

A. Résumé du cours 1982-83

Un atome, placé dans un faisceau lumineux, subit de la part de ce dernier divers types de forces qu'on appelle des forces radiatives. Le cours de cette année a été consacré à une étude des propriétés de ces forces et à leur interprétation en termes d'échanges d'impulsion entre atomes et photons.

Plusieurs raisons expliquent l'intérêt actuellement porté aux forces radiatives. L'analyse du mouvement d'un atome dans une onde lumineuse soulève tout d'abord un certain nombre de problèmes théoriques intéressants (corrélations entre les degrés de liberté internes et les degrés de liberté de translation, diffusion d'impulsion liée aux fluctuations des forces radiatives...). L'utilisation de ces forces, rendue plus aisée grâce au développement des sources laser, constitue par ailleurs un nouveau moyen d'action sur les atomes, ouvrant des perspectives intéressantes dans de nombreux domaines (piégeage et refroidissement radiatifs, spectroscopie à très haute résolution...).

Plusieurs approches possibles au problème des forces radiatives ont été présentées dans le cours, par ordre de complexité croissante.

APPROCHE CLASSIQUE

Le faisceau lumineux est décrit par une onde électromagnétique classique, de fréquence (angulaire) ω , et dont l'amplitude ξ_0 et la phase Φ

varient d'un point à l'autre de l'espace. Cette onde met en mouvement d'oscillation forcée les électrons d'un atome, faisant ainsi apparaître un moment dipolaire électrique oscillant à la même fréquence ω que l'onde. Dans cette première approche, le dipôle atomique est traité simplement comme un dipôle classique. Enfin, le centre de masse de l'atome est supposé initialement immobile.

Les deux types de forces

On part de l'expression de la force de Lorentz exercée par les champs électrique et magnétique de l'onde incidente sur les constituants de l'atome. L'atome étant globalement neutre, la force électrique fait intervenir le dipôle atomique et le gradient du champ électrique. L'expression de la force magnétique est transformée par utilisation des équations de Maxwell. Finalement, la force totale est moyennée sur une période $2\pi/\omega$ de l'onde lumineuse car, seule cette force moyenne "séculaire" a un effet cumulatif.

Un calcul simple permet alors de séparer la force séculaire agissant sur l'atome en deux composantes.

- Une force \vec{F}_1 , proportionnelle au gradient de phase de l'onde lumineuse et à la composante du dipôle oscillant en quadrature avec l'onde.
- Une force \vec{F}_2 , proportionnelle au gradient d'amplitude de l'onde et à la composante du dipôle en phase avec l'onde.

Si l'onde lumineuse est une onde plane, le gradient d'amplitude est nul, et \vec{F}_1 est la seule force présente. Si l'onde lumineuse est une onde stationnaire, la phase est nulle, et c'est \vec{F}_2 qui est alors non nulle.

Interprétation en termes de diffusion et de redistribution de photons

L'interprétation physique des résultats précédents repose sur une analyse des échanges d'énergie et d'impulsion entre l'atome et l'onde lumineuse.

On commence par évaluer le travail moyen effectué par la force de Lorentz sur les constituants de l'atome, ce qui permet de relier l'énergie incidente absorbée par l'atome par unité de temps à la composante du dipôle en quadrature avec le champ.

Si l'onde lumineuse est une onde plane, de vecteur d'onde \vec{k} et de fréquence ω , les photons qui lui sont associés ont chacun une énergie $\hbar\omega$ et une impulsion $\hbar\vec{k}$. La force radiative (qui se réduit à \vec{F}_1 pour une onde plane) est alors reliée directement à l'impulsion gagnée par l'atome par unité de temps lors de l'absorption des photons incidents. En fait, ces photons absorbés sont ensuite réémis spontanément dans toutes les directions de l'espace, mais l'impulsion reperdue est alors nulle en moyenne, car l'émission spontanée se produit avec des probabilités égales dans deux directions opposées. La force \vec{F}_1 apparaît donc comme une *force de diffusion*, l'atome faisant passer des photons du "mode initialement non vide" du champ (onde plane incidente) vers les autres modes initialement vides.

La force \vec{F}_2 n'est non nulle que si l'onde incidente est la superposition linéaire d'au moins deux ondes planes 1 et 2, de même fréquence ($\omega_1 = \omega_2 = \omega$), mais de vecteurs d'onde différents ($\vec{k}_1 \neq \vec{k}_2$), de manière à avoir un gradient d'amplitude non nul. Plusieurs modes du champ (au moins deux) sont alors initialement non vides. L'analyse des échanges d'impulsion montre dans ce cas que la force \vec{F}_2 est une force de redistribution : l'atome absorbe un photon dans un mode initialement non vide 1, et le réémet de manière stimulée dans un autre mode initialement non vide 2. Globalement, l'énergie du champ ne change pas, car $\omega_1 = \omega_2$, mais, comme $\vec{k}_1 \neq \vec{k}_2$, le champ perd l'impulsion $\hbar(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)$ qui est gagnée par l'atome. L'importance du déphasage entre les deux ondes 1 et 2 au point où se trouve l'atome est soulignée, car le sens de la redistribution ($1 \rightarrow 2$ ou $2 \rightarrow 1$) en dépend.

Application à un électron libre dans une onde lumineuse

Les notions précédentes sont appliquées ensuite à l'exemple simple d'un électron libre évoluant dans une onde lumineuse.

Le mouvement d'oscillation rapide de l'électron dans l'onde lumineuse est calculé au moyen de *l'équation de Abraham-Lorentz*, l'amortissement de l'électron étant décrit dans cette équation par le terme de réaction de rayonnement (interaction de l'électron avec son champ propre). La résolution de cette équation donne les composantes en quadrature et en phase du mouvement d'oscillation de l'électron que l'on reporte ensuite dans les expressions de \vec{F}_1 et \vec{F}_2 .

La force \vec{F}_1 apparaît comme étant liée à la *diffusion Thomson* des photons incidents par l'électron, la *pression de radiation* correspondante étant proportionnelle à l'intensité lumineuse.

La force \vec{F}_2 , quant à elle, *dérive d'une énergie potentielle* qui n'est autre que *l'énergie cinétique moyenne de vibration* de l'électron dans l'onde lumineuse. La force \vec{F}_2 , appelée encore *force pondéromotrice*, repousse donc l'électron hors des régions de haute intensité lumineuse.

Les ordres de grandeur de ces deux forces sont enfin discutés ainsi que les phénomènes observables avec des impulsions laser.

APPROCHE SEMI-CLASSIQUE

Le problème des forces radiatives est repris à partir des équations quantiques d'évolution des variables atomiques, l'onde lumineuse continuant elle à être traitée classiquement.

Théorème d'Ehrenfest et équations de Bloch optiques

Les équations de Heisenberg décrivant l'évolution des *opérateurs* atomiques externes (position et impulsion du centre de masse) et internes (dipôle électriques) sont déduites de l'hamiltonien donnant l'énergie de l'atome dans l'onde lumineuse.

Pour obtenir la force radiative moyenne agissant sur l'atome, on prend alors la *valeur moyenne*, dans l'état quantique atomique, des équations de Heisenberg relatives au centre de masse (Théorème d'Ehrenfest). L'expression classique de la force radiative obtenue plus haut est alors retrouvée moyennant certaines conditions qui sont précisées.

- Le paquet d'ondes atomique initial doit avoir ses dimensions petites devant la longueur d'onde lumineuse.
- La *largeur naturelle* $\hbar\Gamma$ de l'état excité e (Γ étant l'inverse, $1/\tau$, de la durée de vie radiative τ de e) doit être grande devant *l'énergie de recul*, $E_{rec} = \hbar^2 k^2 / 2M$, de l'atome (de masse M) lors de l'émission ou de l'absorption d'un photon. Cette dernière condition, largement réalisée pour la plupart des transitions optiques permises, exprime que les variables internes ont un temps d'amortissement beaucoup plus court que les temps d'évolution caractéristiques des variables externes.

Les équations d'évolution des valeurs moyennes du dipôle d'un atome à deux niveaux sont enfin établies, l'effet de l'émission spontanée étant rajouté dans ces équations de manières phénoménologiques. On obtient ainsi les "équations de Bloch optiques". Une représentation géométrique en termes de spin fictif permet de préciser l'analogie très étroite qui existe entre ces équations et celles décrivant l'évolution d'un spin $1/2$ interagissant avec un champ de radiofréquence.

Pression de radiation et forces dipolaire pour un atome à deux niveaux initialement immobile.

La solution stationnaire des équations de Bloch optiques pour un atome à deux niveaux, initialement immobile dans une onde monochromatique, est calculée, puis reportée dans les expressions de \vec{F}_1 et \vec{F}_2 . Les résultats obtenus sont alors discutés en fonction des divers paramètres physiques du problème : fréquence de Rabi $\omega_1 = -d\xi_0 / \hbar$ caractérisant le couplage entre le dipôle atomique d et l'amplitude ξ_0 de l'onde lumineuse, désaccord $\delta = \omega - \omega_0$ entre la fréquence ω de l'onde et la fréquence atomique ω_0 largeur naturelle Γ de l'état excité e .

La force \vec{F}_1 est liée à la diffusion résonante des photons incidents par l'atome. Elle est maximale à résonance, et varie avec $\delta = \omega - \omega_0$ comme une courbe d'absorption de Lorentz. Elle est proportionnelle à l'intensité lumineuse I à basse intensité et tend vers une limite $\hbar \vec{k} \Gamma / 2$, indépendante de I , quand I tend vers l'infini.

La force \vec{F}_2 dérive d'un potentiel et est dirigée suivant le gradient de l'intensité lumineuse. Sa variation avec $\omega - \omega_0$ est celle d'une courbe de dispersion. Si $\omega > \omega_0$, \vec{F}_2 repousse l'atome hors des régions de forte intensité. Si $\omega < \omega_0$, \vec{F}_2 attire au contraire l'atome vers ces régions.

Les ordres de grandeur de \vec{F}_1 et \vec{F}_2 sont enfin discutés et comparés avec ceux trouvés plus haut pour un électron libre.

Dépendance en vitesse des forces radiatives.

Le calcul des forces radiatives est repris en supposant maintenant que l'atome a une vitesse initiale non nulle \vec{v}_0 .

Dans le cas où l'onde lumineuse est une onde plane, les résultats obtenus s'interprètent simplement en termes d'effet Doppler. Suivant sa vitesse, l'atome est plus ou moins en résonance avec l'onde, et la force est plus ou moins grande.

Dans le cas d'une onde stationnaire, les problèmes sont plus complexes. Les déplacements Doppler des deux ondes planes formant l'onde stationnaire ont des signes opposés, et des processus multiphotoniques résonnants appa-

raissent lorsque le désaccord δ est égal à un nombre impair de fois le déplacement Doppler $k v_0$: $\delta = (2n + 1)k v_0$. L'atome peut passer du niveau inférieur f au niveau supérieur e en absorbant $n+1$ photons d'une onde et en émettant de manière stimulée n photons dans l'autre. Il retombe enfin dans l'état fondamental par émission spontanée. Apparaissent ainsi des forces radiatives d'un type nouveau, faisant intervenir à la fois une redistribution et une diffusion. Un traitement qualitatif de ces forces est présenté (utilisant l'analogie mentionnée plus haut avec le problème de la résonance magnétique), de même qu'un traitement quantitatif basé sur la théorie des perturbations et la méthode des fractions continues.

La limite des faibles vitesses fait l'objet d'une étude spéciale. L'objectif du calcul est de déterminer si la force linéaire en v_0 amortit le mouvement atomique (*force de friction* intéressante pour réaliser un *refroidissement radiatif*), ou au contraire l'amplifie (échauffement).

On montre que, pour une onde plane, la force linéaire en v_0 est une force de friction si $\omega < \omega_0$, et on détermine les conditions pour lesquelles cette force de friction est maximale.

La force d'ordre zéro en v_0 est cependant toujours non nulle pour une onde plane, et il semble plus intéressant d'utiliser une onde stationnaire pour avoir une force de friction pure (sans terme d'ordre zéro en v_0). Un tel calcul est présenté à partir d'une résolution approchée des équations de Bloch optiques utilisant la première correction par rapport à l'approximation adiabatique. Le résultat du calcul indique que le signe de la force change à haute intensité, et d'autres schémas possibles, permettant d'éviter un tel changement de signe, sont alors présentés.

EFFETS PHYSIQUES LIES AU CARACTERE QUANTIQUE DES VARIABLES ATOMIQUES

La dernière partie du cours est consacrée à l'étude d'un certain nombre d'effets quantiques atomiques. Au lieu de considérer uniquement l'évolution du centre du paquet d'ondes, on s'intéresse maintenant à *l'évolution du paquet d'ondes tout entier*.

Afin de concentrer la discussion sur les effets quantiques atomiques, l'émission spontanée est négligée, ce qui est valable si le temps d'interaction T est court devant la durée de vie radiative τ . L'état atomique peut alors être décrit par une fonction d'onde à deux composantes, représentant l'amplitude de probabilité de trouver l'atome au point \vec{r} dans l'état e ou f.

Effet Stern et Gerlach optique

L'équation de Schrödinger décrivant l'évolution de la fonction d'onde à deux composantes est formellement tout à fait analogue à celle d'une particule de masse M , de spin $1/2$, évoluant dans un champ magnétique statique inhomogène, dont l'amplitude et la direction varient d'un point à l'autre de l'espace.

Cette analogie permet de comprendre aisément que le paquet d'ondes associé à un atome en mouvement dans une onde lumineuse puisse, dans certaines conditions, se *dédoubler* en deux paquets d'ondes différents –comme dans l'effet Stern et Gerlach ordinaire).

Plusieurs situations susceptibles de donner naissance à un effet Stern et Gerlach optique sont envisagées, et les ordres de grandeur des séparations spatiales entre les deux paquets d'ondes évalués. Le problème de l'entrée de l'atome dans un faisceau lumineux est enfin examiné dans deux situations extrêmes : la limite adiabatique où le paquet d'ondes ne se dédouble pas, la limite non adiabatique où il se dédouble.

Diffraction d'une onde de de Broglie par un faisceau lumineux

Dans une expérience de diffraction usuelle, une onde lumineuse est diffractée par un réseau matériel. On décrit ici la situation inverse où c'est une onde de matière qui est diffractée par un réseau lumineux.

Le déphasage subi par l'onde de de Broglie) la traversée d'une onde lumineuse progressive ou stationnaire est calculé à partir de l'équation de Schrödinger. La transformée de Fourier spatiale de la fonction d'onde après la traversée du faisceau lumineux permet alors de déterminer la distribution finale d'impulsion de l'atome.

Les résultats obtenus sont interprétés à la fois en termes corpusculaires (échanges d'impulsion entre atomes et photons) et en termes ondulatoires (diffraction de Bragg de l'onde de de Broglie).

Le lien avec *l'effet Kapitza-Dirac*, observable sur des électrons libres diffractés par une onde lumineuse stationnaire est enfin discuté.

B - Rappel de quelques formules importantes

Onde lumineuse (polarisé suivant Oz)

$$\vec{E}_z(\vec{r}, t) = \vec{E}_0(\vec{r}) \cos[\omega t + \phi(\vec{r})] = \vec{E}^{(+)}(\vec{r}) e^{-i\omega t} + \vec{E}^{(-)}(\vec{r}) e^{i\omega t}$$

$$\vec{E}^{(+)}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \vec{E}_0(\vec{r}) e^{-i\phi(\vec{r})} = [\vec{E}^{(-)}(\vec{r})]$$

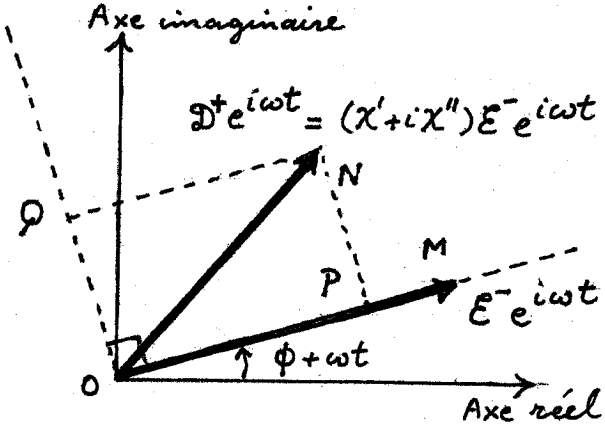
Onde plane $\vec{E}_0 \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})$ $\vec{E}_0(\vec{r}) = \vec{E}_0$ $\phi(\vec{r}) = -\vec{k} \cdot \vec{r}$
 Onde stationnaire $\vec{E}_0 \cos \vec{k} \cdot \vec{r} \cos \omega t$ $\vec{E}_0(\vec{r}) = \vec{E}_0 \cos \vec{k} \cdot \vec{r}$ $\phi(\vec{r}) = 0$

Moment dipolaire électrique induit D

- Oscille à ω , le long de Oz, autour du centre R de l'atome supposé initialement immobile

$$\vec{D}(t) = \vec{D}^+ e^{i\omega t} + \vec{D}^- e^{-i\omega t}$$

- Composantes de D en phase et en quadrature avec E



$$\overline{OM} = \frac{E_0}{2}$$

$$\overline{OP} = D_{\text{phase}} = \chi' \overline{OM} = \chi' \frac{E_0}{2}$$

$$OP = D_{\text{quadr}} = \chi'' \overline{OM} = \chi'' \frac{E_0}{2}$$

Possibilité de non linéarité (χ' et χ'' dépendant de E_0^2)

Force de Lorentz "séculaire" $\vec{F} = \vec{D}^+ \vec{\nabla} E^+ + \vec{D}^- \vec{\nabla} E^-$

Les 2 types de forces

$$\begin{cases} \vec{F}_1 = D_{\text{quadr}} \vec{\nabla} E_0 \phi & \leftarrow \text{nulle pour une onde station.} \\ \vec{F}_2 = D_{\text{phase}} \vec{\nabla} E_0 & \leftarrow \text{nulle pour une onde plane} \end{cases}$$

Absorption d'énergie par le dipole

- Energie moyenne incidente absorbée par unité de temps

$$\frac{dW}{dt} = -\omega E_0 D_{\text{quadr}} \text{avance}$$

- Nombre moyen de photons incidents absorbés par unité de temps

$$\frac{dN}{dt} = \frac{1}{\hbar \omega} \frac{dW}{dt} = -\frac{E_0}{\hbar} D_{\text{quadr}} \text{avance}$$

Interprétation de \vec{F}_1 en termes de photons

$\vec{F}_1 = (-\hbar \nabla \phi) \frac{dN}{dt} = \hbar \vec{k} \frac{dN}{dt}$ pour une onde plane (car $\phi = -\vec{k} \cdot \vec{r}$)

\vec{F}_1 : impulsion des photons absorbés par unité de temps
 (impulsion reperdue par émission spontanée nulle en moyenne)

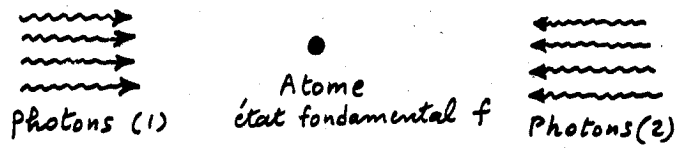


Bilan d'impulsions non nul lors du cycle
 Absorption dirigée + émission spontanée "isotrope"

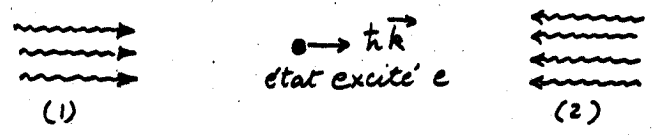
Interprétation de \vec{F}_2 en termes de photons

- Nécessité de superposer plusieurs ondes planes de \vec{k} différents pour avoir $\nabla E_0 \neq \vec{0}$
- Exemple simple de 2 ondes planes \vec{k} et $-\vec{k}$
 \vec{F}_2 résulte d'une redistribution des photons entre les 2 ondes

Etat initial

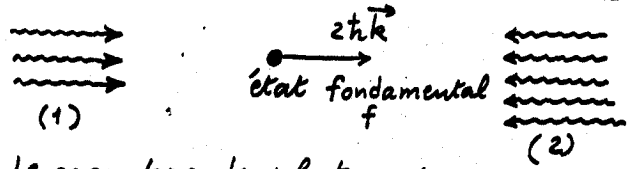


Absorption d'un photon (1)



L'atome passe dans l'état excité e et gagne l'impulsion $\hbar \vec{k}$

Emission stimulée d'un photon (2)



Le nombre de photons (2) augmente d'une unité, l'atome retombe dans f et gagne encore $\hbar \vec{k}$

Bilan d'impulsion non nul lors du cycle

Absorption dirigée dans une onde + émission stimulée dirigée dans une autre onde

- Redistribution cohérente sensible aux relations de phase entre les 2 ondes

Application à un électron libre

- Calcul du dipole induit $\vec{D} = q \vec{r}$ à partir de l'équation de Abraham-Lorentz

$$m \ddot{\vec{r}} = \frac{2}{3} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 c^3} \ddot{\vec{r}} + q \vec{E}(\vec{R}, t)$$

- Expression de \vec{F}_1 . Pression de radiation liée à la diffusion Thomson

$$\vec{F}_1 = \underbrace{\frac{8\pi}{3} r_0^2}_{\text{Section efficace Thomson}} \times \underbrace{\frac{F_{inc}}{\hbar \omega}}_{\text{Flux incident de photons}} \times \underbrace{\hbar \vec{k}}_{\text{Impulsion de chaque photon}}$$

$$r_0 = \frac{q^2}{4\pi \epsilon_0} \frac{1}{mc^2} = \text{rayon classique de } e^-$$

$$F_{inc} = \epsilon_0 c E_0^2 / 2 = \text{Flux incident d'énergie}$$

- Expression de \vec{F}_2 . Force pondéromotrice

$$\vec{F}_2 = -\vec{\nabla} \bar{E}_{vibr}(\vec{R})$$

$$\bar{E}_{vibr}(\vec{R}) = \frac{q^2 E_0^2(\vec{R})}{4m\omega^2} = \text{énergie cinétique moyenne de vibration de l'électron dans l'onde incidente}$$

Hamiltonien semiclassique

$$H = \underbrace{\frac{\vec{P}^2}{2M}}_{\text{①}} + \underbrace{h_A}_{\text{②}} - \underbrace{\sum_j D_j E_j(\vec{R}, t)}_{\text{③}}$$

- ① : Energie cinétique du centre de masse (position \vec{R} , impulsion \vec{P} , masse M)
- ② : Energie des degrés de liberté internes de l'atome (dans le système du centre de masse)
- ③ : Energie d'interaction entre
 - l'opérateur moment dipolaire électrique \vec{D} de l'atome
 - le champ \vec{E} de l'onde (classique) incidente évalué en \vec{R} ($a_0 \ll \lambda$)

Il manque l'interaction avec les modes vides du champ quantifié (responsable de l'émission spontanée), et l'hamiltonien du champ quantifié

Equations de Heisenberg pour \vec{R} et \vec{P}

$$\dot{\vec{R}} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{R}, H] = \vec{\nabla}_{\vec{P}} H = \frac{1}{M} \vec{P}$$

$$\dot{\vec{P}} = M \ddot{\vec{R}} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{P}, H] = -\vec{\nabla}_{\vec{R}} H = \sum_j D_j \vec{\nabla} E_j$$

Evolution des valeurs moyennes : Théorème d'Ehrenfest

$$\dot{\vec{R}}(t) = \langle \dot{\vec{R}}(t) \rangle \quad \dot{\vec{D}}(t) = \langle \dot{\vec{D}}(t) \rangle$$

$$M \ddot{\vec{R}}(t) = \sum_j \langle D_j(t) \vec{\nabla} E_j(\vec{R}(t), t) \rangle$$

Peut-on au 2^{ème} membre de cette équation

- négliger les corrélations entre $\vec{D}(t)$ et $\vec{R}(t)$?
 $\langle D_j(t) \vec{\nabla} E_j(\vec{R}(t), t) \rangle \rightarrow \langle D_j(t) \rangle \langle \vec{\nabla} E_j(\vec{R}(t), t) \rangle$
- remplacer \vec{R} par $\bar{\vec{R}}$ dans $\langle \vec{\nabla} E_j(\vec{R}(t), t) \rangle$?

La réponse est oui si

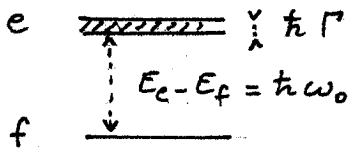
- dimensions du paquet d'ondes atomique $\ll \lambda$
- $\hbar \Gamma$, largeur naturelle de l'état excité $\gg E_{excit} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}$

Temps évolution variables internes \ll Temps évolution variables externes

On obtient alors le résultat classique

$$M \ddot{\vec{R}}(t) = \vec{F} = \vec{D}^+(t) \vec{\nabla} E^+(\vec{R}(t), t) + \vec{D}^-(t) \vec{\nabla} E^-(\vec{R}(t), t)$$

Atome à 2 niveaux



Γ : largeur naturelle de e

Γ = Probabilité par unité de temps d'émettre spontanément un photon

$\tau_R = \frac{1}{\Gamma}$ = durée de vie radiative de e

$\delta = \omega - \omega_0$: Désaccord entre la fréquence ω du laser et la fréquence atomique ω_0

$d = \langle e | D | f \rangle$: Moment dipolaire de transition

$d E_0(\vec{R})$: Energie caractéristique du couplage atome-champ

$\omega_1(\vec{R}) = -d E_0(\vec{R}) / \hbar$: Fréquence de Rabi

Equations de Bloch optiques

- Equations d'évolution de la matrice densité atomique interne σ

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{ee} & \sigma_{ef} \\ \sigma_{fe} & \sigma_{ff} \end{pmatrix}$$

$$\frac{d}{dt} \sigma = \underbrace{\frac{1}{i\hbar} [H_A, \sigma]}_{\text{Evolution propre}} + \underbrace{\frac{1}{i\hbar} [-\vec{D} \cdot \vec{E}(\vec{R}, t), \sigma]}_{\text{Couplage avec le laser}} + \text{Termes d'amortissement par émission spontanée (phénoménologiques)}$$

- Description phénoménologique de l'émission spontanée

$$\dot{\sigma}_{ee} = -\Gamma \sigma_{ee} \quad \dot{\sigma}_{ff} = \Gamma \sigma_{ee} \quad \dot{\sigma}_{fe} = -\frac{\Gamma}{2} \sigma_{fe} \quad \dot{\sigma}_{ef} = -\frac{\Gamma}{2} \sigma_{ef}$$

- Changement de variables

$$\begin{cases} u(t) = \text{Re } \sigma_{fe}(t) e^{-i[\omega t + \phi(\vec{R}, t)]} \\ v(t) = \text{Im } \sigma_{fe}(t) e^{-i[\omega t + \phi(\vec{R}, t)]} \\ w(t) = \frac{1}{2} [\sigma_{ee}(t) - \sigma_{ff}(t)] \end{cases}$$

- Equations d'évolution des vecteurs de Bloch $\{u, v, w\}$

$$\begin{cases} \dot{u} = -\frac{\Gamma}{2} u + (\delta + \dot{\phi}) v \\ \dot{v} = -(\delta + \dot{\phi}) u - \frac{\Gamma}{2} v - \omega_1 w \\ \dot{w} = \omega_1 v - \Gamma (\frac{1}{2} + w) \end{cases}$$

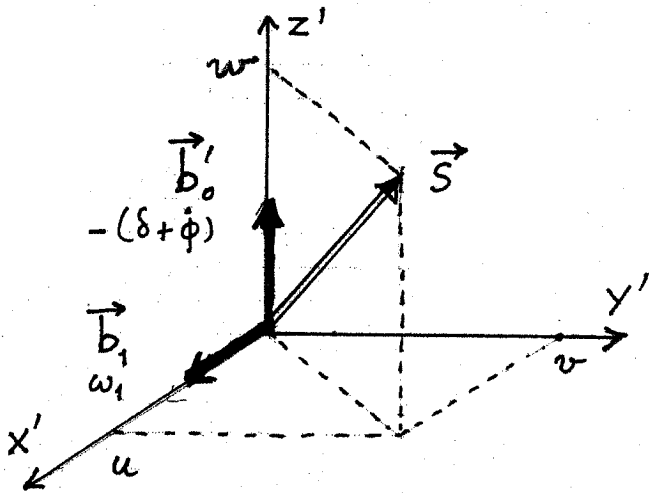
$$\phi = \phi(\vec{R}(t), t) \quad \dot{\phi} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{R} \cdot \vec{\nabla} \phi \quad \omega_1 = -\frac{d E_0(\vec{R}(t), t)}{\hbar}$$

- Equation d'évolution de \vec{R}

$$M \ddot{\vec{R}} = \vec{F}$$

$$\vec{F} = d u \vec{\nabla} E_0 + d v E_0 \vec{\nabla} \phi = -\hbar u \vec{\nabla} \omega_1 - \hbar v \omega_1 \vec{\nabla} \phi$$

Spin fictif \vec{S}



- Précession de Larmor de \vec{S} autour de $\vec{B}'_0 + \vec{B}_1$ (fréquences de Larmor respectivement égales à $-\delta - \dot{\phi}$ et ω_1)

- Relaxation par émission spontanée

$$T_1 = \frac{1}{\Gamma} \text{ pour } w$$

$$T_2 = \frac{2}{\Gamma} \text{ pour } u \text{ et } v$$

Solution stationnaire des équations de Bloch optiques

(pour un atome initialement immobile $\dot{\phi} = 0$)

$$u = \frac{\delta}{\omega_1} \frac{s}{1+s} \quad v = \frac{\Gamma}{2\omega_1} \frac{s}{1+s} \quad w = -\frac{1}{2} \frac{1}{1+s}$$

$$s = \frac{\omega_1^2/2}{\delta^2 + (\Gamma^2/4)} \quad \text{Paramètre de saturation}$$

Expression de la force de diffusion $\vec{F}_1 = -\hbar v \omega_1 \vec{\nabla} \phi$

$$\vec{F}_1 = -\hbar (\vec{\nabla} \phi) \frac{\Gamma}{2} \frac{s}{1+s} = -\hbar (\vec{\nabla} \phi) \frac{\Gamma}{2} \frac{\frac{\omega_1^2}{2}}{(\omega - \omega_0)^2 + \frac{\omega_1^2}{2} + \frac{\Gamma^2}{4}}$$

Pour $s \ll 1$
$$\vec{F}_1 \approx -\hbar (\vec{\nabla} \phi) \frac{\omega_1^2}{2} \frac{\Gamma}{2} \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}$$

Pour $s \gg 1$
$$\vec{F}_1 \approx -\hbar (\vec{\nabla} \phi) \frac{\Gamma}{2}$$

Expression de la force de redistribution $\vec{F}_2 = -\hbar u \vec{\nabla} \omega_1$

$$\vec{F}_2 = -\vec{\nabla} U \quad U = \frac{\hbar \delta}{2} \text{Log}(1+s) = \frac{\hbar \delta}{2} \text{Log} \left[1 + \frac{\frac{\omega_1^2}{2}}{(\omega - \omega_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \right]$$

$$\vec{F}_2 = -\frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{4} \frac{\vec{\nabla} \omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \frac{\omega_1^2}{2} + \frac{\Gamma^2}{4}}$$

Autres notations

$$\vec{\alpha} = \vec{\nabla} \text{Log} |\omega_1(\vec{r})| = \frac{\vec{\nabla} \omega_1}{\omega_1}$$

$$\vec{\beta} = \vec{\nabla} \phi$$

$$\begin{cases} \vec{F}_1 = \hbar \frac{\Gamma}{2} \frac{s}{1+s} \vec{\beta} \\ \vec{F}_2 = -\hbar \delta \frac{s}{1+s} \vec{\alpha} \end{cases}$$

Poursuivre l'étude des forces radiatives en mettant l'accent sur les possibilités ouvertes dans le domaine du refroidissement et du piégeage radiatifs.

- Description de quelques expériences récentes sur la deflexion, le ralentissement et la focalisation de jets atomique irradiés par des faisceaux laser. Mise en évidence des propriétés essentielles des forces de pression de radiation et des forces dipolaires.
- Principes du refroidissement radiatif. Compétitions entre le refroidissement radiatif et l'échauffement dû à la diffusion de l'impulsion atomique. Températures limites pouvant être atteintes. Equations d'évolution de la fonction de distribution de l'impulsion atomique.
- Analogie avec le mouvement brownien. Mouvement brownien dans un puits de potentiel. Energie résiduelle en régime stationnaire. Evolution de la fonction de distribution dans l'espace des phases. Limite des frictions élevées et des frictions faibles.
- Description quantique du mouvement d'un atome dans une onde lumineuse. Equations cinétiques. Equation de Fokker-Planck pour la fonction de Wigner. Origine physique des fluctuations des forces radiatives.
- Pièges radiatifs pour atomes neutres. Probabilité de fuite hors du puits de potentiel. Conditions de stabilité.

Buts de ce chapitre

- Décrire quelques expériences mettant en évidence les forces \vec{F}_1 et \vec{F}_2 introduites dans le chapitre précédent.
- Discuter quelques applications possibles de ces forces, comme le refroidissement et le piégeage d'atomes neutres (les limitations dues aux fluctuations des forces seront abordées dans le chapitre suivant)

A - Propriétés importantes de la force \vec{F}_1 (pression de radiation résonnante)

$$\vec{F}_1 = \hbar \vec{k} \frac{\Gamma}{2} \frac{\frac{\omega_1^2}{2}}{(\omega - \omega_0)^2 + \frac{\omega_1^2}{2} + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (2.1)$$

1. Caractéristiques

- Maximale à résonance : forme d'absorption de Lorentz en fonction de $\omega - \omega_0$ (partie dissipative χ'' de la susceptibilité).
- Largeur de la résonance à mi-hauteur : $\sqrt{\Gamma^2 + 2\omega_1^2}$ (2.2)
Élargissement radiatif aux intensités élevées

- Tend vers une limite $\hbar \vec{k} \Gamma / 2$ à haute intensité

Interprétation physique : à haute intensité, égalisation des 2 populations de e et f : $P_e = P_f = \frac{1}{2}$. Nombre de photons émis spontanément par unité de temps = $P_e \Gamma = \frac{1}{2} \Gamma$ = nombre de cycles absorption + émission spontanée / unité de temps

↳ Transfert d'impulsion / unité de temps = $\hbar \vec{k} \frac{\Gamma}{2}$

Force \vec{F}_1 d'autant plus importante que $|\vec{k}|$ est plus grand (longueur d'onde plus courte) et Γ plus grand (force d'oscillation plus élevée).

2. Ordres de grandeur de $(\vec{F}_1)_{\text{limite}}$

- Accélération associée à $(\vec{F}_1)_{\text{limite}}$: $\vec{a} = \frac{(\vec{F}_1)_{\text{limite}}}{M} = \frac{\hbar \vec{k}}{M} \frac{\Gamma}{2}$ (2.3)

- Pour le sodium $\lambda = \frac{2\pi}{k} \approx 6000 \text{ \AA}$ $\tau_R = \frac{1}{\Gamma} = 16 \cdot 10^{-9} \text{ sec}$

Vitesse de recul : $\frac{\hbar k}{M} = 3 \text{ cm/sec}$

↳ $a = 3 \cdot 10^{-2} \frac{1}{2} \frac{10^9}{16} = 10^6 \text{ m/s}^2 = 10^5 \text{ accélération pesanteur}$

3. Applications possibles de \vec{F}_1

- Changement de la direction de la vitesse d'un atome
Déflexion de jets atomiques
- Changement du module de la vitesse d'un atome
Ralentissement (ou accélération) d'un atome
Refroidissement (ou échauffement)

B. Déflexion résonnante d'un jet atomique

II-2

1. Principe de l'expérience

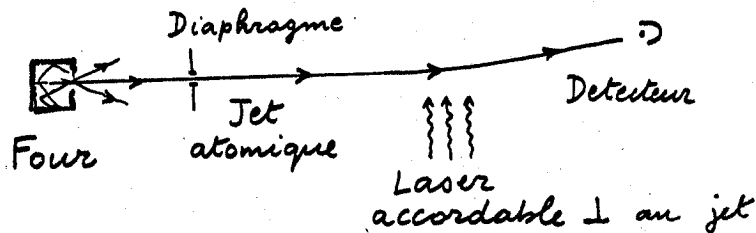


Fig. 1

Toutes les fois que la fréquence ω du laser coïncide avec une fréquence atomique, le jet est dévié. Force "pousse atome".

Etude des variations du signal donné par le détecteur

- en fonction de la fréquence du laser, le détecteur étant fixe
- en fonction de la position du détecteur, la fréquence du laser étant fixe (profil de déflexion).

2. Exemple d'application spectroscopique (voir référence 1)

- Etude de la structure hyperfine de la raie D_1 de Na (Fig. 2)

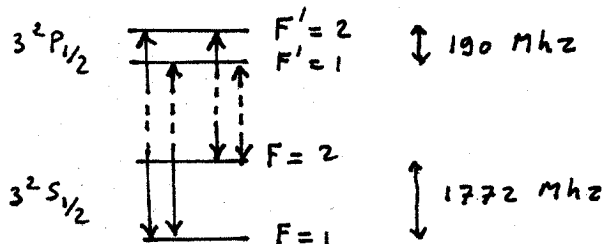


Fig. 2

- Courbe expérimentale obtenue (Fig. 3 extraite de la réf. 1)

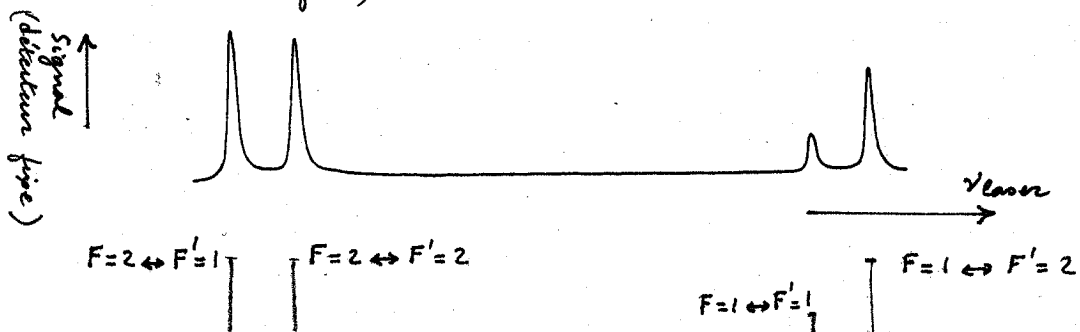


Fig. 3

3. Exemple d'application en séparation isotopique (références 2, 3)

- Principe : Les fréquences de résonance des différents isotopes d'un même élément sont légèrement différentes (déplacement isotopique). En accordant le laser sur un isotope donné, on défléchit surtout cet isotope. Le jet non défléchi est appauvri en cet isotope, le jet défléchi enrichi.

- Etude expérimentale faite sur Ba. Un spectromètre de masse, remplaçant le détecteur de la figure 1, permet de mesurer l'appauvrissement ou l'enrichissement du jet en un isotope donné.

Inconvénient du niveau métastable $6s5d^1D_2$, intermédiaire entre l'état fondamental $6s^2^1S_0$ et l'état excité $6s6p^1P_1$ [voir fig. 4 extraite de la réf. (3)], et dans lequel les atomes absorbent et se trouvent piégés après environ 25 cycles de fluorescence sur 5535 \AA . Recyclage de ces

atomes au moyen d'un 2^{ème} faisceau laser à 5829 Å

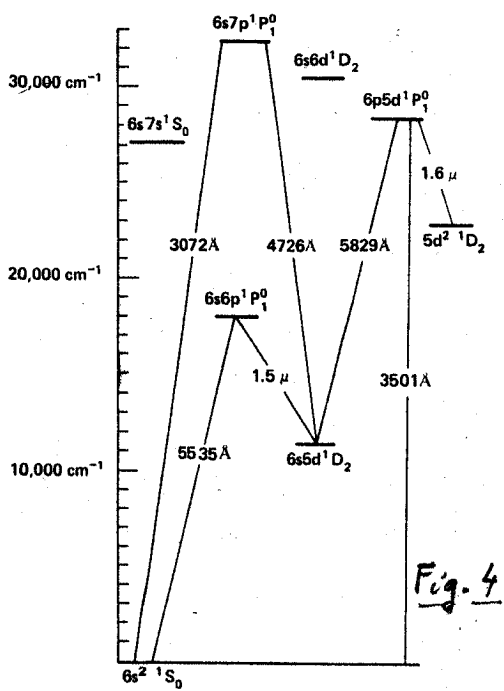
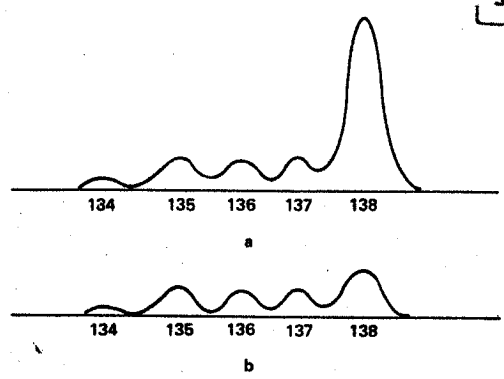


Fig. 4



Mass analyzer output. Only unseparated atoms are detected; a) lasers off, b) both lasers on.

Fig. 5

La figure 5, extraite elle aussi de (3), montre l'appauvrissement du jet non défléchi en ¹³⁸Ba quand les 2 lasers à 5535 Å et 5829 Å sont réglés sur cet isotope.

Remarque Suggestion de la référence 4 pour améliorer l'efficacité de la séparation: Impulsion laser π , ou impulsions laser dont la fréquence instantanée varie d'un bout à l'autre de l'impulsion, de manière à provoquer un "passage adiabatique rapide" sur l'atome étudié. L'impulsion effectuée des allers (\rightarrow) et retours (\leftarrow) entre 2 miroirs. A l'aller (\rightarrow), elle fait passer l'atome de f à e et lui communique l'impulsion $\hbar k$ dans le sens \rightarrow . Au retour (\leftarrow), elle fait redescendre par émission stimulée l'atome de e à f , et le recule lors de l'émission stimulée d'un photon qu'il communique à l'atome une impulsion $\hbar k$ dans le même sens (\rightarrow) qu'à l'aller. Effet cumulatif. La même impulsion sert plusieurs fois.

4. Prolongements possibles

L'étude du profil de déflexion pour un jet thermique a déjà été faite (voir références 5 et 6). La largeur du profil de déflexion est alors essentiellement due à la dispersion des temps d'interaction, elle-même due à la dispersion des vitesses des atomes du jet.

Il serait intéressant de reprendre cette étude avec un jet monocinétique. Tous les atomes du jet ont alors le même temps d'interaction T , et la largeur du profil de déflexion révèle alors de manière très pure les fluctuations de la force \vec{F} . Il y a 2 sources essentielles de fluctuations.

- (i) Fluctuations du nombre N de cycles de fluorescence se produisant pendant le temps T autour de sa valeur moyenne $\langle N \rangle$. Possibilité d'accéder ainsi à la statistique du nombre de photons de fluorescence émis pendant un temps T , et aux statistiques non poissonniennes (en particulier sub poissonniennes) prévues théoriquement (références 7, 8, 9). Méthode plus efficace que la détection des photons eux-mêmes, car chacun photon de fluorescence laisse une "trace" sur la trajectoire atomique, alors que la probabilité de le détecter directement est faible.

- (ii) Fluctuations de la direction d'émission de chaque photon de fluorescence. Mouvement brownien à 3 dimensions de l'impulsion atomique, dû à l'émission spontanée.

C - Ralentissement et refroidissement d'un jet atomique

Bien que le principe du refroidissement radiatif ait été introduit initialement pour des vapeurs atomiques (référence 10), nous étudierons ici le ralentissement des jets atomiques qui est plus simple.

① Principe de l'expérience

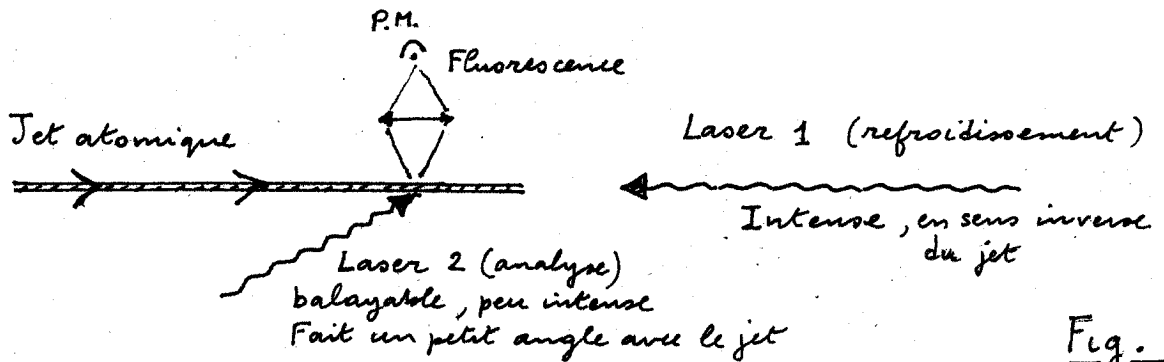


Fig. 6

- la pression de radiation exercée par le laser intense 1 ralentit et refroidit le jet
- La modification qui en résulte pour la distribution de vitesses du jet est analysée par mesure de la fluorescence du laser sonde 2. A cause de l'effet Doppler, ce laser sonde n'excite qu'une "classe" de vitesses (celle avec laquelle il est en résonance), et le signal de fluorescence est proportionnel à la population de cette classe de vitesses. En balayant la fréquence du laser sonde, on change la classe de vitesses détectée, et on peut ainsi déterminer la distribution des vitesses du jet.

② Fréquence atomique fixe - Laser de refroidissement de fréquence fixe

Discussion qualitative

- Le signe de l'effet du laser 1 est le même pour tous les atomes. Chaque cycle de fluorescence induit par le laser 1 provoque un ralentissement moyen égal à $\Delta v = -\hbar k / M$
- Mais, à cause de l'effet Doppler, la probabilité d'absorption d'un photon du laser 1 n'est pas la même pour tous les atomes, et par suite également, le ralentissement.
- Ce sont surtout les atomes de la classe de vitesses résonnante (centrée en $\hbar v = \omega_0 - \omega_L$, et de largeur $\sqrt{\Gamma^2 + 2\omega_L^2}$) qui vont être ralentis. Cependant, au fur et à mesure que leur vitesse décroît, ces atomes vont progressivement "sortir de résonance" vis à vis du laser 1, et l'efficacité du ralentissement va considérablement diminuer.

On s'attend donc à ce que le laser 1 "creuse un trou" dans la distribution de vitesses du jet, correspondant à la classe de vitesses résonnante, et ralentisse les atomes de cette classe, ce qui fait apparaître un pic à la gauche du trou

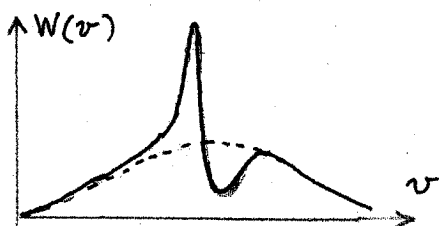


Fig. 7 Allure qualitative des distributions de vitesses initiale (en pointillés) et finale (en traits pleins)

Comme le pic apparaissant à gauche du tracé a une largeur beaucoup plus faible que la distribution de vitesses initiale, la "température effective" associée aux atomes de ce pic est beaucoup plus basse. On s'attend donc à ce que le laser 1, non seulement ralentisse le jet (diminution de la vitesse moyenne), mais également le refroidisse (apparition de structures étroites avec des dispersions de vitesses plus petites)

Confirmation de cette discussion qualitative par des calculs quantitatifs permettant d'étudier l'évolution des phénomènes en fonction du paramètre de saturation et du temps d'interaction [voir référence (11)]

Exemple de résultats expérimentaux [références (12) et (13)]

- La figure 8 extraite de (13) montre des résultats expérimentaux obtenus sur le sodium.

Un laser bimode est utilisé pour refroidir, avec une séparation de 1772 MHz entre les 2 modes égale à la structure hyperfine de l'état fondamental. On assure ainsi un recyclage permanent des atomes qui, par pompage optique, passent d'un niveau hyperfin de l'état fondamental à l'autre.

Température effective associée au pic de la figure 8 : 1,5 K

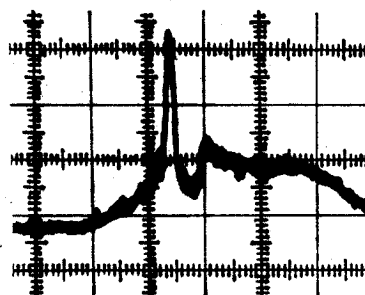


Fig. 8

Experimental profile of velocity distribution for a laser-cooled beam of sodium atoms. One division on the horizontal scale equals $2.25 \cdot 10^4$ cm/s (465 MHz).

- Voir également la référence (14) [et la figure 2 de cette référence]

On utilise ici un champ magnétique longitudinal de 750 Gauss, parallèle au laser 1, le laser 1 étant accordé sur la transition $3^2S_{1/2} F=2 M_F=2 \leftrightarrow 3^2P_{3/2} F=3 M_F=3$ et ayant une polarisation σ^+ . Toutes les autres transitions sont alors négligeables et on a l'équivalent d'un vrai système à 2 niveaux.

limites

La situation étudiée dans ce § C-2 (ω_0 et ω fixes), présente l'inconvénient que seule le laser 1 n'est en résonance qu'avec 1 classe de vitesses et que ces atomes sortent de résonance quand ils sont ralentis. Peut-on améliorer la méthode pour réaliser un ralentissement de manière efficace plus longtemps et agissant sur un nombre d'atomes plus élevé ?

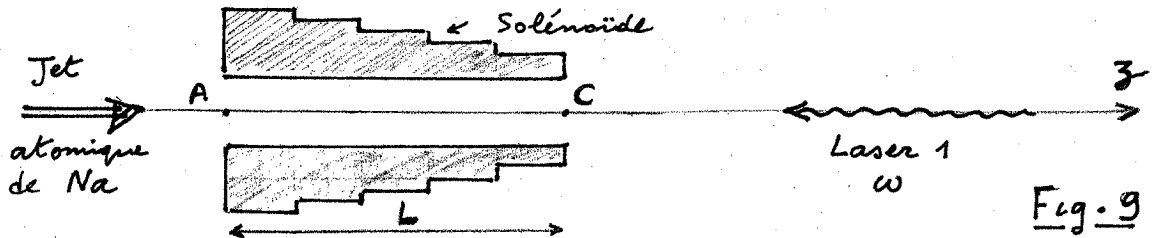
③ 1^{ère} amélioration possible : fréquence propre atomique variable dans l'espace [références (14) à (15)] II-6

a. Idee de base

Au fur et à mesure que l'atome est ralenti, sa fréquence propre, au point où il se trouve, change de manière à ce qu'il reste en résonance avec le laser et continue à subir un ralentissement aussi efficace que possible.

b. Réalisation

- Effet Zeeman dans un champ magnétique statique inhomogène produit par un solénoïde d'épaisseur variable



Champ magnétique $B(z)$, parallèle à l'axe z du jet atomique et du laser 1, et d'amplitude dépendant de z .

L'effet Zeeman pour la transition $3^2S_{1/2}, F=2, M_F=2 \leftrightarrow 3^2P_{3/2}, F=3, M_F=3$ donne une fréquence propre atomique $\omega_0(z)$ dépendant de z

$$\omega_0(z) = \omega_0 + 1,4 B(z) \quad [\omega_0 \text{ en Mhz, } B \text{ en gauss}] \quad (2.4)$$

c. Configuration de champ la plus "ramanée" possible pour un atome de vitesse initiale v_0

- On veut calculer $B(z)$ pour un atome entrant en A et sortant en C (voir Fig. 9), restant constamment en résonance avec le laser 1, et subissant en permanence la décélération maximale

$$-a = -\frac{\hbar k}{M} \frac{\Gamma}{2} \quad (2.5)$$

(le laser 1 étant supposé suffisamment intense : $\omega_1 \gg \Gamma$). On ralentit ainsi l'atome sur la distance la plus courte possible.

- Variation d'énergie cinétique entre A ($z=0$) et z

$$\frac{1}{2} M v_0^2 - \frac{1}{2} M v(z)^2 = M a z \quad (2.6)$$

$$\hookrightarrow v(z) = v_0 \sqrt{1 - \frac{2a z}{v_0^2}} \quad (2.7)$$

- Condition de résonance pour tout z

Fréquence propre atomique $\omega(z)$ [donnée par (2.4)] = Fréquence ω du laser décalée par effet Doppler

$$\omega(z) = \omega_0 + 1,4 B(z) = \omega + k v(z) = \omega + k v_0 \sqrt{1 - \frac{2a z}{v_0^2}} \quad (2.8)$$

$$\hookrightarrow B(z) = \underbrace{\frac{\omega - \omega_0}{1,4}}_{B_d} + \underbrace{\frac{k v_0}{1,4}}_{B_0} \sqrt{1 - \frac{2a z}{v_0^2}} \quad (2.9)$$

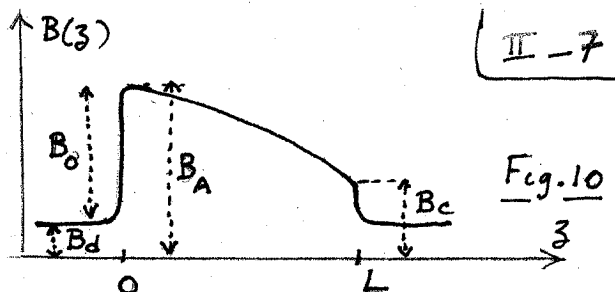
$$B(z) = B_d + B_0 \sqrt{1 - \frac{2az}{v_0^2}} \quad (2.10)$$

$$B_d = (\omega - \omega_0) / 1,4 \quad (2.11)$$

Champ de décalage ("bias field")

$$B_0 = kv_0 / 1,4 \quad (2.12)$$

$$\begin{cases} B_A = B_d + B_0 \\ B_C = B_d + B_0 \sqrt{1 - \frac{2aL}{v_0^2}} \end{cases} \quad (2.13)$$



- Vitesse à la sortie v'_0 . D'après (2.7)

$$v'_0 = v(L) = v_0 \sqrt{1 - \frac{2aL}{v_0^2}} \quad (2.14)$$

L'atome est stoppé ($v'_0 = 0$) si $L = \frac{v_0^2}{2a} \quad (2.15)$

- Ralentissement global $v_0 - v'_0$. A partir de (2.8)

$$k(v_0 - v'_0) = 1,4 (B_C - B_A) \quad (2.16)$$

Le ralentissement global $v_0 - v'_0$ ne dépend que de la variation de champ entre l'entrée et la sortie : la variation d'effet Zeeman rattrape la variation d'effet Doppler.

d. Quelques ordres de grandeur

- $v_0 = \bar{v} = 1000 \text{ m/s}$ (vitesse la plus probable pour un jet de Na sortant d'un four à $T = 600^\circ\text{C}$)

- Valeur maximale de a déjà calculée en (2.3) : $a = 10^6 \text{ m/s}^2$

- Distance d'arrêt $L = v_0^2 / 2a = 0,5 \text{ m}$

- Temps d'arrêt $T = v_0 / a = 10^{-3} \text{ s}$

- Nombre de cycles de fluorescence $N = \frac{\Gamma}{2} T = 3 \cdot 10^4$

- Champ B_0 $B_0 = kv_0 / 1,4 = \omega v_0 / 1,4c = 1100 \text{ Gauss}$

e. Que se passe-t-il pour un atome de vitesse $v_1 \neq v_0$? (entrant dans la configuration de champ calculée pour v_0)

Cas $v_1 > v_0$

L'atome, hors de résonance en A, est de plus en plus hors de résonance quand il s'approche de C. L'effet du laser 1 est pratiquement négligeable.

Cas $v_0 > v_1 > v'_0$

- Au début (en A) l'atome est trop lent pour être en résonance
- Puis, comme sa fréquence propre diminue au fur et à mesure qu'il avance, il se rapproche de résonance et entre en résonance au point z_1 , tel que [d'après (2.7)]

$$v_1 = v_0 \sqrt{1 - \frac{2az_1}{v_0^2}} \quad (2.17)$$

A partir de là, il se comporte comme un atome qui, étant entré en A avec v_0 , se retrouve en z_1 avec v_1 : il continue à être ralenti jusqu'au point C, où il arrive avec la vitesse v'_0 et quitte le solénoïde.

Cas $v'_0 > v_1$

L'atome n'est jamais en résonance entre A et C. Effet du laser 1 négligeable.

Finalement, on "ramasse" tous les atomes de vitesse comprise entre v_0 et v'_0 et on les regroupe en v'_0 II-8

Au lieu de creuser, dans la distribution des vitesses, un "trou" δv tel que $k \delta v = \sqrt{P^2 + 2\omega_z z}$ et d'en faire un "pic" juste à gauche de la vitesse résonnante [méthode du § C-2], on creuse ici une plage beaucoup plus large $v_0 - v'_0$, donné par (2.16), pour en faire un pic en v'_0 qui sera beaucoup plus important.

Remarque. Sans toucher aux courants dans les solénoïdes (on conserve la configuration de la fig. 10, la plus ramassée possible pour v_0), changeons la fréquence du laser: $\omega \rightarrow \tilde{\omega}$. Les atomes, en résonance en A, auront une vitesse $\tilde{v}_0 \neq v_0$. D'après (2.8)

$$\omega_0 + 1,4 B_A = \omega + k v_0 = \tilde{\omega} + k \tilde{v}_0 \rightarrow \text{Si } \tilde{\omega} > \omega, \tilde{v}_0 < v_0 \quad (2.18)$$

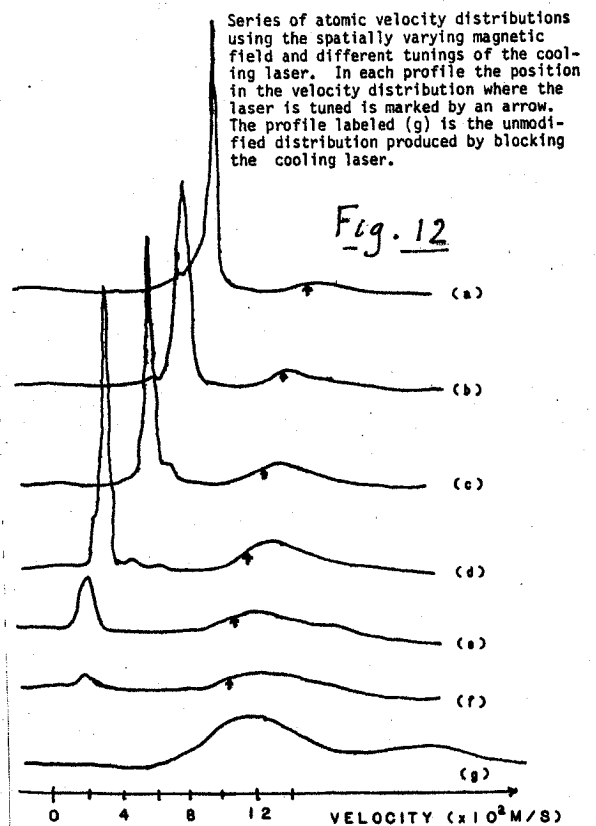
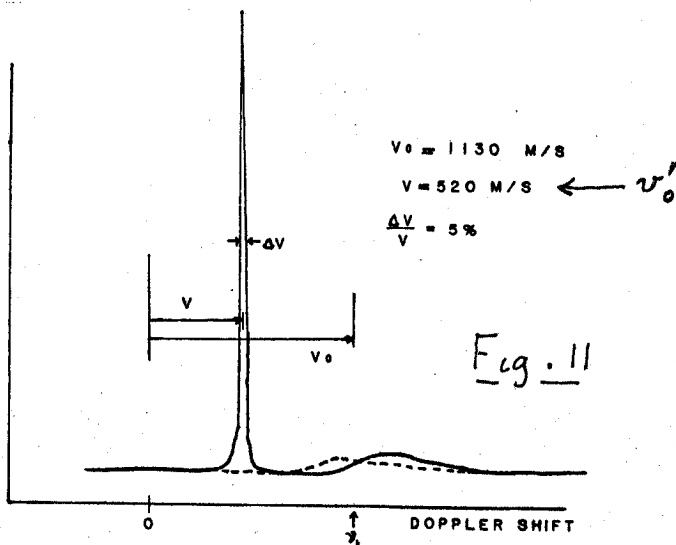
Les atomes vont-ils alors rester en résonance, suivre le déplacement Zeeman et subir ainsi la même décélération $\tilde{v}_0 - \tilde{v}'_0 = v_0 - v'_0$ déterminé uniquement par $B_C - B_A$ [voir (2.16)]?

Si $\tilde{v}_0 > v_0$, la réponse est non, car la configuration de la figure 10 est trop ramassée pour \tilde{v}_0 . Les atomes vont trop vite pour pouvoir suivre.

Si $\tilde{v}_0 < v_0$, la réponse est oui. La configuration de champ pourrait être plus ramassée, mais cela n'est pas grave. Au contraire, les atomes peuvent suivre plus facilement.

Finalement, en changeant ω , on change la plage de vitesses $[\tilde{v}_0, \tilde{v}'_0]$ affectée par le laser, et on peut attendre des vitesses \tilde{v}'_0 finales, plus basses.

f. Exemples de résultats expérimentaux [Figures extraites de la référence 15]



Atomic velocity profile produced using the spatially varying magnetic field. The cooling laser is tuned to be in resonance (in the highest field) with atoms whose initial Doppler shift is v_1 . The dotted line represents the unmodified velocity profile.

- la fig. 11 montre l'effet de regroupement des atomes en v'_0 (noté ici v)
- la fig. 12 montre l'effet d'un changement de la fréquence du laser (cf remarque ci-dessus) \tilde{v}'_0 décroît quand \tilde{v}_0 décroît, d'autant moins que \tilde{v}_0 est plus petit, car les atomes suivent plus facilement.

Problème des atomes très lents

On voit sur la fig. 12 que la hauteur du pic décroît beaucoup quand la vitesse finale diminue.

Les atomes très lents au point C sont en effet très sensibles au laser 1. Le champ ne décroît pas assez vite après C et les atomes continuent à sentir la pression de radiation. Ils rebroussement chemin.

Les auteurs de l'expérience ont résolu cette difficulté en arrêtant périodiquement le laser 1 et en laissant ainsi les atomes lents dériver dans le noir du point C à la zone détectée par le laser sonde, située 40 cm plus loin.

Observation retardée. Discrimination par temps de vol. Plus les atomes sont lents, plus il faut attendre longtemps avant de pouvoir les observer.

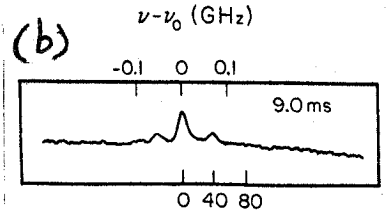
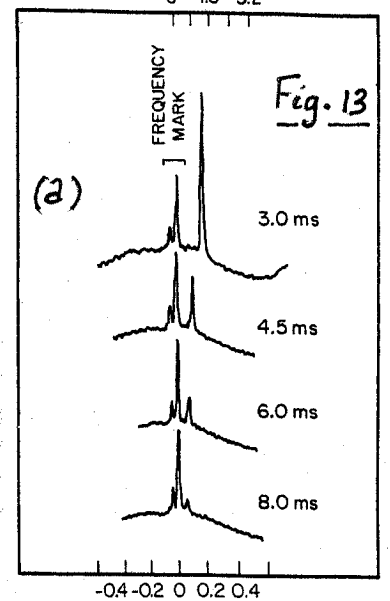
Améliorations récentes (W. Phillips, communication privée)

- Utilisation d'une focalisation magnétique du jet atomique permettant d'augmenter la densité d'atomes lents
- Décroissance plus rapide du champ à la sortie de l'électroaimant, rendant les atomes lents moins sensibles au laser

REFERENCES

- (1) P. Jacquinet, S. Liberman, J.L. Picqué, J. Pinard, *Opt. Comm.* **8**, 163 (1973)
- (2) A.F. Bernhardt, D.E. Duerre, J.R. Simpson, L.L. Wood, *Appl. Phys. Lett.* **25**, 617 (1974)
- (3) " " " " *Opt. Comm.* **16**, 169 (1976)
- (4) I. Nebenzahl, A. Szöke, *Appl. Phys. Lett.* **25**, 327 (1974)
- (5) J.L. Picqué, J.L. Vialle, *Opt. Comm.* **5**, 402 (1972)
- (6) R. Schieder, H. Walther, L. Wöste, *Opt. Comm.* **5**, 337 (1972)
- (7) L. Mandel, *Opt. Lett.* **4**, 205 (1979)
- (8) R.J. Cook, *Opt. Comm.* **35**, 347 (1981)
- (9) S. Reynaud, Thèse (Paris 1981), *Ann. de Phys.* (à paraître)
J. Dalibard, S. Reynaud, *Les Houches 1982* (à paraître)
- (10) T.W. Hansch, A.L. Schawlow, *Opt. Comm.* **13**, 68 (1975)
- (11) V.G. Minogin, *Sov. Phys. JETP* **52**, 1032 (1980)
- (12) S.V. Andrejev, V.I. Balykin, V.S. Letokhov, V.G. Minogin
J.E.T.P. Lett. **34**, 442 (1982) et *Sov. Phys. J.E.T.P.* **55**, 828 (1982)
- (13) V.S. Letokhov, V.G. Minogin, *J. de Physique, Colloque C-8 supplément au n° 12*
42, 347 (1981)
- (14) W.D. Phillips, H. Metcalf, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 596 (1982)
- (15) J.V. Prodan, W.D. Phillips, H. Metcalf, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1149 (1982)
- (16) W.D. Phillips, J.V. Prodan, H. Metcalf in *Laser-Cooled and Trapped Atoms*
Ed. by W.D. Phillips N.B.S. Special publication 653, p. 1 (juin 1983)

VELOCITY (10^2 m/s) II-9



(a) The velocity distribution of cooled atoms with various observational delay times. The broad background is from nonbeam Na atoms. (b) Atoms observed at a velocity 40 m/s and a delay of 9.0 ms. The left-most two peaks in all these distributions are frequency markers from which the rest dual Doppler shift (and hence atomic velocity) is measured.

8.11.83

Pression de radiation et forces dipolaires
Description de quelques expériences (suite et fin)

III-1

E. Ralentissement et refroidissement d'un jet atomique

④ 2^{ème} amélioration possible : fréquence atomique fixe
fréquence du laser de refroidissement variable dans le temps

a) Idee de base [référence (17)]

Au fur et à mesure que l'atome est ralenti, la fréquence du laser est changée pour que l'atome reste en résonance avec le laser.

b) Balayage le plus rapide possible dans le temps

- Comme plus haut (§ C3c), on suppose que le laser reste constamment à résonance, et est suffisamment intense pour produire la décélération maximale

$$-a = -\frac{\hbar k}{M} \frac{\Gamma}{2} \quad (3.1)$$

On a donc $dv = -a dt$ (3.2)

Comme la condition de résonance $\omega_0 = \omega + kv$ est toujours satisfaite, dv est relié à $d\omega$ par $d\omega + kv = 0$

↳ $d\omega = -k dv = ka dt$ (3.3)

La vitesse de balayage en fréquence la plus rapide possible est donc

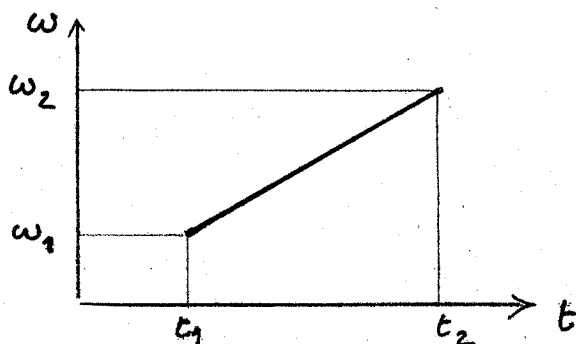
$$\left(\frac{d\omega}{dt}\right)_{\max} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{d\omega}{dt}\right)_{\max} = ka = \frac{\hbar k^2}{2M} \Gamma = \frac{E_{\text{recul}}}{\hbar} \Gamma \quad (3.4)$$

où $E_{\text{recul}} = \hbar^2 k^2 / 2M$ est l'énergie de recul lors de l'absorption ou de l'émission d'un photon par l'atome.

- Si $\frac{d\omega}{dt} > \left(\frac{d\omega}{dt}\right)_{\max}$, la fréquence du laser change trop vite et l'atome ne peut pas "suivre"

Si $\frac{d\omega}{dt} < \left(\frac{d\omega}{dt}\right)_{\max}$, l'atome peut suivre, d'autant plus aisément que dv/dt est plus petit.

c) Ralentissement global obtenu



$$\omega_0 = \omega_1 + kv_1 = \omega_2 + kv_2$$

2 paramètres pour le balayage

$\omega_2 - \omega_1$: Plage de balayage

$\frac{\omega_2 - \omega_1}{t_2 - t_1}$: Vitesse de balayage

$$\omega_2 > \omega_1 \rightarrow v_2 < v_1$$

Si $\frac{\omega_2 - \omega_1}{t_2 - t_1} < \left(\frac{d\omega}{dt}\right)_{\max}$, tous les atomes de vitesse comprise entre v_1 et v_2 sont ralentis et recroisés en vitesse à la vitesse la plus basse v_2 . III-2

d) Ordres de grandeur pour le sodium

- Prenons $v_1 = 10^3$ m/s $v_2 = 0$
- Temps minimum pour aller de v_1 à v_2 . Pour Na, $a = 10^6$ m/s²

$$\Delta t = \frac{v_1 - v_2}{a} = \frac{10^3}{10^6} = 10^{-3} \text{ s} = 1 \text{ msec}$$
- $\omega_2 - \omega_1 = k(v_1 - v_2) = kv_1$

$$\hookrightarrow \Delta \nu = \frac{kv_1}{2\pi} = \frac{v_1}{\lambda} = \frac{10^3}{0,59 \cdot 10^{-6}} = 1,7 \text{ GHz}$$
- Vitesse de balayage maximale $\frac{\Delta \nu}{\Delta t} = 1,7 \text{ GHz/msec}$

e) Comparaison avec la méthode du § C 3

- Dans la méthode du § C 3, où ω_0 varie avec z , on a, en chaque point z , des atomes ralentis avec une vitesse $v(z)$ bien définie, ne dépendant que de z .
 Dans la méthode du § C 4, où ω varie avec t , les atomes ayant, à un instant donné, une vitesse qui leur permet d'être en résonance avec le laser, sont répartis sur tout l'axe z . Pas de corrélations entre v et z .
- Méthode du § C 3 : peut fonctionner en continu
 " " " C 4 : ne peut fonctionner qu'en impulsions
- La méthode du § C 4 est plus souple. L'amplitude et la vitesse de balayage peuvent être changées plus aisément que la configuration de champ $B(z)$.

f) Exemples de résultats expérimentaux [références (18) à (20)]

Premières expériences sur Na [(18) (19)]

- Pompage optique en σ^+ sur D_2 , qui accumule les atomes dans le sous-niveau $3S_{1/2} F=2 M_F=2$ et les expulse uniquement vers $3P_{3/2} F'=3 M'_F=3$.
- Utilisation de 2 jets atomiques, l'un en sens inverse du faisceau laser (jet atomique refroidi), l'autre perpendiculaire au faisceau laser (donnant des signaux de référence, sans déplacement ni élargissement Doppler)
- Balayage linéaire de ω partant de la fréquence correspondant à la vitesse la plus probable du jet antiparallèle.
- 1 seul faisceau laser. Pas de séparation des fonctions de refroidissement et de détection. On observe la fluorescence induite sur les 2 jets par le laser de refroidissement.

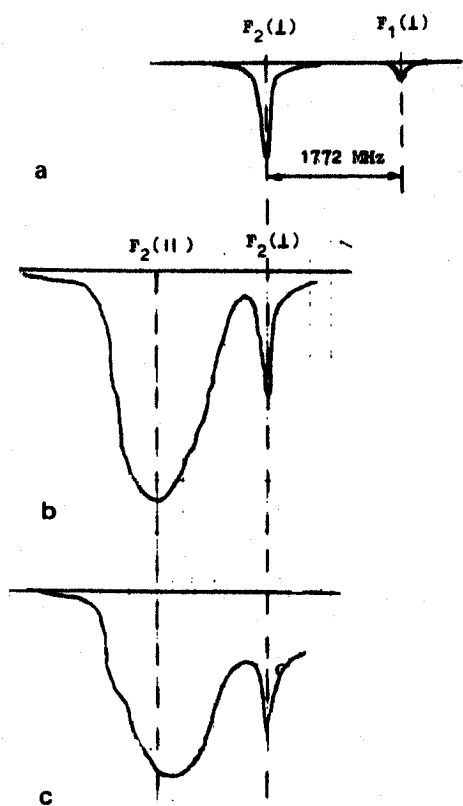


Fig. 15 [extraite de l'article de revue (19)] III-3

- a - les 2 composantes hyperfines de D_2 partant de $F_1=1$ et de $F_2=2$ et détectées sur le jet atomique \perp au laser.
- b - Distribution de vitesses non déformée détectée sur la composante hyperfine partant de $F_2=2$ pour le jet atomique antiparallèle au laser ($F_2(II)$). Le signal $F_2(L)$ sert de référence et donne la vitesse nulle.
- c - Effet d'un balayage en fréquence ($dv/dt = 370 \text{ MHz/msec}$) du laser. Déplacement du maximum vers les faibles vitesses. Augmentation de la densité d'atomes aux faibles vitesses.

Expériences plus récentes sur Na [(20) (21)]

- Pompage optique en σ^+ sur D_2 comme dans l'expérience précédente, mais avec en plus un champ magnétique uniforme parallèle au jet ($B_d = 640 \text{ gauss}$) qui diminue les effets de départ de polarisation.
- Ici, 2 faisceaux laser, l'un pour refroidir, l'autre pour analyser.

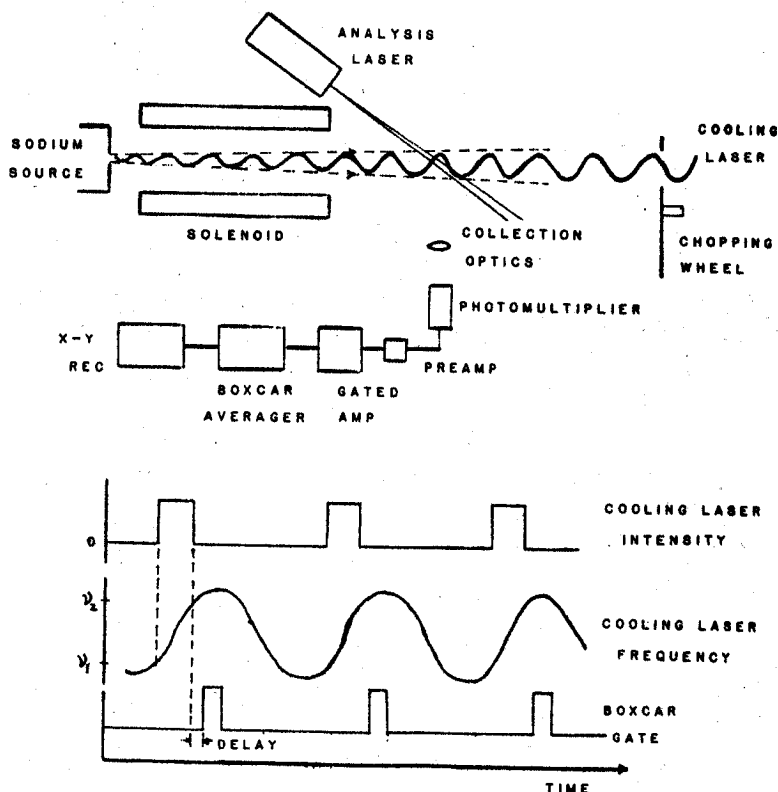


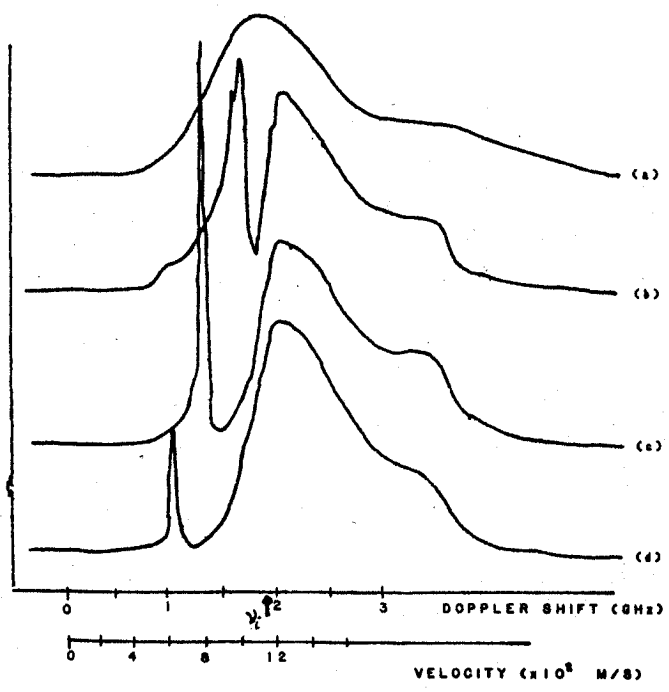
Fig. 16 [Extraite de (20)]

Montage expérimental et séquence temporelle

Pour plus de détails sur le balayage en fréquence du laser voir (22).

(a) Block diagram of experimental set up
(b) Timing diagram

Fig. 17 [extrait de (20)]



$\frac{dy}{dt} = 0$ v fixe
 (Expérience analogue à celle décrite au § C-2. Comparer avec la figure 8 page II-5)

$\frac{dy}{dt} = 0,64 \text{ GHz/m sec}$

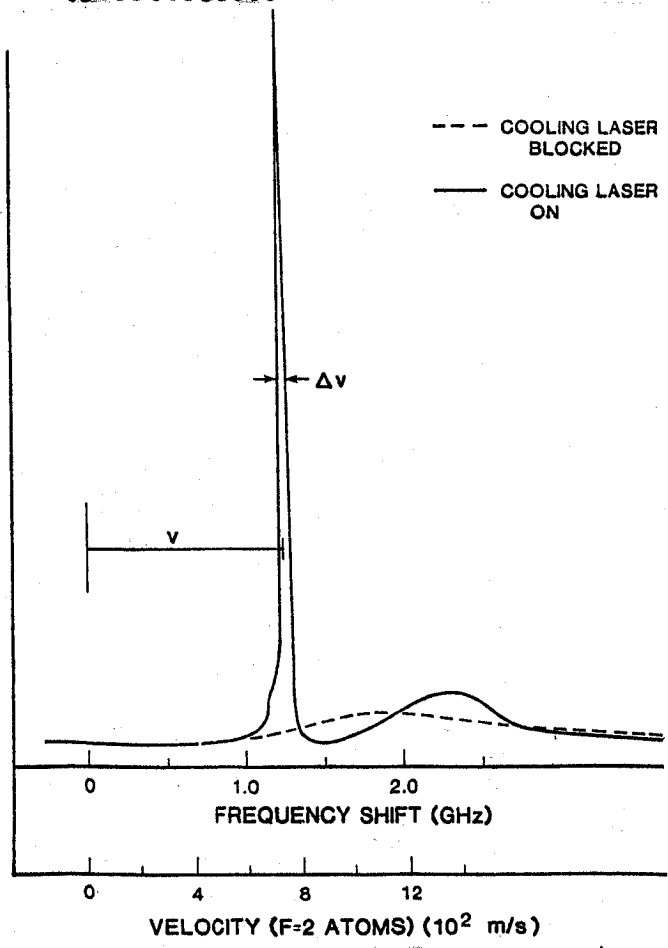
$\frac{dy}{dt} = 1 \text{ GHz/m sec}$

Les auteurs n'ont pas pu encore descendre au dessous de 600 m/s pour une raison non encore comprise

Velocity distribution of the atomic beam for the case of (a) cooling laser blocked, (b) cooling laser on but not scanned, (c) cooling laser scanned for 480 MHz, and (d) cooling laser scanned for 750 MHz.

5 Applications possibles

a) Monochromatisation d'un jet atomique



Dramatically modified atomic beam velocity distribution. Dotted line represents the unmodified distribution and the solid line, the distribution after being changed by the cooling laser. The cooling laser was scanned 890 MHz.

Le regroupement des vitesses des atomes d'un jet en un pic très étroit permet d'obtenir un jet monochromatique très intense. Au lieu de filtrer (avec un sélecteur mécanique par exemple) les atomes ayant une vitesse donnée, et de perdre ainsi tous les autres, qui sont beaucoup plus nombreux, on utilise ici tous les atomes.

Exemple de résultats sur la Fig. 18

Fig. 18 [extrait de (21)]

$\frac{dy}{dt} = 1,18 \text{ GHz/m sec}$

$v = 720 \text{ m/s}$

$\Delta v = 15 \text{ m/s}$

$\frac{\Delta v}{v} = 2\%$

Densité du jet dans le pic 20 fois supérieure à celle du maximum du jet thermique non refroidi

b) Obtention d'atomes très lents

III.5

- Normalement, dans un jet thermique, il y a très peu d'atomes très lents (moins que ne le prévoit la distribution de Maxwell)
- La méthode du § C3 a permis d'obtenir des atomes très lents ($v = 40 \text{ m/s}$) avec une densité estimée à 10^5 atomes/cm^3 dans un intervalle de vitesse correspondant à la largeur naturelle
- Importance pour 2 types d'applications
 - (i) Spectroscopie à ultra haute résolution
Augmentation du temps d'observation (par exemple, temps de passage entre 2 boules de Ramsey, jet "fontaine")
Élimination de l'effet Doppler du 2^{ème} ordre
 - (ii) "Alimentation" de pièges radiatifs
La profondeur des puits radiatifs est très faible (voir § D suivant), et l'atome doit avoir une vitesse initiale très faible si on veut le piéger dans un tel puit

D - Propriétés importantes de la force dipolaire \vec{F}_2

$$\vec{F}_2 = - \frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{4} \frac{\vec{\nabla} \omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4} + \frac{\omega_1^2}{2}} \quad (3.5)$$

1 - Caractéristiques

Direction : celle du gradient de l'intensité lumineuse I ($\propto \omega_1^2$). Dans un faisceau gaussien, les gradients d'intensité les plus importants sont dans le plan focal et transversaux (perpendiculaires à l'axe de propagation)

Variations avec le désaccord $\delta = \omega - \omega_0$

Courbe de dispersion, nulle à résonance, changeant de signe avec $\omega - \omega_0$ (partie "réactive" χ' de la susceptibilité)

$\omega > \omega_0$ atome poussé hors des régions de I élevée

$\omega < \omega_0$ " " vers les " " "

Largeur de la courbe de dispersion : $\sqrt{\Gamma^2 + 2\omega_1^2}$

Comportement quand $I \rightarrow \infty$

Pour une fréquence de Rabi ω_1 donnée (avec $\omega_1 \gg \Gamma$), le maximum de la courbe de dispersion se situe vers $|\omega - \omega_0| = \omega_1$, et $|\vec{F}_2|$ vaut alors

$$|\vec{F}_2| \sim \hbar \left| \frac{\vec{\nabla} \omega_1^2}{\omega_1} \right| \sim \hbar |\vec{\nabla} \omega_1| \sim \frac{\hbar \omega_1}{L} \quad (3.6)$$

où L est la distance caractéristique de variation de I (rayon focal ou "waist" w_0 pour une onde progressive, longueur d'onde pour une onde stationnaire). Si, pour une même configuration géométrique (L fixé), I , et donc ω_1 , augmentent, $|\vec{F}_2|$ augmente indéfiniment. A la différence de \vec{F}_1 qui tend vers une limite finie, $\hbar \vec{k} \Gamma/2$, quand $I \rightarrow \infty$, il n'y a pas de "saturation" pour \vec{F}_2

Comparons $|\vec{F}_2|$ et $|\vec{F}_1|$ limite

$$\frac{|\vec{F}_2|}{|\vec{F}_1|_{\text{lim}}} \approx \frac{\hbar \omega_1}{L} \frac{1}{\hbar k \Gamma} \approx \frac{\omega_1}{\Gamma} \frac{\lambda}{L} \quad (3.7)$$

III-6

λ/L est inférieur à 1, on de l'ordre de 1 (pour une onde stationnaire), mais ω_1/Γ peut être très grand devant 1,

\vec{F}_2 dérive d'un potentiel U

$$\vec{F}_2 = -\vec{\nabla} U \quad \text{avec} \quad U = \frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{2} \text{Log} \left[1 + \frac{\frac{\omega_1^2}{2}}{(\omega - \omega_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \right] \quad (3.8)$$

qu'on peut réécrire

$$U = \frac{\hbar \delta}{2} \text{Log} (1 + s) \quad (3.9)$$

où

$$\delta = \omega - \omega_0 \quad s = \frac{\frac{\omega_1^2}{2}}{\delta^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (\text{paramètre de saturation}) \quad (3.10)$$

2 - Ordres de grandeur des paramètres relatifs au potentiel U

Puits de potentiel

Supposons $\delta < 0$ ($\omega < \omega_0$)

U est alors un "puits de potentiel" dont la profondeur est déterminée par la valeur maximale, ω_1^{max} , de ω_1 ,

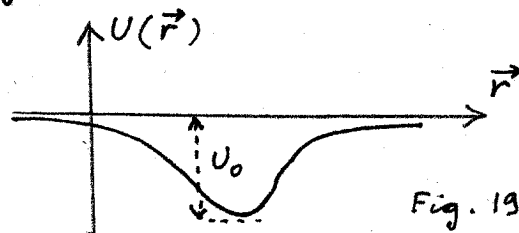


Fig. 19

Profondeur U_0 $U_0 = -\frac{\hbar \delta}{2} \text{Log} (1 + s_{\text{max}})$ (3.11)

$$s_{\text{max}} = \frac{(\omega_1^{\text{max}})^2/2}{\delta^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \approx (\omega_1^{\text{max}})^2/2\delta^2 \quad (3.12)$$

car nous allons voir que le δ optimal est de l'ordre de ω_1^{max} , lui-même en général grand devant Γ

Optimisation du désaccord $\delta = \omega - \omega_0$

Pour une intensité laser donnée (ω_1^{max} fixé), $(\delta)_{\text{optimal}}$ est donné par

$$\frac{\partial}{\partial \delta} U_0 = 0 = \frac{\partial}{\partial \delta} \left[-\frac{\hbar \delta}{2} \text{Log} (1 + s_{\text{max}}) \right] \quad (3.13)$$

où s_{max} est donné par (3.12). A partir de (3.13) on obtient

$$(s_{\text{max}})_{\text{optimal}} = 4 \quad (3.14)$$

d'où, d'après (3.12) $(\delta)_{\text{optimal}} = -\frac{|\omega_1^{\text{max}}|}{2\sqrt{2}}$ (3.15)

et, d'après (3.11)

$$(U_0)_{\text{optimal}} = \frac{\hbar |\omega_1^{\text{max}}|}{4\sqrt{2}} \text{Log} 5 = 0,285 \frac{\hbar |\omega_1^{\text{max}}|}{4\sqrt{2}} \quad (3.16)$$

Ordre de grandeur de la profondeur des puits

$$|\omega_1^{\text{max}}| = |d \mathcal{E}_0^{\text{max}}| / \hbar \quad (3.17)$$

$|\mathcal{E}_0^{\text{max}}|$ amplitude maximale du champ électrique de l'onde laser

$|d|$ Moment dipolaire de transition $\langle e | D | f \rangle$

- L'amplitude $|E_0^{max}|$ dépend de la puissance et de la géométrie du laser. Pour une onde laser gaussienne, progressive, de rayon focal w_0 et de puissance P , on trouve

$$P = \frac{\pi w_0^2}{4} \epsilon_0 c (E_0^{max})^2 \tag{3.18}$$

- Le moment dipolaire d apparaît dans l'expression de la largeur naturelle Γ , qui est aussi la probabilité d'émission spontanée par unité de temps. Pour un atome à 2 niveaux, de fréquence propre ω_0 , correspondant à la longueur d'onde lumineuse $\lambda_0 = 2\pi c / \omega_0$, la règle d'or de Fermi donne

$$\Gamma = \frac{d^2 \omega_0^3}{3\pi \epsilon_0 \hbar c^3} \tag{3.19}$$

- A partir de (3.18) et (3.19), on peut exprimer la fréquence de Rabi maximale $|\omega_1^{max}| / 2\pi$ en fonction de P, w_0, Γ

$$\frac{|\omega_1^{max}|}{2\pi} = \left[\frac{3}{2\pi^3} \frac{\Gamma}{2\pi} \frac{\lambda_0^3}{\hbar c w_0^2} P \right]^{1/2} \tag{3.20}$$

- Application numérique pour Na

$$\lambda_0 = 5890 \text{ \AA} = 5,89 \cdot 10^{-7} \text{ m} \quad \frac{\Gamma}{2\pi} = 10 \text{ MHz} = 10^7 \text{ s}^{-1}$$

Prendons un faisceau laser

$$P = 1 \text{ W} \quad w_0 = 30 \mu = 3 \cdot 10^{-5} \text{ m}$$

$$(3.20) \text{ donne alors } \frac{|\omega_1^{max}|}{2\pi} = 2,35 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} = 23,5 \text{ GHz}$$

On déduit alors de (3.16)

$$(U_0)_{optimal} = 4,44 \cdot 10^{-24} \text{ J}$$

En unités de température, c-à-d en posant $(U_0)_{optimal} = k_B T$ on trouve

$$T = 0,32 \text{ K} = 320 \text{ mK}$$

Pour quelle vitesse v l'énergie cinétique d'un atome de sodium est elle égale à $(U_0)_{optimal}$? $\frac{1}{2} M v^2 = (U_0)_{optimal}$

Comme $M(\text{sodium}) = 3,84 \cdot 10^{-26} \text{ Kg}$, on trouve

$$v = 15,2 \text{ m/s}$$

Si la force \vec{F}_2 était la seule à agir (et qu'on puisse ignorer la force de pression de radiation \vec{F}_1 qui pousse l'atome le long de la direction de propagation de l'onde progressive), seuls les atomes de vitesse inférieure à 15,2 m/s pourraient rester dans le puits. En fait, il faudrait en plus un mécanisme de refroidissement pour compenser l'échauffement dû aux fluctuations des forces radiatives. Nous reviendrons ultérieurement sur tous ces points

3 - Applications possibles de \vec{F}_2

- Modification des trajectoires d'atomes neutres. Focalisation de jets atomiques (voir § E suivant)
- Pièges radiatifs pour atomes neutres. Non encore réalisés.

(20) J.V. Prodan, W.D. Phillips in Laser cooled and trapped atoms III-9
 Ed. by W.D. Phillips N.B.S. Special publication 653, p.137 (juin 1983)

(21) W.D. Phillips, J.V. Prodan Proceedings of the 5th international conference
 on Coherence and Quantum Optics (Rochester juin 1983) à paraître

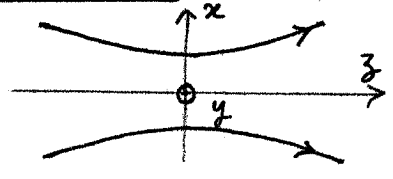
(22) W.D. Phillips Appl. Opt. 20, 3826 (1981)

(23) J.E. Bjorkholm, R.R. Freeman, A. Ashkin, D.B. Pearson
 Phys. Rev. Lett. 41, 1361 (1978)

(24) Mêmes auteurs que (23) in Laser Spectroscopy IV Rottach Egerm (1979)
 H. Walther and K. Rothe eds Springer Verlag 1979, p.49

(25) Mêmes auteurs que (23) Optics Letters 5, 111 (1980)

APPENDICE : Onde laser gaussienne progressive, se propageant le long de Oz et polarisée suivant Ox



- Dans le plan focal ($z=0$)

$$\vec{E} = \vec{e}_x E_0 e^{-\rho^2/w_0^2} \cos \omega t \quad (A.1)$$

$\rho^2 = x^2 + y^2$ $w_0 =$ rayon focal ("beam waist")
 E_0 amplitude maximale de \vec{E}

- Sur l'axe Oz ($x=y=0$)

$$\vec{E} = \vec{e}_x \frac{E_0}{\sqrt{1 + (\frac{z}{z_R})^2}} \cos(\omega t - kz + \phi) \quad (A.2)$$

$$z_R = \frac{\pi w_0^2}{\lambda} \text{ longueur de divergence de Rayleigh} \quad (A.3)$$

$$\phi = \text{Arctg} \frac{z}{z_R} \quad (A.4) \quad \text{Pour Na, si } w_0 = 30 \mu \quad z_R = 4,8 \text{ mm}$$

- Puissance P = énergie passant à travers le plan focal / unité de temps

$$P = \epsilon_0 c^2 \int_{\text{Plan focal}} \overline{\vec{E} \times \vec{B}} \cdot \vec{e}_z dS = \epsilon_0 c E_0^2 \cos^2 \omega t \int_0^\infty 2\pi \rho e^{-2\rho^2/w_0^2} d\rho = \pi \frac{w_0^2}{4} \epsilon_0 c E_0^2 \quad (A.5)$$

- Période d'oscillation au fond des puits dans les directions \perp à Oz

Si l'on se déplace dans le plan focal à partir de 0, d'une quantité petite $\vec{\rho} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y$, la force \vec{F}_2 est une force de rappel (si $\delta < 0$) proportionnelle à $\vec{\rho}$. En effet (3.5) peut s'écrire

$$\vec{F}_2 = -\hbar \delta \frac{\delta}{1+\delta} \vec{\alpha} \quad \vec{\alpha} = \frac{\vec{\nabla} \omega_1}{\omega_1} \quad (A.6)$$

Nous avons choisi $\delta = 4$ et $\delta = -|\omega_1^{\text{max}}|/2\sqrt{2}$ [voir (3.14) et (3.15)]

$$\text{Comme, d'après (A-1), } \omega_1(\vec{\rho}) = \omega_1^{\text{max}} e^{-\rho^2/w_0^2} \quad (A.7)$$

$$\vec{\alpha} = \left(\frac{\vec{\nabla} \omega_1}{\omega_1} \right)_{\vec{\rho} \approx \vec{0}} = -\frac{2\vec{\rho}}{w_0^2} \quad (A.8)$$

$$\text{de sorte que } \vec{F}_2 \approx \hbar \delta \frac{\delta}{5} \frac{\vec{\rho}}{w_0^2} \text{ pour } \vec{\rho} \approx \vec{0} \quad (A.9)$$

On en déduit la période des oscillations dans le plan focal

$$T = \frac{2\pi}{\Omega} \quad \text{avec } \Omega^2 = \frac{8\hbar |\delta|}{5w_0^2 m} = \frac{4\hbar |\omega_1^{\text{max}}|}{5\sqrt{2} M w_0^2} \quad (A.10)$$

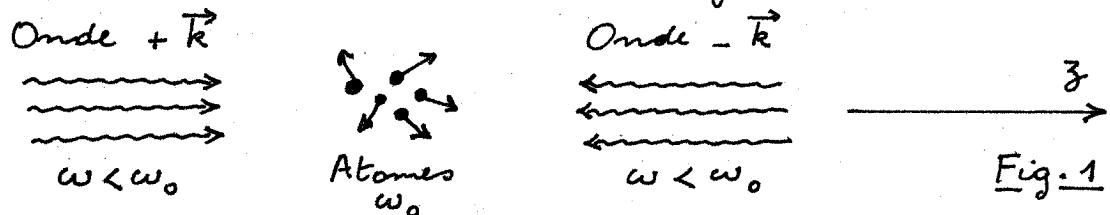
Pour Na, avec $w_0 = 30 \mu$, $m = 3,84 \cdot 10^{-26} \text{ Kg}$, $|\omega_1^{\text{max}}|/2\pi = 23,5 \text{ GHz}$, on trouve $T = 1,24 \cdot 10^{-5} \text{ sec} = 12,4 \mu\text{sec}$. On vérifie bien que le temps d'évolution des variables externes (T) est plus long que celui de variables internes ($T_R = P^{-1} = 16 \text{ ns}$)

Buts de ce chapitre

- Décrire un mécanisme simple de refroidissement radiatif des degrés de liberté de translation d'un atome libre.
- Evaluer la vitesse de refroidissement correspondante ainsi que la diffusion d'impulsion liée au caractère discret des échanges d'impulsion entre matière et rayonnement.
- Déterminer la température la plus basse pouvant être atteinte compte tenu de la compétition entre le refroidissement radiatif et l'échauffement dû à la diffusion d'impulsion.

① - Etude d'un mécanisme simple de refroidissement radiatif

- Atomes libres (fréquence atomique ω_0) soumis à 2 ondes planes progressives $+\vec{k}$ et $-\vec{k}$, se propageant en sens inverse le long de Oz , de même fréquence ω , désaccordée en dessous de ω_0 ($\omega < \omega_0$), de même intensité [Fig. 1]



- Raisonnement qualitatif

Pour un atome de vitesse nulle le long de Oz , $v_z = 0$, les pressions de radiation exercées par les 2 ondes $+\vec{k}$ et $-\vec{k}$ s'équilibrent.

Pour un atome de $v_z > 0$, l'onde $-\vec{k}$ se rapproche de résonance par effet Doppler, alors que l'onde $+\vec{k}$ s'éloigne. La pression de radiation de l'onde $-\vec{k}$ l'emporte sur celle de l'onde $+\vec{k}$ et l'atome est ralenti.

Pour un atome de $v_z < 0$, c'est au contraire l'onde $+\vec{k}$ qui se rapproche de la résonance et l'onde $-\vec{k}$ qui s'en éloigne. Là encore, l'atome est ralenti.

Si l'on dispose 3 paires d'ondes analogues à celles de la figure 1, le long de Ox, Oy, Oz , l'atome est ralenti quelle que soit la direction de la vitesse \rightarrow refroidissement de la vapeur atomique.

- Limites du raisonnement précédent.

Le raisonnement précédent suppose qu'on peut ajouter indépendamment les effets des 2 ondes se propageant en sens inverse (et celui des autres paires d'ondes le long de Ox et Oy). Il néglige donc les effets d'interférence entre ces ondes, qui sont responsables notamment des forces dipolaires liées aux gradients d'intensité de l'onde stationnaire résultant de la superposition des ondes.

Nous supposons ici que l'intensité est faible (transition atomique non saturée). On peut alors montrer que le raisonnement précédent conduisant à ajouter indépendamment les effets des 2 ondes conduit au résultat correct (voir par exemple cours 1982-83, page VI-5, T16 et T17) A plus haute intensité, un traitement théorique plus élaboré serait indispensable.

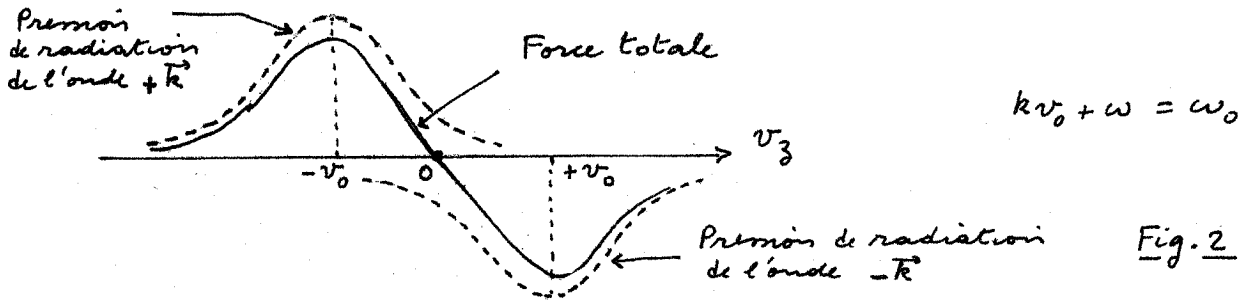


Fig. 2

La force totale est toujours de signe opposé à celui de v_z

Zone de variation linéaire autour de $v_z = 0$. On suppose dans ce chapitre que les atomes ont été au préalable suffisamment ralentis [par exemple, par les méthodes de ralentissement de jets atomiques décrites dans les cours II et III], pour que la distribution de vitesse initiale soit contenue entièrement dans cette plage linéaire.

- Bref historique

L'idée de refroidissement radiatif remonte aux premiers travaux sur le pompage optique. L'article initial de Kastler sur le pompage optique [1] propose des effets "luminescaloriques" et "luminesfrigoriques". La "température de spins" de l'état fondamental d'un atome paramagnétique placé dans un champ magnétique statique est abaissée par absorption de photons convenablement polarisés et réémission de photons de fréquence plus élevée (processus "anti-Stokes").

Dans le même ordre d'idées, on peut citer les méthodes de polarisation nucléaire dynamique [2], où l'irradiation de spins électroniques à une fréquence inférieure à la fréquence de Larmor électronique permet de refroidir des spins nucléaires couplés par interaction dipôle-dipôle aux spins électroniques.

La méthode consistant à utiliser l'effet Doppler pour refroidir directement les degrés de liberté de translation est exposé dans [3]. Dans cette référence, les 2 ondes de la figure 1 sont supposées non monochromatiques, ayant une largeur spectrale couvrant la demi-largeur Doppler inférieure de la vapeur. D'autres méthodes utilisant une onde balayée en fréquence sont proposées dans [4].

Le refroidissement ^{radiatif} des degrés de liberté de translation d'ions ou ^(electrons) piégés dans un piège électromagnétique a fait l'objet de nombreuses propositions et travaux théoriques [5 à 7] et réalisations expérimentales [8 - 9].

② Vitesse de refroidissement. Temps d'amortissement de la vitesse moyenne.

- Soient $n_+(v)$ et $n_-(v)$ les nombres moyens, par unité de temps, de cycles de fluorescence (absorption + émission spontanée) induits par les ondes $+k$ et $-k$ sur un atome de vitesse $v_z = v$. On a

$$n_+(v) = \Gamma \sigma_{ee}^+ \quad n_-(v) = \Gamma \sigma_{ee}^-$$

Γ : probabilité d'émission spontanée / unité de temps (largeur naturelle)

σ_{ee}^+ (σ_{ee}^-) : population de e sous l'effet de l'irradiation de l'onde $+k$ ($-k$)

- Pour calculer σ_{ee}^+ et σ_{ee}^- utilisons les équations de Bloch [IV-3] [voir pages I-7 et I-8]. Pour l'onde $+\vec{k}$, on a $\dot{\phi} = -kv$, pour l'onde $-\vec{k}$, on a $\dot{\phi} = +kv$. A la limite des faibles intensités [paramètre de saturation petit devant 1], les solutions stationnaires pour σ_{ee}^+ et σ_{ee}^- valent

$$\sigma_{ee}^+ = \frac{\omega_1^2/4}{(\delta - kv)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad \sigma_{ee}^- = \frac{\omega_1^2/4}{(\delta + kv)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (4.1)$$

ω_1 = fréquence de Rabi, $\delta = \omega - \omega_0$: désaccord

On retrouve bien que σ_{ee}^+ est maximum quand $\omega - kv = \omega_0$, c-à-d quand l'onde $+\vec{k}$ est en résonance grâce à l'effet Doppler. Même remarque pour σ_{ee}^-

- Force moyenne \vec{F}

A chaque cycle de fluorescence induit par l'onde $+\vec{k}$ ($-\vec{k}$), l'atome gagne en moyenne une impulsion $+\hbar\vec{k}$ ($-\hbar\vec{k}$). Donc

$$\begin{aligned} \vec{F} &= \frac{d}{dt} M \vec{v} = \hbar \vec{k} [n_+(v) - n_-(v)] \\ &= \hbar \vec{k} \Gamma \frac{\omega_1^2}{4} \left[\frac{1}{(\delta - kv)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} - \frac{1}{(\delta + kv)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \right] \end{aligned} \quad (4.2)$$

On retrouve bien la dépendance en v de la figure 2.

- Développement à l'ordre 1 en kv [plage linéaire de la Fig. 2]

$$n_{\pm}(v) = n_0 \left[1 \pm \frac{2\delta}{\delta^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} kv \right] \quad (4.3)$$

avec

$$n_0 = \frac{\Gamma}{2} \frac{\omega_1^2/2}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \quad (4.4)$$

De (4.3) et (4.2), on déduit

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v \quad (4.5)$$

avec

$$\boxed{\gamma = -\frac{4\hbar k^2}{M} n_0 \frac{\delta}{\delta^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}} \quad (4.6)$$

Il faut bien $\delta < 0$ ($\omega < \omega_0$) pour avoir un amortissement ($\gamma > 0$)

- Pour $\delta = -\frac{\Gamma}{2}$, ce qui optimise le dernier facteur $\delta/(\delta^2 + \frac{\Gamma^2}{4})$

$$\gamma = \frac{4\hbar k^2}{M} \frac{n_0}{\Gamma} = 2 \frac{\hbar k^2}{M} \frac{\omega_1^2}{\Gamma^2} \quad (4.7)$$

On peut encore écrire (4.7) sous la forme

$$\gamma = 8 n_0 \frac{\hbar^2 k^2 / 2M}{\hbar \Gamma} = 8 n_0 \frac{E_{recul}}{\hbar \Gamma} \quad (4.8)$$

$2n_0$ est le nombre de cycles de fluorescence par unité de temps pour un atome donné. γ est le taux d'amortissement de la vitesse de cet atome. Comme $E_{recul} \ll \hbar \Gamma$, il faut un grand nombre de cycles de fluorescence pour faire varier la vitesse de façon appréciable. On retrouve bien que le rapport $E_{recul}/\hbar \Gamma$ caractérise la "lenteur" des variables externes vis à vis des variables internes

③ Les divers temps caractéristiques du problème

IV-4

- A la limite perturbative ($\omega_1 \ll \Gamma$) considérée dans ce chapitre, l'évolution d'un atome donné au cours du temps a l'allure représentée sur la figure 3.

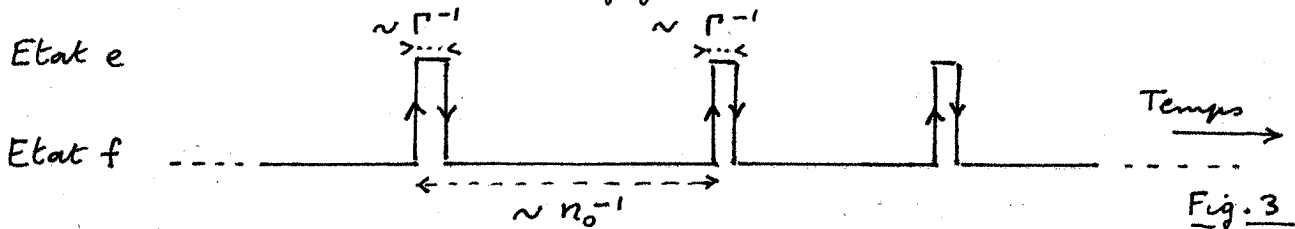


Fig. 3

L'atome est la plupart du temps dans l'état fondamental f. De temps en temps, avec une probabilité par unité de temps de l'ordre de n_0 , il monte dans l'état excité e, par absorption d'un photon, y reste un temps de l'ordre de Γ^{-1} , et redescend dans l'état fondamental par émission spontanée (l'émission induite est négligeable à la limite $\omega_1 \ll \Gamma$)

- 3 échelles de temps

$$\Gamma^{-1} \ll n_0^{-1} \ll \gamma^{-1} \quad (4.9)$$

Γ^{-1} : temps moyen que dure chaque cycle de fluorescence : absorption suivie d'émission spontanée

"Temps de collision" (résonance) entre l'atome et le photon

n_0^{-1} : temps moyen entre 2 cycles de fluorescence successifs sur le même atome

"Temps entre collisions" grand devant le "temps de collision" ($\omega_1 \ll \Gamma$)

γ^{-1} : temps de "relaxation" de v long devant le temps entre collisions.

Il faut plusieurs collisions pour faire changer v de façon appréciable

- Analogie avec le mouvement brownien d'une particule lourde immergée dans un gaz de particules légères ; la particule lourde subit des collisions très brèves, bien séparées dans le temps, et change très peu de vitesse au cours de chaque collision

Remarque

On ne peut parler de probabilité d'absorption d'un photon par unité de temps qu'à la limite $\omega_1 \ll \Gamma$ (ou avec une excitation en raie large). Pour une excitation monochromatique intense ($\omega_1 \gg \Gamma$), l'image de la figure 3 n'est plus valable. L'onde incidente induit une précession cohérente de l'atome entre f et e à la fréquence de Rabi ω_1 , qui est interrompue aléatoirement par des processus d'émission spontanée, séparés par un temps moyen de l'ordre de $2\Gamma^{-1}$ à la limite $\omega_1 \gg \Gamma$.

④ Distribution statistique du nombre de cycles de fluorescence

se produisant pendant un intervalle de temps donné

- Soit δt un intervalle de temps tel que

$$\Gamma^{-1} \ll \delta t \ll \gamma^{-1} \quad (4.10)$$

Comme δt est petit devant γ^{-1} , il est légitime de négliger la variation de vitesse pendant δt .

Comme δt est grand devant Γ^{-1} on peut partager δt en un grand nombre

$$N = \delta t / \varepsilon \gg 1 \quad (4.11)$$

de petits intervalles de largeur ε de l'ordre de quelques Γ

- Les propriétés de la fluorescence de résonance à basse intensité ($\omega_1 \ll \Gamma$) entraînent que IV-5

(i) La probabilité d'avoir plus d'un cycle de fluorescence dans un intervalle ε est négligeable ($\varepsilon N \Gamma^{-1} \ll n_0^{-1}$)

Soient P_+ , P_- , q les probabilités d'avoir respectivement 1 cycle induit par l'onde $+\vec{k}$, 1 cycle induit par l'onde $-\vec{k}$, 0 cycle dans l'intervalle ε . On a

$$P_+ = \varepsilon n_+ \quad P_- = \varepsilon n_- \quad q = 1 - P_+ - P_- \quad (4.12)$$

(ii) les événements se produisant dans 2 intervalles différents sont indépendants.

- Calcul de la probabilité $P(N_+ = r, N_- = s; \delta t)$ d'avoir N_+ cycles $+\vec{k}$ et N_- cycles $-\vec{k}$ dans l'intervalle δt .

Il y a $C_N^r = N! / r! (N-r)!$ façons de choisir r intervalles ε parmi les N formant δt , $C_{N-r}^s = (N-r)! / s! (N-r-s)!$ façons de choisir s intervalles parmi les $N-r$ restants. La probabilité d'avoir un cycle $+\vec{k}$ dans r intervalles est $(P_+)^r$, un cycle $-\vec{k}$ dans s intervalles $(P_-)^s$, 0 cycle dans $(N-r-s)$ intervalles $q^{N-r-s} = (1 - P_+ - P_-)^{N-r-s}$

$$\hookrightarrow P(N_+ = r, N_- = s; \delta t) = \frac{N!}{r! s! (N-r-s)!} (P_+)^r (P_-)^s (1 - P_+ - P_-)^{N-r-s} \quad (4.13)$$

- Dans (4.13), $N \gg 1$ d'après (4.11); r et s sont de l'ordre de quelques unités. En utilisant la formule de Stirling, $N! \sim (N/e)^N \sqrt{2\pi N}$ pour $N \gg 1$, en prenant le Log. de (4.13), et en développant en puissances de r/N et s/N , on montre que $P(N_+, N_-; \delta t)$ est un produit de 2 lois de Poisson pour N_+ et N_- , ce qui montre que N_+ et N_- sont des variables aléatoires indépendantes, de valeurs moyennes et de variances

$$\overline{N_{\pm}} = n_{\pm} \delta t \quad (4.14)$$

$$\sigma^2(N_{\pm}) = \overline{N_{\pm}^2} - (\overline{N_{\pm}})^2 = \overline{N_{\pm}} = n_{\pm} \delta t \quad (4.15)$$

Ce résultat nous sera utile pour l'étude de la diffusion d'impulsion

Remarque A forte intensité ($\omega_1 \gg \Gamma$), la démonstration précédente ne serait plus valable. Pour avoir au plus 1 processus d'émission ^{spontanée} dans un intervalle ε , il faut prendre $\varepsilon \ll \Gamma^{-1}$ puisque les émissions spontanées successives sont séparées par un temps moyen de l'ordre de Γ^{-1} (voir remarque à la fin du § 3 ci-dessus). On ne peut plus alors considérer comme indépendants les événements survenant dans 2 intervalles proches. En effet, il existe des corrélations temporelles entre les photons de fluorescence émis successivement par l'atome (dégrouperment ou "antibunching"), et qui ont une "portée" temporelle de l'ordre de Γ^{-1} . En prenant $\varepsilon \gg \Gamma^{-1}$ comme nous l'avons fait plus haut, on peut négliger de telles corrélations. Mais ce n'est plus possible si $\varepsilon \ll \Gamma^{-1}$. Les corrections correspondantes à la statistique poissonnienne sont discutées dans les références 7, 8, 9 du chapitre II. On trouve bien que ces corrections sont négligeables à la limite $\omega_1 \ll \Gamma$.

a) Variation de l'impulsion atomique pendant un intervalle δt

- Soit $[t, t + \delta t]$ un intervalle de temps satisfaisant (4.10), c.à.d. court devant le temps de "relaxation" γ^{-1} , long devant le temps de "collision" ou de "corrélation" τ^{-1} .

- Soit $\delta \vec{p}(t)$ la variation de l'impulsion atomique au cours de cet intervalle. La conservation de l'impulsion globale du système atome + rayonnement permet d'écrire :

$$\delta \vec{p}(t) = \vec{p}(t + \delta t) - \vec{p}(t) = N_+ \hbar \vec{k} - \hbar \vec{k}'_1 - \dots - \hbar \vec{k}'_i - \dots - \hbar \vec{k}'_{N_+} \\ - N_- \hbar \vec{k} - \hbar \vec{k}''_1 - \dots - \hbar \vec{k}''_j - \dots - \hbar \vec{k}''_{N_-} \quad (4.16)$$

Le terme $N_+ \hbar \vec{k}$ ($-N_- \hbar \vec{k}$) représente l'impulsion gagnée par l'atome par absorption de N_+ (N_-) photons dans l'onde $+\vec{k}$ ($-\vec{k}$), transportant chacun une impulsion $+\hbar \vec{k}$ ($-\hbar \vec{k}$).

Le terme $-\hbar \vec{k}'_i$ ($-\hbar \vec{k}''_j$), avec $i = 1, 2, \dots, N_+$ ($j = 1, 2, \dots, N_-$), représente l'impulsion perdue par l'atome lors de l'émission spontanée d'un photon \vec{k}'_i (\vec{k}''_j), suivant la i ème (j ème) absorption d'un photon dans l'onde $+\vec{k}$ ($-\vec{k}$).

- Dans l'équation (4.16), N_+ et N_- sont des variables aléatoires. Les directions d'émission des photons de fluorescence $\dots \vec{k}'_i \dots \vec{k}''_j \dots$ sont également des variables aléatoires. Il s'ensuit que la variation d'impulsion atomique $\delta \vec{p}(t)$ est également une variable aléatoire, dont nous allons calculer la valeur moyenne et les variances.

b) Valeur moyenne de la variation d'impulsion atomique

- Comme la probabilité d'émission spontanée d'un photon de fluorescence est la même dans 2 directions opposées, on a

$$\vec{k}'_i = \vec{k}''_j = \vec{0} \quad \forall i, j \quad (4.17)$$

On déduit alors de (4.16) et (4.17) que

$$\overline{\delta \vec{p}} = \overline{(N_+ - N_-)} \hbar \vec{k} = (n_+ - n_-) \delta t \hbar \vec{k} \quad (4.18)$$

Comme v reste constant dans l'intervalle δt ($\gamma \delta t \ll 1$), on retrouve alors pour la force moyenne ($\overline{\delta \vec{p}} / \delta t$) le résultat (4.2).

c) Variance de la variation d'impulsion atomique. Tenseur de diffusion

- Calculons maintenant les variances des composantes de $\vec{\delta p}$

$$V_{\alpha\beta} = \overline{\delta p_\alpha(t) \delta p_\beta(t)} - \overline{\delta p_\alpha(t)} \overline{\delta p_\beta(t)} \quad (4.19) \\ \alpha, \beta = x, y, z$$

- Toutes les quantités ne faisant intervenir qu'un seul photon de fluorescence \vec{k}'_i ou \vec{k}''_j sont nulles en moyenne d'après (4.17)

Comme les directions d'émission spontanée de 2 photons de fluorescence différents sont des variables aléatoires indépendantes, toutes les quantités apparaissant dans (4.19), et faisant intervenir 2 photons de fluorescence différents, ont également une valeur moyenne nulle, toujours d'après (4.17)

On en déduit que le tenseur $V_{\alpha\beta}$ est diagonal

$$V_{\alpha\beta} = 0 \quad \text{si } \alpha \neq \beta$$

(4.20) IV-7

et que ses éléments diagonaux valent (rappelons que \vec{k} est suivant Oz)

$$V_{33} = \hbar^2 k^2 \left[\overline{(N_+ - N_-)^2} - \overline{(N_+ - N_-)^2} \right] + \hbar^2 \left[\overline{\sum_i (\vec{e}_3 \cdot \vec{k}'_i)^2} + \overline{\sum_j (\vec{e}_3 \cdot \vec{k}''_j)^2} \right] \quad (4.21.a)$$

$$V_{xx} = \hbar^2 \left[\overline{\sum_i (\vec{e}_x \cdot \vec{k}'_i)^2} + \overline{\sum_j (\vec{e}_x \cdot \vec{k}''_j)^2} \right] \quad (4.21.b)$$

$$V_{yy} = \hbar^2 \left[\overline{\sum_i (\vec{e}_y \cdot \vec{k}'_i)^2} + \overline{\sum_j (\vec{e}_y \cdot \vec{k}''_j)^2} \right] \quad (4.21.c)$$

- La première ligne de (4.21.a) s'écrit encore

$$\hbar^2 k^2 \left[\overline{(N_+^2 - N_+^2)} + \overline{(N_-^2 - N_-^2)} - 2 \overline{(N_+ N_- - N_+ N_-)} \right] \quad (4.22)$$

D'après les résultats du § 4 ci-dessus, le dernier terme de (4.22) est nul (indépendance de N_+ et N_-), et la somme des deux premiers vaut, d'après (4.14) et (4.3) :

$$\hbar^2 k^2 (\overline{N_+} + \overline{N_-}) = \hbar^2 k^2 (n_+ + n_-) \delta t = 2 \hbar^2 k^2 n_0 \delta t \quad (4.23)$$

- La 2^{ème} ligne de (4.21.a), et (4.21.b), (4.21.c) valent respectivement

$$\hbar^2 k^2 (\overline{N_+} + \overline{N_-}) \overline{\cos^2 \theta} = 2 n_0 \hbar^2 k^2 \overline{\cos^2 \theta} \delta t \quad (4.24.a)$$

$$\hbar^2 k^2 (\overline{N_+} + \overline{N_-}) \overline{\sin^2 \theta \cos^2 \varphi} = 2 n_0 \hbar^2 k^2 \overline{\sin^2 \theta \cos^2 \varphi} \delta t \quad (4.24.b)$$

$$\hbar^2 k^2 (\overline{N_+} + \overline{N_-}) \overline{\sin^2 \theta \sin^2 \varphi} = 2 n_0 \hbar^2 k^2 \overline{\sin^2 \theta \sin^2 \varphi} \delta t \quad (4.24.c)$$

Ces termes représentent $2 n_0 \delta t$ fois la moyenne du carré des composantes z, x, y de l'impulsion d'un photon émis spontanément dans la direction d'angles polaires θ et φ . Ces moyennes dépendent du diagramme de rayonnement de l'émission spontanée. Pour une émission isotrope, les 3 moyennes angulaires de (4.24) sont égales à $1/3$. Pour un dipôle oscillant le long de Ox , elles valent $2/5, 1/5, 2/5$.

- En regroupant les résultats (4.23) et (4.24), on peut écrire

$$\boxed{\overline{\delta p_\alpha \delta p_\beta} - \overline{\delta p_\alpha} \overline{\delta p_\beta} = 2 D_{\alpha\beta} \delta t} \quad (4.25)$$

où $D_{\alpha\beta}$ est un tenseur de diffusion donné par

$$D_{\alpha\beta} = n_0 \hbar^2 k^2 \begin{pmatrix} 1 + \overline{\cos^2 \theta} & 0 & 0 \\ 0 & \overline{\sin^2 \theta \cos^2 \varphi} & 0 \\ 0 & 0 & \overline{\sin^2 \theta \sin^2 \varphi} \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

- En conclusion, l'analyse précédente montre qu'il y a 2 raisons physiques pour la diffusion de l'impulsion atomique :

- (i) les fluctuations de l'impulsion perdue par émission spontanée liés au caractère aléatoire de la direction d'émission
- (ii) les fluctuations de l'impulsion gagnée lors de l'absorption dues aux fluctuations de $N_+ - N_-$ autour de $\overline{N_+ - N_-}$. Ce mécanisme ne joue que dans la direction de l'onde incidente, c-à-d pour D_{33}

⑥ Variation de l'énergie cinétique pendant un intervalle δt | IV-8
Limites du refroidissement radiatif

- Variation de l'énergie cinétique E_{c3} le long de l'axe Oz du refroidissement [cf fig. 1] pendant un intervalle de temps δt satisfaisant (4.10)

$$\begin{aligned} \delta E_{c3} &= [P_3^2(t+\delta t) - P_3^2(t)] / 2M \\ &= \{ [\delta P_3(t)]^2 + 2P_3(t) \delta P_3(t) \} / 2M \end{aligned} \quad (4.27)$$

Dans (4.27), $\delta P_3(t) = P_3(t+\delta t) - P_3(t)$ est la variation de P_3 à partir d'une valeur fixée, $P_3(t)$, de P_3 . Effectuons la moyenne sur les cycles de fluorescence

$$\begin{aligned} \overline{\delta E_{c3}} &= \{ \overline{[\delta P_3(t)]^2} + 2P_3(t) \overline{\delta P_3(t)} \} / 2M \\ &= \{ 2D_{33} \delta t + \gamma^2 P_3^2(t) \delta t^2 - 2\gamma P_3^2(t) \delta t \} / 2M \end{aligned} \quad (4.28)$$

On a utilisé (4.25) et le fait que, d'après (4.18) et (4.2), $\overline{\delta P_3(t)} = -\gamma P_3(t) \delta t$. Le 2^{ème} terme de la 2^{ème} ligne de (4.28) est $\gamma \delta t$ fois plus petit que le 3^{ème} et peut donc être négligé, de sorte que

$$\frac{\overline{\delta E_{c3}}}{\delta t} = \frac{D_{33}}{M} - 2\gamma E_{c3} \quad (4.29)$$

- La vitesse de variation "à gros grains" (4.29) correspond à une énergie cinétique fixée à l'instant t . La moyenne est prise sur tous les cycles de fluorescence se produisant entre t et $t+\delta t$. Si l'on prend en plus une moyenne sur toutes les valeurs possibles $P_3(t)$ de P_3 à l'instant t [fonction de distribution de P_3], on obtient, par suite de la linéarité de (4.29) en E_{c3} , une équation analogue pour la vitesse de variation à gros grains de l'énergie cinétique moyenne $\langle E_{c3} \rangle$

$$\boxed{\frac{\delta}{\delta t} \langle E_{c3} \rangle = \frac{D_{33}}{M} - 2\gamma \langle E_{c3} \rangle} \quad (4.30)$$

Compétition entre 2 processus : refroidissement radiatif qui tend à diminuer $\langle E_{c3} \rangle$ (dernier terme de 4.30), échauffement dû à la diffusion d'impulsion (1^{er} terme). L'état d'équilibre correspond à

$$\boxed{\langle E_{c3} \rangle_{\text{eqn.}} = \frac{D_{33}}{2M\gamma}} \quad (4.31)$$

Si l'on définit une température effective T_3 le long de Oz par $\langle E_{c3} \rangle_{\text{eqn.}} = \frac{1}{2} k_B T_3$ (4.32)

on déduit (4.32), et des expressions (4.26) et (4.6) de D_{33} et γ

$$k_B T_3 = \frac{D_{33}}{M\gamma} = -\frac{\hbar \Gamma}{4} \frac{1 + \overline{\cos^2 \theta}}{4} \frac{s^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}{\delta \Gamma} \quad (4.33)$$

qui est la plus basse possible pour $\delta = -\frac{\Gamma}{2}$ et vaut alors

$$\boxed{k_B T_3 = \frac{\hbar \Gamma}{4} \frac{1 + \overline{\cos^2 \theta}}{4}} \quad (4.34)$$

Ainsi, c'est la longueur naturelle qui détermine la température ultime T_3

Application numérique. Pour Na, on trouve, en supposant un diagramme de rayonnement isotrope ($\overline{\cos^2 \theta} = 1/3$), une température ultime égale à $T_3 = 1,5 \cdot 10^{-4} \text{ K} = 0,15 \text{ mK}$

Remarques

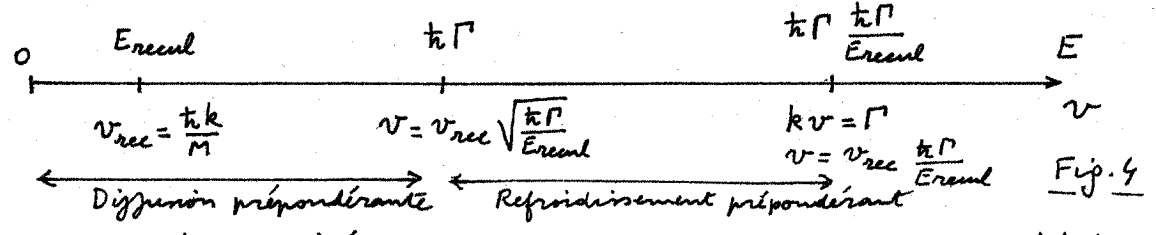
(i) Si l'on effectue un refroidissement radiatif dans les 3 directions Ox, Oy, Oz , de manière à avoir le même γ dans les 3 directions, il faut ajouter au tenseur de diffusion (4.26) les tenseurs de diffusion associés aux 2 autres paires d'ondes le long de Ox et Oy . L'équation (4.30) est alors remplacée par

$$\frac{d}{dt} \langle E_c \rangle = \frac{D}{M} - 2\gamma \langle E_c \rangle \quad (4.35)$$

où E_c est l'énergie cinétique totale, $E_{cx} + E_{cy} + E_{cz}$ et où $D = D_{xx} + D_{yy} + D_{zz}$ est la trace du tenseur de diffusion. La température d'équilibre T est donnée par

$$\frac{3}{2} k_B T = \langle E_c \rangle_{eq.} = \frac{D}{2M\gamma} \quad (4.36)$$

(ii) La figure 4 récapitule quelques énergies importantes et les vitesses correspondantes (la figure n'est pas à l'échelle)



- E_{recul} est l'énergie cinétique de recul correspondant à $v_{recul} = \hbar k / M$
- $\hbar\Gamma$ est l'énergie d'équilibre résultant de la compétition entre diffusion et refroidissement (le 1^{er} processus l'emporte pour $E < \hbar\Gamma$, le 2^{ème} pour $E > \hbar\Gamma$). La vitesse correspondant à l'énergie $\hbar\Gamma$ est plus grande que v_{recul} par un facteur $\sqrt{\hbar\Gamma / E_{recul}} \gg 1$
- Nous avons enfin porté sur la figure 4, la vitesse v telle que l'effet Doppler correspondant, kv , est de l'ordre de Γ , et qui est par suite égale à $v_{recul} \frac{\hbar\Gamma}{E_{recul}}$, soit encore $\sqrt{\frac{\hbar\Gamma}{E_{recul}}}$ fois plus grande que la vitesse correspondant à $\hbar\Gamma$. v doit être inférieure à cette valeur pour qu'on soit dans la plage linéaire de la figure 2 [pour $\delta = -\frac{\Gamma}{2}$] et pour que, par suite, la force de friction soit linéaire en v . L'énergie correspondante est $\hbar\Gamma (\frac{\hbar\Gamma}{E_{recul}}) \gg \hbar\Gamma$

RÉFÉRENCES

- (1) A. Kastler, J. Phys. Rad. 11, 255 (1950)
- (2) A. Abragam et M. Goldman, "Nuclear Magnetism: order and disorder" Clarendon press, Oxford 1982 Chapitre 6 et références in à "l'effet solide" (1958)
- (3) T.W. Hansch, A.L. Schawlow, Optics Commun. 13, 68 (1975)
- (4) V.S. Letokhov, V.G. Minogin, B.D. Pavlik, Optics Commun. 19, 72 (1976)
- (5) D.J. Wineland, H. Dehmelt, Bull. Am. Phys. Soc. 20, 637 (1975)
- (6) H.G. Dehmelt, Nature 262, 777 (1976)
- (7) D.J. Wineland, W.M. Itano, Phys. Rev. A20, 1521 (1979)
- (8) D.J. Wineland, R.E. Drullinger, F.L. Walls, Phys. Rev. Lett. 40, 1639 (1978)
- (9) W. Neuhauser, M. Hohenstatt, P. Toschek, H. Dehmelt Phys. Rev. Lett. 41, 233 (1978)
Phys. Rev. A22, 1137 (1980)

① - Introduction - Buts de ce chapitre

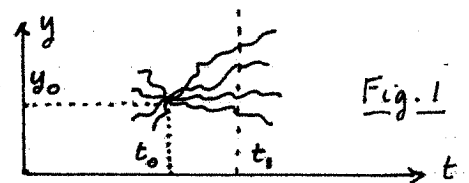
- L'impulsion $p(t)$ d'un atome soumis au refroidissement radiatif est une fonction aléatoire du temps (voir cours IV). Les "moments" d'ordre 1 et 2, \overline{Sp} et $\overline{Sp^2}$, de l'accroissement Δp de $p(t)$ au cours de Δt ont été calculés plus haut. Peut-on aller plus loin et étudier la distribution $\mathcal{P}(p, t)$ des valeurs possibles de p à un instant donné, déterminer la vitesse de variation de cette distribution? Y a-t-il une distribution stationnaire pour p ? Est-elle gaussienne pour qu'on puisse parler effectivement de température?
- Autre exemple de problème: pièges radiatifs. Dans l'exemple précédent, les forces radiatives ne dépendent pas de la position x de l'atome et, seule, l'impulsion p joue un rôle important. Ce n'est plus vrai pour un atome dans un puits de potentiel optique. Peut-on alors définir une fonction de distribution $\mathcal{P}(x, p; t)$ pour x et p à l'instant t , étudier sa vitesse de variation, et en déduire par exemple la probabilité pour l'atome de s'échapper hors du puits?
- Le fait de parler de x et p au même instant implique un point de vue classique. C'est un tel point de vue qui sera adopté dans ce chapitre. Le but est d'introduire simplement des équations cinétiques et de se familiariser avec leur structure et les approximations que l'on peut faire pour les résoudre. Le problème sera repris ensuite quantiquement, et on montrera qu'on obtient des équations tout à fait analogues pour la fonction de Wigner.

② Equation pilote pour un processus stochastique de mémoire très courte (processus de Markov) [pour plus de détails, voir références 1 à 3]a) Processus stochastique stationnaire

- Fonction $y(t)$ [ou plusieurs fonctions $y(t), z(t), \dots$] non connues avec certitude. Ensemble de toutes les "réalisations" possibles de $y(t)$.
- Moyennes d'ensemble sur toutes ces réalisations permettant de définir des densités de probabilité à 1 ou plusieurs temps
 $W(y, t_1)$: probabilité d'avoir y_1 à t_1
 $W(y_1, t_1, y_2, t_2)$: probabilité d'avoir y_1 à t_1 et y_2 à t_2 etc...
- Stationnarité: invariance par translation dans le temps
 $W(y, t_1)$ est indépendant de t_1 ; $W(y_1, t_1, y_2, t_2)$ ne dépend que de $t_2 - t_1, \dots$
- Exemple: impulsion $p(t)$ de l'atome étudié dans le cours IV

b) Sous-ensemble des réalisations partant d'un état initial y_0, t_0 donné

- Tous les systèmes partant de y_0 à t_0 se trouvent répartis à un instant ultérieur $t_1 > t_0$ suivant une distribution qui ne coïncide pas en général avec $W(y, t_1)$ (sauf si $t_1 - t_0 \gg$ "temps de relaxation")



En imposant une condition initiale, on associe donc à un processus stochastique stationnaire un autre processus non stationnaire, dont nous noterons les densités de probabilité \mathcal{P} (pour les distinguer des W)

$P_{y_0 t_0}(y, t_1)$: probabilité d'avoir y à $t_1 > t_0$, sachant qu'on a y_0 à t_0 | V-2

$P_{y_0 t_0}(y_1 t_1, y_2 t_2)$: pbté d'avoir y_1 à $t_1 > t_0$ et y_2 à $t_2 > t_1$, sachant qu'on a y_0 à t_0 ...

- Nous noterons encore $P_{y_0 t_0}(y, t_1) = \pi_1(y_0 t_0 | y, t_1) \quad (t_1 > t_0) \quad (5.1)$

π_1 : "probabilité de transition" $y_0 t_0 \rightarrow y, t_1$ (ne dépend que de $t_1 - t_0$)

Normalisation $\int dy, \pi_1(y_0 t_0 | y, t_1) = 1 \quad (5.2)$

- $P_{y_0 t_0}(y, t_1, y_2 t_2) = \pi_1(y_0 t_0 | y, t_1) \pi_2(y_0 t_0, y, t_1 | y_2 t_2) \quad (t_2 > t_1 > t_0) \quad (5.3)$

$\pi_2(y_0 t_0, y, t_1 | y_2 t_2)$: pbté d'avoir y_2 à t_2 sachant qu'on a y_0 à t_0 et y_1 à t_1 .

Signification de (5.3) : parmi toutes les réalisations partant de $y_0 t_0$, $\pi_1(y_0 t_0 | y, t_1)$ donnent la proportion de celles qui passent par y, t_1 . Parmi ces réalisations (celles qui passent par $y_0 t_0$ et y, t_1), $\pi_2(y_0 t_0, y, t_1 | y_2 t_2)$ donne la proportion de celles qui arrivent en $y_2 t_2$. Le produit de π_1 par π_2 donne donc la probabilité d'avoir y, t_1 puis $y_2 t_2$ après un départ en $y_0 t_0$.

- Comme $\int dy, P_{y_0 t_0}(y, t_1, y_2 t_2) = P_{y_0 t_0}(y_2 t_2)$, on déduit de (5.3) et (5.1) que

$$\pi_1(y_0 t_0 | y_2 t_2) = \int dy, \pi_1(y_0 t_0 | y, t_1) \pi_2(y_0 t_0, y, t_1 | y_2 t_2) \quad (5.4)$$

- Généralisation : au lieu d'avoir à t_0 une condition initiale y_0 très bien définie, on peut avoir un "mélange statistique" de y_0 avec des "poids" $P(y_0)$. Les généralisations de (5.1) et (5.3) sont alors

$$P_{t_0}(y, t_1) = \int dy_0 P(y_0) \pi_1(y_0 t_0 | y, t_1) \quad (t_1 > t_0) \quad (5.5)$$

$$P_{t_0}(y, t_1, y_2 t_2) = \int dy_0 P(y_0) \pi_1(y_0 t_0 | y, t_1) \pi_2(y_0 t_0, y, t_1 | y_2 t_2) \quad (t_2 > t_1 > t_0) \quad (5.6)$$

c) Processus de Markov - Equation de Smoluchowski

- Définition : $\pi_2(y_0 t_0, y, t_1 | y_2 t_2) = \pi_1(y, t_1 | y_2 t_2) \quad (5.7)$

$$\pi_3(y_0 t_0, y, t_1, y_2 t_2 | y_3 t_3) = \pi_1(y_2 t_2 | y_3 t_3) \quad (5.8)$$

et ainsi de suite ... Dans un "chemin" $y_0 t_0, y_1 t_1, \dots, y_{n-1} t_{n-1}, y_n t_n$, la probabilité du dernier "saut" $y_{n-1} t_{n-1} \rightarrow y_n t_n$ ne dépend que de l'état $y_{n-1} t_{n-1}$ juste avant ce saut, et non de toute "l'histoire antérieure". Processus sans mémoire.

- En reportant (5.7) dans (5.4), on obtient l'équation de Smoluchowski

$$\pi_1(y_0 t_0 | y_2 t_2) = \int dy_1 \pi_1(y_0 t_0 | y_1 t_1) \pi_1(y_1 t_1 | y_2 t_2) \quad (5.9)$$

- L'équation (5.6) prend également une forme plus simple

$$P_{t_0}(y, t_1, y_2 t_2) = P_{t_0}(y, t_1) \pi_1(y, t_1 | y_2 t_2) \quad (5.10)$$

Finalement, si le processus est markovien, il suffit de connaître l'état initial $P(y_0)$ et la probabilité de transition $\pi_1(y_i t_i | y_j t_j) \quad (t_j > t_i)$, que nous noterons π pour simplifier, pour tout connaître.

d) Forme différentielle de l'équation de Smoluchowski. Equation pilote

- Dans (5.9) posons $t_1 = t \quad (t > t_0)$ et choisissons $t_2 = t + \delta t$

$$\pi(y_0 t_0 | y, t + \delta t) = \int dy' \pi(y_0 t_0 | y' t) \pi(y' t | y, t + \delta t) \quad (5.11)$$

$\pi(y' t | y, t + \delta t)$, qui ne dépend que de δt , est la pbté de transition élémentaire

- En multipliant les 2 membres de (5.11) ^{par $P(y_0)$} et en intégrant sur y_0 , on obtient compte tenu de (5.5) [en omettant, pour simplifier, l'indice t_0 sur P]

$$P(y, t + \delta t) = \int dy' P(y', t) \pi(y' t | y, t + \delta t) \quad (5.12)$$

Ainsi, pour un processus de Markov (et seulement dans ce cas), la fonction de distribution à $t + \delta t$ peut être reliée directement à la même fonction à t

par une expression ne faisant intervenir que la probabilité de transition élémentaire entre t et $t+\delta t$, et pas l'histoire antérieure à t .
 Les équations (5.11) ou (5.12) sont appelées "équations pilotes".

- En utilisant la condition de normalisation (5.2), on peut encore écrire

$$P(y, t+\delta t) - P(y, t) = \int dy' P(y', t) \Pi(y'|y, t+\delta t) - \int dy'' P(y'', t) \Pi(y''|y, t+\delta t) \quad (5.13)$$

Signification très claire : la variation de P en y entre t et $t+\delta t$ est égale à ce qui arrive en y moins ce qui part de y .

Pour δt suffisamment petit, le second membre de (5.13) est également petit, de l'ordre de δt , et on peut obtenir alors une équation donnant la vitesse de variation $\partial P(y, t) / \partial t$ de $P(y, t)$ en fonction de P au même instant.

e) Processus de Markov approchés

Tout processus physique a, en général, un temps de mémoire fini τ_c (temps de corrélation de la "force" faisant évoluer y , par exemple temps de collision pour une particule brownienne). Pour pouvoir négliger cette mémoire, et considérer le processus comme un processus de Markov approché, il faut garder δt fini dans (5.11), (5.12) ou (5.13), et grand devant τ_c . D'autre part, pour pouvoir tirer de (5.13) une vitesse de variation, il faut que δt soit très petit devant le temps caractéristique d'évolution de P , le temps de relaxation τ_R .

En physique, l'écriture d'une équation pilote implique donc l'existence de 2 échelles de temps bien distinctes τ_c, τ_R avec

$$\tau_R \gg \tau_c \quad (5.14)$$

Remarque : exemple de processus non markovien (F(x))

Particule brownienne soumise en plus à une force extérieure $F(x)$ dépendant de x . Peut-on considérer la vitesse toute seule v (ou l'impulsion $p = Mv$, comme une variable stochastique markovienne ? L'accroissement δv de v entre t et $t+\delta t$ dépend, non seulement des collisions avec les particules du fluide (qui ont un temps de mémoire très court et dont l'effet dépend très peu du passé de v), mais également de la force extérieure au point $x(t)$ où se trouve la particule à l'instant t . Si l'on veut exprimer l'effet de la force extérieure entre t et $t+\delta t$ en fonction de v seulement, il faut réexprimer dans $F(x)$, $x(t)$ en fonction de v :
 $x(t) = x(t_0) + \int_{t_0}^t v(t') dt'$, et on voit que toute l'histoire antérieure de v intervient.

Par contre, si l'on considère l'ensemble $\{x(t), v(t)\}$, cet ensemble est markovien, puisque l'évolution de $x(t)$ et $v(t)$ entre t et $t+\delta t$ ne dépend que de $x(t)$ et $v(t)$ et non du passé de ces 2 variables. Ainsi, une variable stochastique peut ne pas être markovienne, mais faire partie d'un ensemble plus vaste qui, lui, est markovien. C'est seulement pour cet ensemble qu'on peut écrire une équation pilote. Dans l'exemple précédent, on peut écrire une équation pilote pour $P(x, v; t)$ mais non pour $P(v, t)$. Nous rencontrerons plus loin une telle situation pour une particule dans un puits de potentiel optique.

f) Allure de la probabilité de transition élémentaire

Comment varie la pte de transition élémentaire $\Pi(y'|y, t+\delta t)$ en fonction de l'amplitude $y-y'$ du "saut" de y pendant δt . 2 situations extrêmes

(i) Sauts faibles : pour δt petit, Π n'est appréciable que pour $y-y'$ petit.

Exemple des collisions faibles d'une particule brownienne avec des particules beaucoup plus légères, ou de la diffusion résonnante d'un photon par un atome (variation de p_{at} faible, de l'ordre de $\hbar k$. Voir cours IV)

Après 1 collision faible (ou 1 diffusion), l'allure de π en fonction de y dépend du processus étudié. Mais après plusieurs collisions faibles indépendantes (en nombre pas trop élevé toutefois pour que l'effet global reste petit), l'allure de π tend vers une gaussienne (théorème de la limite centrale). Dans l'exemple du refroidissement radiatif il faut prendre $\delta t \gg \tau_0^{-1}$ pour avoir plusieurs cycles de fluorescence, mais $\delta t \ll \tau^{-1}$ pour avoir un effet global faible

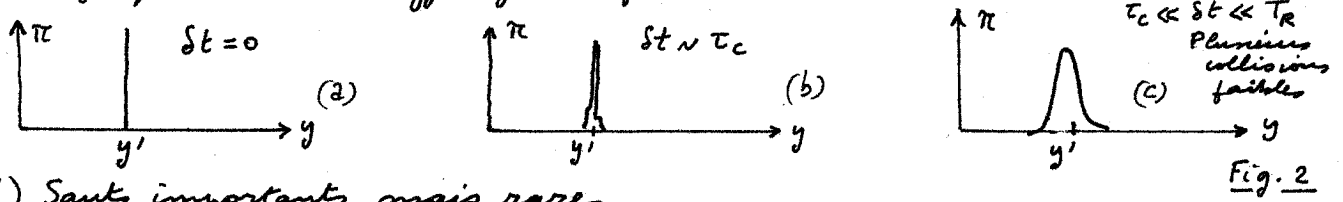


Fig. 2

(ii) Sauts importants mais rares

Exemple de collision entre particules de masse comparable. Chaque collision fait varier la vitesse de la particule de manière appréciable. Mais, pour qu'on puisse écrire une équation pilote, il faut 2 échelles de temps: un temps entre collisions T_c beaucoup plus long que le temps de collision τ_c . En prenant $\tau_c \ll \delta t \ll T_c$, la probabilité pour qu'une particule subisse une collision pendant δt est faible, mais l'effet d'une telle collision, quand elle se produit, est important (Fig. 3).

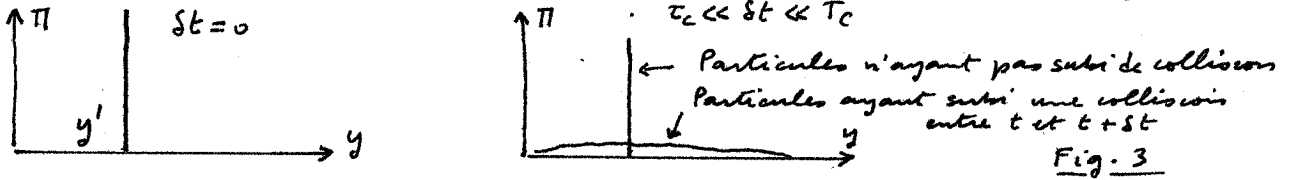


Fig. 3

Par suite de la petitesse de τ_c , le problème des forces radiatives entre dans la catégorie (i).

③ - Limite des faibles sauts - Équations de Fokker-Planck

a) Hypothèses sur la probabilité de transition élémentaire $\pi(y't | y,t + \delta t)$

- (i) $\pi(y't | y,t + \delta t)$ est une fonction de $y', y-y', \delta t$ qui varie beaucoup plus vite en fonction de $y-y'$ qu'en fonction de y' , et qui, pour δt petit, n'est appréciable que pour $y-y'$ petit (cas i de 2f)
- (ii) Dans l'expression (5.12), π varie beaucoup plus vite en fonction de $y-y'$ autour de $y-y' \approx 0$ que $\mathcal{P}(y',t)$ en fonction de y' : l'amplitude des sauts est beaucoup plus faible que la largeur de la distribution \mathcal{P} .

b) Développement de Kramers Moyal - Approximation de Fokker-Planck

- Posons $y-y' = \delta y$ et récrivons (5.12) sous la forme

$$\mathcal{P}(y,t + \delta t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d(\delta y) \mathcal{P}(y-\delta y, t) \pi(y-\delta y, t | y, t + \delta t) \quad (5.15)$$

D'après l'hypothèse (i) du § a ci-dessus, l'intégrand de (5.15) est une fonction de y et δy qui varie lentement en y sur un intervalle de l'ordre de l'amplitude des sauts δy . On peut donc valablement effectuer un développement de Taylor

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(y-\delta y, t) \pi(y-\delta y, t | y, t + \delta t) &= \mathcal{P}(y, t) \pi(y, t | y + \delta y, t + \delta t) \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} (\delta y)^n \frac{\partial^n}{\partial y^n} \mathcal{P}(y, t) \pi(y, t | y + \delta y, t + \delta t) \end{aligned} \quad (5.16)$$

En reportant (5.16) dans (5.15), on obtient, compte tenu de (5.2)

$$P(y, t + \delta t) - P(y, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial y^n} P(y, t) \int_{-\infty}^{+\infty} d(\delta y) (\delta y)^n \pi(y, t | y + \delta y, t + \delta t) \quad (5.17) \quad \text{V-5}$$

c'est à dire encore

$$\frac{\partial}{\partial t} P(y, t) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial y^n} M_n(y) P(y, t) \quad (5.18)$$

où

$$M_n(y) = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\delta t} \int_{-\infty}^{+\infty} d(\delta y) (\delta y)^n \pi(y, t | y + \delta y, t + \delta t) \quad (5.19)$$

est le quotient par $n! \delta t$ du moment d'ordre n de l'accroissement δy de y pendant δt . Le développement (5.19) est le développement de Kramers-Moyal.

En toute rigueur, la limite $\delta t \rightarrow 0$ de (5.19) doit être comprise comme δt petit devant T_R tout en restant grand devant τ_c .

- Si la largeur en y de $P(y, t)$ est petite devant l'amplitude δy des sauts (hypothèse ii du § a ci-dessus), les termes successifs de (5.19) sont de plus en plus petits. L'équation de Fokker-Planck correspond à l'approximation où les termes d'ordre supérieur à 2 sont négligés

$$\frac{\partial}{\partial t} P(y, t) = - \frac{\partial}{\partial y} M_1(y) P(y, t) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} M_2(y) P(y, t) \quad (5.20)$$

La petiteur des sauts permet ainsi d'approximer l'équation pilote qui est en général une équation intégrale en y par une équation aux dérivées partielles.

c) Quelques propriétés de l'équation de Fokker-Planck

Vocabulaire

Le 1^{er} terme du 2^{ème} membre de (5.20) est appelé terme de transport, ou de convection, ou de dérive ; le 2^{ème} terme, terme de diffusion ou de fluctuations.

L'équation de Fokker-Planck (5.20) est toujours linéaire en P . La dénomination d'équation de F.P. linéaire est cependant souvent réservée à une situation où $M_1(y)$ est proportionnel à y et $M_2(y)$ indépendant de y . Quand $M_2(y)$ est indépendant de y et que $M_1(y)$ est une fonction non-linéaire de y , on parle parfois d'équation quasi-linéaire.

Courant

L'équation de Fokker-Planck peut être encore écrite

$$\frac{\partial}{\partial t} P(y, t) + \frac{\partial}{\partial y} J(y, t) = 0 \quad (5.21)$$

et apparaît comme une équation de continuité pour la densité de probabilité $P(y, t)$ et le courant

$$J(y, t) = M_1(y) P(y, t) - \frac{\partial}{\partial y} M_2(y) P(y, t) \quad (5.22)$$

Le premier terme de (5.22) est un courant de convection (proportionnel à P), le second, un courant de diffusion (proportionnel à un gradient). L'équation (5.21) entraîne que $\int dy P(y, t)$ est conservé au cours du temps.

Solution stationnaire

La distribution stationnaire $P_{st}(y)$, quand elle existe, correspond à $J=0$ et est donc solution de

$$M_1(y) P_{st}(y) - \frac{\partial}{\partial y} M_2(y) P_{st}(y) = 0 \quad (5.23)$$

Elle s'écrit

$$P_{st}(y) = \frac{C}{M_2(y)} \exp \int_0^y \frac{M_1(y')}{M_2(y')} dy' \quad (5.24)$$

où C est une constante [à condition que P_{st} soit normalisable]

Fonction de Green

V-6

C'est la solution de (5.20) qui, à l'instant initial t_0 , se réduit à $\delta(y-y_0)$

Pour $t-t_0 \ll T_R$, la fonction de Green de (5.20) reste une fonction très étroite, localisée près de y_0 . Elle varie avec y beaucoup plus vite que $M_1(y)$ et $M_2(y)$ et est donc très proche de la fonction de Green d'une équation de Fokker-Planck plus simple

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{P}(y,t) = -M_1(y_0) \frac{\partial}{\partial y} \tilde{P}(y,t) + M_2(y_0) \frac{\partial^2}{\partial y^2} \tilde{P}(y,t) \quad (5.25)$$

Par transformée de Fourier, on montre que la fonction de Green de (5.25) est une gaussienne centrée en $y_0 + M_1(y_0)(t-t_0)$ et de variance $2M_2(y_0)(t-t_0)$. On en déduit qu'aux temps très courts ($t-t_0 \ll T_R$), la fonction de Green de (5.20) est très proche d'une telle gaussienne. Aux temps plus longs, la fonction de Green de (5.20) n'est plus forcément gaussienne.

Peut-on considérer la fonction de Green de l'équation de Fokker-Planck (5.20) comme la solution de l'équation pilote (5.12) se réduisant à $\delta(y-y_0)$ pour $t=t_0$, c'est à dire encore comme la probabilité de transition $\pi(y_0, t_0 | y, t)$ du processus de Markov. Aux temps très courts, $t-t_0 \ll T_R$, sans doute pas, car l'hypothèse ci du § 3a ci dessus n'est pas valable: la largeur de $P(y,t)$ est alors très faible et ne peut être considérée ^{comme} grande devant celle de π . L'approximation de (5.12) par (5.20) n'est alors pas bonne. Par contre, si $t-t_0$ est suffisamment grand pour qu'il y ait eu plusieurs "collisions faibles" entre t_0 et t , tout en restant très petit devant T_R , nous avons vu plus haut (voir Fig. 2c) que π est alors proche d'une gaussienne, dont les moments d'ordre 1 et 2 sont, d'après (5.19), $M_1(y_0)(t-t_0)$ et $2M_2(y_0)(t-t_0)$. On en déduit que la fonction de Green de (5.20) devient alors une bonne approximation de $\pi(y_0, t_0 | y, t)$

Avantages de l'équation de Fokker-Planck

Pour un processus de Markov à faibles sauts, il suffit de calculer, par une méthode perturbative par exemple, les moments d'ordre 1 et 2, $\overline{\delta y}$ et $\overline{\delta y^2}$ de l'accroissement δy de y pendant δt . Si l'on montre que, pour δt suffisamment petit,

$$\overline{\delta y} = M_1(y) \delta t \quad \overline{\delta y^2} = 2 M_2(y) \delta t \quad (5.26)$$

on peut alors écrire l'équation (5.20) correspondant aux fonctions ainsi trouvées, et en déduire des informations sur le comportement à long terme du système

Généralisation à un processus à plusieurs variables

Pour un processus de Markov à plusieurs variables $\{y_1, y_2, \dots, y_N\}$, l'équation de Fokker-Planck (5.20) se généralise aisément

$$\frac{\partial P(\vec{y}, t)}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial y_i} M_{1i}(\vec{y}) P(\vec{y}, t) + \sum_i \sum_j \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} M_{2ij}(\vec{y}) P(\vec{y}, t) \quad (5.27)$$

ou

$$\left\{ \begin{array}{l} \overline{\delta y_i} = M_{1i}(\vec{y}) \delta t \\ \overline{\delta y_i \delta y_j} = 2 M_{2ij}(\vec{y}) \delta t \end{array} \right. \quad (5.28)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \overline{\delta y_i} = M_{1i}(\vec{y}) \delta t \\ \overline{\delta y_i \delta y_j} = 2 M_{2ij}(\vec{y}) \delta t \end{array} \right. \quad (5.29)$$

④ 1^{er} exemple : Equations de Fokker-Planck pour la distribution d'impulsion d'atomes soumis au refroidissement radiatif

a) Etablissement de l'équation de Fokker-Planck

- La composante p_z de l'impulsion le long de l'axe Oz du refroidissement (figure 1 page IV-1) est une variable markovienne : pas de force dépendant de x , découplage entre les mouvements sur les 3 axes Ox, Oy, Oz , temps de corrélation $\tau_c = \Gamma^{-1}$ (durée d'un cycle de fluorescence) court devant le temps de relaxation γ^{-1} de p_z (voir cours IV). On peut donc écrire une équation pilote pour P_z (noté p pour simplifier). Comme les "sauts" de p (de l'ordre de $\hbar k$) sont petits devant la largeur de la distribution d'impulsion $\mathcal{P}(p,t)$, l'approximation de Fokker-Planck est valable.

- D'après le cours IV, pour $\Gamma^{-1} \ll \delta t \ll \gamma^{-1}$ (5.30)

$$\overline{\delta p} = -\gamma p \delta t \quad (5.31)$$

$$\overline{\delta p^2} = (\overline{\delta p})^2 + 2D \delta t = \gamma^2 p^2 \delta t^2 + 2D \delta t \quad (5.32)$$

$$D \approx n_0 \hbar^2 k^2 \quad (5.33)$$

D étant le coefficient de diffusion, n_0 la probabilité par unité de temps d'un cycle de fluorescence. On déduit de (5.26)

$$M_1(p) = \overline{\delta p} / \delta t = -\gamma p \quad (5.34)$$

$$M_2(p) = \overline{\delta p^2} / 2\delta t = D + \gamma^2 p^2 \delta t / 2 \quad (5.35)$$

Pour évaluer l'ordre de grandeur du dernier terme de (5.35), remplaçons p^2 par la valeur moyenne $\langle p^2 \rangle$ à l'équilibre calculée au cours IV (voir 4.31)

$$\langle p^2 \rangle = p_0^2 = 2M \frac{p_0^2}{2M} = 2M \frac{D}{2M\gamma} = \frac{D}{\gamma} \quad (5.36)$$

On a donc

$$M_2(p) = D + \frac{1}{2} \gamma^2 p^2 \delta t \approx D (1 + \frac{1}{2} \gamma \delta t) \approx D \quad (5.37)$$

Même si l'on ne fait pas tendre δt vers zéro (pour garder $\delta t \gg \Gamma^{-1}$ et considérer le processus comme markovien), on voit qu'on peut négliger le terme en δt de (5.35), puisque, d'après (5.30), $\gamma \delta t \ll 1$. Le même argument s'appliquerait pour tous les autres termes en $\delta t, \delta t^2, \dots$ des autres moments M_n ($n > 2$), qui sont en $\gamma \delta t, \gamma^2 \delta t^2, \dots$

- Il vient ainsi finalement

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}(p,t) = \gamma \frac{\partial}{\partial p} p \mathcal{P}(p,t) + D \frac{\partial^2}{\partial p^2} \mathcal{P}(p,t) \quad (5.38)$$

b) Solution stationnaire et fonction de Green

- Le courant J associé \mathcal{P} est, d'après (5.22), (5.34), (5.37)

$$J(p,t) = -\gamma p \mathcal{P}(p,t) - D \frac{\partial}{\partial p} \mathcal{P}(p,t) \quad (5.39)$$

et la solution stationnaire ($J=0$) vaut

$$\mathcal{P}_{st}(p) = c^{\frac{1}{2}} \exp(-\gamma p^2 / 2D) \quad (5.40)$$

C'est bien une gaussienne qu'on peut encore écrire

$$\mathcal{P}_{st}(p) = c^{\frac{1}{2}} \exp(-p^2 / 2Mk_B T) \quad (5.41)$$

avec $k_B T = D / M\gamma \quad (5.42)$

- La température introduite au cours IV (voir 4.33) peut donc bien être considérée comme la température d'équilibre des degrés de liberté de translation

- On peut vérifier que

$$\left[\frac{2\pi D}{\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \right]^{-1/2} \exp \left[-\frac{\gamma}{2D} \frac{(p - p_0 e^{-\gamma t})^2}{1 - e^{-2\gamma t}} \right] \quad (5.43)$$

est la solution de (5.38) se réduisant à $\delta(p - p_0)$ pour $t=0$, et donc la fonction de Green de (5.38). Le fait que cette fonction de Green soit une gaussienne pour tout t est dû à la forme simple de M_1 (linéaire en p) et M_2 (indépendant de p). On peut vérifier également que, pour $t \gg \gamma^{-1}$, la fonction de Green (5.43) tend vers la distribution stationnaire (5.40). Les conditions initiales sont "oubliées" après un temps supérieur à γ^{-1} .

c) Description équivalente par équation de Langevin

- Il existe une autre description possible de la variable stochastique markovienne $p(t)$, entièrement équivalente à celle donnée par (5.38). Elle repose sur l'équation de Langevin

$$\frac{d}{dt} p(t) = -\gamma p(t) + F(t) \quad (5.44)$$

Equation dynamique où l'effet du rayonnement sur l'impulsion est décrit par

- une force de friction, $-\gamma p(t)$, représentant l'effet moyen du rayonnement (linéaire en p pour p suffisamment petit)
- une force de Langevin aléatoire, $F(t)$, représentant la partie fluctuante de l'effet du rayonnement.

- Comme $F(t)$ est aléatoire, la solution $p(t)$ de (5.44) représente un processus stochastique. Pour qu'il y ait équivalence avec celui décrit par (5.38), certaines conditions doivent bien sûr être imposées sur F

Conditions sur $F(t)$

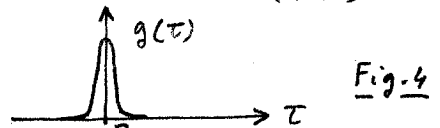
(i) Stationnarité [car $p(t)$ est stationnaire]

(ii) Moment d'ordre 1 $\overline{F(t)} = 0 \quad (5.45)$

(l'effet moyen du rayonnement est pris en compte dans $-\gamma p(t)$)

(iii) Moment d'ordre 2 $\overline{F(t)F(t+\tau)} = g(\tau) \quad (5.46)$

$g(\tau)$: Fonction d'auto-corrélation de F , donc paire en τ , de largeur $\tau_c \sim \gamma^{-1}$, très étroite devant γ^{-1}



Pour préciser g , égalons les $\overline{\delta p^2}$ calculés à partir de (5.44) et (5.38). Les réalisations partant de p_0 à t_0 , correspondent à la solution de (5.44) avec une condition initiale donnée p_0

$$p(t) = p_0 e^{-\gamma(t-t_0)} + \int_{t_0}^t dt' F(t') e^{-\gamma(t-t')} \quad (5.47)$$

Pour $\tau_c \ll \delta t = t - t_0 \ll \gamma^{-1}$, on peut écrire

$$\delta p = p(t_0 + \delta t) - p(t_0) = \int_{t_0}^{t_0 + \delta t} F(t') dt' \quad (5.48)$$

plus des termes d'ordre 1 en $\gamma \delta t$ qui ne contribueront pas pour les termes linéaires en δt dans les moments d'ordre ≥ 2 . On en déduit,

$$\overline{\delta p^2} = \int_{t_0}^{t_0 + \delta t} dt' \int_{t_0}^{t_0 + \delta t} dt'' \overline{F(t')F(t'')} \quad (5.49)$$

Comme $\delta t \gg \tau_c$ est très grand devant la largeur de $g(\tau)$, et que g est paire

$$\overline{\delta p^2} = \delta t \int_{-\infty}^{+\infty} g(\tau) d\tau = 2 \delta t \int_0^{\infty} g(\tau) d\tau \quad (5.50)$$

Or, d'après (5.35) et (5.37), $\overline{\delta p^2} = 2D \delta t$. Vis à vis des fonctions de τ , de largeur grande devant $\tau_c \sim \gamma^{-1}$, on peut donc écrire

$$g(\tau) = \overline{F(t)F(t+\tau)} = 2D \delta(\tau) \quad (5.51)$$

Nous avons vu plus haut que la distribution des valeurs possibles de Sp est une gaussienne. Si l'on impose à la force de Langevin $F(t)$ d'être une fonction aléatoire gaussienne, on montre alors que la grandeur Sp reliée à F par (5.48) est distribuée suivant une gaussienne. Comme les moments d'ordre 1 et 2 des gaussiennes associées à (5.38) et (5.44) ont été déjà ajustés, grâce aux conditions (5.45) et (5.51), ces 2 gaussiennes coïncident. Le fait d'imposer à $F(t)$ d'être gaussienne correspond bien également à l'image d'une force résultant de la succession d'un grand nombre de processus faibles et indépendants (cycles de fluorescence).

Finalement, moyennant les conditions (i) à (iv) imposées à F , les descriptions (5.38) et (5.44) du refroidissement radiatif sont équivalentes. Elles utilisent les mêmes paramètres physiques essentiels: temps d'amortissement γ de p , coefficient de diffusion D , et l'idée que l'atome évolue sous l'effet d'une succession de processus indépendants, faisant changer chacun p d'une petite quantité.

Remarque: Exemple de calcul plus simple à faire à partir de (5.44) qu'à partir de (5.38): fonction d'autocorrélation de p dans l'état stationnaire.

Avec l'équation de Fokker-Planck, il faut utiliser (5.10) avec $t_1 - t_0 \gg \gamma^{-1}$, de sorte que $P_{t_0}(y_1, t_1)$ et $P_{t_0}(y_1, t_1, y_2, t_2)$ se réduisent aux distributions stationnaires à 1 et 2 temps

$$W(y_1, t_1, y_2, t_2) = W(y_1) \pi(y_1, t_1 | y_2, t_2) \quad (5.52)$$

Comme on connaît $W(y_1)$ et π [voir (5.40) et (5.43)], on en déduit

$$\overline{y(t_1)y(t_2)} = \iint dy_1 dy_2 y_1 y_2 W(y_1, t_1, y_2, t_2) \quad (5.53)$$

Il est plus simple, par transformée de Fourier de (5.44), de relier la densité spectrale J_p de p (module du carré de la transformée de Fourier de p) à la densité spectrale J_F de F

$$J_p(\omega) = \frac{J_F(\omega)}{\gamma^2 + \omega^2} \quad (5.54)$$

Par suite de (5.51), $J_F(\omega)$ peut être considéré comme un spectre blanc (indépendant de ω), de sorte que $J_p(\omega)$ est une lorentzienne. Comme la fonction d'autocorrélation de p est la transformée de Fourier de la densité spectrale (théorème de Wiener-Khinchine), on a

$$\overline{p(0)p(\tau)} = \overline{p(0)}^2 e^{-\gamma|\tau|} = \frac{D}{\gamma} e^{-\gamma\tau} \quad (5.55)$$

REFERENCES

- 1 - C. Cohen-Tannoudji Cours au Collège de France 1977-78
Cours I, II, III, IV.
2. P. Nozières Cours sur le mouvement brownien. Grenoble 1979.
3. N.G. Van Kampen "Stochastic processes in physics and chemistry"
North Holland, 1981

5) 2^{ème} exemple : équations de Fokker-Planck pour la fonction de distribution de x et p d'un atome dans un puits de potentiel optique

a) Analyse des phénomènes physiques

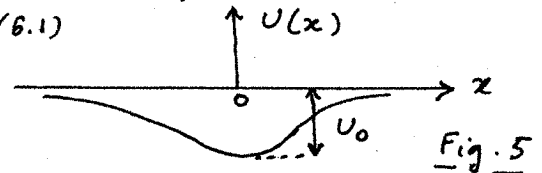
Problème à une dimension : Pour simplifier, on suppose que la configuration laser appliquée à l'atome a un axe de symétrie Ox , et on étudie la projection du mouvement sur cet axe. Découplage avec les mouvements sur les 2 autres axes. On note x et p les projections sur Ox de \vec{r} et \vec{p}

Force moyenne

- Prenons d'abord un atome immobile en x . La force moyenne totale (pression de radiation + force dipolaire) agissant sur l'atome a une valeur $\phi(x)$ qui dépend de x . En général, dans les configurations de type piège, la pression de radiation est nulle (superposition de 2 ondes de même forme, de même foyer, se propageant en sens inverse, de sorte que les 2 pressions de radiation s'équilibrent), et la force moyenne se réduit à la force dipolaire qui dérive d'un potentiel $U(x)$

$$\phi(x) = -\frac{d}{dx} U(x) \quad (6.1)$$

Allure de $U(x)$ pour $\delta = \omega - \omega_0 < 0$
Puits de potentiel de profondeur U_0
(Voir cours III)



- Atome de vitesse $v = p/M$ très faible ($kv \ll \Gamma$). Une résolution approchée des équations de Bloch optiques (utilisant la première correction à l'approximation adiabatique), introduit une force supplémentaire, linéaire en p , que nous noterons $-\gamma(x)p$, où $\gamma(x)$ dépend en général de x [voir cours 1982-83, cours VI]. Nous supposons que les paramètres ont été choisis pour que $\gamma(x)$ soit positif (force de friction). La force moyenne totale, développée à l'ordre 1 en p , s'écrit donc

$$\text{Force moyenne} = \phi(x) - \gamma(x)p \quad (6.2)$$

Fluctuations de la force autour de sa valeur moyenne

Le caractère aléatoire de l'émission spontanée (instant où elle se produit, direction de l'émission...) introduit des fluctuations dans les échanges d'impulsion entre atomes et photons. Les fluctuations de la pression de radiation ont déjà été analysées dans le cours IV. Les fluctuations des forces dipolaires, qui sont, elles aussi, liées à l'émission spontanée, seront analysées plus loin. Pour le problème étudié ici, le point important est que les fluctuations de ces forces sont responsables d'une marche au hasard de p dans l'espace des impulsions, pouvant être décrite par une diffusion de l'impulsion atomique. Si $\tau_c \ll \delta t \ll T_R$

$$\overline{\delta p^2} - \overline{\delta p}^2 = 2D(x) \delta t \quad (6.3)$$

où le coefficient de diffusion $D(x)$ [qui sera calculé ultérieurement en fonction des gradients d'intensité] dépend en général de x

Identification des variables markoviennes

Comme $\phi(x)$, $\gamma(x)$, $D(x)$ dépendent de x , l'évolution de l'atome entre t et $t + \delta t$ dépend non seulement de $p(t)$ mais aussi de $x(t)$. C'est l'ensemble $\{x, p\}$ qui est markovien, et non p tout seul (voir remarque page V-3)

b) Description par une équation de Langevin

VI-2

- Comme dans l'exemple précédent (§ 4c), la diffusion de l'impulsion atomique peut être décrite en ajoutant dans l'équation du mouvement de p une force de Langevin aléatoire $F(x, t)$ qui dépend maintenant de x (comme D)

$$\begin{cases} \dot{p} = \phi(x) - \gamma(x)p + F(x, t) & (6.4.a) \\ \dot{x} = p/M & (6.4.b) \end{cases}$$

Le temps de corrélation $\tau_c \sim \Gamma^{-1}$ de F doit être court devant γ^{-1} et Ω^{-1} (où Ω est la fréquence d'oscillation de l'atome dans le puits de la figure 5), pour qu'on puisse considérer le processus $\{x, p\}$ comme markovien

$$\tau_c \sim \Gamma^{-1} \ll \gamma^{-1}, \Omega^{-1} \quad (6.5)$$

Pendant τ_c , les variations de x et p sont négligeables. La fonction de corrélation de $F(x, t)$ peut alors être considérée comme une fonction $\delta(\tau)$ vis à vis des variables lentes. Si l'on pose

$$\overline{F(x, t) F(x, t+\tau)} = 2D(x) \delta(\tau) \quad (6.6)$$

on retrouve alors (6.3), comme cela sera démontré plus loin. Les autres hypothèses sur F , énoncées dans le § 4c ci-dessus, sont supposées également remplies ici.

- Calcul de δx et δp pour une valeur donnée de x et p à t . L'intégration de (6.4.a) entre t et $t+\delta t$ (avec $\tau_c \ll \delta t \ll \gamma^{-1}, \Omega^{-1}$) donne

$$\delta p = \delta t [\phi(x) - \gamma(x)p] + \int_t^{t+\delta t} F(x, t') dt' \quad (6.7)$$

Dans le 1^{er} terme, et dans $F(x, t)$, on a négligé les variations de x et p entre t et $t+\delta t$. L'intégration de (6.4.b) donne

$$\begin{aligned} \delta x &= \frac{1}{M} \int_t^{t+\delta t} p(t') dt' = \frac{1}{M} \int_t^{t+\delta t} [p + \int_t^{t'} \dot{p}(t'') dt''] dt' \\ &\approx p \delta t / M + \frac{1}{M} \int_t^{t+\delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' F(x, t'') \end{aligned} \quad (6.8)$$

$\dot{p}(t'')$ a été remplacé par $F(x, t'')$ dans le dernier terme de la 1^{ère} ligne, car les autres termes de (6.4.a) donneraient des contributions en δt^2

c) Equation de Fokker-Planck

- D'après le § 3 ci-dessus (voir fin de la page 1-6), la fonction de distribution de x et p , $\mathcal{P}(x, p, t)$, obéit à l'équation

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial p} (M_1 \mathcal{P}) - \frac{\partial}{\partial x} (N_1 \mathcal{P}) + \frac{\partial^2}{\partial p^2} (M_2 \mathcal{P}) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} (N_2 \mathcal{P}) + \frac{\partial^2}{\partial x \partial p} (R_2 \mathcal{P}) \quad (6.9)$$

$$\text{ou} \quad M_1 = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\delta p}}{\delta t} \quad N_1 = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\delta x}}{\delta t} \quad (6.10.a)$$

$$M_2 = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\delta p^2}}{2\delta t} \quad N_2 = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\delta x^2}}{2\delta t} \quad R_2 = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\delta x \delta p}}{\delta t} \quad (6.10.b)$$

M_1, N_1, M_2, N_2, R_2 dépendent en général de x et p . La limite $\delta t \rightarrow 0$ doit être comprise comme $\delta t \ll \gamma^{-1}, \Omega^{-1}$, δt restant grand devant $\tau_c \sim \Gamma^{-1}$. Les termes en $\delta t, \delta t^2, \dots$ qui subsistent dans M_1, \dots, R_2 sont alors négligeables (en $\gamma \delta t, \Omega \delta t, \dots$)

- Les moyennes de (6.7) et (6.8) donnent, compte tenu de $\overline{F} = 0$

$$\frac{\overline{\delta p}}{\delta t} = \phi(x) - \gamma(x)p = M_1, \quad \frac{\overline{\delta x}}{\delta t} = \frac{p}{M} = N_1 \quad (6.11)$$

- Parmi les 3 moyennes $\overline{\delta p^2}, \overline{\delta x^2}, \overline{\delta x \delta p}$, seule $\overline{\delta p^2}$ donne un terme linéaire en δt . En effet, d'après (6.7),

$$\overline{\delta p^2} = \text{Termes en } (\delta t)^2 + \int_t^{t+\delta t} dt' \int_t^{t+\delta t} dt'' \overline{F(x, t') F(x, t'')} \quad (6.12) \quad \text{VI-3}$$

L'utilisation de (6.6) donne alors

$$\lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\delta p^2}}{2\delta t} = D(x) = M_2 \quad (6.13)$$

ce qui justifie le choix de (6.6) pour retrouver (6.3). Par contre, dans $\overline{\delta x^2}$, le carré du 1^{er} terme de (6.8) donne une contribution en δt^2 , le carré du 2^{em} donne une intégrale quadruple de la fonction de corrélation de F , c-à-d une contribution en δt^3 , le double produit étant nul par suite de $\overline{F} = 0$ (L'interprétation du terme en δt^3 est que, la dispersion sur p , variant en $\sqrt{\delta t}$, produit au bout de δt une dispersion sur x égale à $\delta t \sqrt{\delta t}$, donc une variance en δt^3). Un raisonnement analogue permet de montrer que $\overline{\delta x \delta p}$ est au moins en δt^2 . Il s'ensuit que N_2 et R_2 sont nuls.

En regroupant tous les résultats précédents, on obtient finalement

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} + \phi(x) \frac{\partial}{\partial p} \right] \mathcal{P}(x, p, t) = \gamma(x) \left[\frac{\partial}{\partial p} p \mathcal{P}(x, p, t) + M k_B T(x) \frac{\partial^2}{\partial p^2} \mathcal{P}(x, p, t) \right] \quad (6.14)$$

où l'on a posé $k_B T(x) = \frac{D(x)}{M \gamma(x)} \quad (6.15)$

D'après les résultats du § 4 b ci-dessus, $D(x)/M\gamma(x)$ a en effet la signification physique d'une énergie cinétique désordonnée, $k_B T(x)$, de l'ordre de $k_B T$, caractérisée par une "température effective" $T(x)$, qui dépend en général de x comme $D(x)$ et $\gamma(x)$.

En général, $D(x)$ et $\gamma(x)$ varient dans le même sens quand l'intensité lumineuse varie, c-à-d quand x varie. Ceci n'est pas surprenant car $\gamma(x)$ et $D(x)$ décrivent la dissipation et les fluctuations introduites par le faisceau lumineux au point x , et il est bien connu qu'il y a un lien étroit entre fluctuations et dissipation. $T(x)$ varie donc lentement avec x , beaucoup plus lentement en général que $D(x)$ et $\gamma(x)$, qui, par exemple, tendent tous deux vers zéro quand on sort du puits. Une approximation raisonnable, et que nous ferons souvent par la suite pour simplifier les calculs, consiste à supposer que $T(x)$ est indépendant de x . On peut également remplacer $T(x)$ par sa valeur maximale T_m , de manière à être sûr de ne pas sous-estimer la probabilité de sortie du puits, qui est bien sûr d'autant plus grande que T est plus élevée.

Kramers (référence 4) a utilisé une équation analogue à (6.14) pour étudier les réactions chimiques considérées comme un mouvement brownien dans un potentiel à 2 minima.

c) Distribution stationnaire (pour $T(x)$ indépendant de x)

Si $T(x)$ est indépendant de x , on vérifie par substitution directe qu

$$\mathcal{P}_{st}(x, p) = \mathcal{N} \exp \left\{ - \left[\frac{p^2}{2M} + U(x) \right] / kT \right\} \quad (6.16)$$

est une distribution stationnaire (indépendante de t) solution de (6.14). Dans (6.16), \mathcal{N} est une constante de normalisation, et $U(x)$ le potentiel dont dérive $\phi(x)$ [voir 6.1]. \mathcal{P}_{st} a bien la forme d'une distribution d'équilibre thermodynamique associée à la température effective T .

Au voisinage du minimum d'un puits de potentiel profond, on peut assimiler le potentiel à un puits parabolique

$$U(x) \approx -U_0 + \frac{1}{2} M \Omega^2 x^2 \quad (6.17)$$

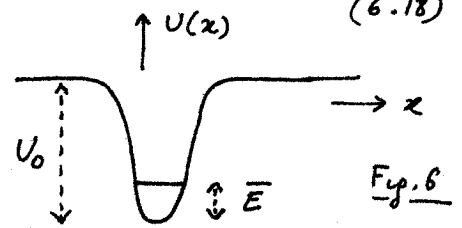
où Ω est la fréquence d'oscillation au fond du puits

Si $k_B T$ est petit devant U_0 , il est légitime de remplacer $U(x)$ par (6.17) dans (6.16) pour calculer $\langle x^2 \rangle$ et $\langle p^2 \rangle$. On trouve alors VI-4

$$\frac{1}{2M} \langle p^2 \rangle = \frac{1}{2} M \Omega^2 \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T \quad (6.18)$$

L'énergie résiduelle moyenne de la particule au fond du puits, \bar{E} , somme des énergies cinétique et potentielle moyennes (rapportée par rapport à $-U_0$), vaut alors

$$\bar{E} = k_B T = \frac{D}{M\gamma} \quad (6.19)$$



Nous reviendrons ultérieurement sur le calcul de la probabilité de sortie, mais on conçoit aisément que cette probabilité ne sera faible que si $\bar{E} = D/M\gamma \ll U_0$ (voir figure 6)

d) Existence de variables superlentes dans certains régimes

Idee générale

Parmi les variables lentes, comme x et p , il peut exister une variable superlente, beaucoup plus lente que les autres. On peut alors de nouveau considérer 2 échelles de temps très différentes, celle de la variable superlente, et celle des autres variables lentes. Pendant un intervalle de temps δt , intermédiaire entre ces 2 échelles de temps, la variable superlente apparaît comme une variable markovienne, et on peut alors espérer déduire de (6.14), une équation de Fokker-Planck à une seule variable, décrivant l'évolution de la variable superlente, et beaucoup plus facile à résoudre que (6.14) qui est à 2 variables. Un peu comme en physique moléculaire, où l'approximation de Born-Oppenheimer permet d'établir une équation pour le mouvement lent des noyaux, avec un potentiel effectif obtenu en étudiant le mouvement rapide des électrons pour une position fixée des noyaux.

Limite des frottements élevés ($\gamma \gg \Omega$)

Plaçons nous au voisinage du fond du puits, où (6.17) est valable; négligeons la variation de $\gamma(x)$ et $D(x)$ avec x , et étudions les fonctions de corrélation de x et p à la limite $\gamma \gg \Omega$. Comme nous l'avons vu plus haut (remarque à la fin du § 4C), il est plus simple de partir des équations de Langevin. En éliminant p entre les 2 équations (6.4), on obtient, compte tenu de (6.17)

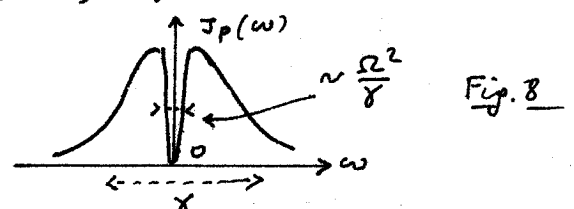
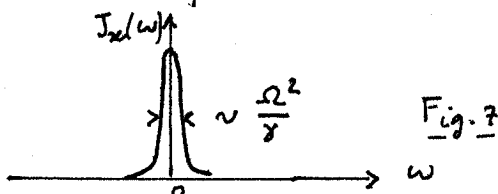
$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} + \Omega^2 x = F/M \quad (6.20)$$

(oscillateur amorti piloté par une force aléatoire). Le carré du module de la transformée de Fourier de x est la densité spectrale, $J_x(\omega)$ de x . Par transformée de Fourier de (6.20), on obtient

$$J_x(\omega) = \frac{1}{M^2} \frac{J_F(\omega)}{(\Omega^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \quad (6.21)$$

où J_F est la densité spectrale de F . Comme $p = M \dot{x}$

$$J_p(\omega) = M^2 \omega^2 J_x(\omega) = \frac{\omega^2 J_F(\omega)}{(\Omega^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \quad (6.22)$$



Comme $\tau_c \ll \gamma^{-1}, \Omega^{-1}$, on peut négliger la dépendance en ω de $J_F(\omega)$

$J_x(\omega)$ est une courbe très étroite (fig. 7), de largeur de l'ordre de VI-5

$$\Omega^2/\gamma = \gamma (\Omega^2/\gamma^2) \ll \gamma \quad (6.23)$$

[en effet, pour $\omega \ll \Omega$, le dénominateur de (6.21) est $\sim \Omega^4 + \gamma^2 \omega^2$ et J_x est à peu près une lorentzienne de largeur Ω^2/γ]. Par contre $J_p(\omega)$ est la superposition d'une courbe large, de largeur γ , et d'une courbe étroite, de largeur Ω^2/γ (fig. 8)

Les transformées de Fourier de (6.21) et (6.22) ne sont autres que les fonctions de corrélation de x et p . Le temps de corrélation de x , de l'ordre de $\gamma/\Omega^2 \gg \gamma^{-1}$, est beaucoup plus long que le temps de corrélation de p , de l'ordre de γ^{-1} [le poids du temps long, γ/Ω^2 , dans la fonction de corrélation de p , est très petit devant celui du temps court]

Conclusion : x est une variable superlente à la limite $\gamma \gg \Omega$

Limite des frictions faibles ($\gamma \ll \Omega$)

L'oscillation décrite par (6.20) est alors très peu amortie et les 2 variables x et p ont le même temps caractéristique, Ω^{-1} .

Par contre, à l'ordre 0 en γ et en F , l'énergie E de la particule est une constante du mouvement. E ne varie que par suite de la friction γ qui est très faible, et de la diffusion d'impulsion, qui est elle aussi très faible.

Conclusion : E est une variable superlente à la limite $\gamma \ll \Omega$

⑥ Limite des frictions élevées - Élimination adiabatique de la vitesse et équation de Fokker-Planck pour la position (références 2-4)

Idee générale. Le fait que v (ou $p = mv$) évolue beaucoup plus vite que x à la limite $\gamma \gg \Omega$ suggère que v a le temps d'atteindre un équilibre local avant que x n'ait eu le temps de beaucoup changer. En d'autres termes, si, à partir de $P(x, p, t)$, on introduit la fonction de distribution réduite

$$P(x, t) = \int dp P(x, p, t) \quad (6.24)$$

on s'attend à ce que l'on puisse écrire

$$P(x, p, t) = \rho(x, t) e^{-p^2/2Mk_B T(x)} + SP(x, p, t) \quad (6.25)$$

où SP est une petite correction par rapport au 1^{er} terme de (6.25) qui représente une distribution où p est en équilibre local.

Élimination de p

- Intégrons les 2 membres de (6.14) par rapport à p

$$\int dp \frac{\partial}{\partial t} P(x, p, t) = \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) \quad (6.26)$$

$$\int dp \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} P(x, p, t) = \frac{\partial}{\partial x} J(x, t) \quad (6.27)$$

où
$$J(x, t) = \int dp \frac{p}{m} P(x, p, t) \quad (6.28)$$

Tous les autres termes de (6.14) contiennent $\frac{\partial}{\partial p}$ ou $\frac{\partial^2}{\partial p^2}$. L'intégration sur p donne la différence des valeurs en $p = +\infty$ et $p = -\infty$ de 2 expressions contenant P ou $\partial P/\partial p$ et sont donc nulles (v est bornée). On en déduit l'équation de continuité

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} J(x, t) = 0 \quad (6.29)$$

entre la densité P et le courant J défini en (6.28). Aucune approximation n'a été faite pour établir (6.29). On s'attend à ce que P varie lentement avec t (par suite du caractère superlent

de x) et que, par suite, J varie lentement avec x

- ρ étant couplé à J par (6.29), calculons maintenant $\partial J / \partial t$ en multipliant les 2 membres de (6.14) par p/M et en intégrant sur p . On obtient

$$\int dp p \frac{\partial \mathcal{P}(x, p, t)}{\partial t} = M \frac{\partial J(x, t)}{\partial t} \quad (6.30)$$

$$\int dp \frac{p^2}{M} \frac{\partial \mathcal{P}(x, p, t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} K(x, t) \quad (6.31)$$

où l'on a posé
$$K(x, t) = \int dp \frac{p^2}{M} \mathcal{P}(x, p, t) \quad (6.32)$$

Par intégration par parties, le 3^{ème} terme de (6.14) donne

$$\phi(x) \int dp p \frac{\partial \mathcal{P}(x, p, t)}{\partial p} = -\phi(x) \int dp \mathcal{P}(x, p, t) = -\phi(x) \rho(x, t) \quad (6.33)$$

le 4^{ème}
$$\gamma(x) \int dp p \frac{\partial}{\partial p} p \mathcal{P}(x, p, t) = -\gamma(x) M J(x, t) \quad (6.34)$$

et le 5^{ème} zéro. On obtient finalement

$$M \frac{\partial}{\partial t} J(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} K(x, t) - \phi(x) \rho(x, t) = -\gamma(x) M J(x, t) \quad (6.35)$$

Aucune approximation n'a été faite pour établir (6.35), mais une nouvelle quantité, $K(x, t)$, est apparue. Utilisons maintenant le fait que $J(x, t)$ varie lentement avec t , avec des constantes de temps de l'ordre du temps de corrélation de x , beaucoup plus longues que γ^{-1} . Il est donc légitime de négliger le 1^{er} terme de (6.35), $M \frac{\partial J}{\partial t}$, devant le dernier, $-\gamma M J$. Dans le même ordre d'approximation, on peut, pour calculer $K(x)$ donné par (6.32), négliger le dernier terme \mathcal{P} de (6.25), et remplacer \mathcal{P} par la distribution $\rho(x)$ multipliée par la distribution d'équilibre local en p . L'intégrale de (6.32) est alors élémentaire et donne

$$K(x, t) = \rho(x, t) k_B T(x) \quad (6.36)$$

Finalement, au moyen de ces 2 approximations, l'équation (6.35) donne une expression approchée de $J(x, t)$

$$J(x, t) = \frac{1}{M \gamma(x)} \left[\rho(x, t) \phi(x) - \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) k_B T(x) \right] \quad (6.37)$$

Avant de reporter cette expression dans (6.29), et d'en déduire une équation de Fokker Planck pour $\rho(x, t)$, étudions la signification physique des 2 termes de (6.37)

Mobilité - Coefficient de diffusion spatiale.

- Le 1^{er} terme de (6.37) est un courant de conduction qui s'écrit

$$\mu(x) \phi(x) \rho(x, t) \quad (6.38)$$

où
$$\mu(x) = 1 / M \gamma(x) \quad (6.39)$$

a la signification d'une mobilité. En effet, pendant le temps γ^{-1} où p/M s'amortit, l'atome parcourt une distance petite devant les dimensions caractéristiques de variation de la force $\phi(x)$ qui apparaît alors comme uniforme. $\mu(x) \phi(x)$ est alors la vitesse moyenne limite, résultant de la compétition entre l'accélération produite par $\phi(x)$, et le freinage $\gamma(x)$ (solution stationnaire

de l'équation $\dot{v} = -\gamma v + \phi/M$. La mobilité est le VI-7 coefficient de proportionnalité entre cette vitesse limite et la force qui lui donne naissance.

- Si $T(x)$ est indépendant de x , le 2^{ème} terme de (6.37) est un courant de diffusion, qui s'écrit

$$- D(x) \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) \quad (6.40)$$

où

$$D(x) = k_B T / M \gamma(x) = D(x) / M^2 \gamma^2(x) \quad (6.41)$$

est un coefficient de diffusion spatiale, à ne pas confondre avec le coefficient $D(x)$ de diffusion de p au point x . L'équation (6.40) exprime qu'un gradient de densité produit un courant opposé à ce gradient avec un coefficient de proportionnalité D .

Remarque : Si $T(x)$ dépend de x , le 2^{ème} terme de (6.37) contient un terme proportionnel à $\rho(x)$ et à $-\partial k_B T(x) / \partial x$ qui peut être regroupé avec le 1^{er}, ce qui revient à ajouter $k_B T(x)$ au potentiel $U(x)$ dont dérive $\phi(x)$.

Equation de Fokker-Planck pour $\rho(x, t)$

En reportant (6.37) dans (6.25), on obtient, compte tenu de (6.38) et (6.40) [$T(x)$ est supposé indépendant de x]

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} [\mu(x) \phi(x) \rho(x, t) - D(x) \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t)] = 0 \quad (6.42)$$

⑦ Limite des frictions faibles - Equation de Fokker-Planck pour l'énergie ou l'action (références 2-4)

Idee générale

En l'absence de friction et de diffusion ($\gamma = D = 0$), le point représentatif du système dans l'état d'énergie

$$E = \frac{p^2}{M} + U(x) \quad (6.43)$$

décrit, dans l'espace des phases (x, p) , une courbe fermée $\mathcal{C}(E)$, de manière périodique (fig. 9), ce qui correspond au mouvement de va et vient entre les 2 puits de la fig. 6

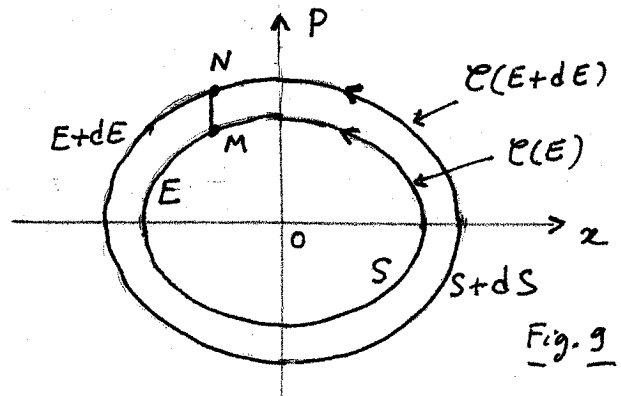
Si l'on a une distribution

$\mathcal{P}(x, p)$ de points dans l'espace des phases, les points de cette distribution

compris entre les courbes $\mathcal{C}(E)$ et $\mathcal{C}(E+dE)$ vont tourner rapidement (devant γ^{-1}) dans le ruban de surface dS entre $\mathcal{C}(E)$ et $\mathcal{C}(E+dE)$.

Si l'on moyenne sur plusieurs périodes, la distribution va être "homogénéisée" dans le ruban dS , et $\mathcal{P}(x, p, t)$ ne va plus dépendre que de E . Plus précisément, \mathcal{P} ne dépend de x et p que par l'intermédiaire de $E(x, p)$

$$\mathcal{P}(x, p, t) = \mathcal{P}(E(x, p), t) \quad (6.44)$$



où $E(x, p)$ est donné en (6.43)

(VI-8)

On peut donc définir une fonction de distribution de l'énergie $f(E, t)$ par

$$f(E, t) dE = \mathcal{P}(E(x, p), t) dS \quad (6.45)$$

$f(E, t) dE$ est la probabilité d'avoir le point représentatif du système dans le ruban de surface dS entre $\mathcal{C}(E)$ et $\mathcal{C}(E+dE)$

En l'absence de friction et de diffusion (termes du 2^{ème} membre de 6.14), E est une constante du mouvement, et $f(E, t)$ n'évolue pas. On peut effectivement vérifier que la somme des 2^{ème} et 3^{ème} termes du 1^{er} membre de (6.14) sont nuls lorsque \mathcal{P} ne dépend que de $E(x, p)$. Lorsqu'on introduit une friction et une diffusion faibles, le point représentatif du système va quitter le ruban dS après plusieurs tours (car $\Omega \gg \gamma$), et $f(E, t)$ va évoluer lentement conformément à l'équation

$$\frac{\partial}{\partial t} f(E, t) = \gamma(x) \left[\frac{\partial}{\partial p} p f(E, t) + M k_B T(x) \frac{\partial^2}{\partial p^2} f(E, t) \right] \quad (6.46)$$

où le 2^{ème} membre de (6.46) représente la moyenne sur un tour du 2^{ème} membre de (6.14), et où $\mathcal{P}(x, p, t)$ a été réexprimé en fonction de $f(E, t)$ grâce à (6.45).

Avant de calculer cette moyenne, calculons dE/dS

Calcul de dE/dS

- Soit
$$S(E) = \oint_{\mathcal{C}(E)} p dx \quad (6.47)$$

la surface enfermée par la courbe $\mathcal{C}(E)$, et qui n'est autre que l'intégrale d'action sur un cycle du mouvement d'énergie E . On a

$$S + dS = \oint_{\mathcal{C}(E)} (p + dp) dx \quad (6.48)$$

où dp est la variation de p quand on passe de $\mathcal{C}(E)$ à $\mathcal{C}(E+dE)$ à x constant ($dx=0$: segment MN de la fig. 9). Or, si $dx=0$, $dU=0$ et $dE = p dp / M = v dp$, de sorte que $dp = dE/v$ pour $dx=0$ et

$$dS = dE \oint_{\mathcal{C}(E)} \frac{dx}{v} = dE \oint_{\mathcal{C}(E)} dt = \Theta(E) dE \quad (6.49)$$

où
$$\Theta(E) = 2\pi / \Omega(E) \quad (6.50)$$

est la période du mouvement d'énergie E , la pulsation étant $\Omega(E)$

- Au lieu de paramétrer les courbes de la figure 9 par E , on peut les paramétrer par l'action S et introduire ainsi une fonction de distribution $g(S, t)$ de S définie par

$$g(S, t) dS = f(E, t) dE \quad (6.51)$$

Equation de Fokker-Planck pour $f(E, t)$ ou $g(S, t)$

- Pour simplifier le calcul de la moyenne figurant dans (6.42), nous supposons que, non seulement T , mais aussi γ , ne dépendent pas de x au moins dans la région où $U(x) \neq 0$

- Comme f ne dépend que de E et que, d'après (6.43), $\partial E / \partial p = p/M$

$$\frac{\partial}{\partial p} p f = f + p \frac{\partial f}{\partial p} = f + p \frac{\partial f}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial p} = f + \frac{p^2}{M} \frac{\partial f}{\partial E} \quad (6.52)$$

- le 2^{ème} terme de (6.46) fait intervenir

$$\frac{\partial^2 f}{\partial p^2} = \frac{\partial}{\partial p} \frac{p}{M} \frac{\partial f}{\partial E} = \frac{1}{M} \frac{\partial f}{\partial E} + \frac{p^2}{M^2} \frac{\partial^2 f}{\partial E^2} \quad (6.53) \quad \text{VI-9}$$

- Finalement, l'équation (6.46) devient

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \gamma \left[f + \frac{\overline{p^2}}{M} \frac{\partial f}{\partial E} + k_B T \left(\frac{\partial f}{\partial E} + \frac{\overline{p^2}}{M} \frac{\partial^2 f}{\partial E^2} \right) \right] \quad (6.54)$$

En effet, comme f , $\partial f / \partial E$, $\partial^2 f / \partial E^2$ ne dépendent que de E et restent donc constants sur un tour, la moyenne sur un tour ne porte que sur p^2/M . Calculons cette moyenne

$$\frac{\overline{p^2}}{M} = \frac{1}{\Theta} \oint_{\mathcal{C}(E)} \frac{p^2}{M} dt = \frac{1}{\Theta} \oint_{\mathcal{C}(E)} p v dt = \frac{1}{\Theta} \oint_{\mathcal{C}(E)} p dx = \frac{S}{\Theta} \quad (6.55)$$

- Il s'ensuit que, compte tenu de (6.49)

$$f + \frac{\overline{p^2}}{M} \frac{\partial f}{\partial E} = f + S \frac{\partial E}{\partial S} \frac{\partial f}{\partial E} = f + S \frac{\partial f}{\partial S} = \frac{\partial}{\partial S} (S f) \quad (6.56)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial E} + \frac{\overline{p^2}}{2M} \frac{\partial^2 f}{\partial E^2} &= \frac{\partial f}{\partial E} + S \frac{\partial E}{\partial S} \frac{\partial^2 f}{\partial E^2} = \frac{\partial f}{\partial E} + S \frac{\partial}{\partial S} \frac{\partial f}{\partial E} = \frac{\partial}{\partial S} \left(S \frac{\partial f}{\partial E} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial S} \left(S \frac{\partial S}{\partial E} \frac{\partial f}{\partial S} \right) = \frac{\partial}{\partial S} \left(S \Theta \frac{\partial f}{\partial S} \right) \end{aligned} \quad (6.57)$$

- Finalement, en reportant (6.56) et (6.57) dans (6.54), on obtient, en passant de $f(E, t)$ à $g(S, t)$

$$\frac{\partial g(S, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial S} J(S, t) = 0 \quad (6.58)$$

où le courant

$$J(S, t) = -\gamma S g(S, t) - \gamma k_B T S \Theta(S) \frac{\partial}{\partial S} g(S, t) \quad (6.59)$$

est la somme d'un terme de dérive (1^{er} terme) et d'un terme de diffusion (2^{er} terme), avec un coefficient de diffusion

$$\Delta(S) = \gamma k_B T S \Theta(S) \quad (6.60)$$

l'équation de Fokker-Planck pour $g(S, t)$ s'écrit donc

$$\boxed{\frac{\partial g(S, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial S} \gamma S g(S, t) + \frac{\partial}{\partial S} \Delta(S) \frac{\partial}{\partial S} g(S, t)} \quad (6.61)$$

et permet d'étudier le mouvement brownien de l'énergie de la particule oscillant avec une friction faible dans le puits de potentiel

Références (à ajouter à la liste de la page N-9)

4 - H. A. Kramers, Physica VII, 284 (1940)

A. Particule sans degrés de liberté internesButs de ce § A

La matrice $\langle i | \sigma | j \rangle$, qui représente l'opérateur densité σ d'une particule dans une base $\{|i\rangle\}$ de l'espace des états, dépend de 2 indices i et j . Si la base est continue, comme par exemple la base $\{|\vec{r}\rangle\}$ des états propres de l'opérateur position \vec{R} , la matrice densité associée à σ dépend de 2 variables \vec{r}' et \vec{r}'' : $\sigma(\vec{r}', \vec{r}'') = \langle \vec{r}' | \sigma | \vec{r}'' \rangle$

Un premier but de ce § A est de montrer qu'à partir de $\sigma(\vec{r}', \vec{r}'')$, il est possible d'introduire une fonction de \vec{r} et \vec{p} , la fonction de Wigner $W(\vec{r}, \vec{p})$, qui présente beaucoup d'analogies avec la fonction de distribution d'une particule classique dans l'espace des phases.

Un deuxième but de ce § A est de montrer que l'équation d'évolution de $W(\vec{r}, \vec{p})$, correspondant à l'équation d'évolution $i\hbar \dot{\sigma} = [H, \sigma]$ de σ , rappelle par certains côtés une équation de Fokker-Planck, et que le propagateur de $W(\vec{r}, \vec{p})$ satisfait à une équation de type équation de Smolouchowski pour un processus de Markov.

Ainsi, tout en restant quantique, la description de l'état de la particule par la fonction de Wigner se rapproche beaucoup de celle de la mécanique statistique classique. Cette description sera ensuite étendue au § B au cas d'un atome, ayant des degrés de liberté internes, interagissant avec le champ de rayonnement.

① Représentation position ou impulsion

(pour simplifier les notations, nous ne mettons pas de flèches sur r et p , sauf quand cela pourrait prêter à confusion)

Base $\{|r\rangle\}$ des états propres de la position R

- Éléments de matrice de σ $\langle r' | \sigma | r'' \rangle$ (7.1)
- Densité de probabilité de présence en r' : $R(r')$ $R(r') = \langle r' | \sigma | r' \rangle$ (7.2)
- Normalisation $\int dr' R(r') = 1$ (7.3)

Remarque: si σ correspond à une particule d'impulsion p_0 , c.-à-d. si $\sigma = |p_0\rangle\langle p_0|$, alors $\langle r' | \sigma | r'' \rangle = \langle r' | p_0 \rangle \langle p_0 | r'' \rangle$ est proportionnel à $\exp\{ip_0(r' - r'')/\hbar\}$

Impulsion p_0 bien définie $\rightarrow \langle r' | \sigma | r'' \rangle \sim e^{ip_0(r' - r'')/\hbar}$ (7.4)

Ainsi, une dépendance oscillante en $r' - r''$ caractérise une impulsion bien définie

Base $\{|p\rangle\}$ des états propres de l'impulsion P

- Éléments de matrice de σ $\langle p' | \sigma | p'' \rangle$ (7.5)
- Densité de probabilité en impulsion $P(p')$ $P(p') = \langle p' | \sigma | p' \rangle$ (7.6)
- Normalisation $\int dp' P(p') = 1$ (7.7)

Pour passer d'une base à l'autre, on utilise les relations

$$\langle r' | p' \rangle = \frac{1}{h^{3/2}} e^{ip'r'/\hbar} \quad \int d^3r' |r'\rangle\langle r'| = \int d^3p' |p'\rangle\langle p'| = \mathbb{1} \quad (7.8)$$

qui permettent de démontrer

$$\langle r' | \sigma | r'' \rangle = \iint \frac{dp' dp''}{h^3} \langle p' | \sigma | p'' \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(p' r' - p'' r'')} \quad (7.9) \quad \text{VII-2}$$

② Changement de variables : représentations $\{r, u\}$ et $\{p, v\}$

Représentation $\{r, u\}$

$$\{r', r''\} \rightarrow \{r, u\} \quad \begin{cases} r = \frac{1}{2}(r' + r'') \\ u = r' - r'' \end{cases} \quad (7.10)$$

Inversement
$$\begin{cases} r' = r + \frac{u}{2} \\ r'' = r - \frac{u}{2} \end{cases} \quad (7.11)$$

- Avec les nouvelles variables, nous posons

$$F(r, u) = \langle r + \frac{u}{2} | \sigma | r - \frac{u}{2} \rangle \quad (7.12)$$

D'après (7.2)
$$R(r) = \langle r | \sigma | r \rangle = F(r, 0) \quad (7.13)$$

Représentation $\{p, v\}$

$$\{p', p''\} \rightarrow \{p, v\} \quad \begin{cases} p = \frac{1}{2}(p' + p'') \\ v = p' - p'' \end{cases} \quad (7.14)$$

Inversement
$$\begin{cases} p' = p + \frac{v}{2} \\ p'' = p - \frac{v}{2} \end{cases} \quad (7.15)$$

- Nous posons

$$G(p, v) = \langle p + \frac{v}{2} | \sigma | p - \frac{v}{2} \rangle \quad (7.16)$$

D'après (7.6)
$$S(p) = \langle p | \sigma | p \rangle = G(p, 0) \quad (7.17)$$

Passage de la représentation $\{r, u\}$ à la représentation $\{p, v\}$

Comme le jacobien de (7.14) est égal à 1 et que, d'après (7.11) et (7.15)

$$p' r' - p'' r'' = p u + r v \quad (7.18)$$

on peut réécrire (7.9) sous la forme

$$F(r, u) = \iint \frac{dp dv}{h^3} G(p, v) e^{i(pu + rv)/\hbar} \quad (7.19)$$

ce qui montre que p et u , r et v sont des variables conjuguées

③ Définitions de la représentation de Wigner

a) Première manière d'introduire la représentation de Wigner

- D'après (7.13), la dépendance en r de $F(r, u)$, pour $u=0$, donne la densité de probabilité de présence de la particule en r . D'autre part, quand $u \neq 0$, une dépendance sinusoidale en $u = r' - r''$ est, d'après (7.4), caractéristique d'une impulsion bien définie. Ces 2 remarques suggèrent d'introduire une fonction de r et p , obtenue en prenant le transformé de Fourier de $F(r, u)$ par rapport à u

$$W(r, p) = \frac{1}{h^3} \int du F(r, u) e^{-i p u / \hbar} \quad (7.20)$$

$W(r, p)$ est, par définition la fonction de Wigner. L'inverse de (7.20) est

$$F(r, u) = \int dp W(r, p) e^{i p u / \hbar} \quad (7.21)$$

- On peut aussi, grâce à (7.19), écrire

$$W(r, p) = \frac{1}{h^3} \int dv G(p, v) e^{i r v / \hbar} \quad (7.22)$$

et la formule inverse
$$G(p, v) = \int dr W(r, p) e^{-i r v / \hbar} \quad (7.23)$$

- Comme nous l'avons déjà souligné après (7.19), il apparaît sur (7.20) \bar{a} (7.23) que p et u d'une part, r et v de l'autre sont conjugués. Ceci suggère d'introduire une 4^{ème} fonction, $C(u, v)$, transformée de Fourier de $F(r, u)$ par rapport à r , ou encore de $G(p, v)$ par rapport à p , ou encore de $w(r, p)$ par rapport à r et p . Nous posons

$$C(u, v) = \iint dr dp w(r, p) e^{i(up + vr)/\hbar} \tag{7.24}$$

dont l'inverse s'écrit

$$w(r, p) = \frac{1}{\hbar^2} \iint du dv C(u, v) e^{-i(up + vr)/\hbar} \tag{7.25}$$

Compte tenu de (7.20) et (7.22), on peut encore écrire

$$C(u, v) = \int dr F(r, u) e^{ivr/\hbar} \tag{7.26}$$

$$C(u, v) = \int dp G(p, v) e^{-iup/\hbar} \tag{7.27}$$

- Récapitulation. Le tableau I donne les couples de variables apparus dans les 4 représentations de l'opérateur densité que nous avons introduites ci-dessus :

$F(r, u)$, $G(p, v)$, $w(r, p)$, $C(u, v)$
 Chaque flèche reliant 2 variables conjuguées l'une de l'autre schématise une transformation de Fourier permettant de passer d'une variable à l'autre

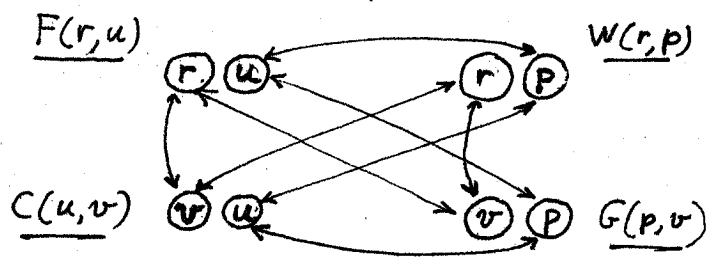


Tableau I

b) Deuxième manière d'introduire la fonction de Wigner

Cette 2^{ème} manière consiste à partir de la fonction $C(u, v)$ définie comme la valeur moyenne, dans l'état σ , de l'opérateur $e^{i[uP + vR]/\hbar}$

$$C(u, v) = \text{Tr} \{ \sigma e^{i[uP + vR]/\hbar} \} = \langle e^{i[uP + vR]/\hbar} \rangle \tag{7.28}$$

puis à introduire $w(r, p)$ comme double transformée de Fourier de $C(u, v)$ par rapport à u et v [formule identique à (7.25)]. On montre, dans l'appendice A, que la fonction $C(u, v)$ définie en (7.28) coïncide avec la fonction $C(u, v)$ introduite dans le § précédent [par exemple en (7.26)]

L'intérêt de cette 2^{ème} définition (7.28) est que $C(u, v)$ ressemble à une "fonction caractéristique" de 2 variables R et P non commutatives, ce qui fait alors apparaître la double transformée de Fourier, $w(r, p)$, de $C(u, v)$, comme une sorte de densité de probabilité de r et p . Il ne faut pas oublier cependant que R et P sont des opérateurs qui ne commutent pas, de sorte qu'on pourrait introduire tout aussi valablement d'autres "fonctions caractéristiques" comme

$$\langle e^{iup/\hbar} e^{ivr/\hbar} \rangle \quad \text{ou} \quad \langle e^{ivr/\hbar} e^{iup/\hbar} \rangle \tag{7.29}$$

différentes, l'une de l'autre, et différentes chacune de (7.28). On pourrait également remplacer R et P par des combinaisons linéaires d'opérateurs de création et d'annihilation a^+ et a et introduire d'autres "fonctions caractéristiques" où a et a^+ sont rangés dans l'ordre normal ou antinormal [voir cours 1974-75 cours IV]. L'intérêt du choix (7.28) est qu'il est bien adapté au calcul des valeurs moyennes de fonctions de R et P , symétrisées en R et P (voir plus loin p. IV.4)

④ Propriétés de la fonction de Wigner

a) Ressemblances avec une densité de probabilité

Réalité Changeons u en $-u$ dans (7.12) et utilisons l'hermiticité de l'opérateur densité σ . Il vient

$$F(r, u) = F(r, -u)^* \quad (7.30)$$

Il découle alors de (7.20) et (7.30) que

$$w(r, p) = w(r, p)^* \quad (7.31)$$

Intégrale sur r , intégrale sur p , intégrale sur r et p

- Faisons $u=0$ dans (7.21), $v=0$ dans (7.23) et utilisons (7.13) et (7.17). Il vient

$$\int dp w(r, p) = F(r, 0) = R(r) \quad (7.32)$$

$$\int dr w(r, p) = G(p, 0) = P(p) \quad (7.33)$$

L'intégrale sur p de $w(r, p)$ donne la densité de probabilité en r .
L'intégrale sur r de $w(r, p)$ donne la densité de probabilité en p .

- Comme $R(r)$ et $P(p)$ sont normées ($\text{Tr } \sigma = 1$), on en déduit que $w(r, p)$ est normée :

$$\iint dr dp w(r, p) = 1 \quad (7.34)$$

Valeurs moyennes de fonctions symétrisées de R et P

- Développons en série l'exponentielle de (7.28), et prenons le terme en $u^2 v$ du développement ainsi obtenu

$$C(u, v) = \dots + u^2 v \frac{1}{3!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^3 \langle (P^2 R + P R P + R P^2) \rangle + \dots \quad (7.35)$$

On voit apparaître la valeur moyenne de l'opérateur $P^2 R$ symétrisé en R et P . Il découle de (7.35) que

$$\left(\frac{\hbar}{i}\right)^3 \frac{\partial^2}{\partial u^2} \frac{\partial}{\partial v} C(u, v) \Big|_{u=0=v} = \frac{1}{3} \langle (P^2 R + P R P + R P^2) \rangle \quad (7.36)$$

- Or, d'après (7.24)

$$\left(\frac{\hbar}{i}\right)^3 \frac{\partial^2}{\partial u^2} \frac{\partial}{\partial v} C(u, v) \Big|_{u=0=v} = \iint dr dp p^2 r w(r, p) \quad (7.37)$$

On en déduit

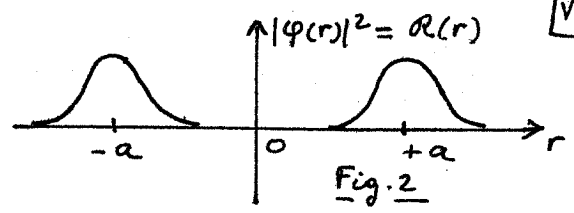
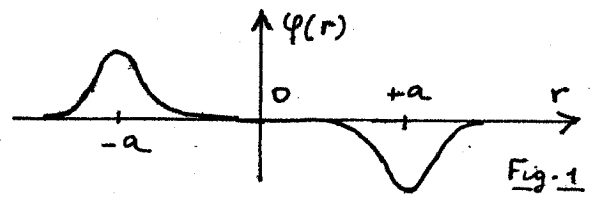
$$\left\langle \frac{1}{3} (P^2 R + P R P + R P^2) \right\rangle = \iint dr dp p^2 r w(r, p) \quad (7.38)$$

Ce résultat se généralise aisément : pour calculer la valeur moyenne d'une fonction symétrisée des opérateurs R et P , il suffit de multiplier la fonction classique correspondante de r et p [qui n'a pas besoin, elle, d'être symétrisée car r et p sont alors des variables classiques] par $w(r, p)$, et d'intégrer sur r et p .

b) Différences avec une densité de probabilité

$w(r, p)$ peut prendre des valeurs négatives

- Supposons que l'opérateur densité σ correspond à un cas pur ($\sigma = |\varphi\rangle\langle\varphi|$), et que la fonction d'onde $\varphi(r)$ associé à $|\varphi\rangle$ ait l'allure représentée sur la figure 1 : 2 fonctions de supports disjoints, l'une positive autour de $r=a$, l'autre négative autour de $r=-a$. Par exemple, $\varphi(r)$ peut être une combinaison linéaire, antisymétrique, de 2 fonctions d'onde localisées dans 2 puits de potentiel symétriques par rapport à 0 et séparés par une barrière de potentiel.



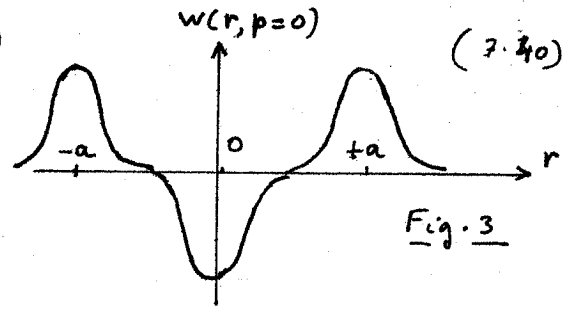
- La densité de probabilité $|\varphi(r)|^2$ associée à $\varphi(r)$ a l'allure représentée sur la figure 2. Elle est toujours positive et exprime que la particule a une certaine probabilité d'être dans 2 régions disjointes de l'espace
- De (7.12), on déduit (comme φ est réelle)

$$F(r, u) = \langle r + \frac{u}{2} | \varphi \rangle \langle \varphi | r - \frac{u}{2} \rangle = \varphi(r + \frac{u}{2}) \varphi(r - \frac{u}{2}) \quad (7.39)$$

et par suite, d'après (7.20)

$$w(r, p=0) = \frac{1}{h^3} \int du \varphi(r + \frac{u}{2}) \varphi(r - \frac{u}{2}) \quad (7.40)$$

L'allure des variations de $w(r, p=0)$ avec r est représentée sur la figure 3.



Au voisinage de $r=0$, on voit, en prenant u de l'ordre de $2a$ dans l'intégrale (7.40), que $w(r, p=0)$ prend des valeurs négatives. Ceci est dû au fait que $F(r, u)$ est le produit des valeurs de la fonction d'onde en 2 points différents, où ces valeurs peuvent être de signe opposé.

$w(r, p)$ peut prendre des valeurs non nulles en des points où $R(r) = 0$

Il apparaît clairement sur la figure 3 qu'au voisinage de $r=0$ $w(r, p=0)$ est différent de 0, alors que la vraie densité de probabilité en r , $R(r)$, représentée sur la figure 2 est nulle. La non localité de la relation entre $F(r, u)$ et $\varphi(r)$ fait donc apparaître des densités "fantômes" en des points où l'on est sûr que la particule ne peut se trouver. Par exemple, dans une expérience d'interférences, immédiatement après la traversée de l'écran percé de 2 fentes, $w(r, 0)$ est non nul dans une région située à mi-distance des 2 fentes.

$w(r, p)$ ne peut pas être infiniment bien localisé

En prenant toujours l'exemple d'un cas pur $\varphi(r)$, on peut écrire

$$w(r, p) = \frac{1}{h^3} \int du \varphi^*(r + \frac{u}{2}) \varphi(r - \frac{u}{2}) e^{-i p u / \hbar} \quad (7.41)$$

ce qui fait apparaître $w(r, p)$ comme le produit scalaire (en u) de $\varphi(r + \frac{u}{2})$ et $\varphi(r - \frac{u}{2}) e^{-i p u / \hbar}$. L'inégalité de Schwarz donne alors

$$|w(r, p)|^2 \leq \frac{1}{h^6} \int du |\varphi(r + \frac{u}{2})|^2 \times \int du' |\varphi(r - \frac{u'}{2})|^2 = (\frac{2}{h})^6 \quad (7.42)$$

et donc

$$|w(r, p)| < (\frac{2}{h})^3 \quad (7.43)$$

inégalité qui se généralise aisément à un mélange statistique d'états. Comme w est normée [voir 7.34], on en déduit que $w(r, p)$ est nécessairement non nul dans un volume au moins égal à $(h/2)^3$. Ceci ne fait d'ailleurs que traduire la relation d'incertitude entre R et P .

Les valeurs moyennes des fonctions non symétrisées de R et P ne s'expriment pas simplement en fonction de $w(r, p)$. Par exemple

$$\langle RP \rangle = \frac{1}{2} \langle RP + PR \rangle + \frac{1}{2} \langle RP - PR \rangle = \iint dr dp r p w(r, p) + \frac{i \hbar}{2} \quad (7.44)$$

⑤ Particule dans un potentiel. Evolution de la fonction de Wigner

a) Vitesse de variations due à l'énergie cinétique

$$- \quad i\hbar \dot{\sigma} = \left[\frac{P^2}{2M}, \sigma \right] \quad (7.45)$$

Comme P est diagonal dans la base $\{|p\rangle\}$, on a intérêt à prendre l'élément de matrice de (7.45) entre $\langle p'|$ et $|p''\rangle$

$$\dot{\sigma}(p', p'') = \frac{1}{i\hbar 2M} (p'^2 - p''^2) \sigma(p', p'') \quad (7.46)$$

- Effectuons alors le changement de variables (7.14). Il vient

$$\dot{G}(p, v) = \frac{1}{i\hbar M} p v G(p, v) \quad (7.47)$$

- Pour obtenir $\dot{w}(r, p)$ il faut prendre la transformée de Fourier des 2 membres de (7.47) par rapport à v. Comme la multiplication par v devient dans une telle opération $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r}$ [voir 7.22 et 7.23], on a

$$\dot{w}(r, p) = - \frac{p}{M} \frac{\partial}{\partial r} w(r, p) \quad (7.48)$$

On retrouve le terme de vol libre introduit dans le cours VI (cf 6.14)

b) Vitesse de variations due à l'énergie potentielle. Développement en puissances de \hbar

$$- \quad i\hbar \dot{\sigma} = [V(R), \sigma] \quad (7.49)$$

Comme R est diagonal dans la base $\{|r\rangle\}$, on a intérêt à prendre l'élément de matrice de (7.49) entre $\langle r'|$ et $|r''\rangle$

$$\dot{\sigma}(r', r'') = \frac{1}{i\hbar} [V(r') - V(r'')] \sigma(r', r'') \quad (7.50)$$

- Effectuons alors le changement de variables (7.10). Il vient

$$\dot{F}(r, u) = \frac{1}{i\hbar} [V(r + \frac{u}{2}) - V(r - \frac{u}{2})] F(r, u) \quad (7.51)$$

- Une première possibilité pour interpréter le contenu physique de (7.51) consiste à développer $V(r \pm \frac{u}{2})$ en puissances de u. Comme le crochet de (7.51) est impair en u, seules les puissances impaires de u apparaissent dans le développement de ce crochet

$$V(r + \frac{u}{2}) - V(r - \frac{u}{2}) = u \frac{dV(r)}{dr} + \frac{u^3}{24} \frac{d^3V(r)}{dr^3} + \dots \quad (7.52)$$

En faisant apparaître la force $\phi(r)$ associée à V(r)

$$\phi(r) = - \frac{dV(r)}{dr} \quad (7.53)$$

et en reportant (7.52) dans (7.51), on obtient

$$\dot{F}(r, u) = \frac{1}{i\hbar} \left[-u \phi(r) F(r, u) + \frac{u^3}{24} \frac{d^3V(r)}{dr^3} F(r, u) + \dots \right] \quad (7.54)$$

Il ne reste plus qu'à prendre la transformée de Fourier des 2 membres de (7.54) par rapport à u. Comme la multiplication par u devient dans une telle opération $i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$ [voir 7.20 et 7.21], il vient

$$\dot{w}(r, p) = - \phi(r) \frac{\partial}{\partial p} w(r, p) - \frac{\hbar^2}{24} \frac{d^3V(r)}{dr^3} \frac{\partial^3}{\partial p^3} w(r, p) + \dots \quad (7.55)$$

Finalement, en ajoutant les vitesses de variation (7.48) et (7.55), on obtient

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p}{M} \frac{\partial}{\partial r} + \phi(r) \frac{\partial}{\partial p} \right] w(r, p, t) = - \frac{\hbar^2}{24} \frac{d^3V(r)}{dr^3} \frac{\partial^3}{\partial p^3} w(r, p, t) + \dots \quad (7.56)$$

équations qui ressemble beaucoup à l'équation de Fokker-Planck (6.14) du cours VI. Le 1^{er} membre décrit l'évolution d'une distribution classique (évolution conservative). Le 2^{ème} membre décrit des corrections quantiques sous forme d'un

développement en puissances de \hbar^2

Notons que si $V(r)$ est quadratique en r (cas d'un potentiel linéaire ou parabolique), tous les termes du second membre de (7.56) sont nuls. Il n'y a alors pas de différence entre l'équation d'évolution de la fonction de Wigner et celle d'une distribution classique. Il ne faut pas oublier cependant que w est soumis à des contraintes liées à la non commutation de R et P (voir § 4 b ci-dessus)

c) Analogies avec une équation pilote. Différences

- Revenons à (7.51). Au lieu de développer $V(r \pm \frac{u}{2})$ en puissances de u , on peut considérer que chacun des 2 termes $V(r + \frac{u}{2}) F(r, u)$ et $-V(r - \frac{u}{2}) F(r, u)$ figurant au 2^{ème} membre de (7.51) est un produit de 2 fonctions de u , qui, par transformée de Fourier par rapport à u , va devenir un produit de convolution de $w(r, p)$ par la transformée de Fourier de $V(r - \frac{u}{2})$. On obtient ainsi, à partir de (7.51)

$$\dot{w}(r, p) = \int dp' S(r, p-p') w(r, p') \quad (7.57)$$

où

$$S(r, p) = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\hbar^3} \int du e^{-ip u / \hbar} [V(r + \frac{u}{2}) - V(r - \frac{u}{2})]$$

$$= -\frac{2}{\hbar} \frac{1}{\hbar^3} \int du \sin \frac{p u}{\hbar} V(r + \frac{u}{2}) \quad (7.58)$$

- En ajoutant les vitesses de variations (7.48) et (7.58), on obtient

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{P}{M} \frac{\partial}{\partial r} \right) w(r, p, t) = \int dp' S(r, p-p') w(r, p', t) \quad (7.58)$$

En plus du vol libre, l'évolution de $w(r, p, t)$ décrite par (7.58) peut être "interprétée" de la manière suivante: Tout se passe comme si, sous l'effet du potentiel, la particule au point r effectuait des "sauts d'impulsion" $p-p'$ avec des "probabilités" par unité de temps $S(r, p-p')$. L'équation (7.58) apparaît ainsi comme une "équation pilote".

- En faveur de cette interprétation, on peut noter que, d'après la 1^{ère} ligne de (7.58), $S(r, p)$ est une quantité réelle. De plus, en multipliant $S(r, p)$ par p , et en intégrant sur p , on obtient le "transfert moyen d'impulsion par unité de temps au point r ". Comme

$$\frac{1}{\hbar^3} \int dp p e^{-ip u / \hbar} = i\hbar \frac{\partial}{\partial u} \frac{1}{\hbar^3} \int du e^{-ip u / \hbar} = i\hbar \delta'(u) \quad (7.59)$$

on obtient

$$\int dp p S(r, p) = \int du S'(u) [V(r + \frac{u}{2}) - V(r - \frac{u}{2})] = -\frac{dV}{dr} = \phi(r) \quad (7.60)$$

résultat satisfaisant puisqu'il fait apparaître la force au point r comme le transfert moyen d'impulsion par unité de temps au point r

- En défaveur de cette interprétation, notons que d'après (7.58), $S(r, p)$ est une fonction impair de p , dont l'intégrale est donc nulle. $S(r, p)$ prend donc nécessairement des valeurs négatives, ce qui montre que ce n'est pas une vraie probabilité. De plus, elle n'est pas normalisée.

Notons enfin que, $S(r, p)$ étant impair, la "valeur moyenne" de p^2 est nulle. Il n'y a donc pas de diffusion d'impulsion associée à l'équation (7.58)

d) Propagateur de la fonction de Wigner

- L'évolution de la fonction de Wigner peut être décrite d'une 3^{ème} manière [en plus de (7.56) et (7.58)] qui rappelle, par certains côtés, l'évolution d'un processus de Markov (voir cours V)
- Partons de l'équation d'évolution de l'opérateur densité qui permet d'exprimer $\sigma(t_1)$ en fonction de $\sigma(t_0)$, et de l'opérateur d'évolution $U(t_1, t_0)$

$$\sigma(t_1) = U(t_1, t_0) \sigma(t_0) U^\dagger(t_1, t_0) \quad (7.61)$$

$$U(t_1, t_0) = e^{-iH(t_1-t_0)/\hbar} \quad H = \frac{p^2}{2m} + V(R) \quad (7.62)$$

En prenant les éléments de matrice des 2 membres de (7.61) entre $\langle r'_1 |$ et $| r''_1 \rangle$ et en insérant des relations de fermeture entre U et σ , σ et U^\dagger , on obtient

$$\sigma(r'_1, r''_1, t_1) = \iint dr'_0 dr''_0 \sigma(r'_0, r''_0, t_0) K(r'_0 t_0 | r'_1 t_1) K^*(r''_0 t_0 | r''_1 t_1) \quad (7.63)$$

où
$$K(r'_0 t_0 | r'_1 t_1) = \langle r'_1 | U(t_1, t_0) | r'_0 \rangle \quad (7.64)$$

est l'amplitude de transition $r'_0 t_0 \rightarrow r'_1 t_1$. A partir des propriétés de l'opérateur d'évolution $U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1) U(t_1, t_0)$ et $U^\dagger(t_1, t_0) = U(t_0, t_1)$, on démontre que

$$\int dr'_1 K(r'_0 t_0 | r'_1 t_1) K(r'_1 t_1 | r'_2 t_2) = K(r'_0 t_0 | r'_2 t_2) \quad (7.65)$$

$$K(r'_0 t_0 | r'_1 t_1) = K(r'_1 t_1 | r'_0 t_0)^* \quad (7.66)$$

$$K(r'_0 t_0 | r''_0 t_0) = \delta(r'_0 - r''_0) \quad (7.67)$$

L'équation (7.65) ressemble un peu à une équation de Smolouchowski pour la probabilité de transition d'un processus de Markov [équation 5.9 de V], mais il ne faut pas oublier que K est une amplitude complexe et non une probabilité

- Effectuons le changement de variables (7.10). L'équation (7.63) devient

$$F(r_1, u_1, t_1) = \iint dr_0 du_0 F(r_0, u_0, t_0) T(r_0 u_0 t_0 | r_1 u_1 t_1) \quad (7.68)$$

où
$$T(r_0 u_0 t_0 | r_1 u_1 t_1) = K(r_0 + \frac{u_0}{2}, t_0 | r_1 + \frac{u_1}{2}, t_1) K(r_0 - \frac{u_0}{2}, t_0 | r_1 - \frac{u_1}{2}, t_1)^* \quad (7.69)$$

satisfait
$$T(r_0, -u_0, t_0 | r_1, -u_1, t_1) = T(r_0, u_0, t_0 | r_1, u_1, t_1)^* \quad (7.70)$$

- Il ne reste plus qu'à prendre la transformée de Fourier des 2 membres de (7.68) par rapport à u_1 , et à exprimer $F(r_0, u_0, t_0)$ en fonction de $w(r_0, p_0, t_0)$ pour obtenir

$$w(r_1, p_1, t_1) = \iint dr_0 dp_0 w(r_0, p_0, t_0) S(r_0 p_0 t_0 | r_1, p_1, t_1) \quad (7.71)$$

où
$$S(r_0 p_0 t_0 | r_1, p_1, t_1) = \frac{1}{\hbar^3} \iint du_0 du_1 T(r_0 u_0 t_0 | r_1, u_1, t_1) e^{i(p_0 u_0 - p_1 u_1)/\hbar} \quad (7.72)$$

apparaît comme le propagateur de la fonction de Wigner et a la signification d'une "probabilité de transition" $r_0 p_0 t_0 \rightarrow r_1, p_1, t_1$

A partir des définitions (7.72) et (7.69) et des propriétés (7.65) à (7.67) (7.70) on démontre alors les propriétés suivantes pour S

(i) $S(r_0 p_0 t_0 | r_1, p_1, t_1)$ réel (7.73)

(ii) $S(r_0 p_0 t_0 | r'_0 p'_0 t_0) = \delta(r_0 - r'_0) \delta(p_0 - p'_0)$ (7.74)

(iii) $\iint dr_i dp_i S(r_0 p_0 t_0 | r_i, p_i, t_i) S(r_i, p_i, t_i | r_2 p_2 t_2) = S(r_0 p_0 t_0 | r_2 p_2 t_2)$ (7.75)

(iv) $\iint dr_i dp_i S(r_0 p_0 t_0 | r_i, p_i, t_i) = 1$ (7.76)

Toutes ces propriétés rappellent beaucoup celles de la probabilité de transition d'un processus de Markov. En particulier l'équation (7.75) rappelle l'équation de Smolouchowski 5.9 du chapitre V. S peut cependant prendre des valeurs négatives, ce qui montre bien que, malgré ses apparences classiques, w reste un objet quantique.

Références

[VII-9]

- C. Tanguy Thèse de 3^{ème} cycle, Paris 1983
C. Lhuillier Séminaire au Collège de France, Paris 1981
S. de Groot La transformation de Weyl et la fonction de Wigner : une forme alternative de la mécanique quantique, Les Presses de l'Université de Montréal (1974)
T. Takabayasi Progress of Theoret. Phys. 11, 341 (1954)

Appendice A

Démontrons que la fonction $C(u, v)$ définie par (7.26) coïncide avec (7.28)

$$C(u, v) = \int dr F(r, u) e^{i v r / \hbar} = \int dr \langle r + \frac{u}{2} | \sigma | r - \frac{u}{2} \rangle e^{i v r / \hbar} \quad (A-1)$$

Reexprimons $|r - \frac{u}{2}\rangle$ en fonction de $|r + \frac{u}{2}\rangle$ et de l'opérateur de translation $e^{i u P / \hbar}$

$$|r - \frac{u}{2}\rangle = e^{i u P / \hbar} |r + \frac{u}{2}\rangle \quad (A-2)$$

Par ailleurs

$$e^{i v R / \hbar} |r + \frac{u}{2}\rangle = e^{i v r / \hbar} e^{i v u / 2 \hbar} |r + \frac{u}{2}\rangle \quad (A-3)$$

En utilisant (A-2) et (A-3), on peut alors réécrire (A-1) sous la forme

$$C(u, v) = \int dr \langle r + \frac{u}{2} | \sigma e^{i u P / \hbar} e^{i v R / \hbar} |r + \frac{u}{2}\rangle e^{-i v u / 2 \hbar} \quad (A-4)$$

Or, si A et B commutent avec $[A, B]$, il est bien connu que

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A, B]} \quad (A-5)$$

de sorte que

$$e^{i u P / \hbar} e^{i v R / \hbar} = e^{i [u P + v R] / \hbar} e^{i u v / 2 \hbar} \quad (A-6)$$

En reportant (A-6) dans (A-4), on obtient

$$\begin{aligned} C(u, v) &= \int dr \langle r + \frac{u}{2} | \sigma e^{i [u P + v R] / \hbar} |r + \frac{u}{2}\rangle \\ &= \text{Tr} \{ \sigma e^{i [u P + v R] / \hbar} \} = \langle e^{i [u P + v R] / \hbar} \rangle \end{aligned} \quad (A-7)$$

ce qui démontre (7.28)

17.01.84

Opérateur densité d'une particule quantique Représentation de Wigner (suite et fin)

VIII-1

B. Atome à deux niveaux dans une onde lumineuse

[références 1 à 3]

Buts de ce § B

- Généraliser la discussion du § A précédent au cas d'une particule ayant des degrés de liberté internes : atome à 2 niveaux e et g couplé à une onde lumineuse.
- Établir les équations d'évolution de la matrice densité en représentation de Wigner : généralisation des équations de Bloch optiques tenant compte à la fois des degrés de liberté internes et externes.
- Montrer que la conservation de l'impulsion globale lors des processus d'absorption, d'émission induite et d'émission spontanée apparaît clairement dans les équations d'évolution.

① Nouvelles notations pour la matrice densité atomique.

- L'atome étant représenté par un système à 2 niveaux internes, e (état excité) et g (état fondamental), les éléments de la matrice densité atomique σ sont maintenant repérés par 2 variables continues (r' et r'' , ... comme dans le § A précédent) pour les degrés de liberté externes, et par 2 indices discrets a et b (égaux à e ou g), pour les degrés de liberté internes. Nous noterons :

$$\begin{cases} \sigma_{ab}(r', r'') = \langle a, r' | \sigma | b, r'' \rangle \\ \sigma_{ab}(p', p'') = \langle a, p' | \sigma | b, p'' \rangle \end{cases} \quad \begin{cases} F_{ab}(r, u) = \langle a, r + \frac{u}{2} | \sigma | b, r - \frac{u}{2} \rangle \\ G_{ab}(p, v) = \langle a, p + \frac{v}{2} | \sigma | b, p - \frac{v}{2} \rangle \end{cases} \quad (8.1)$$

$$w_{ab}(r, p) = \frac{1}{h^3} \int du F_{ab}(r, u) e^{-ip u / \hbar} = \frac{1}{h^3} \int dv G_{ab}(p, v) e^{i r v / \hbar} \quad (8.2)$$

- Nous pouvons alors effectuer la trace sur les degrés de liberté internes, ce qui permet de définir les fonctions

$$F(r, u) = F_{ee}(r, u) + F_{gg}(r, u) \quad G(p, v) = G_{ee}(p, v) + G_{gg}(p, v) \quad (8.3)$$

$$w(r, p) = w_{ee}(r, p) + w_{gg}(r, p) \quad (8.4)$$

$w(r, p)$ est une grandeur de probabilité de la particule en r, p , quel que soit son état interne. Les quantités

$$\mathcal{R}(r) = F(r, 0) = \int dp w(r, p) \quad (8.5)$$

$$\mathcal{P}(p) = G(p, 0) = \int dr w(r, p) \quad (8.6)$$

sont les densités vraies de particules en r et p .

② Hamiltonien du système atome + rayonnement

- L'onde incidente, monochromatique, est supposée correspondre à un champ dans un état cohérent. On sait alors (référence 4) qu'on peut, à l'aide d'une transformation unitaire, mettre l'Hamiltonien du système atome + rayonnement sous une forme équivalente, où le champ incident est traité classiquement, l'atome continuant toutefois à interagir avec le champ quantique du vide. Cet Hamiltonien $H(t)$ s'écrit

$$H(t) = H_A + H_R + H_{AR} + V(t) \quad (8.7)$$

où

$$H_A = \frac{P^2}{2M} + \hbar \omega_0 S_3 \quad \text{avec} \quad S_3 = \frac{1}{2} (|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|) \quad (8.8) \quad \text{VIII-2}$$

est l'hamiltonien atomique (le 1^{er} terme est l'énergie cinétique du centre de masse, le 2^{em} donne la structure interne : 2 niveaux e et g séparés par $\hbar \omega_0$, où ω_0 est la fréquence atomique).

$$H_R = \sum_i \hbar \omega_i (a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2}) \quad (8.9)$$

est l'hamiltonien du rayonnement quantique développé en modes i de fréquence ω_i (a_i^\dagger et a_i sont les opérateurs de création et de destruction d'un photon du mode i).

$$H_{AR} = \sum_i (v_i S_+ e^{i k_i \cdot R} a_i + v_i^* a_i^\dagger e^{-i k_i \cdot R} S_-) \quad (8.10)$$

décrit l'interaction de l'atome avec les divers modes du champ quantique (interaction à l'origine de l'émission spontanée). Dans (8.10), v_i est un coefficient de couplage atome - mode i

$$S_+ = |e\rangle\langle g| \quad S_- = |g\rangle\langle e| \quad (8.11)$$

R est l'opérateur position du centre de masse

$$V(t) = -d S_+ E^+(R) e^{-i\omega t} - d S_- E^-(R) e^{i\omega t} \quad (8.12)$$

décrit l'interaction de l'atome avec l'onde incidente, monochromatique (de fréquence ω), interaction à l'origine de l'absorption et de l'émission induite. $d = \langle e | D | g \rangle$ est l'élément de matrice de l'opérateur dipôle D entre e et g . $E^+(r) e^{-i\omega t}$ est la partie de fréquence positive du champ classique associé à l'onde incidente. Il faut noter que c'est $E^+(R)$, et non $E^+(r)$, qui apparaît dans (8.12). Les degrés de liberté externes (de translation) de l'atome sont traités quantiquement dans (8.12) et dans tous les autres termes de (8.7)

③ Evolution de l'opérateur densité atomique réduit

- Soit σ_{AR} l'opérateur densité du système global atome + rayonnement. Si l'on s'intéresse à l'atome seul, l'état de ce dernier est décrit par l'opérateur densité réduit σ_A , ou plus simplement σ , obtenu en prenant la trace de σ_{AR} sur les variables de rayonnement

$$\sigma = \sigma_A = \text{Tr}_R \sigma_{AR} \quad (8.13)$$

- Comme

$$i\hbar \frac{d}{dt} \sigma_{AR}(t) = [H(t), \sigma_{AR}(t)] \quad (8.14)$$

où $H(t)$ est donné en (8.7), on en déduit que

$$\frac{d}{dt} \sigma(t) = \frac{1}{i\hbar} \text{Tr}_R ([H(t), \sigma_{AR}(t)]) \quad (8.15)$$

Nous passons maintenant en revue les contributions, à la vitesse de variation (8.15) de σ , des divers termes de (8.7)

④ Contribution de l'hamiltonien atomique

- L'énergie cinétique ne dépendant pas des opérateurs de rayonnement, le calcul de la trace sur R de (8.15) est immédiat, et le résultat (7.48) du § A précédent demeure valable. On obtient

$$\dot{w}_{ab}(r, p) = -\frac{p}{M} \frac{\partial}{\partial r} w_{ab}(r, p) \quad (8.16)$$

ce qui donne, par transformée de Fourier sur p

$$\dot{F}_{ab}(r, u) = \frac{i\hbar}{M} \frac{\partial^2}{\partial r \partial u} F_{ab}(r, u) \quad (8.17) \quad \text{VIII.3}$$

- S_z n'agissant pas sur les variables externes et sur les variables de rayonnement, on obtient pour la contribution du terme $\hbar\omega_0 S_z$ de (8.8)

$$\begin{cases} \dot{\sigma}_{eg}(r', r'') = -i\omega_0 \sigma_{eg}(r', r'') \\ \dot{\sigma}_{ge}(r', r'') = i\omega_0 \sigma_{ge}(r', r'') \\ \dot{\sigma}_{ee}(r', r'') = 0 = \dot{\sigma}_{gg}(r', r'') \end{cases} \quad (8.18)$$

et des équations analogues pour $\dot{\sigma}_{ab}(p', p'')$, $\dot{F}_{ab}(r, u)$, $\dot{W}_{ab}(r, p)$...

⑤ Contribution de l'interaction avec l'onde incidente. Absorption et émission induite.

- L'opérateur $V(t)$ écrit en (8.12) étant purement atomique, le calcul de sa contribution à (8.15) est très simple (la trace sur R est immédiate) et donne

$$\dot{\sigma} = \frac{id}{\hbar} e^{-i\omega t} [E^+(R) S_+ \sigma - \sigma S_+ E^+(R)] + h.c. \quad (8.19)$$

- Comme R est l'opérateur position du centre de masse, on obtient, en prenant l'élément de matrice de (8.19) entre $\langle e, r' |$ et $|g, r'' \rangle$,

$$\dot{\sigma}_{eg}(r', r'') = \frac{id}{\hbar} e^{-i\omega t} [E^+(r') \sigma_{gg}(r', r'') - E^+(r'') \sigma_{ee}(r', r'')] \quad (8.20)$$

Il convient de noter que le fait de traiter quantiquement R et P se traduit, dans (8.20), par l'apparition de $E^+(r')$ ou $E^+(r'')$ suivant que $E^+(R)$ est à gauche ou à droite de σ dans (8.19). Si les degrés de liberté externes étaient traités classiquement, seule la valeur du champ incident au point r où se trouve l'atome interviendrait.

- On peut également utiliser la représentation de σ dans la base $\{|p\rangle\}$ et projeter (8.19) entre $\langle e, p' |$ et $|g, p'' \rangle$. Si l'on décompose $E^+(R)$ en intégrale de Fourier spatiale

$$E^+(R) = \int dk E^+(k) e^{ikR} \quad (8.21)$$

et qu'on utilise le fait que e^{ikR} est un opérateur de translation en représentation d'impulsion

$$\begin{aligned} e^{ikR} |p''\rangle &= |p'' + \hbar k\rangle \\ \langle p' | e^{ikR} &= \langle p' - \hbar k | \end{aligned} \quad (8.22)$$

on obtient, à partir de (8.19)

$$\dot{\sigma}_{eg}(p', p'') = \frac{id}{\hbar} \int dk E^+(k) e^{-i\omega t} [\sigma_{gg}(p' - \hbar k, p'') - \sigma_{ee}(p', p'' + \hbar k)] \quad (8.23)$$

En comparant les termes de droite et de gauche dans (8.23), on voit que le passage de e à g dans le "bra" (émission induite) fait passer de p' à $p' - \hbar k$ (l'atome perd l'impulsion emportée par le photon), tandis que le passage de g à e dans le ket (absorption) fait passer de p'' à $p'' + \hbar k$ (l'atome acquiert l'impulsion du photon absorbé). La conservation de l'impulsion dans les processus élémentaires d'absorption et d'émission induite apparaît donc très clairement dans les équations d'évolution (8.23)

- A partir de (8.20), on déduit l'équation d'évolution de $F_{eg}(r, u)$ [VIII-4]

$$\dot{F}_{eg}(r, u) = \frac{id}{\hbar} e^{-i\omega t} \left[E^+(r + \frac{u}{2}) F_{gg}(r, u) - E^+(r - \frac{u}{2}) F_{ee}(r, u) \right] \quad (8.24)$$

puis, en prenant la transformée de Fourier de (8.24) par rapport à u , celle de $W_{eg}(r, p)$

$$\dot{W}_{eg}(r, p) = \frac{id}{\hbar} \int dk E^+(k) e^{i(kr - \omega t)} \left[W_{gg}(r, p - \frac{\hbar k}{2}) - W_{ee}(r, p + \frac{\hbar k}{2}) \right] \quad (8.25)$$

On peut facilement interpréter l'apparition du facteur $\hbar k/2$ dans (8.25). En effet, dans (8.23), seule l'une des deux impulsions p' ou p'' était modifiée de $\mp \hbar k$; or, dans $W(r, p)$, c'est $p = (p' + p'')/2$ qui intervient

- les équations d'évolution des autres éléments de matrice (internes) de σ , sous l'effet de $V(t)$, s'obtiennent de la même manière à partir de (8.19), et seront données plus loin (§ 7).

⑥ Contribution de l'interaction avec les modes vides - Emission spontanée

- A la différence des autres termes de (8.7), H_{AR} agit à la fois sur les variables atomiques et de rayonnement, de sorte que le calcul de la trace sur R dans (8.15) n'est pas aussi simple que pour les autres termes

- En fait, le problème de l'évolution de la matrice densité atomique réduite sous l'effet du couplage avec les modes vides du rayonnement (problème de l'émission spontanée) peut être abordé dans le cadre général de la théorie de la relaxation à la limite du "rétrécissement par le mouvement". [5, 6]. Le champ électromagnétique, avec son très grand nombre de degrés de liberté, peut être considéré comme un grand "réservoir" fluctuant, dont le temps de corrélation τ_c (temps de corrélation des "fluctuations du vide") est suffisamment court pour que la condition de rétrécissement par le mouvement

$$\sqrt{\langle H_{AR}^2 \rangle} \tau_c / \hbar \ll 1 \quad (8.26)$$

soit très largement satisfaite.

Le calcul de la intensité de variation de σ due à H_{AR} est exposé en détail dans la référence (5), dans le cas où la position R de l'atome est traitée classiquement, et supposée de plus fixe. Il nous faut donc reprendre ici ces calculs en tenant compte du fait que R est un opérateur.

- En reprenant la suite des calculs qui font passer de l'équation (4.18) à l'équation (4.27) de la référence (5), et en utilisant l'expression (8.10) de H_{AR} , on obtient [voir aussi l'appendice à la fin du chapitre qui donne les grandes lignes d'un tel calcul].

$$\left[\frac{d}{dt} \sigma(t) \right]_{\text{em. spont.}} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \sum_i |v_i|^2 e^{-i\omega_i \tau} \left\{ e^{ik_i R} S_+ \tilde{S}_-(\tau) e^{-ik_i \tilde{R}(\tau)} \sigma(t) - e^{-ik_i \tilde{R}(\tau)} \tilde{S}_-(\tau) \sigma(t) S_+ e^{ik_i R} \right\} + h.c. \quad (8.27)$$

où l'indice ν désigne la représentation d'interaction par rapport à l'hamiltonien atomique non perturbé H_A .

Notons que, pour calculer la vitesse de variation de σ due VIII-5 à l'émission spontanée, nous prenons $V(t) = 0$ dans (8.27) (pas d'onde incidente). En effet, le temps de corrélation τ_c associé à l'émission spontanée est si court que l'effet du couplage entre l'atome et l'onde incidente est négligeable pendant τ_c .

- En utilisant la relation de commutation générale

$$[R, f(P)] = i\hbar \frac{\partial}{\partial P} f(P) \quad (8.28)$$

nous pouvons calculer l'opérateur $\tilde{R}(-\tau)$ apparaissant dans (8.27)

$$\begin{aligned} \tilde{R}(-\tau) &= e^{-iH_A\tau/\hbar} R e^{iH_A\tau/\hbar} = e^{-iP^2\tau/2M\hbar} R e^{iP^2\tau/2M\hbar} \\ &= R - \frac{P\tau}{M} \end{aligned} \quad (8.29)$$

De même, on peut calculer aisément $\tilde{S}_{\pm}(-\tau)$

$$\tilde{S}_{\pm}(-\tau) = e^{-iH_A\tau/\hbar} S_{\pm} e^{iH_A\tau/\hbar} = e^{-i\omega_0 S_3\tau} S_{\pm} e^{i\omega_0 S_3\tau} = S_{\pm} e^{\mp i\omega_0\tau} \quad (8.30)$$

Lorsque les degrés de liberté externes sont traités classiquement, R et $\tilde{R}(\tau)$ sont tous deux égaux à un même vecteur classique r dans (8.27). Les exponentielles $e^{\pm ikr}$ se contractent alors dans chaque terme de (8.27) et disparaissent du 2^{ème} membre de cette équation qui ne concerne plus que les degrés de liberté internes. Si l'on pose

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i |v_i|^2 \delta(\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i) \quad (8.31)$$

où Γ est la probabilité d'émission spontanée d'un photon par unité de temps (règle d'or de Fermi), on retrouve alors les équations bien connues

$$\dot{\sigma}_{ee} = -\Gamma \sigma_{ee} \quad \dot{\sigma}_{gg} = \Gamma \sigma_{ee} \quad \dot{\sigma}_{eg} = -\frac{\Gamma}{2} \sigma_{eg} \quad \dot{\sigma}_{ge} = -\frac{\Gamma}{2} \sigma_{ge} \quad (8.32)$$

[Des termes imaginaires, représentant des déplacements de niveaux, apparaissent également dans les équations, et sont réintégrés dans ω_0]

- Revenons maintenant à la théorie entièrement quantique où R et $\tilde{R}(-\tau)$ sont des opérateurs. Leur différence est, d'après (8.29), égale à $P\tau/M$. Dans l'intégrale sur τ de (8.27), les valeurs de τ sont en fait limitées à des valeurs très proches de zéro, de l'ordre du temps de corrélation τ_c des fluctuations du vide [$\sum_i |v_i|^2 e^{-i\omega_i\tau}$ est une fonction très étroite en τ , de largeur τ_c]. Dans (8.29), $P\tau/M$ est donc de l'ordre de $P\tau_c/M$, qui représente le déplacement de l'atome pendant τ_c . Aux vitesses usuelles, un tel déplacement est négligeable du fait de la petitesse de τ_c . Nous pouvons donc remplacer dans (8.27) $\tilde{R}(-\tau)$ par R , sans perdre de vue toutefois que R reste un opérateur.

Dans le premier terme de (8.27), R (opérateur externe) commut avec les opérateurs internes \tilde{S}_{\pm} et S_{\pm} . Les 2 opérateurs $\exp[\pm ikR]$ se contractent alors pour donner 1 : les opérateurs externes disparaissent ainsi de ce terme. Il n'en est pas de même pour le second terme entre accolades, où les opérateurs $\exp[\pm ikR]$ restent séparés par σ . Tous les effets nouveaux par rapport à (8.32), vont donc provenir de ce 2^{ème} terme qui, d'après les éléments de matrice de S_+ et S_- encadrant σ , intervient uniquement dans l'équation reliant $\dot{\sigma}_{gg}$ à σ_{ee} (transfert de e à g par émission spontanée). Les équations d'évolution de σ_{ee} , σ_{eg} , σ_{ge} vont donc rester inchangées, quand on rajoute les

nombres quantiques externes qui restent "spectateurs". On obtient ainsi VIII-6

$$\dot{\sigma}_{ee}(r', r'') = -\Gamma \sigma_{ee}(r', r'') \quad \dot{\sigma}_{eg}(r', r'') = -\frac{\Gamma}{2} \sigma_{eg}(r', r'') \quad \dot{\sigma}_{ge}(r', r'') = -\frac{\Gamma}{2} \sigma_{ge}(r', r'') \quad (8.33)$$

et des équations analogues pour $\sigma_{ab}(r', r'')$, $F_{ab}(r, u)$, $w_{ab}(r, p)$ pour $(a, b) \neq (g, g)$

- Pour voir ce que devient l'équation donnant $\dot{\sigma}_{gg}$, prenons l'élément de matrice du 2^{ème} terme entre accolades de (8.27), plus celui de son complexe conjugué entre $\langle g, p' |$ et $|g, p'' \rangle$. En utilisant comme plus haut (8.22), on obtient

$$[\dot{\sigma}_{gg}(p', p'')]_{em. \text{ spont.}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i |v_i|^2 \delta(\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i) \sigma_{ee}(p' + \hbar k_i, p'' + \hbar k_i) \quad (8.34)$$

Le coefficient de couplage $|v_i|^2$ entre l'atome et le mode \vec{k}_i dépend du module k_i de \vec{k}_i , mais ne dépend de la direction $\vec{\kappa} = \vec{k}_i/k_i$ que par l'intermédiaire d'une fonction $\phi(\vec{\kappa})$ que l'on veut choisir normée

$$\int d^2\kappa \phi(\vec{\kappa}) = 1 \quad (8.35)$$

$\Gamma \phi(\vec{\kappa}) d^2\kappa$ est la probabilité par unité de temps d'émission spontanée d'un photon dans l'angle solide $d^2\kappa$ autour de $\vec{\kappa}$. On obtient alors à partir de (8.34) [conste term de 8.31]

$$[\dot{\sigma}_{gg}(\vec{p}', \vec{p}'')]_{em. \text{ spont.}} = \Gamma \int d^2\kappa \phi(\vec{\kappa}) \sigma_{ee}(\vec{p}' + \frac{\hbar\omega_0}{c} \vec{\kappa}, \vec{p}'' + \frac{\hbar\omega_0}{c} \vec{\kappa}) \quad (8.36)$$

où nous avons remis les flèches sur les vecteurs pour plus de clarté. L'interprétation physique de (8.36) est très claire: lors de l'émission spontanée d'un photon de fréquence ω_0 (égale à la fréquence atomique par conservation de l'énergie), dans la direction $\vec{\kappa}$, l'atome passe de e à g et son impulsion est diminuée de l'impulsion $\hbar\omega_0 \vec{\kappa}/c$ du photon émis. La probabilité d'un tel processus par unité de temps étant $\Gamma \phi(\vec{\kappa})$, il faut ensuite sommer sur $\vec{\kappa}$ pour avoir la vitesse totale de transfert en g .

Notons, qu'à la différence de (8.23), la conservation de l'impulsion, explicite dans (8.36), se manifeste à la fois sur p' et p'' , car la vitesse de variation de σ due à l'émission spontanée [cf 8.27] fait intervenir 2 opérateurs d'interaction [calcul du 2^{ème} ordre].

- A partir de (8.36), on obtient aisément l'équation d'évolution de $G_{gg}(p, v) = \sigma_{gg}(p + \frac{v}{2}, p - \frac{v}{2})$, puis par transformée de Fourier par rapport à v , celle de $w_{gg}(r, p)$

$$[\dot{w}_{gg}(\vec{r}, \vec{p})]_{em. \text{ spont.}} = \Gamma \int d^2\kappa \phi(\vec{\kappa}) w_{ee}(\vec{r}, \vec{p} + \frac{\hbar\omega_0}{c} \vec{\kappa}) \quad (8.37)$$

dont l'interprétation physique est aussi simple que celle de (8.36). On notera en particulier la disparition du facteur $1/2$ apparu dans (8.25), car \vec{p}' et \vec{p}'' sont tous deux traduits de $\hbar\omega_0 \vec{\kappa}/c$.

- Enfin, par transformation de Fourier par rapport à p de (8.37), on obtient

$$[\dot{F}_{gg}(\vec{r}, \vec{u})]_{em. \text{ spont.}} = \Gamma \chi(\vec{u}) F_{ee}(\vec{r}, \vec{u}) \quad (8.38)$$

ou

$$\chi(\vec{u}) = \int d^2\vec{\kappa} \phi(\vec{\kappa}) e^{-i \frac{\omega_0}{c} \vec{\kappa} \cdot \vec{u}} \quad (8.39)$$

⑦ Récapitulation : équations de Bloch optiques généralisées VIII-7

- Posons $\tilde{w}_{eg}(r, p) = w_{eg}(r, p) e^{i\omega t}$ $\tilde{w}_{ge}(r, p) = w_{ge}(r, p) e^{-i\omega t}$ (8.40)

[équivalent du passage dans le référentiel tournant], et des formules analogues pour $\tilde{F}_{eg}(r, u)$ et $\tilde{F}_{ge}(r, u)$. Pour simplifier les notations, nous omettons désormais l'indice \sim . Si l'on introduit, comme plus haut, le désaccord $\delta = \omega - \omega_0$ entre les fréquences du laser (ω) et de l'atome (ω_0), on obtient, en récapitulant tous les résultats précédents, les E.B.O. généralisées

$(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p}{M} \frac{\partial}{\partial r}) w_{ee}(r, p) = \frac{id}{\hbar} \int dk [\mathcal{E}^+(k) e^{ikr} w_{ge}(r, p - \frac{\hbar k}{2}) - \mathcal{E}^-(k) e^{-ikr} w_{eg}(r, p + \frac{\hbar k}{2})] - \Gamma w_{ee}(r, p)$ (a)

$(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p}{M} \frac{\partial}{\partial r}) w_{gg}(r, p) = \frac{id}{\hbar} \int dk [\mathcal{E}^-(k) e^{-ikr} w_{eg}(r, p + \frac{\hbar k}{2}) - \mathcal{E}^+(k) e^{ikr} w_{ge}(r, p - \frac{\hbar k}{2})] + \Gamma \int d^3k \phi(\vec{k}) w_{ee}(\vec{r}, \vec{p} + \frac{\hbar \vec{k}}{2})$ (b)

$(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p}{M} \frac{\partial}{\partial r}) w_{eg}(r, p) = \frac{id}{\hbar} \int dk \mathcal{E}^+(k) e^{ikr} [w_{gg}(r, p - \frac{\hbar k}{2}) - w_{ee}(r, p + \frac{\hbar k}{2})] + (i\delta - \frac{\Gamma}{2}) w_{eg}(r, p)$ (c)

$(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p}{M} \frac{\partial}{\partial r}) w_{ge}(r, p) = \frac{id}{\hbar} \int dk \mathcal{E}^-(k) e^{-ikr} [w_{ee}(r, p + \frac{\hbar k}{2}) - w_{gg}(r, p - \frac{\hbar k}{2})] - (i\delta + \frac{\Gamma}{2}) w_{ge}(r, p)$ (d)

décrivant l'évolution complé des degrés de liberté internes et externes. (8.41)

- La représentation $\{r, u\}$ peut être aussi utile

$(\frac{\partial}{\partial t} - i\frac{\hbar}{M} \frac{\partial^2}{\partial r \partial u}) F_{ee}(r, u) = \frac{id}{\hbar} [\mathcal{E}^+(r + \frac{u}{2}) F_{ge}(r, u) - \mathcal{E}^-(r - \frac{u}{2}) F_{eg}(r, u)] - \Gamma F_{ee}(r, u)$ (a)

$(\frac{\partial}{\partial t} - i\frac{\hbar}{M} \frac{\partial^2}{\partial r \partial u}) F_{gg}(r, u) = \frac{id}{\hbar} [\mathcal{E}^-(r + \frac{u}{2}) F_{eg}(r, u) - \mathcal{E}^+(r - \frac{u}{2}) F_{ge}(r, u)] + \Gamma \chi(u) F_{ee}(r, u)$ (b)

$(\frac{\partial}{\partial t} - i\frac{\hbar}{M} \frac{\partial^2}{\partial r \partial u}) F_{eg}(r, u) = \frac{id}{\hbar} [\mathcal{E}^+(r + \frac{u}{2}) F_{gg}(r, u) - \mathcal{E}^-(r - \frac{u}{2}) F_{ee}(r, u)] + (i\delta - \frac{\Gamma}{2}) F_{eg}(r, u)$ (c)

$(\frac{\partial}{\partial t} - i\frac{\hbar}{M} \frac{\partial^2}{\partial r \partial u}) F_{ge}(r, u) = \frac{id}{\hbar} [\mathcal{E}^-(r + \frac{u}{2}) F_{ee}(r, u) - \mathcal{E}^+(r - \frac{u}{2}) F_{gg}(r, u)] - (i\delta + \frac{\Gamma}{2}) F_{ge}(r, u)$ (d)

(8.42)

⑧ Discussion physique

a) Éléments nouveaux par rapport aux E.B.O. ordinaires pour un atome immobile en \vec{r}

- Termes de "vol libre" (en $\frac{p}{M} \frac{\partial}{\partial r}$ ou $i\frac{\hbar}{M} \frac{\partial^2}{\partial r \partial u}$) au 1^{er} membre de (8.41) ou (8.42)

- Termes liés à la conservation de l'impulsion dans l'interaction avec les photons

Termes en $\pm \frac{\hbar k}{2}$, en $\frac{\hbar \omega_0 \vec{k}}{c}$ dans w_{ab} au 2^{ème} membre de (8.41)

Termes $\pm \frac{u}{2}$ dans $\mathcal{E}^\pm(r \pm \frac{u}{2})$, terme $\chi(u)$ au 2^{ème} membre de (8.42)

b) Comment se manifestent les effets physiques liés au vol libre ?

- Plaçons nous dans le référentiel propre de l'atome. Mathématiquement, cela revient à se placer en représentation d'interaction par rapport au terme d'énergie cinétique

$\sigma_{AR}(t) \rightarrow \tilde{\sigma}_{AR}(t) = e^{iP^2(t-t_0)/2M\hbar} \sigma_{AR}(t) e^{-iP^2(t-t_0)/2M\hbar}$ (8.43)

$\tilde{\sigma}_{AR}(t)$ obéit à une équation analogue à (8.15) avec un hamiltonien \tilde{H} ne contenant plus de terme d'énergie cinétique, et où tous les autres termes de (8.7) sont pris en représentation d'interaction par rapport à $P^2/2M$, ce qui revient à remplacer dans (8.10) et (8.12) R par (voir 8.29)

$\tilde{R}(t) = e^{iP^2(t-t_0)/2M\hbar} R e^{-iP^2(t-t_0)/2M\hbar} = R + P(t-t_0)/M$ (8.44)

- En ce qui concerne l'émission spontanée, les temps $t-t_0$ caractéristiques apparaissant dans (8.44) sont de l'ordre du temps de corrélation des fluctuations du vide, qui est si court que $P(t-t_0)/M$ est négligeable, comme nous l'avons déjà mentionné plus haut (voir page VIII-5). Le vol libre n'affecte donc pas l'émission spontanée

- En ce qui concerne l'interaction avec l'onde laser, on a

$$\tilde{V}(t) = -D^+ E^+(R + \frac{P(t-t_0)}{M}) - D^- E^-(R + \frac{P(t-t_0)}{M}) \quad (8.45)$$

$t-t_0$ peut alors être de l'ordre de Γ^{-1} (temps d'évolution des variables internes) et $P(t-t_0)/M$ n'est plus forcément négligeable. Physiquement, le vol libre modifie l'interaction atome-laser par suite de l'effet Doppler. Cet effet sera petit si $P(t-t_0)/M \approx P/M\Gamma$ est petit devant $\lambda = 1/k$ qui caractérise les variations spatiales de E^\pm , c-à-d si

$$kP/M = kv \ll \Gamma \quad \longleftrightarrow \quad \text{Effet Doppler} \ll \text{largeur naturelle} \quad (8.46)$$

Conclusion : il est possible d'éliminer les termes de vol libre dans les E.B.O. généralisées au moyen d'un changement de représentation, mais les termes d'interaction avec le laser sont alors modifiés, les corrections correspondantes étant petites si $kv \ll \Gamma$.

c) Dans quelles limites les E.B.O. généralisées redonnent-elles les E.B.O. ordinaires?

- Pour pouvoir éliminer les termes de vol libre et négliger les corrections correspondantes dans $\tilde{V}(t)$, il faut tout d'abord que $kv \ll \Gamma$ (voir § b ci-dessus)

- Pour pouvoir remplacer au 2^{ème} membre de (8.41) $w_{ab}(r, p \pm \frac{\hbar k}{2})$ et $w_{ee}(r, p \pm \frac{\hbar k}{2})$ par $w_{ab}(r, p)$ et $w_{ee}(r, p)$, il faut d'autre part que

$$\hbar k \ll \bar{p} \quad (8.47)$$

où \bar{p} est largeur en p de $w_{ab}(r, p)$

- Il y a donc 2 infiniment petits, kv/Γ et $\hbar k/\bar{p}$, caractérisant la déviation des E.B.O. généralisées par rapport aux E.B.O. ordinaires pour un atome immobile en r .

Mais nous avons vu dans le cours IV (voir Fig. 4 page IV-9) que pour un atome soumis au refroidissement radiatif, on a (à l'équilibre) $\bar{p}^2/2M \approx \hbar\Gamma$, de sorte que $\bar{p} \sim \sqrt{\hbar\Gamma M}$. On en déduit que

$$\frac{kv}{\Gamma} \approx \frac{k\bar{p}}{\Gamma} \approx \sqrt{\frac{E_{recul}}{\hbar\Gamma}} \quad \frac{\hbar k}{\bar{p}} \approx \sqrt{\frac{E_{recul}}{\hbar\Gamma}} \quad (8.48)$$

Les 2 infiniment petits sont donc tous deux de l'ordre de $\sqrt{\frac{E_{recul}}{\hbar\Gamma}}$

Conclusion On peut envisager de développer les E.B.O. généralisées en puissances de $\sqrt{E_{recul}/\hbar\Gamma}$, par exemple en développant (8.45) en puissances de $kP(t-t_0)/M$, en développant $w_{ab}(r, p \pm \frac{\hbar k}{2})$ en puissances de $\hbar k/\bar{p}$ (ce qui fera notamment apparaître des dérivées partielles de w_{ab} par rapport à p)... A l'ordre 0, on retrouve les E.B.O. ordinaires où degrés de liberté internes et externes sont découplés. Les termes d'ordre 1, 2... permettront d'étudier de manière de plus en plus précise les manifestations du couplage entre les 2 types de degrés de liberté.

Problème Peut-on à partir de ce développement perturbatif, déduire des E.B.O. généralisées l'équation d'évolution de $w(r, p, t) = w_{ee}(r, p, t) + w_{gg}(r, p, t)$, c-à-d l'équation cinétique quantique décrivant le mouvement de l'atome dans l'onde lumineuse, et comparer cette équation aux équations cinétiques classiques des cours V et VI? Ce problème sera abordé dans le cours IX

- Formulation du problème : un "petit" système \mathcal{A} , d'hamiltonien H_A , est couplé par ~~un~~ l'hamiltonien d'interaction H_{AR} à un "grand réservoir" \mathcal{R} d'hamiltonien H_R . L'hamiltonien total s'écrit

$$H = H_A + H_R + H_{AR} \quad (A-1)$$

avec $H_{AR} = \lambda \sum_i A_i R_i$ (A-2)

où λ est une constante de couplage, A_i (R_i) une observable de \mathcal{A} (\mathcal{R})
L'opérateur densité σ_{AR} du système globale évolue suivant

$$\frac{d}{dt} \sigma_{AR} = \frac{1}{i\hbar} [H, \sigma_{AR}] \quad (A-3)$$

Problème : trouver $\frac{d}{dt} \sigma_A(t)$ où $\sigma_A(t) = \text{Tr}_R \sigma_{AR}(t)$ (A-4)

- Représentation d'interaction

$$\left\{ \begin{aligned} \tilde{\sigma}_{AR}(t) &= e^{i(H_A+H_R)t/\hbar} \sigma_{AR}(t) e^{-i(H_A+H_R)t/\hbar} \\ \tilde{H}_{AR}(t) &= e^{i(H_A+H_R)t/\hbar} H_{AR} e^{-i(H_A+H_R)t/\hbar} = \lambda \sum_i \tilde{A}_i(t) \tilde{R}_i(t) \end{aligned} \right. \quad (A-5)$$

$$\tilde{H}_{AR}(t) = e^{i(H_A+H_R)t/\hbar} H_{AR} e^{-i(H_A+H_R)t/\hbar} = \lambda \sum_i \tilde{A}_i(t) \tilde{R}_i(t) \quad (A-6)$$

(A.3) devient $\frac{d}{dt} \tilde{\sigma}_{AR}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\tilde{H}_{AR}(t), \tilde{\sigma}_{AR}(t)]$ (A-7)

- Hypothèses concernant l'opérateur densité initial.

(i) $\sigma_{AR}(0)$ est jointe $\sigma_{AR}(0) = \sigma_A(0) \sigma_R(0)$ (A-8)

(ii) $\sigma_R(0)$ commute avec H_R [le réservoir est dans un état stationnaire]
 $[\sigma_R(0), H_R] = 0$ (A-9)

Ceci est bien vrai pour l'émission spontanée, puisque l'état initial du rayonnement (qui est ici le réservoir) est le vide $|0\rangle$, état propre de H_R

- Solution itérative de l'équation d'évolution de $\sigma_{AR}(t)$: (A-7)

$$\tilde{\sigma}_{AR}(t) = \tilde{\sigma}_{AR}(0) + \int_0^t dt' \frac{1}{i\hbar} [\tilde{H}_{AR}(t'), \tilde{\sigma}_{AR}(t')] \quad (A-10)$$

En reportant (A.10) dans (A.7), on obtient, compte tenu de (A.8)

$$\frac{d}{dt} \tilde{\sigma}_{AR}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\tilde{H}_{AR}(t), \sigma_A(0) \sigma_R(0)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' [\tilde{H}_{AR}(t), [\tilde{H}_{AR}(t'), \tilde{\sigma}_{AR}(t')]]$$

(A.11)

et par suite

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\sigma}_A(t) &= \frac{d}{dt} \text{Tr}_R \tilde{\sigma}_{AR}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\text{Tr}_R(\tilde{H}_{AR}(t) \sigma_R(0)), \sigma_A(0)] + \\ &\quad - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \text{Tr}_R \left\{ [\tilde{H}_{AR}(t), [\tilde{H}_{AR}(t'), \tilde{\sigma}_{AR}(t')]] \right\} \end{aligned} \quad (A.12)$$

Dans le cas de l'émission spontanée, $\text{Tr}_R(\tilde{H}_{AR}(t), \sigma_R(0)) = 0$
car a_i et a_i^\dagger ont une valeur moyenne nulle dans le vide [comparer (8.10) et (A.2)] et le 1^{er} terme du 2nd membre de (A.12) est nul.

- Approximation 1 . Dans le 2nd terme du 2nd membre de (A.12), on pose

$$\tilde{\sigma}_{AR}(t') \approx (\text{Tr}_R \tilde{\sigma}_{AR}(t')) (\text{Tr}_A \tilde{\sigma}_{AR}(t')) \approx \tilde{\sigma}_A(t') \tilde{\sigma}_R(0) \quad (A.13)$$

Ce faisant, on néglige les corrélations entre \mathcal{A} et \mathcal{R} contenues dans $\tilde{\sigma}_{AR}(t')$ et on néglige la variation de l'état du grand réservoir \mathcal{R} entre 0 et t' sous l'effet du couplage avec le petit système \mathcal{A} . [La vitesse de variation (A.12) est en effet déjà d'ordre 2 en H_{AR}]. En reportant (A.13) dans (A.12), on obtient, compte tenu de (A-6) et en posant $t-t' = \tau$

$$\frac{d}{dt} \tilde{\sigma}_A(t) = - \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \sum_{ij} \int_0^t d\tau G_{ij}(\tau) \times \quad \text{VIII-10}$$

$$\{ \tilde{A}_j(t) \tilde{A}_i(t-\tau) \tilde{\sigma}_A(t-\tau) - \tilde{A}_i(t-\tau) \tilde{\sigma}_A(t-\tau) \tilde{A}_j(t) \} + h.c. \quad (A.14)$$

avec $G_{ij}(\tau) = \text{Pr}_R(\sigma_R(0) \tilde{R}_j(t) \tilde{R}_i(t-\tau)) = \langle 0 | \tilde{R}_j(t) \tilde{R}_i(t-\tau) | 0 \rangle \quad (A.15)$

(on a utilisé $\sigma_R(0) = |0\rangle\langle 0|$ pour l'émission spontanée). Le réservoir R n'apparaît plus dans l'équation d'évolution de $\tilde{\sigma}_A(t)$ que par l'intermédiaire des fonctions de corrélation $G_{ij}(\tau)$, qui sont des fonctions très étroites en τ si le spectre de fréquences de Bohr de R apparaissant dans $\tilde{R}_j(t)$ est très large

- Approximation 2 (Markov)

La présence de $G_{ij}(\tau)$ dans (A.14) limite les valeurs de τ dans l'intégrale à des valeurs de l'ordre de τ_c où τ_c est le temps de corrélation des fluctuations du réservoir. Si τ_c est très court devant le temps d'évolution de $\tilde{\sigma}_A(t)$ (temps de relaxation T_R), on peut remplacer dans (A.15) $\tilde{\sigma}_A(t-\tau)$ par $\tilde{\sigma}_A(t)$. Pour l'émission spontanée $\tau_c \ll \omega_0^{-1}$ et $T_R \sim \Gamma^{-1}$ et la condition $\tau_c \ll T_R$ est très largement vérifiée car $\omega_0 \gg \Gamma$. En repassant dans le point de vue de Schrödinger, l'équation d'évolution (A.15) devient

$$\frac{d}{dt} \sigma_A(t) = \frac{1}{i\hbar} [H_A, \sigma_A(t)] - \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \sum_{ij} G_{ij}(\tau) \times$$

$$\{ A_j \tilde{A}_i(-\tau) \sigma_A(t) - \tilde{A}_i(-\tau) \sigma_A(t) A_j \} + h.c. \quad (A.16)$$

En comparant (8.10) et (A.2), on voit que R_i est proportionnel à a_i ou a_i^\dagger . Pour que la fonction de corrélation $G_{ij}(\tau)$ définie en (A.15) soit non nulle, on voit alors qu'il faut prendre $R_i = a_i^\dagger$ et $R_j = a_j$ (partant du vide, on ne peut à l'ordre 2 que créer un photon et détruire ce même photon). On a alors forcément, d'après (8.10), $A_i = e^{-iR_i} R S_-$ et $A_j = e^{iR_j} R S_+$. En reportant alors ces valeurs de A_i, A_j, R_i, R_j dans (A.16) et (A.15), on obtient alors l'équation (8.27) qui est ainsi justifiée

- Conditions de validité des approximations 1 et 2

$$\sqrt{\langle H_{AR}^2 \rangle} \tau_c / \hbar \ll 1 \quad (A.17)$$

Références

- (1) C. TANGUY Thèse 3^e cycle (Paris 1982)
La présentation choisie dans ce cours suit de très près celle du § III-C de cette référence
- (2) V. LETOKHOV, V. MINOGIN Phys. Reports 73, 1 (1981)
- (3) R. J. COOK Phys. Rev. A 22, 1078 (1980)
- (4) B. R. MOLLOW Phys. Rev. A 12, 1919 (1975)
- (5) C. COHEN-TANNOUDJI in Frontiers in Laser Spectroscopy, Balian et al. editors, Les Houches Session XXVII, 1975 North Holland 1977
- (6) G. S. AGARWAL Quantum statistical theory of spontaneous emissions and their relation to other approaches. Springer tracts in modern physics 1973, vol. 66

Buts de ce chapitre

- Dérivier des équations de Bloch optiques généralisées (développées à l'ordre 2 inclus en $\varepsilon = kv/\Gamma \approx \hbar k/\bar{P}$) l'équation d'évolution de $w(r, p, t)$, où $w(r, p, t)$ est la trace sur les degrés de liberté internes de l'opérateur densité atomique en représentation de Wigner.
- Montrer que cette équation cinétique quantique est une équation de Fokker-Planck et établir l'expression des divers coefficients (de friction, de diffusion) apparaissant dans cette équation.

La méthode suivie est une méthode opératorielle due à Jean Dalibard⁽¹⁾. Elle a l'avantage de faire apparaître les tenseurs de diffusion et de friction au même ordre de perturbation en ε (ordre 2), et de fournir des expressions explicites de ces 2 tenseurs en termes de ~~ces~~ fonctions de corrélation des forces radiatives. Le lien entre fluctuations et dissipation apparaît ainsi clairement. Enfin, la méthode est directement applicable à des systèmes plus complexes qu'un atome à 2 niveaux.

① Développement perturbatif des E.B.O. généralisées

Représentation d'interaction par rapport à l'énergie cinétique $P^2/2M$
Ecriture sous forme opératorielle du développement des E.B.O. généralisées à l'ordre 2 en $\varepsilon = kv/\Gamma \approx \hbar k/\bar{P} \approx \sqrt{E_{\text{excit}}/\hbar\Gamma}$ (voir 8.43)

$$\frac{d\tilde{\sigma}_A(r, p, t)}{dt} = \mathcal{L}_0(r) \tilde{\sigma}_A(r, p, t) + \mathcal{L}_1(r, p, t) \tilde{\sigma}_A(r, p, t) + \mathcal{L}_2(r, p, t) \tilde{\sigma}_A(r, p, t) + \dots \quad (9-1)$$

$\tilde{\sigma}_A(r, p, t)$: Opérateur densité (dans l'espace de Hilbert \mathcal{E}_H des états internes) en représentation de Wigner. Dans la base $\{e, g\}$ représentée par une matrice 2×2 dont les 4 éléments sont des fonctions de r et p

$\mathcal{L}_0(r) \tilde{\sigma}_A(r, p, t)$: Vitesse de variation à l'ordre 0 en ε (E.B.O. ordinaires)

$\mathcal{L}_0(r)$: Liouvillien non perturbé. Opérateur dans l'espace de Liouville \mathcal{E}_L des états internes. Tout opérateur densité interne de \mathcal{E}_H (plus généralement, tout opérateur de \mathcal{E}_H) peut être considéré comme un vecteur dans l'espace de Liouville \mathcal{E}_L (de dimension $2^2 = 4$ pour un atome à 2 niveaux). \mathcal{L}_0 est un opérateur linéaire agissant dans \mathcal{E}_L . A tout vecteur de \mathcal{E}_L (c.à.d. à tout opérateur de \mathcal{E}_H), \mathcal{L}_0 fait correspondre linéairement un autre vecteur de \mathcal{E}_L (c.à.d. un autre opérateur de \mathcal{E}_H).

\mathcal{L}_1 et \mathcal{L}_2 : Liouvilliens d'ordre 1 et 2 en ε

② Propriétés du Liouvillien non perturbé \mathcal{L}_0

\mathcal{L}_0 correspond à $\varepsilon = 0$. On peut donc, dans (8.41), négliger le terme de vol libre, négliger les corrections correspondantes en $P(t-t_0)/M$ dans (8.45), ce qui revient à confondre $\tilde{V}(t)$ et $V(t)$, négliger les termes en $\pm \hbar k/2$ et $\hbar \omega_0 \vec{k}/c$ au 2^{ème} membre de (8.41). Les équations (8.41) s'écrivent alors sous forme opératorielle

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\sigma}_A(r, p, t) &= \alpha_0(r) \tilde{\sigma}_A(r, p, t) & \text{IX-2} \\ &= \frac{1}{i\hbar} [-D^+ E^+(r) - D^- E^-(r), \tilde{\sigma}_A(r, p, t)] + i\delta [S_3, \tilde{\sigma}_A(r, p, t)] \\ &\quad - \frac{\Gamma}{2} \{ S_+ S_- ; \tilde{\sigma}_A(r, p, t) \}_+ + \Gamma S_- \tilde{\sigma}_A(r, p, t) S_+ \end{aligned} \quad (9-2)$$

où $\{, \}_+$ désigne un anticommutateur, et où

$$S_3 = \frac{1}{2} (|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|), \quad S_+ = |e\rangle\langle g|, \quad S_- = |g\rangle\langle e|, \quad D^\pm = d S_\pm, \quad d = \langle e | D | g \rangle \quad (9-3)$$

De (9.2) il découle que

(i) α_0 est indépendant de t et p et ne dépend que de r [via $E^\pm(r)$]

(ii) $\forall \tilde{\sigma}_A, \quad \text{Tr}(\alpha_0 \tilde{\sigma}_A) = 0 \quad (9.4)$

Pour le voir, il suffit de noter que les 2 termes de la 2^{ème} ligne sont des commutateurs de trace nulle, et que, par suite de l'invariance d'une trace sous une permutation circulaire, les traces des 2 termes de la 3^{ème} ligne se compensent

Une conséquence de (9.4) est que, si

$$\tilde{w}(r, p, t) = \text{Tr} \tilde{\sigma}_A(r, p, t) \quad (9.5)$$

alors

$$\frac{d}{dt} \tilde{w}(r, p, t) = 0 \quad \text{à l'ordre 0 en } E \quad (9.6)$$

L'évolution à l'ordre 0 en E ne fait donc pas bouger r et p (rappelons que nous sommes en représentation d'interaction par rapport à $P^2/2M$, c'est dans le référentiel propre de l'atome où ce dernier est immobile). Comme on néglige les échanges d'impulsion entre l'atome et le rayonnement (ordre 0 en $\hbar k/\bar{p}$), il est normal aussi que p ne change pas

(iii) Dans (9.2), le nombre quantique externe p est "spectateur" et ne joue aucun rôle. Les équations peuvent être considérées comme les E.B.O. ordinaires d'un atome immobile en r dans le champ $E^\pm(r)$. Or les E.B.O. ordinaires ont toujours une solution stationnaire. Donc, pour tout r , il existe un opérateur densité interne stationnaire $\sigma_{st}(r)$, normé, satisfaisant,

$$\alpha_0(r) \sigma_{st}(r) = 0 \quad \text{Tr}(\sigma_{st}(r)) = 1 \quad (9.7)$$

(iv) La solution de (9.2) peut s'écrire formellement

$$\tilde{\sigma}_A(r, p, t_2) = e^{(t_2-t_1)\alpha_0(r)} \tilde{\sigma}_A(r, p, t_1) \quad (9.8)$$

Comme, d'après (9.6), la trace de $\tilde{\sigma}_A$ ne dépend pas de t et peut s'écrire donc $\tilde{w}(r, p)$, et que au bout d'un temps de l'ordre de τ^{-1} , l'état interne de l'atome au point r tend vers $\sigma_{st}(r)$, on a

$$\text{si } t_2 - t_1 > \tau^{-1}, \quad e^{(t_2-t_1)\alpha_0(r)} \tilde{\sigma}_A(r, p, t_1) \simeq \underbrace{\tilde{w}(r, p)}_{= \text{Tr} \tilde{\sigma}_A(r, p, t_1)} \sigma_{st}(r) \quad (9.9)$$

- Avant d'établir, à partir de (8.41) et (8.42) les expressions de d_1 et d_2 nous allons maintenant étudier la forme générale de l'équation d'évolution de $\tilde{w}(r, p, t)$ défini en (9.5), telle qu'elle résulte de (9.1) et des propriétés de α_0 .

③ Forme générale de l'équation cinétique pour la fonction de Wigner externe

- Cherchons une solution de (9.1) sous la forme

$$\tilde{\sigma}_A(r, p, t) = \tilde{w}(r, p, t) \sigma_{st}(r) + \delta\sigma(r, p, t) \quad (9.10)$$

où \tilde{W} et σ_{st} sont définis en (9.5) et (9.7) et où par suite

$$\text{Tr } \delta\sigma = 0 \tag{9.11}$$

- Le choix de (9.10) est suggéré par l'idée physique suivante : à l'ordre 0 en ϵ , \tilde{W} ne dépend pas de t et $\delta\sigma = 0$ si t est suffisamment loin de l'instant initial t_1 , d'après (9.9). Sous l'effet des forces radiatives, l'état externe de l'atome, et donc \tilde{W} , vont évoluer, lentement (à l'échelle de Γ^{-1}). Le 1^{er} terme de (9.10), $\tilde{W} \sigma_{st}(r)$, représente une sorte de "solution adiabatique" où l'atome reste au cours de son mouvement dans l'état interne stationnaire correspondant au point où il se trouve à chaque instant. Le 2^{ème} terme, $\delta\sigma$, est la correction à cette approximation.

- Reportons (9.10) dans (9.1). Il vient

$$\dot{\tilde{W}} \sigma_{st} + \dot{\delta\sigma} = \mathcal{L}_0 \tilde{W} \sigma_{st} + \mathcal{L}_0 \delta\sigma + \mathcal{L}_1 \tilde{W} \sigma_{st} + \mathcal{L}_1 \delta\sigma + \mathcal{L}_2 \tilde{W} \sigma_{st} + \mathcal{L}_2 \delta\sigma \tag{9.12}$$

Le 1^{er} terme du membre de droite peut aussi s'écrire $\tilde{W} \mathcal{L}_0 \sigma_{st}$, qui est nul d'après (9.7). En prenant la trace des 2 membres, et en utilisant (9.11) et (9.4), on obtient, compte tenu de la 2^{ème} équation (9.7)

$$\dot{\tilde{W}} = \text{Tr}(\mathcal{L}_1 \tilde{W} \sigma_{st}) + \text{Tr}(\mathcal{L}_1 \delta\sigma) + \text{Tr}(\mathcal{L}_2 \tilde{W} \sigma_{st}) + \text{Tr}(\mathcal{L}_2 \delta\sigma) \tag{9.13}$$

Il apparaît ainsi clairement que $\dot{\tilde{W}}$ est au moins d'ordre un en ϵ (voir aussi 9.6) et que, pour calculer $\dot{\tilde{W}}$ à l'ordre 2 inclus en ϵ , il faut calculer $\delta\sigma$ à l'ordre un inclus.

- Calcul de $\delta\sigma$ à l'ordre 0. A l'ordre 0 en ϵ , (9.12) donne (comme $\dot{\tilde{W}}$ est d'ordre 1)

$$\delta\dot{\sigma} = \mathcal{L}_0 \delta\sigma \tag{9.14}$$

dont la solution est de la forme (9.9) pour $t-t_1 \gg \Gamma^{-1}$ (t_1 : instant initial). Comme $\text{Tr } \delta\sigma = 0$, d'après (9.11), on en conclut que $\delta\sigma$ à l'ordre 0 est négligeable pour des instants suffisamment éloignés de l'instant initial t_1 .

- Calcul de $\delta\sigma$ à l'ordre 1. En négligeant $\delta\sigma$ à l'ordre 0 dans (9.12), on obtient, pour déterminer $\delta\sigma$ à l'ordre 1, l'équation

$$\delta\dot{\sigma} = \mathcal{L}_0 \delta\sigma + \mathcal{L}_1 \tilde{W} \sigma_{st} - \dot{\tilde{W}} \sigma_{st} \tag{9.15}$$

où $\dot{\tilde{W}}$ à l'ordre 1 se réduit au 1^{er} terme du 2^{ème} membre de (9.13) puisqu'on néglige $\delta\sigma$ à l'ordre 0. La solution de l'équation différentielle du 1^{er} ordre (9.15) s'écrit alors

$$\delta\sigma(t) \approx \int_{t_1}^t dt' e^{(t-t')\mathcal{L}_0} [\mathcal{L}_1(t') \tilde{W}(t') \sigma_{st} - (\text{Tr}(\mathcal{L}_1(t') \tilde{W}(t') \sigma_{st})) \sigma_{st}] \tag{9.16}$$

où nous avons réintroduit les temps dans les diverses quantités (mais non r, p , pour simplifier les notations)

$\tilde{W}(t')$ évolue à l'échelle de $\text{Tr} \sigma_{st} \sim \hbar / E_{exc} \gg \text{Tr} \sigma_{st} \sim \Gamma^{-1}$. Par ailleurs, les constantes de temps d'amortissement associées à l'opérateur $e^{(t-t')\mathcal{L}_0}$ (lorsqu'il agit sur un écart par rapport à un état stationnaire tel que celui qui apparaît dans le crochet de 9.16) sont de l'ordre de Γ^{-1} . Il est donc légitime de remplacer $\tilde{W}(t')$ par $\tilde{W}(t)$ dans (9.16). Comme par ailleurs l'intégrand de (9.16) tend vers zéro pour $t-t'$ de l'ordre de quelques Γ^{-1} [voir 9.9], on peut remplacer t_1 par $-\infty$, si $t-t_1 \gg \Gamma^{-1}$, de sorte que finalement

$$\delta\sigma(t) = \int_{-\infty}^t dt' e^{(t-t')\mathcal{L}_0} [\mathcal{L}_1(t') \tilde{W}(t) \sigma_{st} - (\text{Tr}(\mathcal{L}_1(t') \tilde{W}(t) \sigma_{st})) \sigma_{st}] \tag{9.17}$$

- Calcul de $\dot{\tilde{W}}$ à l'ordre 2 inclus en ϵ . En reportant (9.17) dans (9.13)

(et en négligeant toujours $\delta\sigma$ à l'ordre 0), on obtient finalement [IX-4]

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{W}}(r, p, t) = & \text{Tr}(\mathcal{L}_1(r, p, t) \tilde{W}(r, p, t) \sigma_{st}(r)) + \text{Tr}(\mathcal{L}_2(r, p, t) \tilde{W}(r, p, t) \sigma_{st}(r)) \\ & + \text{Tr} \left\{ \int_{-\infty}^t dt' \mathcal{L}_1(r, p, t') e^{(t-t')\mathcal{L}_0(r)} \left[\mathcal{L}_1(r, p, t') \tilde{W}(r, p, t') \sigma_{st}(r) - \left(\text{Tr}(\mathcal{L}_1(r, p, t') \tilde{W}(r, p, t') \sigma_{st}(r)) \right) \sigma_{st}(r) \right] \right\} \end{aligned} \quad (9.18)$$

où nous avons réintroduit toutes les dépendances en r, p, t

Ainsi, la vitesse de variation $\dot{\tilde{W}}(r, p, t)$ est reliée à $\tilde{W}(r, p, t)$, aux liouvilliens d'ordre 1 et 2, \mathcal{L}_1 et \mathcal{L}_2 , et à la solution stationnaire $\sigma_{st}(r)$ des E.B.O. ordinaires pour un atome immobile en r

④ Retour sur la représentation d'interaction (par rapport à $P^2/2M$)

- Soit ρ_A l'opérateur densité atomique, opérateur vis à vis à la fois des variables internes et externes. En représentation de Wigner, ρ_A devient l'opérateur $\sigma_A(r, p)$ étudié dans ce chapitre et qui ne demeure opérateur que vis à vis des variables internes. En représentation d'interaction par rapport à l'énergie cinétique $P^2/2M$, ρ_A devient $\tilde{\rho}_A$

$$\tilde{\rho}_A(t) = e^{iP^2(t-t_0)/2M\hbar} \rho_A(t) e^{-iP^2(t-t_0)/2M\hbar} \quad (9.19)$$

On voit apparaître l'instant de référence t_0 , que l'on peut choisir arbitrairement, et pour lequel les 2 représentations, habituelle et d'interaction coïncident

$$\tilde{\rho}_A(t_0) = \rho_A(t_0) \quad \text{et par suite} \quad \tilde{\sigma}_A(r, p, t_0) = \sigma_A(r, p, t_0) \quad (9.20)$$

- Nous calculerons toutes les vitesses de variation, en particulier celle de $w(r, p, t)$, en $t=t_0$. Ceci est possible puisque t_0 peut être choisi arbitrairement. De (9.19) et (9.20), on déduit que

$$\dot{\tilde{\rho}}_A|_{t=t_0} = \dot{\rho}_A|_{t=t_0} - \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{P^2}{2M}, \rho_A(t_0) \right] \quad (9.21)$$

et par suite, après un calcul analogue à celui de la page VII-6

$$\dot{\tilde{\sigma}}_A(r, p, t)|_{t=t_0} = \dot{\sigma}_A(r, p, t)|_{t=t_0} + \frac{P}{M} \frac{\partial}{\partial r} \sigma_A(r, p, t_0) \quad (9.22)$$

ce qui donne, par trace sur les variables internes

$$\dot{\tilde{W}}(r, p, t)|_{t=t_0} = \dot{W}(r, p, t)|_{t=t_0} + \frac{P}{M} \frac{\partial}{\partial r} w(r, p, t_0) \quad (9.23)$$

- Il y a un autre avantage à calculer les vitesses de variation en $t=t_0$. On voit sur (9.18) que \mathcal{L}_2 n'apparaît que pris à l'instant t auquel on calcule la vitesse de variation (alors que \mathcal{L}_1 apparaît à la fois en t et en t' avec $t' < t$ - voir la 2^{ème} ligne de 9.18). On pourra donc négliger toutes les corrections en ϵ^2 qui s'annulent en $t=t_0$.

⑤ Expression des liouvilliens \mathcal{L}_1 et \mathcal{L}_2 d'ordre 1 et 2 en ϵ

Structure générale de \mathcal{L}_1 Il y a a priori 3 contributions à \mathcal{L}_1

(i) $\mathcal{L}_1^{\text{spontané}}$, provenant du terme d'ordre 1 dans le développement de $w_{ee}(\vec{r}, \vec{p} + \hbar\omega_0\vec{k}/c)$ en puissances de $\hbar\omega_0\vec{k}/c$ dans (8.41.b)

(ii) $\mathcal{L}_1^{\text{vitesse}}$, provenant du terme d'ordre 1 dans le développement de l'interaction atome laser $\tilde{V}(t)$ en représentation d'interaction (voir 8.45 et ci dessous) en puissances de P/M

(iii) $\mathcal{L}_1^{\text{laser}}$, provenant des termes d'ordre 1 dans le développement de $w_{ab}(r, p \pm \hbar k/2)$ en puissances de $\hbar k$ dans (8.41), ou, ce qui revient au même de $\mathcal{E}^\pm(r \pm u/2)$ en puissances de u dans (8.42). Pour calculer $\mathcal{L}_1^{\text{laser}}$, on fait bien sûr $P=0$ dans 8.45

Calcul de $\mathcal{L}_1^{\text{spontané}}$

Ce terme est proportionnel à $\int d^3k \vec{k} \Phi(\vec{k})$ qui est nul par raison de symétrie. L'émission spontanée se faisant avec des probabilités égales dans 2 directions opposées, $\Phi(\vec{k})$ est une fonction paire de \vec{k} . Donc

$$\mathcal{L}_1^{\text{spontané}} = 0 \quad (9.24)$$

Développement de l'interaction atome-laser en représentation d'interaction

- Repartons de l'expression (8.45) de $\tilde{V}(t)$:

$$\tilde{V}(t) = -E^+(R + \frac{P}{M}(t-t_0))D^+ - E^-(R + \frac{P}{M}(t-t_0))D^- \quad (9.25)$$

Comme R et P sont des opérateurs qui ne commutent pas, le développement de $E^\pm(R + \frac{P}{M}(t-t_0))$ en puissances de P/M n'est pas immédiat. En prenant le développement de Fourier (8.21) de E^\pm , on peut réécrire (9.25) sous la forme

$$\tilde{V}(t) = -\int dk E^+(k) e^{ik[R + \frac{P}{M}(t-t_0)]} D^+ + h.c. \quad (9.26)$$

On peut alors utiliser l'identité de Glauber [voir formule (A-5) page VII-3] pour écrire

$$e^{ik[R + \frac{P}{M}(t-t_0)]} = e^{ikR} e^{ik\frac{P}{M}(t-t_0)} e^{i\frac{\hbar k^2}{2M}(t-t_0)} = e^{ik\frac{P}{M}(t-t_0)} e^{ikR} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2M}(t-t_0)} \quad (9.27)$$

Comme $e^{\pm i\frac{\hbar k^2}{2M}(t-t_0)} = 1 \pm i\frac{\hbar k^2}{2M}(t-t_0) + \dots$ (9.28)

la non commutation de R et P se traduit donc par des corrections de l'ordre de $\hbar k^2(t-t_0)/M$.

Quel est l'ordre de grandeur de $t-t_0$? Les 2 liouvilliens $\mathcal{L}_1(t)$ et $\mathcal{L}_1(t')$ (avec $t' < t$) apparaissant dans (9.18) font intervenir $\tilde{V}(t)$ et $\tilde{V}(t')$. Comme on calcule la vitesse de variation en $t=t_0$, le terme correctif de (9.28), proportionnel à $t-t_0$, n'intervient pas dans $\mathcal{L}_1(t)|_{t=t_0}$. Dans $\mathcal{L}_1(t')$, ce terme correctif est proportionnel à $t'-t_0$ donc à $t'-t$ en $t=t_0$. Comme la présence de $e^{(t-t')\mathcal{L}_0}$ restreint les valeurs de $t-t'$ à des valeurs de l'ordre de Γ^{-1} , $t'-t_0$ est au plus de l'ordre de Γ^{-1} dans $\mathcal{L}_1(t')$, et le terme correctif de (9.28) est de l'ordre de $\hbar k^2/2M\Gamma = E_{\text{excit}}/\hbar\Gamma = \epsilon$. La non commutation de R et P introduit donc dans $\tilde{V}(t)$ une correction en ϵ^2 , qui s'annule en $t=t_0$ et qui peut donc être négligée (voir fin du § 4 précédent).

- Compte tenu du résultat précédent, on peut donc développer (9.25) sans se préoccuper de l'ordre entre R et P , ce qui donne à l'ordre 1 inclus en P/M

$$\tilde{V}(t) = -D^+ E^+(R) - D^- E^-(R) - (t-t_0) \frac{\vec{P}}{M} \cdot \vec{\mathcal{F}}(R) \quad (9.29)$$

où nous avons posé

$$\vec{\mathcal{F}}(R) = D^+(\vec{\nabla} E^+(R)) + D^-(\vec{\nabla} E^-(R)) \quad (9.30)$$

Si l'on remplace dans (9.30) l'opérateur R par r , les opérateurs D^\pm par \mathcal{D}^\pm ou \mathcal{D}^\pm est la valeur moyenne de D^\pm pour un atome immobile en r , calculé à partir des équations de Bloch ordinaires, on reconnaît en (9.30) l'expression de la force radiative moyenne donnée par l'approche semi-classique (voir cours I de cette année et le cours 1982-83). Nous appellerons donc $\vec{\mathcal{F}}(R)$ l'opérateur force radiative pour bien rappeler que R et D^\pm sont des opérateurs

Calcul de $\mathcal{L}_1^{\text{laser}}$

$\mathcal{L}_1^{\text{laser}}$ correspond au terme d'ordre 1 en $\hbar k/\bar{p}$, et 0 en $\hbar v/\Gamma$. On peut donc

négliger le dernier terme de (9.29) pour le calcul de $\mathcal{L}_1^{\text{laser}}$. Le calcul est IX-6
 en fait plus simple en représentation (r, u) . Dans cette représentation, la contribution du commutateur des 2 premiers termes de (9.29) avec $\tilde{\rho}_A$ s'écrit

$$\frac{1}{i\hbar} \left[-D^+ E^+(r + \frac{u}{2}) \tilde{\sigma}_A(r, u) - D^- E^-(r + \frac{u}{2}) \tilde{\sigma}_A(r, u) + \tilde{\sigma}_A(r, u) D^+ E^+(r - \frac{u}{2}) + \tilde{\sigma}_A(r, u) D^- E^-(r - \frac{u}{2}) \right] \quad (9.31)$$

Développons $E^\pm(r \pm \frac{u}{2})$ en puissances de u , et prenons la T.F. par rapport à u . A l'ordre 0, on obtient le 1^{er} commutateur de la 2^{ème} ligne de l'expression (9.2) de \mathcal{L}_0 . A l'ordre 1 en u , on voit apparaître un anticommutateur

$$\frac{1}{i\hbar} \frac{1}{2} \vec{u} \cdot \left\{ -D^+(\vec{\nabla} E^+(r)) - D^-(\vec{\nabla} E^-(r)), \tilde{\sigma}_A(r, u) \right\}_+ \quad (9.32)$$

entre l'opérateur force radiative au point r , $\vec{F}(r)$ [expression (9.30) prise pour $R=r$ et qui ne reste un opérateur que vis à vis des variables internes] et $\tilde{\sigma}_A(r, u)$. En prenant la T.F. de (9.32) par rapport à u , et en utilisant le fait que la multiplication par \vec{u} se transforme en $i\hbar \partial/\partial \vec{p}$, on obtient finalement pour l'expression de $\mathcal{L}_1^{\text{laser}}$

$$\mathcal{L}_1^{\text{laser}}(r, p) \tilde{\sigma}_A(r, p, t) = -\frac{1}{2} \sum_{i=x,y,z} \frac{\partial}{\partial p_i} \left\{ \vec{F}_i(r), \tilde{\sigma}_A(r, p, t) \right\}_+ \quad (9.33)$$

Calcul de $\mathcal{L}_1^{\text{vitesse}}$

La contribution du commutateur du dernier terme de (9.29) avec $\tilde{\rho}_A$ s'écrit en représentation (r, u)

$$-\frac{t-t_0}{i\hbar M} \left[\vec{F}(r + \frac{u}{2}) \cdot \langle r + \frac{u}{2} | \vec{P} \tilde{\rho}_A | r - \frac{u}{2} \rangle - \langle r + \frac{u}{2} | \tilde{\rho}_A \vec{P} | r - \frac{u}{2} \rangle \cdot \vec{F}(r - \frac{u}{2}) \right] \quad (9.34)$$

[On a utilisé le fait que l'ordre entre R et P est sans importance dans le dernier terme de (9.29) pour placer $\vec{F}(R)$ près du bra $\langle r + \frac{u}{2} |$ dans le 1^{er} terme de (9.34), près du ket $| r - \frac{u}{2} \rangle$ dans le 2^{ème}]. Comme (9.34) est déjà d'ordre 1 en $\hbar v/\Gamma$, on peut alors remplacer $\vec{F}(r \pm \frac{u}{2})$ par $\vec{F}(r)$ car les termes d'ordre 1 dans le développement de $\vec{F}(r \pm \frac{u}{2})$ en puissances de u donneraient des corrections en $(\hbar v/\Gamma)(\hbar k/\bar{p})$, c-à-d des termes du second ordre en ϵ , s'annulant en $t=t_0$ et donc négligeables. Il ne reste donc qu'à calculer les éléments de matrice de $\vec{P} \tilde{\rho}_A$ et $\tilde{\rho}_A \vec{P}$, plus précisément les TF de ces éléments de matrice par rapport à u . Il est plus simple de partir de la représentation (p, v) et de prendre la T.F. par rapport à v

$$\langle p + \frac{v}{2} | \vec{P} \tilde{\rho}_A | p - \frac{v}{2} \rangle = (\vec{p} + \frac{v}{2}) \tilde{\sigma}_A(p, v) \quad (9.35)$$

Par T.F. par rapport à v , (9.35) donne $(\vec{p} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{p}}) \tilde{\sigma}_A(r, p)$. On peut montrer que le terme en $\partial/\partial \vec{p}$ introduit des corrections d'ordre supérieur à ϵ (qui s'annulent en $t=t_0$ et sont donc négligeables), si la largeur en v de la fonction de Wigner $w(r, p, t)$ est supérieure à $\epsilon \lambda$ (λ : longueur d'onde lumineuse), ce que nous supposons réalisé. On obtient ainsi finalement

$$\mathcal{L}_1^{\text{vitesse}}(r, p, t) \tilde{\sigma}_A(r, p, t) = -\frac{t-t_0}{i\hbar M} \left[\vec{p} \cdot \vec{F}(r), \tilde{\sigma}_A(r, p, t) \right] \quad (9.36)$$

Structure générale et expression de \mathcal{L}_2

Tous les termes d'ordre 2 en $\hbar v/\Gamma$ (Termes suivants du développement 9.29), et tous les termes "croisés" en $(\hbar v/\Gamma) \times (\hbar k/\bar{p})$, faisant intervenir le dernier terme de (9.29) [ou des termes négligés dans l'établissement de 9.29 et 9.36] sont des termes en ϵ^2 , s'annulant en $t=t_0$, et donc négligeables. Il n'y a donc que 2 termes dans \mathcal{L}_2 qui peuvent donner des contributions non négligeables

(i) $\mathcal{L}_2^{\text{spontané}}$, provenant des d'ordre 2 dans le développement de $\frac{1}{\omega} \vec{E}(\vec{r}, \vec{p} + \hbar \omega_0 \vec{k} / c)$ en puissances de $\hbar \omega_0 \vec{k} / c$ dans (8.41.b). On obtient

$$\mathcal{L}_2^{\text{spontané}}(r, p) \tilde{\sigma}_A(r, p, t) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i, j \\ =x, y, z}} \Gamma \frac{\hbar^2 \omega_0^2}{c^2} \left(\int d^2 \kappa \kappa_i \kappa_j \phi(\vec{\kappa}) \right) \frac{\partial^2}{\partial p_i \partial p_j} \tilde{\sigma}_{ee}(r, p, t) \quad (9.37)$$

(ii) $\mathcal{L}_2^{\text{laser}}$, provenant des termes d'ordre 2 dans le développement de $E^\pm(r \pm \frac{u}{c})$ en puissances de u dans (9.31). Au lieu d'obtenir un anticommutateur comme c'était le cas à l'ordre 1 (voir 9.32), on obtient maintenant un commutateur

$$\mathcal{L}_2^{\text{laser}}(r, p) \tilde{\sigma}_A(r, p, t) = \frac{\hbar}{8i} \sum_{\substack{i, j \\ =x, y, z}} \frac{\partial^2}{\partial p_i \partial p_j} \left[D^+ \left(\frac{\partial^2 E^+}{\partial r_i \partial r_j} \right) + D^- \left(\frac{\partial^2 E^-}{\partial r_i \partial r_j} \right), \tilde{\sigma}_A(r, p, t) \right] \quad (9.38)$$

⑥ Vitesse de variation de la fonction de Wigner à l'ordre 1 en ϵ . Force radiative moyenne

- A l'ordre 1 en ϵ , seul le 1^{er} terme de (9.18) intervient. Comme on calcule la vitesse de variation en $t = t_0$ (voir § 4) et que, d'après (9.36), $\mathcal{L}_1^{\text{vitesse}}$ s'annule en $t = t_0$, seul $\mathcal{L}_1^{\text{laser}}$ intervient [rappelons que $\mathcal{L}_1^{\text{spontané}}$ est nul]

- Reportons donc (9.33) dans le 1^{er} terme de (9.18). Il vient

$$\text{Tr}(\mathcal{L}_1(r, p, t) \tilde{w}(r, p, t) \sigma_{st}(r)) \Big|_{t=t_0} = -\frac{1}{2} \sum_{i=x, y, z} \frac{\partial}{\partial p_i} \text{Tr} \{ \mathcal{F}_i(r), \tilde{w}(r, p, t_0) \sigma_{st}(r) \} \quad (9.39)$$

c-à-d, par suite de l'invariance d'une trace dans une permutation circulaire,

$$-\sum_i \phi_i(r) \frac{\partial}{\partial p_i} \tilde{w}(r, p, t) \quad (9.40)$$

où
$$\phi_i(r) = \text{Tr}(\sigma_{st}(r) \mathcal{F}_i(r)) = \mathcal{D}^+(\nabla_i E^+) + \mathcal{D}^-(\nabla_i E^-) \quad (9.41)$$

avec
$$\mathcal{D}^\pm = \text{Tr}(\sigma_{st}(r) D^\pm) \quad (9.42)$$

$\phi_i(r)$ n'est autre que la force radiative moyenne stationnaire, calculée à partir de la solution stationnaire $\sigma_{st}(r)$ des E.B.O. ordinaires pour un atome immobile en r . En regroupant (9.40) avec (9.23), et en écrivant t au lieu de t_0 (ce qui est possible puisque t_0 peut être choisi arbitrairement), on obtient à l'ordre 1 inclus en ϵ

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=x, y, z} \left(\frac{p_i}{m} \frac{\partial}{\partial r_i} + \phi_i(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial p_i} \right) \right] w(\vec{r}, \vec{p}, t) = 0 \quad (9.43)$$

qui rappelle tout à fait l'équation d'évolution d'une distribution classique de particules soumises à la force $\vec{F}(\vec{r})$. La théorie semi-classique des forces radiatives, présentée dans le cours 1982-83, est ainsi justifiée rigoureusement à partir d'une théorie entièrement quantique.

⑦ Vitesse de variation de la fonction de Wigner à l'ordre 2 en ϵ : Tenseurs de diffusion et de friction.

a) Contribution de \mathcal{L}_2 : Tenseur de diffusion D_{ij}^{vide}

- Il s'agit du dernier terme de la 1^{ère} ligne de (9.18), $\text{Tr}(\mathcal{L}_2 \tilde{w} \sigma_{st})$.
- Comme $\mathcal{L}_2^{\text{laser}}$ est un commutateur [voir 9.38], et que la trace d'un commutateur est nulle, la contribution de $\mathcal{L}_2^{\text{laser}}$ est nulle.
- De l'expression (9.37) de $\mathcal{L}_2^{\text{spontané}}$ on déduit

$$\text{Tr}(\mathcal{L}_2^{\text{spontané}} \tilde{W}(r, p, t) \sigma_{st}(r))_{t=t_0} = \sum_{i,j=2,4,3} D_{ij}^{\text{vide}} \frac{\partial^2}{\partial p_i \partial p_j} \tilde{W}(r, p, t_0) \quad (9.44) \quad |IX-8$$

où

$$D_{ij}^{\text{vide}} = \frac{1}{2} \Gamma \langle e | \sigma_{st}(r) | e \rangle \frac{\hbar^2 \omega_0^2}{c^2} \int d^2 k \kappa_i \kappa_j \Phi(\vec{k}) \quad (9.45)$$

L'interprétation de D_{ij}^{vide} est très simple : $\Gamma \langle e | \sigma_{st}(r) | e \rangle$ est le nombre de photons spontanés émis par unité de temps en régime stationnaire par un atome immobile en r . $\frac{\hbar^2 \omega_0^2}{c^2} \int d^2 k \kappa_i \kappa_j \Phi(\vec{k})$ est la valeur moyenne du produit des composantes i et j de l'impulsion d'un tel photon spontané, valeur moyenne déterminée par le diagramme de rayonnement $\Phi(\vec{k})$. On retrouve le résultat du cours IV (voir 9.24).

b) Structure de la contribution de \mathcal{L}_1 à l'ordre 2 en ϵ

- Il s'agit de la 2^{ème} ligne de (9.18).
- Comme on calcule \tilde{W} en $t=t_0$, il faut faire $t=t_0$. Comme $\mathcal{L}_1^{\text{vitée}}(t)$ s'annule en $t=t_0$ (voir 9.36), $\mathcal{L}_1^{\text{vitée}}$ ne peut apparaître que dans $\mathcal{L}_1(t')$. D'autre part, comme $\mathcal{L}_1^{\text{vitée}}$ est un commutateur, il ne contribue pas à $\text{Tr}(\mathcal{L}_1(t) \tilde{W}(t) \sigma_{st})$, c.-à-d. au dernier terme de (9.18).
- La 2^{ème} ligne de (9.18) se réduit donc à 2 contributions, qu'on peut écrire, en posant $\tau = t - t'$ ($= t_0 - t'$ pour $t=t_0$)

$$\int_0^\infty d\tau \left[\text{Tr} \mathcal{L}_1^{\text{laser}} e^{\mathcal{L}_0 \tau} \mathcal{L}_1^{\text{laser}} \tilde{W} \sigma_{st} \right] - \left(\text{Tr} \mathcal{L}_1^{\text{laser}} e^{\mathcal{L}_0 \tau} \sigma_{st} \right) \left(\text{Tr} \mathcal{L}_1^{\text{vitée}} \tilde{W} \sigma_{st} \right) + \int_0^\infty d\tau \text{Tr} \left(\mathcal{L}_1^{\text{laser}} e^{\mathcal{L}_0 \tau} \mathcal{L}_1^{\text{vitée}}(\tau) \tilde{W} \sigma_{st} \right) \quad (9.46)$$

La 1^{ère} ligne fait intervenir 2 fois $\mathcal{L}_1^{\text{laser}}$ (qui ne dépend pas du temps) alors que la 2^{ème} fait intervenir 1 fois $\mathcal{L}_1^{\text{laser}}$ et 1 fois $\mathcal{L}_1^{\text{vitée}}$ (qui dépend de τ)

c) Brefs rappels sur l'espace de Liouville (voir référence 2)

- Notations de Dirac pour les vecteurs de \mathcal{E}_L (opérateurs de \mathcal{E}_H)

$$| \sigma \rangle \quad \langle \sigma |$$

- Produit scalaire dans \mathcal{E}_L (qui donne à \mathcal{E}_L la structure d'un espace de Hilbert)

$$\langle \langle A | B \rangle \rangle = \text{Tr} A^+ B \quad (9.47)$$

- Adjoint \mathcal{L}^+ d'un opérateur \mathcal{L} de \mathcal{E}_L

$$\langle \langle A | \mathcal{L} | B \rangle \rangle = \langle \langle B | \mathcal{L}^+ | A \rangle \rangle^* \quad (9.48)$$

- Valeur moyenne d'une observable $A = A^+$ dans le point de vue de Schrödinger

Si σ évolue conformément à $\frac{d\sigma}{dt} = \mathcal{L}\sigma$, on a

$$| \sigma(t) \rangle \rangle = e^{\mathcal{L}t} | \sigma \rangle \rangle \quad (9.49)$$

$$\langle A \rangle(t) = \text{Tr}(A \sigma(t)) = \langle \langle A | \sigma(t) \rangle \rangle = \langle \langle A | e^{\mathcal{L}t} | \sigma \rangle \rangle \quad (9.50)$$

Attention : \mathcal{L} ne correspond pas forcément à une évolution "hamiltonienne". Par exemple, \mathcal{L}_0 étudié au § 2, contient des termes de relaxation.

- Evolution des observables dans le point de vue de Heisenberg

$$\langle A \rangle(t) = \underbrace{\text{Tr}(A \sigma(t))}_{\text{Schrödinger}} = \underbrace{\text{Tr}(A^H(t) \sigma)}_{\text{Heisenberg}}, \text{ réel si } A = A^+ \quad (9.51)$$

$$\hookrightarrow \langle A \rangle(t) = \langle \langle A | e^{\mathcal{L}t} | \sigma \rangle \rangle = \langle \langle \sigma | e^{\mathcal{L}^+ t} | A \rangle \rangle = \langle \langle \sigma | A^H(t) \rangle \rangle \quad (9.52)$$

$$\text{avec } | A^H(t) \rangle \rangle = e^{\mathcal{L}^+ t} | A \rangle \rangle \quad (9.53)$$

Attention : si \mathcal{L} ne correspond pas à une évolution hamiltonienne, $A^H(t)$, avec $t \neq 0$, ne satisfait pas aux relations de commutation fondamentales des A .

- Fonctions de corrélation

$$\langle A^H(0) B^H(t) \rangle = \text{Tr}(\sigma A^H(0) B^H(t)) = \langle\langle A | \sigma | e^{\mathcal{L}^+ t} | B \rangle\rangle = \langle\langle B | e^{\mathcal{L} t} | A \sigma \rangle\rangle^* \quad (9.54)$$

Remarque : Quand \mathcal{L} contient des termes de relaxation, l'expression (9.54) n'est en toute rigueur pas correcte. Il faut, en principe, travailler dans l'espace des états du système global, atome + réservoir responsable de la relaxation, espace où l'évolution rederrait hamiltonienne. Les observables $A^H(0)$ et $B^H(t)$ de (9.54) doivent être alors considérées comme des observables de Heisenberg dans l'espace des états du système global, et la moyenne, sur l'état du réservoir, du produit de ces 2 observables doit être ensuite évaluée. Le "théorème de régression quantique" permet cependant de montrer qu'on commet une erreur négligeable (de l'ordre de τ_c / τ_r en valeur relative), en travaillant dans l'espace des états du seul atome, avec un liouvillien \mathcal{L} qui ne correspond plus à une évolution hamiltonienne. Il faut alors prendre $t > 0$ dans (9.54), développer B sur les états propres $|V_i\rangle\rangle$ de \mathcal{L}^+ , de valeurs propres λ_i , ce qui permet d'exprimer $|B^H(t)\rangle\rangle = e^{\mathcal{L}^+ t} |B\rangle\rangle$ comme une somme de $|V_i\rangle\rangle e^{\lambda_i t}$. Il ne reste plus enfin qu'à calculer la valeur moyenne dans l'état atomique σ de produits d'opérateurs A et V_i pris tous deux en $t=0$. Une transformation de Laplace permet souvent de simplifier considérablement un tel calcul.

d) Tenseur de diffusion D_{ij}^{laser}

Calcul de $\text{Tr}(\mathcal{L}_1^{\text{laser}} e^{\mathcal{L}_0 t} \mathcal{L}_1^{\text{laser}} \tilde{w} \sigma_{st})$ (1^{er} terme de 9.46)

- D'après (9.33), et comme, seul, \tilde{w} dépend de p dans $\tilde{w} \sigma_{st}$, on a

$$\mathcal{L}_1^{\text{laser}} \tilde{w} \sigma_{st} = -\frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial \tilde{w}}{\partial p_i} \{F_i, \sigma_{st}\}_+ \quad (9.55)$$

- On en déduit, en utilisant l'invariance d'une trace par permutation

$$\text{Tr}(\mathcal{L}_1^{\text{laser}} e^{\mathcal{L}_0 t} \mathcal{L}_1^{\text{laser}} \tilde{w} \sigma_{st}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 \tilde{w}}{\partial p_i \partial p_j} \text{Tr} [F_j (e^{\mathcal{L}_0 t} F_i \sigma_{st}) + F_j (e^{\mathcal{L}_0 t} \sigma_{st} F_i)] \quad (9.56)$$

r et sous entendu dans $\mathcal{L}_0, \sigma_{st}$ et les composantes i et j de la force \vec{F}

- $\text{Tr}(F_j (e^{\mathcal{L}_0 t} F_i \sigma_{st})) = \langle\langle F_j | e^{\mathcal{L}_0 t} | F_i \sigma_{st} \rangle\rangle = \langle\langle F_i \sigma_{st} | e^{\mathcal{L}_0^+ t} | F_j \rangle\rangle^* =$

$$= \text{Tr}(\sigma_{st} F_i^H(0) F_j^H(t))^* = \langle F_j^H(t) F_i^H(0) \rangle_{st}^* \quad (9.57)$$

où l'indice st signifie que la fonction de corrélation est évaluée dans l'état σ_{st}

- De même

$$\text{Tr}(F_j (e^{\mathcal{L}_0 t} \sigma_{st} F_i)) = \langle\langle F_j | e^{\mathcal{L}_0 t} | \sigma_{st} F_i \rangle\rangle = \langle\langle \sigma_{st} F_i | e^{\mathcal{L}_0^+ t} | F_j \rangle\rangle^* =$$

$$\text{Tr}(F_i^H(0) \sigma_{st} F_j^H(t))^* = \text{Tr}(\sigma_{st} F_j^H(t) F_i^H(0))^* = \langle F_j^H(t) F_i^H(0) \rangle_{st}^* \quad (9.58)$$

- Finalement, en regroupant tout

$$\text{Tr}(\mathcal{L}_1^{\text{laser}} e^{\mathcal{L}_0 t} \mathcal{L}_1^{\text{laser}} \tilde{w} \sigma_{st}) = \sum_{i,j} \frac{1}{2} \langle F_i^H(0) F_j^H(t) + F_j^H(t) F_i^H(0) \rangle_{st} \frac{\partial^2 \tilde{w}}{\partial p_i \partial p_j} \quad (9.59)$$

Comme la fonction de corrélation est symétrique, et donc réelle, on a enlevé le signe *

Calcul de $\text{Tr}(\mathcal{L}_1^{\text{laser}} e^{\mathcal{L}_0 t} \sigma_{st})$ (2^{em} terme de 9.46)

- $(\text{Tr} \mathcal{L}_1^{\text{laser}} \tilde{w} \sigma_{st}) = -\frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial \tilde{w}}{\partial p_i} \text{Tr} \{F_i, \sigma_{st}\}_+ = -\sum_i \frac{\partial \tilde{w}}{\partial p_i} \langle F_i \rangle_{st} \quad (9.60)$

- $(\text{Tr} \mathcal{L}_1^{\text{laser}} e^{\mathcal{L}_0 t} \sigma_{st}) (\text{Tr} \mathcal{L}_1^{\text{laser}} \tilde{w} \sigma_{st}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 \tilde{w}}{\partial p_i \partial p_j} \langle F_i \rangle_{st} \text{Tr} \{F_j, e^{\mathcal{L}_0 t} \sigma_{st}\}_+ \quad (9.61)$

Or, $\frac{1}{2} \text{Tr} \{F_j, e^{\mathcal{L}_0 t} \sigma_{st}\}_+ = \langle\langle F_j | e^{\mathcal{L}_0 t} | \sigma_{st} \rangle\rangle = \langle\langle F_j | \sigma_{st} \rangle\rangle = \langle F_j \rangle_{st} \quad (9.62)$

On a utilisé le fait que $\mathcal{L}_0 | \sigma_{st} \rangle\rangle = 0$ (voir 9.7) pour remplacer $e^{\mathcal{L}_0 t}$ par 1

- Finalement, le produit des 2 traces vaut

$$(\text{Tr} \mathcal{L}_1^{\text{laser}} e^{\mathcal{L}_0 \tau} \sigma_{st}) (\text{Tr} \mathcal{L}_1^{\text{laser}} \tilde{w} \sigma_{st}) = \sum_{ij} \frac{\partial^2 \tilde{w}}{\partial p_i \partial p_j} \langle \mathcal{F}_i \rangle_{st} \langle \mathcal{F}_j \rangle_{st} \quad (9.63)$$

- En regroupant (9.59) et (9.63), on obtient pour la 1^{ère} ligne de (9.46) :

$$\sum_{ij} D_{ij}^{\text{laser}} \frac{\partial^2}{\partial p_i \partial p_j} \tilde{w} \quad (9.64)$$

où

$$D_{ij}^{\text{laser}} = \int_0^\infty d\tau \left[\frac{1}{2} \langle \mathcal{F}_i^H(0) \mathcal{F}_j^H(\tau) + \mathcal{F}_j^H(\tau) \mathcal{F}_i^H(0) \rangle_{st} - \langle \mathcal{F}_i \rangle_{st} \langle \mathcal{F}_j \rangle_{st} \right] \quad (9.65)$$

est l'intégrale de 0 à ∞ de la fonction de corrélation symétrique des parties fluctuantes de \mathcal{F}_i et \mathcal{F}_j .

Comparaison avec l'équation de Langevin classique [cours V § 4C]

A partir de $\overline{F(0)F(\tau)} = 2D \delta(\tau)$ et du caractère pair de $D(\tau)$, on peut écrire

$$D = \int_0^\infty d\tau \overline{F(0)F(\tau)} \quad (9.66)$$

L'équation (9.65) est la généralisation quantique de (9.66) [voir aussi (3)]

e) Tenseur de friction γ_{ij}

Le calcul de la 2^{ème} ligne de (9.46) se fait de manière tout à fait identique à celui du 1^{er} terme de la 1^{ère} ligne. La seule différence est qu'on a $\mathcal{L}_1^{\text{laser}}$ et $\mathcal{L}_1^{\text{vib}}$ au lieu de 2 fois $\mathcal{L}_1^{\text{laser}}$. Compte tenu de (9.33), on aura une seule dérivée partielle par rapport à p portant sur une fonction linéaire de p . Nous ne donnerons pas les détails de calculs, mais seulement le résultat

$$\sum_{ij} \frac{\partial}{\partial p_i} [\gamma_{ij} p_j \tilde{w}] \quad (9.67)$$

où

$$\gamma_{ij} = -\frac{i}{\hbar M} \int_0^\infty d\tau \langle [\mathcal{F}_i^H(0), \mathcal{F}_j^H(\tau)] \rangle_{st} \tau \quad (9.68)$$

Interprétation : terme de friction lié à la force linéaire en v . Le point important est que le tenseur de friction a une expression explicite en termes de fonctions de corrélation de \mathcal{F} .

⑧ Récapitulation : Equations de Fokker-Planck pour w

En ajoutant à (9.43) les termes obtenus à l'ordre 2 en ϵ , à savoir (9.44), (9.64) et (9.67), on obtient finalement (comme $w = \tilde{w}$ pour $t = t_0$)

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{p_i}{M} \frac{\partial}{\partial r_i} + \Phi_i(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial p_i} \right) \right] w(\vec{r}, \vec{p}, t) = \sum_{ij} \gamma_{ij}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial p_i} [p_j w(\vec{r}, \vec{p}, t)] + \sum_{ij} D_{ij}(\vec{r}) \frac{\partial^2}{\partial p_i \partial p_j} w(\vec{r}, \vec{p}, t) \quad (9.69)$$

avec $D_{ij} = D_{ij}^{\text{vide}} + D_{ij}^{\text{laser}} \quad (9.70)$

D_{ij}^{vide} , D_{ij}^{laser} et γ_{ij} étant donnés en (9.45), (9.65) et (9.68)

On peut enfin faire passer le terme de friction au 1^{er} membre et le regrouper avec le terme en Φ_i pour faire apparaître la force totale de composante

$$\Phi_i(\vec{r}) - \sum_j \gamma_{ij}(\vec{r}) p_j \quad (9.71)$$

Références

- (1) J. DALIBARD, à paraître.
- (2) C. COHEN-TANNOUDJI, Cours au Collège de France 1975-76 - cours VIII
- (3) J.P. GORDON, A. ASHKIN Phys. Rev. A 21, 1606 (1980)

Buts de ce chapitre

- Etudier la trace du tenseur de diffusion D_{ij} dont l'expression a été établie dans le cours antérieur.
- Interpréter physiquement les divers termes apparaissant dans cette trace, et analyser leur comportement à haute intensité.
- Interpréter la valeur moyenne et les fluctuations des forces dipolaires en termes d'atome habillé par les photons laser.

A - Etude du coefficient de diffusion

① Calcul de la trace du tenseur de diffusion

On associe au tenseur de diffusion D_{ij} introduit dans le cours IX (voir 9.70, 9.45 et 9.65), un nombre D qui est sa trace

$$D = \sum_{i=1,2,3} D_{ii} \quad (10.1)$$

et que nous appellerons le coefficient de diffusion. C'est D qui apparaît dans l'expression de la température limite pouvant être atteinte par refroidissement radiatif et dans l'expression de l'énergie résiduelle d'une particule piégée dans un puits optique.

a) Les 2 origines du coefficient de diffusion

- (i) Termes d'émission spontanée dans les E.B.O. généralisées, plus précisément dans l'équation donnant $\dot{w}_{gg}(r, p)$, et provenant de l'interaction H_{AR} entre l'atome et le champ du vide (voir 9.45)

$$D^{\text{vide}} = \sum_i D_{ii}^{\text{vide}} \quad (10.2)$$

- (ii) Termes d'absorption et d'émission induite des E.B.O. généralisées provenant de l'interaction $V(t)$ entre l'atome et le laser (voir 9.55)

$$D^{\text{laser}} = \sum_i D_{ii}^{\text{laser}} \quad (10.3)$$

b) Rappel de notations (voir aussi cours I)

- Onde laser $E_0(\vec{r}) \cos[\omega t + \vec{k} \cdot \vec{r}]$, d'amplitude E_0 et de phase dépendant de \vec{r}

$$E^{\pm}(\vec{r}) = \frac{1}{2} E_0(\vec{r}) e^{\mp i\varphi(\vec{r})} \quad (10.4)$$

- $\psi_{st}(\vec{r})$: Solution stationnaire des E.B.O. ordinaires pour un atome immobile en \vec{r}

- Fréquence de Rabi $\omega_1(\vec{r})$ pour un atome en \vec{r}

$$\omega_1(\vec{r}) = -d E_0(\vec{r}) / \hbar \quad d = \langle e | D | g \rangle \quad (10.5)$$

- Paramètre de saturation $s(\vec{r})$ pour un atome en \vec{r}

$$s(\vec{r}) = \frac{[\omega_1(\vec{r})]^2 / 2}{s^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad s = \omega - \omega_0 \quad (10.6)$$

- Force radiative $\vec{F}(\vec{r})$ en \vec{r} (opérateur vis à vis des variables internes)

$$\vec{F}(\vec{r}) = D^+ (\vec{\nabla} E^+(\vec{r})) + D^- (\vec{\nabla} E^-(\vec{r})) \quad (10.7)$$

Termes proportionnels à $\vec{\nabla} \varphi(\vec{r})$: pression de radiation

Termes proportionnels à $\vec{\nabla} E_0(\vec{r})$, c.à.d à $\vec{\nabla} \omega_1(\vec{r})$: forces dipolaires

c) Calcul de D^{vide}

[X-2]

- D'après (9.45), et en posant $k_0 = \omega_0/c$, on obtient pour (10.2)

$$D^{vide} = \frac{1}{2} \Gamma \sigma_{ee}^{st} \hbar^2 k_0^2 \int d^2\kappa \left(\sum_i \kappa_i^2 \right) \phi(\vec{\kappa}) = \frac{1}{2} \Gamma \sigma_{ee}^{st} \hbar^2 k_0^2 \quad (10.8)$$

On a utilisé $\sum_i \kappa_i^2 = 1$ et la normalisation (8.35) de ϕ

- Par ailleurs, la population stationnaire de l'état excité, σ_{ee}^{st} , se calcule aisément à partir des E.B.O. ordinaires (voir cours I) et vaut

$$\sigma_{ee}^{st} = \frac{1}{2} \frac{s}{1+s} \quad (10.9)$$

où s est le paramètre de saturation défini en (10.6). Finalement,

$$D^{vide} = \hbar^2 k_0^2 \Gamma \frac{s}{4(1+s)} \quad (10.10)$$

d) Résultats du calcul de D^{laser}

- D'après (9.65), D_{ij}^{laser} est la fonction de corrélation symétrique des parties fluctuantes des composantes i et j de la force radiative $\vec{F}(\vec{r})$ définie en (10.7), pour un atome immobile en \vec{r} et dont l'état interne a atteint un régime d'équilibre stationnaire $\sigma_{st}(\vec{r})$. Comme les gradients $\vec{\nabla} E^\pm$ sont des grandeurs classiques bien définies, le calcul de D_{ij} se ramène au calcul des fonctions de corrélation stationnaires de l'opérateur dipôle D^\pm pour un atome immobile en \vec{r} .

- Le principe du calcul de telles fonctions de corrélation atomiques à partir des E.B.O. ordinaires et du théorème de régression quantique est maintenant bien établi (des calculs analogues apparaissent dans la théorie de la fluorescence de résonance), et nous donnerons ici seulement le résultat du calcul de D^{laser} [le calcul détaillé de D^{laser} utilisant les transformées de Laplace des E.B.O. ordinaires peut être trouvé dans la référence (1). Voir aussi (2)]. Comme dans l'expression (9.65) de D_{ij}^{laser} apparaissent 2 composantes de \vec{F} et par suite, d'après (10.7), un produit de 2 gradients $\vec{\nabla} E^\pm$, il y aura dans D^{laser} un terme en $(\vec{\nabla}\varphi)^2$, un terme en $(\vec{\nabla}\omega_1)^2$ et un terme en $(\vec{\nabla}\varphi) \cdot (\vec{\nabla}\omega_1)$. En regroupant le résultat obtenu pour D^{laser} avec (10.10), on obtient finalement

$$\begin{aligned} D = D^{vide} + D^{laser} &= \hbar^2 k_0^2 \Gamma \frac{s}{4(1+s)} + \\ &+ \hbar^2 (\vec{\nabla}\varphi)^2 \Gamma \frac{s}{4(1+s)^3} \left\{ 1 + \left[3 - \frac{\Gamma^2}{\delta^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \right] s + s^2 \right\} \\ &+ \hbar^2 \left(\frac{\vec{\nabla}\omega_1}{\omega_1} \right)^2 \Gamma \frac{s}{4(1+s)^3} \left\{ 1 + \left[\frac{\Gamma^2}{\delta^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} - 1 \right] s + 3s^2 + \frac{\Gamma^2 + 4\delta^2}{\Gamma^2} s^3 \right\} \\ &- \hbar^2 \left(\frac{\vec{\nabla}\omega_1}{\omega_1} \right) \cdot (\vec{\nabla}\varphi) \delta \frac{s^2}{(1+s)^3} \left\{ \frac{\Gamma^2}{\delta^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} + s \right\} \end{aligned} \quad (10.11)$$

② Fluctuations liés aux photons émis spontanément

a) Interprétation physique

- Ces fluctuations sont décrites par le coefficient de diffusion D^{vide} calculé en (10.8) et (10.10) et figurant sur la 1^{ère} ligne de (10.11)

- Nous avons déjà donné dans le cours IV l'image de la marche au hasard de l'impulsion atomique dans l'espace des impulsions, due au caractère aléatoire de la direction d'émission des photons spontanés

Dans une marche au hasard, les carrés des marches élémentaires s'ajoutent pour déterminer la variance de la variable aléatoire. Ici, comme on calcule la trace de D_{ij}^{vide} , la somme des carrés des composantes de la marche élémentaire vaut simplement $\hbar^2 k_0^2$. L'accroissement de la variance de l'impulsion atomique au cours de δt vaut donc

$$\overline{(\delta \vec{p})^2} - (\overline{\delta \vec{p}})^2 = 2 D^{vide} \delta t = \hbar^2 k_0^2 \times \text{Nombre moyen de pas pendant } \delta t = \hbar^2 k_0^2 \times \text{Nombre moyen de photons émis spontanément pendant } \delta t = \hbar^2 k_0^2 \Gamma(\sigma_{ee})_{st} \delta t \quad (10.12)$$

On retrouve ainsi exactement l'expression (10.8) de D^{vide}

b) Comportement aux intensités élevées

- Comme une population ne peut jamais être supérieure à 1, il apparaît sur (10.8) que D^{vide} est borné supérieurement par $\hbar^2 k^2 \Gamma / 2$
- En fait, on voit sur (10.9), qu'aux intensités élevées ($\delta \rightarrow \infty$) σ_{ee}^{st} tend vers 1/2 par valeurs inférieures. Donc

$$D^{vide} \leq \hbar^2 k^2 \frac{\Gamma}{4} \quad (10.13)$$

et s'approche de cette valeur limite dès que la transition est saturée.

③ Fluctuations de la pression de radiation (Terme en $(\vec{\nabla} \varphi)^2$)

a) Interprétation physique

- Ces fluctuations sont décrites par la contribution au coefficient de diffusion de la 2^{ème} ligne de (10.11), qui ne fait intervenir que le gradient de phase $\vec{\nabla} \varphi$ (comme la pression de radiation)
- Prenons le cas simple d'une onde plane lumineuse, de vecteur d'onde \vec{k} . On a alors $\vec{\nabla} \varphi = -\vec{k}$. En réécrivant le crochet de la 2^{ème} ligne de (10.11) sous la forme $(1+\delta)^2 (1+\varphi)$ [où φ est donné plus loin en (10.15)], on peut alors mettre la 2^{ème} ligne de (10.11) sous la forme

$$\frac{1}{2} \hbar^2 k^2 \Gamma \frac{1}{2} \delta(1+\delta) (1+\varphi) = \frac{1}{2} \hbar^2 k^2 \Gamma \sigma_{ee}^{st} (1+\varphi) \quad (10.14)$$

avec

$$\varphi = \frac{\frac{\omega_1^2}{2} (\delta^2 - \frac{3\Gamma^2}{4})}{[\frac{\omega_1^2}{2} + \delta^2 + \frac{\Gamma^2}{4}]^2} \quad (10.15)$$

On a utilisé (10.9) pour faire apparaître σ_{ee}^{st} .

Notons enfin que, pour une onde plane $e^{i\vec{k}\vec{r}}$, le terme en $(\vec{\nabla} \varphi)^2$ de (10.11) n'apparaît que dans un seul élément diagonal D_{33}^{laser} du tenseur de diffusion, si l'on prend l'axe z parallèle à \vec{k} , ce qui suggère que (10.14) est lié aux fluctuations de l'impulsion absorbée

- Effectivement, pendant le temps δt , l'atome absorbe N photons et acquiert donc l'impulsion

$$\delta \vec{p} = N \hbar \vec{k} \quad (10.16)$$

N est une variable aléatoire, donc $\delta \vec{p}$ aussi. La variance de $\delta \vec{p}$

vaut
$$\overline{(\delta \vec{p})^2} - (\overline{\delta \vec{p}})^2 = \hbar^2 k^2 (\overline{N^2} - \bar{N}^2) = \hbar^2 k^2 \Delta N^2 \quad (10.17)$$

où ΔN est la variance de N . On peut encore écrire

$$\Delta N^2 = \frac{\Delta N^2}{\bar{N}} \bar{N} \quad (10.18)$$

où

$$\begin{aligned} \bar{N} &= \text{Nombre moyen de photons absorbés pendant } \delta t \\ &= \text{Nombre moyen de photons émis spontanément pendant } \delta t \\ &= \Gamma(\sigma_{ee}^{st}) \delta t \end{aligned} \quad (10.19)$$

Si le nombre de photons N absorbés pendant δt suivait une loi de Poisson, on aurait $\Delta N^2 = \bar{N}$. La théorie de la résonance de fluorescence montre que ce n'est pas le cas et qu'on a plutôt

$$\Delta N^2 = \bar{N}(1 + \varphi) \quad (10.20)$$

où précisément φ est un facteur sans dimensions qui coïncide avec l'expression (10.15) donnée plus haut [voir références (3) à (5)]. Si $\varphi > 0$ on a une statistique superpoissonnienne, si $\varphi < 0$, une statistique subpoissonnienne [qui a été récemment observée (6)].

En reportant (10.20) et (10.19) dans (10.17), on obtient finalement

$$\overline{(\delta \vec{p})^2} - (\overline{\delta \vec{p}})^2 = \hbar^2 k^2 (1 + \varphi) \Gamma \sigma_{ee}^{st} \delta t \quad (10.21)$$

qui peut encore s'écrire $2D \delta t$ où D coïncide avec (10.14)

- Ainsi, le coefficient de diffusion (10.14) représente la contribution à la diffusion de l'impulsion atomique, des fluctuations de l'impulsion absorbée par l'atome, liées elles mêmes aux fluctuations du nombre de photons absorbés pendant un intervalle de temps donné.

La discussion qualitative du cours IV, limitée aux faibles intensités ($\omega \ll \Gamma$), auquel cas $\varphi \approx 0$, est donc justifiée et étendue à des valeurs arbitraires de l'intensité.

b) Comportement aux intensités élevées

Ici aussi, comme σ_{ee}^{st} est borné par 1 et que,

$$-\frac{3}{4} \leq \varphi \leq \frac{1}{4} \quad (10.22)$$

le coefficient de diffusion (10.14) ne peut dépasser des valeurs de l'ordre de $\hbar^2 k^2 \Gamma$.

④ Fluctuations des forces dipolaires (Terme en $(\vec{\nabla} \omega_1)^2$)

Leur contribution au coefficient de diffusion est représentée par la 3^{ème} ligne de (10.11), qui ne fait intervenir que le gradient d'amplitude $\vec{\nabla} \omega_1$ (comme les forces dipolaires).

L'origine physique de ces fluctuations sera analysée dans le § B suivant. Nous nous contenterons ici de discuter du comportement de ce terme aux hautes intensités, et les conséquences de ce comportement pour la stabilité des pièges radiatifs.

a) Comportement aux intensités élevées

- Les forces dipolaires sont surtout intéressantes par les puits de potentiel optique qui leur sont associés. Nous avons étudié dans le cours III les valeurs optimales des paramètres permettant de réaliser le puits le plus profond pour un faisceau gaussien de

B-Interprétation des forces dipolaires et de leurs fluctuations | X-6

en termes d'atome habillé par les photons laser

① Introduction

- la valeur moyenne de l'expression (10.7) de la force $\vec{F}(\vec{r})$ dans l'état stationnaire interne $\psi_{st}(\vec{r})$, donne la force radiative moyenne stationnaire pour un atome initialement immobile en \vec{r} , et dont les termes proportionnels à $\vec{\nabla}\varphi$ et $\vec{\nabla}\omega$, sont respectivement la pression de radiation moyenne \vec{F}_1 , et la force dipolaire moyenne \vec{F}_2 , étudiés dans le cours 1982-83 [voir aussi cours I, II, III de cette année], et dont les expressions sont :

$$\vec{F}_1 = -\hbar(\vec{\nabla}\varphi)\frac{\Gamma}{2} \frac{\omega_1^2/2}{\delta^2 + \frac{\omega_1^2}{2} + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad \vec{F}_2 = -\frac{\hbar\delta}{4} \frac{\vec{\nabla}\omega_1^2}{\delta^2 + \frac{\omega_1^2}{2} + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (10.21)$$

- A la limite $\Gamma \rightarrow 0$, \vec{F}_1 s'annule, \vec{F}_2 non. Cette propriété suggère qu'il doit être possible de rechercher une interprétation physique simple de la force dipolaire (valeur moyenne et fluctuations) dans le formalisme de l'atome habillé qui est bien adapté à la limite $\omega_1 \gg \Gamma$

② Brefs rappels sur l'atome habillé (3)(8)

- Dans ce § 2, nous étudions le diagramme d'énergie de l'atome habillé en un point \vec{r} bien défini de l'espace. Dans le § 3 suivant, nous nous intéresserons à la variation spatiale des énergies et des états propres de l'atome habillé.

- Commençons par négliger l'émission spontanée. L'atome et les photons du mode laser forment alors un système isolé, qu'on appelle l'atome habillé par les photons laser.

En l'absence de couplage atome-photon laser, les états non-perturbés du système, repérés par 2 nombres quantiques, e ou g pour l'atome, n pour le nombre de photons laser, se groupent en multiplicités E_n , de dimension 2, bien séparées les unes des autres. Par exemple, la partie gauche de la figure 1 représente 2 de ces multiplicités, E_n formée des 2 états $|e, n\rangle$ et $|g, n+1\rangle$, qui sont quasi-dégénérés (leur écart en énergie vaut $-\hbar\delta = -\hbar(\omega - \omega_0)$), E_{n-1} formée des 2 états $|e, n-1\rangle$ et $|g, n\rangle$, située à une distance $\hbar\omega$ en dessous de E_n .

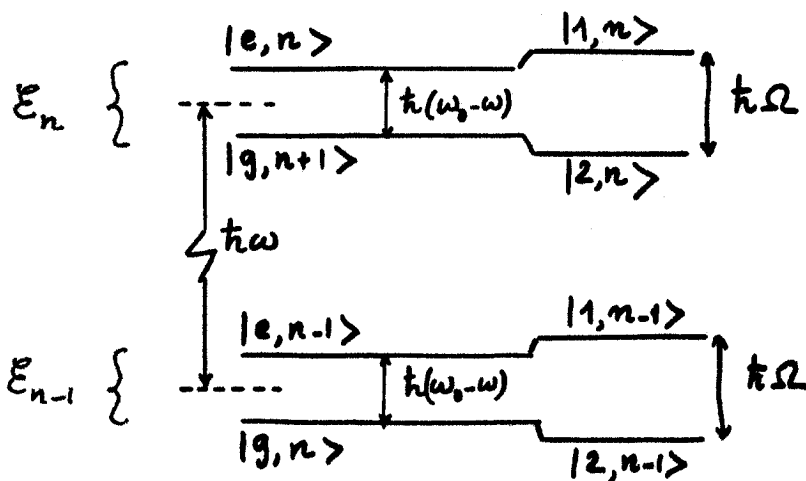


Fig 1

Le couplage atome-laser peut faire passer le système global de l'état $|g, n+1\rangle$ à l'état $|e, n\rangle$, de l'état $|g, n\rangle$ à l'état $|e, n-1\rangle$... (excitation de l'atome par absorption d'un photon). On peut montrer que l'élément de matrice décrivant un tel couplage s'écrit

$$\langle e, n | V | g, n+1 \rangle = \frac{\omega_1(\vec{r})}{2} e^{-i\varphi(\vec{r})} \quad (10.22)$$

où $\omega_1(\vec{r})$ est la fréquence de Rabi en \vec{r} , et $\varphi(\vec{r})$ la phase du champ laser [En toute rigueur, l'élément de matrice (10.22) varie avec n , comme $\sqrt{n+1}$; mais le diagramme de la figure 1 est considéré localement, autour d'une valeur de n , \bar{n} , très grande, et ce diagramme peut alors être considéré comme périodique].

Lorsqu'on tient compte du couplage (10.22) à l'intérieur de E_n , on obtient les états "perturbés" $|1, n\rangle$ et $|2, n\rangle$ représentés sur la partie droite de la figure 1, qui s'expriment sous forme de combinaisons linéaires de $|e, n\rangle$ et $|g, n+1\rangle$, et dont l'écart en énergie vaut $\hbar\Omega$, où

$$\Omega(\vec{r}) = \sqrt{\omega_1^2(\vec{r}) + \delta^2} \quad (10.23)$$

Les mêmes considérations s'appliquent bien sûr à E_{n-1} , E_{n+1} ...

- Introduisons maintenant le couplage avec les modes vides du champ, responsable de l'émission spontanée

Ce couplage provoque des transitions radiatives de l'atome habillé, de E_n vers E_{n-1} , puis de E_{n-1} vers E_{n-2} et ainsi de suite. Par exemple, dans la base "non perturbée", ces processus correspondent aux transitions $|e, n\rangle \rightarrow |g, n\rangle$, $|e, n-1\rangle \rightarrow |g, n-1\rangle$...

(l'atome passe brièvement de e à g , sans changement du nombre de photons laser). Comme les 2 états $|1, n\rangle$ et $|2, n\rangle$ contiennent une proportion de $|e, n\rangle$, les 2 états $|1, n-1\rangle$ et $|2, n-1\rangle$ une proportion de $|g, n\rangle$, on en conclut que les 4 transitions $|i, n\rangle \rightarrow |j, n\rangle$ ($i, j = 1, 2$) dans la base "perturbée" sont permises, ce qui permet de comprendre la structure en triplet du spectre de fluorescence : 1 composante à ω correspondant aux 2 transitions $|1, n\rangle \rightarrow |2, n-1\rangle$ et $|2, n\rangle \rightarrow |2, n-1\rangle$, 1 composante à $\omega + \Omega$ correspondant à $|1, n\rangle \rightarrow |2, n-1\rangle$, 1 composante à $\omega - \Omega$ correspondant à $|2, n\rangle \rightarrow |1, n-1\rangle$.

De même, en considérant la "cascade radiative" de l'atome habillé le long de son diagramme d'énergie, $E_n \rightarrow E_{n-1} \rightarrow E_{n-2} \dots$, on peut comprendre aisément les corrélations temporelles entre les photons de fluorescence émis successivement par l'atome, la distribution du nombre de ces photons pendant un intervalle de temps ... (pour plus de détails, voir la référence (3)).

③ Variation spatiale des énergies propres et états propres de l'atome habillé

- Dans le problème des forces radiatives qui nous intéresse ici, $\omega_1(\vec{r})$ et $\varphi(\vec{r})$ dépendent de \vec{r} . Par exemple $\omega_1(\vec{r})$ s'annule quand \vec{r} est à l'extérieur du mode laser.
- Traçons alors la variation, en fonction de la position de l'atome dans le mode laser, des énergies des états perturbés des multiplicités E_n, E_{n-1} [Fig. 2]. On obtient, à l'extérieur du mode laser, des états qui se réduisent aux états non perturbés et dont l'écart

énergétique à l'intérieur de chaque multiplicité vaut $\hbar(\omega_0 - \omega)$ [X-8].
 Puis, lorsqu'on entre dans le faisceau laser, ces états se rapprochent, puisqu'ils deviennent séparés par $\hbar\Omega(\vec{r})$, où $\Omega(\vec{r})$ est donné en (10.23), et que $\Omega \geq |\omega_0 - \omega|$. De plus, l'expression des états perturbés $|1, n\rangle$ et $|2, n\rangle$ en fonction des états non perturbés $|e, n\rangle$ et $|g, n+1\rangle$ change avec \vec{r} . Enfin, quand on ressort du mode laser, on retrouve les états non perturbés, séparés par $\hbar(\omega_0 - \omega)$.

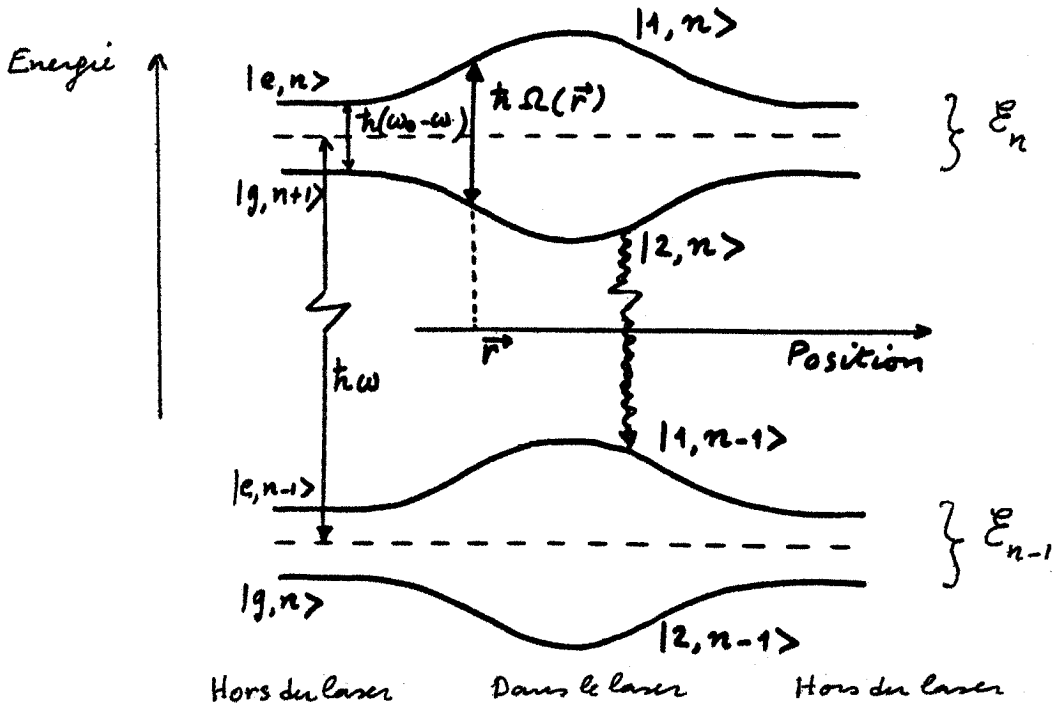


Fig. 2

- Commençons par négliger l'émission spontanée

Supposons que le système soit dans l'état $|1, n\rangle$ ou $|2, n\rangle$, et supposons que l'état externe de l'atome soit décrit par un paquet d'onde de dimensions très petites devant λ (λ de Broglie / $\lambda = \hbar k / p = \epsilon' \ll 1$) et dont le centre se déplace à une vitesse v très lente ($\hbar k v / \Gamma = \epsilon \ll 1$)

Le système va alors suivre adiabotiquement l'état dans lequel il se trouve initialement, $|1, n\rangle$ ou $|2, n\rangle$. Les courbes d'énergie de la figure 2 apparaissent alors comme des courbes d'énergie potentielle $V_{1n}(\vec{r})$ et $V_{2n}(\vec{r})$. L'atome habillé va subir une force

$$\begin{aligned} \vec{F}_1 &= -\vec{\nabla} V_{1n}(\vec{r}) = -\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \Omega(\vec{r}) \quad \text{s'il est dans l'état } |1, n\rangle \\ \vec{F}_2 &= -\vec{\nabla} V_{2n}(\vec{r}) = +\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \Omega(\vec{r}) = -\vec{F}_1 \quad \text{s'il est dans l'état } |2, n\rangle \end{aligned} \quad (10.24)$$

On aboutit ainsi à l'image d'une force agissant sur l'atome habillé et dont le signe dépend du "type d'état" 1 ou 2 dans lequel il se trouve. C'est ainsi qu'apparait dans le point de vue de l'atome habillé, l'effet Stern et Gerlach optique [voir cours 1982-83 cours VII - le champ laser était alors traité classiquement].

- Introduisons maintenant l'émission spontanée

L'atome habillé cascade alors le long de son diagramme d'énergie $E_n \rightarrow E_{n-1} \rightarrow E_{n-2} \dots$. Les transitions radiatives qu'il subit peuvent changer le type d'état dans lequel il se trouve. Par exemple, la flèche ondulée de la figure 2, correspondant à la transition $|2, n\rangle \rightarrow |1, n-1\rangle$ le fait passer d'un état de type 2 à un état de type 1. On aboutit ainsi à l'image d'une force lumineuse agissant sur l'atome et dont le signe change aléatoirement au cours du temps.

4) Interprétation de la force dipolaire moyenne

[X-9]

- La force dipolaire moyenne apparaît comme la moyenne des forces \vec{F}_1 et $\vec{F}_2 = -\vec{F}_1$, pondérées par les probabilités π_1 et π_2 qu'a l'atome habillé de se trouver dans un état de type 1 ou 2,

$$\vec{F}_1 \pi_1 + \vec{F}_2 \pi_2 = \vec{F}_1 (\pi_1 - \pi_2) \quad (10.25)$$

- A résonance ($\omega = \omega_0$), les 2 états $|1, n\rangle$ et $|2, n\rangle$ contiennent la même proportion (1/2) de $|e, n\rangle$. L'instabilité de l'état e , se partage également sur les états $|1, n\rangle$ et $|2, n\rangle$. Les 4 transitions radiatives $|i, n\rangle \rightarrow |j, n-1\rangle$ ($i, j = 1, 2$) ont la même probabilité par unité de temps, égale à $\Gamma/4$. Les états de type 1 et 2 sont également peuplés ($\pi_1 = \pi_2$) et la force dipolaire moyenne est nulle.

- Hors résonance ($\omega \neq \omega_0$), π_1 n'est plus égal à π_2 . Si $\omega < \omega_0$ [Fig. 3a) ce sont les états de type 2 (qui se raccordent à $g, n+1$ hors du laser) qui sont les moins "contaminés" par $|e, n\rangle$, sont donc plus stables et par suite plus peuplés. L'atome est alors, en moyenne, poussé vers les régions de haute intensité. Les conclusions sont inversées si $\omega > \omega_0$ (Fig. 3b). On comprend ainsi pourquoi la force dipolaire moyenne dont l'expression est rappelée en (10.21), varie avec $\delta = \omega - \omega_0$ comme une courbe de dispersion.

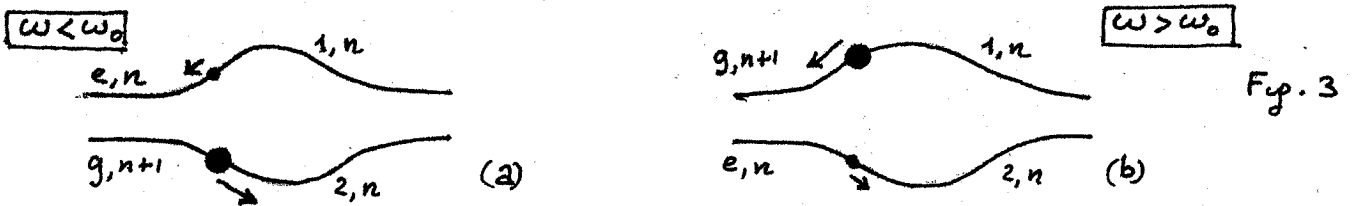


Fig. 3

Notons que si $|\delta| \gg \omega$, l'une des 2 populations π_1 ou π_2 est pratiquement égale à 1. Le déplacement de l'état d'énergie correspondant (qui est très proche de $g, n+1$) représente alors le déplacement lumineux ("light-shift") de l'état fondamental, calculé de manière perturbative. La force dipolaire apparaît comme l'opposé du gradient du déplacement lumineux. Le point de vue de l'atome habillé, qui prend en compte les 2 types d'état, permet de généraliser ce résultat à des intensités élevées ($\omega, \approx |\delta|$)

- Calcul quantitatif

La résolution de l'équation piloté décrivant l'effet de l'émission spontanée sur la matrice densité de l'atome habillé permet de calculer les populations $P_{i,n}$ des divers états $|i, n\rangle$ de l'atome habillé, et par suite les probabilités π_1 et π_2 introduites plus haut. On trouve ainsi [voir références (3) et (8)]

$$\pi_1 = \sum_n P_{1,n} = \frac{(\Omega + \delta)^2}{2(\delta^2 + \Omega^2)} \quad \pi_2 = \sum_n P_{2,n} = \frac{(\Omega - \delta)^2}{2(\delta^2 + \Omega^2)} \quad (10.26)$$

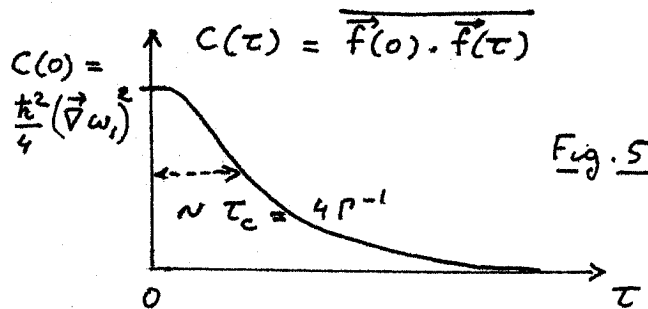
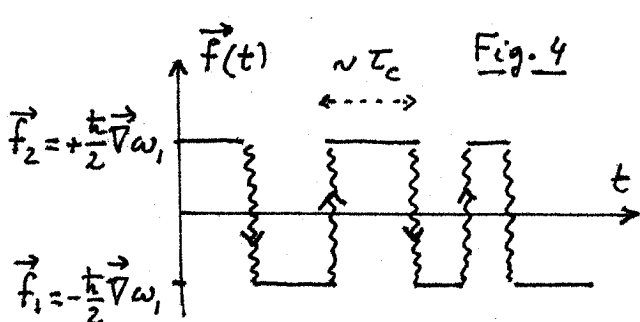
En reportant (10.26) dans (10.25), et en utilisant (10.23), on obtient alors

$$\vec{F}_1 \pi_1 + \vec{F}_2 \pi_2 = -(\pi_1 - \pi_2) \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \Omega = -\hbar \delta \frac{\Omega \vec{\nabla} \Omega}{\delta^2 + \Omega^2} = -\hbar \delta \frac{\omega_1 \vec{\nabla} \omega_1}{2\delta^2 + \omega_1^2} \quad (10.27)$$

qui se réduit à l'expression (10.21) de la force dipolaire moyenne \vec{F}_2 à la limite $\Gamma \rightarrow 0$. L'interprétation physique donnée plus haut se trouve ainsi confirmée de manière quantitative.

⑤ Interprétation des fluctuations de la force dipolaire | X-10

- Supposons nous placés à résonance ($\omega = \omega_0$). D'après (10.23), Ω se réduit alors à ω . La force lumineuse $\vec{F}(t)$ agissant sur l'atome passe aléatoirement au cours du temps de la valeur $\vec{F}_1 = -\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \omega$, à la valeur $\vec{F}_2 = -\vec{F}_1$, et réciproquement [Fig. 4]. Comme la probabilité par unité de temps d'une transition $|1, n\rangle \rightarrow |2, n-1\rangle$ ou $|2, n\rangle \rightarrow |1, n-1\rangle$ est $\Gamma/4$, le temps moyen τ_c séparant 2 sauts consécutifs entre les 2 valeurs possibles de \vec{F} est de l'ordre de $4\Gamma^{-1}$. Ce temps τ_c peut être encore considéré comme le temps de corrélation de la force fluctuante $\vec{F}(t)$, c.-à-d. le temps au delà duquel elle commence à perdre la "mémoire" de sa valeur initiale.



- La figure 5 représente la fonction de corrélation $C(\tau) = \overline{\vec{F}(0) \cdot \vec{F}(\tau)}$ de la force fluctuante $\vec{F}(t)$ représentée sur la figure 4. En $\tau=0$ on a

$$C(0) = \overline{(\vec{F}(0))^2} = \vec{F}_1^2 = \vec{F}_2^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\vec{\nabla} \omega)^2 \quad (10.28)$$

Pour $\tau \gg \tau_c \sim 4\Gamma^{-1}$, $C(\tau)$ se réduit au produit des valeurs moyennes de $\vec{F}(0)$ et $\vec{F}(\tau)$ qui est nul puisque la force dipolaire moyenne est nulle à résonance.

- Le coefficient de diffusion associé à la force fluctuante $\vec{F}(t)$ est, d'après (9.66), l'intégrale de 0 à $+\infty$ de $C(\tau)$. On a donc

$$D = \int_0^{\infty} C(\tau) d\tau \approx C(0) \tau_c \approx \frac{\hbar^2 (\vec{\nabla} \omega)^2}{\Gamma} \quad (10.29)$$

On retrouve ainsi la dépendance correcte en $(\vec{\nabla} \omega)^2$ et Γ du coefficient de diffusion associé à la 3^{ème} ligne de (10.11) qui, pour $\delta=0$ et $\omega \gg \Gamma$, se réduit à $\frac{\hbar^2 (\vec{\nabla} \omega)^2}{2\Gamma}$ [voir aussi (10.20)]

En conclusion, bien que le traitement quantique du champ laser ne soit pas indispensable si l'état de ce champ est un état cohérent (théorème de Fock), le fait de considérer le système global formé par l'atome et le mode laser en interaction (atome "habillé" par les photons laser) permet d'interpréter simplement toute les caractéristiques de la force dipolaire.

Références du § B (suite de la page X 5)

- (8) C. COHEN-TANNOUDJI Cours au Collège de France (1976-77)
- (9) S. HAROCHE Thèse d'état (Paris 1971)
Ann. Phys. Fr 6, 189 (1971)

Introduction

Buts de ce chapitre

- Caractériser la stabilité des pièges optiques pour atomes neutres.
Sous l'effet des fluctuations des forces radiatives, un atome piégé au fond du puits peut s'échapper hors de ce puits. Quelle est la probabilité par unité de temps d'un tel événement ?
- Montrer qu'on peut répondre à une telle question en utilisant les équations cinétiques introduites dans le cours VI et justifiées dans le cours X

Généralité du problème posé

Autres exemples de situations physiques où des problèmes analogues se posent

- Désorption d'un atome adsorbé sur une surface. Quelle est la probabilité de désorption par unité de temps ?
- Vitesse d'une réaction chimique, modélisée comme résultant du passage du système d'une "vallée" de potentiel à une autre "vallée" via un "col"

Rappels de paramètres physiques importants pour un puits optique (voir cours VI)

- Force moyenne $\phi(x)$ dérivant du potentiel $U(x)$ représenté sur la figure 1. La profondeur du puits est ΔE ($\Delta E > 0$)

$$\phi(x) = -\frac{d}{dx} U(x) \quad (11.1)$$

$$\Delta E = U(B) - U(A) = U(C) - U(A) \quad (11.2)$$

- Au voisinage du point A (fond du puits en $x=0$)

$$U(x) \approx -\Delta E + \frac{1}{2} M \Omega_A^2 x^2 \quad (11.3)$$

Ω_A : fréquence (angulaire) d'oscillation au fond du puits

- Fluctuations des forces radiatives autour de leur valeur moyenne $\phi(x)$, entraînant
 - (i) une friction $\gamma(x)$
 - (ii) une diffusion d'impulsion au point x , caractérisé par $D(x)$.

On suppose pour simplifier $D(x)/\gamma(x)$ indépendant de x

$$\frac{D(x)}{M \gamma(x)} = k_B T \quad (11.4)$$

T : température "effective" des atomes dans le puits ($k_B T$ de l'ordre de $\hbar \Gamma$)

$\gamma(x)$ et $D(x)$ s'annulent à l'extérieur du puits (c-à-d pour $|x|$ suffisamment grand)

- L'ensemble $\{x, p\}$ est un ensemble markovien, les "sauts" de chaque variable étant faibles. La densité de probabilité $P(x, p, t)$ [ou plus exactement la fonction de Wigner $W(x, p, t)$], obéit à une équation de Fokker-Planck [voir (6.14)]

Solution à l'équilibre

$$P_{st}(x, p) = N \exp \left\{ - \left[\frac{p^2}{2M} + U(x) \right] / k_B T \right\} \quad (11.5)$$

- Possibilité d'une "hiérarchie" dans la lenteur. Existence de variable superlente comme

$$\begin{cases} x & \text{à la limite } \gamma \gg \Omega \text{ (frictions élevées)} \\ E & \text{à la limite } \gamma \ll \Omega \text{ (frictions très faibles)} \end{cases}$$

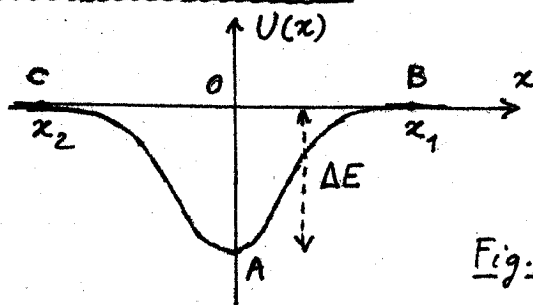


Fig. 1

① Élimination adiabatique de la vitesse [rappels du cours VI]

- Si l'on introduit la densité en x

$$\rho(x, t) = \int dp \mathcal{P}(x, p, t) \quad (11.6)$$

on montre que ρ obéit à l'équation de continuité

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} J(x, t) = 0 \quad (11.7)$$

où le courant J est la somme d'un courant de conduction et d'un courant de diffusion

$$J(x, t) = \mu(x) \phi(x) \rho(x, t) - D(x) \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) \quad (11.8)$$

$$\mu(x) = \frac{1}{M\gamma(x)} \quad (\text{Mobilité en } x) \quad (11.9)$$

$$D(x) = D(x) / M^2 \gamma^2(x) \quad (\text{Coefficient de diffusion spatiale}) \quad (11.10)$$

- Solutions stationnaires ($\partial \rho / \partial t = 0$) et d'équilibre ($J = 0$)

$$J(x) = \frac{1}{M\gamma(x)} \left[\phi(x) \rho(x) - \frac{D(x)}{M\gamma(x)} \frac{d\rho(x)}{dx} \right] = \frac{1}{M\gamma(x)} \left[-\frac{dU(x)}{dx} \rho(x) - k_B T \frac{d\rho(x)}{dx} \right] = 0 \quad (11.11)$$

$$\hookrightarrow \rho_{eq}(x) = C e^{-U(x)/k_B T} \quad (11.12)$$

- La solution d'équilibre (11.12) n'est pas la seule solution stationnaire possible. On peut envisager des solutions stationnaires ($\partial \rho / \partial t = 0$) mais correspondant à des situations hors d'équilibre ($J \neq 0$). L'équation de continuité (11.7) impose alors, comme $\partial \rho / \partial t = 0$, que J soit indépendant de x ($\partial J / \partial x = 0$). Une solution stationnaire, mais hors d'équilibre, correspond donc à un courant indépendant de x et l'équation (11.11) doit alors être remplacée par

$$\frac{d\rho(x)}{dx} + \frac{1}{k_B T} \frac{dU}{dx} \rho(x) = -\frac{MJ}{k_B T} \gamma(x) \quad (11.13)$$

où J est une constante (indépendante de x et de t)

② Exemple de situation hors d'équilibre

a) Injection de particules au fond des puits

- Exemple concret de situation hors d'équilibre : on injecte en $x = 0$ (abscisse du fond A du puits) n_0 particules par unité de temps. L'équation de continuité (11.7) doit être alors remplacée par

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} J = n_0 \delta(x) \quad (11.14)$$

- En régime stationnaire ($\partial \rho / \partial t = 0$), on a alors (voir Fig. 2)

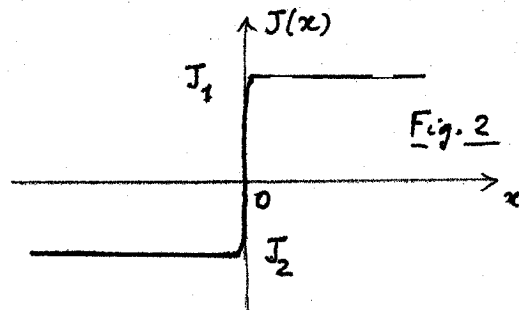
$$\begin{cases} J(x) = J_1 & \text{pour } x > 0 \\ J(x) = J_2 & \text{pour } x < 0 \end{cases} \quad (11.15)$$

où J_1 et J_2 sont des constantes liés par la relation

$$J_1 - J_2 = n_0 \quad (11.16)$$

obtenue en intégrant 11.14 (avec $\partial \rho / \partial t = 0$) entre $-E$ et $+E$ ($E > 0$)

Physiquement, on comprend bien que l'injection permanente de particules en $x = 0$ avec un taux n_0 va donner, en régime stationnaire, naissance à 2 courants de particules, J_1 et J_2 , se dirigeant vers la droite et la gauche (J_1 et J_2 de signes opposés), l'équation (11.16) exprimant la conservation du nombre de particules en $x = 0$.



- l'équation (11.13) demeure valable pour $x > 0$ avec $J = J_1$, [X1-3] pour $x < 0$ avec $J = J_2$, donc pour x quelconque avec J remplacé par la fonction représentée sur la figure 2. On en déduit que

$$\text{En présence d'injection} \quad \begin{cases} dp/dx \text{ est discontinu en } x=0 \\ \rho \text{ est continu en } x=0 \end{cases} \quad (11.17)$$

b) Injection de particules au fond des puits et extraction de celle qui s'en échappent.

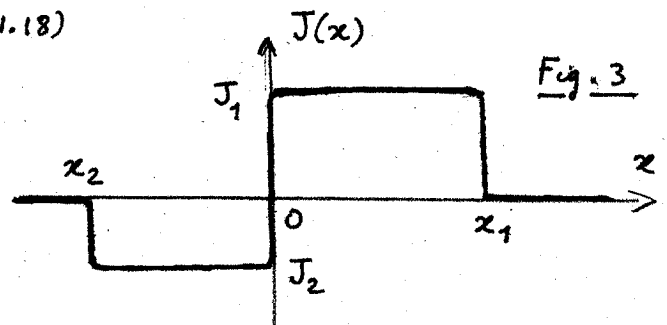
- Supposons maintenant que, de part et d'autre des puits, en 2 points B et C suffisamment éloignés, d'abscisses $x_1 > 0$ et $x_2 < 0$ (voir Fig. 1), on enlève toutes les particules arrivant en ces points après avoir été injectées en A.

La traduction mathématique de cette nouvelle situation physique est la suivante. De même qu'en un point d'injection (voir 11.17), $\rho(x)$ reste continue en un point d'extraction. Comme aucune particule ne passe à droite de x_1 et à gauche de x_2 , $\rho(x)$ doit s'annuler dans ces 2 régions, et donc aussi en x_1 et x_2 . La nouvelle distribution stationnaire est donc la solution stationnaire de l'équation (11.14) [avec J remplacé par (11.8)], correspondant aux conditions aux limites

$$\rho(x_1) = \rho(x_2) = 0 \quad (11.18)$$

- Allure du nouveau courant.

J est, comme ρ , nul à droite de x_1 et à gauche de x_2 [Fig. 3]. La discontinuité de J en x_1 traduit l'extraction de $n_1 = J_1$ particules par unité de temps en x_1 . De même $n_2 = -J_2$ particules sont extraites par unité de temps en x_2 .



- Allure de la nouvelle densité ρ . ρ est continue sur tout l'axe des x , nulle pour $x \geq x_1$ et $x \leq x_2$. Par contre dp/dx est discontinu en $x=0$, $x=x_1$, $x=x_2$.

c) lien avec le problème physique étudié dans ce chapitre

- Il est clair que, les caractéristiques des puits étant connues [$U(x)$, $\gamma(x)$, T], la donnée du taux d'injection n_0 en $x=0$, et des points d'extraction x_1 et x_2 , doit permettre de déterminer sans ambiguïté J_1 , J_2 et la densité stationnaire ρ . Comme ρ est connue, on peut alors calculer le nombre total de particules dans le puits

$$N = \int \rho(x) dx \quad (11.19)$$

- Ainsi, parmi les N particules qui se trouvent dans le puits (on fait très près du fond des puits si $\Delta E \gg kT$), $n_1 = J_1$ arrivent par unité de temps jusqu'au point x_1 , où elles sont extraites, $n_2 = -J_2$ au point x_2 . On en déduit que les probabilités par unité de temps de sortie du puits à droite (w_1) et à gauche (w_2)

$$w_1 = \frac{n_1}{N} = \frac{J_1}{N} \quad w_2 = \frac{n_2}{N} = \frac{-J_2}{N} \quad (11.20)$$

- Finalement, on a ramené le problème physique posé à celui de la recherche de la solution stationnaire de l'équation cinétique

(modifié pour tenir compte de l'injection), avec des conditions (X1-4) aux limites fixées par l'extraction. C'est ce qui sera fait dans le § 3.

L'artifice de l'injection en $x=0$ permet de se ramener à un problème mathématique stationnaire, les particules s'échappant des puits étant en permanence remplacées par des nouvelles qui sont injectées en $x=0$.

Il faudra bien sûr examiner ensuite dans quelle mesure les résultats obtenus pour w_1 et w_2 peuvent être considérés comme intrinsèques, c-à-d comme indépendants des mécanismes précis d'injection et d'extraction utilisés dans le modèle mathématique

③ Calcul des probabilités de sortie par unité de temps

- Calcul de $p(x)$ pour $0 < x \leq x_1$. La densité $p(x)$ obéit à une équation du type (11.13), où J est remplacé par J_1 , qui est pour l'instant inconnue, mais qui sera déterminé plus loin à partir de la continuité de p en $x=0$ et de (11.16).

La solution de l'équation différentielle linéaire (11.13) avec second membre, s'obtient aisément en utilisant la méthode de variation de constantes, et s'écrit, compte tenu de la condition aux limites $p(x_1) = 0$

$$p(x) = -\frac{J_1 M}{k_B T} e^{-U(x)/k_B T} \int_{x_1}^x dx' \gamma(x') e^{U(x')/k_B T} \text{ pour } 0 < x \leq x_1 \quad (11.21)$$

- Un calcul analogue dans la région $x_2 \leq x < 0$ donne

$$p(x) = -\frac{J_2 M}{k_B T} e^{-U(x)/k_B T} \int_{x_2}^x dx' \gamma(x') e^{U(x')/k_B T} \text{ pour } x_2 \leq x < 0 \quad (11.22)$$

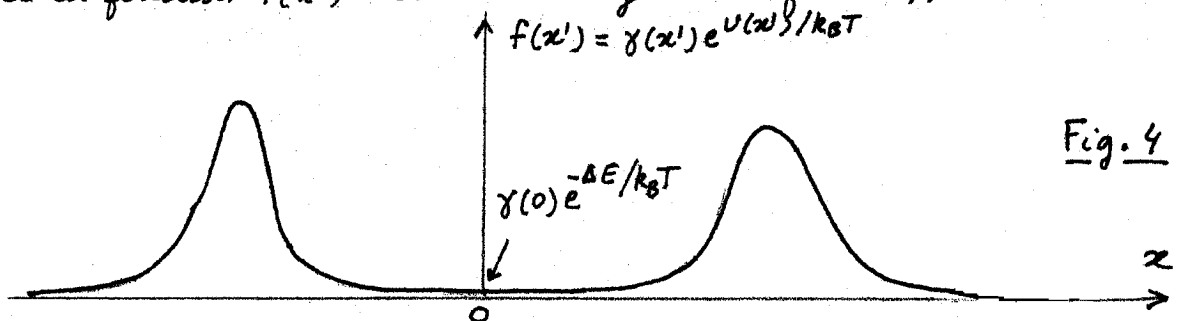
- Ecrivons maintenant que les 2 solutions (11.21) et (11.22) se raccordent en $x=0$ (continuité de p). On obtient, compte tenu de (11.16)

$$\frac{J_1}{\int_{x_2}^0 dx' \gamma(x') e^{U(x')/k_B T}} = \frac{-J_2}{\int_0^{x_1} dx' \gamma(x') e^{U(x')/k_B T}} = \frac{n_0}{\int_{x_2}^{x_1} dx' \gamma(x') e^{U(x')/k_B T}} \quad (11.23)$$

Les 2 équations (11.23) permettant d'exprimer J_1 et J_2 en fonction de n_0 et d'intégrales définies de la fonction

$$f(x') = \gamma(x') e^{U(x')/k_B T} \quad (11.24)$$

- A ce stade du calcul, il est utile de représenter les variations avec x' de la fonction $f(x')$ dont les intégrales définies apparaissent en (11.23).



En $x'=0$, $U(0) = -\Delta E$, et $f(0)$ est égal à $\gamma(0) e^{-\Delta E/k_B T}$ qui est extrêmement petit si $\Delta E \gg k_B T$ (puits profond). $f(x')$ reste très petit tant que $|U(x')| \gg k_B T$ et ne devient appréciable que lorsqu'on s'approche de la sortie du puits $|U(x')| \sim k_B T$. Puis, quand on sort du puits, on a $U(x') \approx 0$, $e^{U(x')/k_B T} \approx 1$, et $f(x')$ reflète alors les

variations de $\gamma(x')$ qui tend vers zéro quand on s'éloigne suffisamment des bords du puits. Finalement, les variations de $f(x')$ sont contrôlées par les valeurs de $\gamma(x')$ dans la 1^{ère} couche d'épaisseur kT quand on rentre dans le puits ($-kT \leq U(x') \leq 0$) et par la décroissance de $\gamma(x')$ à l'extérieur du puits.

On en conclut que les intégrales figurant dans (11.23) dépendent très peu de x_1 et x_2 si $|x_1|$ et $|x_2|$ sont suffisamment grands pour qu'il n'y ait plus de friction. On peut alors remplacer x_1 par $+\infty$ et x_2 par $-\infty$ sans changer la valeur des intégrales. Physiquement, les résultats obtenus dépendront très peu de l'extraction, si celle-ci est effectuée suffisamment loin des bords.

D'autre part, si $\Delta E \gg kT$, on voit sur la figure 4 que la position exacte de l'injection (que nous avons prise ici en $x=0$) est sans importance pourvu qu'elle ait lieu dans la région où le puits est très profond ($|U(x')| \gg k_B T$), et où par suite la fonction $f(x')$ est très proche de zéro. Les résultats obtenus seront donc très peu sensibles au mode d'injection, et pourront donc être considérés comme intrinsèques, si le puits est très profond.

$$\Delta E \gg k_B T \tag{11.25}$$

condition que nous supposons désormais réalisée. Physiquement, la condition (11.25) exprime qu'une particule injectée au fond du puits a tout le temps de se thermaliser avant d'avoir une chance de pouvoir s'échapper. L'injection et l'extraction sont des processus indépendants et ne se perturbent pas mutuellement.

- Il reste à calculer le nombre N de particules dans le puits. Comme $\Delta E \gg k_B T$, la densité $\rho(x)$ est très concentrée autour de $x=0$, dans un intervalle de largeur Δx telle que $U(\Delta x) - U(0) \approx k_B T$. Pour les valeurs de x où $\rho(x)$ est important, les intégrales qui figurent dans (11.21) et (11.22) dépendent très peu de la borne supérieure x qui peut donc être remplacé par 0 [l'intégrant $f(x')$ est pratiquement nul dans l'intervalle Δx autour de 0. voir figure 4]. Enfin, dans l'intervalle Δx autour de $x=0$, $U(x)$ peut être approximé par (11.3), de sorte que finalement, on peut écrire

$$\rho(x) = - \frac{J_2 M}{k_B T} e^{\Delta E/k_B T} e^{-M \Omega_A^2 x^2 / 2k_B T} \int_{-\infty}^0 dx' \gamma(x') e^{U(x')/k_B T} \tag{11.26}$$

On obtient ainsi

$$N = \int dx \rho(x) = - \frac{J_2}{\Omega_A} \sqrt{\frac{2\pi M}{k_B T}} e^{\Delta E/k_B T} \int_{-\infty}^0 dx' \gamma(x') e^{U(x')/k_B T} \tag{11.27}$$

- En reportant (11.23) [avec $x_1 = +\infty, x_2 = -\infty$] et (11.27) dans (11.20), on obtient finalement

$w_2 = \frac{-J_2}{N} = \frac{\Omega_A e^{-\Delta E/k_B T}}{\sqrt{\frac{2\pi M}{k_B T}} \int_{-\infty}^0 \gamma(x') e^{U(x')/k_B T} dx'}$	(11.28)
$w_1 = \frac{J_1}{N} = w_2 \frac{J_1}{-J_2} = \frac{\Omega_A e^{-\Delta E/k_B T}}{\sqrt{\frac{2\pi M}{k_B T}} \int_0^{\infty} \gamma(x') e^{U(x')/k_B T} dx'}$	(11.29)

④ - Discussion physique

- le point le plus important est la variation en $e^{-\Delta E/k_B T}$. La profondeur du puits apparaît comme une "énergie d'activation" que les fluctuations doivent fournir à la particule pour lui permettre de s'échapper. Comme

$\Delta E \gg k_B T$, w_1 et w_2 sont très petits.

- w_1 et w_2 sont proportionnels à la fréquence d'oscillation Ω_A de la particule dans le puits.

On pourrait être tenté d'interpréter la quantité $\Omega_A e^{-\Delta E/k_B T}$ de la façon suivante : la particule fait Ω_A allers et retours par seconde entre les 2 parois du puits ; à chaque fois qu'elle arrive sur une paroi, elle a une probabilité $e^{-\Delta E/k_B T}$ de s'échapper, d'où une probabilité par unité de temps en $\Omega_A e^{-\Delta E/k_B T}$. En fait, ce raisonnement n'est pas correct. Le facteur Ω_A apparaît dans l'intégration de (11.26) sur x . Il est purement statistique et ne résulte pas de considérations de cinétique.

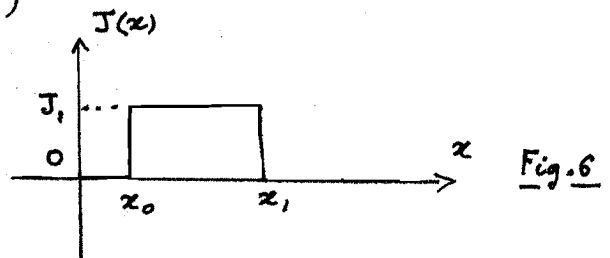
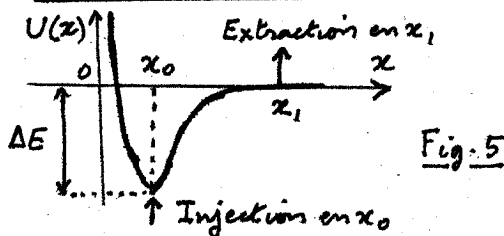
- w_1 et w_2 sont inversement proportionnels à la friction γ et tendent donc vers 0 si $\gamma \rightarrow \infty$

- Interprétation des dénominateurs de (11.28) et (11.29) qui sont sans dimensions. Soit L la largeur en x des pics de la figure 4, c'est la largeur de la zone qui contrôle les variations de $f(x)$ donné en (11.24). L est de l'ordre d'une fraction de la largeur en x du puits. L'intégrale sur x' est de l'ordre de γL . Quant au facteur $\sqrt{2\pi M/k_B T}$ il est de l'ordre l'inverse de la vitesse moyenne \bar{v} d'une particule de masse M à la température T . Finalement, ces dénominateurs sont de l'ordre de $\gamma L \bar{v}^{-1}$. Or $L \bar{v}^{-1}$ est le temps mis par la particule à parcourir à la vitesse thermique \bar{v} la longueur L , et est donc de l'ordre de la période d'oscillation Ω_A^{-1} dans le puits. Les dénominateurs de (11.28) et (11.29) sont donc de l'ordre de γ/Ω_A , c-à-d très grands devant 1 à la limite des frictions élevées considérée dans ce § A. Finalement, w_1 et w_2 sont petits devant $\Omega_A e^{-\Delta E/k_B T}$

- Si le puits est symétrique, les probabilités de sortie à droite w_1 et à gauche w_2 sont égales

⑤ Etude d'autres formes de potentiel

a) Atome adsorbé sur une surface (Fig. 5)



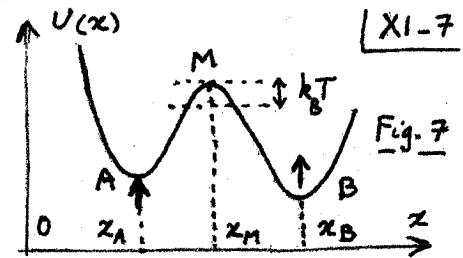
L'injection de particules au fond du puits en x_0 ne donne plus de courant vers la gauche J_2 comme dans le cas précédent. En effet, les particules qui, après avoir été injectées, vont vers la gauche sont obligées de rebrousser chemin (murs de potentiel infranchissable à gauche) de sorte qu'en régime stationnaire $J=0$ à gauche de x_0 , égal à une constante J_1 entre x_0 et l'abscisse x_1 du point d'extraction, nul après x_1 (Fig. 6).

La densité $\rho(x)$ est la densité d'équilibre entre 0 et x_0 ($J=0$), la solution de (11.13) entre x_0 et x_1 qui s'annule en x_1 , nulle après x_1 . Le calcul de la probabilité de désorption par unité de temps, w , est tout à fait analogue à celui du § 4, et on trouve

$$w = \frac{\Omega e^{-\Delta E/k_B T}}{\sqrt{\frac{2\pi M}{k_B T}} \int_{x_0}^{\infty} \gamma(x') e^{U(x')/k_B T} dx'} \quad (11.30)$$

b) Réaction chimique

- Injection de particules en x_A - Extraction en x_B
- Comme dans l'exemple précédent, le courant J est nul à gauche de x_A (mur infranchissable à gauche). Il est constant entre x_A et x_B , nul après x_B



- L'intégrale de $f(x') = \gamma(x') e^{U(x')/k_B T}$ entre x_A et x_B est contrôlée par une couche d'épaisseur $k_B T$ au voisinage du sommet M de la barrière. Cette région est la région critique pour déterminer la valeur de la probabilité de passage par unité de temps $w_{A \rightarrow B}$ qu'on trouve égale à

$$w_{A \rightarrow B} = \frac{\Omega_A e^{U_A/k_B T}}{\sqrt{\frac{2\pi M}{k_B T}} \int_{x_A}^{x_B} \gamma(x') e^{U(x')/k_B T} dx'} \quad (11.31)$$

- Comme, seule, une toute petite région de x' autour de x_M contribue à l'intégrale de (11.31), on peut approximer $U(x')$ par $U_M - \frac{1}{2} M \Omega_M^2 (x' - x_M)^2$, remplacer $\gamma(x')$ par une constante $\gamma_M = \gamma(x_M)$, ce qui donne

$$w_{A \rightarrow B} = \frac{\Omega_A}{2\pi} \frac{\Omega_M}{\gamma_M} e^{-(U_M - U_A)/k_B T} \quad (11.32)$$

On retrouve bien $\Omega_A e^{-\Delta E/k_B T}$ (où $\Delta E = U_M - U_A$), divisé par un nombre sans dimension, γ_M/Ω_M , très grand devant 1 pour des frictions élevées.

B. Limite des frictions faibles ($\gamma \ll \Omega$)

① Equations d'évolution de la fonction de distribution de l'énergie (voir cours VI)

- Revenons au puits de potentiel de la figure 1. A la limite des frictions faibles ($\gamma \ll \Omega$), la particule effectue de nombreuses oscillations entre les parois du puits pendant le temps γ^{-1} . Nous avons vu au cours VI (§ 7) que la fonction de distribution de l'énergie $E = \frac{p^2}{2m} + U(x)$ de la particule, ou, ce qui revient au même, de l'action S , reliée à E par

$$\frac{dS}{dE} = \Theta(E) = \frac{2\pi}{\Omega(E)} \quad (11.33)$$

(où Θ et Ω sont la période et la fréquence angulaire de l'oscillation), aboutit à une équation de Fokker-Planck

$$\frac{\partial g}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial S} = \gamma \frac{\partial}{\partial S} \left(S g + k_B T S \frac{\partial g}{\partial E} \right) \quad (11.34)$$

où g est la densité, J le courant (On a supposé γ indépendant de S).

- Une solution stationnaire et d'équilibre correspond à $\partial g/\partial t = 0$, $J=0$, ce qui donne

$$g_{eq} = C e^{-E/k_B T} \quad (11.35)$$

- Une solution stationnaire mais hors d'équilibre correspond à $\partial g/\partial t = 0$, $J = \text{constante}$ (indépendante de E ou S), ce qui donne, compte tenu de (11.34):

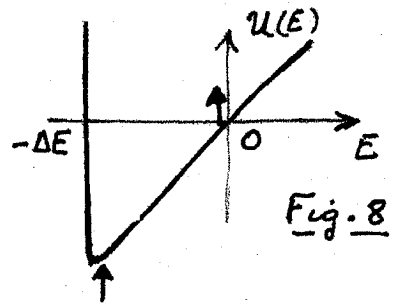
$$\frac{dg(E)}{dE} + \frac{1}{k_B T} g(E) = \frac{-J}{k_B T} \frac{1}{S(E)} \quad (11.36)$$

② Calcul de la probabilité de sortie des puits

- Formellement, l'équation (11.36) est très analogue à (11.13). On peut assimiler E à la "position" d'une particule fictive évoluant dans le "potentiel" $U(E) = E$ [le $\frac{dU}{dx}$ de (11.13) est en effet remplacé par $\frac{dU}{dE} = 1$ dans (11.36)]. Comme $E = \frac{p^2}{2m} + U(x)$ ne peut descendre au-dessous de $U_A = -\Delta E$ (vraie particule immobile en A dans le vrai puits $U(x)$),

il faut compléter le "potentiel" $U(E)$ par un mur en $E = -\Delta E = U_A$ | XI-8
 infranchissable à gauche (Fig. 8)

- Le problème de la sortie du puits peut alors être posé en ces termes : on injecte des particules en $-\Delta E + E$ (juste à droite du mur de la figure 8) et on les extrait en $0 - E'$ (juste avant l'énergie 0).



Le courant est nul à gauche de $-\Delta E + E$ (mur infranchissable à gauche), constant entre $-\Delta E + E$ et $0 - E'$, nul à droite de $0 - E'$

- Intégrons alors (11.36) avec la condition aux limites $g(0 - E') = 0$. Il vient

$$g(E) = \frac{-J}{\gamma k_B T} e^{-E/k_B T} \int_{0-E'}^E dE' \frac{e^{E'/k_B T}}{S(E')} \quad (11.37)$$

L'intégrale figurant dans (11.37) est contrôlée par une couche de largeur $k_B T$ au voisinage de 0 ($-k_B T \lesssim E' < 0$). Pour l'évaluer, nous remplaçons $1/S(E')$ par $1/S_0$ (en admettant que $S(E')$ varie peu autour de S_0 dans cet intervalle), ce qui permet de sortir $\frac{1}{S_0}$. A partir de $g(E)$, on peut ensuite calculer le nombre total N de particules dans le puits, contrôlé par la valeur de $g(E)$ dans l'intervalle $-\Delta E < E' \lesssim -\Delta E + k_B T$ (ce qui permet de remplacer la borne supérieure de l'intégrale de 11.37 par $-\infty$ puisque $\Delta E \gg k_B T$). On obtient ainsi

$$N = \int g(E) dS = \int g(E) dE \frac{dS}{dE} \approx \frac{2\pi}{\Omega_A} \int g(E) dE = \frac{2\pi}{\Omega_A} \frac{J k_B T}{\gamma} e^{\Delta E/k_B T} \frac{1}{S_0} \quad (11.38)$$

Finalement, la probabilité totale de sortie (à droite et à gauche) par unité de temps vaut

$$W = \frac{J}{N} = \frac{\gamma S_0}{k_B T} \frac{\Omega}{2\pi} e^{-\Delta E/k_B T} \quad (11.38)$$

③ Discussion physique - Critique du modèle

- Pour interpréter le facteur $\gamma S_0/k_B T$ multipliant la quantité $\frac{\Omega}{2\pi} e^{-\Delta E/k_B T}$ déjà rencontré plus haut, intégrons (11.33) entre 0 et ΔE . On trouve :

$$S_0 \approx \Delta E \Theta_0 \quad (11.39)$$

où Θ_0 est une période moyenne d'oscillation dans le puits. Par ailleurs, une particule oscillant près du bord supérieur du puits a une énergie cinétique de l'ordre de ΔE et perd donc par friction une énergie de l'ordre de $\gamma \Delta E$ par unité de temps. On en déduit que $\gamma S_0 \approx \gamma \Delta E \Theta_0$ est de l'ordre de l'énergie perdue par friction au cours d'un aller et retour de la particule. On peut donc réécrire (11.38) sous la forme

$$W = \frac{SE_{\text{perdue par aller et retour}}}{k_B T} \frac{\Omega}{2\pi} e^{-\Delta E/k_B T} \quad (11.40)$$

- L'équation de Fokker-Planck (11.34) que nous avons utilisé pour établir (11.38) ou (11.40) suppose que E est une variable superlente, pouvant être considérée comme markovienne et à faibles sauts sur des échelles de temps longues devant Ω^{-1} . Le changement d'énergie ΔE par aller et retour doit donc pouvoir être considéré comme très petit devant toutes les autres énergies caractéristiques du problème. Or l'intervalle d'énergie qui contrôle l'intégrale de (11.37), et par suite w , est de l'ordre de $k_B T$. Pour que (11.38) ait un sens, il faut donc que

$$SE_{\text{perdue par aller et retour}} \ll k_B T \quad (11.41)$$

Nous verrons dans le § C suivant ce qui se passe dans l'autre cas limite $SE \gg k_B T$.

- Le modèle utilisé dans le § B est plus grossier et plus critiquable que celui du § A. Pour pouvoir mener les calculs jusqu'au bout, des approximations grossières ont été faites : γ indépendant de x et E , $S(E')$ variant peu avec E' au voisinage de $E' = 0$. De plus, pour certaines formes de puits, la période d'oscillation peut

diverger quand E tend vers 0 par valeurs inférieures et la condition $\gamma \ll \Omega$ n'est plus satisfaite. Enfin, la signification physique d'une extraction de particules à l'énergie $0-E'$ n'est pas aussi claire que celle du § A où les particules étaient extraites loin des bords du puits. En fait, toutes ces difficultés sont liées au fait que l'équation de Fokker-Planck (11.34) est beaucoup plus critique au bord du puits qu'au fond, alors que la probabilité de sortie est contrôlée par ce qui se passe au bord.

Une méthode plus valable pour étudier la limite $\gamma \ll \Omega$ (et même des situations où x et p ne sont plus markoviens!) consiste à utiliser le principe du bilan détaillé qui permet de relier la probabilité de sortie à la probabilité de capture d'une particule arrivant de l'extérieur. Il est possible alors d'établir (11.40) de manière plus convaincante [cf référence 3]. Nous n'exposerons pas ici une telle méthode car le problème des puits radiatifs relève plus du cas $\gamma \gg \Omega$ que du cas $\gamma \ll \Omega$.

C - Probabilités "absolues"

① Calcul des probabilités "absolues" de sortie par unité de temps

Considérons la distribution d'équilibre donnée en (11.5). Si $\Delta E \gg k_B T$, elle est concentrée près de $x=0$. Par intégration sur x et p et utilisation de (11.3), on obtient le nombre N de particules piégées dans le puits

$$N = \iint dx dp P_{eq}(x,p) = N k_B T \frac{2\pi}{\Omega_A} e^{\Delta E/k_B T} \quad (11.42)$$

Plaçons nous maintenant à la sortie du puits, en un point comme B, d'abscisse x , où $V(x)=0$, et où par suite $e^{-U(x)/k_B T} = 1$, et calculons le courant J_{\rightarrow} des particules qui vont vers la droite

$$J_{\rightarrow} = \int_0^{\infty} dp \frac{p}{M} P_{eq}(x=x, p) = N k_B T \quad (11.43)$$

Un calcul analogue peut être fait au point C et donne la même valeur pour le courant J_{\leftarrow} des particules allant vers la gauche

Par définition, la probabilité absolue de sortie par unité de temps vaut

$$W_{absolue} = \frac{J_{\rightarrow}}{N} = -\frac{J_{\leftarrow}}{N} = \frac{\Omega_A}{2\pi} e^{-\Delta E/k_B T} \quad (11.44)$$

② Différences entre la probabilité absolue et les probabilités réelles

a) La probabilité absolue est une borne supérieure de la probabilité réelle

Le courant J_{\rightarrow} , calculé en (11.43), ne représente pas en fait le courant des seules particules initialement piégées et en train de s'échapper vers la droite. Il contient en plus la contribution de particules arrivant vers le puits à partir de la droite, et rebroussant chemin avant d'avoir pu être piégées

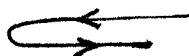


Fig. 9

J_{\rightarrow} surestime donc le courant de sortie des particules piégées et, par suite

$$W_{absolue} \geq W_{réelle} \quad (11.45)$$

$W_{absolue}$ est égale à $W_{réelle}$ si toute particule arrivant dans le puits est piégée à coup sûr. Il n'y a plus alors de particules rebroussant chemin comme sur la figure 9.

b) Limite des frictions faibles ($\gamma \ll \Omega$)

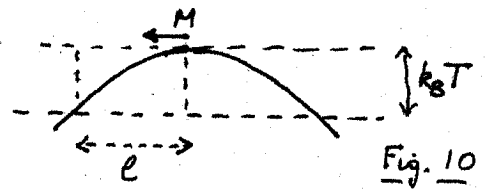
Considérons le problème de l'adsorption (Fig. 5). Une particule arrivant de la droite rebondit sur le mur de gauche et perd au cours de l'aller retour l'énergie $\delta E \approx \gamma \Delta E \Omega^{-1}$ (voir § B.3). Si $\delta E \gg k_B T$, c.-à-d. si $\gamma \gg \Omega k_B T / \Delta E$, la particule a perdu trop d'énergie (elle a quitté la zone critique d'épaisseur $k_B T$) pour pouvoir repartir tout de suite à droite. On peut considérer qu'elle a été piégée, de sorte que $W_{\text{reelle}} = W_{\text{absolue}}$. Par contre si $\delta E \ll k_B T$, la particule peut repartir tout de suite et il faut utiliser (11.40). Finalement

$$\Omega \frac{k_B T}{\Delta E} \ll \gamma \ll \Omega \quad \rightarrow \quad W_{\text{reelle}} = W_{\text{absolue}} \quad (11.46)$$

$$\gamma \ll \Omega \frac{k_B T}{\Delta E} \quad \rightarrow \quad W_{\text{reelle}} = W_{\text{absolue}} \frac{\delta E}{k_B T} \ll W_{\text{absolue}} \quad (11.47)$$

c) Limite des frictions fortes ($\gamma \gg \Omega$)

Reprenons le problème de la réaction chimique (Fig. 7), et considérons une particule au sommet M du col arrivant de la droite (Fig. 10)



Si la particule parcourt une distance l vers la gauche avant de rebrousser chemin, alors elle aura quitté la zone critique d'épaisseur $k_B T$ au voisinage du col, et on pourra considérer qu'elle est piégée car il lui sera très difficile de repasser tout de suite le col. Si Ω_M est la courbure du potentiel en M, on a $M \Omega_M^2 l^2 \approx k_B T$ et donc

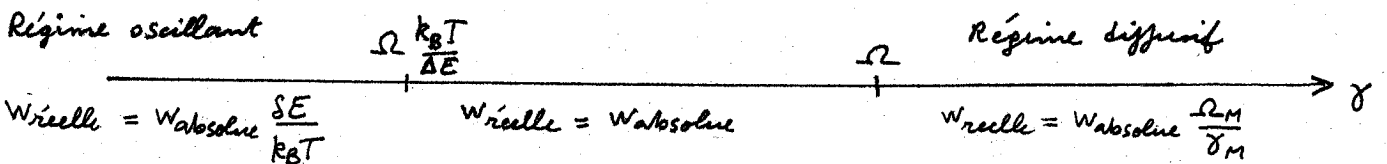
$$l \approx \frac{1}{\Omega_M} \sqrt{\frac{k_B T}{M}} \quad (11.48)$$

Or, la vitesse de la particule change de signe au bout d'un temps γ^{-1} et elle parcourt, pendant ce temps, à la vitesse thermique $\bar{v} = \sqrt{k_B T / M}$ une distance

$$\delta x = \bar{v} \gamma^{-1} = \frac{1}{\gamma} \sqrt{\frac{k_B T}{M}} \quad (11.49)$$

Comme $\gamma \gg \Omega_M$, on voit que $\delta x \approx l \frac{\Omega_M}{\gamma} \ll l$. La particule a donc tout le temps de rebrousser chemin avant d'être piégée. Son comportement est le comportement diffusif étudié au § A et $W_{\text{reelle}} \ll W_{\text{absolue}}$

Récapitulation



Références

- (1) H.A. KRAMERS *Physica*, 7, 284 (1940)
- (2) N.G. VAN KAMPEN, "Stochastic processes in physics and chemistry" North Holland, 1981
- (3) P. NOZIERES, Cours sur le mouvement brownien, Grenoble 1979
- (4) G. ICHE, P. NOZIERES, *Journal de Physique* 37, 1313 (1976)