Emission spontanée et transition quantique

J. Salmon

Conservatoire National des Arts et Métiers,
Laboratoire de Physique générale,
292 rue Saint Martin, 75003 Paris

RESUME. L'auteur introduit dans l'équation de Schroedinger un terme destiné à rendre compte de l'émission spontanée. Il obtient ainsi une expression de la fonction d'onde qui décrit de manière continue l'évolution de l'électron entre deux états quantiques avec émission de rayonnement.

ABSTRACT. The author introduces in the Schroedinger equation a term destinated to describe the spontaneous emission. So he obtains an expression of the wave function which shows continuously the evolution of the electron between two quantum states with an emission of radiation.

1) Introduction

Cet article propose une nouvelle théorie de l'émission spontanée de lumière c'est-à-dire de la transition radiative d'un électron entre deux niveaux de l'atome.

On sait qu'un traitement fin exige le recours aux méthodes de la théorie quantique des champs. Les calculs sont malheureusement très lourds. Il existe une autre voie dite semi-classique dans laquelle le courant associé à la fonction d'onde quantique engendre un champ électromagnétique calculé de manière classique. Celui-ci réagit à son tour sur l'Hamiltonien de l'équation de Schroedinger.

Cette méthode semi-classique a permis un calcul correct de l'Effet Lamb [1][2][3][4].

Auparavant M.H. Crisp et E.T. Jaynes avaient obtenu à partir des mêmes concepts une théorie de l'émission spontanée de rayonnement.

Nous décrirons leur méthode puis nous proposerons une hypothèse différente mais également semi-classique [5].

2) Méthode de Crisp et Jaynes

Considérons un atome à un électron. Cet électron a une masse m et une charge électrique $-e$. La charge du noyau est Ze. On considère deux niveaux d'énergie de l'électron E_1 et E_2 et les pulsations associées soit $\hbar$ désignant la constante de Planck divisée par 2π les quantités ω_1 et ω_2 avec

$$E_1 = -\hbar\omega_1 \tag{1}$$

$$E_2 = -\hbar\omega_2 \quad , \quad E_1 < E_2 \tag{2}$$

L'équation de Schroedinger s'écrit en désignant par Ψ la fonction d'onde, par t le temps, par $\vec{x}$ le vecteur position et par ϵ_0 la permitivité du vide

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{x}|}\Psi \tag{3}$$

On pose

$$V = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{x}|} \tag{4}$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V \tag{5}$$

A chacun des deux niveaux est associée une fonction propre de H_0 soit

$$E = E_1 \quad , \quad H_0\psi_1 = E_1\psi_1 \quad , \quad E = E_2 \quad , \quad H_0\psi_2 = E_2\psi_2 \tag{6}$$

ψ_1 et ψ_2 seront supposés réels et normés. Au prix de lourds calculs le résultat subsiste pour Ψ_j complexe.

L'expression générale de la fonction d'onde Ψ est en désignant par c_1 et c_2 des fonctions du temps t

$$\Psi = c_1 e^{i\omega_1 t}\psi_1 + c_2 e^{i\omega_2 t}\psi_2 \tag{7}$$

En reportant dans (3) on montre très simplement qu'on a soit $c_1 = 1$ $c_2 = 0$ soit $c_1 = 0$ $c_2 = 1$.

L'électron est stationnaire dans un des deux états. Il n'y a donc ni transition ni rayonnement ce qui est contraire à l'expérience.

Pour retrouver celle-ci la théorie semi-classique associe un courant à la fonction d'onde et en déduit par les formules classiques un potentiel vecteur $\vec{A}$ à partir duquel on ajoute un terme dans l'équation de Schroedinger. Crisp et Jaynes obtiennent ainsi des fonctions $c_1(t)$ et $c_2(t)$ convenables mais avant d'exposer leur calcul nous allons établir une relation utile.

Les équations (6) s'écrivent encore

$$-\hbar\omega_a\psi_a = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_a + V\psi_a \tag{8}$$

$$-\hbar\omega_b\psi_b = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_2 + V\psi_b \tag{9}$$

Multiplions la première par ψ_b et la seconde par ψ_a. Soustrayons.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\psi_b\Delta\psi_a - \psi_a\Delta\psi_b] = \hbar(\omega_b - \omega_a)\psi_a\psi_b \tag{10}$$

Posons

$$\vec{j}_{ab} = ie\frac{\hbar}{2m}[\psi_b\vec{\nabla}\psi_a - \psi_a\vec{\nabla}\psi_b] \tag{11}$$

L'équation (10) s'écrit encore

$$i\hbar\vec{\nabla}\cdot\vec{j}_{ab} = e\hbar(\omega_b - \omega_a)\psi_a\psi_b \tag{12}$$

soit

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{j}_{ab} = -ie(\omega_b - \omega_a)\psi_a\psi_b \tag{13}$$

Désignons par j_{abq} la composante courante de $\vec{j}_{ab}$. On a

$$\frac{\partial}{\partial x_q}(x_p j_{abq}) = x_p\frac{\partial j_{abq}}{\partial x_q} + j_{abq}\frac{\partial x_p}{\partial x_q} = x_p\vec{\nabla}\cdot\vec{j}_{ab} + j_{abq} \tag{14}$$

Multiplions par l'élément de volume d^3x et intégrons. Il vient

$$\int x_p\vec{\nabla}\cdot\vec{j}_{ab}d^3x = -\int j_{abp}d^3x \tag{15}$$

d'où en reportant dans (13)

$$\int j_{abp}d^3x = ie(\omega_b - \omega_a)\int x_p\psi_a\psi_b d^3x \tag{16}$$

Désignons par $\vec{d}_{ab}$ le vecteur moment dipolaire mixte

$$\vec{d}_{ab} = \int -e\vec{x}\psi_a\psi_b d^3x \tag{17}$$

Il vient

$$\int \vec{j}_{ab} d^3x = i(\omega_a - \omega_b)\vec{d} \tag{18}$$

Posons

$$\omega_1 - \omega_2 = \omega \tag{19}$$

Il vient

$$\vec{j}_{11} = \vec{j}_{22} = 0 \tag{20}$$

et

$$\vec{j}_{12} = -\vec{j}_{21} = \frac{ie\hbar}{2m}[\psi_2\vec{\nabla}\psi_1 - \psi_1\vec{\nabla}\psi_2] \tag{21}$$

$$\int \vec{j}_{12} d^3x = i\omega\vec{d} \tag{22}$$

$$\vec{d} = \int -\vec{x}\psi_1\psi_2 d^3x \tag{23}$$

A la fonction d'onde Ψ on associe le vecteur densité de courant $\vec{j}$ tel que

$$\vec{j} = \frac{ie\hbar}{2m}[\psi^+\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^+] \tag{24}$$

Puisque

$$\Psi = c_1 e^{i\omega_1 t}\psi_1 + c_2 e^{i\omega_2 t}\psi_2 \tag{7}$$

il vient

$$\vec{j} = [c_1 c_2^+ e^{i\omega t} - c_2 c_1^* e^{-i\omega t}]\vec{j}_{12} \tag{25}$$

et

$$\int \vec{j} d^3x = [c_1 c_2^+ e^{i\omega t} - c_2 c_1^+ e^{-i\omega t}]i\omega\vec{d} \tag{26}$$

Cette densité de courant génère de manière classique un potentiel vecteur $\vec{A}$. Adoptons la jauge de Coulomb et désignons par $\vec{j}_t$ la densité de courant transverse. On a

$$\vec{A} = \frac{\mu_0}{4\pi}\int |\vec{x} - \vec{x}'|^{-1}\vec{j}_t(t - \frac{|\vec{x} - \vec{x}'|}{c}, \vec{x}')d^3x' \tag{27}$$

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{A}=0 \tag{28}$$

L'influence de $\vec{j}$ ne se fait sentir qu'au voisinage de l'atome. On peut donc développer autour de t d'où

$$\vec{A}=\frac{\mu_0}{4\pi}[\int|\vec{x}-\vec{x}'|^{-1}\vec{j}_t(t,\vec{x}')d^3x']-\frac{\mu_0}{4\pi c}\frac{d}{dt}\int\vec{j}_t(t,\vec{x}')d^3x' \tag{29}$$

Or

$$\vec{j}_t=\frac{2}{3}\vec{j}=\frac{2}{3}[c_1c_2^+e^{i\omega t}-c_2c_1^+e^{-i\omega t}]\vec{j}_{12} \tag{30}$$

La dérivation de $\vec{j}$ met en compétition ωc_1 et dc_1/dt.

Désignons par θ la vie moyenne de l'électron. On a

$$\frac{dc_1}{dt}\simeq\frac{c_1}{\theta} \tag{31}$$

On a donc à comparer ω et $1/\theta$. Or ω est très grand devant θ^{-1}. On négligera donc le terme en θ^{-1}. Il vient

$$\begin{aligned}\vec{A}=&\frac{\mu_0}{4\pi}[c_1c_2^+e^{i\omega t}-c_2c_1^+e^{-i\omega t}]\int|\vec{x}-\vec{x}'|\vec{j}_{12t}(\vec{x}')d^3x'\\&+\frac{\mu_0\omega^2}{6\pi c}[c_1c_2^+e^{i\omega t}+c_1^+c_2e^{-i\omega t}]\vec{d}\end{aligned} \tag{32}$$

Ce potentiel vecteur $\vec{A}$ est introduit dans l'équation de Schroedinger qui devient

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[c_1e^{i\omega_1t}\psi_1+c_2e^{i\omega_2t}\psi_2]=\frac{1}{2m}[-i\hbar\vec{\nabla}+e\vec{A}]^2[c_1e^{i\omega_1t}\psi_1+c_2e^{i\omega_2t}\psi_2] \tag{33}$$

Le terme en A^2 est négligeable vu l'ordre de grandeur des champs et $\vec{\nabla}\cdot\vec{A}$ est nul par suite du choix de la jauge. Il vient après quelques calculs

$$\frac{dc_1}{dt}e^{i\omega_1t}\psi_1+\frac{dc_2}{dt}e^{i\omega_2t}\psi_2=-\frac{e}{m}\vec{A}\cdot[c_1e^{i\omega_1t}\vec{\nabla}\psi_1+c_2e^{i\omega_2t}\vec{\nabla}\psi_2] \tag{34}$$

Multiplions par $c_1^+e^{-i\omega_1t}\psi_1d^3x$ et intégrons, il vient

$$\begin{aligned}c_1^*\frac{dc_1}{dt}=&\left[\frac{\mu_0}{4\pi}[c_1c_2^+e^{i\omega t}-c_2c_1^+e^{-i\omega t}][\int|\vec{x}-\vec{x}'|^{-1}\vec{j}_{12t}d^3x']\right.\\&\left.+\frac{\mu_0\omega^2}{6\pi c}[c_1c_2^+e^{i\omega t}+c_1^+c_2e^{-i\omega t}]\vec{d}\right]\\&\times\left[-\frac{e}{m}\int[c_1c_1^+\psi_1\vec{\nabla}\psi_1+c_1^+c_2\psi_1\vec{\nabla}\psi_2e^{-i\omega t}]d^3x\right]\end{aligned} \tag{35}$$

Prenons la valeur moyenne sur une période. Il vient

$$\begin{aligned} c_1^+\frac{dc_1}{dt} =& \frac{\mu_0}{4\pi}c_1c_1^+c_2c_2^+\left[\int |\vec{x}-\vec{x}'|^{-1}\vec{j}_{12t}d^3x'\right]\cdot\left[-\frac{e}{m}\int \psi_1\vec{\nabla}\psi_1 d^3x\right] \\ & -\frac{\mu_0\omega^2 e}{6\pi cm}c_1c_1^+c_2c_2^+\vec{d}\cdot\int \psi_1\vec{\nabla}\psi_2 d^3x \end{aligned} \tag{36}$$

Prenons l'expression conjuguée et additionnons. Puisque

$$\vec{j}_{12}+\vec{j}^{\,*}_{12}=0 \tag{37}$$

il subsiste

$$\frac{d}{dt}(c_1c_1^+) = -\frac{\mu_0\omega^2 e}{6\pi cm}c_1c_1^+c_2c_2^+\vec{d}\cdot\int[\psi_1\vec{\nabla}\psi_2+\psi_1\vec{\nabla}\psi_2]d^3x \tag{38}$$

Or

$$\int \psi_1\psi_2 d^3x = 0 \tag{39}$$

entraîne

$$\int[\psi_1\vec{\nabla}\psi_2+\psi_2\vec{\nabla}\psi_1]d^3x = 0 \tag{40}$$

d'où

$$2\int \psi_1\vec{\nabla}\psi_2 d^3x = \int[\psi_1\vec{\nabla}\psi_2-\psi_2\vec{\nabla}\psi_1]d^3x \tag{41}$$

Or

$$\vec{j}_{12} = \frac{ie\hbar}{2m}[\psi_2\vec{\nabla}\psi_1-\psi_1\vec{\nabla}\psi_2] \tag{42}$$

Par suite

$$\int[\psi_1\vec{\nabla}\psi_2-\psi_2\vec{\nabla}\psi_1]d^3x = \frac{2mi}{e\hbar}\int \vec{j}_{12}d^3x = -\frac{2m\omega}{i\hbar}\vec{d} \tag{43}$$

L'équation (38) devient

$$\frac{d}{dt}(c_1c_1^+) = \frac{\mu_0\omega^3 d^2}{3\pi\hbar c}[c_1c_1^+c_2c_2^+] \tag{44}$$

Posons

$$\alpha = \frac{\mu_0\omega^3 d^2}{3\pi\hbar c} \tag{45}$$

$$c_1 c_1^+ = p_1 \tag{46}$$

$$c_2 c_2^+ = p_2 \tag{47}$$

Il vient

$$\frac{\alpha p_1}{dt} = dp_1 p_2 \tag{48}$$

Un calcul analogue donne

$$\frac{dp_2}{dt} = -\alpha p_1 p_2 \tag{49}$$

d'où

$$\frac{d}{dt}(p_1 + p_2) = 1 \tag{50}$$

$$p_1 + p_2 = 1 \tag{51}$$

Les solutions de (49) et (50) sont K désignant une constante

$$p_1 = \frac{Ke^{\alpha t}}{1 + Ke^{\alpha t}} \tag{52}$$

$$p_2 = \frac{1}{1 + Ke^{\alpha t}} \tag{53}$$

Malheureusement l'état initial étant

$$p_1 = 0 \quad , \quad p_2 = 1 \tag{54}$$

on a

$$K = 0 \tag{55}$$

et il n'y a pas d'évolution.

Ce résultat est décevant. La théorie n'est valable que si p_1 est à l'instant zéro positif. Aussi nous allons proposer une hypothèse inspirée par les mêmes idées mais de forme différente.

3) Une nouvelle hypothèse

La théorie semi-quantique usuelle du rayonnement dipolaire donne en fonction de la quantité b

$$b = \frac{\omega^4 e^2 d^2}{12\pi^2 \epsilon_0 c^3} \tag{56}$$

la vie moyenne

$$\theta = \frac{\hbar\omega}{b} \tag{57}$$

et l'énergie rayonnée W_R

$$W_R = b\int_0^t c_1(t')c_2(t')c_1^+(t')c_2^+(t')dt' \tag{58}$$

mais elle ne donne pas la détermination de c_1 et c_2 à partir de $c_2 = 1$ à l'instant initial.

Afin d'y parvenir nous introduisons dans l'Hamiltonien un terme proportionnel à $\hbar\omega$ soit a désignant une constante de couplage

$$H_R = a\hbar\omega \tag{59}$$

L'équation de Schroedinger devient

$$[i\hbar\partial t - (H_0 + a\hbar\omega)][c_1 e^{i\omega_1 t}\psi_1 + c_2 e^{i\omega_2 t}\psi_2] = 0 \tag{60}$$

Développons. Il vient

$$\frac{dc_1}{dt} = -ia\omega c_1 \tag{61}$$

$$\frac{dc_2}{dt} = -ia\omega c_2 \tag{62}$$

d'où G désignant une constante

$$c_1 = Ge^{-ia\omega t} \tag{63}$$

$$p_1 = G^2 \tag{64}$$

Cette solution n'est pas acceptable puisque p_1 est invariant. Il faut donc introduire une nouvelle hypothèse. Nous nous laissons guider par la nécessité de coupler l'état initial et l'état final.

Dans ce but nous introduisons un opérateur d'échange entre les coefficients c_1 et c_2 soit :

$$H_c c_1 = c_2 \tag{65}$$

$$H_c c_2 = c_1 \tag{66}$$

Le nouvel Hamiltonien s'écrit

$$H = H_0 + a\hbar\omega H_c. \tag{67}$$

L'équation d'évolution de la fonction d'onde vient

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[c_1e^{i\omega_1 t}\psi_1+c_2e^{i\omega_2 t}\psi_2]=[H_0+a\hbar\omega H_c][c_1e^{i\omega_1 t}\psi_1+c_2e^{i\omega_2 t}\psi_2] \quad (68)$$

Multiplions cette équation par $c_1^+e^{-i\omega_1 t}\psi_1 d^3x$ et intégrons. On a

$$\frac{dc_1}{dt}=-ia\omega c_2 \quad (69)$$

$$\frac{dc_2}{dt}=-ia\omega c_1 \quad (70)$$

d'où la solution correspondant à $p_2=1$ à l'instant initial

$$c_1=\sin a\omega t \quad (71)$$

$$c_2=i\cos a\omega t \quad (72)$$

$$p_1=\sin^2 a\omega t \quad (73)$$

$$p_2=\cos^2 a\omega t \quad (74)$$

Spontanément l'électron abandonne le niveau E_2 pour aboutir au niveau E_1. La transition est terminée à l'instant t_1 tel que

$$a\omega t_1=\frac{\pi}{2} \quad (75)$$

La vie moyenne est θ avec

$$\theta=\int_0^{t_1}\sin^2 a\omega t dt=\frac{\pi}{4a\omega} \quad (76)$$

ce qui détermine la constante de couplage a

$$a=\frac{\pi}{4\omega\theta} \quad (77)$$

Conclusion

Ce modèle décrit de manière continue la transition entre les deux états. La fonction d'onde a pour expression

$$\Psi=[\sin\frac{\pi t}{4\theta}e^{i\omega_1 t}\psi_1+i\cos\frac{\pi t}{4\theta}e^{i\omega_2 t}\psi_2] \quad (78)$$

Références

[1] R. Boudet, *Ann. Fond. L. de Broglie*, Vol. **14** n(1989).
[2] B. Blaive, R. Boudet, *Ann. Fond. L. de Broglie*, Vol. **14** n(1989).
[3] A. Barut, J. Kraus, *Found. Phys.*, **13-189** (1983).
[4] A. Barut, J. Van Huele, *Phys. Rev.*, **A32-3187** (1985).
[5] M. Crisp, E. Jaynes, *Phys. Rev.*, **179-1253** (1969).

(Manuscrit reçu le 21 mars 1990)