Sur les transitions quantiques

R. Boudet

Université de Provence, Pl. V. Hugo, 13331 Marseille

RESUME. Si Ψ_1, Ψ_2 sont les fonctions d'onde d'un électron lié, correspondant à deux niveaux, normalisées chacune à l'unité, l'application des pures lois de Maxwell au courant de charge associé à la fonction $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$ est suffisante pour le calcul (en particulier le calcul relativiste), en accord avec l'expérience, du coefficient de transition. Cependant, dans ce calcul, on postule la libération à chaque transition d'une énergie insécable, égale à $h\nu$, ce qui fait apparaitre la marche suivie comme une illustration de la dualité onde-corpuscule pour le photon.

ABSTRACT. Let Ψ_1, Ψ_2 be the wave functions, eachone normalized to unity, which correspond to two levels of a bound electron. The application of the pure laws of Maxwell to the charge current associated with the function $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$ is sufficient for the (relativistic) calculation, in agreement with experiments, of the transition coefficient.However, in the calculation, the liberation of an indivisible energy amount, equal to $h\nu$, for each transition, is postulated, and the adopted way appears as an illustration of the duality wave-corpuscule for the photon.

1- Dans la première partie de son article sur l'émission spontanée [1], J. Salmon démontre l'impossibilité de mettre en évidence une évolution dans le temps entre deux états 2 et 1 d'un électron lié à un atome, si l'on s'en tient aux seules lois de Schrödinger pour l'électron, de Maxwell pour le champ électromagnétique créé par l'électron, et si, dans l'équation de Schrödinger, on ne fait intervenir, en dehors du champ extérieur, que le seul champ créé par l'électron, sans addition d'un terme supplémentaire pouvant rendre compte de l'émission spontanée.

Nous rappelons brièvement le point de départ du calcul de M. Salmon. La fonction d'onde Ψ qui doit rendre compte à la fois de l'état 2, de la période transitoire 2-1 et de l'état 1, est prise sous la forme

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2, \tag{1}$$

où les $\Psi_k = \exp(i\omega_k t)\psi_k(\vec{r})$ correspondent aux niveaux 1 et 2 et sont normalisées à l'unité, et où, suivant un point de vue, en particulier de Crisp et Jaynes, les c_k sont fonctions de t, de telle façon que $c_1 = 0, c_2 = 1$ avant le début de la transition, et $c_1 = 1, c_2 = 0$ après la fin de la transition.

Un point de vue alternatif, moins satisfaisant pour l'esprit, implicitement adopté dans le calcul du décalage de Lamb et de l'émission spontanée par A.O. Barut et ses collaborateurs, consiste à supposer que $c_1 = c_2 = 1$ à tout instant. La question de la validité respective des deux points de vue en théorie semi-classique fait encore l'objet de discussions [2].

Le résultat de M. Salmon, si l'on s'en tient aux hypothèses ci-dessus sur l'électron, son champ, et leur interéaction, ne laisse la place qu'au second point de vue. Nous nous proposons d'examiner ses avantages et inconvénients.

2- Le premier point à souligner est cette propriété du champ électromagnétique:

Si le courant J^μ qui est la source du champ est nul (ou négligeable) à l'extérieur d'un voisinage de l'origine, la partie à grande distance (la seule qui est à prendre en compte pour une transition d'un électron lié) du champ dérivé du potentiel retardé, est [3]

$$\begin{aligned} \vec{E}(t,\vec{r}) &= -\frac{\partial}{\partial t}\int \frac{\vec{j}^{\perp}(ct-R,\vec{r}\,')}{cR}d\vec{r}\,', \\ \vec{B}(t,\vec{r}) &= -\frac{\partial}{\partial t}\int \frac{\vec{N}\times\vec{j}^{\perp}(ct-R,\vec{r}\,')}{cR}d\vec{r}\,', \end{aligned} \tag{2}$$

où $\vec{j}^{\perp}$ est la composante de $\vec{j} = (J^1, J^2, J^3)$ orthogonale au vecteur $\vec{N} = \vec{R}/R$, et où $\vec{R} = \vec{r}\,' - \vec{r}$, $R = |\vec{R}|$. On remarque que J^0 n'intervient pas, et que si $\vec{j}$ est indépendant de t, la partie à grande distance du champ est nulle.

3- Le courant J^μ qui est la source du champ doit satisfaire les propriétés suivantes.

Toute la “substance” qui représente la charge de l’électron, associée à l’état 2, doit se retrouver en entier associée à l’état 1 après la transition (et cela quelle que soit la nature de cette substance: probabiliste (Bohr), statistique (Landé-Ballentine), matérielle (Schrödinger)). Par suite J^μ doit être conservatif pour les trois situations successives: état 2, transition 2-1, état 1.

De plus J^μ doit correspondre à une solution de l’équation de Schrödinger, ou de Dirac, qui satisfait le problème *extérieur* pour la période qui concerne chaque état.

4- Si la fonction d’onde est de la forme

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2, \tag{3}$$

le courant associé J^μ, que nous supposerons être le courant de Dirac pour fixer les idées, est décomposé en trois parties, chacune conservative,

$$J^\mu = \bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi = J_2^\mu + J_{21}^\mu + J_1^\mu, \tag{4}$$

où

$$J_k^\mu(\vec{r}) = \bar{\Psi}_k\gamma^\mu\Psi_k, \quad \int J_k^0(\vec{r})d\vec{r} = 1, \; k = 1, 2 \tag{5}$$

et où

$$J_{21}^\mu(t, \vec{r}) = \bar{\Psi}_2\gamma^\mu\Psi_1 + \bar{\Psi}_1\gamma^\mu\Psi_2 \tag{6}$$

dépend sinusoidalement du temps.

Il convient de souligner que la fonction Ψ est normalisée non pas à l’unité, mais à son double, et cela parce qu’elle correspond à une situation où les deux états 2 et 1 sont considérés non pas simultanément (il faudrait alors diviser le second membre de (3) par $\sqrt{2}$) mais successivement (voir Addendum).

5- Le point de vue précédent contient un paradoxe. Comme

$$\int J_{21}^0(t, \vec{r})d\vec{r} = 0 \tag{7}$$

la période de temps (indéterminée) correspondant à la transition 2-1 n’a pas “d’existence légale”. Pourtant c’est la seule qui est à même de manifester son existence.

En effet, nous ne pouvons savoir ce qui arrive à un électron lié à un atome que par l’intermédiaire de la partie à grande distance du champ qu'il crée. Cette partie est nulle pour le champ crée par les courants J_1^μ, J_2^μ qui ne dépendent pas de t, ce qui explique que l'électron ne rayonne pas à *grande distance* pendant un état stationnaire.

Mais la partie à grande distance du champ ne fait intervenir que la composante spatiale du courant, et la nullité de l'intégrale (7) n'est nullement un obstacle à l'existence d'une radiation pendant la transition.

Ainsi ce qui pouvait apparaitre comme un paradoxe n'est-il en réalité que la complémentarité des rôles joués par les périodes des états stationnaires et celles des transitions entre ces états.

6- Un argument contre le choix de la forme (3) donnée à Ψ est le suivant. Ψ est une combinaison linéaire de solutions de l'équation de Dirac dans le problème extérieur. Ainsi, c'est une solution de cette équation, mais le champ radié n'intervient pas dans cette solution, contrairement à la marche adoptée par Crisp et Jaynes (et d'autres auteurs [4]).

Un corollaire de ce choix est le fait que la durée de la transition ne peut être calculée. Par voie de conséquence la différence $h\nu = E_2 - E_1$ des énergies des deux états ne peut être retrouvée par un calcul couplant l'équation de l'électron et celle du champ qu'il crée.

Le fait qu'à chaque transition une énergie égale à $h\nu$ est rayonnée dans une émission spontanée doit donc être *postulé* et non calculé, de la même manière qu'elle est postulée et non calculée, à ma connaissance, dans tout modèle, pour une émission stimulée ou une absorption. La durée moyenne θ de l'émission se détermine alors comme l'inverse du nombre A d'émissions par seconde, ou coefficient d'Einstein, lui-même calculé par la formule

$$h\nu \times A = F \tag{8}$$

où F est le flux par seconde du vecteur de Poynting du champ créé par le courant (6) à travers une sphère de grand rayon dont le centre coincide avec celui de l'atome (voir "Quantum Mechanics", Ch. X, Schiff).

7- L'impossibilité pour la théorie semi-classique de calculer, sans hypothèse additionnelle, l'évolution de la fonction d'onde dans une transition, peut donner du crédit à la Théorie Quantique des Champs (TQC). Au fond, débarassée de son formalisme algébrique qui est inacceptable (par son association, contradictoire avec la théorie de l'électron qui lui a servi de modèle, de la constante $\hbar$ et du nombre i, qui dans la théorie de l'électron admet une interprétation géométrique bien précise, incompatible avec le caractère invariant dans tout changement de repère du champ électromagnétique), la TQC n'est pas, du point de vue des pures lois de Maxwell, une mauvaise théorie quand elle s'applique à un champ électromagnétique qui peut être confondu avec une onde plane monochromatique, le "photon $\vec{k}$", satisfaisant des conditions périodiques aux limites.

La méthode des perturbations, appliquée "photon $\vec{k}$" par "photon $\vec{k}$", à l'équation de l'électron, pour toutes les valeurs de l'énergie comprises entre E_2 et E_1, pourrait faire espérer un calcul de l'évolution de la fonction Ψ. Mais ce qui fait atteindre à la TQC sa limite, en dehors des difficultés analytiques qui surviennent quand on superpose une infinité d'ondes planes, c'est qu'elle ne peut pas faire directement la séparation du champ en parties à petite et grande distance. Tout ce qu'elle peut utiliser, comme point commun avec cette dernière partie, c'est l'élimination, qui, à ma connaissance est en TQC postulée et non démontrée, du photon longitudinal. Cette élimination correspond en théorie classique du champ à la tranversalité du courant, elle, rigoureusement démontrée à partir des pures lois de Maxwell, qui apparait dans l'expression (2) du champ à grande distance.

Nous avions signalé en Réf. [5] que l'incontournable (en TQC) opération de renormalisation dans le calcul du décalage de Lamb (qui revient en fait à ne retenir que la partie à grande distance du champ) conduit la TQC à introduire la constante $\hbar$ dans le potentiel statique, en $1/r$, par un artifice surprenant. Nous en précisons le détail. On écrit

$$\begin{aligned} &\frac{1}{r} = \frac{1}{r} \times \frac{\pi}{2} \times \frac{2}{\pi}, \\ &\frac{\pi}{2} = \int_0^\infty \frac{\sin\, x}{x} dx = \int_0^\infty \frac{\sin(ur)}{u} du = \frac{1}{\hbar c} \int_0^\infty \frac{\sin(kr/\hbar c)}{k/\hbar c} dk, \end{aligned} \tag{9}$$

(voir Réf. [6]) ce qui revient à introduire la constante de Planck dans $\pi/2$ sans l'introduire dans $2/\pi$ et constitue un pur non-sens.

8- Utilisant les solutions de Darwin de l'équation de Dirac pour le potentiel extérieur central, la forme (3) du Ψ associé à deux états, le champ (2) créé par le courant de Dirac (6), et la relation (8), nous avons calculé le coefficient d'Einstein A, généralisant ainsi le calcul non relativiste mentionné dans l'ouvrage de Schiff. Nos résultats recoupent exactement ceux obtenus, par une autre voie, en Réf. [7], et sont en parfait accord avec l'expérience.

Jusqu'à l'obtention de données expérimentales plus fines contredisant ces résultats, il n'y a donc pas lieu, à notre avis, de mettre en doute la démarche suivie dans ce calcul de l'émission spontanée, compte tenu de sa rectitude mathématique (les intégrales (2) convergent pour le courant (6)!) et de sa conformité aux lois de la Relativité, tant du point de vue de la théorie de l'électron que du champ électromagnétique. Le calcul du décalage de Lamb réalisé par A.O. Barut et ses collaborateurs et la réalité du courant (6) attestée dans les expériences de Zeeman et Paschen-Back, ajoutent au crédit de la forme (3) donnée au Ψ associé à deux états.

Conclusion. Cependant, il faut bien reconnaitre que la démarche suivie dans notre calcul relativiste des coefficients de transition laisse sur un sentiment d'insatisfaction. Elle ne précise en rien le mécanisme de cession au champ électromagnétique de l'énergie de l'électron quand il passe d'un état à un autre.

Mais ce mécanisme peut-il vraiment être décrit? *Et l'impossibilité éventuelle de sa description ne serait-elle pas liée à la nature insécable de l'énergie du photon;* ne nous placerait-elle pas au coeur même du mystère de la Mécanique Quantique?

En fait, la formule (8) traduit l'association du photon d'énergie $h\nu$ et du champ qui lui est complémentairement associé dans le flux du vecteur de Poynting. Le deuxième et le premier membres de cette relation expriment respectivement l'aspect ondulatoire et l'aspect corpusculaire de la lumière (ou plutôt de son interéaction avec la matière) et cette relation est suffisante, dans les limites actuelles des données expérimentales, pour calculer les coefficients de transition dans l'émission spontanée. Sous réserve d'aménagements pour tenir compte du décalage de Lamb des niveaux d'énergie, le point de vue adopté pour réaliser ce calcul est peut-être le seul qui soit compatible avec les lois de la Mécanique Quantique.

Nota. Qu'est-ce que l'énergie $h\nu$ d'un photon? C'est la discontinuité que subit la composante temporelle de l'impulsion-énergie p^μ de l'électron quand il passe d'un état à un autre. Et qu'est-ce, géométriquement, que le vecteur p^μ? Nous avons montré [8] qu'on pouvait écrire, pour l'électron de Dirac

$$p^\mu = \frac{\hbar c}{2}\omega^\mu - eA^\mu \tag{10}$$

où A est le potentiel électromagnétique agissant sur l'électron, et où le quadrivecteur ω représente la rotation infinitésimale du mouvement sur lui-même d'un plan $P(x)$, du genre espace, déterminé par deux vecteurs n_1, n_2 orthonormaux, orthogonaux chacun, en chaque point

x de l'espace-temps, aux vecteurs v et s, vitesse et spin d'univers de l'électron.

La rotation d'un angle χ_0 indépendant de x des vecteurs n_1, n_2 dans le plan $P(x)$ constitue une invariance de jauge de première espèce. Avec un angle χ variable on obtient l'invariance de jauge électromagnétique, à condition d'ajouter au potentiel A_μ le quadrivecteur $(\hbar c/2e)\partial_\mu\chi$ qui constitue un "photon de jauge"(voir Réf. [9]). On remarque que la notion de photon se situe au niveau du potentiel électromagnétique et de l'impulsion-énergie de l'électron.

Afin de retrouver une formule de T.Takabayasi ([10], éq. (II)) exprimant le rotationnel de p_μ, nous avions calculé [11] le rotationnel $l_{\nu\mu} = \partial_\nu\omega_\mu - \partial_\mu\omega_\nu$ d'une telle rotation infinitésimale ω, d'un plan $P(x)$ de l'espace-temps. Or dans une étude [12] consacrée, non pas à l'électron, mais aux monopoles (cordes) de Dirac, F. Gliozzi introduit la rotation infinitésimale ω d'un plan $P(x) = (n_1, n_2)$ comme exprimant d'une façon très générale ce qu'il appelle un potentiel de jauge électromagnétique, et calcule son rotationnel $l_{\nu\mu}$ retrouvant ainsi, indépendemment, la formule de Takabayasi, et, avec l'interprétation cinématique précise que nous lui avions donnée, notre formule de la Réf. [11].

Or, une remarque de F. Gliozzi est la suivante. Le rotationnel $l_{\nu\mu}$ peut s'exprimer en fonction des vecteurs d'univers v et s orthogonaux à $P(x)$. Il ne dépend donc que de la direction de ce plan et non pas de sa rotation propre, déterminée par la donnée de la direction des vecteurs n_1, n_2 dans ce plan. Il en résulte que des discontinuités, notamment de nature topologique, affectant la rotation infintésimale ω peuvent disparaitre quand on prend le rotationnel de ω.

Oubliant l'application exclusive aux monopoles que F. Gliozzi donne à ses remarques, on peut se demander si, pour le photon, la dualité onde-corpuscule n'exprimerait pas la propriété géométrique par laquelle une discontinuité du potentiel-impulsion $(\hbar c/2)\omega$ disparaitrait quand on passe à son rotationnel, c'est à dire le champ. Cette idée est analogue à celle de Bohm, par laquelle les équations de la mécanique quantique sont suffisantes pour expliquer la dualité, la notion de corpuscule coincidant avec des singularité des solutions de ces équations. Mais ici il s'agirait de singularités de nature géométrique, tout à fait différentes de celles envisagées par Bohm, et la dualité onde- corpuscule serait plutôt à rapprocher de la complémentarité des aspects globaux et locaux propres à la géométrie des plans dans l'espace-temps.

Addendum. Dans notre étude [5] sur le décalage de Lamb nous avions associé à chaque couple d'états, une fonction Ψ normalisée à l'unité, ce qui nous a fait considérer des courants de la forme (6) divisés par 2. Le facteur 1/4 qui s'en déduit dans le résultat final était compensé par le fait que dans notre inventaire de l'énergie, les transitions vers les états d'énergies supérieures étaient prises en compte, en supplément aux transitions vers les états d'énergies inférieures (d'où un facteur 2), et que l'énergie utilisée dans l'inventaire était l'énergie d'interéaction et non sa moitié (voir Réf. [13], Ann. A). Ce point de vue qui fait dépendre le décalage de Lamb aussi bien des absorptions que des émissions n'est pas partagé par la plupart des auteurs. En Réf. [14] nous avons repris le calcul de la formule du décalage, qui dans le résultat final reste inchangée, mais, conformément à l'usage, nous avons fait dépendre le décalage de la seule émission spontanée. Dans ce deuxième point de vue, la fonction Ψ est normalisée au double de l'unité comme dans la relation (3).

Références

[1] J. Salmon, Ann. Fond. L. de Broglie, **15**, 359 (1990).
[2] W.T. Grandy, "The explicit nonlinearity of quantum electrodynamics". A.O. Barut, "On the mathematical procedures of selffied quantum electrodynamics". in "The Electron 1990 Workshop" (à paraître).
[3] H. Krüger, "Elektrodynamik", Universität Kaiserslautern, Allemagne (1988).
[4] G. Lanyi, Phys. Rev. D, **8**, 3413 (1973).
[5] R. Boudet, Ann. Fond. L. de Broglie, **14**, 119 (1989).
[6] R. Boudet,"The role of Planck's constant in the Lamb shift standard formulas", in "New Frontiers in quantum electrodynamics and quantum optics", A.O. Barut Ed., Plenum Pub. Corp., N.Y., pp. 443-450 (1990).
[7] A.O. Barut et Y.I. Salamin, Phys. Rev. A, **37**, 2284 (1988).
[8] R. Boudet, C.R.A.S., **272** A, 829 (1971).
[9] R. Boudet, Ann. Fond. L. de Broglie, **13**, 105 (1988).
[10] T. Takabayasi, Suppl. Prog. Theor. Phys. **4**, 1 (1957).
[11] R. Boudet et P. Quilichini, C.R.A.S., **268** A, 725 (1969).
[12] F. Gliozzi, Nucl. Phys. B, **141**, 379 (1978).
[13] B. Blaive et R. Boudet, Ann. Fond. L. de Broglie, **14**, 147 (1989).
[14] R. Boudet, Found. Phys. Lett., **3**, 311 (1990).

(Manuscrit reçu le 5 février 1991)