac{3}{4} E_I \quad (10)$$

d'où $\hbar \omega = 3 E_I/8$. Comme $\hbar \omega_{ra} = -(E_I/n^2) + E_I$, nous pouvons réécrire (9) sous la forme

$$Q'_{ba}(r) = -q^2 \omega^2 \frac{a_0^2}{3 E_I} \frac{R_{10}^{n1} R_{20}^{n1}}{\left(-\frac{5}{8} + \frac{1}{n^2}\right)}. \quad (11)$$

En identifiant cette expression avec la formule (2) de l'énoncé, nous obtenons

$$J'_n = \frac{R_{10}^{n1} R_{20}^{n1}}{-\frac{5}{8} + \frac{1}{n^2}}. \quad (12)$$

Entre un élément de la somme (1.b) et l'élément correspondant de la somme (1.a), il y a un facteur multiplicatif ($\omega_{br} \omega_{ra}/\omega^2$). Les relations $E_n = -E_I/n^2$ et $\hbar \omega = 3 E_I/8$ permettent de calculer ce facteur

$$\frac{\omega_{br} \omega_{ra}}{\omega^2} = \frac{E_I^2}{\hbar^2 \omega^2} \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right) \left(\frac{1}{n^2} - 1\right) = -\left(\frac{8}{3}\right)^2 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right) \left(1 - \frac{1}{n^2}\right) \quad (13)$$

et d'obtenir

$$J_n = -J'_n \left(\frac{8}{3}\right)^2 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right) \left(1 - \frac{1}{n^2}\right). \quad (14)$$

c) Pour calculer J_n et J'_n (n valant 2 ou 3), nous calculons les intégrales radiales nécessaires en utilisant (6.a) et (6.b). Nous trouvons $R_{10}^{21} = 1,29$, $R_{10}^{31} = 0,52$ et $R_{20}^{31} = 3,06$, R_{20}^{21} étant donné par (6.c). En portant ces valeurs dans (12) et (14), nous trouvons $J'_2 = 17,9$, $J'_3 = -3,1$ alors que $J_2 = 0$ et $J_3 = 2,7$.

Nous avons dans le tableau suivant rassemblé ces résultats ainsi que ceux obtenus en ajoutant la contribution d'autres niveaux relais np afin d'éclairer la discussion.

Tableau. — Etude de la contribution des niveaux relais à l'amplitude de transition à 2 photons entre les niveaux 1s et 2s.

	Point de vue A · p	Point de vue E · r
Résultat exact (incluant les niveaux du continuum)	11,8	11,8
1 niveau relais 2p	0	17,9
2 niveaux relais 2p, 3p	2,7	14,8
3 niveaux relais 2p, 3p, 4p	3,6	14,1
10 niveaux relais discrets 2p, 3p, ..., 11p	4,5	13,5

Il apparaît clairement sur ce tableau que, si on se limite à une somme partielle, les résultats les plus satisfaisants sont obtenus dans le point de vue E · r. Par exemple, $J'_2 + J'_3$ ne diffère du résultat exact que d'environ 25 %. Notons que dans le point de vue E · r, la contribution du niveau 2p a un signe opposé à celle des niveaux plus excités. Dans ce point de vue, la somme sur tous les niveaux discrets est égale à 13,4, la contribution du continuum étant égale à - 1,6.

Dans le point de vue A · p, la sommation sur deux niveaux relais conduit à un résultat très médiocre, différant du résultat exact par presque un ordre de grandeur. Même si l'on tient compte de tous les niveaux discrets, le résultat obtenu (4.7) est encore très différent du résultat exact. Cela tient à la contribution du continuum (7.1) qui est prédominante dans ce point de vue à cause du facteur $\omega_{br} \omega_{ra} \omega^2$ qui favorise les niveaux très excités et entraîne une convergence beaucoup plus lente de la sommation sur les niveaux relais.

d) Lorsque tous les dénominateurs d'énergie sont remplacés par $x E_I$, Q'_{ba} devient

$$\begin{aligned} Q'_{ba} &\simeq -\frac{q^2 \omega^2}{x E_I} \sum_r \langle b | z | r \rangle \langle r | z | a \rangle \\ &= -\frac{q^2 \omega^2}{x E_I} \langle b | z^2 | a \rangle = -\left(\frac{q^2 \omega^2}{3 E_I} \right) \frac{\langle b | r^2 | a \rangle}{x} \end{aligned} \quad (15)$$

puisque les niveaux $|b\rangle$ et $|a\rangle$ sont des états s et donc invariants par rotation.

Pour utiliser de façon analogue la relation de fermeture dans le cas de Q_{ba} , il suffit d'exprimer l'élément de matrice $\langle r | z | a \rangle$ en fonction de $\langle r | p_z | a \rangle$ à l'aide de (B.43). Nous trouvons alors

$$\begin{aligned} Q_{ba} &= \frac{q^2}{m^2} \sum_r \frac{\langle b | p_z | r \rangle \langle r | p_z | a \rangle}{\hbar(\omega - \omega_{ra})} \\ &\simeq \frac{q^2}{m^2 x E_I} \sum_r \langle b | p_z | r \rangle \langle r | p_z | a \rangle = \frac{q^2}{3 m^2 x E_I} \langle b | p^2 | a \rangle \end{aligned} \quad (16)$$

ou encore

$$Q_{ba} \simeq \left(\frac{q^2}{3 E_I} \right) \frac{2 q^2}{4 \pi \epsilon_0 m x} \left\langle b \left| \frac{1}{r} \right| a \right\rangle = \left(\frac{q^2}{3 E_I} \right) \frac{2 \alpha^2 c^2 a_0}{x} \left\langle b \left| \frac{1}{r} \right| a \right\rangle \quad (17)$$

puisque l'élément de matrice de $H_0 = (p^2/2m) - (q^2/4 \pi \epsilon_0 r)$ est nul entre les états orthogonaux 1s et 2s.

Pour les niveaux relais discrets, les dénominateurs d'énergie varient entre $-3 E_I/8$ pour $n = 2$ et $-5 E_I/8$ pour $n = \infty$, la valeur $-0,5 E_I$ semble donc un compromis raisonnable.

Notons cependant que cette approximation entraîne une surévaluation de la contribution des niveaux relais du continuum pour lesquels les dénominateurs d'énergie sont en module plus grands que $5 E_I/8$ (et a fortiori que $0,5 E_I$).

En prenant $x = -0,5$ et en utilisant les fonctions d'onde radiales (5. a) et (5. b), nous trouvons à partir de (15) et (17)

$$Q'_{ba} \simeq -q^2 \frac{\omega^2}{3 E_I} a_0^2 \times (6,0) \quad (18. a)$$

$$Q_{ba} \simeq -q^2 \frac{\omega^2}{3 E_I} a_0^2 \times (23,8). \quad (18. b)$$

Si on compare ces résultats approchés au résultat exact (4), on constate que l'amplitude obtenue dans le point de vue $E \cdot r$ est deux fois trop petite alors qu'elle est deux fois trop grande dans le point de vue $A \cdot p$. Dans les deux cas, l'utilisation d'un dénominateur d'énergie unique augmente la contribution des niveaux relais les plus excités (et en particulier ceux du continuum). Dans le point de vue $E \cdot r$, la contribution de ces niveaux a un signe opposé à la contribution prédominante du niveau $2p$. Il est donc normal que le résultat obtenu dans cette approximation soit plus petit que le résultat exact. En revanche, dans le point de vue $A \cdot p$, les contributions étant de même signe, on surestime le résultat en prenant un dénominateur d'énergie unique égal à $0,5 E_I$ (il est bien sûr possible, connaissant le résultat exact, d'améliorer le résultat approché en changeant le dénominateur, mais le choix, a priori, d'un dénominateur deux fois plus grand ou deux fois plus petit n'est nullement évident).

En conclusion, pour le problème précis étudié dans cet exercice, la meilleure des approximations envisagées consiste à faire le calcul dans le point de vue $E \cdot r$ en retenant les premiers niveaux intermédiaires discrets.

3. HAMILTONIEN DIPOLAIRE ÉLECTRIQUE POUR UN ION COUPLÉ À UN CHAMP EXTÉRIEUR

Le but de cet exercice est de montrer que, si un système localisé de charges couplées à un champ extérieur n'est pas globalement neutre (cas d'un ion), des termes nouveaux apparaissent dans l'hamiltonien dipolaire électrique qui peut être utilisé pour décrire un tel système. Ces termes décrivent le couplage du mouvement de la charge globale de l'ion avec le champ extérieur.

Les diverses particules α de charge q_α et de masse m_α formant un ion de charge totale

$$Q = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \quad (1)$$

sont localisées autour du centre de masse

$$\mathbf{R} = \frac{1}{M} \sum_{\alpha} m_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \quad (2. a); \quad M = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \quad (2. b)$$

de cet ion dans un volume d'extension spatiale a . Cet ion interagit avec un champ extérieur décrit par le potentiel vecteur $\mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t)$. L'approximation des grandes longueurs d'onde ($\lambda \gg a$) consiste à remplacer $\mathbf{A}_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t)$ par $\mathbf{A}_e(\mathbf{R}, t)$ dans l'hamiltonien de l'ion qui s'écrit alors

$$H(t) = \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{R}, t)]^2 + V_{\text{Coul}}. \quad (3)$$

a) On considère la transformation unitaire

$$T(t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha} q_{\alpha} (\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{R}) \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{R}, t) \right\} = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{d} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{R}, t) \right] \quad (4)$$

où

$$\mathbf{d} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} (\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{R}) \quad (5)$$

est le moment dipolaire électrique de l'ion par rapport au centre de masse. Calculer $T(t) \mathbf{p}_{\alpha} T^+(t)$. On tiendra compte du fait que $\mathbf{R}$ dépend de $\mathbf{r}_{\alpha}$ dans $T(t)$, mais on négligera les dérivées spatiales de $\mathbf{A}_e(\mathbf{R}, t)$ qui introduisent des corrections d'ordre supérieur en a/λ .

b) Calculer l'hamiltonien $H'(t)$ qui décrit l'évolution temporelle dans le nouveau point de vue. Quelle est l'interprétation physique des termes nouveaux qui apparaissent par rapport au cas d'un système globalement neutre ($Q = 0$) ?

Solution

a) Les formules (4) et (5) généralisent les expressions (3) et (4) du complément A_{IV}. Au lieu d'être repérées par rapport à un point fixe, pris pour origine des coordonnées, les diverses charges q_{α} sont repérées maintenant par rapport au centre de masse $\mathbf{R}$. Comme $\mathbf{R}$ figure dans l'expression (4) de $T(t)$ et que $\mathbf{R}$ dépend, d'après (2.a), des $\mathbf{r}_{\alpha}$ qui ne commutent pas avec $\mathbf{p}_{\alpha}$, la formule (2) du complément A_{IV} n'est plus valable et doit être remplacée par

$$\begin{aligned} T(t) \mathbf{p}_{\alpha} T^+(t) &= \mathbf{p}_{\alpha} + T(t) \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}_{\alpha}} T^+(t) \\ &= \mathbf{p}_{\alpha} + q_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{R}, t) - \sum_{\alpha'} q_{\alpha'} \frac{m_{\alpha}}{M} \mathbf{A}_e(\mathbf{R}, t) \\ &= \mathbf{p}_{\alpha} + q_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{R}, t) - \frac{Q}{M} m_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{R}, t). \end{aligned} \quad (6)$$

Nous avons utilisé (1) et négligé les termes provenant de $\nabla_{\mathbf{r}_{\alpha}} \mathbf{A}_e(\mathbf{R}, t)$, qui sont d'un ordre supérieur en a/λ .

b) L'hamiltonien qui décrit l'évolution temporelle dans le nouveau point de vue est égal à

$$H'(t) = T(t) H(t) T^+(t) + i\hbar \left[\frac{dT(t)}{dt} \right] T^+(t). \quad (7)$$

Les équations (3) et (6) donnent

$$\begin{aligned} T(t) H(t) T^+(t) &= \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} \left[\mathbf{p}_{\alpha} - \frac{Q}{M} m_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{R}, t) \right]^2 + V_{\text{Coul}} \\ &= \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha}^2}{2 m_{\alpha}} + V_{\text{Coul}} - \frac{Q}{M} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{R}, t) + \frac{Q^2}{2 M} \mathbf{A}_e^2(\mathbf{R}, t) \end{aligned} \quad (8)$$

où

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha} \quad (9)$$

est l'impulsion totale du système de charges. Quant au dernier terme de (7), un calcul analogue à celui du complément A_{IV} donne, compte tenu de (5)

$$i\hbar \left[\frac{dT(t)}{dt} \right] T^+(t) = \sum_{\alpha} q_{\alpha} (\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{R}) \cdot \dot{\mathbf{A}}_e(\mathbf{R}, t) = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_e(\mathbf{R}, t). \quad (10)$$

Finalement, en ajoutant (8) et (10), on obtient

$$H'(t) = \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + V_{\text{Coul}} - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_e(\mathbf{R}, t) - \frac{Q}{M} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{R}, t) + \frac{Q^2}{2M} A_e^2(\mathbf{R}, t). \quad (11)$$

Les deux derniers termes de (11) sont nouveaux par rapport à l'expression (8) de A_{IV} . Ils n'existent que pour un ion et s'annulent si $Q = 0$. Ils ne dépendent que des variables $\mathbf{R}$, $\mathbf{P}$ du centre de masse. Ils décrivent l'interaction avec le champ extérieur $\mathbf{A}_e$ d'une particule fictive de masse M , de charge Q , de position $\mathbf{R}$, d'impulsion $\mathbf{P}$.

4. DIFFUSION D'UNE PARTICULE PAR UN POTENTIEL EN PRÉSENCE D'UN RAYONNEMENT LASER

Une particule chargée, diffusée par un potentiel statique $V(\mathbf{r})$ et interagissant simultanément avec un rayonnement laser, peut absorber (ou émettre de manière stimulée) plusieurs photons laser au cours du processus de diffusion. Le but de cet exercice est de montrer comment la transformation de Henneberger permet de calculer simplement de tels processus à l'ordre le plus bas en $V(\mathbf{r})$ (*).

Une particule de charge q , de masse m , interagit d'une part avec un potentiel statique $V(\mathbf{r})$, localisé près de l'origine, et d'autre part avec un rayonnement incident monochromatique considéré comme un champ extérieur. Ce dernier est décrit par le potentiel vecteur $\mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t)$ (le potentiel scalaire $U_e(\mathbf{r}, t)$ est nul). On négligera l'interaction de la particule avec les modes vides du champ électromagnétique et on supposera la longueur d'onde du rayonnement incident grande devant la portée du potentiel statique $V(\mathbf{r})$. L'hamiltonien de la particule s'écrit alors (dans le cadre de l'approximation des grandes longueurs d'onde)

$$H = \frac{1}{2m} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}_e(0, t)]^2 + V(\mathbf{r}) \quad (1)$$

avec

$$\mathbf{A}_e(0, t) = A_0 \cos \omega t \mathbf{e}_z \quad (2)$$

(rayonnement incident d'amplitude A_0 , de fréquence ω et de polarisation $\mathbf{e}_z$).

(*) Voir Y. Gontier et N. K. Rahman, *Lett. al Nuov. Cim.*, **9**, 537 (1974); voir aussi N. M. Kroll et K. M. Weston, *Phys. Rev.*, **A 8**, 804 (1973).

a) On effectue la transformation unitaire

$$T(t) = \exp[iF(t)/\hbar] \quad (3.a)$$

avec

$$F(t) = \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\xi}(t) + \frac{q^2}{2m} \int^t \mathbf{A}_e^2(0, t') dt' \quad (3.b)$$

$$\boldsymbol{\xi}(t) = -\frac{qA_0}{m\omega} \sin \omega t \mathbf{e}_z. \quad (3.c)$$

Soient $|\psi^{(1)}(t)\rangle$ et $|\psi^{(2)}(t)\rangle = T(t) |\psi^{(1)}(t)\rangle$ les vecteurs d'état décrivant respectivement l'état du système dans l'ancien et le nouveau point de vue. Donner l'expression de l'hamiltonien $H^{(2)}$ décrivant l'évolution de $|\psi^{(2)}(t)\rangle$. Montrer que $H^{(2)}$ peut s'écrire

$$H^{(2)}(t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \tilde{V}(\mathbf{r}, t) \quad (4)$$

et donner l'expression de $\tilde{V}(\mathbf{r}, t)$.

b) Interpréter physiquement $\boldsymbol{\xi}(t)$. En déduire une interprétation « géométrique » de la transformation (3.a). Quelle est, dans la nouvelle représentation, la signification physique de l'opérateur $\mathbf{r}$ (multiplication par x, y, z) ?

c) Développer le nouveau potentiel $\tilde{V}(\mathbf{r}, t)$ en série de Fourier temporelle sous la forme

$$\tilde{V}(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-in\omega t} \tilde{V}_n(\mathbf{r}). \quad (5)$$

Exprimer $\tilde{V}_n(\mathbf{r})$ comme une intégrale faisant intervenir la transformée de Fourier spatiale $\mathcal{V}(\mathbf{k})$ de $V(\mathbf{r})$ et la fonction de Bessel d'ordre n , J_n . On rappelle que

$$e^{-i\alpha \sin \varphi} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_n(\alpha) e^{-in\varphi}. \quad (6)$$

d) On s'intéresse dans cette question à la partie statique $\tilde{V}_0(\mathbf{r})$ du développement (5) de $\tilde{V}(\mathbf{r}, t)$. On se limite de plus au cas d'un potentiel coulombien $V(\mathbf{r}) = -q^2/4\pi\epsilon_0 r$.

A l'aide de l'équation de Poisson, déterminer la répartition des charges électrostatiques que l'on peut associer au potentiel $\tilde{V}_0(\mathbf{r})$? On pourra utiliser la relation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} J_0(au) e^{ibu} du = \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{a^2 - b^2}} & \text{si } |b| < |a| \\ 0 & \text{si } |a| < |b|. \end{cases} \quad (7)$$

Quelle est l'interprétation physique du résultat obtenu ?

e) On s'intéresse maintenant au problème de la diffusion d'un électron par le potentiel $V(\mathbf{r})$ en présence du champ extérieur $\mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t)$. L'électron passe d'un état initial d'énergie E_i et d'impulsion $\mathbf{p}_i$ à un état final d'énergie E_f et d'impulsion $\mathbf{p}_f$.

En appliquant les résultats de la théorie des perturbations dépendant du temps au premier ordre, montrer à partir du développement (5) que les énergies finales possibles E_f associées à une énergie initiale donnée E_i forment une série de valeurs discrètes repérées par un entier relatif n . Interpréter physiquement un tel résultat.

f) Calculer, au premier ordre en $V(\mathbf{r})$, l'amplitude de diffusion associée à un transfert d'énergie et d'impulsion donné. Que deviennent les amplitudes de diffusion élastique ($E_f = E_i$) et inélastique ($E_f \neq E_i$) lorsque $A_0 \rightarrow 0$?

g) A partir des résultats précédents, pouvez-vous obtenir *sans calcul* une expression de la section efficace différentielle de diffusion $(d\sigma/d\Omega)_{i \rightarrow f}$ pour un processus inélastique associé à l'une des énergies E_f de la série définie dans la question (e) ? On rapportera cette section à la section efficace différentielle élastique $(d\sigma/d\Omega)_0$ associée à un électron diffusé par le potentiel $V(\mathbf{r})$ en l'absence de tout champ extérieur. On ne cherchera pas à déterminer $(d\sigma/d\Omega)_0$.

Solution

a) Comme $F(t)$ dépend de t , le nouvel hamiltonien $H^{(2)}$ s'écrit

$$H^{(2)} = T(t) H T^\dagger(t) + i\hbar \left(\frac{d}{dt} T(t) \right) T^\dagger(t). \quad (8)$$

Comme dF/dt commute avec F , le dernier terme de (8) est égal à

$$-\frac{dF}{dt} = -\mathbf{p} \cdot \dot{\xi}(t) - \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}_e^2(\mathbf{0}, t) \quad (9)$$

c'est-à-dire encore, d'après (3. c) et (2), à

$$-\frac{dF}{dt} = \frac{q}{m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) - \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}_e^2(\mathbf{0}, t). \quad (10)$$

Par ailleurs, $T(t)$ est un opérateur de translation pour $\mathbf{r}$

$$T(t) \mathbf{r} T^\dagger(t) = \mathbf{r} + \xi(t) \quad (11)$$

de sorte que le premier terme de (8) s'écrit, d'après (1)

$$T(t) H T^\dagger(t) = \frac{1}{2m} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)]^2 + V(\mathbf{r} + \xi(t)). \quad (12)$$

Finalement, la somme de (10) et (12) donne

$$H^{(2)}(t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r} + \xi(t)). \quad (13)$$

La transformation $T(t)$ n'est autre que la transformation de Henneberger étudiée dans le paragraphe B.4, le dernier terme de (3. b) permettant de faire disparaître $q^2 \mathbf{A}_e^2(\mathbf{0}, t)/2m$ (qui se réduit à un nombre pour un champ extérieur).

b) Comme nous l'avons vu dans le paragraphe B.4, $\xi(t)$ représente le mouvement de vibration de la particule dans l'onde incidente. Dans la nouvelle représentation, l'opérateur $\mathbf{r}$ représente la position moyenne de la particule autour de laquelle elle effectue le mouvement de vibration décrit par $\xi(t)$. Sous l'effet de l'onde incidente, la particule explore donc le potentiel statique autour du point $\mathbf{r}$ sur un intervalle caractérisé par $\xi(t)$. C'est ce qu'exprime le dernier terme de (13).

c) Soit $\mathcal{V}(\mathbf{k})$ la transformée de Fourier spatiale de $V(\mathbf{r})$

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \mathcal{V}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (14)$$

Remplaçons dans (14) $\mathbf{r}$ par $\mathbf{r} + \xi(t)$ et utilisons (3.c) et (6). Il vient

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r} + \xi(t)) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \mathcal{V}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \exp\left(-i \frac{qA_0}{m\omega} \mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_z \sin \omega t\right) \\ &= \sum_n e^{-in\omega t} \tilde{V}_n(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (15)$$

avec

$$\tilde{V}_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \mathcal{V}(\mathbf{k}) J_n(\mathbf{k} \cdot \xi_0) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (16)$$

où nous avons posé

$$\xi_0 = \frac{qA_0}{m\omega} \mathbf{e}_z. \quad (17)$$

A cause de sa vibration à la fréquence ω dans le potentiel $V(\mathbf{r})$, la particule « voit » un potentiel périodique en t , dont (15) donne le développement en série de Fourier.

d) Si $V(\mathbf{r}) = -q^2/4\pi\epsilon_0 r$, $\mathcal{V}(\mathbf{k}) = -q^2/(2\pi)^{3/2} \epsilon_0 k^2$, de sorte que, d'après (16)

$$\tilde{V}_0(\mathbf{r}) = -\frac{q^2}{\epsilon_0} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{1}{k^2} J_0(\mathbf{k} \cdot \xi_0) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (18)$$

Soit $\rho_0(\mathbf{r})$ la densité de charge effective qui créerait, pour la particule de charge q , l'énergie potentielle $\tilde{V}_0(\mathbf{r})$, $\rho_0(\mathbf{k})$ la transformée de Fourier de $\rho_0(\mathbf{r})$. L'équation de Poisson $\Delta(\tilde{V}_0/q) = -\rho_0/\epsilon_0$ s'écrit dans l'espace réciproque $\rho_0 = \epsilon_0 k^2 \tilde{\mathcal{V}}_0/q$ où $\tilde{\mathcal{V}}_0(\mathbf{k})$ est la transformée de Fourier de $\tilde{V}_0(\mathbf{r})$. Comme $\tilde{\mathcal{V}}_0$ est donné par (18), on en déduit

$$\rho_0(\mathbf{k}) = -\frac{q}{(2\pi)^{3/2}} J_0(\mathbf{k} \cdot \xi_0) \quad (19.a)$$

et par suite

$$\rho_0(\mathbf{r}) = -q \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} J_0(k_z \xi_0) \quad (19.b)$$

où $\xi_0 = qA_0/m\omega$ est l'amplitude maximale de la vibration. Il suffit alors d'utiliser (7) pour obtenir (*)

$$\rho_0(\mathbf{r}) = -q \delta(x) \delta(y) \times$$

$$\begin{cases} \frac{1}{\pi \sqrt{\xi_0^2 - z^2}} & \text{si } |z| < \xi_0 \\ 0 & \text{si } \xi_0 < |z|. \end{cases} \quad (20)$$

(*) W. C. Henneberger, *Phys. Rev. Lett.*, **21**, 838 (1968).

Pour interpréter (20), notons que dans son référentiel au repos, la particule voit la charge $-q$, créant le potentiel $V(r)$, osciller à la fréquence ω le long de Oz avec une amplitude ξ_0 . L'expression (20) donne la charge statique apparente associée à cette charge $-q$ oscillante. Elle est bien sûr localisée sur l'axe Oz . Par ailleurs, la fonction de z écrite en (20) n'est autre que la densité de probabilité classique de trouver la charge $-q$ en un point z de l'axe Oz , qui diverge bien sûr aux points de rebroussement $-\xi_0$ et $+\xi_0$, puisque la vitesse de la charge $-q$ est nulle en ces points.

e) D'après la théorie des perturbations dépendant du temps au 1^{er} ordre, l'amplitude de transition d'un état initial $|\varphi_i\rangle$ d'énergie E_i vers un état final $|\varphi_f\rangle$ d'énergie E_f est proportionnelle à la transformée de Fourier de $\langle \varphi_f | \tilde{V}(r, t) | \varphi_i \rangle$ évaluée à la fréquence $(E_f - E_i)/\hbar$. Comme $\tilde{V}(r, t)$ est une somme d'exponentielles $e^{-im\omega t}$, l'amplitude de transition ne sera importante que pour

$$E_f = E_i + n\hbar\omega \quad (21)$$

avec n entier positif, négatif ou nul. Le cas $n > 0$ correspond à l'absorption de n photons incidents par la particule au cours du processus de diffusion, le cas $n < 0$ à l'émission stimulée de n photons (*).

f) L'amplitude de diffusion $\{p_i = \hbar k_i, E_i\} \rightarrow \{p_f = \hbar k_f, E_f\}$ avec absorption de n photons incidents vaut

$$\frac{1}{i\hbar} \langle \varphi_f | \tilde{V}_n(r) | \varphi_i \rangle \int_{-T/2}^{+T/2} e^{i(E_f - E_i - n\hbar\omega)t/\hbar} dt \quad (22)$$

où T est la durée de la collision. L'intégrale sur t de (22) donne $2\pi\hbar \delta^{(T)}(E_f - E_i - n\hbar\omega)$. Quant à l'élément de matrice de $\tilde{V}_n(r)$ il est proportionnel à

$$\mathcal{V}(k_f - k_i) J_n[(k_f - k_i) \cdot \xi_0]. \quad (23)$$

A cause de la conservation de l'énergie, k_f et k_i sont liés par la relation

$$\frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} + n\hbar\omega. \quad (24)$$

L'amplitude de diffusion élastique ($E_f = E_i$) correspond à $n = 0$. Comme $J_0(0) = 1$, on retrouve bien, à la limite $\xi_0 \rightarrow 0$, l'amplitude de Born $\mathcal{V}(k_f - k_i)$ (avec $|k_f| = |k_i|$). Pour $n \neq 0$, $J_n(0) = 0$ et les amplitudes de diffusion inélastique tendent vers zéro avec A_0 comme A_0^n . L'existence de termes d'ordre n quelconque en A_0 montre le caractère non perturbatif vis-à-vis de A_0 d'un tel calcul.

g) Soit $(d\sigma/d\Omega)_0$ la section efficace différentielle en l'absence de champ extérieur. $(d\sigma/d\Omega)_0$ est proportionnelle à $|\mathcal{V}(k_f - k_i)|^2$ et à la densité d'états finals $\rho(E_f = E_i)$. En présence de champ extérieur, et pour le processus où n photons sont absorbés au cours de la diffusion, il faut remplacer $\mathcal{V}(k_f - k_i)$ par (23). D'autre part, comme $E_f \neq E_i$ à cause de (24), la densité d'états finals est différente. Comme $\rho(E)$ est proportionnelle à $\sqrt{E}$ pour une particule de masse m , on a donc

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{i \rightarrow f} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}(k_f - k_i)\right)_0 J_n^2[(k_f - k_i) \cdot \xi_0] \sqrt{\frac{E_f}{E_i}}. \quad (25)$$

(*) Une observation expérimentale de ces processus est présentée dans A. Weingartshofer et al., *Phys. Rev. Lett.*, **39**, 269 (1977).

5. EQUIVALENCE ENTRE LES HAMILTONIENS D'INTERACTION EN $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ ET $\mathbf{Z} \cdot (\nabla V)$ POUR LE CALCUL DES AMPLITUDES DE TRANSITION

On considère une particule liée au voisinage de l'origine par un potentiel statique $V(\mathbf{r})$. Cette particule interagit également avec un champ électromagnétique extérieur décrit par un potentiel vecteur dont la valeur à l'origine est :

$$\mathbf{A}(\mathbf{0}, t) = \tilde{A}(t) \mathbf{e}_z \cos \omega t \quad (1)$$

où $\tilde{A}(t)$ est une fonction lentement variable du temps.

L'hamiltonien de cette particule dans le point de vue de Henneberger (voir § B.4) est, à l'approximation dipolaire électrique, égal à

$$H^{(2)} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V\left(\mathbf{r} + \frac{q}{m} \mathbf{Z}(\mathbf{0}, t)\right) + \frac{q^2}{2m} A^2(\mathbf{0}, t). \quad (2)$$

L'évolution de $\tilde{A}(t)$ étant supposée lente, on pourra prendre :

$$\mathbf{Z}(\mathbf{0}, t) \simeq -\frac{\tilde{A}(t)}{\omega} \mathbf{e}_z \sin \omega t. \quad (3)$$

On utilisera dans la suite la décomposition de $H^{(2)}$ en un hamiltonien des particules H_0

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (4)$$

et un hamiltonien d'interaction avec le champ électromagnétique $H'_I = H^{(2)} - H_0$. Le but de cet exercice est de montrer que l'élément de matrice de transition (à un photon ou deux photons) est, à résonance, le même dans ce point de vue que dans le point de vue habituel où l'hamiltonien d'interaction est en $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ (*).

a) Calculer le développement de H'_I à l'ordre 2 inclus en q .

b) Démontrer, en utilisant le commutateur $[p_z, H_0]$, la relation

$$\langle b | \partial V / \partial z | a \rangle = i\omega_{ab} \langle b | p_z | a \rangle \quad (5)$$

liant les éléments de matrice de $\partial V / \partial z$ et ceux de p_z ($|a\rangle$ et $|b\rangle$ sont deux états propres de H_0 de valeurs propres E_a et E_b , avec $\hbar\omega_{ba} = E_b - E_a$). En déduire que, dans le cas d'une transition résonnante à un photon, les éléments de matrice de transition sont identiques dans les deux points de vue.

c) Dans le cas d'une transition à deux photons, l'amplitude de transition est proportionnelle à l'élément de matrice Q_{ba} d'un opérateur effectif reliant le niveau initial au niveau final (voir complément B_{IV}, § 2.a). Dans

(*) W. C. Henneberger, *Phys. Rev. Lett.*, **21**, 838 (1968).

le point de vue $A \cdot p$, cet élément de matrice s'écrit

$$Q_{ba} = \left(\frac{q}{m}\right)^2 \sum_r \frac{\langle b | p_z | r \rangle \langle r | p_z | a \rangle}{\hbar(\omega - \omega_{ra})}. \quad (6)$$

Expliquer pourquoi cette expression doit être remplacée par

$$Q_{ba}^H = -\left(\frac{q}{m\omega}\right)^2 \left[\sum_r \frac{\langle b | \partial V / \partial z | r \rangle \langle r | \partial V / \partial z | a \rangle}{\hbar(\omega - \omega_{ra})} + \frac{1}{2} \left\langle b \left| \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right| a \right\rangle \right] \quad (7)$$

si les calculs sont développés dans le point de vue de Henneberger.

d) En utilisant la relation (5) et le commutateur $[p_z, \partial V / \partial z]$ montrer directement l'égalité $Q_{ba} = Q_{ba}^H$ dans le cas d'une excitation à deux photons résonnante (on pourra s'inspirer de la démonstration du § 2.c du complément B_{IV}).

Solution

a) Le développement de $V\left(x, y, z + \frac{q}{m} Z_z(0, t)\right)$ à l'ordre 2 en q

$$V\left(x, y, z + \frac{q}{m} Z_z(0, t)\right) = V(r) + \frac{q}{m} Z_z(0, t) \frac{\partial V(r)}{\partial z} + \frac{q^2}{2m^2} Z_z^2(0, t) \frac{\partial^2 V(r)}{\partial z^2} + \dots \quad (8)$$

donne pour H'_I

$$H'_I = \frac{q}{m} Z_z(0, t) \frac{\partial V(r)}{\partial z} + \frac{q^2}{2m^2} Z_z^2(0, t) \frac{\partial^2 V(r)}{\partial z^2} + \frac{q^2}{2m} A^2(0, t). \quad (9)$$

b) Partons de l'égalité

$$-i\hbar \frac{\partial V}{\partial z} = [p_z, H_0] \quad (10)$$

et calculons les éléments de matrice des deux membres de (10) entre deux états propres $|a\rangle$ et $|b\rangle$ de H_0

$$-i\hbar \langle b | \partial V / \partial z | a \rangle = \langle b | [p_z, H_0] | a \rangle = (E_a - E_b) \langle b | p_z | a \rangle. \quad (11)$$

En divisant les deux membres de cette égalité par $(-i\hbar)$, nous trouvons la relation (5) de l'énoncé.

Dans le point de vue habituel, l'amplitude de transition S_{ba} est proportionnelle à $M_{ba} = -q(p_z)_{ba}/m$ (voir (7.a) et (7.b), complément B_{IV}). Dans le point de vue de Henneberger, on obtient pour l'amplitude de transition S_{ba} une formule identique à la formule (7.a) du complément B_{IV}, mais l'élément de matrice qui intervient est, compte tenu de (3) et (9) :

$$M_{ba}^H = -\frac{i}{\omega} \frac{q}{m} \left\langle b \left| \frac{\partial V}{\partial z} \right| a \right\rangle. \quad (12)$$

En effet, des trois termes de (9), seul le terme linéaire en q a une composante oscillant en $e^{-i\omega t}$ pouvant induire une transition à un photon. La relation (5) entraîne

$$M_{ba}^H = -\frac{\omega_{ba}}{\omega} \frac{q}{m} \langle b | p_z | a \rangle \quad (13)$$

qui est manifestement égal à M_{ba} à résonance ($\omega_{ba} = \omega$).

c) Dans le nouveau point de vue, il y a deux contributions à l'amplitude de transition à deux photons. La première contribution fait intervenir le premier terme de (9) (opérateur à un

photon) au 2^e ordre et correspond à l'absorption successive de deux photons avec passage intermédiaire de l'atome dans des niveaux relais r . Le calcul de cette contribution se fait en remplaçant $-(q/m)p_z(\tilde{A}(t)e^{-i\omega t})/2$ par $(q/m)(\partial V/\partial z)(\tilde{A}(t)e^{-i\omega t})/2i\omega$ dans la formule (9) du complément B_{IV} et conduit donc, compte tenu des formules (15) de ce même complément, à

$$[Q_{ba}^H]' = -\left(\frac{q}{m\omega}\right)^2 \sum_r \frac{\langle b | \partial V / \partial z | r \rangle \langle r | \partial V / \partial z | a \rangle}{\hbar(\omega - \omega_{ra})}. \quad (14)$$

Il y a une seconde contribution à l'amplitude de transition, qui provient du second terme de (9) (opérateur à deux photons au 1^{er} ordre), et qui correspond à une absorption simultanée de deux photons. La contribution S_{ba}'' de ce terme se calcule par la théorie des perturbations au premier ordre en ne conservant que la composante oscillant en $e^{-2i\omega t}$ dans $Z_z^2(0, t)$ et conduit à :

$$S_{ba}'' = \frac{1}{i\hbar} \frac{q^2}{2m^2} \left\langle b \left| \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right| a \right\rangle \int dt \left(\frac{\tilde{A}(t) e^{-i\omega t}}{2i\omega} \right)^2 e^{i\omega_{ba}t} \quad (15)$$

d'où nous déduisons

$$[Q_{ba}^H]'' = -\frac{q^2}{2m^2\omega^2} \left\langle b \left| \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right| a \right\rangle. \quad (16)$$

Le dernier terme de (9) ne contribue pas à la transition à deux photons puisque c'est un nombre. La somme de (14) et (16) coïncide avec la formule (7) de l'énoncé et permet d'étudier la transition à deux photons dans le nouveau point de vue.

d) Appelons D' la différence

$$D' = \left[-\left(\frac{1}{\omega}\right)^2 \sum_r \frac{\langle b | \partial V / \partial z | r \rangle \langle r | \partial V / \partial z | a \rangle}{\hbar(\omega - \omega_{ra})} \right] - \sum_r \frac{\langle b | p_z | r \rangle \langle r | p_z | a \rangle}{\hbar(\omega - \omega_{ra})}. \quad (17.a)$$

L'identité (5) permet de réécrire D' sous la forme

$$D' = \sum_r \left(\frac{\omega_{br}\omega_{ra}}{\omega^2} - 1 \right) \frac{\langle b | p_z | r \rangle \langle r | p_z | a \rangle}{\hbar(\omega - \omega_{ra})}. \quad (17.b)$$

Or, dans le cas d'une transition résonnante à deux photons (voir formule (25) du complément B_{IV})

$$\omega_{br}\omega_{ra} - \omega^2 = -(\omega - \omega_{ra})^2. \quad (18)$$

En portant (18) dans (17.b), nous trouvons

$$D' = -\frac{1}{\hbar\omega^2} \sum_r (\omega - \omega_{ra}) \langle b | p_z | r \rangle \langle r | p_z | a \rangle. \quad (19)$$

Considérons maintenant le commutateur

$$\left[p_z, \frac{\partial V}{\partial z} \right] = -i\hbar \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \quad (20)$$

dont nous prenons les éléments de matrice entre $|b\rangle$ et $|a\rangle$:

$$\sum_r (\langle b | p_z | r \rangle \langle r | \partial V / \partial z | a \rangle - \langle b | \partial V / \partial z | r \rangle \langle r | p_z | a \rangle) = -i\hbar \langle b | \partial^2 V / \partial z^2 | a \rangle. \quad (21)$$

La relation (5) permet de transformer (21) en

$$\sum_r (\omega_{ra} - \omega_{br}) \langle b | p_z | r \rangle \langle r | p_z | a \rangle = \hbar \langle b | \partial^2 V / \partial z^2 | a \rangle \quad (22)$$

qui peut encore s'écrire puisque $\omega_{br} = 2\omega - \omega_{ra}$

$$2 \sum_r (\omega_{ra} - \omega) \langle b | p_z | r \rangle \langle r | p_z | a \rangle = \hbar \langle b | \partial^2 V / \partial z^2 | a \rangle. \quad (23)$$

La comparaison de (19) et (23) donne alors :

$$D' = \frac{1}{2\omega^2} \left\langle b \left| \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right| a \right\rangle. \quad (24)$$

Considérons enfin $Q_{ba}^H - Q_{ba}$. Compte tenu des relations (6) et (7) et la définition (17.a) de D' , nous avons

$$Q_{ba}^H - Q_{ba} = \left(\frac{q}{m}\right)^2 \left[D' - \frac{1}{2\omega^2} \left\langle b \left| \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right| a \right\rangle \right] \quad (25)$$

expression qui est nulle d'après (24).

Il est donc théoriquement indifférent pour calculer une transition à deux photons d'utiliser les formules (15.b) ou (18.b) du complément B_{IV} dans les points de vue $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$, ou la formule (7) dans le point de vue de Henneberger à condition, bien entendu, de faire la sommation sur *tous* les niveaux relais. Il faut cependant noter que, par suite du rapport $(-\omega_{br} \omega_{ra} / \omega^2)$ entre les contributions de chaque niveau relais r dans le premier terme de (7) et (6), la sommation sur les niveaux relais dans le nouveau point de vue converge encore plus lentement que dans le point de vue $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ qui était déjà, pour le problème de l'absorption à deux photons entre niveaux discrets, moins bien adapté que le point de vue $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$ (voir exercice 2).

6. RÉPONSE LINÉAIRE ET SUSCEPTIBILITÉ ; APPLICATION AU CALCUL DU RAYONNEMENT D'UN DIPÔLE

Soit un système d'hamiltonien H_0 , dont l'état d'équilibre est décrit par l'opérateur densité ρ_{eq} (ρ_{eq} commute avec H_0). On soumet ce système à une perturbation

$$V(t) = -\lambda(t) M \quad (1)$$

où $\lambda(t)$ est un paramètre dépendant du temps et M une observable du système. Le but de l'exercice est de calculer la réponse linéaire (*) du système à cette perturbation, telle qu'elle apparaît sur l'évolution des valeurs moyennes d'autres observables, et d'appliquer ce résultat au champ électromagnétique.

Soit $\rho(t)$ l'opérateur densité décrivant le système perturbé à l'instant t .

a) Déterminer l'équation d'évolution de l'opérateur densité en représentation interaction

$$\rho_I(t) = \exp(iH_0 t / \hbar) \rho(t) \exp(-iH_0 t / \hbar). \quad (2)$$

en fonction de l'opérateur M en représentation interaction

$$M_I(t) = \exp(iH_0 t / \hbar) M(t) \exp(-iH_0 t / \hbar) \quad (3)$$

(*) Voir par exemple P. Martin in *Many Body Physics*, Les Houches, 1967, edited by C. de Witt and R. Balian (Gordon and Breach, 1968).

b) Intégrer l'équation du mouvement de ρ_I au premier ordre en V , en supposant que le système était dans l'état ρ_{eq} à $t = -\infty$. Montrer que la valeur moyenne d'une observable N à l'instant t dans l'état perturbé calculé au premier ordre en V peut s'écrire sous la forme

$$\langle N \rangle_t = \langle N \rangle_{eq} + \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi_{NM}(t-t') \lambda(t') \quad (4)$$

où $\langle N \rangle_{eq}$ est la valeur moyenne d'équilibre de N (dans l'état non perturbé ρ_{eq}), et où χ_{NM} est la moyenne d'un opérateur dans l'état d'équilibre ρ_{eq} . Donner l'expression de $\chi_{NM}(t-t')$.

c) L'hamiltonien d'un champ quantique couplé à une source classique constituée par un dipôle électrique classique $\mathbf{d}(t)$ localisé près de l'origine $\mathbf{0}$, dans une région d'extension a , peut s'écrire (voir complément A_{IV}, § 3b)

$$H = H_R - \frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{d}(t) \cdot \mathbf{D}'(\mathbf{0}) \quad (5)$$

où $H_R = \sum_i \hbar \omega_i (a_i^\dagger a_i + 1/2)$ est l'hamiltonien du rayonnement et où $\mathbf{D}'(\mathbf{0})$ est l'induction électrique en $\mathbf{0}$. On rappelle que

$$\frac{\mathbf{D}'(\mathbf{r})}{\epsilon_0} = \sum_i i \mathcal{E}_{\omega_i} (\epsilon_i a_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} - \epsilon_i a_i^\dagger e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}) \quad (6)$$

coïncide avec le champ électrique total en dehors du système de charges.

En utilisant les résultats de la question précédente et les commutateurs calculés dans le complément C_{III}, calculer la valeur moyenne du champ électrique total rayonné par le dipôle en un point $\mathbf{r}$ tel que $r \gg a$.

Exprimer ce champ en fonction des composantes du dipôle, de sa vitesse et de son accélération. Montrer que le champ rayonné au loin est relié à l'accélération du dipôle.

d) Appliquer les résultats précédents au cas où le dipôle est oscillant :

$$\mathbf{d}(t) = q \mathbf{a}_0 \cos \omega_0 t. \quad (7)$$

Comparer au résultat de l'exercice 6 du chapitre I.

Solution

a) Dérivons par rapport au temps l'équation (2)

$$\frac{d}{dt} \rho_I(t) = \frac{i}{\hbar} H_0 \rho_I(t) - \frac{i}{\hbar} \rho_I(t) H_0 + \exp\left(i \frac{H_0}{\hbar} t\right) \left[\frac{d}{dt} \rho(t) \right] \exp\left(-i \frac{H_0}{\hbar} t\right). \quad (8)$$

La vitesse de variation de $\rho(t)$ est donnée par l'équation d'évolution de la matrice densité sous l'action de l'hamiltonien perturbé $H_0 + V(t)$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) = [H_0, \rho(t)] + [V(t), \rho(t)]. \quad (9)$$

Ceci donne pour le dernier terme de (8)

$$\begin{aligned} \exp\left(i \frac{H_0}{\hbar} t\right) \left[\frac{d}{dt} \rho(t) \right] \exp\left(-i \frac{H_0}{\hbar} t\right) &= -\frac{i}{\hbar} \left[H_0, \exp\left(i \frac{H_0}{\hbar} t\right) \rho(t) \exp\left(-i \frac{H_0}{\hbar} t\right) \right] + \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \exp\left(i \frac{H_0}{\hbar} t\right) [V(t), \rho(t)] \exp\left(-i \frac{H_0}{\hbar} t\right) \\ &= -\frac{i}{\hbar} [H_0, \rho_I(t)] - \frac{i}{\hbar} [-\lambda(t) M_I(t), \rho_I(t)] \quad (10) \end{aligned}$$

d'où

$$\frac{d}{dt} \rho_I(t) = \frac{i}{\hbar} \lambda(t) [M_I(t), \rho_I(t)]. \quad (11)$$

La condition initiale est donnée par $\rho(t) \rightarrow \rho_{eq}$ pour $t \rightarrow -\infty$. Comme ρ_{eq} commute avec H_0 , on en déduit

$$\rho_I(-\infty) = \rho_{eq}. \quad (12)$$

b) Si $\lambda(t)$ reste identiquement nul, $d\rho_I/dt$ l'est aussi et

$$\rho_I(t) = \rho_I(-\infty) = \rho_{eq}. \quad (13)$$

A l'ordre 1 en λ , on peut remplacer $\rho_I(t)$ par ρ_{eq} dans l'équation (11) qui s'écrit alors

$$\frac{d}{dt} \rho_I(t) = \frac{i\lambda(t)}{\hbar} [M_I(t), \rho_{eq}] \quad (14)$$

et s'intègre en

$$\rho_I(t) - \rho_{eq} = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \lambda(t') [M_I(t'), \rho_{eq}]. \quad (15)$$

Revenons à $\rho(t)$ en utilisant (2) et le fait que ρ_{eq} commute avec H_0

$$\rho(t) = \rho_{eq} + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \lambda(t') \left[\exp\left\{i \frac{H_0}{\hbar} (t' - t)\right\} M \exp\left\{-i \frac{H_0}{\hbar} (t' - t)\right\}, \rho_{eq} \right]. \quad (16)$$

On peut étendre l'intégrale sur t' jusqu'à $+\infty$, en multipliant l'intégrand par la fonction de Heaviside $\theta(t - t')$ qui est nulle pour $t' > t$.

Prenons la moyenne de l'observable N à l'instant t . Il vient :

$$\begin{aligned} \langle N \rangle_t &= \text{Tr}(\rho(t) N) = \text{Tr}(\rho_{eq} N) + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \theta(t - t') \lambda(t') \text{Tr}\{N[M_I(t' - t), \rho_{eq}]\} \\ &= \langle N \rangle_{eq} + \int_{-\infty}^{\infty} dt' \lambda(t') \chi_{NM}(t - t') \end{aligned} \quad (17)$$

où

$$\chi_{NM}(\tau) = \frac{i}{\hbar} \text{Tr}\{NM_I(-\tau)\rho_{eq} - N\rho_{eq}M_I(-\tau)\}\theta(\tau). \quad (18)$$

Utilisons l'invariance de la trace par permutation circulaire des opérateurs dans le deuxième terme

$$\begin{aligned} \chi_{NM}(\tau) &= \frac{i}{\hbar} \text{Tr}\{NM_I(-\tau)\rho_{eq} - M_I(-\tau)N\rho_{eq}\}\theta(\tau) \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle [N, M_I(-\tau)] \rangle_{eq} \theta(\tau). \end{aligned} \quad (19)$$

Remarquons que $M_f(-\tau)$ n'est autre que l'observable M ayant évolué dans le point de vue de Heisenberg de 0 à $-\tau$ sous l'action de H_0 (évolution libre). Ainsi, χ_{NM} est la moyenne dans l'état ρ_{eq} d'un commutateur faisant intervenir des opérateurs non perturbés pris à des instants différents (N à l'instant 0, M à l'instant $-\tau$ auparavant). L'expression (17) montre que χ_{NM} définit la réponse linéaire du système dans l'état ρ_{eq} à une perturbation faible. C'est donc une susceptibilité linéaire.

c) Nous cherchons la réponse linéaire du champ à la perturbation causée par son couplage au dipôle classique $\mathbf{d}(t)$. Cette réponse est mesurée sur les composantes du champ électrique total $\mathbf{E}'(\mathbf{r})$, en un point $\mathbf{r}$ situé bien en dehors de la région d'extension a autour de l'origine où se trouvent les charges constituant le dipôle.

Il a été montré dans le complément A_{IV} qu'on a alors :

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{D}'(\mathbf{r})}{\epsilon_0} \quad (20)$$

où $\mathbf{D}'$ est l'induction électrique donnée par l'expression (6). On peut donc appliquer la théorie de la réponse linéaire de la question b) en prenant

$$N = E'_n(\mathbf{r}) = \frac{D'_n(\mathbf{r})}{\epsilon_0} \quad (n = x, y, z) \quad (21.a)$$

$$\lambda(t) M = \mathbf{d}(t) \cdot \frac{\mathbf{D}'(0)}{\epsilon_0} = \sum_m \mathbf{d}_m(t) \frac{D'_m(0)}{\epsilon_0} \quad (m = x, y, z) \quad (21.b)$$

$$\rho_{eq} = |0\rangle \langle 0|. \quad (21.c)$$

Remarquons d'abord que, d'après l'expression (6), la moyenne de $\mathbf{D}'(\mathbf{r})$ dans le vide est nulle. Il reste alors le deuxième terme de (17) qui s'écrit ici :

$$\langle E'_n(\mathbf{r}) \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \sum_m \chi_{nm}(t-t') \mathbf{d}_m(t') = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \sum_m \chi_{nm}(\tau) \mathbf{d}_m(t-\tau) \quad (22)$$

où $\tau = t - t'$ et

$$\chi_{nm}(\tau) = \frac{i}{\hbar} \left\langle 0 \left| \left[\frac{D'_n(\mathbf{r}, 0)}{\epsilon_0}, \frac{D'_m(0, -\tau)}{\epsilon_0} \right] \right| 0 \right\rangle \theta(\tau). \quad (23)$$

L'expression (6) montre que l'expression mathématique de $\mathbf{D}'/\epsilon_0$ est, dans le nouveau point de vue, identique à celle de $\mathbf{E}_\perp$ en jauge de Coulomb. L'hamiltonien du rayonnement H_R est également le même dans les deux cas. Il en résulte que la valeur du commutateur de l'expression (23) est identique à celle du commutateur des composantes de $\mathbf{E}_\perp$ calculé dans le complément C_{III} (voir formule (22)), où l'on fait $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}$, $t_1 = 0$; $\mathbf{r}_2 = 0$, $t_2 = -\tau$. Il vient :

$$\chi_{nm}(\tau) = \frac{i}{\hbar} \theta(\tau) \frac{i\hbar c}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \left(\frac{3r_n r_m}{r^2} - \delta_{nm} \right) \left(\frac{\delta'(r - c\tau) - \delta'(r + c\tau)}{r^2} - \frac{\delta(r - c\tau) - \delta(r + c\tau)}{r^3} \right) \right. \\ \left. - \left(\frac{r_n r_m}{r^2} - \delta_{nm} \right) \left(\frac{\delta''(r - c\tau) - \delta''(r + c\tau)}{r} \right) \right\}. \quad (24)$$

Les fonctions ayant $r + c\tau$ comme argument ne contribuent pas car $\theta(\tau)$ vaut 0 pour $\tau = -r/c$.

Portons (24) dans (22), et utilisons les propriétés de la fonction δ et de ses dérivées

$$\int c d\tau \delta(r - c\tau) \mathbf{d}_m(t - \tau) = \mathbf{d}_m\left(t - \frac{r}{c}\right) \quad (25.a)$$

$$\int c d\tau \delta'(r - c\tau) \mathbf{d}_m(t - \tau) = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{d}}_m\left(t - \frac{r}{c}\right) \quad (25.b)$$

$$\int c d\tau \delta''(r - c\tau) \mathbf{d}_m(t - \tau) = \frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{d}}_m\left(t - \frac{r}{c}\right) \quad (25.c)$$

Il vient alors

$$\langle E'_n(\mathbf{r}) \rangle_t = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \left(\frac{3\mathbf{r}_n \cdot \mathbf{r}_m}{r^3} - \delta_{nm} \right) \left(\frac{\dot{d}_m \left(t - \frac{r}{c} \right)}{r^3} + \frac{\ddot{d}_m \left(t - \frac{r}{c} \right)}{cr^2} \right) + \left(\frac{r_n r_m}{r^2} - \delta_{nm} \right) \frac{\ddot{d}_m \left(t - \frac{r}{c} \right)}{c^2 r} \right\}. \quad (26)$$

A grande distance, seul subsiste le terme en $1/r$ qui décrit le champ rayonné. Il est proportionnel à l'accélération du dipôle, ou plutôt à la partie de cette dernière orthogonale au rayon vecteur $\mathbf{r}$.

d) En appliquant la formule (26) au cas où le dipôle est donné par (7), on obtient, en posant $k_0 = \omega_0/c$:

$$\langle E(\mathbf{r}) \rangle_t = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{3\mathbf{r}(\mathbf{a}_0 \cdot \mathbf{r})}{r^3} - \mathbf{a}_0 \right] \left[\frac{\cos(\omega_0 t - k_0 r)}{r^3} - \frac{k_0 \sin(\omega_0 t - k_0 r)}{r^2} \right] - \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{\mathbf{r}(\mathbf{a}_0 \cdot \mathbf{r})}{r^3} - \mathbf{a}_0 \right] k_0^2 \frac{\cos(\omega_0 t - k_0 r)}{r}.$$

On retrouve ainsi le résultat de l'exercice 6 du chapitre I (formule (14)) : la moyenne du champ quantique est identique au champ classique.

7. DIFFUSION NON RÉSONNANTE : VÉRIFICATION DIRECTE DE L'ÉGALITÉ DES AMPLITUDES DE TRANSITION CALCULÉES DANS LES POINTS DE VUE $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ ET $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$

On considère un électron lié au voisinage de l'origine par un potentiel statique $V(\mathbf{r})$. Cet électron peut passer d'un état $|a\rangle$ d'énergie E_a à un état $|a'\rangle$ d'énergie $E_{a'}$ dans un processus de diffusion, au cours duquel un photon incident de vecteur d'onde $\mathbf{k}$ et de polarisation ϵ est absorbé et un photon $\mathbf{k}' \epsilon'$ est émis dans un mode différent ($\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$). On notera $|\varphi_i\rangle = |a, \mathbf{k}\epsilon\rangle$ et $|\varphi_f\rangle = |a', \mathbf{k}'\epsilon'\rangle$ les états initial et final du système global d'énergies $E_i = E_a + \hbar\omega$ et $E_f = E_{a'} + \hbar\omega'$ (il n'y a pas de photons dans les autres modes et $|\mathbf{k}\epsilon\rangle = a_{\mathbf{k}\epsilon}^+ |\mathbf{0}\rangle$, $|\mathbf{0}\rangle$ étant le vide de photons). On supposera que le processus de diffusion est non résonnant, c'est-à-dire qu'il n'existe pas de niveau atomique discret $|b\rangle$ dont l'énergie E_b soit égale à E_i . Le but de l'exercice est de montrer que l'élément de matrice de transition au deuxième ordre en charge électrique q

$$\mathcal{T}_{fi} = \langle \varphi_f | H_I^* | \varphi_i \rangle + \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \sum_j \frac{\langle \varphi_f | H_I | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | H_I | \varphi_i \rangle}{E_i - E_j + i\epsilon} \quad (1)$$

a même valeur dans le point de vue $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et dans le point de vue $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$ sur la couche d'énergie, c'est-à-dire lorsque $E_i = E_f$ (*). (E_i , E_f et E_j correspondent à l'énergie du système global atome + rayonnement.) A

(*) Voir également Dirac (§ 64).

l'approximation dipolaire électrique, les hamiltoniens d'interaction sont dans chacun des points de vue :

$$H_I = -\frac{q}{m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2(\mathbf{0}) \quad (2.a)$$

$$H'_I = -q\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{0}) \quad (2.b)$$

les champs quantiques en $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ étant

$$\mathbf{A}(\mathbf{0}) = \int d^3k \sum_{\epsilon} \frac{\mathcal{E}_\omega}{\omega} [a_\epsilon(\mathbf{k}) + a_\epsilon^\dagger(\mathbf{k})] \boldsymbol{\epsilon} \quad (2.c)$$

$$\mathbf{E}_\perp(\mathbf{0}) = \int d^3k \sum_{\epsilon} i\mathcal{E}_\omega [a_\epsilon(\mathbf{k}) - a_\epsilon^\dagger(\mathbf{k})] \boldsymbol{\epsilon} \quad (2.d)$$

où $\mathcal{E}_\omega = [\hbar\omega/2 \epsilon_0(2\pi)^3]^{1/2}$.

a) Calculer $\mathcal{T}_{fi}$ dans le point de vue $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$ à l'ordre 2 en charge électrique q . Montrer que le résultat obtenu est de la forme

$$\mathcal{T}'_{fi} = C \sum_b \left[\frac{(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\epsilon}')_{a'b} (\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\epsilon})_{ba}}{\hbar(\omega - \omega_{ba})} - \frac{(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\epsilon})_{a'b} (\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\epsilon}')_{ba}}{\hbar(\omega' + \omega_{ba})} \right] \quad (3)$$

où C est une constante que l'on calculera et où la somme porte sur les niveaux électroniques $|b\rangle$.

b) Calculer au même ordre en charge électrique $\mathcal{T}_{fi}$ en utilisant l'hamiltonien d'interaction H_I donné en (2.a). On notera $\mathcal{T}_{fi}(2)$ la contribution du terme quadratique de H_I et $\mathcal{T}_{fi}(1)$ la contribution du terme linéaire au second ordre.

c) Soit D la quantité

$$D = \sum_b (\omega_{a'b} \omega_{ba} + \omega\omega') \left(\frac{(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\epsilon}')_{a'b} (\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\epsilon})_{ba}}{\omega - \omega_{ba}} - \frac{(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\epsilon})_{a'b} (\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\epsilon}')_{ba}}{\omega' + \omega_{ba}} \right). \quad (4)$$

Montrer que, lorsque $E_{a'} + \hbar\omega' = E_a + \hbar\omega$, D est égal à :

$$D = \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\epsilon}' \delta_{a'a} \quad (5)$$

(on pourra au préalable vérifier que $\omega_{a'b} \omega_{ba} + \omega\omega' = (\omega - \omega_{ba}) \times (\omega' + \omega_{ba})$).

d) En déduire que les valeurs de $\mathcal{T}_{fi}$ obtenues aux questions a) et b) sont égales sur la couche d'énergie.

Solution

a) Dans le point de vue $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$, l'hamiltonien d'interaction (2.b) est linéaire en a et $a^\dagger$ et ne peut donc coupler directement $|\varphi_i\rangle$ à $|\varphi_f\rangle$. Le passage de $|\varphi_i\rangle$ à $|\varphi_f\rangle$ se fait donc exclusi-

vement via un état intermédiaire (second terme de (1)). Cet état $|\varphi_j\rangle$ peut être un état à 0 photon $|b, 0\rangle$ ou un état à deux photons $|b, k\varepsilon, k'\varepsilon'\rangle$. Dans le premier cas, il y a absorption du photon $k\varepsilon$ puis émission du photon $k'\varepsilon'$, l'énergie E_j du niveau intermédiaire étant E_b . Dans le second cas, l'émission du photon $k'\varepsilon'$ précède l'absorption du photon $k\varepsilon$ et l'énergie E_j du niveau intermédiaire est $(E_b + \hbar\omega + \hbar\omega')$.

Calculons maintenant $\langle b, 0 | H'_I | a, k\varepsilon \rangle$. En utilisant (2. b) et (2. d) il vient :

$$\langle b, 0 | H'_I | a, k\varepsilon \rangle = -q \int d^3k'' \sum_{\varepsilon''} i\mathcal{E}_{\omega''} \langle 0 | a_{\varepsilon''}(k'') | k\varepsilon \rangle (\mathbf{r} \cdot \varepsilon'')_{ba} \quad (6)$$

$|k\varepsilon\rangle$ étant égal à $a_{\varepsilon}^+(k) | 0 \rangle$, nous obtenons en utilisant le commutateur

$$[a_{\varepsilon''}(k''), a_{\varepsilon}^+(k)] = \delta_{\varepsilon\varepsilon''} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'') \quad (7)$$

$$\langle b, 0 | H'_I | a, k\varepsilon \rangle = -q(\mathbf{r} \cdot \varepsilon)_{ba} i\mathcal{E}_{\omega}. \quad (8)$$

Considérons $\langle a', k'\varepsilon' | H'_I | b, 0 \rangle$

$$\begin{aligned} \langle a', k'\varepsilon' | H'_I | b, 0 \rangle &= -q \int d^3k'' \sum_{\varepsilon''} (-i\mathcal{E}_{\omega''}) \langle k'\varepsilon' | a_{\varepsilon''}^+(k'') | 0 \rangle (\mathbf{r} \cdot \varepsilon'')_{a'b} \\ &= q(\mathbf{r} \cdot \varepsilon')_{a'b} i\mathcal{E}_{\omega'}. \end{aligned} \quad (9)$$

Le calcul des éléments de matrice $\langle b, k\varepsilon, k'\varepsilon' | H'_I | a, k\varepsilon \rangle$ et $\langle a', k'\varepsilon' | H'_I | b, k\varepsilon, k'\varepsilon' \rangle$ se fait de façon identique, ce qui donne finalement pour $\mathcal{V}_{fi}$

$$\mathcal{V}_{fi} = q^2 \mathcal{E}_{\omega} \mathcal{E}_{\omega'} \sum_b \left[\frac{(\mathbf{r} \cdot \varepsilon')_{a'b} (\mathbf{r} \cdot \varepsilon)_{ba}}{\hbar(\omega - \omega_{ba})} - \frac{(\mathbf{r} \cdot \varepsilon)_{a'b} (\mathbf{r} \cdot \varepsilon')_{ba}}{\hbar(\omega' + \omega_{ba})} \right]. \quad (10)$$

Cette formule coïncide avec celle de l'énoncé si l'on pose

$$C = q^2 \mathcal{E}_{\omega} \mathcal{E}_{\omega'} = \frac{q^2 \hbar}{2 \varepsilon_0 (2\pi)^3} \sqrt{\omega\omega'}. \quad (11)$$

(Nous avons supposé qu'aucun dénominateur de (10) ne peut s'annuler ce qui permet de prendre $\varepsilon = 0$ dans la formule (1).)

b) Contrairement à la situation précédente, il est maintenant possible de coupler directement $|\varphi_i\rangle$ à $|\varphi_f\rangle$ en utilisant le terme quadratique en q de H_I . Calculons cette première contribution à $\mathcal{V}_{fi}$ notée $\mathcal{V}_{fi}(2)$. Comme $A^2(0)$ est un nombre vis-à-vis des particules, il est clair d'abord que $\mathcal{V}_{fi}(2)$ est proportionnel à $\delta_{a'a'}$. Pour calculer l'élément de matrice, il suffit de conserver dans $A^2(0)$, exprimé à l'aide de (2. c), les produits $a_{\varepsilon_1}^+(k_1') a_{\varepsilon_2}^-(k_2')$ et $a_{\varepsilon_1}^-(k_1'') a_{\varepsilon_2}^+(k_2'')$. Après intégration sur k_1' et k_2' nous obtenons en utilisant (7) :

$$\mathcal{V}_{fi}(2) = \frac{q^2}{m} \frac{\mathcal{E}_{\omega} \mathcal{E}_{\omega'}}{\omega\omega'} \varepsilon \cdot \varepsilon' \delta_{a'a'}. \quad (12)$$

Le second terme $\mathcal{V}_{fi}(1)$ fait intervenir une somme sur les niveaux intermédiaires $|\varphi_j\rangle$. Ce second terme se calcule comme $\mathcal{V}_{fi}$ dans la question a) en remplaçant $-q\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}$ par $-q\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}/m$. En utilisant l'expression (2. c) de $A(0)$, on trouve :

$$\mathcal{V}_{fi}(1) = \frac{q^2}{m^2} \frac{\mathcal{E}_{\omega} \mathcal{E}_{\omega'}}{\omega\omega'} \sum_b \left[\frac{(\mathbf{p} \cdot \varepsilon')_{a'b} (\mathbf{p} \cdot \varepsilon)_{ba}}{\hbar(\omega - \omega_{ba})} - \frac{(\mathbf{p} \cdot \varepsilon)_{a'b} (\mathbf{p} \cdot \varepsilon')_{ba}}{\hbar(\omega' + \omega_{ba})} \right]. \quad (13)$$

La relation (B.43) reliant les éléments de matrice de $(\mathbf{p} \cdot \varepsilon)$ à ceux de $(\mathbf{r} \cdot \varepsilon)$ permet de transformer (13) en

$$\mathcal{V}_{fi}(1) = q^2 \mathcal{E}_{\omega} \mathcal{E}_{\omega'} \sum_b \left(-\frac{\omega_{a'b} \omega_{ba}}{\omega\omega'} \right) \left[\frac{(\mathbf{r} \cdot \varepsilon')_{a'b} (\mathbf{r} \cdot \varepsilon)_{ba}}{\hbar(\omega - \omega_{ba})} - \frac{(\mathbf{r} \cdot \varepsilon)_{a'b} (\mathbf{r} \cdot \varepsilon')_{ba}}{\hbar(\omega' + \omega_{ba})} \right]. \quad (14)$$

c) Pour vérifier

$$\omega_{a'b} \omega_{ba} + \omega \omega' = (\omega - \omega_{ba})(\omega' + \omega_{ba}) \quad (15)$$

notons que lorsque $E_{a'} = E_a + \hbar(\omega - \omega')$, on peut remplacer $\omega_{a'b}$ par

$$\omega_{a'b} = \omega - \omega' - \omega_{ba} \quad (16)$$

dans le premier terme de (15) et identifier les deux membres de (15).

L'équation (15) permet alors de réécrire (4) sous la forme :

$$D = \sum_b [(\omega' + \omega_{ba})(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})_{a'b}(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})_{ba} - (\omega - \omega_{ba})(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})_{a'b}(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})_{ba}]. \quad (17)$$

Or, sur la couche d'énergie, $\omega - \omega_{ba} = \omega' + \omega_{a'b}$. En transformant le second terme du crochet à l'aide de cette égalité, nous trouvons :

$$D = \omega' \sum_b [(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})_{a'b}(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})_{ba} - (\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})_{a'b}(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})_{ba}] - \frac{i}{m} \sum_b [(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})_{a'b}(\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})_{ba} - (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})_{a'b}(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})_{ba}] \quad (18)$$

après avoir, à nouveau, utilisé (B.43) pour écrire la seconde somme sur $|b\rangle$. Compte tenu de la relation de fermeture, il vient alors :

$$D = \omega' \langle a' | [(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}), (\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})] | a \rangle - \frac{i}{m} \langle a' | [(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}), (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})] | a \rangle. \quad (19)$$

Le premier commutateur est nul et le second est un nombre égal à $i\hbar \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}'$ ce qui conduit à la formule (5) de l'énoncé.

d) En utilisant (4), (10), (12) et (14), nous pouvons écrire

$$\mathcal{T}'_{fi} - \mathcal{T}_{fi} = \frac{q^2 \mathcal{E}_\omega \mathcal{E}_{\omega'}}{\hbar \omega \omega'} D - \frac{q^2 \mathcal{E}_\omega \mathcal{E}_{\omega'}}{m \omega \omega'} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}' \delta_{a'a}. \quad (20)$$

L'égalité (5) donne alors

$$\mathcal{T}'_{fi} = \mathcal{T}_{fi}. \quad (21)$$

La matrice de transition sur la couche d'énergie est donc la même dans les points de vue $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ et $\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$. Notons que la démonstration de cette égalité ne suppose rien sur les valeurs de ω et ω' , à l'exception de l'approximation des grandes longueurs d'onde et de l'absence de niveaux atomiques résonnants. Le résultat précédent peut donc être appliqué à divers problèmes comme la diffusion Rayleigh, la diffusion Thomson ou la diffusion Raman.

Introduction à la formulation covariante de l'électrodynamique quantique

Ce dernier chapitre a pour but de donner au lecteur un premier aperçu sur l'électrodynamique quantique relativiste, et d'introduire les notions nécessaires pour l'étude d'ouvrages plus avancés dans ce domaine.

Jusqu'ici, nous avons, en choisissant la jauge de Coulomb, délibérément renoncé à écrire des équations manifestement covariantes pour le champ électromagnétique. Nous avons également traité la dynamique des particules de manière non relativiste. Une telle approche est suffisante pour la physique des basses énergies tout en simplifiant au maximum le formalisme théorique.

Nous revenons maintenant sur ces deux points et nous essayons de donner une idée sur d'autres approches plus élaborées qui sont indispensables à haute énergie (particules rapides ou photons incidents de fréquence élevée devant $m_a c^2/\hbar$), ou pour l'étude des corrections radiatives (émission et réabsorption virtuelles de photons de fréquence élevée, identification covariante des charges et masses renormalisées). Le présent chapitre traite essentiellement de la *formulation covariante* de l'électrodynamique classique et quantique en jauge de Lorentz. Pour simplifier, nous étudierons soit le *champ libre* (pas de sources), soit le champ en présence de *sources extérieures* dont le mouvement est imposé. Le problème de la description relativiste des particules et de leur dynamique sous l'effet du couplage avec le champ est beaucoup plus vaste et beaucoup plus complexe. Les particules doivent être alors considérées comme des excitations élémentaires d'un *champ de matière relativiste* quantifié, couplé au champ de photons. Nous présentons, dans le complément A_V, une introduction élémentaire à la théorie des champs de Dirac et Maxwell couplés en jauge de Lorentz. Nous montrons également, dans le complément B_V, comment il est possible de justifier, à partir d'une telle théorie complètement relativiste, les hamiltoniens non relativistes en jauge de Coulomb utilisés dans le reste de cet ouvrage.

Rappelons tout d'abord la démarche que nous avons suivie au chapitre II pour quantifier l'électrodynamique. Partant du lagrangien standard qui conduit aux équations de Maxwell-Lorentz, nous avons éliminé tous les degrés de liberté redondants des potentiels pour transformer ce lagrangien en un lagrangien équivalent où ne figurent plus que des variables dynamiques essentielles, possédant chacune un moment conjugué. La quantification canonique de la théorie ne présente alors aucune difficulté.

Si elle a l'avantage de la simplicité, une telle démarche présente cependant l'inconvénient de ne pas préserver la covariance manifeste du champ. Ainsi, même si elle ne remet pas en cause le caractère relativiste du champ, l'élimination du potentiel scalaire a brisé la symétrie manifeste entre les quatre composantes du quadrivecteur potentiel. De même, les variables dynamiques du potentiel vecteur en jauge de Coulomb, à savoir les composantes transverses $\mathcal{A}_\perp(\mathbf{k})$ et $\mathcal{A}_\perp'(\mathbf{k})$ dans l'espace réciproque, ne se transforment pas simplement dans une transformation de Lorentz. Or, il existe des problèmes en électrodynamique quantique, comme la renormalisation et l'élimination de quantités divergentes, pour lesquels il est essentiel de ne manier que des expressions manifestement covariantes.

Nous allons donc traiter ici de manière symétrique les potentiels vecteur A et scalaire U . L'approche simple du chapitre II doit alors être abandonnée. En effet, la symétrie que nous désirons préserver entre A et U nous interdit d'éliminer les degrés de liberté redondants des potentiels *au niveau du lagrangien lui-même*, comme nous l'avons fait dans le chapitre II. Nous sommes obligés maintenant de considérer A et U comme des variables dynamiques *indépendantes* dans le lagrangien, possédant chacune un moment conjugué, ce qui conduit, après quantification canonique, à quatre types de photons associés aux quatre composantes du quadrivecteur potentiel. Le problème de la redondance des potentiels, que nous avons ainsi ignoré au niveau du lagrangien, resurgit alors nécessairement plus loin, au niveau des solutions des équations du mouvement, qui ne coïncident plus en général avec les solutions des équations de Maxwell. Il faut donc introduire, en plus du lagrangien de départ, une *condition supplémentaire*, permettant de sélectionner, parmi toutes les solutions possibles, les solutions physiques intéressantes. L'un des buts essentiels de ce chapitre est précisément de discuter les problèmes soulevés par un tel programme en théorie quantique et de donner une idée de la manière dont on peut les résoudre (construction d'un espace des états pour le rayonnement avec quatre types de photons indépendants, puis caractérisation d'un sous-espace d'états physiques au moyen de la condition supplémentaire).

Nous commençons (partie A) par introduire un nouveau lagrangien pour les champs classiques, manifestement covariant, différent du lagrangien standard dans la mesure où il doit contenir U pour que U ait un moment conjugué. Ce lagrangien conduit à des équations du mouvement

qui ne coïncident avec les équations de Maxwell que si une condition supplémentaire, à savoir la condition de Lorentz, est imposée aux potentiels. A partir de ce lagrangien, nous calculons ensuite les moments conjugués des potentiels et l'hamiltonien, ainsi que les variables normales classiques du champ, c'est-à-dire les variables évoluant indépendamment les unes des autres en l'absence de sources. La quantification canonique de la théorie précédente est effectuée dans la partie B, les variables normales devenant les opérateurs de création et d'annihilation de photons transverses, longitudinaux et scalaires. Nous établissons des expressions manifestement covariantes pour les commutateurs des potentiels libres et nous analysons les difficultés soulevées en théorie quantique par la condition de Lorentz. Nous étudions ensuite (partie C) une solution possible à ces difficultés consistant à introduire une métrique indéfinie dans l'espace de Hilbert du rayonnement. Les notions précédentes sont enfin illustrées sur un exemple simple : l'effet sur le champ de son interaction avec deux charges fixes est étudié, ce qui permet de retrouver l'interaction de Coulomb et de l'interpréter comme résultant d'un échange de photons entre les deux charges (partie D).

A — ÉLECTRODYNAMIQUE CLASSIQUE EN JAUGE DE LORENTZ

1. Formalisme lagrangien

a) NOTATIONS COVARIANTES. NOTATIONS ORDINAIRES

Avant de commencer, précisons les notations que nous utiliserons pour les potentiels.

Les « notations covariantes » A^μ pour le quadrivecteur potentiel utilisent un indice grec μ pouvant prendre quatre valeurs, 1, 2, 3 pour les composantes spatiales, 0 pour la composante temporelle. Il convient alors de distinguer les « composantes contravariantes » A^μ (indice en haut) des « composantes covariantes » A_μ (indice en bas), reliées par :

$$A_\mu = \sum_\nu g_{\mu\nu} A^\nu \quad (\text{A.1})$$

où $g_{\mu\nu}$ est le tenseur diagonal ($g_{00} = +1$, $g_{11} = g_{22} = g_{33} = -1$).

Les notations ordinaires pour le potentiel vecteur, A_j , utilisent un indice latin pouvant prendre les valeurs x, y, z . Pour le potentiel scalaire U , nous utiliserons également la notation :

$$A_s = \frac{U}{c} \quad (\text{A.2})$$

de manière à avoir un potentiel de même dimension que le potentiel vecteur. La position supérieure ou inférieure des indices j et s n'a aucune importance dans A_j et A_s .

Donnons enfin les équations reliant les différentes composantes qui viennent d'être introduites :

$$\begin{aligned} A^0 &= A_0 = A_s = U/c \\ A^1 &= -A_1 = A_x \\ A^2 &= -A_2 = A_y \\ A^3 &= -A_3 = A_z. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

b) CHOIX D'UN NOUVEAU LAGRANGIEN POUR LE CHAMP

Dans le lagrangien standard (donné par l'expression (B.5) du chapitre II), le potentiel scalaire U n'a pas de moment conjugué puisque $\partial\mathcal{L}/\partial U$ est identiquement nul. Si nous voulons traiter de façon symétrique $U(\mathbf{r})$ et $A_j(\mathbf{r})$, il faut modifier le lagrangien standard de manière que $U(\mathbf{r})$ ait un moment conjugué. Cette propriété devant être, a priori, vraie pour le

champ libre, il faut à coup sûr modifier la densité de lagrangien $\mathcal{L}_R$ du rayonnement. Nous devons imposer deux conditions à $\mathcal{L}_R$:

- (i) $\mathcal{L}_R$ doit être manifestement covariant.
- (ii) $\mathcal{L}_R$ doit contenir U .

Considérons alors la densité de lagrangien suivante :

$$\mathcal{L}_R = - \frac{\epsilon_0 c^2}{2} \sum_{\mu\nu} (\partial_\mu A^\nu) (\partial^\mu A_\nu). \quad (\text{A. 4})$$

Elle s'écrit encore, en notations ordinaires

$$\mathcal{L}_R = \frac{\epsilon_0}{2} \left[\dot{\mathbf{A}}^2 - \left(\frac{\dot{U}}{c^2} \right)^2 - c^2 \sum_{ij} (\partial_i A_j)^2 + (\nabla U)^2 \right]. \quad (\text{A. 5})$$

L'expression (A.4) est manifestement covariante, et U a un moment conjugué puisque $\dot{U}$ apparaît explicitement dans (A.5).

Analysons quelques propriétés de $\mathcal{L}_R$. Notons tout d'abord que $\mathcal{L}_R$ ne fait intervenir que des fonctions quadratiques des A_μ . Ceci assure que les équations de Lagrange déduites de (A.4) ou (A.5) seront linéaires en fonction des potentiels. Par ailleurs, $\mathcal{L}_R$ ne fait intervenir que les dérivées premières des potentiels, ce qui est logique puisque, seules, les dérivées temporelles d'ordre 1 sont autorisées dans le formalisme lagrangien et que la covariance manifeste impose la même propriété pour les dérivées spatiales. Notons enfin, et c'est là le point le plus important, que ce nouveau lagrangien *n'est pas équivalent* au lagrangien standard dont la densité pour le champ libre, $\mathcal{L}_R^{st}$, s'écrit (voir la formule (B.26) du chapitre II)

$$\mathcal{L}_R^{st} = - \frac{\epsilon_0 c^2}{4} \sum_{\mu,\nu} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad (\text{A. 6})$$

où

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (\text{A. 7})$$

est le tenseur champ électromagnétique. Nous verrons en effet dans le paragraphe suivant que les équations de Lagrange associées à (A.4) diffèrent en général de celles déduites de (A.6) qui, rappelons le, sont les équations de Maxwell. On ne pourra retrouver les équations de Maxwell qu'en imposant une *condition supplémentaire* aux potentiels.

Jusqu'ici, nous n'avons considéré que le champ libre. Pour décrire l'interaction entre le champ et les particules, nous conservons la même densité $\mathcal{L}_I$ que celle figurant dans le lagrangien standard (voir la formule (B.4.e) du chapitre II)

$$\mathcal{L}_I = \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} - \rho U = - \sum_\mu j_\mu A^\mu \quad (\text{A. 8})$$

où j_μ est le quadri vecteur courant (cp, $\mathbf{j}$). Dans la suite du chapitre, nous

nous intéresserons essentiellement aux champs (équations du mouvement des champs, relations de commutation des champs...) et nous utiliserons uniquement les densités de lagrangien $\mathcal{L}_R$ et $\mathcal{L}_I$.

Remarques

(i) En électrodynamique quantique relativiste, les particules sont elles aussi décrites par un champ relativiste, qui est le champ de Dirac si les particules sont des électrons et des positrons. Le lagrangien des particules L_p est alors le lagrangien du champ de Dirac libre, et le courant $j_\mu(x)$ est égal à $qc\bar{\psi}(x)\gamma_\mu\psi(x)$, où les γ_μ sont les matrices de Dirac, ψ le champ de Dirac et $\bar{\psi}$ son adjoint relativiste. Lors de la quantification, le champ de Dirac devient un champ quantique dont les excitations élémentaires décrivent les électrons et les positrons (voir complément A_v).

(ii) Dans les formulations covariantes de l'électrodynamique quantique, on utilise fréquemment une autre densité de lagrangien pour le champ, appelée densité de lagrangien de Fermi :

$$\mathcal{L}_R^F = -\varepsilon_0 c^2 \left[\sum_{\mu\nu} \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{1}{2} \left(\sum_\mu \partial_\mu A^\mu \right)^2 \right] \quad (\text{A.9})$$

qui diffère de $\mathcal{L}_R$ mais qui lui est équivalente. Un calcul élémentaire montre en effet que la différence entre (A.4) et (A.9) est une quadridivergence :

$$\mathcal{L}_R - \mathcal{L}_R^F = \frac{\varepsilon_0 c^2}{2} \sum_{\mu\nu} \partial_\mu [A^\mu \partial_\nu A^\nu - A^\nu \partial_\nu A^\mu]. \quad (\text{A.10})$$

Le premier terme de (A.9) n'est autre que la densité de lagrangien standard $\mathcal{L}_R^{st}$. Ainsi, pour passer de $\mathcal{L}_R^{st}$ à $\mathcal{L}_R^F$, il faut ajouter un terme proportionnel à $\left(\sum_\mu \partial_\mu A^\mu \right)^2$ qui n'est pas une quadridivergence. Les densités $\mathcal{L}_R^{st}$ et $\mathcal{L}_R^F$, et par suite $\mathcal{L}_R^{st}$ et $\mathcal{L}_R$, ne sont donc pas équivalentes.

c) EQUATIONS DE LAGRANGE DU CHAMP

Comme la nouvelle densité de lagrangien $\mathcal{L} = \mathcal{L}_R + \mathcal{L}_I$ n'est pas équivalente à $\mathcal{L}_R^{st} + \mathcal{L}_I$, il n'y a aucune raison pour que les nouvelles équations de Lagrange pour le champ coïncident avec les équations de Maxwell (A.11.a et b) du chapitre I. Ces dernières peuvent se mettre sous la forme suivante

$$\square \mathbf{A} = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \mathbf{j} - \nabla \Lambda \quad (\text{A.11.a})$$

$$\square U = \frac{1}{\varepsilon_0} \rho + \frac{\partial}{\partial t} \Lambda \quad (\text{A.11.b})$$

où $\square$ est le D'Alembertien et où

$$\Lambda = \frac{1}{c^2} \frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{A}. \quad (\text{A. 11. c})$$

La forme (A. 11) des équations de Maxwell rendra plus aisée leur comparaison avec les nouvelles équations de Lagrange.

La nouvelle densité de lagrangien est la somme de (A. 5) et (A. 8)

$$\mathcal{L} = \frac{\epsilon_0}{2} \left[\dot{\mathbf{A}}^2 - \left(\frac{\dot{U}}{c} \right)^2 - c^2 \sum_{ij} (\partial_i A_j)^2 + (\nabla U)^2 \right] - \rho U + \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}. \quad (\text{A. 12})$$

Considérons d'abord l'équation de Lagrange relative à la composante $A_i(\mathbf{r})$ du potentiel vecteur. $\dot{A}_i$ et les dérivées spatiales de A_i n'apparaissent que dans la densité de lagrangien propre du champ (A. 5), alors que A_i n'apparaît que dans le terme d'interaction (A. 8). Il s'ensuit que

$$\partial \mathcal{L} / \partial \dot{A}_i = \epsilon_0 \dot{A}_i \quad (\text{A. 13. a})$$

$$\partial \mathcal{L} / \partial (\partial_j A_i) = -\epsilon_0 c^2 \partial_j A_i \quad (\text{A. 13. b})$$

$$\partial \mathcal{L} / \partial A_i = j_i. \quad (\text{A. 13. c})$$

En appliquant les équations de Lagrange relatives à un système possédant un ensemble continu de degrés de liberté (équation (A. 39) du chapitre II), nous trouvons alors

$$\epsilon_0 \left[\ddot{A}_i - c^2 \sum_j \frac{\partial^2 A_i}{\partial x_j^2} \right] = j_i \quad (\text{A. 14})$$

c'est-à-dire encore,

$$\square \mathbf{A} = \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \mathbf{j}. \quad (\text{A. 15. a})$$

Un calcul analogue donne, pour l'équation de Lagrange relative au potentiel scalaire :

$$\square U = \frac{1}{\epsilon_0} \rho. \quad (\text{A. 15. b})$$

Les équations (A. 15. a et b) diffèrent des équations de Maxwell (A. 11. a et b).

Remarque

Nous n'avons considéré ici que les équations de Lagrange des champs. Si l'on prend pour lagrangien des particules, le lagrangien du champ de Dirac $\psi(x)$, et si l'on prend pour courant $j_\mu = qc\bar{\psi}\gamma_\mu\psi$ (voir remarque (i) du § 1. b), l'équation de Lagrange relative à ψ n'est autre que l'équation de Dirac en présence du potentiel A_μ (voir exercices 5 et 6).

d) CONDITION SUPPLÉMENTAIRE

Il existe cependant un choix des potentiels pour lesquels les équations (A.11) et (A.15) coïncident. Il suffit d'imposer :

$$\Lambda = \nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \dot{U} = 0 \quad (\text{A.16.a})$$

c'est-à-dire de se placer dans la jauge de Lorentz. La condition (A.16.a) s'écrit encore, en notations covariantes :

$$\sum_{\mu} \partial_{\mu} A^{\mu} = 0. \quad (\text{A.16.b})$$

Les deux approches (lagrangien standard, nouveau lagrangien) conduisent donc au même résultat, à condition d'imposer la condition de Lorentz (A.16) comme condition supplémentaire.

Montrons maintenant que la condition (A.16) est bien compatible avec les équations du mouvement (A.15). Une combinaison de (A.15.a) et (A.15.b) conduit à l'équation d'évolution suivante pour Λ :

$$\square \Lambda = \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \left(\nabla \cdot \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) = 0 \quad (\text{A.17})$$

par suite de la conservation de la charge. Ainsi, si initialement $\Lambda = \dot{\Lambda} = 0$, Λ reste identiquement nul dans la suite. Or, il est toujours possible, à l'instant initial, d'imposer la condition $\Lambda = 0$ entre les coordonnées généralisées $\mathbf{A}$, U et les vitesses généralisées $\dot{\mathbf{A}}$, $\dot{U}$. Quant à $\dot{\Lambda}$, on peut calculer sa valeur à l'instant initial, en utilisant l'équation du mouvement (A.15.b) pour réexprimer $\ddot{U}$ en fonction de ΔU et ρ . Il vient

$$\dot{\Lambda} = \nabla \cdot (\dot{\mathbf{A}} + \nabla U) + \frac{\rho}{\epsilon_0} = -\nabla \cdot \mathbf{E} + \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (\text{A.18})$$

qui est bien nul si les conditions initiales sont telles que $\mathbf{E}$ obéisse à l'équation $\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho/\epsilon_0$. On peut donc bien choisir $\Lambda = \dot{\Lambda} = 0$ à l'instant initial et avoir par suite, d'après (A.17), $\Lambda = 0$ à tout instant.

Notons enfin que la condition (A.16) autorise encore certains changements de jauge

$$A_{\mu} \rightarrow A'_{\mu} = A_{\mu} - \partial_{\mu} f. \quad (\text{A.19})$$

Il suffit que

$$\partial_{\mu} \partial^{\mu} f = \square f = 0 \quad (\text{A.20})$$

pour que A'_{μ} soit aussi un potentiel vérifiant la condition de Lorentz.

e) DENSITÉ DE LAGRANGIEN DANS L'ESPACE RÉCIPROQUE

Pour conclure ce paragraphe, écrivons la densité de lagrangien $\overline{\mathcal{L}}_R$ du champ, obtenue quand les variables dynamiques sont développées dans l'espace réciproque

$$L_R = \int d^3r \mathcal{L}_R = \int d^3k \overline{\mathcal{L}}_R. \quad (\text{A.21})$$

(Rappelons que l'intégrale sur k dans (A.21) ne porte que sur un demi-espace ; voir § B.1.b du chapitre II). En utilisant la relation de Parseval-Plancherel pour transformer l'intégrale sur r de (A.5), et en utilisant $\mathcal{A}_s$ et sa transformée de Fourier $\mathcal{A}_s^*$ au lieu de U et $\mathcal{U}$ (voir (A.2)), on obtient

$$\overline{\mathcal{L}}_R = \varepsilon_0 [\dot{\mathcal{A}}^* \cdot \dot{\mathcal{A}} - \omega^2 \mathcal{A}^* \cdot \mathcal{A} - \dot{\mathcal{A}}_s^* \cdot \dot{\mathcal{A}}_s + \omega^2 \mathcal{A}_s^* \cdot \mathcal{A}_s] \quad (\text{A.22})$$

avec $\omega = ck$. La densité de lagrangien (A.22) décrit quatre oscillateurs harmoniques indépendants, respectivement associés aux trois composantes spatiales et à la composante temporelle du quadripotential. Pour $\mathcal{A}_s$, le signe diffère du signe habituel, ce qui, nous le verrons, aura des conséquences importantes au niveau de la quantification.

2. Formalisme hamiltonien

a) MOMENTS CONJUGUÉS DES POTENTIELS

Soient π_j et π_s les moments conjugués de $\mathcal{A}_j$ et $\mathcal{A}_s$. En utilisant la définition (A.54) du chapitre II pour les moments conjugués et (A.22), on obtient (avec $j = x, y, z$)

$$\pi_j = \partial \overline{\mathcal{L}}_R / \partial \dot{\mathcal{A}}_j^* = \varepsilon_0 \dot{\mathcal{A}}_j \quad (\text{A.23.a})$$

$$\pi_s = \partial \overline{\mathcal{L}}_R / \partial \dot{\mathcal{A}}_s^* = -\varepsilon_0 \dot{\mathcal{A}}_s \quad (\text{A.23.b})$$

ce qui donne également dans l'espace réel

$$\Pi_j = \varepsilon_0 \dot{\mathcal{A}}_j \quad (\text{A.24.a})$$

$$\Pi_s = -\varepsilon_0 \dot{\mathcal{A}}_s. \quad (\text{A.24.b})$$

Les expressions (A.23) et (A.24) demeurent valables en présence d'interaction car le lagrangien d'interaction ne contient pas $\dot{\mathcal{A}}_j$ et $\dot{\mathcal{A}}_s$, et ne contribue donc pas à π_j et π_s .

Il est intéressant pour la suite de réécrire la condition supplémentaire de

Lorentz (A.16. a) dans l'espace réciproque en utilisant (A.23. b) pour réexprimer $\dot{\mathcal{U}} = \dot{\mathcal{A}}_s/c$ en fonction de π_s

$$ik \cdot \mathcal{A} = \frac{1}{\varepsilon_0 c} \pi_s. \quad (\text{A.25})$$

b) HAMILTONIEN DU CHAMP

L'hamiltonien H_R du seul champ peut être déduit de $\mathcal{L}_R$. H_R est donc donné par l'intégrale sur un demi-espace réciproque de la densité d'hamiltonien $\mathcal{H}_R$ égale à (voir la formule (A.59) du chapitre II)

$$\overline{\mathcal{H}}_R = [\pi \cdot \dot{\mathcal{A}}^* + \pi^* \cdot \dot{\mathcal{A}} + \pi_s \dot{\mathcal{A}}_s^* + \pi_s^* \dot{\mathcal{A}}_s] - \overline{\mathcal{L}}_R \quad (\text{A.26})$$

c'est-à-dire encore, d'après (A.23),

$$\overline{\mathcal{H}}_R = \varepsilon_0 \left[\frac{1}{\varepsilon_0^2} \pi^* \cdot \pi + \omega^2 \mathcal{A}^* \cdot \mathcal{A} - \frac{1}{\varepsilon_0^2} \pi_s^* \pi_s - \omega^2 \mathcal{A}_s^* \mathcal{A}_s \right]. \quad (\text{A.27})$$

Nous voyons apparaître dans l'expression (A.27) quatre hamiltoniens d'oscillateur harmonique, trois avec le signe + pour les trois composantes du potentiel vecteur, ($\mathcal{A}_j, \pi_j$), l'un avec le signe - pour le potentiel scalaire ($\mathcal{A}_s, \pi_s$). Ce signe - semble poser un problème puisque l'énergie propre du rayonnement paraît pouvoir devenir négative. Nous verrons ultérieurement que la condition supplémentaire (A.25) empêche une telle situation de se produire.

Remarques

(i) Le lagrangien L_R du champ est invariant par translation d'espace. Une démarche analogue à celle du complément B_{11} (§4) permet donc de déterminer la constante du mouvement qui est associée à cette invariance de L_R , et qui n'est autre que l'impulsion globale $\mathbf{P}_R$ du rayonnement. (Voir aussi l'exercice 5 du chapitre II). L'expression de $\mathbf{P}_R$ s'écrit ici

$$\mathbf{P}_R = -i \int d^3k \mathbf{k} (\pi^* \cdot \mathcal{A} + \pi_s^* \mathcal{A}_s - \pi \cdot \mathcal{A}^* - \pi_s \mathcal{A}_s^*). \quad (\text{A.28})$$

(ii) Comme nous n'avons pas précisé l'expression du lagrangien L_p des particules, il est impossible ici de calculer l'hamiltonien total H . Si par contre les sources sont des sources extérieures, dont la dynamique est imposée, L_p n'apparaît plus dans le lagrangien qui se réduit à $L_R + L_I$. On trouve alors pour l'hamiltonien H du champ couplé à des sources extérieures l'expression

$$H = H_R - L_I = H_R + \int d^3k (j_{e\mu}^* \mathcal{A}^\mu + j_{e\mu} \mathcal{A}^{\mu*}) \quad (\text{A.29})$$

où les courants $j_{e\mu}$ sont des fonctions données de $\mathbf{k}$ et t .

c) EQUATIONS DE HAMILTON-JACOBI DU CHAMP LIBRE

L'application des relations (A.60) du chapitre II à la densité d'hamiltonien (A.27) donne les équations d'évolution de $\mathcal{A}_j$ et π_j

$$\dot{\mathcal{A}}_j = \partial \overline{\mathcal{H}}_R / \partial \pi_j^* = \frac{1}{\varepsilon_0} \pi_j \quad (\text{A.30.a})$$

$$\dot{\pi}_j = - \partial \overline{\mathcal{H}}_R / \partial \mathcal{A}_j^* = - \varepsilon_0 \omega^2 \mathcal{A}_j \quad (\text{A.30.b})$$

et celle de $\mathcal{A}_s$ et π_s

$$\dot{\mathcal{A}}_s = \partial \overline{\mathcal{H}}_R / \partial \pi_s^* = - \frac{1}{\varepsilon_0} \pi_s \quad (\text{A.31.a})$$

$$\dot{\pi}_s = - \partial \overline{\mathcal{H}}_R / \partial \mathcal{A}_s^* = \varepsilon_0 \omega^2 \mathcal{A}_s. \quad (\text{A.31.b})$$

Les équations (A.30.a) et (A.31.a) ont déjà été obtenues en (A.23.a) et (A.23.b). Il convient de noter la différence de signe entre les seconds membres de (A.30) et (A.31), elle-même due à la différence de signe entre les premiers et derniers termes de (A.27).

Remarque

En présence de sources extérieures, il faut utiliser (A.29). Les équations (A.30.a) et (A.31.a) demeurent inchangées. Il faut ajouter j_{ej} au second membre de (A.30.b) et $-j_{e0} = -cp_e$ au second membre de (A.31.b) ce qui donne

$$\dot{\pi}_j = - \varepsilon_0 \omega^2 \mathcal{A}_j + j_{ej} \quad (\text{A.30.b'})$$

$$\dot{\pi}_s = \varepsilon_0 \omega^2 \mathcal{A}_s - cp_e. \quad (\text{A.31.b'})$$

3. Variables normales du champ classique

a) DÉFINITION

Les variables normales du champ classique sont des combinaisons linéaires des variables dynamiques du champ et de leurs moments conjugués qui ont la propriété d'évoluer indépendamment les uns des autres en l'absence de sources (champ libre). Ainsi, si l'on pose

$$\alpha_j = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2 \hbar \omega}} \left[\omega \mathcal{A}_j + \frac{i}{\varepsilon_0} \pi_j \right] \quad (\text{A.32})$$

il découle de (A.30.a) et (A.30.b) que

$$\dot{\alpha}_j + i\omega \alpha_j = 0. \quad (\text{A.33})$$

En l'absence de sources, la variable normale $\alpha_j(\mathbf{k}, t)$ n'est donc couplée qu'à elle-même, et évolue en $\exp(-i\omega t)$. Notons que la définition (A.32) coïncide avec celle utilisée dans les chapitres I et II (voir la formule (C.46) du chapitre II).

En revanche, à cause de la différence de signe entre les seconds membres des équations (A.30) et (A.31), il faut poser

$$\alpha_s = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2\hbar\omega}} \left[\omega \mathcal{A}_s - \frac{i}{\varepsilon_0} \pi_s \right] \quad (\text{A.34})$$

pour avoir, pour α_s , une équation analogue à (A.33)

$$\dot{\alpha}_s + i\omega\alpha_s = 0. \quad (\text{A.35})$$

Si l'on prenait le signe + au second membre de (A.34), comme en (A.32), α_s évoluerait en $\exp(i\omega t)$ et non en $\exp(-i\omega t)$.

Les solutions de (A.33) et (A.35) s'écrivent

$$\alpha_j(\mathbf{k}, t) = \alpha_j(\mathbf{k}) e^{-i\omega t} \quad (\text{A.36.a})$$

$$\alpha_s(\mathbf{k}, t) = \alpha_s(\mathbf{k}) e^{-i\omega t}. \quad (\text{A.36.b})$$

Remarque

Les relations (A.32) et (A.34) continuent à définir α_j et α_s en présence d'interaction. Mais les équations d'évolution (A.33) et (A.35) contiennent alors des termes sources. Par exemple, avec des sources extérieures, (A.33) et (A.35) doivent être remplacées par (voir (A.30.b') et (A.31.b')) :

$$\dot{\alpha}_j + i\omega\alpha_j = \frac{i}{\sqrt{2\varepsilon_0\hbar\omega}} j_{vj} \quad (\text{A.33}')$$

$$\dot{\alpha}_s + i\omega\alpha_s = \frac{i}{\sqrt{2\varepsilon_0\hbar\omega}} c\rho_e. \quad (\text{A.35}')$$

b) DÉVELOPPEMENT DES POTENTIELS EN VARIABLES NORMALES

Rappelons tout d'abord que les potentiels $\mathcal{A}_j$ et $\mathcal{A}_s$ sont réels, ce qui entraîne

$$\mathcal{A}_j(\mathbf{k}) = \mathcal{A}_j^*(-\mathbf{k}) \quad (\text{A.37.a})$$

$$\mathcal{A}_s(\mathbf{k}) = \mathcal{A}_s^*(-\mathbf{k}) \quad (\text{A.37.b})$$

et des relations analogues pour π_j et π_s .

Remplaçons alors $\mathbf{k}$ par $-\mathbf{k}$ dans (A.32) et (A.34) et prenons le complexe conjugué. En utilisant (A.37) et en posant $\alpha_{j-}^* = \alpha_j^*(-\mathbf{k}, t)$,

$\alpha_{s-}^* = \alpha_s^*(-\mathbf{k}, t)$, nous obtenons

$$\alpha_{j-}^* = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2 \hbar \omega}} \left[\omega \mathcal{A}_j - \frac{i}{\varepsilon_0} \pi_j \right] \quad (\text{A. 38. a})$$

$$\alpha_{s-}^* = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2 \hbar \omega}} \left[\omega \mathcal{A}_s + \frac{i}{\varepsilon_0} \pi_s \right]. \quad (\text{A. 38. b})$$

A partir de (A. 32), (A. 34), (A. 38. a) et (A. 38. b), nous déduisons alors les composantes de Fourier des potentiels en fonction des variables normales

$$\mathcal{A}_j(\mathbf{k}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega}} [\alpha_j(\mathbf{k}, t) + \alpha_j^*(-\mathbf{k}, t)] \quad (\text{A. 39. a})$$

$$\mathcal{A}_s(\mathbf{k}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega}} [\alpha_s(\mathbf{k}, t) + \alpha_s^*(-\mathbf{k}, t)]. \quad (\text{A. 39. b})$$

Reportons enfin (A. 39) dans les intégrales de Fourier définissant $A_j(\mathbf{r}, t)$ et $A_s(\mathbf{r}, t)$ et changeons $\mathbf{k}$ en $-\mathbf{k}$ dans les intégrales des seconds termes de (A. 39). Nous obtenons les équations

$$\left\{ \begin{aligned} A_j(\mathbf{r}, t) &= \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega (2 \pi)^3}} [\alpha_j(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \alpha_j^*(\mathbf{k}, t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}] \end{aligned} \right. \quad (\text{A. 40. a})$$

$$\left\{ \begin{aligned} A_s(\mathbf{r}, t) &= \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega (2 \pi)^3}} [\alpha_s(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \alpha_s^*(\mathbf{k}, t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}] \end{aligned} \right. \quad (\text{A. 40. b})$$

qui donnent le développement des potentiels en variables normales. Dans le cas particulier du champ libre, il est possible d'utiliser les équations (A. 36) et d'obtenir

$$\left\{ \begin{aligned} A_j(\mathbf{r}, t) &= \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega (2 \pi)^3}} [\alpha_j(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + \alpha_j^*(\mathbf{k}) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}] \end{aligned} \right. \quad (\text{A. 40. c})$$

$$\left\{ \begin{aligned} A_s(\mathbf{r}, t) &= \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega (2 \pi)^3}} [\alpha_s(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + \alpha_s^*(\mathbf{k}) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}]. \end{aligned} \right. \quad (\text{A. 40. d})$$

Les équations (A. 40. c) et (A. 40. d) donnent les développements des potentiels vecteur et scalaire libres en ondes planes progressives.

Comme les potentiels vecteur et scalaire sont considérés comme des

variables dynamiques indépendantes dans le lagrangien de départ, il existe, en chaque point $\mathbf{k}$ de l'espace réciproque, quatre degrés de liberté indépendants décrits par les trois composantes cartésiennes $\alpha_i(\mathbf{k})$ de $\alpha(\mathbf{k})$ et par $\alpha_s(\mathbf{k})$. Au lieu de projeter $\alpha(\mathbf{k})$ sur une base cartésienne fixe de l'espace réciproque, on peut projeter $\alpha(\mathbf{k})$ sur les deux vecteurs unitaires transverses ε et ε' , c'est-à-dire perpendiculaires à $\mathbf{k}$ et perpendiculaires entre eux (voir Fig. 1 du chap. I), et sur le vecteur unitaire $\kappa = \mathbf{k}/k$ le long de $\mathbf{k}$. Les variables normales transverses $\alpha_\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon \cdot \alpha(\mathbf{k})$ et $\alpha_{\varepsilon'}(\mathbf{k}) = \varepsilon' \cdot \alpha(\mathbf{k})$ sont les mêmes que celles utilisées dans les chapitres I et II. En plus de ces variables transverses, on a maintenant une variable normale longitudinale

$$\alpha_l(\mathbf{k}) = \kappa \cdot \alpha(\mathbf{k}) = \frac{1}{k} (k_x \alpha_x + k_y \alpha_y + k_z \alpha_z) \quad (\text{A.41})$$

et, bien sûr, la variable normale $\alpha_s(\mathbf{k})$ associée au potentiel scalaire. Pour chaque valeur de $\mathbf{k}$, il y a donc maintenant quatre *modes* normaux de vibrations des potentiels libres, deux transverses, un longitudinal et un scalaire, décrits par l'ensemble

$$\{ \alpha_\varepsilon(\mathbf{k}), \alpha_{\varepsilon'}(\mathbf{k}), \alpha_l(\mathbf{k}), \alpha_s(\mathbf{k}) \}. \quad (\text{A.42})$$

Les excitations élémentaires de ces quatre types de modes donneront naissance, lors de la quantification, à quatre types de photons pour chaque valeur de $\mathbf{k}$.

c) FORME DE LA CONDITION SUPPLÉMENTAIRE POUR LE CHAMP CLASSIQUE LIBRE. ARBITRAIRE DE JAUGE

Jusqu'ici nous avons considéré le potentiel vecteur et le potentiel scalaire comme des variables dynamiques indépendantes. Introduisons maintenant la condition supplémentaire (A.16.a) qui s'écrit pour le champ libre, compte tenu de (A.40.c) et (A.40.d)

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{\dot{A}_s}{c} = \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega (2\pi)^3}} i(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\alpha} - k \alpha_s) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + c.c. \quad (\text{A.43})$$

Si l'on veut que la condition supplémentaire soit satisfaite pour tout $\mathbf{r}$ et tout t , il faut que le coefficient de chaque exponentielle dans (A.43) soit nul, c'est-à-dire, compte tenu de la définition (A.41) de α_l (qui entraîne que $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\alpha} = k \alpha_l$)

$$\alpha_l(\mathbf{k}) - \alpha_s(\mathbf{k}) = 0 \quad \forall \mathbf{k}. \quad (\text{A.44})$$

La condition supplémentaire prend donc, pour le champ libre, une forme très simple en termes de variables normales. Parmi toutes les solu-

tions (A.40.c) et (A.40.d) des équations du mouvement, seules sont physiques celles pour lesquelles, en tout point $\mathbf{k}$, la variable normale longitudinale $\alpha_l(\mathbf{k})$ est égale à la variable normale scalaire $\alpha_s(\mathbf{k})$.

La forme très simple de la condition supplémentaire (A.44) suggère d'introduire, pour chaque valeur de $\mathbf{k}$, deux combinaisons linéaires « orthogonales » de α_l et α_s , dont l'une fait intervenir précisément $\alpha_l - \alpha_s$. Posons ainsi

$$\alpha_d = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_l - \alpha_s) \quad (\text{A.45.a})$$

$$\alpha_g = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_l + \alpha_s). \quad (\text{A.45.b})$$

Nous avons ainsi introduit deux nouveaux types de variables normales α_d et α_g . Avec ces nouvelles notations, la condition supplémentaire (A.44) s'écrit

$$\alpha_d = 0. \quad (\text{A.46})$$

La condition (A.46) restreint le nombre de degrés de liberté pour les champs physiques : la variable normale α_d est nulle pour un champ physique libre. Etudions maintenant comment se manifeste l'arbitraire de jauge associé aux transformations de jauge (A.19) satisfaisant (A.20). Un même champ physique peut en effet être décrit par plusieurs ensembles de variables normales (A.42), satisfaisant (A.44), et se déduisant les uns des autres par une transformation de jauge. Comme toute fonction réelle f satisfaisant (A.20) peut s'écrire

$$f = \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega(2\pi)^3}} \mathcal{F}(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + c.c. \quad (\text{A.47})$$

la transformation de jauge associée à $f(\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f, A'_s = A_s - (\partial f / \partial t))$ se traduit pour les variables normales (A.42) par la transformation

$$\begin{cases} \alpha'_e = \alpha_e & \alpha'_{e'} = \alpha_{e'} \\ \alpha'_l = \alpha_l + ik\mathcal{F} \\ \alpha'_s = \alpha_s + ik\mathcal{F} \end{cases} \quad (\text{A.48})$$

Exprimés en fonction des variables α_d et α_g définies en (A.45), les relations (A.48) deviennent

$$\begin{aligned} \alpha'_e &= \alpha_e & \alpha'_{e'} &= \alpha_{e'} \\ \alpha'_d &= \alpha_d \\ \alpha'_g &= \alpha_g + i\sqrt{2}k\mathcal{F}. \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

Une transformation de jauge ne modifie pas α_d (qui est nul pour un champ physique) et ne transforme que la variable normale α_g . En définitive, l'arbitraire de jauge se manifeste exclusivement sur la valeur de α_g .

Remarque

Comme $\alpha_d = 0$, on voit, qu'en choisissant $\mathcal{F} = -\alpha_g / ik \sqrt{2}$, on peut toujours (dans un référentiel de Lorentz donné) annuler α'_g (et donc α'_t et α'_x) et montrer ainsi, comme dans les chapitres I et II, que les degrés de liberté essentiels du champ physique sont décrits, en chaque point $\mathbf{k}$, par les deux variables normales transverses α_ϵ et α'_ϵ . Il est cependant impossible d'annuler α_t et α_x dans tous les référentiels de Lorentz *à la fois* (si A_x est nul dans un référentiel, il ne l'est plus dans un autre). Ceci explique pourquoi la construction d'une théorie manifestement covariante exige de conserver les quatre types de variables normales, et d'ajouter la condition (A.46) et l'arbitraire de jauge (A.49).

Il sera utile pour la suite de réexprimer les potentiels libres en fonction des variables α_d et α_g . Pour cela, utilisons les relations (A.40.c) et (A.40.d) qui s'écrivent encore sous forme covariante (*)

$$A_\mu(x^\nu) = \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2 \epsilon_0 \omega (2\pi)^3}} [\alpha_\mu(\mathbf{k}) e^{-ik_\nu x^\nu} + \alpha_\mu^*(\mathbf{k}) e^{ik_\nu x^\nu}] \quad (\text{A.50})$$

où k^μ est le quadrivecteur $(\omega/c, \mathbf{k})$ avec $\omega = c |\mathbf{k}|$ satisfaisant donc à

$$\sum_\nu k^\nu k_\nu = 0. \quad (\text{A.51})$$

Pour exprimer α_μ et α_μ^* en fonction des variables α_ϵ , α'_ϵ , α_d et α_g , partons de la relation

$$\alpha_\mu(\mathbf{k}) = \alpha_\epsilon(\mathbf{k}) \epsilon_\mu + \alpha'_\epsilon(\mathbf{k}) \epsilon'_\mu + \alpha_t(\mathbf{k}) \kappa_\mu + \alpha_x(\mathbf{k}) \eta_\mu \quad (\text{A.52})$$

ϵ_μ et ϵ'_μ sont deux quadrivecteurs, n'ayant que des composantes spatiales et construits à partir des vecteurs transverses ϵ et ϵ'

$$\begin{aligned} \epsilon^\mu &= (0, \epsilon) \\ \epsilon'^\mu &= (0, \epsilon') \end{aligned} \quad (\text{A.53})$$

κ_μ est un quadrivecteur n'ayant que des composantes spatiales et construit à partir du vecteur longitudinal κ

$$\kappa^\mu = (0, \kappa) \quad (\text{A.54})$$

(*) Pour simplifier les notations, nous utilisons dans les exponentielles la convention de sommation sur les indices répétés ($k_\nu x^\nu = \sum_\nu k_\nu x^\nu$).

η_μ est enfin un quadrivecteur n'ayant qu'une composante temporelle

$$\eta^\mu = (1, 0). \quad (\text{A.55})$$

Réexprimons ensuite les deux derniers termes de (A.52) en fonction de α_d et α_g , grâce aux relations (A.45). Il vient

$$\alpha_i(\mathbf{k}) \kappa_\mu + \alpha_s(\mathbf{k}) \eta_\mu = \frac{1}{\sqrt{2}} \alpha_g(\mathbf{k}) (\kappa_\mu + \eta_\mu) + \frac{i}{\sqrt{2}} \alpha_d(\mathbf{k}) (\eta_\mu - \kappa_\mu). \quad (\text{A.56})$$

Ecrivons enfin

$$A_\mu = A_\mu^T + A_\mu^G + A_\mu^D \quad (\text{A.57})$$

où A_μ^T , A_μ^G , A_μ^D sont les contributions respectives à A_μ des termes en α_e et α_e' , en α_g et en α_d de α_μ . A_μ^T est le potentiel vecteur transverse n'ayant que des composantes spatiales et transverses. Il coïncide avec celui étudié dans le chapitre I

$$A_\mu^T(x^\nu) = \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega(2\pi)^3}} \{ [\varepsilon_\mu \alpha_e(\mathbf{k}) + \varepsilon'_\mu \alpha_e'(\mathbf{k})] e^{-ik_\nu x^\nu} + [\varepsilon_\mu \alpha_e^*(\mathbf{k}) + \varepsilon'_\mu \alpha_e'^*(\mathbf{k})] e^{ik_\nu x^\nu} \}. \quad (\text{A.58})$$

Avant d'écrire A_μ^G , remarquons que le quadrivecteur $\kappa^\mu + \eta^\mu$ qui multiplie α_g dans (A.56), a, d'après (A.54) et (A.55), pour composantes $(\mathbf{k}, 1) = k^{-1}(\mathbf{k}, k)$ et n'est donc autre que le quadrivecteur k^μ/k . Comme d'autre part : $k_\mu \exp(-ik_\nu x^\nu) = i \partial_\mu \exp(-ik_\nu x^\nu)$, on voit qu'on peut écrire

$$A_\mu^G(x^\nu) = -\partial_\mu f(x^\nu) \quad (\text{A.59})$$

où

$$f(x^\nu) = - \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega(2\pi)^3}} \frac{i}{k\sqrt{2}} [\alpha_g(\mathbf{k}) e^{-ik_\nu x^\nu} - \alpha_g^*(\mathbf{k}) e^{ik_\nu x^\nu}] \quad (\text{A.60})$$

f satisfait à l'équation

$$\square f = \sum_\nu \partial_\nu \partial^\nu f = 0 \quad (\text{A.61})$$

puisque $\sum_\nu k_\nu k^\nu = 0$. A_μ^G a donc la structure d'un terme de jauge. Enfin, compte tenu de (A.56), A_μ^D s'écrit

$$A_\mu^D(x^\nu) = \frac{i}{\sqrt{2}} \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega(2\pi)^3}} \times (\eta_\mu - \kappa_\mu) [\alpha_d(\mathbf{k}) e^{-ik_\nu x^\nu} - \alpha_d^*(\mathbf{k}) e^{ik_\nu x^\nu}]. \quad (\text{A.62})$$

Un état physique du champ est caractérisé, en vertu de (A. 46), par $A_\mu^D = 0$.

Considérons enfin les champs électrique et magnétique, c'est-à-dire le tenseur $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$. A_μ^G ne contribue pas à $F_{\mu\nu}$, en raison de (A. 59), ce qui est naturel pour un terme de jauge. Nous trouvons finalement pour un état physique ($\alpha_d = 0$)

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu^T - \partial_\nu A_\mu^T = F_{\mu\nu}^T. \quad (\text{A. 63})$$

Les champs électrique et magnétique libres sont purement transverses et leur expression en fonction des variables α_e , α_e^* , α_e^* et α_e^* , coïncide avec celle du chapitre I puisqu'il en est ainsi pour le potentiel transverse.

d) EXPRESSION DE L'HAMILTONIEN DU CHAMP

Pour obtenir l'expression de H_R en termes de variables normales, il suffit de reporter dans (A. 27) les expressions (A. 39) de $\mathcal{A}_j$ et $\mathcal{A}_s$, et des expressions analogues pour π_j et π_s déduites de (A. 32) et (A. 38. a), (A. 34) et (A. 38. b). Comme dans le paragraphe C. 4 du chapitre I, on conserve l'ordre entre α et α^* , tel qu'il apparaît dans les calculs (de manière à obtenir un résultat immédiatement généralisable en théorie quantique), et on obtient ainsi, après des calculs très analogues à ceux du chapitre I

$$H_R = \int d^3k \frac{\hbar\omega}{2} [(\alpha_e^* \alpha_e + \alpha_e \alpha_e^*) + (\alpha_e^* \alpha_e^* + \alpha_e \alpha_e^*) + (\alpha_i^* \alpha_i + \alpha_i \alpha_i^*) - (\alpha_s^* \alpha_s + \alpha_s \alpha_s^*)]. \quad (\text{A. 64})$$

On voit alors clairement comment la difficulté liée au signe $-$ de (A. 64) est résolue par la condition supplémentaire. Alors que l'énergie (A. 64) peut parfaitement être négative pour des valeurs quelconques des variables normales, la condition supplémentaire (A. 44) entraîne que, pour un état physique, l'énergie associée aux variables longitudinales compense exactement celle associée aux variables scalaires, la seule contribution non nulle provenant, comme il se doit, des variables transverses.

Remarques

(i) En exprimant au moyen des relations (A. 45) α_l et α_s en fonction de α_d et α_g , nous pouvons écrire H_R sous la forme

$$H_R = \int d^3k \frac{\hbar\omega}{2} [(\alpha_e^* \alpha_e + \alpha_e \alpha_e^*) + (\alpha_e^* \alpha_e^* + \alpha_e \alpha_e^*) + i(\alpha_d^* \alpha_g - \alpha_g^* \alpha_d) + i(\alpha_g \alpha_d^* - \alpha_d \alpha_g^*)]. \quad (\text{A. 65})$$

Il apparaît ainsi clairement que pour un état physique ($\alpha_d = 0$), α_g ne contribue pas à l'énergie du champ libre (qui est due exclusivement au champ transverse et qui est positive).

(ii) Un calcul analogue donne pour l'impulsion $\mathbf{P}_R$ du champ écrite en (A. 28) (après symétrisation des produits)

$$\mathbf{P}_R = \int d^3k \frac{\hbar \mathbf{k}}{2} [(\alpha_e^* \alpha_e + \alpha_e \alpha_e^*) + (\alpha_e^* \alpha_{e'} + \alpha_{e'} \alpha_e^*) + (\alpha_i^* \alpha_i + \alpha_i \alpha_i^*) - (\alpha_s^* \alpha_s + \alpha_s \alpha_s^*)]. \quad (\text{A. 66})$$

Comme pour l'énergie H_R , seules les variables normales transverses contribuent à $\mathbf{P}_R$ dans un état physique. En utilisant des notations covariantes P^μ pour le quadrivecteur impulsion énergie du champ (composantes ordinaires : H_R/c , $\mathbf{P}_R$), et k^μ pour le quadrivecteur d'onde (ω/c , $\mathbf{k}$), les deux expressions (A. 64) et (A. 66) peuvent être regroupées sous la forme

$$P^\mu = \int d^3k \frac{\hbar k^\mu}{2} [(\alpha_e^* \alpha_e + \alpha_e \alpha_e^*) + (\alpha_e^* \alpha_{e'} + \alpha_{e'} \alpha_e^*) + (\alpha_i^* \alpha_i + \alpha_i \alpha_i^*) - (\alpha_s^* \alpha_s + \alpha_s \alpha_s^*)]. \quad (\text{A. 67})$$

(iii) Avant de passer à la quantification, revenons sur la définition (A. 34) de α_s , et imaginons que nous prenions le même signe, +, qu'en (A. 32), remplaçant ainsi (A. 34) par

$$\alpha_s' = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2 \hbar \omega}} \left[\omega \mathcal{A}_s + \frac{i}{\varepsilon_0} \pi_s \right]. \quad (\text{A. 34}')$$

Quelles seraient les modifications des résultats établis dans ce paragraphe ? Tout d'abord, comme nous l'avons déjà signalé plus haut, α_s' évoluerait en $\exp(i\omega t)$ et non en $\exp(-i\omega t)$. L'annulation du coefficient en $\exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$ dans la condition supplémentaire entraînerait alors, au lieu de (A. 44)

$$\alpha_i(\mathbf{k}) - \alpha_s'^*(-\mathbf{k}) = 0 \quad (\text{A. 44}')$$

qui est moins agréable que (A. 44). Enfin, on peut aisément vérifier que l'expression (A. 64) de H_R demeurerait inchangée, alors que l'expression (A. 66) de $\mathbf{P}_R$ serait modifiée (tous les signes devenant positifs), ce qui interdit alors de regrouper les deux expressions en une seule, comme en (A. 67). Toutes ces raisons montrent bien que la définition (A. 34) de α_s doit être préférée à (A. 34)' dans l'établissement d'une théorie covariante.

B — DIFFICULTÉS POSÉES PAR LA QUANTIFICATION DU CHAMP LIBRE

1. Quantification canonique

Nous procédons dans ce paragraphe à la quantification canonique de la théorie précédente, sans nous préoccuper pour l'instant de considérations physiques, c'est-à-dire en traitant tous les degrés de liberté comme indépendants. Nous discuterons ensuite dans le paragraphe suivant des difficultés qui apparaissent lorsqu'on essaie, en théorie quantique, d'introduire la condition supplémentaire et de construire des états physiques contenant un nombre quelconque de photons.

a) RELATIONS DE COMMUTATION CANONIQUES

Comme dans le paragraphe A.2.e du chapitre II, nous associons des opérateurs aux variables dynamiques et à leurs moments conjugués. Les conditions de réalité de la théorie classique deviennent ici

$$A_j(\mathbf{r}) = A_j^+(\mathbf{r}) \quad (\text{B.1.a})$$

$$\mathcal{A}_j(\mathbf{k}) = \mathcal{A}_j^+(-\mathbf{k}) \quad (\text{B.1.b})$$

et des relations analogues pour A_s et $\mathcal{A}_s$, Π_j et π_j , Π_s et π_s . Lorsque l'excursion de $\mathbf{k}$ est limitée à un demi-espace réciproque, toutes les variables dynamiques précédentes peuvent être considérées comme indépendantes. La quantification s'effectue alors au moyen des relations de commutation canoniques (A.61) du chapitre II

$$[\mathcal{A}_i(\mathbf{k}), \pi_j^+(\mathbf{k}')] = i\hbar \delta_{ij} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{B.2.a})$$

$$[\mathcal{A}_s(\mathbf{k}), \pi_s^+(\mathbf{k}')] = i\hbar \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{B.2.b})$$

tous les autres commutateurs étant nuls. L'extension des relations (B.2) lorsque $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$ parcourent tout l'espace s'effectue, comme dans le paragraphe C.4.a du chapitre II, en utilisant (B.1.b) et les relations analogues pour π_j , $\mathcal{A}_s$ et π_s .

Les commutateurs (B.2) sont des commutateurs à temps égaux (point de vue de Schrödinger). La quantification canonique privilégie ainsi le temps, ce qui peut, à première vue, sembler mal adapté à un formalisme covariant. Nous verrons cependant plus loin qu'elle conduit, dans le point de vue de Heisenberg, à des expressions manifestement covariantes pour les commutateurs des potentiels libres en deux points d'espace-temps quelconques $\mathbf{r}$, t et $\mathbf{r}'$, t' .

b) OPÉRATEURS D'ANNIHILATION ET DE CRÉATION

Les variables normales α_j et α_s de la théorie classique deviennent, lors de la quantification canonique, des « opérateurs d'annihilation » a_j et a_s , reliés aux opérateurs $\mathcal{A}_j, \pi_j, \mathcal{A}_s, \pi_s$ par des expressions identiques à (A.32) et (A.34)

$$a_j(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2 \hbar \omega}} \left[\omega \mathcal{A}_j(\mathbf{k}) + \frac{i}{\varepsilon_0} \pi_j(\mathbf{k}) \right] \quad (\text{B.3.a})$$

$$a_s(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2 \hbar \omega}} \left[\omega \mathcal{A}_s(\mathbf{k}) - \frac{i}{\varepsilon_0} \pi_s(\mathbf{k}) \right]. \quad (\text{B.3.b})$$

Les opérateurs adjoints a_j^+ et a_s^+ de a_j et a_s sont les « opérateurs de création ».

La différence de signe entre les derniers termes des seconds membres de (B.3.a) et (B.3.b) va avoir des conséquences importantes au niveau des commutateurs entre les opérateurs de création et d'annihilation. Les relations de commutation canoniques (B.2) entraînent en effet pour les opérateurs définis en (B.3) et leurs adjoints ($\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$ parcourant maintenant tout l'espace)

$$[a_i(\mathbf{k}), a_j^+(\mathbf{k}')] = \delta_{ij} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{B.4.a})$$

$$[a_s(\mathbf{k}), a_s^+(\mathbf{k}')] = -\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{B.4.b})$$

tous les autres commutateurs étant nuls. Pour les trois degrés de liberté spatiaux ($i, j = x, y, z$), on retrouve bien les relations de commutation habituelles pour un oscillateur harmonique quantique. Par contre, pour le degré de liberté scalaire, la relation (B.4.b) diffère par un signe $-$ de la relation habituelle. Nous verrons plus loin les difficultés que soulève ce signe $-$ lors de la construction de l'espace des états. Notons enfin que les relations (B.4.a) et (B.4.b) peuvent être regroupées en une seule avec des notations covariantes

$$[a_\mu(\mathbf{k}), a_\nu^+(\mathbf{k}')] = -g_{\mu\nu} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (\text{B.5})$$

Remarques

(i) a_μ est l'opérateur associé à la variable normale α_μ . Il convient de noter que, en dépit des notations employées, les α_μ ne sont pas les composantes d'un quadrivecteur.

(ii) Les opérateurs a_x, a_y, a_z peuvent toujours être remplacés par a_e, a_e, a_l . Comme la transformation correspondante est orthogonale, les relations (B.4.a) deviennent

$$[a_e(\mathbf{k}), a_e^+(\mathbf{k}')] = \delta_{ee} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{B.6.a})$$

$$[a_l(\mathbf{k}), a_l^+(\mathbf{k}')] = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{B.6.b})$$

tous les autres commutateurs étant nuls.

Il est clair également que les grandeurs physiques importantes, comme l'énergie H_R du champ, l'impulsion P_R , les champs, ... peuvent être exprimées en fonction des opérateurs de création et d'annihilation. Ainsi, l'énergie H_R du champ s'obtient en remplaçant dans l'expression (A.64) les variables normales α et α^* par les opérateurs a et a^+ , ce qui donne

$$H_R = \int d^3k \frac{\hbar\omega}{2} [(a_e^+ a_e + a_e a_e^+) + (a_e^+ a_{e'} + a_{e'} a_e^+) + \\ + (a_l^+ a_l + a_l a_l^+) - (a_s^+ a_s + a_s a_s^+)] \quad (\text{B.7})$$

et plus généralement, à partir de (A.67)

$$P_\mu = - \int d^3k \frac{1}{2} \hbar k_\mu \sum_{\nu\rho} g^{\nu\rho} (a_\nu^+ a_\rho + a_\rho a_\nu^+). \quad (\text{B.8})$$

c) RELATIONS DE COMMUTATION COVARIANTES ENTRE LES POTENTIELS LIBRES DANS LE POINT DE VUE DE HEISENBERG

Les potentiels libres dans le point de vue de Heisenberg s'obtiennent en remplaçant dans l'expression classique (A.50) α_μ et α_μ^* par a_μ et a_μ^+ , ce qui donne, avec des notations covariantes

$$A_\mu(x^\nu) = \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega(2\pi)^3}} [a_\mu(\mathbf{k}) e^{-ik_\nu x^\nu} + a_\mu^+(\mathbf{k}) e^{ik_\nu x^\nu}]. \quad (\text{B.9})$$

Les relations de commutation (B.5) entraînent alors que

$$[A_\mu(\mathbf{r}, t), A_\nu(\mathbf{r}', t')] = \\ = -g_{\mu\nu} \int d^3k \frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega(2\pi)^3} [e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - i\omega(t - t')} - c.c.] \quad (\text{B.10})$$

L'intégrale triple de (B.10) peut être transformée en une intégrale quadruple $\int d^4k$, la contrainte (A.51) étant introduite par l'adjonction d'une fonction delta

$$\delta(k^\mu k_\mu) = \delta(k_0^2 - \mathbf{k}^2) = \frac{\delta(k_0 - |\mathbf{k}|)}{2|\mathbf{k}|} + \frac{\delta(k_0 + |\mathbf{k}|)}{2|\mathbf{k}|}, \quad (\text{B.11})$$

ce qui a en plus l'avantage d'absorber le facteur $1/\omega = 1/c |\mathbf{k}|$ de (B.10). En introduisant la fonction signe de k_0 , $\eta(k_0)$, on peut finalement réécrire (B.10) sous la forme manifestement covariante

$$[A_\mu(\mathbf{r}, t), A_\nu(\mathbf{r}', t')] = \frac{i\hbar}{\varepsilon_0 c} g_{\mu\nu} D(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') \quad (\text{B.12})$$

avec

$$D(\mathbf{r}, t) = \frac{i}{(2\pi)^3} \int d^4k e^{-ik_\nu x^\nu} \delta(k_\mu k^\mu) \eta(k^0). \quad (\text{B.13})$$

Notons enfin qu'il est possible de calculer directement l'intégrale triple de (B.10) et d'établir ainsi que

$$D(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi r} [\delta(r - ct) - \delta(r + ct)] \quad (\text{B.14})$$

ce qui montre que D est nul partout sauf sur le cône de lumière.

Remarques

(i) Notons que la fonction D a déjà été introduite dans le complément C_{III}. A partir de (B.12), il est possible d'obtenir les commutateurs entre les composantes du champ électromagnétique. On obtient alors des expressions identiques à celles calculées dans ce complément (formules 20).

(ii) A partir de l'expression (B.8) de P_μ et des relations de commutation (B.5), il est possible de montrer que

$$[P_\mu, a_\nu(\mathbf{k})] = -\hbar k_\mu a_\nu(\mathbf{k}) \quad (\text{B.15})$$

et par suite, compte tenu de (B.9)

$$[P_\mu, A_\nu(\mathbf{r}, t)] = -i\hbar \partial_\mu A_\nu(\mathbf{r}, t). \quad (\text{B.16})$$

Les P_μ apparaissent ainsi comme les générateurs des translations d'espace-temps dans l'espace des états. Nous avons ici déduit (B.16) des relations de commutation canoniques (B.5). Une quantification complètement covariante suivrait le chemin inverse. Elle partirait de l'étude des symétries du lagrangien pour établir l'expression des grandeurs physiques associées aux générateurs du groupe de Lorentz, postulerait (B.16) et des relations analogues pour les autres générateurs du groupe, pour en déduire ensuite (B.5).

2. Problèmes d'interprétation physique posés par la quantification covariante

L'approche que nous avons suivie dans les paragraphes précédents nous a permis d'établir des relations de commutation manifestement covariantes, comme (B.12) ou (B.16), et de construire ainsi un cadre théorique plus esthétique et mieux adapté à la relativité que celui du chapitre II, où la symétrie entre A et U n'est pas respectée. Nous allons aborder maintenant les problèmes d'interprétation physique posés par la quantification covariante et montrer tout d'abord que des difficultés surgissent à ce niveau, beaucoup plus sérieuses que dans la théorie classique exposée dans les paragraphes précédents, où il suffisait d'imposer la condition supplémentaire (A.44) pour obtenir les bons états physiques.

a) FORME DE LA CONDITION SUPPLÉMENTAIRE EN THÉORIE QUANTIQUE

Un calcul identique à celui du paragraphe A.3.c ci-dessus conduirait, pour le champ libre, à une condition analogue à (A.44), où α_i et α_s sont respectivement remplacés par a_i et a_s . Il est clair cependant qu'une identité telle que (A.44) ne peut être satisfaite par des opérateurs comme a_i et a_s qui agissent dans des sous-espaces différents de l'espace des états (sous-espace des photons longitudinaux et sous-espace des photons scalaires). *Dans la théorie quantique covariante, les équations de Maxwell ne peuvent donc pas être satisfaites entre opérateurs*, puisqu'il n'est pas possible d'imposer la condition supplémentaire comme une identité opératorielle.

On peut alors essayer d'utiliser la condition supplémentaire pour sélectionner les états physiques $|\psi\rangle$ en leur imposant d'être vecteurs propres de $\sum_{\mu} \partial_{\mu} A^{\mu}$ de valeur propre nulle

$$\sum_{\mu} \partial_{\mu} A^{\mu} |\psi\rangle = 0. \quad (\text{B.17})$$

Cette relation devant être vraie pour tout r et pour tout t , un développement analogue à (A.43) conduit aux deux conditions (valables pour tout $\mathbf{k}$)

$$\begin{cases} [a_i(\mathbf{k}) - a_s(\mathbf{k})] |\psi\rangle = 0 & (\text{B.18.a}) \\ [a_i^+(\mathbf{k}) - a_s^+(\mathbf{k})] |\psi\rangle = 0. & (\text{B.18.b}) \end{cases}$$

En fait, une telle condition est trop forte, et il est possible de montrer que les équations (B.17) ou (B.18) n'ont pas de solution physique. Une condition moins forte que (B.17) ou (B.18) est que, pour tout r et tout t , on ait

$$\langle \psi | \sum_{\mu} \partial_{\mu} A^{\mu}(\mathbf{r}, t) | \psi \rangle = 0 \quad \forall \mathbf{r}, t. \quad (\text{B.19})$$

Les états physiques $|\psi\rangle$ sont alors tels que la condition supplémentaire est satisfaite en valeur moyenne dans ces états. L'ennui avec la condition (B.19) est que ses solutions ne forment pas nécessairement un sous-espace vectoriel de l'espace des états. C'est la raison pour laquelle on préfère utiliser la condition supplémentaire sous la forme

$$\sum_{\mu} \partial_{\mu} A^{(+)\mu} |\psi\rangle = 0 \quad (\text{B.20})$$

où $A^{(+)\mu}$ est la composante de fréquence positive de A^{μ} (ne contenant que des termes en $\exp(-i\omega t)$). Pour le champ libre, l'expression (B.9) montre que cette condition est satisfaite pour tout r et tout t si

$$[a_i(\mathbf{k}) - a_s(\mathbf{k})] |\psi\rangle = 0 \quad \forall \mathbf{k}. \quad (\text{B.21})$$

Les solutions de (B.20) ou (B.21) forment un sous-espace vectoriel de l'espace des états et sont toutes solutions de l'équation (B.19).

C'est sous la forme (B.21) que nous utiliserons désormais la condition supplémentaire pour caractériser les états physiques du champ quantique libre (*).

b) PROBLÈMES POSÉS PAR LA CONSTRUCTION DE L'ESPACE DES ÉTATS

Il semble tout d'abord logique de postuler l'existence d'un état $|0\rangle$, vide de tout photon, et sur lequel l'action de tout opérateur d'annihilation $a_\mu(\mathbf{k})$ donne zéro puisqu'il est impossible d'enlever un photon au vide qui n'en contient aucun

$$a_\mu(\mathbf{k})|0\rangle = 0 \quad \forall \mu, \mathbf{k}. \quad (\text{B.22})$$

Notons en particulier que l'équation (B.22) entraîne que le vide obéit à (B.21) et est donc un état physique, ce qui est un résultat satisfaisant.

L'étape suivante consiste alors à essayer de construire des états à un nombre quelconque de photons par action répétée des opérateurs de création a_μ^+ sur le vide. Pour les photons transverses et longitudinaux, ceci ne pose aucun problème, car les relations de commutation (B.4.a) ou (B.6) ont la forme habituelle. Par exemple, un état à $n_e(\mathbf{k})$ photons $\mathbf{k}\epsilon$, $n_{e'}(\mathbf{k}')$ photons $\mathbf{k}'\epsilon'$, $n_l(\mathbf{k}'')$ photons $\mathbf{k}''\epsilon''$ s'écrit (avec des notations simplifiées)

$$|n_e, n_{e'}, n_l\rangle = \frac{(a_e^+)^{n_e} (a_{e'}^+)^{n_{e'}} (a_l^+)^{n_l}}{\sqrt{n_e! n_{e'}! n_l!}} |0\rangle. \quad (\text{B.23})$$

En revanche, pour les photons scalaires, des difficultés sérieuses surgissent. Calculons par exemple la norme de l'état à un photon scalaire

$$|\psi\rangle = \int d^3k g(\mathbf{k}) a_s^+(\mathbf{k}) |0\rangle. \quad (\text{B.24})$$

En utilisant la relation de commutation (B.4.b) et (B.22), on obtient

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \iint d^3k d^3k' g^*(\mathbf{k}') g(\mathbf{k}) \langle 0 | a_s(\mathbf{k}') a_s^+(\mathbf{k}) | 0 \rangle \\ &= - \langle 0 | 0 \rangle \int d^3k |g(\mathbf{k})|^2. \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

(*) Dans le paragraphe D.3.a ci-dessous et dans le paragraphe 3.c du complément A_1 , nous indiquerons comment on peut généraliser l'équation (B.21) pour un champ de rayonnement quantique couplé à des sources extérieures ou au champ de Dirac.

Il apparaît ainsi que le vide $|0\rangle$ et l'état $|\psi\rangle$ à un photon scalaire ont des normes de signes opposés, ce qui est tout à fait anormal dans un espace de Hilbert où toutes les normes doivent être positives pour permettre une interprétation probabiliste.

Il convient donc de généraliser la notion de norme dans l'espace des états, de manière à pouvoir admettre, dans cet espace, des états de norme négative, tout en conservant des états physiques qui soient de norme finie et positive.

Remarque

Il peut être tentant de considérer que l'interprétation de $a_s(a_s^+)$ comme un opérateur d'annihilation (de création) est erronée, et qu'il faut intervenir ces rôles. Posons alors

$$\begin{cases} b_s(\mathbf{k}) = a_s^+(\mathbf{k}) \\ b_s^+(\mathbf{k}) = a_s(\mathbf{k}) \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{(B.26. a)} \\ \text{(B.26. b)} \end{matrix}$$

et considérons b_s comme un opérateur d'annihilation, b_s^+ comme un opérateur de création satisfaisant, compte tenu de (B.4. b) et (B.26), la relation de commutation

$$[b_s(\mathbf{k}), b_s^+(\mathbf{k}')] = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad \text{(B.27)}$$

identique à (B.4. a). Le vide de photons scalaires satisfait maintenant à

$$b_s(\mathbf{k}) |0\rangle = a_s^+(\mathbf{k}) |0\rangle = 0. \quad \text{(B.28)}$$

En revanche, la condition supplémentaire (B.21) qui s'obtient en annulant le coefficient de $\exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ dans $\partial_\mu A^{(+)\mu}$ demeure inchangée et s'écrit avec les notations (B.26)

$$[a_s(\mathbf{k}) - b_s^+(\mathbf{k})] |\psi\rangle = 0 \quad \forall \mathbf{k}. \quad \text{(B.29)}$$

Mais on voit alors surgir de nouvelles difficultés. Tout d'abord, le nouveau vide défini en (B.28) ne satisfait plus (B.29) et ne peut donc plus être considéré comme un état physique. De plus, il est possible de montrer (cf. exercice 2) que les solutions de (B.29), avec cette nouvelle interprétation de $a_s = b_s^+$ comme un opérateur de création, ne sont pas normalisables. Ainsi, le signe — apparaissant dans (B.4. b) nous conduit, soit à des états à un photon scalaire de norme négative, si nous considérons a_s comme un opérateur d'annihilation, a_s^+ comme un opérateur de création; soit à des états physiques de norme infinie, si nous intervertissons les interprétations de a_s et a_s^+ . La seconde éventualité est en fait encore plus grave que la première, car elle concerne des états physiques, alors que les états à un photon scalaire (B.24) n'en sont pas. C'est la raison pour laquelle nous revenons à l'interprétation initiale de a_s et a_s^+ .

C — QUANTIFICATION COVARIANTE AVEC UNE MÉTRIQUE INDÉFINIE

Dans cette troisième partie nous présentons une méthode qui permet de résoudre les difficultés que nous venons de discuter au paragraphe B.2. Nous commençons (§ 1) par montrer qu'il est tout à fait possible d'introduire dans un espace de Hilbert un deuxième produit scalaire, conduisant à une deuxième norme, non nécessairement définie positive (métrique indéfinie). Ce nouveau produit scalaire permet de définir un nouvel adjoint pour chaque opérateur et une nouvelle valeur moyenne. La quantification canonique est alors effectuée (§ 2) en remplaçant partout dans la théorie précédente les opérateurs hermitiques conjugués par les nouveaux adjoints, la nouvelle métrique étant choisie de manière à résoudre les difficultés associées au potentiel scalaire. Nous construisons ensuite (§ 3) les kets physiques, obéissant à la condition supplémentaire (B.21), et montrons enfin (§ 4) que, pour ces kets, toutes les prévisions concernant des grandeurs physiques ne font intervenir que les degrés de liberté transverses et sont conformes à l'interprétation quantique habituelle.

1. Métrique indéfinie dans un espace de Hilbert

Soit un espace de Hilbert, avec les notations de Dirac habituelles (ket $|\psi\rangle$, bra $\langle\phi|$), avec le produit scalaire habituel $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$, linéaire par rapport à $|\psi\rangle$, antilinéaire par rapport à $\langle\phi|$, donnant une norme $\langle\psi|\psi\rangle$ définie positive (c'est-à-dire strictement positive et nulle si et seulement si $|\psi\rangle = 0$).

A partir d'un opérateur linéaire M de cet espace, hermitique et unitaire, c'est-à-dire tel que

$$M = M^+ = M^{-1} \quad (\text{C.1})$$

introduisons un deuxième produit scalaire défini par

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|M|\psi\rangle. \quad (\text{C.2})$$

Nous utilisons des notations de Dirac « rondes » $|\rangle$ et $\langle|$ pour ce nouveau produit scalaire. Il est équivalent de dire qu'on associe aux anciens ket $|\psi\rangle$ et bra $\langle\phi|$ de nouveaux $|\psi\rangle$ et $\langle\phi|$ définis par

$$\begin{cases} |\psi\rangle = |\psi\rangle \\ \langle\phi| = \langle\phi|M. \end{cases} \quad (\text{C.3. a})$$

$$\quad \quad \quad \begin{cases} |\psi\rangle = |\psi\rangle \\ \langle\phi| = \langle\phi|M. \end{cases} \quad (\text{C.3. b})$$

De (C.1) et (C.2) il découle que

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^* \quad (\text{C.4})$$

et que $\langle \phi | \psi \rangle$ est linéaire par rapport à $|\psi\rangle$, antilinéaire par rapport à $\langle \phi |$. Le nouveau produit scalaire a donc un certain nombre des propriétés habituelles d'un produit scalaire ordinaire. Par contre, la nouvelle norme $\langle \psi | \psi \rangle$ n'est pas nécessairement définie positive. Pour le voir, considérons les vecteurs propres $|m_i\rangle$ de M , de valeurs propres m_i . Par suite de (C.1), m_i est réel et forcément égal à $+1$ ou -1 . En remplaçant M par $\sum_i m_i |m_i\rangle \langle m_i|$ dans (C.2), on obtient

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | M | \psi \rangle = \sum_i m_i |\langle m_i | \psi \rangle|^2. \quad (\text{C.5})$$

Comme certains m_i peuvent être égaux à -1 , il apparaît clairement sur (C.5) que $\langle \psi | \psi \rangle$, tout en étant réel, peut prendre des valeurs négatives ou nulles. La nouvelle métrique associée à M est dite, dans ce cas, *indéfinie*.

A partir du nouveau produit scalaire, on peut introduire de nouveaux éléments de matrice pour un opérateur linéaire A

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \langle \phi | M A | \psi \rangle \quad (\text{C.6})$$

et un nouvel adjoint de A , que nous noterons $\bar{A}$ pour le distinguer de l'ancien A^+ , et qui est défini par

$$\langle \phi | \bar{A} | \psi \rangle = \langle \psi | A | \phi \rangle^* \quad (\text{C.7})$$

pour tout ψ et tout ϕ . Les relations (C.4) et (C.7) entraînent également que

$$|\psi'\rangle = A |\psi\rangle \Leftrightarrow \langle \psi'| = \langle \psi | \bar{A}. \quad (\text{C.8})$$

Quelle est la relation entre le nouvel adjoint $\bar{A}$ et l'ancien A^+ ? Pour l'obtenir, il suffit d'exprimer les deux termes de l'équation (C.7) au moyen des kets habituels

$$\langle \phi | \bar{A} | \psi \rangle = \langle \phi | M \bar{A} | \psi \rangle \quad (\text{C.9.a})$$

$$\langle \psi | A | \phi \rangle^* = \langle \psi | M A | \phi \rangle^* = \langle \phi | A^+ M^+ | \psi \rangle. \quad (\text{C.9.b})$$

La comparaison de (C.9.a) et (C.9.b) donne alors, $M \bar{A} = A^+ M^+$, c'est-à-dire encore, comme $M^2 = 1$ et $M = M^+$

$$\bar{A} = M A^+ M \quad (\text{C.10})$$

A est hermitique dans la nouvelle métrique si

$$A = \bar{A} \quad (\text{C.11})$$

et a alors, d'après (C.7), des éléments diagonaux réels. Par définition,

nous appellerons « nouvelle valeur moyenne » dans l'état ψ d'un opérateur A , la quantité

$$\langle A \rangle_{\psi} = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (\text{C. 12})$$

qui est réelle si $A = \bar{A}$, et qui généralise dans la nouvelle métrique, l'expression bien connue de la valeur moyenne habituelle. (Nous supposons bien sûr dans (C. 12) que $\langle \psi | \psi \rangle$ est non nul.)

Remarques

(i) La notion de vecteur propre et de valeur propre est indépendante de toute métrique. Les valeurs propres λ_i d'un opérateur linéaire A sont donc les mêmes, que l'on utilise l'ancienne ou la nouvelle métrique. On peut dire encore que, d'après (C. 3. a), l'égalité

$$A | \varphi_i \rangle = \lambda_i | \varphi_i \rangle \quad (\text{C. 13. a})$$

entraîne

$$A | \varphi_i \rangle = \lambda_i | \varphi_i \rangle. \quad (\text{C. 13. b})$$

Notons en passant que la valeur propre λ_i de A peut être considérée aussi bien comme l'ancienne valeur moyenne de A dans l'état propre correspondant φ_i que la nouvelle. En projetant (C. 13. a) sur $\langle \varphi_i |$ et (C. 13. b) sur $\langle \varphi_i |$, on obtient en effet, si $\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle$ est non nul (rappelons que $\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle$ est toujours non nul, sauf si $|\varphi_i\rangle$ est nul)

$$\lambda_i = \frac{\langle \varphi_i | A | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle} \quad (\text{C. 14. a})$$

$$\lambda_i = \frac{\langle \varphi_i | A | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle}. \quad (\text{C. 14. b})$$

Si $\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle$ est nul, la deuxième égalité (C. 14) n'est bien sûr plus valable (forme indéterminée).

(ii) Supposons que $A = \bar{A}$ mais que $A \neq A^+$, par exemple $A = -A^+$ (opérateur A antihermitique au sens habituel). Comme $\langle \varphi_i | A | \varphi_i \rangle = \langle \varphi_i | A^+ | \varphi_i \rangle^* = -\langle \varphi_i | A | \varphi_i \rangle^*$ est alors imaginaire pur, la première égalité (C. 14) entraîne que λ_i est imaginaire pur. Par contre, comme $A = \bar{A}$, $\langle \varphi_i | A | \varphi_i \rangle$ est réel et la seconde égalité (C. 14) semble indiquer que λ_i est réel. Cette contradiction n'est qu'apparente car on peut montrer (cf. exercice 3) que, si $A = \bar{A}$ et si λ_i n'est pas réel, alors $\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle$ est nécessairement nul, de sorte que (C. 14. b) n'est plus valable.

(iii) Soit $\{ |u_n\rangle \}$ une base de l'espace des états, orthonormée au sens habituel, satisfaisant la relation de fermeture

$$\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| = \mathbb{1}. \quad (\text{C. 15. a})$$

Comme, d'après (C.3.b), $\langle u_n | = \langle u_n | M$ (puisque $M^2 = 1$), cette relation s'écrit encore

$$\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| M = \mathbb{1}. \quad (\text{C.15.b})$$

Ces deux relations sont utiles pour relier entre elles les deux types de composantes $\langle u_n | \psi \rangle$ et $\langle u_n | \psi \rangle$ d'un vecteur $|\psi\rangle$ de l'espace des états (exercice 3).

Insistons enfin sur le fait que la nouvelle valeur moyenne n'a pas le même contenu physique que l'ancienne. Même si $A = \bar{A}$, il n'est pas possible en général de donner une interprétation probabiliste à l'expression (C.12), du type de celle donnée à la valeur moyenne habituelle d'un opérateur hermitique dans l'ancien sens, $A = A^+$. Rappelons cette interprétation : lorsque $A = A^+$, $\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$ est la moyenne des valeurs propres λ_i de A (qui sont réelles puisque $A = A^+$), pondérées par les probabilités $\pi_i = |\langle \varphi_i | \psi \rangle|^2 / \langle \psi | \psi \rangle$ de trouver le résultat λ_i sur le système dans l'état $|\psi\rangle$. Lorsque $A = \bar{A}$, et que $A \neq A^+$, certaines valeurs propres de A peuvent ne pas être réelles, et il est alors exclu de les interpréter comme des résultats de mesure possibles. On peut se demander alors quel est l'intérêt d'introduire (C.12). En fait, la nouvelle valeur moyenne est intéressante pour les potentiels qui, tout en étant réels dans la théorie classique, ne sont pas des grandeurs véritablement physiques dans la mesure où leur valeur précise dépend d'un arbitraire de jauge. Les postulats quantiques de la mesure ne s'appliquent donc pas en fait aux potentiels, et il n'est pas scandaleux de leur associer des opérateurs $A \neq A^+$ (cela peut même être utile comme nous le verrons plus loin !). Cependant, il est important que les potentiels vérifient $A = \bar{A}$ de façon que leur valeur moyenne, au nouveau sens (C.12), soit réelle. En effet, ceci est nécessaire si l'on veut que la valeur moyenne des équations quantiques du mouvement coïncide avec les équations classiques où les potentiels sont des fonctions réelles de $\mathbf{r}$ et t . Si l'on abandonne ainsi l'hermiticité des potentiels au sens de l'ancienne métrique pour la remplacer par l'hermiticité au sens de la nouvelle, il faudra bien sûr s'assurer que les anciennes et nouvelles valeurs moyennes des grandeurs véritablement physiques, comme les champs électriques et magnétiques, coïncident lorsqu'elles sont calculées dans les bons états physiques.

Finalement, la généralisation présentée dans ce paragraphe offre la possibilité d'avoir des états de nouvelle norme négative, de considérer des opérateurs non hermitiques dans l'ancien sens ($A \neq A^+$), mais hermitiques dans le nouveau ($A = \bar{A}$), ce qui permet d'associer à ces opérateurs des nouvelles valeurs moyennes réelles. C'est cette « flexibilité » du formalisme qui nous permettra plus loin de résoudre les difficultés associées au potentiel scalaire.

2. Choix de la nouvelle métrique pour la quantification covariante

Pour essayer de résoudre les difficultés mentionnées à la fin de la partie B, nous allons maintenant introduire une nouvelle métrique dans l'espace des états du rayonnement. Comme toutes les valeurs moyennes vont être ensuite calculées avec cette nouvelle métrique, et que ces nouvelles valeurs moyennes doivent être réelles pour les potentiels, nous devons donc imposer aux opérateurs potentiels d'être hermitiques dans le nouveau sens.

$$A_\mu(\mathbf{r}) = \bar{A}_\mu(\mathbf{r}) \quad (\text{C.16. a})$$

$$\mathcal{A}_\mu(\mathbf{k}) = \bar{\mathcal{A}}_\mu(-\mathbf{k}) \quad (\text{C.16. b})$$

et des conditions analogues pour Π_μ et π_μ . Tous les calculs du paragraphe B ci-dessus restent donc valables, à condition de remplacer partout les anciens adjoints par les nouveaux, en particulier a_μ^+ par $\bar{a}_\mu$. Par exemple, on obtient à partir des équations (A.40. a) et (A.40. b), (B.4) et (B.7)

$$A_\mu(\mathbf{r}) = \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega(2\pi)^3}} [a_\mu(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \bar{a}_\mu(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] \quad (\text{C.17})$$

$$[a_i(\mathbf{k}), \bar{a}_j(\mathbf{k}')] = \delta_{ij} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{C.18. a})$$

$$[a_s(\mathbf{k}), \bar{a}_s(\mathbf{k}')] = -\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{C.18. b})$$

$$H_R = \int d^3k \frac{\hbar\omega}{2} [(\bar{a}_e a_e + a_e \bar{a}_e) + (\bar{a}_e' a_e' + a_e' \bar{a}_e') + (\bar{a}_l a_l + a_l \bar{a}_l) - (\bar{a}_s a_s + a_s \bar{a}_s)] \quad (\text{C.19})$$

Comment choisir la métrique M ? Comme tous les ennuis viennent du signe $-$ de (C.18. b), l'idée la plus simple consiste à jouer sur la différence possible entre a_s^+ et $\bar{a}_s$ pour corriger ce signe. Supposons par exemple que l'on ait réussi à trouver M tel que

$$\bar{a}_j = M a_j^+ M = a_j^+ \quad (\text{C.20. a})$$

$$\bar{a}_s = M a_s^+ M = -a_s^+ \quad (\text{C.20. b})$$

En d'autres termes, M commute avec a_j mais anticommute avec a_s . Les relations de commutation (C.18. a) demeurent valables pour les opérateurs a_i et a_j^+ relatifs aux degrés de liberté spatiaux, alors que (C.18. b) devient

$$[a_s(\mathbf{k}), a_s^+(\mathbf{k}')] = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{C.21})$$

a_s et a_s^+ deviennent alors des opérateurs d'annihilation et de création tout à fait « normaux », et permettent de construire sans difficulté l'espace

des états des photons scalaires. De plus, comme (C.20.a) entraîne que $\bar{a}_e = a_e^+$, $\bar{a}_{e'} = a_{e'}^+$, $\bar{a}_l = a_l^+$, l'hamiltonien (C.19), exprimé en fonction des anciens adjoints, devient, compte tenu de (C.20.b)

$$H_R = \int d^3k \frac{\hbar\omega}{2} [(a_e^+ a_e + a_e a_e^+) + (a_{e'}^+ a_{e'} + a_{e'} a_{e'}^+) + (a_l^+ a_l + a_l a_l^+) + (a_s^+ a_s + a_s a_s^+)] \quad (C.22)$$

et ne contient que des signes +. L'énergie devient donc définie positive (rappelons que les valeurs propres d'un opérateur sont indépendantes de la métrique; voir remarque (i) du paragraphe C.1 ci-dessus).

Avant d'aller plus loin, notons que la relation $\bar{a}_s = -a_s^+$ entraîne que le potentiel scalaire A_s est maintenant antihermitique dans l'ancien sens ($A_s^+ = -A_s$), puisqu'on lui impose d'être hermitique dans le nouveau (équation (C.17)). Le rétablissement du signe + dans (C.21) est donc obtenu au prix de l'abandon de l'hermiticité de A_s au sens habituel. Il n'est donc plus possible d'appliquer les postulats de la mécanique quantique à A_s . Cela n'est cependant pas grave, car A_s n'est pas une grandeur véritablement physique.

Montrons maintenant comment il est possible de satisfaire aux relations (C.20). Introduisons tout d'abord, pour chaque mode scalaire (*), une base d'états

$$|n_s\rangle = \frac{(a_s^+)^{n_s}}{\sqrt{n_s!}} |0_s\rangle \quad (C.23)$$

normés au sens habituel

$$\langle n_s | n'_s \rangle = \delta_{n_s n'_s}. \quad (C.24)$$

L'action de a_s et a_s^+ sur $|n_s\rangle$ est bien connue puisque la relation de commutation $[a_s, a_s^+] = 1$ est « normale »

$$a_s^+ |n_s\rangle = \sqrt{n_s + 1} |n_s + 1\rangle \quad (C.25.a)$$

$$a_s |n_s\rangle = \sqrt{n_s} |n_s - 1\rangle \quad (C.25.b)$$

$$a_s |0_s\rangle = 0 \quad (C.25.c)$$

et celle de $\bar{a}_s$ s'en déduit d'après (C.20.b)

$$\bar{a}_s |n_s\rangle = -\sqrt{n_s + 1} |n_s + 1\rangle. \quad (C.26)$$

(*) Pour alléger les notations, nous omettons l'indice k du mode. Nous supposons également le champ quantifié dans un cube de manière à avoir des modes k discrets.

Considérons alors l'opérateur M hermitique et unitaire défini par

$$M |n_s\rangle = (-1)^{n_s} |n_s\rangle. \quad (\text{C.27})$$

De (C.25. a), (C.26) et (C.27), il découle alors que

$$Ma^+ |n_s\rangle = (-1)^{n_s+1} \sqrt{n_s+1} |n_s+1\rangle = -a^+ M |n_s\rangle \quad (\text{C.28})$$

ce qui, comme l'ensemble $\{|n_s\rangle\}$ forme une base, entraîne que $Ma_s^+ = -a_s^+ M$ et prouve donc (C.20. b). La relation (C.27) permet alors de calculer les nouveaux produits scalaires

$$\langle n_s | n'_s \rangle = \langle n_s | M | n'_s \rangle = (-1)^{n_s} \delta_{n_s n'_s}. \quad (\text{C.29})$$

Alors que le vide a une nouvelle norme positive, les états à un photon scalaire ont une nouvelle norme négative. La généralisation présentée dans ce paragraphe permet donc d'inclure dans le formalisme des situations du type de celles rencontrées plus haut (§ B.2).

Remarque

Changeons les facteurs de phase des vecteurs de base (C.23), en posant

$$|n_s\rangle = (-1)^{n_s} \frac{(a^+)^{n_s}}{\sqrt{n_s!}} |0_s\rangle \quad (\text{C.30})$$

de manière à avoir une expression plus agréable de $|n_s\rangle$ en fonction de $\bar{a}_s$ et $|0_s\rangle$

$$|n_s\rangle = \frac{(\bar{a}_s)^{n_s}}{\sqrt{n_s!}} |0_s\rangle. \quad (\text{C.31})$$

Les relations (C.26), (C.25. b) et (C.25. a) deviennent alors

$$\bar{a}_s |n_s\rangle = \sqrt{n_s+1} |n_s+1\rangle \quad (\text{C.32. a})$$

$$a_s |n_s\rangle = -\sqrt{n_s} |n_s-1\rangle \quad (\text{C.32. b})$$

$$a_s^+ |n_s\rangle = -\sqrt{n_s+1} |n_s+1\rangle. \quad (\text{C.32. c})$$

La relation (C.27) qui ne dépend pas du facteur de phase de $|n_s\rangle$ demeure inchangée, de même que la relation (C.29) qui en découle. Suivant le choix (C.23) ou (C.30), on peut donc dire, si l'on utilise uniquement $\bar{a}_s$ et a_s , que, par rapport à la théorie de l'oscillateur harmonique ordinaire, il suffit d'ajouter un signe $-$, soit aux éléments de matrice de $\bar{a}_s$ (pour le choix C.23), soit aux éléments de matrice de a_s (pour le choix C.30).

3. Construction des kets physiques

La forme très simple de la condition supplémentaire (B.21) suggère d'introduire, pour chaque valeur de k , deux combinaisons linéaires

« orthogonales » de a_l et a_s généralisant ainsi au cas quantique les variables normales (A.45). Posons ainsi

$$a_d = \frac{i}{\sqrt{2}}(a_l - a_s) \quad (\text{C.33.a})$$

$$a_g = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_l + a_s). \quad (\text{C.33.b})$$

Les nouveaux opérateurs a_d et a_g ainsi introduits satisfont, compte tenu de (C.18.a), (C.20.a) et (C.21), aux relations

$$[a_d(\mathbf{k}), a_d^+(\mathbf{k}')] = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{C.34.a})$$

$$[a_g(\mathbf{k}), a_g^+(\mathbf{k}')] = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{C.34.b})$$

$$[a_d, a_g^+] = [a_g, a_d^+] = 0. \quad (\text{C.34.c})$$

Les relations (C.33) permettent ainsi d'introduire, pour chaque valeur de $\mathbf{k}$, deux nouveaux types de modes, d et g , auxquels correspondent des « photons d » et des « photons g ». Notons en passant que le vide de photons d et g coïncide avec le vide de photons l et s , car les relations (C.33) entraînent

$$a_d |0_l 0_s\rangle = 0 \quad (\text{C.35.a})$$

$$a_g |0_l 0_s\rangle = 0 \quad (\text{C.35.b})$$

ce qui démontre que

$$|0_d 0_g\rangle = |0_l 0_s\rangle. \quad (\text{C.36})$$

Avec ces nouvelles notations, la condition supplémentaire (B.21) s'écrit

$$a_d |\psi\rangle = 0 \quad (\text{C.37})$$

qui généralise (A.46) et exprime que *les kets physiques ne contiennent aucun photon d* . La condition supplémentaire ne précise rien, en revanche, sur l'état du mode g , qui peut être quelconque (ni bien sûr sur l'état des modes transverses ε et ε').

Construisons maintenant une base de l'espace des kets physiques. Pour chaque valeur de $\mathbf{k}$, nous avons

$$|n_\varepsilon n_{\varepsilon'} 0_d n_g\rangle = \frac{(a_\varepsilon^+)^{n_\varepsilon} (a_{\varepsilon'}^+)^{n_{\varepsilon'}} (a_g^+)^{n_g}}{\sqrt{n_\varepsilon! n_{\varepsilon'}! n_g!}} |0\rangle. \quad (\text{C.38})$$

Les nombres de photons transverses n_ε et $n_{\varepsilon'}$ peuvent être quelconques, de même que le nombre n_g de photons g . En revanche, le nombre de photons d est nécessairement nul, d'après (C.37). L'ensemble des vecteurs (C.38)

forme une base orthonormée au sens habituel dans le sous-espace des kets physiques

$$\langle n_e n_{e'} 0_d n_g | n'_e n'_{e'} 0_d n'_g \rangle = \delta_{n_e n'_e} \delta_{n_{e'} n'_{e'}} \delta_{n_g n'_g}. \quad (\text{C.39})$$

Que peut-on dire par contre des nouveaux produits scalaires des vecteurs de base (C.38) ? Comme $\langle n_e n_{e'} | n'_e n'_{e'} \rangle = \delta_{n_e n'_e} \delta_{n_{e'} n'_{e'}}$, il suffit de calculer $\langle 0_d n_g | 0_d n'_g \rangle$. Comme $|n_g\rangle$ coïncide avec $|n_g\rangle$ et s'exprime, d'après (C.38), en fonction de a_g^+ , il nous faut, pour calculer $\langle 0_d n_g |$, déterminer auparavant le nouvel adjoint $\bar{a}_g^+$ de a_g^+ . Or, les relations de définition (C.33) donnent

$$\bar{a}_d = -\frac{i}{\sqrt{2}}(\bar{a}_l - \bar{a}_s) = -\frac{i}{\sqrt{2}}(a_l^+ + a_s^+) = -ia_g^+ \quad (\text{C.40.a})$$

$$\bar{a}_g = \frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{a}_l + \bar{a}_s) = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_l^+ - a_s^+) = +ia_d^+ \quad (\text{C.40.b})$$

ce qui montre que

$$\bar{a}_g^+ = -ia_d. \quad (\text{C.41})$$

De plus, comme d'après (C.34.c), a_d commute avec a_g^+ et que, d'après (C.40.a), $a_g^+ = i\bar{a}_d$, on a

$$[a_d, \bar{a}_d] = 0. \quad (\text{C.42})$$

On peut alors écrire, compte tenu de (C.40.a), (C.41) et (C.42)

$$\begin{aligned} \sqrt{n_g! n'_g!} \langle 0_d n_g | 0_d n'_g \rangle &= \langle 0_d 0_g | (\bar{a}_g^+)^{n_g} (a_g^+)^{n'_g} | 0_d 0_g \rangle \\ &= (i)^{(n'_g - n_g)} \langle 0_d 0_g | (a_d)^{n_g} (\bar{a}_d)^{n'_g} | 0_d 0_g \rangle \\ &= (i)^{(n'_g - n_g)} \langle 0_d 0_g | (\bar{a}_d)^{n_g} (a_d)^{n'_g} | 0_d 0_g \rangle = \delta_{n_g 0} \delta_{n'_g 0}. \end{aligned} \quad (\text{C.43})$$

Finalement, tous les vecteurs de base du sous-espace des kets physiques, ont un nouveau produit scalaire nul et ont une nouvelle norme nulle, sauf si $n_g = 0$

$$\langle n_e n_{e'} 0_d n_g | n'_e n'_{e'} 0_d n'_g \rangle = \delta_{n_e n'_e} \delta_{n_{e'} n'_{e'}} \delta_{n_g 0} \delta_{n'_g 0}. \quad (\text{C.44})$$

Considérons maintenant (pour une valeur de $\mathbf{k}$), un ket physique $|\psi\rangle$ du rayonnement

$$|\psi\rangle = |\psi_T\rangle \otimes |\psi_{LS}\rangle \quad (\text{C.45})$$

décrivant une situation où les degrés de liberté transverses sont dans

l'état $|\psi_T\rangle$ et les degrés de liberté longitudinaux et scalaires dans l'état physique

$$|\psi_{LS}\rangle = \sum_n c_n |0_d n_g\rangle \quad (\text{C.46})$$

dans lequel n_d est toujours nul. Compte tenu de (C.44), la nouvelle norme de $|\psi\rangle$ vaut

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \langle \psi_T | \psi_T \rangle \langle \psi_{LS} | \psi_{LS} \rangle \\ &= \langle \psi_T | \psi_T \rangle |c_0|^2. \end{aligned} \quad (\text{C.47})$$

Cette relation peut être aisément généralisée à une situation où $|\psi\rangle$ se développe sur tous les modes $\mathbf{k}$ (transverses), $|\psi_{LS}\rangle$ sur tous les modes $(\mathbf{k}, g)$ (n_d étant toujours nul). La relation (C.47) reste valable, c_0 représentant la composante de $|\psi_{LS}\rangle$ sur le vide de tous les modes $(\mathbf{k}, d)$ et $(\mathbf{k}, g)$. Il apparaît ainsi que la nouvelle norme d'un ket physique est proportionnelle à l'ancienne norme de sa composante transverse, le coefficient de proportionnalité $|c_0|^2$ étant le carré du module de la composante de $|\psi_{LS}\rangle$ sur le vide des modes d et g , ou encore, d'après (C.36), sur le vide des modes l et s .

4. Valeurs moyennes des grandeurs physiques dans un ket physique

Après avoir caractérisé les kets physiques par la condition (C.37), nous calculons maintenant la valeur moyenne dans ces kets des diverses grandeurs physiques (potentiels, champs, énergie).

a) VALEUR MOYENNE DES POTENTIELS ET DES CHAMPS

Comme en (A.57), nous écrivons les potentiels A_μ sous la forme

$$A_\mu = A_\mu^T + A_\mu^G + A_\mu^D \quad (\text{C.48})$$

où A_μ^T , A_μ^G , A_μ^D sont donnés par des expressions identiques à (A.58), (A.59), (A.62) au remplacement près des variables normales classiques $\alpha_\varepsilon, \alpha_{\varepsilon'}, \alpha_d, \alpha_g, \alpha_\varepsilon^*, \alpha_{\varepsilon'}^*, \alpha_d^*, \alpha_g^*$ par les opérateurs $a_\varepsilon, a_{\varepsilon'}, a_d, a_g, \bar{a}_\varepsilon, \bar{a}_{\varepsilon'}, \bar{a}_d, \bar{a}_g$.

Comme les opérateurs apparaissant dans A_μ^T n'agissent que sur les degrés de liberté transverses, il s'ensuit que

$$\begin{aligned} \frac{\langle \psi | A_\mu^T | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} &= \frac{\langle \psi_T | A_\mu^T | \psi_T \rangle}{\langle \psi_T | \psi_T \rangle} \frac{\langle \psi_{LS} | \psi_{LS} \rangle}{\langle \psi_{LS} | \psi_{LS} \rangle} \\ &= \frac{\langle \psi_T | A_\mu^T | \psi_T \rangle}{\langle \psi_T | \psi_T \rangle}. \end{aligned} \quad (\text{C.49})$$

La nouvelle valeur moyenne du potentiel transverse coïncide donc avec l'ancienne, ce qui est satisfaisant dans la mesure où A_μ^T , invariant dans un changement de jauge, peut être considéré comme une grandeur véritablement physique.

D'après (A.62), A_μ^D est une superposition linéaire des opérateurs a_d et $\bar{a}_d$. Comme la condition supplémentaire (C.37) entraîne que $a_d |\psi\rangle = 0$ la nouvelle valeur moyenne de A_μ^D dans le ket physique $|\psi\rangle$ est nulle

$$\frac{\langle \psi | A_\mu^D | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = 0. \quad (\text{C.50})$$

Considérons enfin A_μ^G . Comme A_μ^G n'agit pas sur les degrés de liberté transverses, cette moyenne ne fait intervenir que $|\psi_{LS}\rangle$ et s'écrit, d'après (A.59)

$$\frac{\langle \psi | A_\mu^G | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = -\partial_\mu \langle f \rangle \quad (\text{C.51})$$

où $\langle f \rangle$ est la nouvelle valeur moyenne dans l'état $|\psi\rangle$ de l'opérateur f obtenu en remplaçant dans (A.60) α_g et α_g^* par a_g et $\bar{a}_g$.

Finalement la nouvelle valeur moyenne de (C.48) s'écrit, compte tenu de (C.49), (C.50), (C.51)

$$\frac{\langle \psi | A_\mu | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle \psi_T | A_\mu^T | \psi_T \rangle}{\langle \psi_T | \psi_T \rangle} - \partial_\mu \langle f \rangle. \quad (\text{C.52})$$

Elle ne diffère de l'ancienne valeur moyenne du potentiel transverse que par une transformation de jauge.

La moyenne du tenseur champ électromagnétique $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ se déduit des résultats précédents : $\langle F_{\mu\nu}^D \rangle = 0$ à cause de (C.50) et $\langle F_{\mu\nu}^G \rangle$ est nul car $\langle A_\mu^G \rangle$ est un terme de jauge ((C.51)). Il s'ensuit que

$$\frac{\langle \psi | F_{\mu\nu} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle \psi_T | F_{\mu\nu}^T | \psi_T \rangle}{\langle \psi_T | \psi_T \rangle}. \quad (\text{C.53})$$

La nouvelle valeur moyenne des champ coïncide donc avec l'ancienne, calculée en ne tenant compte que des degrés de liberté transverses.

b) ARBITRAIRE DE JAUGE ET ARBITRAIRE SUR LES KETS PHYSIQUES ASSOCIÉS À UN ÉTAT PHYSIQUE

Les résultats précédents permettent de comprendre le rôle joué par les modes g sur l'excitation desquels la condition supplémentaire ne précise rien.

A un même *état physique* du champ transverse correspondent tout un ensemble de *kets physiques* de la forme (C.45). Dans ces kets, $|\psi_T\rangle$ est

fixé, mais $|\psi_{LS}\rangle$ peut décrire une excitation arbitraire des modes g , les modes d étant par contre toujours dans l'état vide. Cet arbitraire correspond à l'arbitraire de jauge sur les potentiels. Deux excitations différentes des modes g correspondent à deux jauges différentes, donc à deux valeurs moyennes différentes pour les potentiels, mais bien sûr aux mêmes valeurs moyennes pour les grandeurs véritablement physiques comme $F_{\mu\nu}$ ou A_μ^T .

La quantification covariante avec une métrique indéfinie nous a donc permis de faire apparaître explicitement, au niveau des kets physiques, l'arbitraire de jauge, tout en conservant pour les grandeurs véritablement physiques des prédictions identiques à celles des chapitres II et III.

c) VALEUR MOYENNE DE L'HAMILTONIEN

A partir de (C.33), il est possible de montrer que

$$a_l^+ a_l + \dot{a}_s^+ a_s = a_d^+ a_d + a_g^+ a_g. \quad (\text{C.54})$$

On peut donc écrire en utilisant (C.22)

$$H_R = H_R^T + H_R^{LS} \quad (\text{C.55})$$

où H_R^T est l'hamiltonien purement transverse des chapitres II et III, et où H_R^{LS} s'écrit pour une valeur donnée de $\mathbf{k}$ (et en omettant l'énergie de point zéro)

$$\begin{aligned} H_R^{LS} &= \hbar\omega(a_g^+ a_g + a_d^+ a_d) \\ &= i \hbar\omega(\bar{a}_d a_g - \bar{a}_g a_d). \end{aligned} \quad (\text{C.56})$$

On a tenu compte de (C.40) pour remplacer a_g^+ par $i\bar{a}_d$ et a_d^+ par $-i\bar{a}_g$. (L'expression obtenue est la généralisation naturelle de l'expression classique (A.65)). Comme dans un état physique $a_d|\psi\rangle$ et $\langle\psi|\bar{a}_d$ sont nuls, il s'ensuit que

$$\frac{\langle\psi|H_R^{LS}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = 0 \quad (\text{C.57})$$

et par suite

$$\frac{\langle\psi|H_R|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\langle\psi_T|H_R^T|\psi_T\rangle}{\langle\psi_T|\psi_T\rangle}. \quad (\text{C.58})$$

La nouvelle valeur moyenne de l'hamiltonien total H_R dans un ket physique coïncide donc avec l'ancienne valeur moyenne de l'énergie du champ transverse.

Finalement, par une généralisation de la métrique dans l'espace des états du rayonnement, nous avons pu résoudre tous les problèmes posés par la condition supplémentaire et le signe des relations de commutation des opérateurs relatifs au potentiel scalaire. Nous avons identifié les différents kets physiques correspondant à un même état physique donné, relié la multiplicité de ces kets à l'arbitraire de jauge, et montré l'équivalence de la théorie ainsi élaborée avec celle des chapitres II et III pour toutes les prévisions concernant des grandeurs physiques et des états physiques.

D — EXEMPLE SIMPLE D'INTERACTION : CHAMP QUANTIQUE COUPLÉ A DEUX CHARGES EXTÉRIEURES FIXES

La plupart des développements présentés dans les paragraphes précédents concernent le champ libre. Il s'agissait en effet de comprendre comment il est possible de concilier la présence dans la théorie covariante de quatre types de photons avec le fait que, seuls, les photons transverses libres sont physiques. De plus, comme nous n'avons pas précisé la forme du lagrangien des particules, il ne pouvait être question d'aborder l'étude de l'électrodynamique quantique relativiste en présence d'interactions.

Nous avons cependant, et à plusieurs reprises, considéré plus haut le cas plus simple de champs couplés à des sources extérieures, c'est-à-dire n'ayant pas de dynamique propre et dont le mouvement est imposé. Il suffit alors, pour étudier l'évolution des champs, d'ajouter au lagrangien ou à l'hamiltonien du champ libre un terme d'interaction.

Nous considérons dans cette dernière partie un exemple particulièrement simple de problème de ce type, celui d'un champ quantique couplé à deux charges extérieures fixes. Notre ambition est d'illustrer, sur cet exemple simple, l'importance du rôle joué dans les interactions par les nouveaux types de photons (longitudinaux et scalaires) introduits par la théorie covariante.

1. Hamiltonien du problème

Considérons deux charges fixes q_1 et q_2 situées en $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$. La densité de charge extérieure correspondante s'écrit dans l'espace réel

$$\rho_e(\mathbf{r}) = q_1 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) + q_2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) \quad (\text{D.1})$$

et dans l'espace réciproque

$$\rho_e(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} [q_1 e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1} + q_2 e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_2}]. \quad (\text{D.2})$$

En présence d'un quadrivecteur courant $j_{e\mu}$, il faut, pour étudier l'évolution du champ quantique, ajouter à l'hamiltonien H_R du champ libre le terme de couplage $V = \sum_{\mu} \int d^3r j_{e\mu} A^{\mu}$ (voir équation (A.29)). L'hamiltonien H du champ en présence des deux charges s'écrit donc

$$H = H_R + V \quad (\text{D.3})$$

où H_R est donné en (C.19). Comme la seule composante non nulle de

$j_{e\mu}$ est $j_{e0} = c\rho_e$, V s'écrit :

$$\begin{aligned} V &= \int d^3r c\rho_e(\mathbf{r}) A_s(\mathbf{r}) \\ &= cq_1 A_s(\mathbf{r}_1) + cq_2 A_s(\mathbf{r}_2) \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

En utilisant le développement (C.17) des potentiels, on obtient

$$\begin{aligned} V &= \int d^3k c \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega(2\pi)^3}} [a_s(\mathbf{k}) (q_1 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} + q_2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2}) + \\ &\quad + \bar{a}_s(\mathbf{k}) (q_1 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} + q_2 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2})] \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

c'est-à-dire encore, compte tenu de (D.2)

$$V = \int d^3k c \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega}} [a_s(\mathbf{k}) \rho_e^*(\mathbf{k}) + \bar{a}_s(\mathbf{k}) \rho_e(\mathbf{k})]. \quad (\text{D.6})$$

2. Déplacement de l'état fondamental du champ. Réinterprétation de la loi de Coulomb

En l'absence de sources ($\rho_e = 0$), l'état fondamental de H_R est le vide de photons $|0\rangle$. Lorsqu'on introduit les deux charges q_1 et q_2 en $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$, le nouvel état fondamental du champ, c'est-à-dire l'état fondamental de (D.3), est modifié et déplacé d'une quantité ΔE dépendant de q_1 et q_2 . Nous allons, dans ce paragraphe 2, calculer ΔE en traitant tout d'abord l'effet de V sur l'état fondamental de H_R par la théorie des perturbations. Nous montrerons qu'on obtient ainsi l'énergie de Coulomb du système des deux charges, ce qui nous permettra d'interpréter, dans ce point de vue, la loi de Coulomb comme liée à un échange de photons scalaires entre les deux charges. Nous verrons enfin que l'expression obtenue pour ΔE au deuxième ordre de la théorie des perturbations est en fait valable à tous les ordres.

a) CALCUL PERTURBATIF DU DÉPLACEMENT

Nous avons déjà mentionné plus haut que les valeurs propres d'un opérateur sont indépendantes de la métrique (remarque (i) du paragraphe C.1). Pour déterminer le déplacement ΔE de l'état fondamental $|0\rangle$ de H sous l'effet de V , nous pouvons donc appliquer la formule habituelle de la théorie des perturbations, avec les éléments de matrice de V évalués dans la métrique usuelle de l'espace de Hilbert. Au deuxième ordre inclus en V , nous obtenons ainsi, comme l'état $|0\rangle$ est non dégénéré

$$\Delta E = \langle 0 | V | 0 \rangle + \langle 0 | V \frac{Q}{E_0 - H_R} V | 0 \rangle \quad (\text{D.7})$$

où E_0 est l'énergie non perturbée de $|0\rangle$ et où Q est le projecteur sur le sous-espace orthogonal à $|0\rangle$. Comme les éléments diagonaux de a_s et $\bar{a}_s$ qui apparaissent dans l'expression (D.6) de V sont nuls, le terme d'ordre un de (D.7) est nul. Par ailleurs, comme V ne peut que créer ou détruire un photon scalaire, le seul type d'état intermédiaire susceptible d'apparaître dans le deuxième terme de (D.7) est l'état $|ks\rangle$ à un photon scalaire k , dont l'énergie est supérieure à celle du vide par la quantité $\hbar\omega$, de sorte que le dénominateur d'énergie de (D.7) vaut $E_0 - (E_0 + \hbar\omega) = -\hbar\omega$. Finalement, il vient pour ΔE

$$\Delta E = \int d^3k \frac{\langle 0 | V | ks \rangle \langle ks | V | 0 \rangle}{-\hbar\omega}. \quad (D.8)$$

D'après les règles de sélection des opérateurs a_s et $\bar{a}_s$

$$\langle 0 | V | ks \rangle = c \int d^3k' \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega'}} \langle 0 | a_s(k') | ks \rangle \rho_e^*(k') \quad (D.9.a)$$

$$\langle ks | V | 0 \rangle = c \int d^3k'' \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega''}} \langle ks | \bar{a}_s(k'') | 0 \rangle \rho_e(k''). \quad (D.9.b)$$

Enfin, nous avons vu plus haut que les éléments de matrice de a_s et $\bar{a}_s$ avaient toujours des signes opposés, quelle que soit la convention choisie pour les états $|n_s\rangle$ (voir équations (C.25.b) et (C.26) ou (C.32)) de sorte que

$$\langle 0 | a_s(k') | ks \rangle \langle ks | \bar{a}_s(k'') | 0 \rangle = -\delta(k - k') \delta(k - k''). \quad (D.10)$$

Le report de (D.9) et (D.10) dans (D.8) donne finalement

$$\Delta E = \int d^3k \frac{\rho_e^*(k) \rho_e(k)}{2\varepsilon_0 k^2}. \quad (D.11)$$

On reconnaît dans (D.11) l'expression de l'énergie de Coulomb de la distribution de charges caractérisée par $\rho_e(k)$ (voir formules (B.32) et (B.37) du chapitre I), ce qui permet d'écrire

$$\Delta E = V_{\text{Coul}} = \varepsilon_{\text{Coul}}^1 + \varepsilon_{\text{Coul}}^2 + \frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (D.12)$$

Les deux premiers termes de (D.12) représentent l'énergie de Coulomb propre de chaque charge q_1 et q_2 , le dernier terme l'énergie d'interaction de Coulomb entre les deux charges.

Remarque

Il convient de noter l'importance du signe $-$ apparaissant dans (D.10), qui entraîne que le produit des deux éléments de matrice de V apparaissant au

numérateur de (D.8) est négatif, de sorte que ΔE est finalement positif (voir aussi D.11). Si l'opérateur associé au potentiel scalaire était hermitique au sens habituel, il en serait de même de V et le numérateur de (D.8) serait positif, conduisant à un déplacement $\Delta E < 0$. Un tel résultat exprime tout simplement que le déplacement de l'état fondamental d'un système sous l'effet d'un potentiel hermitique est toujours négatif au deuxième ordre (l'état fondamental est toujours repoussé vers le bas par les états excités). C'est parce que l'opérateur associé au potentiel scalaire est antihermitique dans le point de vue de la métrique initiale (mais hermitique au sens de la nouvelle métrique) que nous trouvons finalement une énergie de Coulomb positive.

b) DISCUSSION PHYSIQUE. ECHANGE DE PHOTONS SCALAIRES ENTRE LES DEUX CHARGES

L'énergie de Coulomb apparaît ainsi comme étant associée au terme de perturbation du second ordre (D.8). La structure de cette expression suggère alors l'interprétation physique suivante. Le champ, initialement dans l'état vide, passe sous l'effet de V dans l'état intermédiaire $|ks\rangle$. En d'autres termes, un photon scalaire k est émis virtuellement puis réabsorbé, le champ retournant dans l'état initial.

Le terme en $q_1 q_2$ de ΔE s'obtient, soit en prenant le terme en q_1 de ρ dans l'élément de matrice $\langle ks | V | 0 \rangle$, le terme en q_2 dans $\langle 0 | V | ks \rangle$, auquel cas c'est la charge q_1 qui émet virtuellement un photon scalaire réabsorbé ensuite par q_2 ; soit l'inverse, auquel cas c'est q_2 qui émet virtuellement un photon et q_1 qui l'absorbe. L'électrodynamique quantique en jauge de Lorentz permet donc d'interpréter l'interaction de Coulomb entre deux charges fixes comme résultant de l'échange de photons scalaires entre les deux charges.

Notons enfin que les termes en q_1^2 (ou q_2^2) de ΔE , c'est-à-dire ϵ_{Coul}^1 (ou ϵ_{Coul}^2), s'obtiennent en prenant le même terme en q_1 (ou q_2) dans les deux éléments de matrice de V . L'énergie de Coulomb propre d'une particule apparaît donc comme liée à l'émission virtuelle et à la réabsorption d'un photon scalaire par cette même particule.

c) CALCUL EXACT

Comme l'hamiltonien de couplage V est linéaire en a_s et $\bar{a}_s$, il est en fait possible de diagonaliser exactement l'hamiltonien total $H = H_R + V$. Considérons la partie H_s de H relative aux modes scalaires (V n'agit que sur ces modes). Elle s'écrit

$$H_s = \int d^3k H_s(\mathbf{k}) \quad (\text{D.13})$$

avec

$$H_s(\mathbf{k}) = \hbar\omega \left[-\bar{a}_s(\mathbf{k}) a_s(\mathbf{k}) + \lambda^*(\mathbf{k}) a_s(\mathbf{k}) + \lambda(\mathbf{k}) \bar{a}_s(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right] \quad (\text{D.14})$$

$\lambda(\mathbf{k})$ étant donné d'après (D. 6), par

$$\lambda(\mathbf{k}) = \frac{c}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega}} \rho_e(\mathbf{k}). \quad (\text{D. 15})$$

Le principe de la diagonalisation de l'hamiltonien $H_s(\mathbf{k})$ du mode scalaire $\mathbf{k}$ consiste à effectuer sur a_s et $\bar{a}_s$ une translation de manière à faire disparaître les termes linéaires en a_s et $\bar{a}_s$ de (D. 14) et à obtenir un hamiltonien d'oscillateur harmonique.

Introduisons pour cela les nouveaux opérateurs b_s et $\bar{b}_s$ définis par

$$b_s(\mathbf{k}) = a_s(\mathbf{k}) - \lambda(\mathbf{k}) \quad (\text{D. 16. a})$$

$$\bar{b}_s(\mathbf{k}) = \bar{a}_s(\mathbf{k}) - \lambda^*(\mathbf{k}). \quad (\text{D. 16. b})$$

La relation de commutation (C. 18. b) donne pour b_s et $\bar{b}_s$

$$[b_s(\mathbf{k}), \bar{b}_s(\mathbf{k}')] = [a_s(\mathbf{k}), \bar{a}_s(\mathbf{k}')] = -\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{D. 17})$$

de sorte que b_s et $\bar{b}_s$ peuvent bien être considérés comme des opérateurs d'annihilation et de création (*). Par ailleurs, comme

$$\bar{b}_s b_s = \bar{a}_s a_s - \lambda^* a_s - \lambda \bar{a}_s + \lambda^* \lambda \quad (\text{D. 18})$$

il est possible de réécrire $H_s(\mathbf{k})$ sous la forme

$$H_s(\mathbf{k}) = \hbar\omega \left[-\bar{b}_s(\mathbf{k}) b_s(\mathbf{k}) + \lambda^*(\mathbf{k}) \lambda(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right] \quad (\text{D. 19})$$

qui est bien, à une constante près, un hamiltonien d'oscillateur harmonique. Soit alors $|\tilde{0}\rangle$ l'état défini par

$$b_s(\mathbf{k}) |\tilde{0}\rangle = 0 \quad (\text{D. 20})$$

c'est-à-dire encore

$$a_s(\mathbf{k}) |\tilde{0}\rangle = \lambda(\mathbf{k}) |\tilde{0}\rangle. \quad (\text{D. 21})$$

L'état $|\tilde{0}\rangle$ est donc un état cohérent du mode $(\mathbf{k}_s)$, vecteur propre de $a_s(\mathbf{k})$ de valeur propre $\lambda(\mathbf{k})$. Compte tenu de (D. 20), $|\tilde{0}\rangle$ est état propre de $H_s(\mathbf{k})$

$$H_s(\mathbf{k}) |\tilde{0}\rangle = \hbar\omega \left[\lambda^*(\mathbf{k}) \lambda(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right] |\tilde{0}\rangle \quad (\text{D. 22})$$

(*) Comme b_s et $\bar{b}_s$ obéissent aux mêmes relations de commutation que a_s et $\bar{a}_s$, on peut d'ailleurs trouver une transformation T unitaire (au nouveau sens, c'est-à-dire telle que $\bar{T}T = T^*T = 1$), faisant passer des opérateurs a_s et $\bar{a}_s$ aux opérateurs b_s et $\bar{b}_s$ (voir exercice 4).

avec une valeur propre $\hbar\omega\left[\frac{1}{2} + \lambda^*(\mathbf{k}) \lambda(\mathbf{k})\right]$. On en conclut que le déplacement exact ΔE de l'état fondamental du champ, dû à la présence des charges, est la somme sur tous les modes scalaires de $\hbar\omega\lambda^*(\mathbf{k}) \lambda(\mathbf{k})$, c'est-à-dire encore, compte tenu de (D.15)

$$\Delta E = \int d^3k \hbar\omega \lambda^*(\mathbf{k}) \lambda(\mathbf{k}) = \int d^3k \frac{\rho_e^*(\mathbf{k}) \rho_e(\mathbf{k})}{2 \varepsilon_0 k^2} \quad (\text{D.23})$$

qui n'est autre que (D.11). Le résultat du calcul perturbatif au second ordre de ΔE coïncide donc avec la valeur exacte de ce déplacement.

Remarque

Il est aisé d'obtenir les autres états et valeurs propres de H_s . A partir de la relation de commutation (D.17) et de (D.20), on peut montrer en effet que

$$H_s[h_s(\mathbf{k})]^p |\bar{0}\rangle = \hbar\omega\left[p + \frac{1}{2} + \lambda^*(\mathbf{k}) \lambda(\mathbf{k})\right] [\bar{b}_s(\mathbf{k})]^p |\bar{0}\rangle \quad (\text{D.24})$$

L'état $[\bar{b}_s(\mathbf{k})]^p |\bar{0}\rangle$ est un état propre de H_s situé à une distance $p\hbar\omega$ au-dessus du nouvel état fondamental $|\bar{0}\rangle$. Tous les niveaux de l'oscillateur harmonique associé au mode scalaire $\mathbf{k}$ sont donc déplacés en bloc de la même quantité ΔE .

3. Quelques propriétés du nouvel état fondamental du champ

a) CONDITION SUPPLÉMENTAIRE EN PRÉSENCE D'INTERACTION. CARACTÈRE PHYSIQUE DU NOUVEL ÉTAT FONDAMENTAL

Pour voir comment il est possible de généraliser les équations (B.20) et (B.21) qui caractérisent les états physiques pour le champ libre, commençons par calculer $\sum_{\mu} \partial_{\mu} A^{\mu}$ à partir du développement (C.17) de A_{μ} en a et $\bar{a}$

$$\sum_{\mu} \partial_{\mu} A^{\mu} = \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega(2\pi)^3}} \left(ika_t + \frac{\dot{a}_s}{c} \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + h.c. \quad (\text{D.25})$$

Considérons alors, à un instant donné t_0 , les états $|\psi\rangle$ qui sont, pour tout $\mathbf{k}$, solutions de l'équation

$$\left[ika_t(\mathbf{k}) + \frac{\dot{a}_s(\mathbf{k})}{c} \right] |\psi\rangle = 0 \quad \forall \mathbf{k}. \quad (\text{D.26})$$

Il découle de (D.25) que la valeur moyenne dans ces états de l'opérateur $\sum_{\mu} \partial_{\mu} A^{\mu}$ est nulle à l'instant t_0 . Il est possible par ailleurs d'exprimer la

vitesse $\dot{a}_s = [a_s, H]/i\hbar$ figurant dans (D.26) au moyen de l'équation du mouvement de a_s , qui est la généralisation quantique de l'équation du mouvement (A.35') de la variable normale classique α_s

$$\dot{a}_s(\mathbf{k}) + i\omega a_s(\mathbf{k}) = \frac{i}{\sqrt{2\varepsilon_0\hbar\omega}} c\rho_e(\mathbf{k}). \quad (\text{D.27})$$

Le report de (D.27) dans (D.26) donne alors, compte tenu de l'expression (D.15) de $\lambda(\mathbf{k})$

$$[a_t(\mathbf{k}) - a_s(\mathbf{k}) + \lambda(\mathbf{k})] |\psi\rangle = 0 \quad \forall \mathbf{k} \quad (\text{D.28})$$

équation qui redonne bien (B.21) en l'absence de sources ($\lambda = 0$).

Une propriété importante de l'équation (D.28) est que ses solutions ne dépendent pas de l'instant t_0 choisi. En d'autres termes, le sous-espace des états physiques sélectionnés par (D.28) est stable vis-à-vis de l'évolution temporelle : un état $|\psi\rangle$, qui est physique à t_0 , demeure physique à tout instant ultérieur. Nous démontrerons ce point important dans le paragraphe 3.c du complément A_v , en étudiant l'évolution temporelle de l'opérateur $a_t - a_s + \lambda$ qui figure dans le crochet de (D.28). Cette propriété assure que $\sum_\mu \partial_\mu A^\mu$ reste nul en valeur moyenne pour tout $\mathbf{r}$ et tout

t . Ainsi, les équations de Heisenberg du champ quantique coïncident en valeur moyenne avec les équations de Maxwell et (D.28) constitue bien la généralisation de (B.21) en présence d'interaction.

Revenons maintenant au nouvel état fondamental du champ $|\tilde{0}\rangle$ défini en (D.21). Il est facile de voir que $|\tilde{0}\rangle$ satisfait (D.28) et est donc un état physique. Tout d'abord, comme les modes longitudinaux ne sont pas excités par les charges fixes

$$a_t(\mathbf{k}) |\tilde{0}\rangle = 0 \quad \forall \mathbf{k}. \quad (\text{D.29})$$

Il suffit alors d'utiliser (D.29) et la définition (D.21) de $|\tilde{0}\rangle$ pour voir que $|\tilde{0}\rangle$ satisfait bien (D.28).

b) VALEUR MOYENNE DU POTENTIEL SCALAIRE DANS LE NOUVEL ÉTAT FONDAMENTAL DU CHAMP

A partir du développement en modes scalaires de $A_s(\mathbf{r})$, on obtient pour la valeur moyenne (au sens de la nouvelle métrique) de $A_s(\mathbf{r})$ dans le nouvel état $|\tilde{0}\rangle$

$$\frac{\langle \tilde{0} | A_s(\mathbf{r}) | \tilde{0} \rangle}{\langle \tilde{0} | \tilde{0} \rangle} = \frac{1}{\langle \tilde{0} | \tilde{0} \rangle} \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega(2\pi)^3}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle \tilde{0} | a_s(\mathbf{k}) | \tilde{0} \rangle + c.c. \quad (\text{D.30})$$

qui s'écrit encore, compte tenu de (D. 21)

$$\frac{\langle \tilde{0} | A_s(\mathbf{r}) | \tilde{0} \rangle}{\langle \tilde{0} | \tilde{0} \rangle} = \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega (2\pi)^3}} \lambda(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + c.c. \quad (\text{D. 31})$$

La condition de réalité de $\rho_e(\mathbf{r})$ entraîne que $\lambda(\mathbf{k}) = \lambda^*(-\mathbf{k})$, ce qui, par un changement de $\mathbf{k}$ en $-\mathbf{k}$ dans l'intégrale de (D. 31), permet de montrer que le terme complexe conjugué double le premier. En utilisant (D. 15), on obtient alors pour la valeur moyenne de $U(\mathbf{r}) = cA_s(\mathbf{r})$

$$\frac{\langle \tilde{0} | U(\mathbf{r}) | \tilde{0} \rangle}{\langle \tilde{0} | \tilde{0} \rangle} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \frac{\rho_e(\mathbf{k})}{\varepsilon_0 k^2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (\text{D. 32})$$

qui n'est autre que la transformée de Fourier de $\rho_e(\mathbf{k})/\varepsilon_0 k^2$, c'est-à-dire encore le potentiel de Coulomb associé à la distribution de charges $\rho_e(\mathbf{r})$. (Pour le voir il suffit de noter que, par transformation de Fourier, l'équation de Poisson $\Delta U + \rho_e/\varepsilon_0 = 0$ donne $\mathcal{U} = \rho_e/\varepsilon_0 k^2$.)

4. Conclusion et généralisation

Nous avons ainsi montré qu'il était possible de transformer l'hamiltonien du champ quantique couplé à des charges fixes de manière à faire apparaître explicitement l'interaction de Coulomb entre les charges. Nous avons également vérifié que la valeur moyenne (nouvelle) du potentiel scalaire dans l'état fondamental perturbé du champ coïncidait avec le potentiel de Coulomb créé par les charges.

Une telle démarche peut être étendue au cas où les sources sont des particules formant un système dynamique. Nous verrons en effet dans le complément B_v qu'il est possible d'appliquer à l'hamiltonien des champs quantiques de Dirac et Maxwell couplés en jauge de Lorentz une transformation unitaire (au nouveau sens) qui généralise celle étudiée ici et qui fait apparaître explicitement l'interaction de Coulomb entre les particules. Jointe à la condition supplémentaire sélectionnant les états physiques, une telle transformation permet d'établir une correspondance entre les deux formulations possibles de l'électrodynamique quantique envisagées dans cet ouvrage, celle en jauge de Lorentz et celle en jauge de Coulomb.

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES ET CONSEILS DE LECTURE

Bogoliubov et Chirkov (§ 13), Heitler (§ 10), Itzykson et Zuber (§ 3-2), Jauch et Rohrlich (chapitre 6).

Quantification avec une métrique indéfinie : articles originaux de S. N. Gupta, *Proc. Phys. Soc.* **63**, 681 (1950) et K. Bleuler, *Helv. Phys. Act.*, **23**, 567 (1950).

COMPLÉMENT A_vINTRODUCTION ÉLÉMENTAIRE A LA THÉORIE
DU CHAMP ÉLECTRON-POSITRON COUPLÉ AU CHAMP
DE PHOTONS EN JAUGE DE LORENTZ

La description des particules utilisée dans les chapitres précédents n'est valable que pour des particules se déplaçant à des vitesses faibles devant celle de la lumière. De plus, le cadre théorique mis en place ne permet pas de décrire des processus dans lesquels le nombre total de particules varie (création de paires et annihilation entre particule et antiparticule). Il apparaît également que le rayonnement et la matière sont traités de manière dissymétrique : un champ quantique relativiste décrit le rayonnement avec un nombre *arbitraire* d'excitations élémentaires (photons), alors que nous ne considérons qu'un nombre fixe de particules chargées, représentées par des fonctions d'onde non relativistes.

Le but de ce complément est de montrer de manière très élémentaire comment la matière, et plus précisément les électrons et les positrons, peuvent être décrits par un champ relativiste quantifié. Nous commençons (§ 1) par une brève revue de l'équation de Dirac, considérée comme une équation d'onde relativiste à un seul électron (*). Nous quantifions ensuite la fonction d'onde de cette équation selon la procédure habituelle de seconde quantification (§ 2) et nous obtenons ainsi le champ de Dirac quantifié dont les excitations élémentaires décrivent électrons (e^-) et positrons (e^+). Nous introduisons enfin (§ 3) l'expression de l'hamiltonien décrivant les champs de Dirac et de Maxwell quantifiés en interaction. Cet hamiltonien s'exprime en termes des opérateurs de création et d'annihilation des électrons, positrons et photons. Il constitue le point de départ de tout calcul d'électrodynamique quantique.

1. Brefs rappels sur l'équation de Dirac

a) MATRICES DE DIRAC

Un procédé heuristique pour obtenir une équation d'onde pour une particule consiste à partir de la relation de dispersion $E = f(\mathbf{p})$ entre l'énergie E et l'impulsion $\mathbf{p}$, et à faire les substitutions :

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \qquad \mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla \qquad (1.a)$$

(*) Le lecteur trouvera des exposés plus détaillés dans les ouvrages cités en référence à la fin du complément.

En présence d'un champ électromagnétique décrit par les potentiels A et U , on utilise les substitutions suivantes :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qU \quad - i\hbar \nabla \rightarrow - i\hbar \nabla - qA \quad (1.b)$$

où q est la charge de la particule. Cette règle est reliée à la possibilité de changer localement la phase de la fonction d'onde (voir l'exercice 5).

Si l'on cherche pour la fonction d'onde ψ une équation différentielle du premier ordre en t , comme l'équation de Schrödinger, et dans laquelle $\mathbf{r}$ et t jouent des rôles symétriques comme l'exige la relativité, on est conduit naturellement à une relation linéaire en E et $\mathbf{p}$ du type

$$E = \beta mc^2 + c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} \quad (2)$$

où β et $\boldsymbol{\alpha}$ sont réels et sans dimensions. De plus, la relation (2) doit être compatible avec la relation de dispersion relativiste bien connue

$$E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2. \quad (3)$$

Le carré de l'équation (2) donne :

$$E^2 = m^2 c^4 \beta^2 + mc^3 \sum_i (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) p_i + c^2 \sum_i \sum_j p_i p_j \alpha_i \alpha_j \quad (4)$$

où $i, j = x, y, z$. La comparaison avec (3) conduit aux relations suivantes :

$$\begin{cases} \beta^2 = 1 & (5.a) \\ \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 & (5.b) \\ \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2 \delta_{ij}. & (5.c) \end{cases}$$

Elles montrent clairement que β et $\boldsymbol{\alpha}$ ne peuvent pas être des nombres. On peut par contre trouver des matrices, de rang au moins 4, qui vérifient ces relations. La fonction d'onde ψ est donc nécessairement un spineur (avec au moins 4 composantes), ce qui implique l'existence de degrés de liberté internes pour la particule, décrits par $\boldsymbol{\alpha}$ et β , en plus de ses degrés de liberté externes décrits par $\mathbf{r}$ et $\mathbf{p}$.

L'équation de Dirac correspond à la réalisation de dimension 4 des équations (5). On peut vérifier que les quatre *matrices de Dirac*

$$\beta = \left(\begin{array}{c|c} \mathbb{1} & 0 \\ \hline 0 & -\mathbb{1} \end{array} \right) \quad \alpha_i = \left(\begin{array}{c|c} 0 & \sigma_i \\ \hline \sigma_i & 0 \end{array} \right) \quad (6)$$

dans lesquelles $\mathbb{1}$ est la matrice unité de dimension 2 et σ_i est l'une des

matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7)$$

vérifient bien les relations (5).

Donnons pour terminer quelques relations vérifiées par les matrices (6), qui seront utiles pour la suite. Des relations de commutation bien connues des matrices de Pauli

$$\sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i = 2i \sum_k \varepsilon_{ijk} \sigma_k \quad (8)$$

(ε_{ijk} = tenseur complètement antisymétrique), on déduit les relations suivantes pour les matrices α_i

$$\alpha_i \alpha_j - \alpha_j \alpha_i = 2i \sum_k \varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k \quad (9.a)$$

où

$$\hat{\sigma}_k = \left(\begin{array}{c|c} \sigma_k & 0 \\ \hline 0 & \sigma_k \end{array} \right). \quad (9.b)$$

Jointe à la relation (5.c), cette équation fournit :

$$\alpha_i \alpha_j = \delta_{ij} + i \sum_k \varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k. \quad (10)$$

Si **A** et **B** sont deux vecteurs (n'agissant pas sur les variables internes), il en résulte la relation suivante généralisant (10) :

$$(\alpha \cdot A)(\alpha \cdot B) = A \cdot B + i\hat{\sigma} \cdot (A \times B). \quad (11)$$

b) HAMILTONIEN DE DIRAC ; DENSITÉS DE CHARGE ET DE COURANT

L'équation de Dirac décrit l'évolution temporelle du spineur ψ , de composantes ψ_λ ($\lambda = 1, 2, 3, 4$) :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \mathcal{H}_D \psi. \quad (12)$$

D'après (1) et (2), $\mathcal{H}_D$ s'écrit

$$\mathcal{H}_D = \beta mc^2 + c\alpha \cdot \mathbf{p} \quad (13)$$

pour un électron libre et

$$\mathcal{H}_D = \beta mc^2 + c\alpha \cdot [\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r})] + qU(\mathbf{r}) \quad (14)$$

pour un électron en présence d'un champ électromagnétique. Soit $\tilde{\psi}$ le transposé de ψ (c'est un vecteur ligne) et soit $\tilde{\psi}^*$ son adjoint. A partir de l'équation (12) et de son adjointe, on peut montrer que les densités

$$\rho = q\tilde{\psi}^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = q \sum_{\lambda} \psi_{\lambda}^*(\mathbf{r}) \psi_{\lambda}(\mathbf{r}) \quad (15. a)$$

$$\mathbf{j} = qc\tilde{\psi}^*(\mathbf{r})\boldsymbol{\alpha}\psi(\mathbf{r}) = qc \sum_{\lambda\lambda'} \psi_{\lambda}^*(\mathbf{r}) \boldsymbol{\alpha}_{\lambda\lambda'} \psi_{\lambda'}(\mathbf{r}) \quad (15. b)$$

vérifient l'équation de conservation

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (16)$$

Les quantités ρ et $\mathbf{j}$ s'interprètent comme des densités de charge et de courant respectivement. Il est remarquable que les équations (15) et (16) gardent la même forme en présence de champ électromagnétique.

c) LIEN AVEC LES NOTATIONS COVARIANTES

Plutôt que les matrices α_i et β introduites précédemment, les matrices γ_{μ} sont fréquemment utilisées pour obtenir une forme symétrique de l'équation de Dirac :

$$\gamma^0 = \beta \quad (17. a)$$

$$\gamma^i = \beta\alpha_i. \quad (17. b)$$

En multipliant l'équation (12) par $\beta/\hbar c$, nous pouvons réécrire l'équation obtenue sous la forme

$$\left[\sum_{\mu} i\gamma^{\mu} \partial_{\mu} - \frac{mc}{\hbar} \right] \psi = 0 \quad (18)$$

dans le cas d'un électron libre, et

$$\left[\sum_{\mu} i\gamma^{\mu} D_{\mu} - \frac{mc}{\hbar} \right] \psi = 0 \quad (19. a)$$

avec

$$D_{\mu} = \partial_{\mu} + i \frac{q}{\hbar} A_{\mu} \quad (19. b)$$

dans le cas d'un électron dans un champ défini par le quadri-potential A_{μ} .

Plutôt que l'adjoint $\tilde{\psi}^*$ de ψ , on utilise alors une autre quantité appelée adjoint relativiste et définie par

$$\bar{\psi} = \tilde{\psi}^* \gamma^0. \quad (20)$$

Avec ces notations, les expressions (15. a) et (15. b) peuvent être rassemblées sous la forme d'un quadrivecteur courant j^{μ}

$$j^{\mu} = qc\bar{\psi}(\mathbf{r}) \gamma^{\mu} \psi(\mathbf{r}) \quad (21)$$

d) SPECTRE D'ÉNERGIE DE LA PARTICULE LIBRE

Pour un électron libre, $\mathbf{p}$ et $\mathcal{H}_D$ commutent, de sorte qu'il existe un système de vecteurs propres communs, les ondes planes. Pour chaque valeur propre $\mathbf{p}$, $\mathcal{H}_D$ a 2 valeurs propres :

$$E_p = \pm \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} . \quad (22)$$

Le spectre d'énergie de $\mathcal{H}_D$ est donc formé de deux continums, l'un au-dessus de mc^2 , l'autre au-dessous de $-mc^2$.

La forme des états propres est particulièrement simple pour $\mathbf{p} = \mathbf{0}$, car $\mathcal{H}_D$ se réduit alors à βmc^2 . On trouve deux états propres :

$$u_{0+} = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} \quad u_{0-} = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} \quad \text{de valeur propre } +mc^2 \quad (23.a)$$

et deux autres :

$$v_{0+} = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix} \quad v_{0-} = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix} \quad \text{de valeur propre } -mc^2 \quad (23.b)$$

Ainsi, un électron d'impulsion nulle et d'énergie mc^2 peut exister dans deux états internes différents, correspondant aux deux états d'un spin 1/2. Ce résultat subsiste pour les états d'impulsion $\mathbf{p} \neq \mathbf{0}$, les spineurs correspondants ayant alors en général leur quatre composantes non nulles. Ceux relatifs à la valeur propre $+\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ se déduisent des spineurs (23.a) par la transformation

$$T(\mathbf{p}) = \left[\cos \frac{\theta}{2} - (\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}/p) \sin \frac{\theta}{2} \right] \exp \frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar} \quad (24.a)$$

$$\theta = \text{Arc tg } \frac{p}{mc} . \quad (24.b)$$

Nous les noterons $u_p(\mathbf{r})$. Pour simplifier les notations, l'indice p désigne collectivement les trois composantes de $\mathbf{p}$ et la composante de spin + ou -. Les spineurs relatifs à la valeur propre opposée se déduisent de (23.b) par $T(\mathbf{p})$ et seront notés $v_p(\mathbf{r})$.

$$u_p(\mathbf{r}) = T(\mathbf{p}) u_{0\pm} \quad v_p(\mathbf{r}) = T(\mathbf{p}) v_{0\pm} . \quad (25)$$

Remarque

Les spineurs u_p et v_p introduits en (25) sont normalisés comme des ondes planes, car la transformation $T(\mathbf{p})$ est unitaire. Dans la formulation covariante, u_p et v_p se déduisent de $u_{0\pm}$ et $v_{0\pm}$ par une transformation de Lorentz (qui n'est pas unitaire), et ont une normalisation différente.

e) ETATS D'ÉNERGIE NÉGATIVE. THÉORIE DES TROUS

L'existence de valeurs négatives jusqu'à $-\infty$ pour $\mathcal{H}_D$ pose un problème d'interprétation physique.

On peut d'abord essayer de considérer les états correspondants comme des solutions mathématiques, sans signification physique, et ne conserver que les états d'énergie positive pour décrire l'électron. Mais l'interaction avec le champ de rayonnement couple les états d'énergie positive aux états d'énergie négative. Un électron initialement dans un état d'énergie positive pourrait, par émission de photons, tomber dans un état d'énergie négative.

Cette difficulté a conduit Dirac à considérer que tous les états d'énergie négative sont occupés. Comme les électrons sont des fermions, le principe d'exclusion de Pauli empêche alors les électrons d'énergie positive de tomber dans ceux d'énergie négative, déjà remplis. La stabilité des états d'énergie positive est ainsi rétablie. De plus, ce point de vue suggère de nouvelles idées. L'absence d'un électron d'énergie négative E , de charge q , d'impulsion $\mathbf{p}$, de spin μ est équivalente à la présence d'une particule d'énergie $-E$ positive, de charge $-q$, d'impulsion $-\mathbf{p}$, de spin $-\mu$. Une telle particule n'est autre que le positron, l'antiparticule de l'électron, qui apparaît ainsi comme un trou dans la « mer » des électrons occupant le continuum des états d'énergie négative. D'autres prédictions en découlent directement. Par absorption de photons, un électron d'énergie négative peut être promu dans un état d'énergie positive, laissant un trou dans le continuum des états d'énergie négative. Un tel processus correspond à la formation d'une paire électron-positron (e^+ , e^-). Le processus inverse, l'annihilation d'une paire, s'interprète comme une recombinaison entre l'électron et le trou.

Les considérations précédentes montrent clairement que l'équation de Dirac ne peut décrire de façon cohérente une seule particule relativiste. En relativité, la masse est une forme d'énergie et des particules peuvent donc être créées ou disparaître. La prescription ad hoc de Dirac n'est qu'une façon de réaliser cette nécessité avec des électrons préexistants dans les états d'énergie négative. Pour éviter l'introduction de ces électrons peu physiques, il est préférable de quantifier la fonction d'onde de Dirac $\psi(\mathbf{r})$ selon la procédure de seconde quantification. Les excitations du champ quantique $\Psi(\mathbf{r})$ permettent alors de décrire un nombre arbitraire de particules et d'antiparticules.

2. Quantification du champ de Dirac libre

a) PROCÉDURE DE SECONDE QUANTIFICATION

Nous suivons la procédure générale, utilisée aussi en mécanique quantique non relativiste pour décrire un ensemble de fermions identiques.

Commençons par développer la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$ de l'équation de Dirac sur une base orthonormée. Une telle base peut être, par exemple, la base des ondes planes (25), états propres de $\mathcal{H}_D$ et $\mathbf{p}$:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_p [\gamma_p u_p(\mathbf{r}) + \gamma_{\bar{p}} v_{\bar{p}}(\mathbf{r})]. \quad (26)$$

L'indice $\bar{p}$ désigne l'ensemble des nombres quantiques $(-E, -\mathbf{p}, -\mu)$, opposés à ceux désignés par p . Comme nous l'avons vu au paragraphe précédent, un trou de fonction d'onde $v_{\bar{p}}$ décrit, dans le point de vue de Dirac, un positron de nombres quantiques p .

La fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$ est alors quantifiée en remplaçant les coefficients γ_p et $\gamma_{\bar{p}}$ de (26) par des opérateurs c_p et $c_{\bar{p}}$ annihilant un électron dans l'état correspondant :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_p [c_p u_p(\mathbf{r}) + c_{\bar{p}} v_{\bar{p}}(\mathbf{r})]. \quad (27)$$

Comme les électrons sont des fermions, des relations d'anticommutation sont imposées à ces opérateurs

$$\begin{aligned} [c_p, c_q]_+ &= [c_{\bar{p}}, c_{\bar{q}}]_+ = [c_p, c_{\bar{q}}]_+ = [c_{\bar{p}}, c_q^+]_+ = 0 \\ [c_p, c_q^+]_+ &= \delta_{pq}; \quad [c_{\bar{p}}, c_{\bar{q}}^+]_+ = \delta_{p\bar{q}}. \end{aligned} \quad (28)$$

Ces relations d'anticommutation sont nécessaires pour préserver le caractère positif de l'énergie du champ (voir la fin du § b suivant).

En suivant l'idée générale du paragraphe 1. d, nous réinterprétons les opérateurs c_p et c_p^+ . Annihiler un électron $(-\mathbf{p}, -E_p, -\mu)$ est équivalent à créer un positron $(\mathbf{p}, E_p, \mu)$; nous posons donc :

$$c_{\bar{p}} = b_p^+ \quad (29. a)$$

et inversement

$$c_{\bar{p}}^+ = b_p \quad (29. b)$$

où b_p et b_p^+ sont les opérateurs d'annihilation et de création d'un positron d'impulsion $\mathbf{p}$, d'énergie E_p et de spin μ .

Finalement le champ de Dirac quantifié $\Psi(\mathbf{r})$ et son hermitique conjugué $\Psi^+(\mathbf{r})$ sont donnés par :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_p [c_p u_p(\mathbf{r}) + b_p^+ v_{\bar{p}}(\mathbf{r})] \quad (30. a)$$

$$\Psi^+(\mathbf{r}) = \sum_p [c_p^+ u_p^*(\mathbf{r}) + b_p v_{\bar{p}}^*(\mathbf{r})] \quad (30. b)$$

Ψ^+ est le spineur dont les composantes Ψ_λ^+ sont les hermitiques conjuguées de celles de Ψ . Les relations d'anticommutation des c et des b découlent directement de (28) et (29) :

$$\begin{aligned} [c_p, c_q]_+ &= [b_p, b_q]_+ = [c_p, b_p]_+ = [c_p, b_p^+]_+ = 0 \\ [c_p, c_q^+]_+ &= \delta_{pq} \qquad [b_p, b_q^+]_+ = \delta_{pq}. \end{aligned} \quad (31)$$

On peut également tirer de (30) et (31) les relations d'anticommutation des composantes du champ lui-même, en utilisant le fait que l'ensemble (u_p, v_p) forme une base complète de l'espace des fonctions d'onde

$$\begin{aligned} [\Psi_\lambda(\mathbf{r}), \Psi_{\lambda'}(\mathbf{r}')]_+ &= [\Psi_\lambda^+(\mathbf{r}), \Psi_{\lambda'}^+(\mathbf{r}')]_+ = 0 \\ [\Psi_\lambda(\mathbf{r}), \Psi_{\lambda'}^+(\mathbf{r}')]_+ &= \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (32)$$

b) HAMILTONIEN DU CHAMP QUANTIFIÉ. NIVEAUX D'ÉNERGIE

La valeur moyenne de l'hamiltonien de Dirac dans l'état décrit par la fonction $\psi(\mathbf{r})$ est

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H}_D \rangle &= \int d^3r \tilde{\psi}^*(\mathbf{r}) \mathcal{H}_D \psi(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{\lambda\lambda'} \int d^3r \psi_\lambda^*(\mathbf{r}) \left[\beta_{\lambda\lambda'} mc^2 + \frac{\hbar c}{i} \alpha_{\lambda\lambda'} \cdot \nabla \right] \psi_{\lambda'}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (33)$$

L'hamiltonien H_D en seconde quantification s'obtient en remplaçant la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$ par le champ $\Psi(\mathbf{r})$.

$$\begin{aligned} H_D &= \int d^3r \tilde{\Psi}^+(\mathbf{r}) \mathcal{H}_D \Psi(\mathbf{r}) \\ &= \int d^3r \tilde{\Psi}^+(\mathbf{r}) \left[\beta mc^2 + \frac{\hbar c}{i} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \right] \Psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (34)$$

L'utilisation des développements (30) et du fait que u_p et v_p sont des fonctions propres de $\mathcal{H}_D$ de valeurs E_p et $-E_p$ conduit à l'expression suivante de H_D

$$H_D = \sum_p E_p c_p^+ c_p + \sum_p (-E_p) b_p b_p^+. \quad (35)$$

Or, d'après (26), $b_p b_p^+ = 1 - b_p^+ b_p$, de sorte que

$$H_D = E_0 + \sum_p E_p c_p^+ c_p + \sum_p E_p b_p^+ b_p. \quad (36)$$

L'interprétation physique de (36) est très claire. L'énergie $E_0 = \sum_p (-E_p)$

est l'énergie du vide et n'est pas directement observable. $c_p^+ c_p$ est le nombre d'électrons d'énergie E_p , qui contribuent à l'énergie totale par la quantité $E_p c_p^+ c_p$. Les valeurs propres de $c_p^+ c_p$ ne peuvent être que 0 ou 1. Cette propriété, démontrée dans l'exercice 8 du chapitre II, est une conséquence des relations d'anticommuation et justifie le principe d'exclusion de Pauli. De même, $b_p^+ b_p$ est le nombre de positrons d'énergie E_p , qui contribuent de façon semblable à l'énergie totale, avec un signe positif. Il est à noter que, si l'on avait imposé à b_p et b_p^+ des relations de commutation au lieu d'anticommuation, le signe $-$ présent dans (35) aurait subsisté dans (36), et l'énergie totale aurait pu devenir infiniment négative. Les relations d'anticommuation sont donc nécessaires pour obtenir que l'énergie soit bornée inférieurement.

Remarques

(i) L'énergie du vide E_0 n'a pas vraiment de signification physique. On pourrait la supprimer en définissant H_D de façon plus symétrique entre particules et antiparticules.

(ii) En présence d'un champ extérieur, il faut remplacer dans l'expression (34) de H_D , l'opérateur $\mathcal{H}_D$ par l'expression (14) plutôt que (13).

Pour classer les niveaux d'énergie du champ de Dirac, il est intéressant d'introduire la charge totale Q

$$Q = q \sum_p c_p^+ c_p - q \sum_p b_p^+ b_p. \quad (37)$$

L'importance de cette quantité vient du fait qu'elle est conservée, même en présence d'interaction avec le champ électromagnétique.

Les premiers niveaux d'énergie du champ sont représentés sur la figure 1.

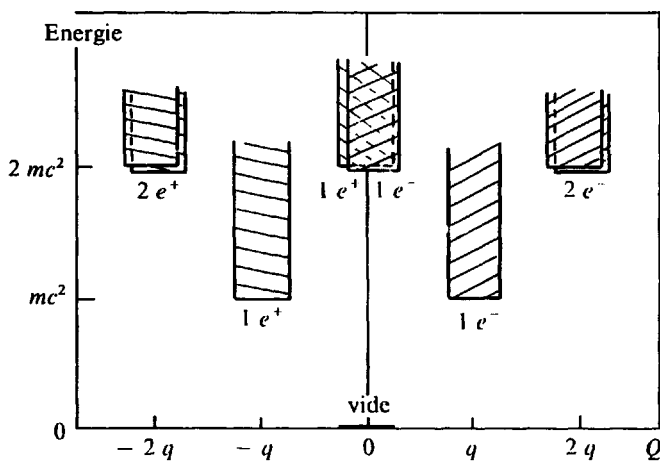


Figure 1. Premiers états du champ de Dirac quantifié.

Le vide a pour énergie E_0 que nous prendrons pour origine, et la valeur de Q correspondante est 0. C'est l'état fondamental du champ. Les premiers états excités commencent à $E = mc^2$ et forment deux continus caractérisés par $Q = +q$ et $Q = -q$, s'étendant jusqu'à $+\infty$. Ce sont les états à 1 électron, et 1 positron respectivement. Trois doubles continus commencent à $E = 2mc^2$, avec $Q = +2q, 0, -2q$, décrivant respectivement deux électrons, une paire électron-positron, 2 positrons. On trouverait ensuite des états à 3 particules, certains de charge $+q$, au-dessus des états à 1 électron, d'autres de charge $3q$; et ainsi de suite...

Le formalisme non relativiste utilisé dans les chapitres précédents permet de décrire les processus dont le déroulement se situe entièrement à l'intérieur d'une multiplicité du type de celles que nous venons de décrire. Dans la théorie présente, des transitions entre multiplicités de même valeur de Q (transitions verticales sur la figure 1) peuvent être étudiées, comme nous le verrons au paragraphe 3 en étudiant l'hamiltonien de couplage avec le champ de rayonnement.

c) TRANSLATIONS TEMPORELLES ET SPATIALES

Pour terminer ce paragraphe sur la quantification du champ de Dirac, nous montrons que l'hamiltonien H_D et l'opérateur impulsion $\mathbf{P}$, dont nous allons donner l'expression, sont bien les générateurs des translations dans le temps et dans l'espace du système, comme pour tout système quantique libre.

Pour H_D , la propriété est évidente puisque l'équation de Heisenberg pour l'opérateur champ s'écrit

$$[H_D, \Psi(\mathbf{r}, t)] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (38)$$

qui s'intègre en

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} H_D \tau\right) \Psi(\mathbf{r}, t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_D \tau\right) = \Psi(\mathbf{r}, t + \tau). \quad (39)$$

L'opérateur impulsion du champ $\mathbf{P}$ s'obtient selon une méthode identique à celle qui nous a fourni H_D (voir aussi exercice 6).

$$\mathbf{P} = \int d^3 r' \tilde{\Psi}^+(\mathbf{r}') \left[\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(\mathbf{r}') \right]. \quad (40)$$

Prenons en le commutateur avec $\Psi_\lambda(\mathbf{r})$

$$\begin{aligned} [\mathbf{P}, \Psi_\lambda(\mathbf{r})] = \sum_{\lambda'} \int d^3 r' \left\{ \Psi_{\lambda'}^+(\mathbf{r}') \left[\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi_{\lambda'}(\mathbf{r}') \right] \Psi_\lambda(\mathbf{r}) - \right. \\ \left. - \Psi_\lambda(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda'}^+(\mathbf{r}') \left[\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi_{\lambda'}(\mathbf{r}') \right] \right\} \quad (41) \end{aligned}$$

$\Psi_\lambda(\mathbf{r})$ anticommute avec $\Psi_{\lambda'}(\mathbf{r}')$, donc aussi avec $\nabla\Psi_{\lambda'}(\mathbf{r}')$. En le faisant passer à gauche dans le premier terme, on obtient l'anticommutateur de $\Psi_{\lambda'}^+(\mathbf{r}')$ et $\Psi_\lambda(\mathbf{r})$, qui vaut $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\lambda\lambda'}$. Après intégration sur $\mathbf{r}'$, (41) devient

$$[\mathbf{P}, \Psi_\lambda(\mathbf{r})] = -\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi_\lambda(\mathbf{r}) \quad (42)$$

$\mathbf{P}$ est donc bien le générateur des translation spatiales

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot \mathbf{a}\right) \Psi(\mathbf{r}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot \mathbf{a}\right) = \Psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}). \quad (43)$$

Notons que les formules (38) et (42) peuvent se condenser en une seule en posant $P^0 = H_D/c$

$$[P^\mu, \Psi(x)] = \frac{\hbar}{i} \sum_\nu g^{\mu\nu} \partial_\nu \Psi(x), \quad x = (ct, \mathbf{r}). \quad (44)$$

Dans une approche plus élaborée de la quantification, cette relation fondamentale, que nous démontrons ici à partir des relations d'anticommutation des champs, est au contraire postulée pour que les translations soient représentées par une transformation unitaire des opérateurs champ, générée par P^μ . L'utilisation des relations d'anticommutation pour les champs constitue l'une des façons de réaliser cette exigence. L'autre consisterait à utiliser des relations de commutation, mais elle conduirait à une énergie non bornée inférieurement et doit donc être rejetée.

3. Champ de Dirac et champ électromagnétique en interaction

a) HAMILTONIEN DU SYSTÈME TOTAL, HAMILTONIEN D'INTERACTION

Dans le chapitre V, nous avons étudié le champ de Maxwell quantifié en jauge de Lorentz en présence de sources extérieures $\mathbf{j}_e(\mathbf{r}, t)$ et $\rho_e(\mathbf{r}, t)$ dont la dynamique est imposée. L'hamiltonien du champ libre H_R est donné par (C.19) ou (C.22). L'hamiltonien d'interaction avec les sources s'écrit (voir (A.29) et (A.8))

$$H_I = \int d^3r \sum_\mu j_{e\mu}(\mathbf{r}, t) A^\mu(\mathbf{r}) = \int d^3r [-\mathbf{j}_e(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) + c\rho_e(\mathbf{r}, t) A_s(\mathbf{r})]. \quad (45)$$

Par ailleurs, l'hamiltonien du champ de Dirac en présence de champs électrique et magnétique extérieurs dont la dynamique est imposée s'obtiendrait en utilisant dans (34) l'expression (14) de $\mathcal{H}_D$ au lieu de (13).

Cela revient à ajouter à l'hamiltonien H_D du champ libre

$$\begin{aligned} H_I &= \int d^3r \tilde{\Psi}^+(\mathbf{r}) [-c\mathbf{q}\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t) + qU_e(\mathbf{r}, t)] \Psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \int d^3r [-\mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t) + \rho(\mathbf{r}) U_e(\mathbf{r}, t)] \end{aligned} \quad (46)$$

où les opérateurs densité de charge et densité de courant sont les analogues de (15. a) et (15. b) en seconde quantification

$$\rho(\mathbf{r}) = q\tilde{\Psi}^+(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \quad (47. a)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = qc\tilde{\Psi}^+(\mathbf{r}) \boldsymbol{\alpha} \Psi(\mathbf{r}). \quad (47. b)$$

Lorsque chacun des deux systèmes, champ de rayonnement et champ de matière, a sa dynamique propre, il semble naturel de généraliser (45) ou (46) en remplaçant les grandeurs extérieures $\mathbf{j}_e(\mathbf{r}, t)$, $\rho_e(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t)$, $U_e(\mathbf{r}, t)/c$ par les opérateurs quantiques $\mathbf{j}(\mathbf{r})$, $\rho(\mathbf{r})$, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, $A_s(\mathbf{r})$. On obtient ainsi, pour l'hamiltonien des deux champs quantiques en interaction, l'expression suivante qui peut être justifiée plus précisément à partir du formalisme lagrangien (voir exercice 6).

$$H = H_D + H_R + H_I \quad (48)$$

où H_D est l'hamiltonien des particules libres (36) (en laissant de côté la constante E_0)

$$H_D = \sum_p E_p c_p^+ c_p + \sum_p E_p b_p^+ b_p \quad (49)$$

H_R est l'hamiltonien propre du champ, décomposé en modes transverses, longitudinaux et temporels,

$$\begin{aligned} H_R &= \int d^3k \sum_{\lambda=e,e',l} \hbar\omega \left[\bar{a}_\lambda(\mathbf{k}) a_\lambda(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right] + \\ &\quad + \int d^3k \hbar\omega \left[-\bar{a}_s(\mathbf{k}) a_s(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right] \end{aligned} \quad (50)$$

et H_I , l'hamiltonien d'interaction

$$H_I = \int d^3r [-\mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) + c\rho(\mathbf{r}) A_s(\mathbf{r})]. \quad (51)$$

Ce dernier est linéaire en a et $\bar{a}$ pour les photons, et fait intervenir les produits $c_p^+ c_{p'}$, $b_p b_{p'}^+$, $c_p^+ b_{p'}^+$, $b_p c_{p'}$ pour les particules. Une interaction fait donc varier le nombre de photons d'une unité, et le nombre de particules de 0 (termes en $c_p^+ c_{p'}$ et $b_p b_{p'}^+$), ou de 2 (les produits $c_p^+ b_{p'}^+$ et $b_p c_{p'}$ créent et détruisent respectivement des paires électron-positron).

A des aménagements techniques près (utilisation de produits dans

l'ordre normal), (48) est l'hamiltonien de base pour calculer tout processus en électrodynamique quantique.

b) EQUATIONS DE HEISENBERG DES CHAMPS

Comme nous n'avons pas introduit l'hamiltonien (48) à partir des premiers principes, il est intéressant de vérifier à quelles équations de Heisenberg il conduit pour les champs quantiques.

Pour le champ électromagnétique, déterminons l'équation d'évolution des opérateurs $a_\mu(\mathbf{k})$

$$\begin{aligned}\dot{a}_\mu(\mathbf{k}) &= \frac{1}{i\hbar} [a_\mu(\mathbf{k}), H] \\ &= \frac{1}{i\hbar} [a_\mu(\mathbf{k}), H_R] + \frac{1}{i\hbar} [a_\mu(\mathbf{k}), H_I].\end{aligned}\quad (52)$$

Le premier terme donne simplement $-i\omega a_\mu$. Dans le second terme, il faut remplacer H_I par son expression (51) dans laquelle $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ et $A_s(\mathbf{r})$ sont développés en fonction des opérateurs $a_\mu(\mathbf{k}')$ et $\bar{a}_\mu(\mathbf{k}')$ (formule (C.17) du chapitre). Seul le commutateur $[a_\mu(\mathbf{k}), \bar{a}_\mu(\mathbf{k}')]$ est non nul et vaut $-g_{\mu\mu'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$. L'intégrale sur $\mathbf{r}$ dans l'expression (51) de H_I projette le quadrivecteur $j^\mu = (c\rho, \mathbf{j})$ sur le mode $\mathbf{k}$:

$$\dot{a}_\mu(\mathbf{k}) = -i\omega a_\mu(\mathbf{k}) + \frac{i}{\sqrt{2\varepsilon_0\hbar\omega}} j_\mu(\mathbf{k}) \quad (53)$$

où

$$j_\mu(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \int d^3r j_\mu(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (54)$$

L'équation (53) est à rapprocher des équations (A.33') et (A.35') du chapitre, elles-mêmes équivalentes aux équations de Maxwell classiques en jauge de Lorentz. L'équation (53) est donc la bonne équation du mouvement des champs quantiques, dans le sous-espace d'états satisfaisant la condition supplémentaire de Lorentz (qui sera précisée dans le § c suivant). Notons également que la source j_μ est ici un opérateur dans l'espace des particules, et non pas un nombre.

Pour le champ de Dirac, l'équation de Heisenberg s'écrit :

$$\begin{aligned}i\hbar \dot{\Psi}(\mathbf{r}) &= [\Psi(\mathbf{r}), H] \\ &= [\Psi(\mathbf{r}), H_D + H_I] \\ &= \left[\Psi(\mathbf{r}), \int d^3r' \bar{\Psi}^+(\mathbf{r}') \{ \mathcal{H}_D + qcA_s(\mathbf{r}') - qc\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}') \} \Psi(\mathbf{r}') \right].\end{aligned}\quad (55)$$

En utilisant les relations d'anticommuation de façon analogue à ce qui a été fait pour passer de l'équation (41) à (42), on obtient :

$$i\hbar \dot{\Psi}(\mathbf{r}) = \left\{ \beta mc^2 + qcA_s(\mathbf{r}) + c\boldsymbol{\alpha} \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \right\} \Psi(\mathbf{r}). \quad (56)$$

Cette équation est semblable à l'équation de Dirac en présence d'un champ électromagnétique décrit par les potentiels $A_s(\mathbf{r})$ et $\mathbf{A}(\mathbf{r})$. Mais ces deux quantités sont maintenant des opérateurs du champ de Maxwell, Ψ étant lui-même un opérateur du champ de Dirac. A partir de (56), on démontre sans difficulté l'équation quantique de conservation du courant, vérifiée par les densités ρ et $\mathbf{j}$ définies en (47. a) et (47. b).

$$\dot{\rho}(\mathbf{r}) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0 \quad (57. a)$$

ou encore dans l'espace réciproque

$$\dot{\rho}(\mathbf{k}) + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{k}) = 0. \quad (57. b)$$

c) FORME DE LA CONDITION SUPPLÉMENTAIRE EN PRÉSENCE D'INTERACTION

Dans le cas du champ libre, nous avons montré qu'il existait des vecteurs d'état physiques $|\chi\rangle$ tels que la condition de Lorentz

$$\langle \chi | \sum_{\mu} \partial_{\mu} A^{\mu}(\mathbf{r}, t) | \chi \rangle = 0 \quad (58)$$

soit vérifiée en moyenne quels que soient $\mathbf{r}$ et t . Pour cela, nous avons utilisé le développement du champ libre en ondes planes progressives (B.9) pour identifier les composantes de Fourier spatiales et temporelles de $\sum_{\mu} \partial_{\mu} A_{\mu}$ et les annuler en moyenne par la condition (B.21), exprimée pour toutes les valeurs de $\mathbf{k}$. Nous avons ainsi utilisé explicitement l'évolution temporelle simple des opérateurs a et a^+ pour le champ libre.

En présence d'interaction, l'évolution des champs en représentation de Heisenberg n'est plus aussi simple, et l'identification des composantes de Fourier de fréquence donnée suppose la connaissance complète de l'évolution du système « champ de matière + champ électromagnétique » en interaction. Fort heureusement, bien que le champ A_{μ} ait une évolution compliquée, l'opérateur

$$\Lambda(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mu} \partial_{\mu} A^{\mu}(\mathbf{r}, t) \quad (59)$$

qui figure dans (58) a, quant à lui, un comportement simple. Pour le voir, il suffit de se reporter à l'équation (A.17) vérifiée par la grandeur classique correspondante. Cette équation résulte d'une part des équations du mouvement de A_{μ} , d'autre part de l'équation de conservation du courant.

Ces équations restent vraies pour les opérateurs en théorie quantique et Λ vérifie donc l'équation :

$$\square \Lambda(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (60)$$

Dans l'espace réciproque, la transformée de Fourier spatiale $\Lambda(\mathbf{k})$ de $\Lambda(\mathbf{r})$ vérifie

$$\ddot{\Lambda}(\mathbf{k}) = -\omega^2 \Lambda(\mathbf{k}) \quad (\omega = ck) \quad (61)$$

de sorte que $\Lambda(\mathbf{k})$ a une évolution simple, caractérisée par les deux exponentielles $\exp(\pm i\omega t)$.

Identifions plus précisément les parties de $\Lambda(\mathbf{k})$ associées à chacune des fréquences $\pm \omega$. A l'aide de (C.17), $\Lambda(\mathbf{k})$ s'exprime en fonction des opérateurs a et $\bar{a}$:

$$\Lambda(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega}} \left[\mathbf{ik} \cdot \mathbf{a}(\mathbf{k}) + \mathbf{ik} \cdot \bar{\mathbf{a}}(-\mathbf{k}) + \frac{1}{c} \dot{a}_s(\mathbf{k}) + \frac{1}{c} \dot{\bar{a}}_s(-\mathbf{k}) \right]. \quad (62)$$

La vitesse $\dot{a}_s$ peut être remplacée par sa valeur donnée par (53) et $\mathbf{ik} \cdot \mathbf{a}$ par ika_t . Montrons que l'opérateur $\Lambda^{(+)}(\mathbf{k})$, défini par

$$\begin{aligned} \Lambda^{(+)}(\mathbf{k}) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega}} \left[\mathbf{ik} \cdot \mathbf{a}(\mathbf{k}) + \frac{1}{c} \dot{a}_s(\mathbf{k}) \right] \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega}} \frac{i\omega}{c} \left[a_t(\mathbf{k}) - a_s(\mathbf{k}) + \frac{c}{\omega\sqrt{2\varepsilon_0\hbar\omega}} \rho(\mathbf{k}) \right] \end{aligned} \quad (63)$$

évolue au cours du temps sous l'action de l'hamiltonien total H , comme $\exp(-i\omega t)$. Pour cela, calculons sa dérivée $\dot{\Lambda}^{(+)}(\mathbf{k})$. Elle fait intervenir $\dot{a}_t$, $\dot{a}_s$ et $\dot{\rho}$ dont les valeurs sont données en (53) et (57. b). On obtient ainsi

$$\begin{aligned} \dot{\Lambda}^{(+)}(\mathbf{k}) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega}} \frac{i\omega}{c} \left[-i\omega a_t(\mathbf{k}) + \frac{\mathbf{ik} \cdot \dot{\mathbf{j}}(\mathbf{k})}{\sqrt{2\varepsilon_0\hbar\omega}} + i\omega a_s(\mathbf{k}) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{ic\rho(\mathbf{k})}{\sqrt{2\varepsilon_0\hbar\omega}} - \frac{ick \cdot \dot{\mathbf{j}}(\mathbf{k})}{\omega\sqrt{2\varepsilon_0\hbar\omega}} \right] = -i\omega \Lambda^{(+)}(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (64)$$

ce qui démontre la propriété annoncée.

De la même façon

$$\begin{aligned} \Lambda^{(-)}(\mathbf{k}) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega}} \left[\mathbf{ik} \cdot \bar{\mathbf{a}}(-\mathbf{k}) + \frac{1}{c} \dot{\bar{a}}_s(-\mathbf{k}) \right] \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega}} \frac{-i\omega}{c} \left[\bar{a}_t(-\mathbf{k}) - \bar{a}_s(-\mathbf{k}) + \frac{c}{\omega\sqrt{2\varepsilon_0\hbar\omega}} \rho^+(-\mathbf{k}) \right] \end{aligned} \quad (65)$$

évolue comme $\exp(+i\omega t)$.

Ainsi, la condition (58) pour tout $\mathbf{r}$ et tout t se ramène à deux conditions initiales, à vérifier pour tout $\mathbf{k}$:

$$\langle \chi | a_l(\mathbf{k}) - a_s(\mathbf{k}) + \frac{c}{\omega \sqrt{2 \varepsilon_0 \hbar \omega}} \rho(\mathbf{k}) | \chi \rangle = 0 \quad (66.a)$$

$$\langle \chi | \bar{a}_l(\mathbf{k}) - \bar{a}_s(\mathbf{k}) + \frac{c}{\omega \sqrt{2 \varepsilon_0 \hbar \omega}} \rho^+(\mathbf{k}) | \chi \rangle = 0. \quad (66.b)$$

Ces conditions sont réalisées pour les états du sous-espace défini par

$$[a_l(\mathbf{k}) - a_s(\mathbf{k}) + \lambda(\mathbf{k})] | \chi \rangle = 0 \quad \forall \mathbf{k} \quad (67)$$

où

$$\lambda(\mathbf{k}) = \frac{c}{\omega \sqrt{2 \varepsilon_0 \hbar \omega}} \rho(\mathbf{k}) \quad (68)$$

qui constitue le sous-espace des états physiques. Cette équation généralise les équations (B.21) et (D.28) discutées dans le chapitre pour le champ libre, ou le champ en présence de sources extérieures.

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES ET CONSEILS DE LECTURE

Pour l'équation de Dirac, voir par exemple Berestetskii, Lifchitz et Pitayevski (chap. 4), Bjorken et Drell (chap. 1 à 7), Messiah (chap. XX).

Pour la quantification du champ de Dirac et l'électrodynamique quantique relativiste, voir par exemple Berestetskii, Lifchitz et Pitayevski, Bogoliubov et Chirkov, Feynman, Heitler, Itzykson et Zuber, Jauch et Rohrlich, Schweber.

COMPLÉMENT B_V

**JUSTIFICATION DE LA THÉORIE NON RELATIVISTE
EN JAUGE DE COULOMB À PARTIR
DE L'ÉLECTRODYNAMIQUE QUANTIQUE RELATIVISTE**

Introduction

Dans le complément A_V précédent, nous avons donné l'expression de l'hamiltonien qui décrit la dynamique des champs quantiques de Dirac et Maxwell couplés. Un tel hamiltonien utilise la *jauge de Lorentz* pour le champ électromagnétique, de sorte que l'interaction de Coulomb entre particules n'apparaît pas explicitement dans l'hamiltonien. De plus, *le nombre de positrons et d'électrons n'est pas une constante du mouvement* et peut varier au cours du temps. Un tel cadre théorique semble donc très éloigné de celui mis en place dans les chapitres précédents. Nous avons alors considéré des particules, *en nombre fixé*, décrites par des fonctions d'ondes de Schrödinger (ou des spineurs à 2 composantes de Pauli), et utilisé pour le champ de rayonnement la jauge de Coulomb (ou des jauges dérivées de la jauge de Coulomb) *faisant apparaître explicitement l'interaction de Coulomb dans l'hamiltonien des particules*. Le but de ce complément est d'établir un lien entre ces deux traitements et de montrer comment la théorie non relativiste des chapitres I à IV peut être justifiée à partir de l'électrodynamique quantique relativiste en jauge de Lorentz, dont nous avons donné les grandes lignes dans le complément A_V.

Nous allons pour cela procéder en deux étapes. Tout en conservant la description des particules par un champ quantique de Dirac, nous commençons par effectuer sur l'hamiltonien du complément A_V une transformation unitaire (au sens de la nouvelle norme) qui fait apparaître explicitement l'interaction de Coulomb entre particules. Si l'on utilise en plus la condition supplémentaire, caractérisant les états physiques dans l'espace des états, une telle transformation revient à passer de la jauge de Lorentz à la jauge de Coulomb (§ 1) (*). A la limite non relativiste, les couplages entre états avec des nombres différents de particules (électrons + positrons) sont faibles et peuvent être traités perturbativement. Nous montrons alors (§ 2) que, pour un nombre donné de particules, la dynamique du système particules + photons est équivalente à celle décrite par les hamiltoniens non relativistes des chapitres précédents.

(*) Une démarche de ce type est suivie par K. Haller, R. B. Sohn, *Phys. Rev.*, A **20**, 1541 (1979).

1. Passage de la jauge de Lorentz à la jauge de Coulomb en électrodynamique quantique relativiste

a) TRANSFORMATION SUR LES PHOTONS SCALAIRES FAISANT APPARAÎTRE L'INTERACTION DE COULOMB

Partons de l'hamiltonien (48) du complément A_v que nous réécrivons sous la forme

$$H = H_D + H_R^T + H_R^L + H_R^S + H_I^T + H_I^L + H_I^S \quad (1)$$

en séparant dans l'hamiltonien du rayonnement H_R et dans l'hamiltonien d'interaction H_I les contributions des photons transverses, longitudinaux, scalaires (repérées par des indices supérieurs T, L, S respectivement).

Considérons tout d'abord la partie de H faisant intervenir les photons scalaires. Elle se réduit à $H_R^S + H_I^S$. En utilisant les formules (50) et (51) du complément A_v, ainsi que le développement du potentiel scalaire $A_s(\mathbf{r})$ en a_s et $\bar{a}_s$ (voir formule (C.17) du chapitre), nous obtenons

$$H_R^S + H_I^S = \int d^3k \hbar \omega \left[-\bar{a}_s(\mathbf{k}) a_s(\mathbf{k}) + \lambda^*(\mathbf{k}) a_s(\mathbf{k}) + \lambda(\mathbf{k}) \bar{a}_s(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right] \quad (2)$$

où

$$\lambda(\mathbf{k}) = \frac{c}{\hbar \omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega}} \rho(\mathbf{k}) = \frac{c}{\hbar \omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega (2\pi)^3}} \int d^3r \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (3)$$

a déjà été introduit dans le complément A_v (voir (68)). Comme dans le paragraphe D.2.c du chapitre V, nous pouvons alors réécrire le crochet de (2) sous la forme

$$- [\bar{a}_s(\mathbf{k}) - \lambda^*(\mathbf{k})] [a_s(\mathbf{k}) - \lambda(\mathbf{k})] + \lambda^*(\mathbf{k}) \lambda(\mathbf{k}) + \frac{1}{2}. \quad (4)$$

Les opérateurs de particules $\lambda^*(\mathbf{k})$ et $\lambda(\mathbf{k})$ commutent avec les opérateurs de rayonnement $a_s(\mathbf{k})$ et $\bar{a}_s(\mathbf{k})$, et aussi entre eux, car ils ne dépendent, d'après (3), que de $\rho(\mathbf{r})$, et on peut montrer (voir exercice 7) que $\rho(\mathbf{r})$ commute avec $\rho(\mathbf{r}')$. Il s'ensuit que les opérateurs $\bar{a}_s - \lambda^*$ et $a_s - \lambda$ satisfont aux mêmes relations de commutation que $\bar{a}_s$ et a_s . Il doit donc exister un « opérateur de translation » T transformant $\bar{a}_s - \lambda^*$ en $\bar{a}_s$ et $a_s - \lambda$ en a_s ,

$$T[\bar{a}_s(\mathbf{k}) - \lambda^*(\mathbf{k})] T^{-1} = \bar{a}_s(\mathbf{k}) \quad (5.a)$$

$$T[a_s(\mathbf{k}) - \lambda(\mathbf{k})] T^{-1} = a_s(\mathbf{k}) \quad (5.b)$$

et généralisant les opérateurs de translation introduits dans le paragraphe C.4.d du chapitre III pour des opérateurs a et $a^\dagger$ adjoints l'un de

l'autre vis-à-vis du produit scalaire habituel. Il est possible de vérifier (voir exercice 4) que l'opérateur

$$T = \exp \left\{ \int d^3k [\lambda(\mathbf{k}) \bar{a}_s(\mathbf{k}) - \lambda^*(\mathbf{k}) a_s(\mathbf{k})] \right\} \quad (6)$$

qui est unitaire vis-à-vis du nouveau produit scalaire

$$T \bar{T} = \bar{T} T = 1 \quad (7)$$

satisfait bien aux relations (5). Compte tenu de (2), (4), (5) et (3), on obtient alors

$$\begin{aligned} T(H_R^S + H_I^S) \bar{T} &= \int d^3k \hbar \omega \left[-\bar{a}_s(\mathbf{k}) a_s(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right] + \int d^3k \hbar \omega \lambda^*(\mathbf{k}) \lambda(\mathbf{k}) \\ &= H_R^S + \int d^3k \frac{\rho^*(\mathbf{k}) \rho(\mathbf{k})}{2 \varepsilon_0 k^2}. \end{aligned} \quad (8)$$

Le dernier terme de (8) n'est autre que l'énergie de Coulomb du système de charges (voir formules (B.32) et (B.33) du chap. I)

$$\begin{aligned} V_{\text{Coul}} &= \int d^3k \frac{\rho^*(\mathbf{k}) \rho(\mathbf{k})}{2 \varepsilon_0 k^2} = \iint d^3r d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{8 \pi \varepsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ &= \frac{q^2}{8 \pi \varepsilon_0} \iint d^3r d^3r' \frac{\tilde{\Psi}^+(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \tilde{\Psi}^+(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \end{aligned} \quad (9)$$

Ainsi la transformation T nous a permis d'éliminer le terme d'interaction H_I^S avec les photons scalaires et de le remplacer par l'interaction de Coulomb.

$$T(H_R^S + H_I^S) \bar{T} = H_R^S + V_{\text{Coul}}. \quad (10)$$

Remarque

Dans la nouvelle représentation, le potentiel scalaire $A_s(\mathbf{r})$ est représenté par l'opérateur mathématique

$$\begin{aligned} A'_s(\mathbf{r}) &= T A_s(\mathbf{r}) \bar{T} = \\ &= A_s(\mathbf{r}) + \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega (2 \pi)^3}} [\lambda(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \lambda^*(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}]. \end{aligned} \quad (11)$$

Nous avons utilisé le développement de $A_s(\mathbf{r})$ en a_s et $\bar{a}_s$ (voir formule (C.17)), ainsi que les équations (5). Le dernier terme de (11) se calcule aisément à partir de l'expression (3) de $\lambda(\mathbf{k})$. Il coïncide avec le potentiel scalaire $A_s^P(\mathbf{r})$

créé par la densité de charges $\rho(\mathbf{r})$ des particules

$$A_s^p(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (12)$$

Reportons (12) dans (11). Il vient

$$A_s'(\mathbf{r}) = A_s(\mathbf{r}) + A_s^p(\mathbf{r}). \quad (13)$$

Il apparaît clairement sur (13) que l'opérateur mathématique $A_s(\mathbf{r})$ (donné par la formule (C. 17)), qui décrit, dans le point de vue initial, le potentiel scalaire total, décrit dans le nouveau point de vue la grandeur physique $A_s'(\mathbf{r}) - A_s^p(\mathbf{r}) = A_s'(\mathbf{r}) - (A_s^p(\mathbf{r}))'$ puisque A_s^p commute avec T et est donc égal à $(A_s^p(\mathbf{r}))'$. Dans le nouveau point de vue, l'opérateur $A_s(\mathbf{r})$ décrit donc la différence entre le potentiel scalaire total et le potentiel scalaire créé par les particules.

b) EFFET DE LA TRANSFORMATION SUR LES AUTRES TERMES DE L'HAMILTONIEN EN JAUGE DE LORENTZ

Pour étudier ce que deviennent les autres termes de (1) dans la transformation T , réécrivons T en reportant dans (6) l'expression (3) de $\lambda(\mathbf{k})$. Il vient

$$T = \exp \left\{ -\frac{ic}{\hbar} \int d^3r \rho(\mathbf{r}) S(\mathbf{r}) \right\} \quad (14)$$

où

$$S(\mathbf{r}) = \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega(2\pi)^3}} \left[\frac{a_s(\mathbf{k})}{i\omega} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{\bar{a}_s(\mathbf{k})}{i\omega} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] \quad (15)$$

est un champ quantique qui n'agit que sur les photons scalaires et qui commute avec lui-même

$$[S(\mathbf{r}), S(\mathbf{r}')] = 0 \quad (16)$$

T agit sur les particules par l'intermédiaire de la densité $\rho(\mathbf{r})$ qui apparaît dans (14). La simplicité des relations de commutation de $\rho(\mathbf{r}) = q\Psi^+(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})$ avec les opérateurs de Dirac $\Psi_\lambda(\mathbf{r})$ et $\Psi_\lambda^+(\mathbf{r})$ et la propriété (16) permettent de calculer simplement les transformées de Ψ_λ et Ψ_λ^+ par T (voir exercice 7). Comme $T^{-1} = \bar{T}$ d'après (7), les équations (6) de l'exercice 7 s'écrivent

$$\left\{ \begin{array}{l} T\Psi_\lambda(\mathbf{r})\bar{T} = \exp\left[i\frac{qc}{\hbar}S(\mathbf{r})\right]\Psi_\lambda(\mathbf{r}) \\ T\Psi_\lambda^+(\mathbf{r})\bar{T} = \exp\left[-i\frac{qc}{\hbar}S(\mathbf{r})\right]\Psi_\lambda^+(\mathbf{r}). \end{array} \right. \quad (17. a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} T\Psi_\lambda(\mathbf{r})\bar{T} = \exp\left[i\frac{qc}{\hbar}S(\mathbf{r})\right]\Psi_\lambda(\mathbf{r}) \\ T\Psi_\lambda^+(\mathbf{r})\bar{T} = \exp\left[-i\frac{qc}{\hbar}S(\mathbf{r})\right]\Psi_\lambda^+(\mathbf{r}). \end{array} \right. \quad (17. b)$$

Revenons maintenant à l'hamiltonien (1). Comme H_R^T et H_R^L ne dépendent que des variables du champ transverse et longitudinal, sur lesquelles T n'agit pas

$$T(H_R^T + H_R^L) \bar{T} = H_R^T + H_R^L. \quad (18)$$

On peut réécrire $H_I^T + H_I^L$ sous la forme

$$H_I^T + H_I^L = -q \int d^3r \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} \Psi_{\lambda}^{+}(\mathbf{r}) [c(\boldsymbol{\alpha})_{\lambda\lambda'} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})] \Psi_{\lambda'}(\mathbf{r}) \quad (19)$$

où $\mathbf{A}$ est le potentiel vecteur (transverse et longitudinal), de sorte que

$$T(H_I^T + H_I^L) \bar{T} = -q \int d^3r \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} \exp\left[-i \frac{qc}{\hbar} S(\mathbf{r})\right] \Psi_{\lambda}^{+}(\mathbf{r}) T[c(\boldsymbol{\alpha})_{\lambda\lambda'} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})] \bar{T} \exp\left[i \frac{qc}{\hbar} S(\mathbf{r})\right] \Psi_{\lambda'}(\mathbf{r}). \quad (20)$$

Comme T commute avec $\mathbf{A}$, et que $S(\mathbf{r})$ commute aussi bien avec $\mathbf{A}$ qu'avec Ψ_{λ}^{+} , l'intégrale de (20) se réduit à celle de (19), de sorte que

$$T(H_I^T + H_I^L) \bar{T} = H_I^T + H_I^L. \quad (21)$$

Une démonstration analogue s'applique au terme en βmc^2 de H_D (donné par la formule (34) du complément A_v)

$$T \left\{ \int d^3r \tilde{\Psi}^{+}(\mathbf{r}) \beta mc^2 \Psi(\mathbf{r}) \right\} \bar{T} = \int d^3r \tilde{\Psi}^{+}(\mathbf{r}) \beta mc^2 \Psi(\mathbf{r}). \quad (22)$$

Il ne reste plus qu'à étudier le terme en $(\hbar c/i) \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla$ de H_D

$$\begin{aligned} T \left\{ \frac{\hbar c}{i} \int d^3r \tilde{\Psi}^{+}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\alpha} \cdot [\nabla \Psi(\mathbf{r})] \right\} \bar{T} &= \\ &= \frac{\hbar c}{i} \int d^3r \exp\left[-\frac{iqc}{\hbar} S(\mathbf{r})\right] \tilde{\Psi}^{+}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\alpha} \cdot \left\{ \nabla \left[\exp\left[i \frac{qc}{\hbar} S(\mathbf{r})\right] \Psi(\mathbf{r}) \right] \right\} \\ &= \frac{\hbar c}{i} \int d^3r \tilde{\Psi}^{+}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}) + qc^2 \int d^3r \tilde{\Psi}^{+}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\alpha} \cdot [\nabla S(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (23)$$

Le regroupement de (22) et (23) donne

$$T H_D \bar{T} = H_D + qc^2 \int d^3r \tilde{\Psi}^{+}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\alpha} \cdot [\nabla S(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}). \quad (24)$$

Finalement, compte tenu de (10), (18), (21) et (24), nous avons montré que

$$TH\bar{T} = H_P + H_R^T + H_I^T + H_R^L + H_R^S + H_I^{LS} \quad (25)$$

où

$$H_P = H_D + V_{\text{Coul}} \quad (26)$$

n'agit que sur les variables des particules, et où

$$\begin{aligned} H_I^{LS} &= H_I^L + qc^2 \int d^3r \tilde{\Psi}^+(\mathbf{r}) \boldsymbol{\alpha} \cdot [\nabla S(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}) = \\ &= -qc \int d^3r \tilde{\Psi}^+(\mathbf{r}) \boldsymbol{\alpha} \cdot [\mathbf{A}_{\parallel}(\mathbf{r}) - c\nabla S(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (27)$$

agit sur les variables des particules et sur celles des photons longitudinaux et scalaires. On peut enfin réexprimer $\mathbf{A}_{\parallel}$ en fonction de a_l et $\bar{a}_l$ et ∇S en fonction de a_s et $\bar{a}_s$ à partir de (15), et obtenir

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{\parallel}(\mathbf{r}) - c\nabla S(\mathbf{r}) &= \\ &= \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega(2\pi)^3}} \{ [a_l(\mathbf{k}) - a_s(\mathbf{k})] \boldsymbol{\kappa} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + [\bar{a}_l(\mathbf{k}) - \bar{a}_s(\mathbf{k})] \boldsymbol{\kappa} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \} \end{aligned} \quad (28)$$

c'est-à-dire encore, en introduisant les opérateurs $a_d(\mathbf{k})$ et $\bar{a}_d(\mathbf{k})$ définis dans le chapitre V (formule (C.33. a))

$$\mathbf{A}_{\parallel}(\mathbf{r}) - c\nabla S(\mathbf{r}) = -i\sqrt{2} \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega(2\pi)^3}} [a_d(\mathbf{k}) \boldsymbol{\kappa} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \bar{a}_d(\mathbf{k}) \boldsymbol{\kappa} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}]. \quad (29)$$

Il apparaît ainsi que, dans le nouveau point de vue (c'est-à-dire après la transformation T), le nouvel hamiltonien d'interaction avec les photons longitudinaux et scalaires ne dépend que des opérateurs a_d et $\bar{a}_d$. Nous verrons plus loin l'importance de ce point.

Remarque

Il existe une grande analogie entre le champ $S(\mathbf{r})$ défini en (15) et le champ $\mathbf{Z}(\mathbf{r})$ introduit dans le chapitre IV (voir l'équation (B.63)). Pour des champs libres, dans le point de vue de Heisenberg, $S(\mathbf{r}, t)$ est (au signe près) l'intégrale dans le temps du potentiel scalaire $A_s(\mathbf{r}, t)$, alors que $\mathbf{Z}(\mathbf{r}, t)$ est l'intégrale dans le temps du potentiel vecteur transverse $\mathbf{A}_1(\mathbf{r}, t)$. De même, on peut montrer qu'il existe une certaine analogie entre la transformation étudiée ici et la transformation de Pauli-Fierz-Kramers, que nous avons mentionnée dans le paragraphe B.4. d du chapitre IV. La transformation de Pauli-Fierz-Kramers essaie en effet de soustraire du potentiel vecteur transverse total le potentiel

vecteur transverse lié aux particules (*), de la même façon que T soustrait ici le potentiel scalaire lié aux particules (voir remarque à la fin du paragraphe *a* ci-dessus).

c) CONDITION SUPPLÉMENTAIRE. ABSENCE D'EFFETS PHYSIQUES DES PHOTONS SCALAIRES ET LONGITUDINAUX

Nous avons vu dans le complément A_v que, dans la représentation initiale en jauge de Lorentz, les états physiques $|\chi\rangle$ doivent satisfaire la condition

$$[a_t(\mathbf{k}) - a_s(\mathbf{k}) + \lambda(\mathbf{k})] |\chi\rangle = 0 \quad \forall \mathbf{k} \quad (30)$$

où $\lambda(\mathbf{k})$ est donné en (3). Pour déterminer ce que devient cette condition pour les états transformés

$$|\chi'\rangle = T |\chi\rangle \quad (31)$$

multiplions (30) à gauche par T , insérons $\bar{T}T = 1$ entre le crochet et $|\chi\rangle$ et utilisons (5.b). Il vient

$$[a_t(\mathbf{k}) - a_s(\mathbf{k})] |\chi'\rangle = 0 \quad \forall \mathbf{k} \quad (32)$$

c'est-à-dire encore, en termes des opérateurs a_d et $\bar{a}_d$

$$\begin{cases} a_d(\mathbf{k}) |\chi'\rangle = 0 \\ \langle \chi' | \bar{a}_d(\mathbf{k}) = 0 \end{cases} \quad \forall \mathbf{k}. \quad (33.a)$$

$$(33.b)$$

Dans la nouvelle représentation, la condition supplémentaire a donc la même forme que pour le champ libre (voir équation (C.37) du chapitre V et l'équation adjointe).

Les relations (33) jointes à l'équation

$$[a_d(\mathbf{k}), \bar{a}_d(\mathbf{k}')] = 0 \quad (34)$$

que nous avons démontrée dans le chapitre V (voir (C.42)), entraînent que l'hamiltonien d'interaction H_I^{LS} introduit dans le paragraphe précédent (voir (27) et (29)) ne contribue pas aux amplitudes de transition entre un état physique initial $|\chi_i\rangle$ et un état physique final $|\chi_f\rangle$ obéissant tous deux aux relations (33). Pour le voir, il suffit de noter qu'une telle amplitude est une somme de termes faisant intervenir des éléments de matrice entre $|\chi_i\rangle$ et $\langle \chi_f |$ d'un produit d'hamiltoniens d'interaction en représentation d'interaction, $\tilde{H}_I(t_1), \tilde{H}_I(t_2) \dots$. Or, dans l'expression (25) du nouvel hamiltonien, l'hamiltonien d'interaction est $H_I^T + H_I^{LS}$. Par ailleurs, $\tilde{H}_I^T$ s'exprime en fonction de $a_e \exp(-i\omega t)$, $a_e^* \exp(-i\omega t)$,

(*) Voir par exemple « Photons et atomes — Les processus d'interaction », Complément B_{II}.

$\bar{a}_e \exp(i\omega t)$, $\bar{a}_e \exp(i\omega t)$ alors que, d'après (27) et (29), H_I^{LS} s'exprime en fonction de $a_d \exp(-i\omega t)$ et $\bar{a}_d \exp(i\omega t)$. Comme a_d et $\bar{a}_d$ commutent entre eux d'après (34) et avec tous les opérateurs de photons transverses $a_e, a_e^*, \bar{a}_e, \bar{a}_e^*$, il est possible, dès que $\tilde{H}_I^{LS}$ intervient à un ordre supérieur ou égal à 1, de faire passer a_d à l'extrême droite, ou $\bar{a}_d$ à l'extrême gauche dans le produit $\tilde{H}_I(t_1) \tilde{H}_I(t_2) \dots$ et d'obtenir ainsi une amplitude de transition nulle, compte tenu des relations (33). Les seuls termes non nuls entre états physiques sont donc d'ordre 0 en H_I^{LS} . Ceci montre que pour tout calcul physique, H_I^{LS} peut être ignoré.

d) CONCLUSION : HAMILTONIEN DE L'ÉLECTRODYNAMIQUE QUANTIQUE RELATIVISTE EN JAUGE DE COULOMB

Nous venons de montrer que H_I^{LS} peut être ignoré dans le calcul d'une amplitude de transition entre deux états physiques $|\chi_i'\rangle$ et $|\chi_f'\rangle$. Prenons alors pour états physiques initiaux $|\chi_i'\rangle$ des états qui ne contiennent aucun photon longitudinal et aucun photon scalaire. De tels états satisfont bien aux relations (33) puisque $a_d|0, 0_s\rangle = 0$. Comme il est possible d'ignorer H_I^{LS} dans (25), et qu'aucun des autres termes de (25) ne peut créer de photons longitudinaux ou scalaires, n_l et n_s restent toujours nuls au cours du temps et H_R^L et H_R^S se réduisent alors à des constantes dans (25).

Finalement, pour tout processus physique, il est possible d'ignorer complètement dans (25) tous les termes relatifs aux photons longitudinaux et scalaires et de ne conserver que les trois premiers termes relatifs aux particules et au champ transverse. Nous retrouvons ainsi, en combinant la transformation T effectuée sur l'hamiltonien en jauge de Lorentz et la condition supplémentaire caractérisant les états physiques, que les degrés de liberté réellement indépendants du champ sont les degrés de liberté transverses. L'hamiltonien

$$H = H_p + H_R^T + H_I^T \quad (35)$$

où

$$H_p = \int d^3r \tilde{\Psi}^+(\mathbf{r}) \left[\beta mc^2 + \frac{\hbar c}{i} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \right] \Psi(\mathbf{r}) + \iint d^3r d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{8 \pi \epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (36)$$

$$H_R^T = \int d^3k \sum_{e,e'} \hbar \omega \left[a_e^+(\mathbf{k}) a_e^-(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right] \quad (37)$$

$$H_I^T = -qc \int d^3r \tilde{\Psi}^+(\mathbf{r}) \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \quad (38)$$

avec

$$\mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}) = \int d^3k \sum_{e,e'} \sqrt{\frac{\hbar}{2 \epsilon_0 \omega (2\pi)^3}} [a_e(\mathbf{k}) \boldsymbol{\epsilon} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + a_e^+(\mathbf{k}) \boldsymbol{\epsilon} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}] \quad (39)$$

est l'hamiltonien de l'électrodynamique quantique relativiste en jauge de Coulomb.

2. Limite non relativiste en jauge de Coulomb : justification de l'hamiltonien de Pauli pour les particules (*).

a) TERME PRÉPONDERANT H_0 DE L'HAMILTONIEN À LA LIMITE NON RELATIVISTE : ÉNERGIE DE MASSE DES PARTICULES

L'hamiltonien (35) est strictement équivalent à l'hamiltonien relativiste (48) du complément A_V. Les particules peuvent avoir une énergie cinétique grande devant mc^2 , et les fréquences des photons ne sont soumises à aucune restriction.

Intéressons-nous maintenant aux états décrivant des situations non relativistes (particules lentes, énergie des photons petite devant mc^2). La terme prépondérant de l'hamiltonien est alors l'énergie de masse des particules, qui est bien plus grande que leur énergie cinétique ou l'énergie des photons. Dans l'hamiltonien (35), elle est décrite par le terme

$$H_0 = \int d^3r \tilde{\Psi}^+(\mathbf{r}) \beta mc^2 \Psi(\mathbf{r}) \quad (40)$$

de (36). Nous allons considérer H_0 comme une première approximation de H et étudier ses niveaux d'énergie. Le reste de l'hamiltonien, que nous noterons V , sera traité comme une perturbation. Il comprend l'énergie cinétique des particules et leur interaction avec le champ transverse,

$$H_1 = \int d^3r \tilde{\Psi}^+(\mathbf{r}) \alpha \cdot \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) \quad (41)$$

($\mathbf{A}_\perp$ est donné par (39)), ainsi que l'énergie de Coulomb des particules, et l'hamiltonien propre du champ transverse

$$V = H_1 + V_{\text{Coul}} + H_R^T. \quad (42)$$

L'hamiltonien total s'écrit alors

$$H = H_0 + V. \quad (43)$$

Dans le complément A_V, nous avons utilisé un développement du champ de Dirac quantifié sur une base de fonctions spinorielles adaptée à l'hamiltonien $\mathcal{H}$ donné par la formule (13) de ce complément. Il est préférable

(*) Ce problème est également discuté dans Cohen-Tannoudji (§ 6) et dans I. Bialynicki-Birula in *Quantum Electrodynamics and Quantum Optics*, ed. by A. O. Barut, Plenum Press (1984) p. 63.

ici de faire un autre développement, mieux adapté à H_0 . Pour cela, considérons la base des spineurs $u_{\mathbf{p}\sigma}^{(0)}(\mathbf{r})$ et $v_{\mathbf{p}\sigma}^{(0)}(\mathbf{r})$, états propres communs aux opérateurs βmc^2 , σ_z et $\frac{\hbar}{i} \nabla$:

$$u_{\mathbf{p}\sigma}^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} u_{\sigma}^{(0)} \exp\left(i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right) \quad (44. a)$$

$$v_{\mathbf{p}\sigma}^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} v_{\sigma}^{(0)} \exp\left(i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right) \quad (44. b)$$

avec

$$u_{+}^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad u_{-}^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad v_{+}^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad v_{-}^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (45)$$

Le développement de $\Psi(\mathbf{r})$ s'écrit alors, en notant $\overline{\mathbf{p}\sigma} = -\mathbf{p}, -\sigma$:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}\sigma} C_{\mathbf{p}\sigma} u_{\mathbf{p}\sigma}^{(0)}(\mathbf{r}) + B_{\mathbf{p}\sigma}^{+} v_{\overline{\mathbf{p}\sigma}}^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (46)$$

$C_{\mathbf{p}\sigma}$, (resp. $B_{\mathbf{p}\sigma}^{+}$) étant l'opérateur de destruction d'une particule (resp. de création d'une antiparticule) d'impulsion $\mathbf{p}$ et de spin σ . Les opérateurs $C_{\mathbf{p}\sigma}$ et $B_{\mathbf{p}\sigma}$ anticommulent les uns avec les autres. En utilisant une démarche analogue à celle du paragraphe 2.b de A_v, on peut mettre H_0 sous la forme

$$H_0 = E'_0 + \sum_{\mathbf{p}\sigma} mc^2 [C_{\mathbf{p}\sigma}^{+} C_{\mathbf{p}\sigma} + B_{\mathbf{p}\sigma}^{+} B_{\mathbf{p}\sigma}]. \quad (47)$$

Les opérateurs $C^{+} C$ et $B^{+} B$ ont pour valeurs propres 0 et 1, de sorte qu'à la constante $E'_0 = \sum_{\mathbf{p}\sigma} (-mc^2)$ non observable près, le spectre de H_0 est un spectre *discret*, constitué de l'ensemble des multiples de mc^2 . Si l'on introduit la charge totale

$$Q = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \left[q C_{\mathbf{p}\sigma}^{+} C_{\mathbf{p}\sigma} + (-q) B_{\mathbf{p}\sigma}^{+} B_{\mathbf{p}\sigma} \right] \quad (48)$$

le diagramme des niveaux d'énergie de H_0 , classés suivant la valeur de Q , a l'allure donnée par la figure 1. Sur cette figure, chacun des niveaux présente une grande dégénérescence puisqu'il faut spécifier l'impulsion et le spin des particules, ainsi que le nombre de photons du champ transverse.

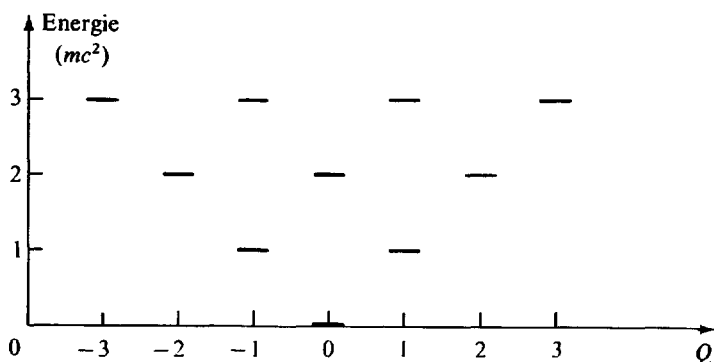


Figure 1. Niveaux d'énergie de l'hamiltonien H_0 décrivant l'énergie de masse du champ de Dirac quantifié.

Il apparaît clairement sur les expressions (44) que les spineurs $u_{p\sigma}^{(0)}$ n'ont que leurs deux premières composantes non nulles, alors que ce sont les deux dernières pour $v_{p\sigma}^{(0)}$ (ce n'était pas le cas dans le complément A_v, car les spineurs u_p et v_p avaient leurs quatre composantes non nulles pour $p \neq 0$). Dans le développement (46), les opérateurs C et B sont donc associés aux deux premières et aux deux dernières composantes du champ $\Psi(\mathbf{r})$ respectivement. Compte tenu des rôles différents que jouent ces deux types d'opérateurs, il est utile de décomposer $\Psi(\mathbf{r})$ en deux spineurs à deux composantes, $\Phi(\mathbf{r})$ et $\Omega^+(\mathbf{r})$.

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Phi(\mathbf{r}) \\ \Omega^+(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (49)$$

Leurs composantes $\Phi_\sigma(\mathbf{r})$ et $\Omega_\sigma^+(\mathbf{r})$, ($\sigma = +1$ ou -1), s'expriment en fonction des opérateurs C et B^+ , en utilisant l'expression (44) des spineurs $u_{p\sigma}^{(0)}$ et $v_{p\sigma}^{(0)}$

$$\Phi_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{L^3}} C_{p\sigma} \exp\left(i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right) \quad (50.a)$$

$$\Omega_\sigma^+(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{L^3}} B_{p\sigma}^+ \exp\left(i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right) \quad (50.b)$$

Il faut noter la présence de $\overline{\mathbf{p}\sigma} = -\mathbf{p}, -\sigma$ dans l'expression de $\Omega_\sigma^+(\mathbf{r})$. La densité de charge

$$\rho(\mathbf{r}) = q \sum_{\lambda} \Psi_{\lambda}^+(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) \quad (51)$$

peut alors se mettre sous la forme

$$\rho(\mathbf{r}) = q n_e(\mathbf{r}) + (-q) n_p(\mathbf{r}) \quad (52)$$

où

$$n_e(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \Phi_{\sigma}^{+}(\mathbf{r}) \Phi_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (53.a)$$

$$\begin{aligned} n_p(\mathbf{r}) &= \sum_{\sigma} (-) \Omega_{\sigma}(\mathbf{r}) \Omega_{\sigma}^{+}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{\sigma} \Omega_{\sigma}^{+}(\mathbf{r}) \Omega_{\sigma}(\mathbf{r}) - n_0. \end{aligned} \quad (53.b)$$

Elle se décompose en deux densités de signes opposés, associées aux nouveaux champs Φ et Ω . La contribution de la constante n_0 , qui apparaît lorsqu'on rétablit l'ordre normal des opérateurs Ω , représente la densité de charge du vide. Elle est non physique et disparaît avec une définition de ρ symétrique vis-à-vis des particules et antiparticules, ou en définissant les observables par des produits dans l'ordre normal directement.

b) HAMILTONIEN EFFECTIF DANS UNE MULTIPLICITÉ

Revenons maintenant à l'hamiltonien total (43). Le terme supplémentaire V , décrivant l'énergie cinétique des particules, leur couplage avec le champ transverse, et l'hamiltonien du champ transverse, va modifier le diagramme d'énergie de la figure 1. Dans la mesure où les multiplicités sont bien séparées, et où nous considérons des situations caractérisées par de faibles valeurs de V , il est possible de déterminer l'effet de V par la théorie des perturbations. Pour cela, il convient de calculer ses éléments de matrice dans la base des états propres de H_0 .

Partons de l'expression (42) de V , et considérons d'abord H_R^T . Il est clair que H_R^T commute avec H_0 et Q . Il n'a donc d'éléments de matrice qu'à l'intérieur d'une multiplicité de la figure 1.

L'opérateur V_{Coul} peut être réécrit en fonction des densités n_e et n_p

$$V_{\text{Coul}} = \frac{q^2}{8 \pi \epsilon_0} \iint d^3r d^3r' \frac{[n_e(\mathbf{r}) - n_p(\mathbf{r})] [n_e(\mathbf{r}') - n_p(\mathbf{r}')] }{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (54)$$

Les densités $n_e(\mathbf{r})$ et $n_p(\mathbf{r})$ commutent avec $n_e(\mathbf{r}')$ et $n_p(\mathbf{r}')$ (la démonstration est la même que celle donnée dans l'exercice 7 relatif à $\rho(\mathbf{r})$). Elles commutent donc également avec les nombres de particules N_e et N_p , qui sont les intégrales sur tout l'espace des densités précédentes. Comme H_0 et Q sont des fonctions de N_e et N_p , ils commutent avec V_{Coul} , qui n'a donc pas d'éléments de matrice entre multiplicités.

Quant à H_1 , son expression en fonction de Φ et Ω s'écrit, en utilisant l'expression (6) du complément A_v pour les matrices α :

$$H_1 = H_1^{++} + H_1^{--} \quad (55)$$

où

$$H_1^{++} = \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r \Phi_{\sigma}^{+}(\mathbf{r}) c \langle \sigma | \sigma | \sigma' \rangle \cdot \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}) \right] \Omega_{\sigma'}^{+}(\mathbf{r}) \quad (56.a)$$

$$H_1^{--} = \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r \Omega_{\sigma}(\mathbf{r}) c \langle \sigma | \sigma | \sigma' \rangle \cdot \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}) \right] \Phi_{\sigma'}(\mathbf{r}). \quad (56.b)$$

Dans ces expressions, $\langle \sigma | \sigma | \sigma' \rangle$ représente les éléments de matrice des matrices de Pauli entre les états propres de σ_z , $|\sigma\rangle$ et $|\sigma'\rangle$. En utilisant les développements (50) de Φ et Ω^{+} , H_1^{++} et H_1^{--} se mettent sous forme de sommes discrètes d'éléments de matrices de l'opérateur

$$\mathcal{U} = c\sigma \cdot [\mathbf{p} - q\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r})] \quad (57)$$

entre des ondes planes $|\mathbf{p}, \sigma\rangle$ et $|\mathbf{p}', \sigma'\rangle$ de particules de Pauli

$$\begin{aligned} H_1^{++} &= \sum_{\mathbf{p}\sigma} \sum_{\mathbf{p}'\sigma'} C_{\mathbf{p}\sigma}^{+} \langle \mathbf{p}\sigma | \mathcal{U} | \mathbf{p}'\sigma' \rangle B_{\mathbf{p}'\sigma'}^{+} = \\ &= \sum_{\mathbf{p}\sigma} \sum_{\mathbf{p}'\sigma'} C_{\mathbf{p}\sigma}^{+} \langle \mathbf{p}\sigma | \mathcal{U} | \overline{\mathbf{p}'\sigma'} \rangle B_{\mathbf{p}'\sigma'}^{+} \quad (58.a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_1^{--} &= \sum_{\mathbf{p}\sigma} \sum_{\mathbf{p}'\sigma'} B_{\mathbf{p}'\sigma'} \langle \mathbf{p}'\sigma' | \mathcal{U} | \mathbf{p}\sigma \rangle C_{\mathbf{p}\sigma} = \\ &= \sum_{\mathbf{p}\sigma} \sum_{\mathbf{p}'\sigma'} B_{\mathbf{p}'\sigma'} \langle \overline{\mathbf{p}'\sigma'} | \mathcal{U} | \mathbf{p}\sigma \rangle C_{\mathbf{p}\sigma}. \quad (58.b) \end{aligned}$$

Sous cette forme, il apparaît clairement que H_1^{++} augmente, et H_1^{--} diminue, le nombre des électrons de 1 et celui des positrons de la même quantité. Ainsi, H_1^{++} et H_1^{--} ont des éléments de matrice entre des multiplicités dont l'énergie diffère de $2mc^2$, et qui correspondent à la même valeur de Q .

Dans la recherche d'une approximation non relativiste des énergies du système, nous nous limiterons aux termes d'ordre 0 en $1/c$. Pour cela, il suffit de calculer l'effet de H_R^T et V_{Coul} à l'ordre 1 dans chaque multiplicité. Dans la mesure où ils sont tous deux diagonaux vis-à-vis des multiplicités, leur effet à l'intérieur des multiplicités est décrit par les opérateurs eux-mêmes.

A cause de la présence du facteur c , H_1 est d'un ordre de grandeur plus important. Il faut chercher son effet à l'ordre 2 de la théorie des perturbations pour obtenir des termes d'ordre 0 en $1/c$. Son effet à l'ordre 1 est

nul, puisque H_1 est purement non diagonal. A l'ordre 2, les niveaux d'énergie dans une multiplicité sont obtenus en diagonalisant l'hamiltonien effectif $\Delta^{(2)}$ obtenu par la théorie des perturbations du deuxième ordre. D'après les règles de sélection de H_1 et en raison de la simplicité du spectre de H_0 , les dénominateurs d'énergie dans les termes du deuxième ordre de la théorie des perturbations sont simplement $\pm 2 mc^2$. L'expression de $\Delta^{(2)}$ se compose de deux termes :

$$\begin{aligned}\Delta^{(2)} &= H_1^{++} \frac{1}{2 mc^2} H_1^{--} + H_1^{--} \frac{1}{-2 mc^2} H_1^{++} \\ &= \frac{1}{2 mc^2} [H_1^{++}, H_1^{--}].\end{aligned}\quad (59)$$

En utilisant les expressions (58) de H_1^{++} et H_1^{--} , le calcul du commutateur se ramène à une expression du type

$$\mathcal{C} = \left[\sum_{qr} C_q^+ \mathcal{U}_{q\bar{r}} B_r^+, \sum_{st} B_s \mathcal{U}_{st} C_t \right]. \quad (60)$$

Les indices q, r, s, t représentent des nombres quantiques du type $\mathbf{p}, \sigma$ et les indices surlignés les nombres quantiques opposés. Les relations d'anticommutation des opérateurs B et C permettent de calculer :

$$\begin{aligned}\mathcal{C} &= \sum_{qrst} \mathcal{U}_{q\bar{r}} \mathcal{U}_{st} (C_q^+ B_r^+ B_s C_t - B_s C_t C_q^+ B_r^+) \\ &= \sum_{qrst} \mathcal{U}_{q\bar{r}} \mathcal{U}_{st} [(C_q^+ C_t) (B_r^+ B_s) - (-C_q^+ C_t + \delta_{qt}) (-B_r^+ B_s + \delta_{rs})]\end{aligned}\quad (61)$$

La relation de fermeture sur les états $|\mathbf{p}, \sigma\rangle$ permet de mettre $\mathcal{C}$ sous la forme

$$\mathcal{C} = \sum_{qt} C_q^+ (\mathcal{U}^2)_{qt} C_t + \sum_{rs} B_r^+ (\mathcal{U}^2)_{\bar{s}\bar{r}} B_s - \sum_q (\mathcal{U}^2)_{qq}. \quad (62)$$

Pour calculer le carré de l'opérateur $\mathcal{U} = \sigma \cdot [\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r})]$, utilisons les propriétés des matrices de Pauli σ_i (formule (8) du complément A_v) et la relation d'anticommutation $\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2 \delta_{ij}$. Il vient

$$\begin{aligned}\frac{\mathcal{U}^2}{c^2} &= \sum_{ij} \left[\delta_{ij} + i \sum_k \varepsilon_{ijk} \sigma_k \right] [p_i - qA_i(\mathbf{r})] [p_j - qA_j(\mathbf{r})] \\ &= [\mathbf{p} - q\mathbf{A}_\perp(\mathbf{r})]^2 - iq \sum_{ijk} \varepsilon_{ijk} \sigma_k [p_i A_j(\mathbf{r}) + A_i(\mathbf{r}) p_j] \\ &= [\mathbf{p} - q\mathbf{A}_\perp(\mathbf{r})]^2 - iq \sum_{ijk} \varepsilon_{ijk} \sigma_k [p_i, A_j(\mathbf{r})] \\ &= [\mathbf{p} - q\mathbf{A}_\perp(\mathbf{r})]^2 - q\hbar \sigma \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r})\end{aligned}\quad (63)$$

où $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$ est le champ magnétique du rayonnement. L'expression de $\Delta^{(2)}$ peut ainsi s'écrire sous la forme d'une somme d'un opérateur électronique $\Delta_e^{(2)}$, d'un opérateur $\Delta_p^{(2)}$ relatif aux positrons et d'une constante que nous négligerons dans la suite.

$$\Delta^{(2)} = \Delta_e^{(2)} + \Delta_p^{(2)} \quad (64)$$

où

$$\Delta_e^{(2)} = \sum_{\substack{\mathbf{p}\sigma \\ \mathbf{p}'\sigma'}} C_{\mathbf{p}'\sigma'}^+ \langle \mathbf{p}' \sigma' | \frac{[\mathbf{p} - q\mathbf{A}_\perp(\mathbf{r})]^2}{2m} - \frac{q\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) | \mathbf{p}\sigma \rangle C_{\mathbf{p}\sigma} \quad (65)$$

et une expression du même type pour $\Delta_p^{(2)}$.

Finalement, à l'ordre 0 en $1/c$, les niveaux d'énergie de l'hamiltonien total H sont identiques, à des termes constants près et pour les états « non relativistes » du système, à ceux de l'hamiltonien effectif

$$H_{\text{eff}} = mc^2 \sum_{\mathbf{p}\sigma} C_{\mathbf{p}\sigma}^+ C_{\mathbf{p}\sigma} + \Delta_e^{(2)} + mc^2 \sum_{\mathbf{p}\sigma} B_{\mathbf{p}\sigma}^+ B_{\mathbf{p}\sigma} + \Delta_p^{(2)} + \\ + V_{\text{Coul}} + H_R^T + \dots \quad (66)$$

Remarque

Il est possible d'obtenir une expression de $\Delta_p^{(2)}$ se prêtant à une interprétation physique simple. Appelons $\mathcal{U}^{(c)}$ l'opérateur déduit de $\mathcal{U}$ en changeant q en $-q$, et $|\mathbf{p}\sigma\rangle_c$ une base de spineurs qui diffèrent d'un facteur de phase $\pm i$ par rapport à la base $|\mathbf{p}, \sigma\rangle$.

$$\mathcal{U}^{(c)} = c\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{p} + q\mathbf{A}_\perp(\mathbf{r})] \quad (67)$$

$$|\mathbf{p}\pm\rangle_c = \mp i |\mathbf{p}\pm\rangle. \quad (68)$$

Un simple calcul des éléments de matrice montre que

$${}_c\langle \mathbf{p}\sigma | \mathcal{U}^{(c)} | \mathbf{p}'\sigma' \rangle_c = \langle \overline{\mathbf{p}'\sigma'} | \mathcal{U} | \overline{\mathbf{p}\sigma} \rangle. \quad (69)$$

Une formule analogue pour $(\mathcal{U}^{(c)})^2$ et $\mathcal{U}^2$ s'en déduit immédiatement. L'hamiltonien $\Delta_p^{(2)}$ pour les positrons s'écrit alors :

$$\Delta_p^{(2)} = \sum_{rs} B_r^+ \left(\frac{\mathcal{U}^2}{2mc^2} \right)_{\overline{sr}} B_s \\ = \sum_{rs} B_r^+ {}_c\langle r | \left(\frac{(\mathbf{p} + q\mathbf{A}_\perp)^2}{2m} + \frac{q\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right) | s \rangle_c B_s. \quad (70)$$

Il a la même forme que $\Delta_e^{(2)}$ en remplaçant q par $-q$, les opérateurs C par B , et en faisant les changements (68) sur la base de spineurs. Cette transformation est la réalisation particulière dans notre cas simple de la transformation générale de conjugaison de charge (*).

(*) Voir par exemple Berestetskii, Lifchitz et Pitayevski, paragraphes 23 et 26.

c) DISCUSSION PHYSIQUE

Considérons les états ne contenant que des électrons. H_{eff} se réduit alors à

$$H_{\text{eff}}^{(e)} = \sum_{\mathbf{p}\sigma} mc^2 C_{\mathbf{p}\sigma}^+ C_{\mathbf{p}\sigma} + \sum_{\substack{\mathbf{p}\sigma \\ \mathbf{p}'\sigma'}} C_{\mathbf{p}'\sigma'}^+ \langle \mathbf{p}' \sigma' | \frac{[\mathbf{p} - q\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r})]^2}{2m} - \frac{q\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) | \mathbf{p}\sigma \rangle C_{\mathbf{p}\sigma} + \\ + \frac{q^2}{8\pi\epsilon_0} \iint d^3r d^3r' \frac{n_e(\mathbf{r}) n_e(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + H_R^T. \quad (71)$$

Par construction même, $H_{\text{eff}}^{(e)}$ est diagonal par blocs, chaque bloc étant relatif à une multiplicité à un nombre donné N_e d'électrons. L'expression (71) coïncide en fait avec la forme que prend, en seconde quantification, l'hamiltonien non relativiste décrivant un ensemble d'électrons couplés au champ de rayonnement. De manière plus précise, les éléments de matrice de (71), entre 2 états à même nombre N d'électrons, repérés par les nombres d'occupation (0 ou 1) des états $\mathbf{p}\sigma$, coïncident avec ceux de l'hamiltonien suivant à N électrons (indités par α)

$$\mathcal{H} = Nmc^2 + \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{2m} [\mathbf{p}_{\alpha} - q\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha})]^2 - \sum_{\alpha=1}^N \frac{q\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}_{\alpha}) + \\ + \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{q^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}|} + H_R^T \quad (72)$$

évalués entre deux états formés par des produits antisymétrisés de N spineurs à 2 composantes, relatifs aux états $\mathbf{p}\sigma$ occupés.

L'hamiltonien (72) coïncide avec celui que nous avons introduit dans le chapitre III. Les divers termes de (72) décrivent respectivement l'énergie au repos des N électrons, leur énergie cinétique non relativiste, le couplage des moments magnétiques de spin des électrons avec le champ magnétique du rayonnement, l'énergie de Coulomb des N électrons et l'énergie du champ transverse quantifié. Nous justifions ainsi, à partir de l'électrodynamique quantique relativiste, la théorie non relativiste en jauge de Coulomb qui a servi de base à tout le reste de cet ouvrage. L'avantage d'un tel traitement est qu'il introduit naturellement le spin de l'électron et le moment magnétique de spin associé

$$\mathbf{M}_s = 2 \frac{q}{2m} \frac{\hbar \boldsymbol{\sigma}}{2} \quad (73)$$

correspondant à un facteur $g = 2$ (voir formule (D.7) du chapitre III), ainsi que la statistique de Fermi-Dirac à laquelle obéissent les électrons.

En effet, les relations d'anticommutation des opérateurs C^+ et C de (71) sont des conséquences des relations d'anticommutation du champ quantique de Dirac, qui découlent elles-mêmes de la nécessité d'avoir une énergie positive (voir complément A_V, § 2. b). Mentionnons enfin qu'il serait possible de calculer les termes d'ordre supérieur en $(1/c)$ de $H_{\text{eff}}^{(e)}$ et d'obtenir ainsi l'expression des premières corrections relativistes (correction masse-vitesse, interaction spin-orbite, terme de Darwin).

COMPLÉMENT C_V

EXERCICES

- Exercice 1 Autres lagrangiens covariants du champ électromagnétique
- Exercice 2 Opérateurs d'annihilation et de création de photons scalaires : peut-on échanger leur signification ?
- Exercice 3 Quelques propriétés relatives à la métrique indéfinie
- Exercice 4 Opérateur de translation pour les opérateurs de création et d'annihilation d'un photon scalaire
- Exercice 5 Lagrangien du champ de Dirac. Lien entre phase du champ de Dirac et jauge du champ électromagnétique
- Exercice 6 Lagrangien et hamiltonien des champs de Dirac et Maxwell couplés
- Exercice 7 Opérateurs champ de Dirac et densité de charge. Etude de quelques relations de commutation

1. AUTRES LAGRANGIENS COVARIANTS DU CHAMP ÉLECTROMAGNÉTIQUE

Le but de l'exercice est d'étudier des lagrangiens qui, tout comme le lagrangien utilisé dans ce chapitre, peuvent servir de point de départ à une quantification covariante du champ électromagnétique. On considère ainsi une famille de lagrangiens $L_R(\lambda) = \int d^3r \mathcal{L}_R(\lambda)$ dépendant d'un paramètre réel λ . La densité de lagrangien dans l'espace réel, $\mathcal{L}_R(\lambda)$, s'écrit

$$\mathcal{L}_R(\lambda) = -\varepsilon_0 c^2 \left[\sum_{\mu, \nu} \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{\lambda}{2} \left(\sum_{\mu} \partial_{\mu} A^{\mu} \right)^2 \right]. \quad (1)$$

a) Deux lagrangiens correspondant à des valeurs différentes de λ sont-ils équivalents ?

b) Exprimer $L_R(\lambda)$ en fonction des composantes transverses, longitudinale et scalaire du quadrivecteur potentiel dans l'espace réciproque $\mathcal{A}_e, \mathcal{A}_e', \mathcal{A}_l$ et $\mathcal{A}_s = \mathcal{U}/c$. Montrer que les équations de Lagrange relatives à $\mathcal{A}_e, \mathcal{A}_l$ et $\mathcal{A}_s$ s'écrivent :

$$\ddot{\mathcal{A}}_e + \omega^2 \mathcal{A}_e = 0 \quad (2.a)$$

$$\ddot{\mathcal{A}}_l + \omega^2 \mathcal{A}_l - i\omega(\lambda - 1)(\dot{\mathcal{A}}_s + i\omega \mathcal{A}_l) = 0 \quad (2.b)$$

$$\ddot{\mathcal{A}}_s + \omega^2 \mathcal{A}_s + (\lambda - 1) \frac{\partial}{\partial t} (\dot{\mathcal{A}}_s + i\omega \mathcal{A}_l) = 0. \quad (2.c)$$

En déduire que les équations relatives aux composantes longitudinale et scalaire du potentiel sont celles de deux oscillateurs indépendants quand $\lambda = 1$.

c) Montrer que les équations (2) coïncident avec les équations de Maxwell du champ libre, pour tout λ , quand la condition de Lorentz est vérifiée.

Solution

a) La différence entre deux densités de lagrangiens correspondant à des valeurs de λ différentes est proportionnelle à $\left(\sum_n \hat{c}_n A^n\right)^2$ qui n'est pas une quadridivergence. Ces lagrangiens ne sont donc pas équivalents. En particulier le lagrangien standard ($\lambda = 0$) et le lagrangien de Fermi ($\lambda = 1$) ne sont pas équivalents.

b) Le lagrangien $L_R(\lambda)$ est l'intégrale dans un demi-espace réciproque de la densité de lagrangien $\overline{\mathcal{L}}_R(\lambda)$

$$L_R(\lambda) = \int d^3k \overline{\mathcal{L}}_R(\lambda) \quad (3.a)$$

où $\overline{\mathcal{L}}_R(\lambda)$ se déduit de (1) et de la relation (A.7) définissant $F_{\mu\nu}$

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{L}}_R(\lambda) &= \varepsilon_0 \left[(\dot{\mathcal{A}} + i\mathbf{k}\mathcal{W}) \cdot (\dot{\mathcal{A}}^* - i\mathbf{k}\mathcal{W}^*) - c^2 |\mathbf{k} \times \mathcal{A}|^2 - \right. \\ &\quad \left. \lambda \left(\frac{\dot{\mathcal{W}}}{c} + i\mathbf{k} \cdot \mathcal{A} \right) \left(\frac{\dot{\mathcal{W}}^*}{c} - i\mathbf{k} \cdot \mathcal{A}^* \right) \right] \\ &= \varepsilon_0 \left[\dot{\mathcal{A}}_1 \cdot \dot{\mathcal{A}}_1^* - \omega^2 \mathcal{A}_1 \cdot \mathcal{A}_1^* + (\dot{\mathcal{A}}_1 + i\omega \mathcal{A}_s) (\dot{\mathcal{A}}_1^* - i\omega \mathcal{A}_s^*) - \right. \\ &\quad \left. - \lambda (\dot{\mathcal{A}}_s + i\omega \mathcal{A}_1) (\dot{\mathcal{A}}_s^* - i\omega \mathcal{A}_1^*) \right]. \quad (3.b) \end{aligned}$$

Pour obtenir les équations de Lagrange, calculons

$$\frac{\partial \overline{\mathcal{L}}_R(\lambda)}{\partial \dot{\mathcal{A}}_1^*} = -\varepsilon_0 \omega^2 \mathcal{A}_1 \quad (4.a) \quad \frac{\partial \overline{\mathcal{L}}_R(\lambda)}{\partial \dot{\mathcal{A}}_1^*} = \varepsilon_0 \dot{\mathcal{A}}_1 \quad (4.b)$$

$$\frac{\partial \overline{\mathcal{L}}_R(\lambda)}{\partial \dot{\mathcal{A}}_1^*} = -\varepsilon_0 \lambda (\omega^2 \mathcal{A}_1 - i\omega \dot{\mathcal{A}}_s) \quad (5.a) \quad \frac{\partial \overline{\mathcal{L}}_R(\lambda)}{\partial \dot{\mathcal{A}}_1^*} = \varepsilon_0 (\dot{\mathcal{A}}_1 + i\omega \mathcal{A}_s) \quad (5.b)$$

$$\frac{\partial \overline{\mathcal{L}}_R(\lambda)}{\partial \dot{\mathcal{A}}_s^*} = \varepsilon_0 (\omega^2 \mathcal{A}_s - i\omega \dot{\mathcal{A}}_1) \quad (6.a) \quad \frac{\partial \overline{\mathcal{L}}_R(\lambda)}{\partial \dot{\mathcal{A}}_s^*} = -\varepsilon_0 \lambda (\dot{\mathcal{A}}_s + i\omega \mathcal{A}_1) \quad (6.b)$$

Nous déduisons de (4.a) et (4.b) l'équation de Lagrange relative à $\mathcal{A}_1$ qui correspond à (2.a). Les équations (5.a) et (5.b) donnent

$$\ddot{\mathcal{A}}_1 + i\omega \dot{\mathcal{A}}_s + \lambda (\omega^2 \mathcal{A}_1 - i\omega \dot{\mathcal{A}}_s) = 0. \quad (7)$$

En écrivant le terme proportionnel à $\lambda \mathcal{A}_1$ sous la forme $(\lambda - 1) \mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_1$ et en regroupant les termes, nous trouvons (2.b). De même (6.a) et (6.b) conduisent à

$$\lambda (\ddot{\mathcal{A}}_s + i\omega \dot{\mathcal{A}}_1) + \omega^2 \mathcal{A}_s - i\omega \dot{\mathcal{A}}_1 = 0 \quad (8)$$

qui, après transformation, donne (2.c).

Si nous faisons $\lambda = 1$ dans les équations (2), nous trouvons des équations d'oscillateurs harmoniques indépendants pour les quatre composantes $\mathcal{A}_1$, $\mathcal{A}_s$, $\mathcal{A}_1^*$ et $\mathcal{A}_s^*$. Ce résultat est

satisfaisant dans la mesure où le lagrangien de Fermi ($\lambda = 1$) est équivalent au lagrangien $\overline{\mathcal{L}}_R$ (A.22) qui décrit, dans le cas du champ libre, quatre oscillateurs harmoniques indépendants. Notons d'ailleurs qu'en développant (3. b), nous obtenons

$$\overline{\mathcal{L}}_R(1) = \overline{\mathcal{L}}_R + \frac{\partial}{\partial t} i\omega\epsilon_0(\mathcal{A}_s \mathcal{A}_i^* - \mathcal{A}_i \mathcal{A}_s^*) \quad (9)$$

ce qui démontre bien cette équivalence dans le cas $\lambda = 1$.

c) La condition de Lorentz (A.16. b) s'écrit dans l'espace réciproque

$$ik\mathcal{A}_i + \frac{\dot{\mathcal{A}}_s}{c} = 0. \quad (10)$$

Si cette équation est vérifiée, les derniers termes de (2. b) et (2. c) s'annulent et les équations (2) deviennent dans l'espace ordinaire

$$\square A = 0 \quad (11. a) \quad \square U = 0 \quad (11. b)$$

qui sont équivalentes aux équations de Maxwell du champ libre dans le cadre de la jauge de Lorentz. Tous les lagrangiens $L_R(\lambda)$ conduisent donc aux mêmes équations du mouvement si on leur impose la condition supplémentaire (10). Ce résultat n'est pas réellement surprenant dans la mesure où $L_R(\lambda)$ diffère du lagrangien standard par un terme proportionnel à l'intégrale sur tout l'espace du carré d'une quantité dont la valeur est prise égale à 0 quand la condition supplémentaire est imposée en théorie classique.

Notons finalement que le moment conjugué relatif à $\mathcal{A}_s$, donné en (6. b), est non nul dès que $\lambda \neq 0$. Il est donc possible de procéder à la quantification du champ libre et de traiter de façon symétrique les quatre composantes du potentiel en partant de $L_R(\lambda)$ avec $\lambda \neq 0$. Les résultats physiques doivent évidemment être indépendants de λ , mais les intermédiaires de calcul peuvent en dépendre.

2. OPÉRATEURS D'ANNIHILATION ET DE CRÉATION DE PHOTONS SCALAIRES : PEUT-ON ÉCHANGER LEUR SIGNIFICATION ?

On a montré dans la partie B du chapitre que, dans le cadre de la quantification covariante, l'espace des états est plus vaste que l'espace des états physiques. Ces derniers forment un sous-espace défini par la relation suivante déduite de la condition de Lorentz :

$$[a_{ii} - a_{is}] |\psi\rangle = 0. \quad (1)$$

(Pour simplifier les notations, nous supposons ici que le champ est quantifié dans une boîte, de sorte que l'indice continu k est remplacé par l'indice discret i). La difficulté de la quantification canonique habituelle est qu'elle conduit à un commutateur pour le champ scalaire

$$[a_{is}, a_{js}^+] = -\delta_{ij} \quad (2)$$

dont le signe diffère du signe habituel (obtenu pour les variables transverses et longitudinales du champ).

Pour remédier à cette difficulté, on peut être tenté d'intervertir les rôles des opérateurs d'annihilation et de création. On pose ainsi

$$a_{is} = b_{is}^+ \quad (3. a) \quad a_{is}^+ = b_{is} \quad (3. b)$$

b_{is} et b_{is}^+ satisfaisant aux relations habituelles pour des opérateurs d'annihilation et de création.

Le but de l'exercice est d'étudier les conséquences de ce changement sur le sous-espace des états physiques défini par la condition (1).

a) On considère un état $|\psi\rangle$ qui est un produit tensoriel d'états relatifs à chaque mode du champ

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_i\rangle \otimes \dots \quad (4)$$

Ecrire, en utilisant (3) et (4), l'équation vérifiée par $|\psi_i\rangle$. Le vide de photons scalaires et longitudinaux est-il un état physique dans ce nouveau point de vue ?

b) $|\psi_i\rangle$ étant décomposé sur la base $\{|n_{ii} = n, n_{is} = n'\rangle\}$, notée simplement $\{|n, n'\rangle\}$

$$|\psi_i\rangle = \sum_{n, n'} b(n, n') |n, n'\rangle \quad (5)$$

trouver une relation de récurrence entre les coefficients $b(n, n')$. Que vaut $b(n, 0)$ pour $n > 0$?

c) Montrer que la composante $|\psi_i\rangle$ d'un état physique est, dans cette approche, de la forme

$$|\psi_i\rangle = \sum_{m \geq 0} b(0, m) \sum_{n \geq 0} \frac{\sqrt{(n+m)!}}{\sqrt{n!} \sqrt{m!}} |n, (n+m)\rangle. \quad (6)$$

Que vaut $\langle \psi_i | \psi_i \rangle$? Commenter ce résultat.

Solution

a) Avec les nouveaux opérateurs introduits en (3), les états physiques sont solutions de l'équation

$$(a_{ii} - b_{is}^+) |\psi\rangle = 0 \quad \text{pour tout } i. \quad (7)$$

Si $|\psi\rangle$ est de la forme (4), cette équation devient

$$(a_{ii} - b_{is}^+) |\psi_i\rangle = 0 \quad (8)$$

puisque a_{ii} et b_{is}^+ n'agissent que sur le mode i . Il est clair que $|0, 0\rangle$ n'est pas solution de (8) puisque $b_{is}^+ |0\rangle = |1\rangle$. L'état « vide » de photons scalaires et longitudinaux n'est donc pas un état physique dans ce nouveau point de vue.

b) Calculons $a_{ii} |\psi_i\rangle$ et $b_{is}^+ |\psi_i\rangle$

$$a_{ii} |\psi_i\rangle = \sum_{n, n'} b(n, n') \sqrt{n} |n-1, n'\rangle \quad (9.a)$$

$$b_{is}^+ |\psi_i\rangle = \sum_{n, n'} b(n, n') \sqrt{n'+1} |n, (n'+1)\rangle. \quad (9.b)$$

L'utilisation de la condition (8) donne alors

$$b(n+1, n'+1)\sqrt{n+1} = b(n, n')\sqrt{n'+1} \quad (10.a)$$

$$b(n, 0) = 0 \quad \text{pour } n > 0. \quad (10.b)$$

c) Calculons d'abord $b(n, n')$ dans le cas $n' \geq n$. En utilisant (10. a), nous trouvons

$$b(n, n') = \frac{\sqrt{n'!}}{\sqrt{n!}\sqrt{(n'-n)!}} b(0, n'-n). \quad (11)$$

Dans le cas $n' < n$, un calcul analogue donne

$$b(n, n') = \frac{\sqrt{n'!}\sqrt{(n-n')!}}{\sqrt{n!}} b(n-n', 0) \quad (12)$$

résultat qui est nul d'après (10. b). En utilisant (11) et (12), on montre ainsi que la forme la plus générale de $|\psi_i\rangle$ est donnée par (6). Notons que $|\psi_i\rangle$ devant être différent de 0, l'un au moins des $b(0, m)$ est non nul.

En utilisant (6), nous trouvons

$$\langle \psi_i | \psi_i \rangle = \sum_m |b(0, m)|^2 \sum_n \frac{(n+m)!}{n!m!}. \quad (13)$$

Il apparaît clairement que la somme sur n conduit à un résultat infini. Les états physiques, dans le nouveau point de vue, ont donc une norme infinie. Un tel résultat soulève, de façon évidente, des difficultés au niveau de l'utilisation des postulats de base de la mécanique quantique (voir aussi remarque du § B.2. b).

3. QUELQUES PROPRIÉTÉS RELATIVES À LA MÉTRIQUE INDÉFINIE

a) Soit A un opérateur hermitique dans la nouvelle métrique, $A = \bar{A}$, et soit $|u\rangle$ un état propre de A de valeur propre λ . Montrer que, si λ n'est pas réel, la nouvelle norme de $|u\rangle$, $\langle u | u \rangle$, est nulle.

b) Soit $\{|u_n\rangle\}$ une base orthonormée au sens habituel, et soient $c_n = \langle u_n | \psi \rangle$ et $\gamma_n = \langle u_n | \psi \rangle$ les composantes du ket $|\psi\rangle$ sur $|u_n\rangle$ définies respectivement avec l'ancien et le nouveau produit scalaire. Montrer qu'il existe entre les deux types de composantes une relation faisant intervenir les éléments de matrice de l'opérateur M servant à définir le nouveau produit scalaire. Exprimer la nouvelle norme $\langle \psi | \psi \rangle$ en fonction des c_n et γ_n^* .

Solution

a) Considérons l'équation aux valeurs propres

$$A|u\rangle = \lambda|u\rangle \quad (1)$$

et l'équation adjointe dans le nouveau sens, qui s'écrit

$$\langle u|A = \lambda^* \langle u| \quad (2)$$

puisque $A = \bar{A}$. En prenant le nouveau produit scalaire des deux membres de (1) avec $|u\rangle$, on obtient

$$\langle u | A | u \rangle = \lambda \langle u | u \rangle. \quad (3)$$

Par ailleurs, l'équation (2) donne

$$\langle u | A | u \rangle = \lambda^* \langle u | u \rangle. \quad (4)$$

Par soustraction, les équations (3) et (4) conduisent à

$$(\lambda - \lambda^*) \langle u | u \rangle = 0 \quad (5)$$

ce qui montre que si $\lambda \neq \lambda^*$, c'est-à-dire si λ n'est pas réel, $\langle u | u \rangle$ est nul.

b) La relation

$$\langle u_n | = \langle u_n | M \quad (6)$$

(voir (C 3. b)) entraîne que

$$\begin{aligned} \gamma_n &= \langle u_n | \psi \rangle = \langle u_n | M | \psi \rangle \\ &= \sum_p \langle u_n | M | u_p \rangle \langle u_p | \psi \rangle = \sum_p M_{np} c_p. \end{aligned} \quad (7)$$

On a utilisé la relation de fermeture habituelle

$$\sum_p |u_p\rangle \langle u_p| = \mathbb{1} \quad (8)$$

et posé $M_{np} = \langle u_n | M | u_p \rangle$. Par ailleurs, comme $M^2 = 1$, on a

$$\begin{aligned} c_n &= \langle u_n | \psi \rangle = \langle u_n | M M | \psi \rangle \\ &= \sum_p \langle u_n | M | u_p \rangle \langle u_p | M | \psi \rangle \\ &= \sum_p M_{np} \langle u_p | \psi \rangle = \sum_p M_{np} \gamma_p. \end{aligned} \quad (9)$$

Enfin, toujours à cause de $M^2 = 1$, l'équation (6) entraîne que

$$\langle u_n | = \langle u_n | M \quad (10)$$

de sorte que (8) peut s'écrire encore

$$\sum_p |u_p\rangle \langle u_p| M = \quad (11)$$

(voir (C. 15. b)). Insérons alors (11) entre $\langle \psi |$ et $| \psi \rangle$ dans la nouvelle norme $\langle \psi | \psi \rangle$. Il vient, compte tenu de (10)

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \sum_p \langle \psi | u_p \rangle \langle u_p | M | \psi \rangle = \sum_p \langle \psi | u_p \rangle \langle u_p | \psi \rangle \\ &= \sum_p \langle u_p | \psi \rangle^* \langle u_p | \psi \rangle = \sum_p \gamma_p^* c_p. \end{aligned} \quad (12)$$

4. OPÉRATEUR DE TRANSLATION POUR LES OPÉRATEURS DE CRÉATION ET D'ANNIHILATION D'UN PHOTON SCALAIRE

Soient $a_s(\mathbf{k})$ et $\bar{a}_s(\mathbf{k})$ les opérateurs d'annihilation et de création d'un photon scalaire de vecteur d'onde $\mathbf{k}$, satisfaisant la relation de commutation

$$[a_s(\mathbf{k}), \bar{a}_s(\mathbf{k}')] = -\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (1)$$

On considère l'opérateur

$$T = \exp \left\{ \int d^3k [\lambda(\mathbf{k}) \bar{a}_s(\mathbf{k}) - \lambda^*(\mathbf{k}) a_s(\mathbf{k})] \right\} \quad (2)$$

où $\lambda(\mathbf{k})$ est, soit une fonction classique de $\mathbf{k}$, soit un opérateur de particules qui commute avec lui-même et avec son adjoint $\lambda^*(\mathbf{k})$.

a) Montrer que T est unitaire vis-à-vis de la nouvelle norme

$$T\bar{T} = \bar{T}T = 1. \quad (3)$$

b) Montrer que T est un opérateur de translation pour a_s et $\bar{a}_s$, c'est-à-dire que

$$\begin{cases} T a_s(\mathbf{k}) \bar{T} = a_s(\mathbf{k}) + \lambda(\mathbf{k}) \\ T \bar{a}_s(\mathbf{k}) \bar{T} = \bar{a}_s(\mathbf{k}) + \lambda^*(\mathbf{k}). \end{cases} \quad (4.a)$$

$$(4.b)$$

c) Les vecteurs d'onde $\mathbf{k}$ sont supposés discrétisés et on considère un seul mode scalaire, d'opérateurs d'annihilation et de création a_s et $\bar{a}_s$ avec

$$[a_s, \bar{a}_s] = -1. \quad (5)$$

Les états $|n_s\rangle$ à n_s photons scalaires sont définis par

$$|n_s\rangle = \frac{(a_s^+)^{n_s}}{\sqrt{n_s!}} |0_s\rangle \quad (6.a)$$

où $|0_s\rangle$ est le vide de photons scalaires et où

$$a_s^+ = -\bar{a}_s \quad (6.b)$$

est l'adjoint habituel de a_s (dans l'ancienne métrique définie positive). On se limite dans cette question au cas où λ et λ^* sont des nombres dans $T = \exp \{ \lambda \bar{a}_s - \lambda^* a_s \}$.

Calculer le développement dans la base $\{|n_s\rangle\}$ de l'état

$$|\tilde{0}_s\rangle = \bar{T} |0_s\rangle. \quad (7)$$

Est-ce un état cohérent ? Quelles sont son ancienne et sa nouvelle normes ?

a) Le nouvel adjoint de $\lambda(\mathbf{k}) \bar{a}_s(\mathbf{k}) - \lambda^*(\mathbf{k}) a_s(\mathbf{k})$ est égal à $\lambda^*(\mathbf{k}) a_s(\mathbf{k}) - \lambda(\mathbf{k}) \bar{a}_s(\mathbf{k})$, c'est-à-dire à son opposé. On en déduit que

$$\bar{T} = \exp \left\{ - \int d^3k [\lambda(\mathbf{k}) \bar{a}_s(\mathbf{k}) - \lambda^*(\mathbf{k}) a_s(\mathbf{k})] \right\} \quad (8)$$

ce qui démontre (3).

b) Comme a_s et $\bar{a}_s$ commutent avec leur commutateur (1) qui est un nombre et que λ et λ^* commutent entre eux et avec a_s et $\bar{a}_s$, il est possible d'appliquer l'identité (C. 64) du chapitre III à (2) et d'obtenir ainsi :

$$T = \exp \left[\int d^3k \lambda(k) \bar{a}_s(k) \right] \exp \left[- \int d^3k \lambda^*(k) a_s(k) \right] \exp \left[\int d^3k |\lambda(k)|^2/2 \right]. \quad (9)$$

Calculons maintenant le commutateur $[a_s(k), T]$. Le premier terme de (9) est le seul à ne pas commuter avec $a_s(k)$. Compte tenu de (1), il vient

$$\left[a_s(k), \exp \left[\int d^3k' \lambda(k') \bar{a}_s(k') \right] \right] = - \lambda(k) \exp \left[\int d^3k' \lambda(k') \bar{a}_s(k') \right] \quad (10)$$

de sorte que

$$[a_s(k), T] = - \lambda(k) T \quad (11)$$

c'est-à-dire encore

$$T a_s(k) = a_s(k) T + \lambda(k) T. \quad (12)$$

Il suffit alors de multiplier les deux membres de (12) à droite par $\bar{T}$ pour obtenir (4. a), puis de prendre le nouvel adjoint de (4. a) pour obtenir (4. b).

c) Dans le cas d'un seul mode, l'équation (9) devient

$$T = e^{\lambda \bar{a}_s - \lambda^* a_s} = e^{\lambda \bar{a}_s} e^{-\lambda^* a_s} e^{\lambda^2/2} \quad (13. a)$$

d'où l'on déduit

$$\bar{T} = e^{-\lambda \bar{a}_s} e^{\lambda^* a_s} e^{\lambda^2/2}. \quad (13. b)$$

(Noter la différence avec la formule (C. 65) du chapitre III). Développons en série la deuxième exponentielle de (13. b). Comme $a_s |0_s\rangle = 0$, seul le premier terme de ce développement (ordre 0) donne un résultat non nul quand $\bar{T}$ agit sur le vide $|0_s\rangle$. On a donc

$$\begin{aligned} |\tilde{0}_s\rangle &= \bar{T} |0_s\rangle = e^{\lambda^2/2} e^{-\lambda \bar{a}_s} |0_s\rangle \\ &= e^{\lambda^2/2} e^{\lambda a_s} |0_s\rangle. \end{aligned} \quad (14)$$

Par ailleurs, le développement en série de $\exp(\lambda a_s)$ et l'utilisation de (6. a) donnent

$$|\tilde{0}_s\rangle = e^{\lambda^2/2} \sum_{n_s=0}^{\infty} \frac{\lambda^{n_s}}{\sqrt{n_s!}} |n_s\rangle. \quad (15)$$

Comme $[a_s, a_s^\dagger] = 1$, les états $|n_s\rangle$ définis en (6. a) sont les états de base habituels d'un oscillateur harmonique. Le développement (15) est proportionnel à celui de l'état cohérent $|\lambda\rangle$ défini par

$$a_s |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle. \quad (16)$$

(voir la formule (C. 51) du chap. III). Cependant, comme le coefficient multipliant la somme sur n_s dans (15) est $\exp(|\lambda|^2/2)$, et non $\exp(-|\lambda|^2/2)$, l'ancienne norme de $|\tilde{0}_s\rangle$ n'est pas égale à 1, mais à

$$\langle \tilde{0}_s | \tilde{0}_s \rangle = e^{2|\lambda|^2}. \quad (17)$$

Par contre, comme T est unitaire vis-à-vis de la nouvelle norme, on a

$$\langle \tilde{0}_s | \tilde{0}_s \rangle = \langle 0_s | T \bar{T} | 0_s \rangle = \langle 0_s | 0_s \rangle = 1. \quad (18)$$

Il est d'ailleurs possible d'établir directement (18) à partir du développement (15) et de relations d'orthonormalisation

$$\langle n_s | n'_s \rangle = (-1)^{n_s} \delta_{n_s n'_s} \quad (19)$$

dans la nouvelle métrique (voir (C.29)).

Notons enfin que le fait que $|\hat{0}_s\rangle$ soit un état cohérent peut être établi directement à partir de (4.a). Faisons agir les 2 membres de cette équation sur $|\hat{0}_s\rangle$ et utilisons $a_s |\hat{0}_s\rangle = 0$. Il vient

$$T a_s \bar{T} |\hat{0}_s\rangle = \lambda |\hat{0}_s\rangle. \quad (20)$$

Il suffit alors de faire agir $\bar{T}$ à gauche sur les deux membres de cette équation et d'utiliser (3) et (7) pour obtenir

$$a_s |\hat{0}_s\rangle = \lambda |\hat{0}_s\rangle. \quad (21)$$

5. LAGRANGIEN DU CHAMP DE DIRAC. LIEN ENTRE PHASE DU CHAMP DE DIRAC ET JAUGE DU CHAMP ÉLECTROMAGNÉTIQUE

Le but de l'exercice est de montrer que l'équation de Dirac peut être déduite d'un lagrangien. On montrera également que tout changement de phase du champ de Dirac est équivalent à un changement de jauge du champ électromagnétique.

On considère un champ classique complexe à quatre composantes $\psi_\lambda(\mathbf{r})$ (avec $\lambda = 1, 2, 3$ ou 4) dont l'évolution se déduit d'un lagrangien

$$L_D = \int d^3r \mathcal{L}_D \text{ avec}$$

$$\mathcal{L}_D = \frac{i\hbar}{2} \left[\sum_\lambda (\psi_\lambda^* \dot{\psi}_\lambda - \dot{\psi}_\lambda^* \psi_\lambda) + c \sum_{\lambda, \lambda'} (\psi_\lambda^* \alpha_{\lambda\lambda'} \cdot \nabla \psi_{\lambda'} - (\nabla \psi_\lambda^*) \cdot \alpha_{\lambda\lambda'} \psi_{\lambda'}) \right] - mc^2 \sum_{\lambda, \lambda'} \beta_{\lambda\lambda'} \psi_\lambda^* \psi_{\lambda'} \quad (1)$$

où α et β sont les matrices de Dirac (voir complément A_V, § 1).

a) Ecrire les équations de Lagrange associées à (1). Montrer qu'elles coïncident avec l'équation de Dirac d'une particule libre.

Réécrire (1) en utilisant les notations covariantes γ^μ pour les matrices de Dirac ($\gamma^0 = \beta, \gamma = \beta\alpha$) et l'adjoint relativiste $\bar{\psi}(\mathbf{r}) = \psi^*(\mathbf{r}) \gamma^0$.

b) On considère la densité de Lagrangien

$$\mathcal{L} = -\frac{c}{2} \sum_\mu \left\{ \bar{\psi} \gamma^\mu \left(\frac{\hbar}{i} \partial_\mu + q A_\mu^e \right) \psi + \left[\left(\frac{\hbar}{i} \partial_\mu + q A_\mu^e \right)^* \bar{\psi} \right] \gamma^\mu \psi \right\} - mc^2 \bar{\psi} \psi \quad (2)$$

où les A_μ^e sont les composantes d'un quadrivecteur potentiel extérieur. Montrer que les équations de Lagrange associées à (2) correspondent à l'équation de Dirac d'une particule dans un champ extérieur.

Montrer que $\mathcal{L}$ est la somme de $\mathcal{L}_D$ et d'un terme d'interaction $\mathcal{L}_I$. Ecrire l'expression de $\mathcal{L}_I$ et en déduire la forme du courant j^μ associé au champ de Dirac.

c) On fait le changement de variable

$$\psi_\lambda(\mathbf{r}) = \psi'_\lambda(\mathbf{r}) e^{-iqF(\mathbf{r},t)/\hbar} \quad (3)$$

où $F(\mathbf{r}, t)$ est une fonction quelconque de $\mathbf{r}$ et de t (et indépendante de λ). Montrer que ce changement de phase de ψ est mathématiquement équivalent à un changement de jauge sur les potentiels du champ extérieur.

Solution

a) Pour établir les équations de Lagrange, calculons

$$\frac{\partial \mathcal{L}_D}{\partial \psi_\lambda^*} = -\frac{i\hbar}{2} \psi_\lambda \quad (4.a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}_D}{\partial \psi_\lambda} = \frac{i\hbar}{2} \left[\dot{\psi}_\lambda + c \sum_{\lambda'} \alpha_{\lambda\lambda'} \cdot \nabla \psi_{\lambda'} \right] - mc^2 \sum_{\lambda'} \beta_{\lambda\lambda'} \psi_{\lambda'} \quad (4.b)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}_D}{\partial (\partial_j \psi_\lambda^*)} = -\frac{i\hbar}{2} c \sum_{\lambda'} (\alpha_j)_{\lambda\lambda'} \psi_{\lambda'} \quad (4.c)$$

L'équation de Lagrange (A.52. b) du chapitre II donne alors l'équation d'évolution suivante :

$$i\hbar \dot{\psi}_\lambda = -i\hbar c \sum_{\lambda'} \alpha_{\lambda\lambda'} \cdot \nabla \psi_{\lambda'} + mc^2 \sum_{\lambda'} \beta_{\lambda\lambda'} \psi_{\lambda'} \quad (5)$$

Réécrivons (5) en utilisant $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$ et le vecteur colonne $\psi(\mathbf{r})$ de composantes $\psi_\lambda(\mathbf{r})$ ($\lambda = 1, 2, 3$ et 4). Nous obtenons

$$i\hbar \dot{\psi} = c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} \psi + \beta mc^2 \psi \quad (6)$$

qui est bien l'équation de Dirac d'une particule libre.

La densité de lagrangien (1) peut être écrite sous une autre forme en utilisant les matrices de Dirac γ^μ et l'adjoint relativiste $\bar{\psi}(\mathbf{r}) = \tilde{\psi}^*(\mathbf{r}) \beta$:

$$\mathcal{L}_D = \frac{i\hbar}{2} c \sum_\mu [\bar{\psi} \gamma^\mu (\partial_\mu \psi) - (\partial_\mu \bar{\psi}) \gamma^\mu \psi] - mc^2 \bar{\psi} \psi \quad (7)$$

Outre son aspect compact, cette forme est mieux adaptée au formalisme covariant.

b) Exprimons (2) sous une forme analogue à (1). Pour cela, introduisons les composantes ($U/c, \mathbf{A}$) du quadripotential A^μ .

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{i\hbar}{2} \sum_\lambda (\psi_\lambda^* \dot{\psi}_\lambda - \dot{\psi}_\lambda^* \psi_\lambda) - \frac{c}{2} \sum_{\lambda, \lambda'} \left\{ \psi_\lambda^* \alpha_{\lambda\lambda'} \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}_e \right) \psi_{\lambda'} + \right. \\ & \left. + \left[\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}_e \right)^* \psi_\lambda^* \right] \cdot \alpha_{\lambda\lambda'} \psi_{\lambda'} \right\} - qU_e \sum_\lambda \psi_\lambda^* \psi_\lambda - mc^2 \sum_{\lambda, \lambda'} \psi_\lambda^* \beta_{\lambda\lambda'} \psi_{\lambda'} \quad (8) \end{aligned}$$

Les relations (4. a), (4. b) et (4. c) sont alors remplacées par :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\lambda^*} = -\frac{i\hbar}{2} \dot{\psi}_\lambda \quad (9.a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\lambda^*} = \frac{i\hbar}{2} \dot{\psi}_\lambda - \frac{c}{2} \sum_{\lambda'} \left[\alpha_{\lambda\lambda'} \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}_e \right) \psi_{\lambda'} - q\mathbf{A}_e \cdot \alpha_{\lambda\lambda'} \psi_{\lambda'} \right] - qU_e \psi_\lambda - mc^2 \sum_{\lambda'} \beta_{\lambda\lambda'} \psi_{\lambda'} \quad (9.b)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_j \psi_\lambda^*)} = -\frac{i\hbar}{2} c \sum_{\lambda'} (\alpha_j)_{\lambda\lambda'} \psi_{\lambda'} \quad (9.c)$$

ce qui donne comme équation d'évolution pour le vecteur colonne ψ :

$$i\hbar \dot{\psi} = c\alpha \cdot (\mathbf{p} - q\mathbf{A}_e) \psi + qU_e \psi + \beta mc^2 \psi \quad (10)$$

qui est l'équation de Dirac d'une particule dans un champ extérieur décrit par les potentiels $\mathbf{A}_e$ et U_e .

A partir de (2) et (7), nous réécrivons $\mathcal{L}$ sous la forme $\mathcal{L} = \mathcal{L}_D + \mathcal{L}_I$ avec :

$$\mathcal{L}_I = - \sum_{\mu} j^\mu(\mathbf{r}) A_\mu^e(\mathbf{r}) \quad (11.a)$$

$$j^\mu(\mathbf{r}) = c q \bar{\psi}(\mathbf{r}) \gamma^\mu \psi(\mathbf{r}). \quad (11.b)$$

c) La transformation (3) donne :

$$\frac{\hbar}{i} \partial_\mu \psi_\lambda = \left[\frac{\hbar}{i} \partial_\mu \psi'_\lambda - q(\partial_\mu F) \psi'_\lambda \right] e^{-iqF/\hbar}. \quad (12)$$

En portant ce résultat, ainsi que (3), dans l'équation (2), nous obtenons une nouvelle densité de lagrangien. Celle-ci est identique au résultat que l'on obtiendrait en faisant le changement de jauge (A_μ^e)' = $A_\mu^e - \partial_\mu F$ dans la densité de lagrangien (2).

6. LAGRANGIEN ET HAMILTONIEN DES CHAMPS DE DIRAC ET MAXWELL COUPLÉS

On considère un champ dont la densité de lagrangien est définie par la formule (1) de l'exercice 5.

a) En s'inspirant de la démarche des exercices 6 et 7 du chapitre II, montrer que l'hamiltonien du champ de Dirac est de la forme

$$H_D = \int d^3r \sum_{\lambda, \lambda'} \psi_\lambda^*(\mathbf{r}) (c\alpha_{\lambda\lambda'} \cdot \mathbf{p} + \beta_{\lambda\lambda'} mc^2) \psi_{\lambda'}(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Quelle est l'impulsion $\mathbf{P}$ d'un tel champ ?

b) On considère le système constitué par un champ de Dirac et un champ électromagnétique en interaction. Justifier le fait que la densité de lagrangien du système couplé puisse être prise égale à :

$$\mathcal{L} = \left\{ -\frac{c}{2} \sum_{\mu} \left[\bar{\psi} \gamma^\mu \frac{\hbar}{i} D_\mu \psi - \frac{\hbar}{i} (D_\mu^* \bar{\psi}) \gamma^\mu \psi \right] - mc^2 \bar{\psi} \psi \right\} - \epsilon_0 \frac{c^2}{2} \sum_{\mu, \nu} (\partial_\mu A^\nu) (\partial^\mu A_\nu) \quad (2)$$

où $D_\mu = \partial_\mu + iqA_\mu/\hbar$. Quelle est la condition à imposer aux composantes A_μ du potentiel ?

c) Quel est l'hamiltonien associé à (2) ?

Solution

a) Le lagrangien de Dirac a une forme analogue aux lagrangiens étudiés dans les exercices 6 et 7 du chapitre II. (Comme pour ces exercices, les équations de Lagrange sont du premier ordre en temps, ce qui prouve qu'il y a surabondance des variables dynamiques). Nous y avons montré que pour une densité de lagrangien de la forme

$$\frac{i\hbar}{2} \sum_\lambda (\psi_\lambda^* \dot{\psi}_\lambda - \dot{\psi}_\lambda^* \psi_\lambda) - f(\psi_\lambda, \psi_\lambda^*) \quad (3)$$

la densité d'hamiltonien est $f(\psi_\lambda, \psi_\lambda^*)$. La même démarche appliquée à $\mathcal{L}_D$ conduit à un hamiltonien égal à :

$$H_D = \int d^3r \left\{ \left(-\frac{i\hbar}{2} \right) c \sum_{\lambda, \lambda'} [\psi_\lambda^* \alpha_{\lambda\lambda'} \cdot \nabla \psi_{\lambda'} - (\nabla \psi_\lambda^*) \cdot \alpha_{\lambda\lambda'} \psi_{\lambda'}] + mc^2 \sum_{\lambda, \lambda'} \psi_\lambda^* \beta_{\lambda\lambda'} \psi_{\lambda'} \right\} \quad (4)$$

En intégrant par parties le second terme du crochet, nous trouvons, puisque les champs sont nuls à l'infini, un terme égal au premier terme du crochet

$$H_D = \int d^3r \sum_{\lambda, \lambda'} [(-i\hbar) c \psi_\lambda^* \alpha_{\lambda\lambda'} \cdot \nabla \psi_{\lambda'} + mc^2 \psi_\lambda^* \beta_{\lambda\lambda'} \psi_{\lambda'}]. \quad (5)$$

En remplaçant $-i\hbar \nabla$ par $\mathbf{p}$, nous retrouvons la formule (1) de l'énoncé.

La démonstration faite à la question d) de l'exercice 7 du chapitre II peut être immédiatement utilisée ici pour trouver l'impulsion. Notons que cette démonstration, qui concerne l'impulsion du champ de Schrödinger, ne fait pas intervenir la forme explicite de la densité $f(\psi_\lambda, \psi_\lambda^*)$ de la formule (3). Le raisonnement fait sur le champ de Schrödinger peut donc être adapté de façon immédiate au cas du champ de Dirac et conduit à

$$\mathbf{P} = \int d^3r \sum_\lambda \psi_\lambda^* \frac{\hbar}{i} \nabla \psi_\lambda. \quad (6)$$

b) La densité de lagrangien (2) dépend à la fois des variables du champ de Dirac et de celles du champ électromagnétique. Comme le dernier terme de (2) ne dépend que du champ de rayonnement, il n'intervient pas dans les équations de Lagrange pour le champ de Dirac. Or, l'autre terme de $\mathcal{L}$ (entre accolades) est identique à celui donné par la formule (2) de l'exercice 5. Les mêmes calculs que ceux faits dans cet exercice montrent donc que l'équation de Lagrange pour ψ s'écrit

$$i\hbar \dot{\psi} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} - q\mathbf{A})\psi + qU\psi + \beta mc^2 \psi \quad (7)$$

et coïncide avec l'équation de Dirac dans le champ décrit par les potentiels $\mathbf{A}$ et U .

Considérons maintenant les équations de Lagrange pour A_μ . Regroupons les termes de (2) où apparaissent les variables du champ électromagnétique. Il vient

$$- \sum_\mu j^\mu A_\mu - \epsilon_0 \frac{c^2}{2} \sum_{\mu, \nu} (\partial_\mu A^\nu) (\partial^\mu A_\nu) \quad (8)$$

avec $j^\mu = c q \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$. La densité (8) est la même que celle utilisée dans le paragraphe A.1.b du chapitre V. Les mêmes calculs que ceux du paragraphe A.1.c montrent que les équations de Lagrange pour A_μ s'écrivent

$$\square A_\mu = \frac{1}{\epsilon_0 c^2} j_\mu. \quad (9)$$

Elles coïncident avec les équations de Maxwell du champ en présence des sources j_μ , si les A_μ satisfont en plus à la condition de Lorentz $\left(\sum_\mu \partial_\mu A^\mu = 0\right)$.

Ainsi, la densité de lagrangien (2) conduit, moyennant la condition de Lorentz, à l'équation de Dirac pour ψ en présence du champ A_μ , et aux équations de Maxwell du champ A_μ en présence des sources $j^\mu = c q \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$. Elle décrit donc correctement la dynamique des champs de Dirac et Maxwell couplés et peut être prise pour point de départ de la formulation de l'électrodynamique en jauge de Lorentz.

c) Comme $\mathcal{L}$ ne dépend pas des vitesses $\dot{\mathbf{A}}$ et $\dot{\mathbf{U}}$ des variables du champ de Maxwell, le calcul des moments conjugués Π_j et Π_s de A_j et A_s fait dans le paragraphe A.2.a reste valable et donne

$$\Pi_j = \varepsilon_0 \dot{A}_j \quad (10.a)$$

$$\Pi_s = -\varepsilon_0 \dot{A}_s. \quad (10.b)$$

Il est donc possible de réexprimer dans la densité (2) $\dot{A}_j$ et $\dot{A}_s$ en fonction de Π_j et Π_s . Par ailleurs, la densité (2) a, en ce qui concerne ψ_λ et ψ_λ^* , une structure analogue à celle de (3)

$$\mathcal{L} = \frac{i\hbar}{2} \sum_\lambda (\psi_\lambda^* \dot{\psi}_\lambda - \dot{\psi}_\lambda^* \psi_\lambda) - g(\psi_\lambda, \psi_\lambda^*, \mathbf{A}, \Pi, A_s, \Pi_s). \quad (11)$$

En suivant la même démarche que dans les exercices 6 et 7 du chapitre II, on montre alors que la densité d'hamiltonien associée à (11) est

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \Pi \cdot \dot{\mathbf{A}} + \Pi_s \dot{A}_s + g(\psi_\lambda, \psi_\lambda^*, \mathbf{A}, \Pi, A_s, \Pi_s) \\ &= \frac{1}{\varepsilon_0} (\Pi^2 - \Pi_s^2) + g(\psi_\lambda, \psi_\lambda^*, \mathbf{A}, \Pi, A_s, \Pi_s). \end{aligned} \quad (12)$$

En explicitant g au moyen de (2), (11) et (10), on obtient alors

$$H = H_D + H_R + H_I \quad (13)$$

où H_D est donné en (1), où

$$H_R = \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3r \left[\frac{1}{\varepsilon_0} \Pi^2 + c^2 (\nabla \times \mathbf{A})^2 - \frac{1}{\varepsilon_0^2} \Pi_s^2 - c^2 (\nabla A_s)^2 \right] \quad (14)$$

(expression qui, après passage dans l'espace réciproque, coïncide avec celle déduite de (A.27) et conduit donc en termes de variables normales à (A.64)) et où

$$H_I = \int d^3r \sum_\mu j^\mu A_\mu = c q \int d^3r \sum_\mu \bar{\psi}(\mathbf{r}) \gamma^\mu \psi(\mathbf{r}) A_\mu(\mathbf{r}). \quad (15)$$

Notons enfin que, comme dans la question e) de l'exercice 7 du chapitre II, la quantification canonique est faite en associant à $\psi_\lambda(\mathbf{r})$ et à $\psi_\lambda^*(\mathbf{r}')$, deux opérateurs dont le commutateur ou l'anticommutateur vaut $\delta_{\lambda\lambda'}$, $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Le commutateur conduisant à une énergie non bornée inférieurement, il faut prendre l'anticommutateur, ce qui donne

$$[\Psi_\lambda(\mathbf{r}), \Psi_{\lambda'}^+(\mathbf{r}')]_+ = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (16)$$

Nous justifions ainsi, à partir du formalisme lagrangien, l'hamiltonien et les relations d'anticommutation utilisés dans les paragraphes 2 et 3 du complément A_v et servant de point de départ à l'électrodynamique quantique relativiste en jauge de Lorentz.

7. OPÉRATEURS CHAMP DE DIRAC ET DENSITÉ DE CHARGE. ÉTUDE DE QUELQUES RELATIONS DE COMMUTATION

Soient $\Psi_\lambda(\mathbf{r})$ les composantes du champ de Dirac quantifié au point $\mathbf{r}$ et

$$\rho(\mathbf{r}) = q \sum_{\lambda} \Psi_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) \quad (1)$$

l'opérateur densité de charge au point $\mathbf{r}$.

a) En utilisant les relations d'anticommutation entre les opérateurs de champ $\Psi_{\lambda}(\mathbf{r})$ et $\Psi_{\lambda'}^{\dagger}(\mathbf{r}')$, établir que

$$[\rho(\mathbf{r}), \rho(\mathbf{r}')] = 0. \quad (2)$$

b) On considère l'opérateur

$$X = -\frac{c}{\hbar} \int d^3r \rho(\mathbf{r}) S(\mathbf{r}) \quad (3)$$

où $\rho(\mathbf{r})$ est défini en (1) et où $S(\mathbf{r})$ (qui peut être un opérateur de rayonnement) commute avec les opérateurs de champ $\Psi_{\lambda}(\mathbf{r})$ et $\Psi_{\lambda'}^{\dagger}(\mathbf{r}')$. Montrer que

$$\left\{ \begin{aligned} [X, \Psi_{\lambda}(\mathbf{r})] &= \frac{qc}{\hbar} S(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) \end{aligned} \right. \quad (4.a)$$

$$\left\{ \begin{aligned} [X, \Psi_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r})] &= -\frac{qc}{\hbar} S(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r}). \end{aligned} \right. \quad (4.b)$$

c) On suppose que $S(\mathbf{r})$ commute avec $S(\mathbf{r}')$ et on pose

$$T = e^{iX}. \quad (5)$$

Montrer que

$$\left\{ \begin{aligned} T \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) T^{-1} &= \exp\left[\frac{iqc}{\hbar} S(\mathbf{r})\right] \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) \end{aligned} \right. \quad (6.a)$$

$$\left\{ \begin{aligned} T \Psi_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r}) T^{-1} &= \exp\left[-\frac{iqc}{\hbar} S(\mathbf{r})\right] \Psi_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r}). \end{aligned} \right. \quad (6.b)$$

Solution

a) Les relations d'anticommutation (32) du complément A_v permettent d'écrire

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') &= q^2 \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} \Psi_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \Psi_{\lambda'}(\mathbf{r}') = \\ &= -q^2 \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} \Psi_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda'}(\mathbf{r}') + q^2 \sum_{\lambda} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (7)$$

Anticommutons $\Psi_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r})$ et $\Psi_{\lambda'}^{\dagger}(\mathbf{r}')$, ainsi que $\Psi_{\lambda}(\mathbf{r})$ et $\Psi_{\lambda'}(\mathbf{r}')$ dans le premier terme de (7), ce qui donne un double changement de signe et donc ne change rien, puis anticommutons

$\Psi_{\lambda}^+(\mathbf{r})$ et $\Psi_{\lambda}(\mathbf{r}')$. Il vient

$$\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') = \rho(\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}) - q^2 \sum_{\lambda} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\Psi_{\lambda}^+(\mathbf{r}') \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) - \Psi_{\lambda}^+(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}')]. \quad (8)$$

A cause de la fonction $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, on peut remplacer $\mathbf{r}'$ par $\mathbf{r}$ dans le crochet du dernier terme de (8), ce qui montre qu'il est nul et redonne bien (2).

b) Comme S commute avec les opérateurs de champ

$$[X, \Psi_{\lambda}(\mathbf{r})] = -\frac{c}{\hbar} \int d^3r' S(\mathbf{r}') [\rho(\mathbf{r}'), \Psi_{\lambda}(\mathbf{r})]. \quad (9)$$

Or, les relations d'anticommutation (32) du complément A_v permettent d'écrire

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}') \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) &= q \sum_{\lambda'} \Psi_{\lambda'}^+(\mathbf{r}') \Psi_{\lambda'}(\mathbf{r}') \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) = -q \sum_{\lambda'} \Psi_{\lambda'}^+(\mathbf{r}') \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda'}(\mathbf{r}') \\ &= \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') - q \sum_{\lambda'} \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi_{\lambda'}(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (10)$$

c'est-à-dire encore

$$[\rho(\mathbf{r}'), \Psi_{\lambda}(\mathbf{r})] = -q \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}). \quad (11)$$

Il suffit alors de reporter (11) dans (9) et d'intégrer sur $\mathbf{r}'$ pour obtenir (4. a). Une démonstration analogue permet d'établir (4. b).

c) Partons de l'identité

$$e^{iX} \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) e^{-iX} = \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) + [iX, \Psi_{\lambda}(\mathbf{r})] + \frac{1}{2!} [iX, [iX, \Psi_{\lambda}(\mathbf{r})]] + \dots \quad (12)$$

D'après (4. a), le premier commutateur de (12) vaut $iqcS(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda}(\mathbf{r})/\hbar$. Comme $S(\mathbf{r})$ commute avec $S(\mathbf{r}')$, le double commutateur vaut simplement

$$\frac{1}{2!} \frac{iqc}{\hbar} S(\mathbf{r}) [iX, \Psi_{\lambda}(\mathbf{r})] \quad (13)$$

et peut être lui aussi calculé à partir de (4. a), et ainsi de suite. Il vient ainsi

$$e^{iX} \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) e^{-iX} = \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) \left\{ 1 + \frac{iqc}{\hbar} S(\mathbf{r}) + \frac{1}{2!} \left[\frac{iqc}{\hbar} S(\mathbf{r}) \right]^2 + \dots \right\}. \quad (14)$$

On reconnaît dans l'accolade le développement en série de $\exp[iqc S(\mathbf{r})/\hbar]$, ce qui démontre (6. a). Une démonstration analogue permet d'établir (6. b).

Liste des ouvrages cités en référence

- AKHIEZER A. I. and BERESTETSKII V. B., *Quantum Electrodynamics*, Wiley Interscience, New York (1965).
- BERESTETSKI V., LIFCHITZ E. et PITAYEVSKI L., *Théorie Quantique Relativiste*, Tome IV, Editions MIR, Moscou (1972).
- BJORKEN J. D. and DRELL S. D., *Relativistic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York (1964).
- BLATT J. M. and WEISSKOPF V. F., *Theoretical Nuclear Physics*, Wiley, New York (1963).
- BOGOLIUBOV N. N. and SHIRKOV D. V., *Introduction to the Theory of Quantized Fields*, Interscience Publishers, New York (1959); *Introduction à la théorie quantique des champs*, Dunod, Paris (1960).
- COHEN-TANNOUDJI C., « Introduction to Quantum Electrodynamics », in Les Houches, Session XXXVIII (1982). *Tendances actuelles en physique atomique/ New trends in atomic physics*, Grynberg G. and Stora R. eds, Elsevier Science Publishers B.V. (1984), p. 1.
- COHEN-TANNOUDJI C., DIU B. et LALOË F., *Mécanique Quantique*, Vols. 1 and 2, Hermann, Paris (1973); English translation : *Quantum Mechanics*, Wiley and Hermann, Paris (1977).
- COHEN-TANNOUDJI C., DUPONT-ROC J. et GRYNBERG G., *Photons et Atomes — Les Processus d'Interaction*, InterEditions, Paris (1988).
- DIRAC P. A. M., *The Principles of Quantum Mechanics*, Fourth edition Oxford University Press (1958).
- FEYNMAN R. P., *Quantum Electrodynamics*, Benjamin, New York (1961).
- FEYNMAN R. P., LEIGHTON R. B. and SANDS M., « The Feynman Lectures on Physics », Vol. II : Electromagnetism and Matter, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1966). Traduction française : Les Cours de Physique de Feynman, Vol. II : Electromagnétisme et Matière. InterEditions, Paris (1979).
- GLAUBER R. J., « Optical Coherence and Photon Statistics », in *Quantum Optics and Electronics*, Les Houches (1964), eds. de Witt C., Blandin A. and Cohen-Tannoudji C., Gordon and Breach, New York (1965), p. 63.
- GOLDBERGER M. L. and WATSON K. M., *Collision Theory*, Wiley, New York (1964).
- GOLDSTEIN H., *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1959).
- HAKEN H., *Light*, Vol. I, North Holland, Amsterdam (1981).
- HEALY W. P., *Non Relativistic Quantum Electrodynamics*, Academic Press, London (1982).
- HEITLER W., *The Quantum Theory of Radiation*, third edition Clarendon Press, Oxford (1954).
- ITZYKSON C. and ZUBER J.-B., *Quantum Field Theory*, McGraw-Hill, New York (1980).

- JACKSON J. D., *Classical Electrodynamics*, second edition, Wiley, New York (1975).
- JAUCH J. M. and ROHRlich F., *The Theory of Photons and Electrons*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1955).
- KLAUDER J. R. and SKAGERSTAM B.-S., *Coherent States. Applications in Physics and Mathematical Physics*, World Scientific Publishing Co, Singapore (1985).
- KROLL N. M. « Quantum Theory of Radiation », in *Quantum Optics and Electronics*, Les Houches (1964), eds de Witt C., Blandin A. and Cohen-Tannoudji C., Gordon and Breach, New York (1965), p. 1.
- LANDAU L. D. and LIFSHITZ E. M., *Mechanics*, Tome I, Pergamon Press, Oxford (1960); *Mécanique*, 3^e édition, Ed. MIR, Moscou (1969).
- LANDAU L. D. and LIFSHITZ E. M., *The Classical Theory of Fields*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1951); Pergamon Press, London (1951); *Théorie des champs*, 3^e édition, Ed. MIR, Moscou (1970).
- LOUDON R., *The Quantum Theory of Light*, Clarendon Press, Oxford (1973).
- MESSIAH A., *Mécanique Quantique*, Vols. 1 et 2, Dunod, Paris (1964). Traduction anglaise : *Quantum Mechanics*, North Holland, Amsterdam (1962).
- NUSSENZVEIG H. M., *Introduction to Quantum Optics*, Gordon and Breach, New York (1973).
- POWER E. A., *Introductory Quantum Electrodynamics*, Longman, London (1964).
- ROMAN P., *Advanced Quantum Theory*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1965).
- SARGENT M., SCULLY M. O. and LAMB W. E. Jr., *Laser Physics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1974).
- SCHIFF L. I., *Quantum Mechanics*, Second edition, McGraw-Hill, New York (1955).
- SCHWEBER S. S., *An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory*, Harper and Row, New York (1961).
- SOMMERFELD A., *Electrodynamics*, Academic Press, New York (1952).

INDEX

N.B. : Les références suivies de e sont relatives à des exercices

A

Absorption (de photons) 318, 327, 340e, 346e, 350e, 351e

Action

- principe de moindre 81, 83
- pour un système discret 83
- pour un champ 94
- dérivée fonctionnelle de l'action 130
- le long d'un mouvement réel 136, 154e

Adiabatique (branchement) 301

Adjoint (relativiste) 413

(voir aussi opérateur)

Amortissement radiatif 73e, 78e

Amplitudes de transition (ou de diffusion)

- définition et calcul 178, 273, 318, 339e, 340e, 348e
- interférence entre 215
- égalité dans les divers points de vue 266, 271, 275, 299, 318, 323, 351e, 358e

Annihilation

(voir opérateurs de création et d'annihilation)

Anticommutation (relations d')

- pour un champ complexe 100
- pour le champ de Schrödinger 101, 164e
- pour le champ de Dirac 416, 417, 455e, 456e
- et positivité de l'énergie 101, 418, 442, 455e

Antihermiticité

(voir potentiel scalaire)

Antiparticule 189, 415, 435

Approximation

- non relativiste 107, 124, 202
- des grandes longueurs d'onde 204, 271, 277, 306, 344e

B

Base

- dans l'espace réciproque 27, 38
- de fonctions vectorielles 53, 57

Bessel

- fonctions de 347e
- fonctions de Bessel sphériques 58, 73e

Born (développement de) 302

Bose-Einstein (distribution de) 236e, 240e

Bosons 101, 163e, 189

C

Canoniques (relations de commutation)

- pour un système discret 91, 92, 149e, 157e, 260
- pour un champ 96, 100, 150e, 160e, 382
- (voir aussi commutation, quantification)

Centre de masse 234e, 344e

Champs (en général)

- transverses et longitudinaux 15, 39
- réels 92

- complexes 97
(voir aussi énergie, hamiltonien, impulsion, lagrangien, moment cinétique, quantification)
- Champ électrique
 - total 68e, 119, 174, 293, 297, 312, 332, 357e
 - longitudinal 17, 66e, 119, 174, 285
 - transverse 23, 26, 29, 34, 66e, 119, 173, 289, 297, 312
 - d'un dipôle oscillant 73e, 355e
 - en jauge de Coulomb 119, 124, 174
 - dans le point de vue de Power-Zienau-Wooley 297
(voir aussi champ électromagnétique, développements)
- Champ électromagnétique
 - dans l'espace réel 9
 - dans l'espace réciproque 14
 - libre 30, 60, 183, 185, 223, 232e, 243e
 - tenseur $F_{\mu\nu}$ 19, 108, 367, 380
 - associé à une particule 70e
 - valeur moyenne dans la métrique indéfinie 398
(voir aussi développements, extérieur)
- Champ magnétique 23, 26, 29, 34, 44, 120, 173
(voir aussi développements)
- Champ de matière
 - quantification 100, 163e, 363, 416
 - de Schrödinger 159e, 163e, 169e
 - de Dirac 368, 410, 416, 435, 453e, 456e
- Changement
 - de coordonnées 86, 90
 - de variables dynamiques 88, 262
 - de représentation quantique 262, 264
(voir aussi jauge, lagrangien, transformation)
- Charge
 - totale 418
 - conservation de la 9, 14, 110, 370, 413, 418, 423
(voir aussi densité)
- Classique
(voir électrodynamique)
- Cohérent (état)
(voir quasi-classique)
- Commutation (relations de)
 - pour les particules 36, 120, 147, 173
 - pour les opérateurs a et a^+ 36, 173, 243e, 383, 396, 445e
 - canoniques pour un système discret 91, 149e, 157e, 260
 - canoniques pour un champ quelconque 96, 100, 150e
 - des champs électromagnétiques dans l'espace réciproque 121, 147, 382
 - des champs électromagnétiques dans l'espace réel 122, 175, 232e
 - des champs libres dans le point de vue de Heisenberg 225, 357e, 384
 - des champs avec l'énergie et l'impulsion 235e, 385, 419
 - pour les opérateurs a et $\bar{a}$ 393, 397
 - covariantes 383, 384
- Complexes
(voir champs, variables dynamiques)
- Compton
 - longueur d'onde de 204
 - diffusion 200
- Condition aux limites périodiques 33
- Condition supplémentaire (de Lorentz)
 - en théorie classique 11, 12, 24, 370, 372, 376, 444e, 445e
 - pour le champ quantique libre 386, 388, 396
 - en présence d'interaction 407, 423, 432
- Conjugaison de charge 440
- Conjugués
(voir moments, variables)
- Conservation
 - de la charge 9, 14, 110, 370, 413, 418, 423
 - de l'énergie totale 10, 63e, 139, 202
 - de l'impulsion totale 10, 63e, 140, 202, 234e
 - du moment cinétique total 10, 141, 202
- Constante du mouvement 10, 63e, 136, 154e, 202, 372
- Contact (interaction de) 44

Continue (passage à la limite) 128, 149e

Convolution (produit de) 13

Coordonnées généralisées

- réelles 83, 86

- complexes 89, 90

(voir aussi changement)

Corrélation(s)

- fonction de 183, 193, 229

- d'intensité 188

Coulomb

- champ de 18, 124, 174, 297

- potentiel de 18, 69e, 174, 409

- interaction de 20, 124, 332, 403, 428, 437

- interaction de Coulomb par échange de photons 405

(voir aussi énergie, énergie propre, jauge de Coulomb, photons scalaires)

Coupage 126, 192, 202, 289

Courant (quadrivecteur) 12, 367, 413

(voir aussi densité, magnétisation, polarisation)

Covariantes

- formulations 363

- notations et équations 12, 19, 366, 413, 451e

- relations de commutation 383, 384

- densités de lagrangien 108, 367, 371, 443e

Création

(voir opérateurs de création et d'annihilation)

D

Dalembertien 12, 369

Dégrouement 213

Delta transverse (fonction) 16, 38, 40, 44, 66e, 122, 175, 233e

Densité

- de charge 9, 103, 311, 412, 421, 436, 456e

- de courant 9, 103, 117, 412, 421

- de lagrangien 93, 103, 108, 115, 149e, 159e, 169e, 367, 371, 443e

- d'hamiltonien 95, 99, 149e, 160e, 372

- de polarisation 283, 294, 310, 330

- de magnétisation 44, 286, 294

(voir aussi quasiprobabilité)

Dérivée fonctionnelle 94, 128

Développement en variables normales

- des champs électrique et magnétique 29, 30, 34

- du potentiel vecteur transverse 31, 33

- de l'hamiltonien du champ transverse 26, 29, 33

- de l'impulsion du champ transverse 29, 33

- du moment cinétique du champ transverse 29, 50

- du quadrivecteur potentiel 374, 378

- de l'hamiltonien et de l'impulsion en jauge de Lorentz 380, 381

Développement en a et a^+ (ou en a et $\bar{a}$)

- des champs électrique et magnétique 173, 243e

- du potentiel vecteur transverse 173

- de l'hamiltonien et de l'impulsion du champ transverse 174

- du quadrivecteur potentiel 393

- de l'hamiltonien et de l'impulsion en jauge de Lorentz 384, 393

Développement multipolaire 289

Diamagnétique (énergie) 292, 295

Diffusion

- section efficace de 76e, 348e

- processus de 327

- résonnante 77e

- non résonnante 358e

- en présence de rayonnement 346e

(voir aussi amplitude de transition, Compton, Raman, Rayleigh, Thomson)

Dipolaire (onde) 73e

Dipolaire électrique

- rayonnement 73e

- moment 272, 290, 308, 345

- énergie propre 314

- interaction 272, 290, 306, 308, 314, 315

- approximation 272

Dipolaires magnétiques (moment et interaction) 290

Dipôle-dipôle

- interaction magnétique 45
- interaction électrique 315

Dirac

- fonction de 96
- équation de 410, 451e, 454e
- matrices de 410
- hamiltonien de 412
(voir aussi champ de matière, spinneur)

Discretisation 33

E

Effectif (hamiltonien) 437, 440

Einstein 206

Electrodynamique classique

- dans l'espace réel 9
- dans l'espace réciproque 13
- lagrangien standard 102
- en jauge de Coulomb 113, 123
- dans le point de vue de Power-Zienau-Woolley 288
- en jauge de Lorentz 366

Electrodynamique quantique

- en jauge de Coulomb 171
- dans le point de vue de Power-Zienau-Woolley 295
- relativiste en jauge de Lorentz 363, 426
- relativiste en jauge de Coulomb 426, 433

Electron

- élastiquement lié 76e
- rayon classique 77e
- facteur g 441
(voir aussi champ de matière)

Elimination

- d'une variable dynamique 87, 156e, 159e
- du potentiel scalaire 113

Emission (de photons) 346e, 350e, 351e

Energie

- du système champ + particules 10, 21, 118
- coulombienne 20, 116, 175, 285, 403, 405, 428
- conservation de 10, 63e, 139, 202
- du champ transverse 29, 33,
- du champ libre 185, 381
- états d'énergie négative 415
(voir aussi les rubriques hamiltonien)

Energie propre

- coulombienne d'une particule 20, 73e, 203
- dipolaire 314
- de la polarisation transverse 292, 332

Equations (voir Dirac, Hamilton, Heisenberg, Lagrange, Maxwell, Newton-Lorentz, Poisson, Schrödinger)

Equivalence

- entre les diverses formulations de l'électrodynamique 255, 302, 304
- entre les points de vue $A.p$ et $E.r$ 274, 298, 318, 323, 339e, 340e, 358e
- entre les points de vue $A.p$ et $Z.\nabla V$ 351e
- entre les électrodynamiques quantiques relativistes en jauge de Lorentz et en jauge de Coulomb 426

Espace des états

- en jauge de Coulomb 177
- dans la formulation covariante 387
- des photons scalaires 394, 445e
(voir aussi condition supplémentaire)

Espace réel et espace réciproque 13, 33, 38, 104

Etats du champ de rayonnement

- à un photon 189, 207, 210, 212, 387
- à deux photons 213
- factorisés 207, 209
- comprimés 245e, 248e, 250e, 252e
- représentation graphique 243e
(voir aussi quasi-classique, physique, vide)

Etats initial et final d'un processus 266, 273, 298, 302, 304, 319, 328, 339e

Extérieur

- électrodynamique dans un champ extérieur 143, 176, 180, 182, 200
- particules dans un champ extérieur (voir les rubriques lagrangien et hamiltonien en présence d'un champ extérieur)
- sources extérieures (pour le rayonnement) 26, 219, 316, 372, 374, 402, 420

F

Fermi

- règle d'or de 325
- lagrangien de 368

Fermion 101, 163e, 415, 416

Fierz (voir transformation de Pauli-Fierz-Kramers)

Fluctuations du vide 193, 201, 281

Fock (espace de) 33, 177

Fonction d'onde du photon 32, 52

Fonctionnelle (voir dérivée)

Fourier (transformée de) 13, 14, 17, 58, 98

G

Göppert-Mayer (transformation de) 271, 306

Grandeurs physiques

- en théorie classique 259
- en théorie quantique 261, 298
- transformation des opérateurs associés 262, 265
- représentation mathématique dans divers points de vue 118, 119, 273, 279, 296, 308, 312
- valeur moyenne dans la métrique indéfinie 398
- (voir champ électrique, champ magnétique, énergie, impulsion, moment cinétique, photodétection, position, signification physique des opérateurs, vitesse)

H

Hamilton (équations de)

- pour un système discret 85
- pour un champ 96, 134, 373

Hamiltonien (formalisme général)

- pour un système discret 85, 149e
- pour un champ 95, 99, 150e
- avec des variables dynamiques complexes 90, 99, 156e, 159e
- en mécanique quantique 91, 261
- transformation de l'hamiltonien 260, 263, 265
- hamiltonien et énergie 85, 138, 148e (voir aussi densité, effectif)

Hamiltonien total

- en jauge de Coulomb 22, 35, 118, 140, 175, 441
- en jauge de Coulomb avec des champs extérieurs 146, 176, 200
- dans le point de vue de Power-Zienau-Woolley 291, 294, 297, 331
- des champs de Dirac et Maxwell couplés 421, 433, 453e

Hamiltonien des particules

- expression 146, 199
- sens physique dans divers points de vue 273, 299
- cas de deux particules de charges opposées 234e
- cas de 2 systèmes séparés de charges 315, 330
- hamiltonien de Pauli 434
- hamiltonien de Dirac 412
- du champ de Dirac quantifié 417

Hamiltonien des particules dans un champ extérieur

- point de vue standard (en A.p) 146, 200, 268, 319
- point de vue dipolaire électrique (en E.r) 273, 306, 322
- point de vue de Henneberger 279
- cas d'un ion 344e
- particule de Dirac 412
- champ de Dirac quantifié 421

Hamiltonien du rayonnement

- en fonction des champs 20, 314

- en fonction des variables conjuguées 118, 146, 292, 298, 372
- en fonction des variables normales 29, 33, 380
- en fonction des opérateurs a et a^+ 174, 199, 243e, 298, 384
- états propres de 188
- en fonction des opérateurs a et $\bar{a}$ 393,
- en jauge de Lorentz 372, 400
- sens physique 294, 314
- Hamiltonien du rayonnement couplé à des sources extérieures
- en jauge de Coulomb 220
- dans le point de vue dipolaire électrique 316, 355e
- en jauge de Lorentz 372, 402, 420
- Hamiltonien d'interaction entre particules et rayonnement
- en jauge de Coulomb 199, 234e
- dans le point de vue dipolaire électrique 273, 309, 314, 315
- dans le point de vue de Power-Zienau-Woolley 292, 294, 298, 330
- en électrodynamique quantique relativiste 420
- Heisenberg
- équations de 91
- équations pour les particules 179
- équations pour a et a^+ 181, 220, 251e, 422
- équations pour les champs de matière 101, 163e, 422
- point de vue de 91, 178, 187, 220, 223
- relations de 243e, 250e
- Henneberger (transformation de) 277, 346e, 351e
- Hilbert (espace de) 91, 389
- Hydrogène
- transition de Lamb 329
- transition 1s-2s à 2 photons 326, 340e
- d'une particule 22, 179
- impulsion et quantité de mouvement 22, 179, 273, 292
- d'un champ quelconque 154e
- du système champ + particules 10, 21, 120, 141, 176, 202
- contribution du champ électrique longitudinal 21, 22
- du champ transverse 21, 29, 34, 174, 185, 190
- du champ électromagnétique en jauge de Lorentz 372, 381
- du champ de Schrödinger 160e
- du champ de Dirac 453e
(voir aussi commutation, développements)
- Indépendantes (variables) 97, 111, 123, 364
(voir aussi redondance)
- Induction électrique 284, 293, 294, 310, 312
- Instantané
- champ de Coulomb et champ transverse 18, 23, 66e, 69e, 124
- interactions instantanées 20, 124, 315, 332
(voir aussi non-localité)
- Intensité lumineuse 187
- Interactions
(voir contact, Coulomb, dipolaire électrique, dipolaire magnétique, dipôle-dipôle, instantanées, quadrupolaire, retardées et les rubriques hamiltonien)
- Interférences
- lumineuses (théorie quantique) 206
- à 1 photon 209
- à 2 photons 211
- entre 2 faisceaux laser 210, 214
- entre amplitudes de transition 215
- Invariance
- de jauge 11, 109, 169e, 271
- relativiste 12, 17, 108, 116
- par translation et rotation 136, 155e, 202, 372
(voir aussi covariante)
- Ion (hamiltonien d'interaction avec le rayonnement) 344e

J

Jauge (généralités)

- transformation de 11, 15, 110, 257, 269, 272, 333, 370, 377, 399
- invariance de 11, 109, 271
- changement de jauge et phase du champ de matière 169e, 451e

Jauge de Coulomb

- définition 12, 115
- électrodynamique en 12, 115, 123, 171, 441
- électrodynamique quantique relativiste en 426, 433
(voir aussi les rubriques hamiltonien, transformation)

Jauge de Lorentz

- définition 11
- électrodynamique classique en 370
- électrodynamique quantique relativiste en 363, 426
(voir aussi condition supplémentaire)

Jauge de Poincaré 333, 335

K

Kramers

(voir transformation de Pauli-Fierz-Kramers)

Kronecker (symbole de) 96, 150e

L

Lagrange (équations de)

- pour un système discret 84, 131, 149e
- pour un champ 94, 98, 149e, 152e
- avec des variables dynamiques complexes 89, 98, 156e
- pour les particules 105, 144, 153e
- pour les potentiels électromagnétiques 106, 144, 152e, 153e, 368
- pour un champ de matière 159e, 169e, 369, 451e
(voir aussi lagrangien)

Lagrangien (généralités)

- formalisme 81, 83
- d'un système discret 83, 149e

- d'un champ 93, 97, 149e
- avec des variables dynamiques complexes 89, 97, 156e, 159e
- lagrangiens équivalents 84, 94, 110, 258
- élimination d'une variable dynamique redondante 86, 156e, 159e
- linéaire vis-à-vis des vitesses 156e, 159e
(voir champ de matière, densité de lagrangien, dérivée fonctionnelle, Schrödinger)

Lagrangiens covariants

- pour le champ électromagnétique (standard) 108, 367
- pour le champ électromagnétique (en jauge de Lorentz) 367, 371, 443e
- d'interaction 108, 367
- de Fermi 368
- pour les particules classiques 108
- pour le champ de Dirac 451e
- pour les champs de Dirac et Maxwell couplés 453e

Lagrangien en jauge de Coulomb 115, 139

Lagrangien de Power-Zienau-Woolley 289

Lagrangien en présence d'un champ extérieur 144, 145, 268, 273, 451e

Lagrangien standard

- expression 102
- symétries 107
- difficultés pour la quantification 112

Lamb (transition de) 329

Libres (champs et potentiels) 30, 60, 185, 207, 375, 378, 384

Limite non relativiste 426, 434, 441

Localisés (systèmes de charges) 283, 306, 309

Localité 14, 17, 18, 22, 105, 293

(voir aussi instantané, non localité)

Longitudinal

- champ vectoriel 15
- champ électrique 66e, 174, 285
- contribution du champ électrique longitudinal à l'énergie, à l'impulsion, au moment cinétique 19, 20, 22
- potentiel vecteur 114, 257

- base de fonctions vectorielles longitudinales 55
- projecteur sur sous-espace 40
- variables normales longitudinales 376
- photons longitudinaux 387, 432
- Longueurs d'onde (échelle de) 204
(voir aussi Compton, approximation)
- Lorentz (équations de) 106, 180
(voir aussi condition supplémentaire, jauge de Lorentz)

M

Magnétisation

- densité de 44, 286, 294
- courant de 286

Masse

- correction de 71e
- énergie de 434

Matière (voir champ de matière)

Matrices

- de Pauli 412, 439
- de Dirac 410

Matrice de transition 301, 358e

Matrice S

- définition 301, 319
- processus à un ou deux photons 320, 322, 323, 351e
- équivalence dans divers points de vue 300, 304, 323, 351e, 358e

Maxwell (équations de)

- dans l'espace réel 9
- forme covariante 19, 368
- dans l'espace réciproque 14, 15, 23
- pour les potentiels 11, 12, 368
- quantiques 181
(voir aussi Heisenberg, variables normales)

Métrique indéfinie

- définition et propriétés 389, 393, 447e
- incompatibilité avec une interprétation probabiliste 392, 394
(voir aussi potentiel scalaire)

Mode (normal de vibration) 26, 29, 376

(voir développements, variables normales)

Moment cinétique

- conservation du 10, 141, 202
- d'une particule sans spin 139
- d'une particule de spin 1, 51
- fonctions propres pour une particule de spin 1, 55
- d'un champ quelconque 154e
- du système champ + particules 10, 22, 120, 176, 202
- contribution du champ électrique longitudinal 22, 47
- du champ transverse 22, 29, 49
(voir aussi développements, multipolaire)

Moments conjugués (généralités)

- d'une coordonnée généralisée discrète 85, 149e, 258
- d'un champ 95, 98, 150e
- d'une coordonnée généralisée complexe 90, 98, 156e
- transformation dans un changement de coordonnées généralisées 87
- transformation dans un changement de lagrangien 259
- en théorie quantique 260, 268

Moments conjugués des particules

- en jauge de Coulomb 22, 117, 145
- transformation dans un changement de jauge 269
- dans le point de vue de Göppert-Mayer 273
- dans le point de vue de Henneberger 278
- dans le point de vue de Power-Zienau-Woolley 291, 292, 295
- pour les champs de matière 159e

Moments conjugués (des potentiels électromagnétiques)

- en jauge de Coulomb 117, 118, 145
- dans le point de vue de Power-Zienau-Woolley 291, 293, 296
- en jauge de Lorentz 371

Moment dipolaire

(voir dipolaire électrique, dipolaire magnétique)

Moment magnétique

- orbital 290
- de spin 46, 199, 441

Multiphotoniques (calcul des amplitudes de transition dans divers points de vue) 318, 327, 340e, 346e, 350e, 351e**Multipolaire(s)**

- ondes 47, 57, 60, 62
- développement 289

N**Négative**

- composante de fréquence 31, 186, 195, 424
- états d'énergie 415

Newton-Lorentz (équations de) 9, 106, 180**Non-localité 16, 17, 18, 23, 154e**

(voir aussi instantané, localité)

Non-relativiste

(voir approximation, limite)

Non-résonnant (processus) 327, 358e**Normal (voir mode, ordre, variables)****Norme**

- négative 388
- dans la métrique indéfinie 390, 447e, 449e

O**Observables (voir grandeurs physiques)****Ondes**

- planes progressives 30
- multipolaires 47, 57

Onde-corpuscule (dualité) 206, 217**Opérateurs (dans la métrique indéfinie)**

- adjoint 390
- hermitique 390, 447e
- valeurs propres et vecteurs propres 391, 447e

Opérateurs de création et d'annihilation

- de photons 35, 123, 296, 383
- relations de commutation 123, 173, 383, 393
- équation d'évolution 181, 220, 251e, 422
- de photons scalaires 383, 388, 393, 445e, 448e
- opérateurs a_μ et $\bar{a}_\mu$ 393
- opérateurs a_d et a_g 396, 431
- d'électrons et de positrons 416, 435
- relations d'anticommutation 165e, 416
- (voir aussi développement en a et a^+ , opérateurs de translation)

Opérateurs de translation

- pour la position d'une particule 278
- pour l'impulsion d'une particule 307
- générateurs infinitésimaux 165e, 201, 385, 419
- pour les opérateurs a et a^+ 197, 310
- pour les opérateurs a et $\bar{a}$ 406, 427, 448e

Ordre

- normal 187, 197, 239e
- antinormal 239e

P**Paires (électron-positron) 125, 415, 419****Parseval-Plancherel (identité de) 13****Particules**

(voir champ de matière, hamiltonien, moment conjugué)

Pauli

- matrices de 412, 439
- principe d'exclusion de 165e, 415, 418
- hamiltonien de 434
- (voir aussi transformation de Pauli-Fierz-Kramers)

Périodiques (conditions aux limites) 33**Phase**

- d'un mode du champ électromagnétique 210, 214, 245e
- du champ de matière et invariance de jauge 169e, 451e

Photodétection (signaux de)

- signaux de comptage simple 186, 190, 208, 209, 216

- signaux de comptage double 187, 208, 211, 216

(voir aussi interférences)

Photon(s)

- comme excitation élémentaire du champ de rayonnement quantifié 32, 189

- opérateur nombre de 189

- fonction d'onde dans l'espace réciproque 32

- non existence d'un opérateur position 32, 52, 190

- transverses 188, 387,

- longitudinaux et scalaires 387, 394, 405, 427, 432, 445e, 448e

- états à un photon 189, 207, 210, 212, 387

(voir Bose-Einstein, états du champ de rayonnement, interférences, matrice S, onde-corpuscule, opérateurs de création et d'annihilation, vide)

Physiques (états) 386, 396, 398, 407, 425, 432, 445e

(voir aussi condition supplémentaire, grandeur physique, signification physique)

Planck 3

Poincaré (jauge de) 333, 335

Poisson

- équation de 12, 347e

- crochets de 88

Polarisation

- densité de 283, 294, 310, 330

- courant de 286

Polarisation du rayonnement

- vecteur polarisation 27, 378

- somme sur les polarisations transverses 38

Position (opérateur)

- pour les particules 35, 120, 265

- dans le point de vue de Henneberger 278, 347e

(voir aussi opérateurs de translation, photon)

Positive

- composante de fréquence 31, 186, 424

- états d'énergie 414

Positron 410, 415

Potentiels électromagnétiques

- définition et transformation de jauge 11

- quadrivecteur potentiel 12, 366, 378

- équation d'évolution 11, 12, 368, 369

- retardés 68e

- relations de commutation covariantes 384

- valeur moyenne dans la métrique indéfinie 398, 408

(voir aussi libres et les rubriques jauge)

Potentiel scalaire

- absence de moment conjugué pour le lagrangien standard 112, 364

- élimination du lagrangien standard 113

- en jauge de Coulomb 18, 24, 69e

- en jauge de Poincaré 335

- moment conjugué en jauge de Lorentz 371

- antihermiticité dans la jauge de Lorentz 394

(voir aussi développement)

Potentiel vecteur longitudinal

- en jauge de Coulomb 18, 115

- en jauge de Poincaré 334

- en jauge de Lorentz 24

Potentiel vecteur transverse

- invariance de jauge 19

- relations de commutation 121, 122, 225, 232e

- moment conjugué 117, 291

(voir aussi développement, instantané, non-localité)

Power

(voir transformation de Power-Zienau-Woolley)

Principe de moindre action 81, 83

Probabilité de transition (par unité de temps) 325

Processus

(voir absorption, diffusion, émission, matrice S, multiphotoniques, non-résonnants, résonnants)

Produit scalaire

- dans un espace de Hilbert 389
- avec une métrique indéfinie 389, 397, 447e

Q

Quadrivecteur

- potentiel 12, 366, 378
- courant 12, 367, 413
- impulsion-énergie du champ 381

Quadrupolaires électriques (moment et interaction) 290

Quantification (généralités)

- canonique 36, 91, 260, 382
- d'un champ réel 96, 150e
- d'un champ complexe 100, 101, 163e
- avec des anticommutateurs 100, 164e, 455e
- seconde quantification 416, 441 (voir aussi champ de matière)

Quantification du champ électromagnétique

- méthodes de 35, 36
- approche élémentaire 35
- canonique en jauge de Coulomb 120, 146
- canonique dans le point de vue de Power-Zienau-Woolley 295
- covariante en jauge de Lorentz 382, 385, 389, 393

Quantité de mouvement 22, 179, 273, 292

Quasi-classiques (états du champ)

- définition 194
- propriétés 196, 449e
- interférences avec 209, 211
- représentation graphique 244e
- produits par des sources extérieures 219, 406 (voir aussi photodétection, quasi-probabilité)

Quasi-probabilité (densité de)

- adaptée à l'ordre normal 197, 208, 213, 238e, 252e
- adaptée à l'ordre antinormal 238e, 252e

R

Raman (diffusion) 328

Rayleigh (diffusion) 77e, 200, 328

Rayonnement

- réaction de 70e, 76e
- d'un dipôle oscillant 73e, 354e (voir aussi champ, hamiltonien, transverse)

Réaction de rayonnement 70e, 76e

Réciproque

- espace 13, 38
- demi-espace 104

Redondance (des variables dynamiques) 111, 115, 156e, 159e, 364

Règles de sélection 201, 235e

Règle d'or de Fermi 325

Relativiste(s)

- description relativiste des particules classiques 109
- champ de Dirac 368, 410, 416, 435, 453e, 456e
- modes 125 (voir aussi covariantes, électrodynamique quantique, lagrangiens covariants)

Réponse linéaire 223, 354e

Représentation P 197, 208, 213, 238e, 252e

Résonnant

- processus résonnants 318, 328, 351e
- diffusion résonnante 77e

Retardé

- potentiel 68e
- champ 23, 312, 332 (voir aussi instantané)

S

Scalaire (voir potentiel, photon, produit)

Schrödinger

- équation de 91, 159e, 169e, 178, 263, 265
- point de vue de 91, 178, 221
- lagrangien et hamiltonien du champ de 159e, 169e
- quantification du champ de 163e

Schwarzschild 81

Section efficace de diffusion 76e, 348e

Signification physique des opérateurs

- généralités 261, 271
- dans le point de vue de Göppert-Mayer 273, 308, 312
- dans le point de vue de Henneberger 279, 347e
- dans le point de vue de Power-Zienau-Woolley 292, 296

Spin

- moment magnétique de 46, 199, 441
- théorème spin-statistique 101

Spineur

- à deux composantes (de Pauli) 436
- de Dirac 412, 414, 435

Soudain (branchement d'un potentiel) 266, 338e

Sources (classiques ou extérieures) (voir extérieur)

Susceptibilité linéaire 223, 354e

Symétries

- du lagrangien standard 107
- et lois de conservation 136

T

Thomson (diffusion) 77e, 200

Transformation

- des vitesses et des impulsions dans un changement de coordonnées 87
- de Göppert-Mayer 271, 306
- de Henneberger 277, 346e, 351e
- de Pauli-Fierz-Kramers 280, 431
- de Power-Zienau-Woolley 282, 288, 330, 333
- de la jauge de Lorentz à la jauge de Coulomb 65e, 427
- du vecteur d'état 263, 265, 270 (voir aussi grandeur physique, hamil-

tonien, lagrangien, unitaire et les diverses rubriques jauge)

Translation (voir opérateurs de)

Transverse

- champ vectoriel 15, 39, 52
- champ électrique 23, 26, 29, 34, 66e, 119, 173, 289, 297, 312
- champ magnétique 23, 26, 29, 34, 44, 120, 173
- potentiel vecteur 19, 121, 173, 225, 296, 379, 398
- induction électrique 285, 293, 297, 312
- énergie, impulsion et moment cinétique du champ transverse 20, 21, 22, 29, 49, 50, 176, 314
- équations du mouvement des champs transverses 23
- base de fonctions vectorielles transverses 27, 39, 55
- projecteur sur sous-espace 40
- somme sur les polarisations transverses 38
- relations de commutation pour les champs transverses 121, 225, 232e (voir aussi delta transverse, développement, instantané, non-localité, photons)

Trous (théorie des) 415

U

Unitaire (transformation)

- associée à une transformation de jauge 270, 273
- associée à un changement de lagrangien 262, 264, 298
- sur l'hamiltonien 264, 278, 306, 345e (voir aussi opérateurs de translation)

V

Valeur moyenne (dans la métrique indéfinie) 391, 398, 400, 408

Variables dynamiques

- pour un système discret 83
- pour un champ 92

- complexes 89, 92
- changement de (dans le lagrangien) 86
- changement de (dans l'hamiltonien) 88, 262
- canoniquement conjuguées 35, 88, 95, 259, 260, 371
- redondantes 111, 115, 156e, 159e, 364

Variables normales du rayonnement

- définition et expression 25, 27, 31, 373
 - discrétisation 33
 - équations d'évolution 26, 28, 34, 68e, 221, 373, 374
 - analogie avec une fonction d'onde 32
 - transverses 27, 31, 376
 - quantification 35, 173
 - longitudinales et scalaires 374, 376, 381
 - variables α_d et α_g 377, 378, 380
 - condition supplémentaire de Lorentz 376
- (voir aussi développements en variables normales)

Vide 188, 191, 254e, 387, 388, 396
(voir aussi fluctuations du vide)

Vitesses généralisées
(transformation des) 87

Vitesse des particules

- en jauge de Coulomb 119, 179.
- dans le point de vue de Göppert-Mayer 273, 308
- dans le point de vue de Henneberger 279
- dans le point de vue de Power-Zienau-Woolley 292, 297

W

Woolley (voir transformation de Power-Zienau-Woolley)

Z

Zienau (voir transformation de Power-Zienau-Woolley)

Cette page est laissée intentionnellement en blanc.

Collection « **Savoirs Actuels** »

Directeur : Michèle Leduc

Physique

- *Analyse continue par ondelettes*, B. Torrèsani
- *Des phénomènes critiques aux champs de jauge. Une introduction aux méthodes et aux applications de la théorie quantique des champs*, M. Le Bellac
- *Gravitation relativiste*, R. Hakim
- *Magnétisme et supraconductivité*, L.P. Lévy
- *Photons et atomes – Introduction à l'électrodynamique quantique*, C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg
- *Physique des plasmas* (tome 1 et tome 2), A. Bers, J.-L. Delcroix
- *Processus d'interaction entre photons et atomes*, C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg
- *Théorie des formes de croissance – Digitations, dendrites et flammes*, P. Pelcé
- *Théorie statistique des champs* (tome 1 et tome 2), J.-M. Drouffe, C. Itzykson

Chimie

- *Aspects de la chimie des composés macrocycliques*, B. Dietrich, J.-M. Lehn, P. Viout
- *Chimie moléculaire et supramoléculaire des sucres – Introduction chimique aux glycosciences*, S. David
- *De la solution à l'oxyde – Condensation des cations en solution aqueuse. Chimie de surface des oxydes*, J.-P. Jolivet avec le concours de M. Henry et J. Livage
- *Éléments de chimie quantique à l'usage des chimistes*, J.-L. Rivail
- *Liaisons intermoléculaires – Les forces en jeu dans la matière condensée*, A. Gerschel
- *Orbitales frontières*, Nguyễn Trong Anh
- *Synthèse et catalyse asymétriques – Auxiliaires et ligands chiraux*, J. Seyden-Penne

Astrophysique

- *Les Étoiles*, F. Praderie, E. Schatzman
- *Galaxies et cosmologie*, A. Blanchard, P. Boissé, F. Combes, A. Mazure
- *Méthodes physiques de l'observation*,
P. Léna avec le concours de F. Lebrun et F. Mignard

Mathématiques

- *Géométrie algébrique – Une introduction*, D. Perrin
- *Groupes quantiques – Introduction au point de vue formel*, A. Guichardet
- *Opérateurs pseudo-différentiels et théorème de Nash-Moser*,
S. Alinhac, P. Gérard
- *Théorie des fonctions holomorphes de plusieurs variables*,
Ch. Laurent-Thiébaud