

Introduction

Peut-on contrôler l'équilibre thermodynamique d'un échantillon de matière par une lumière bien choisie? Depuis les articles fondateurs d'Einstein (1917) et de Kastler (1950), cette question a accompagné le développement de la physique atomique et de l'optique quantique. À partir des années 1970, le développement des sources laser accordables est venu lui donner un renouveau avec notamment les propositions de refroidissement de gaz d'atomes neutres ou d'ions par Hänsch & Schawlow (1975) et Wine-land & Dehmelt (1975). Les réponses qui ont été apportées sont allées bien au delà des prévisions initiales les plus optimistes. Le refroidissement de particules atomiques par laser permet d'abaisser la température d'un gaz depuis la température ambiante (300 K) jusqu'à un domaine compris entre le millikelvin et le microkelvin, voire même en dessous dans certains cas particuliers (figure 1).

Les atomes froids sont omniprésents dans les expériences de métrologie du temps et des fréquences, ainsi que dans la plupart des mesures de haute précision en physique atomique. Le refroidissement radiatif a également ouvert la voie à la production de gaz quantiques comme les condensats de Bose-Einstein, dans lesquels un grand nombre de particules s'accumulent dans un seul état microscopique. Il permet en effet de s'approcher de la limite où la longueur d'onde thermique des particules du gaz, $\lambda_T \sim h/M\bar{v}$, où h est la constante de Planck, M la masse d'un atome et \bar{v} la vitesse d'agitation thermique résiduelle, devient comparable à la distance entre particules. Notons toutefois que le refroidissement radiatif ne permet en général pas d'atteindre directement le seuil de condensation. Il est secondé par une phase de refroidissement par évaporation, qui permet d'abaisser la température d'encore un ou deux ordres de grandeur (figure 1).

Le refroidissement radiatif a été appliqué à de nombreuses espèces atomiques, plus d'une trentaine à ce jour (figure 2). Le seul élément déter-

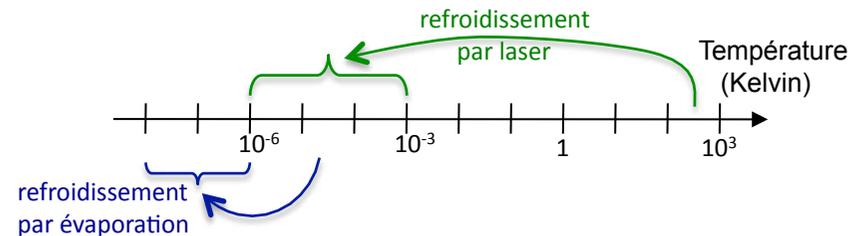


FIGURE 1. Échelle de température indiquant le gain apporté par le refroidissement de gaz d'atomes par laser, ainsi que le gain supplémentaire obtenu grâce au refroidissement par évaporation.

minant est de disposer de sources laser continues suffisamment fiables, intenses (et relativement bon marché) pour exciter de manière résonante une transition atomique. Le but de ce cours est de présenter l'évolution des principales idées à la base du refroidissement radiatif, et de discuter leurs performances et leurs limites. Nous ne chercherons pas à décrire ici toutes les méthodes qui ont été proposées, mais nous nous concentrerons sur quelques principes importants :

- L'effet Doppler, qui permet d'obtenir une réponse de l'atome à l'onde lumineuse qui dépend de la vitesse atomique.
- Le mécanisme Sisyphe, qui oblige l'atome à escalader plus de collines de potentiel qu'il n'en descend.
- L'utilisation d'états noirs, qui consiste à cacher les atomes dans l'obscurité, c'est-à-dire à les accumuler dans des états où ils sont effectivement découplés de la lumière.

En préliminaire, il est probablement utile de préciser ce que nous en-

CLASSIFICATION PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS CHIMIQUES

FIGURE 2. Espèces atomiques ayant été refroidies par laser (ou en passe de l'être pour les cercles pointillés) [le tableau périodique a été obtenu sur wikipedia].

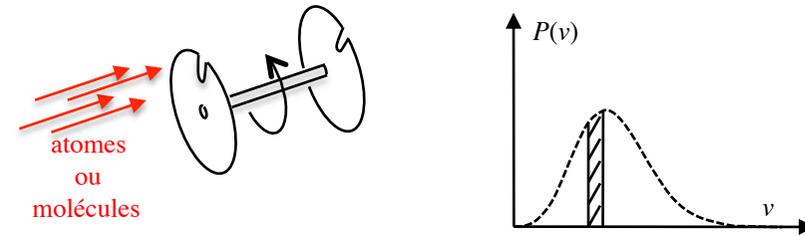


FIGURE 3. Sélection en vitesse d'un jet atomique ou moléculaire, au moins d'un système de roues dentées tournantes. Il n'y a pas d'augmentation de la densité d'une classe de vitesse donnée.

tendrons par *refroidissement*, une notion parfois subtile qui peut concerner un filtrage, un abaissement de température ou encore une augmentation de densité dans l'espace des phases.

Donnons deux exemples pour fixer les idées. Partant d'un jet atomique avec une distribution en vitesse de grande largeur Δv , on peut filtrer une tranche de largeur $\delta v \ll \Delta v$ par un système de roues dentées (figure 3). On n'a pas refroidi le gaz à proprement parler mais on l'a séparé en deux parties, l'une constituée de la tranche de vitesse désirée qui a été transmise par la roue dentée, l'autre qui s'est collée sur les parois de cette roue. Ce filtrage est très différent de l'accumulation de tous les atomes du jet dans la tranche δv , comme cela est fait dans les expériences de ralentissement par pression de radiation. Le gain en brillance peut être de plusieurs ordres de grandeur dans le deuxième cas.

Un deuxième exemple va nous permettre de distinguer *abaissement de température* et *augmentation de la densité dans l'espace des phases*. Considérons une assemblée de particules de masse M dans un piège harmonique 1D de pulsation ω , à l'équilibre thermodynamique à température T :

$$\frac{1}{2}M\omega^2\Delta x^2 = \frac{1}{2}M\Delta v^2 = \frac{1}{2}k_B T, \quad (1)$$

où Δx et $\Delta v = \omega \Delta x$ sont les écart-types des distributions en position et en vitesse. Supposons qu'on « ouvre » ce piège en modifiant sa pulsation. Cette ouverture, si elle se fait suffisamment lentement, maintient l'équilibre thermique avec une température T' qui se déduit de T via le théorème

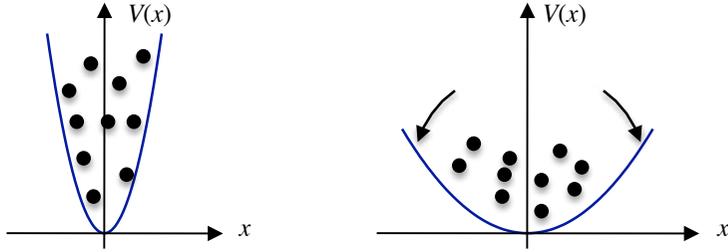


FIGURE 4. Ouverture adiabatique d'un piège harmonique, la pulsation passant de ω à $\omega' < \omega$.

adiabatique :

$$\frac{T'}{\omega'} = \frac{T}{\omega} \Rightarrow T' = T \frac{\omega'}{\omega} < T. \quad (2)$$

On a donc bien un refroidissement. On trouve pour les nouvelles largeurs en position et en vitesse :

$$\Delta x' = \Delta x \left(\frac{\omega}{\omega'} \right)^{1/2}, \quad \Delta v' = \Delta v \left(\frac{\omega'}{\omega} \right)^{1/2} \quad (3)$$

On a donc divisé la largeur de la distribution en vitesse par le facteur $(\omega/\omega')^{1/2}$, et multiplié la largeur de la distribution en position par le même facteur. La densité dans l'espace des phases, proportionnelle à $(\Delta x \Delta v)^{-1}$, est inchangée dans ce processus : on a simplement échangé une bonne connaissance de la position et une mauvaise connaissance de la vitesse par son inverse.¹

Sur ce deuxième exemple, on voit qu'un refroidissement n'entraîne pas forcément une augmentation de la densité dans l'espace des phases, ni – pour parler en termes quantiques – une augmentation de la population d'un état quantique individuel. Or cette augmentation est essentielle pour de nombreuses expériences de refroidissement d'atomes par laser, puisqu'un des buts de ces expériences est de se rapprocher, voire d'atteindre le seuil de dégénérescence quantique et la condensation de Bose–Einstein.

1. Les opticiens reconnaîtront dans ce qui précède l'action d'une lentille sur un faisceau lumineux, la conservation de la densité dans l'espace des phases devenant la conservation de l'étendue optique.

En fait, pour un système de N particules indépendantes, on peut facilement montrer que cette augmentation ne peut jamais être obtenue lors d'une évolution hamiltonienne du gaz. Le raisonnement est simple (Ketterle & Pritchard 1992); partons de l'opérateur densité $\hat{\rho}$ à une particule caractérisant l'état du gaz. Cet opérateur peut être diagonalisé et ses valeurs propres π_1, π_2, \dots , toutes réelles positives ou nulles avec $\sum_j \pi_j = 1$, nous donnent les probabilités d'occupation des différents états quantiques. Supposons que l'évolution du gaz de particules entre t_i et t_f soit régie par l'hamiltonien

$$\hat{H}(t) = \sum_{n=1}^N \hat{H}^{(n)}(t), \quad (4)$$

où $\hat{H}^{(n)}$ est l'hamiltonien de la $n^{\text{ème}}$ particule. À l'instant t_f , l'opérateur densité à une particule sera simplement

$$\hat{\rho}(t_f) = \hat{U}(t_i \rightarrow t_f) \hat{\rho}(t_i) \hat{U}^\dagger(t_i \rightarrow t_f), \quad (5)$$

où l'opérateur d'évolution à une particule $\hat{U}(t_i \rightarrow t_f)$ se calcule à partir de $\hat{H}^{(n)}$. Il est inutile ici de disposer de l'expression explicite de \hat{U} . Le seul point important est que cet opérateur est unitaire : les valeurs propres de $\hat{\rho}(t_f)$ sont toujours identiques aux valeurs propres de $\hat{\rho}(t_i)$. On ne peut donc pas espérer accumuler des particules dans un état donné via un processus purement hamiltonien (comme l'ouverture du piège de la figure 4) quand ces particules sont indépendantes. On peut tout au plus échanger les populations entre deux états différents, l'exemple le plus simple étant le pulse π de la résonance magnétique.

L'examen des hypothèses nécessaires pour arriver à cette conclusion quelque peu négative nous donne la démarche à suivre pour progresser :

(i) Nous avons considéré un processus hamiltonien ; le système n'est pas nécessairement isolé puisque \hat{H} peut dépendre du temps, mais nous avons fait l'hypothèse que notre assemblée de N particules n'était pas couplée à un autre système quantique qui pourrait jouer le rôle de réservoir. Or, c'est précisément ce qui va se produire dans le refroidissement d'atomes par laser. L'atome est couplé à l'ensemble des modes du champ électromagnétique, notamment via les processus d'émission spontanée : l'évolution de la matrice densité réduite de l'atome n'est donc pas hamiltonienne et on peut très bien augmenter une de ses valeurs propres au détriment des autres.

(ii) Nous avons considéré un système de particules indépendantes. Si les particules interagissent entre elles, alors il est possible de changer l'occupation des niveaux d'énergie à une particule par une variation appropriée de l'hamiltonien $\hat{H}(t)$. Il est en particulier possible de produire un condensat de Bose-Einstein en modifiant uniquement le potentiel confinant les N particules, sans introduire de couplage avec un système quantique extérieur, ni évaporer de particules. L'entropie totale du gaz est inchangée (voire augmentée si le processus est irréversible) mais le nombre de particules occupant le niveau fondamental du piège peut néanmoins croître de manière spectaculaire lors de cette transformation. Nous en verrons un exemple plus loin.

Le déroulement du cours sera le suivant.

- Le chapitre 1 sera consacré à la démarche suivie par Einstein dans ses articles fondateurs (Einstein 1916; Einstein 1917). Il y montre comment le mouvement d'atomes couplés au rayonnement électromagnétique est analogue au mouvement brownien, et pourquoi on obtient ainsi une thermalisation des atomes grâce à l'effet Doppler.
- Le deuxième chapitre sera lui aussi consacré au refroidissement Doppler, mais avec des lasers ; nous y décrirons également son équivalent dans l'espace des positions, le piège magnéto-optique, et nous rencontrerons la première signature d'une interaction effective atome-atome créée par la lumière.
- Dans le troisième chapitre, nous étudierons la possibilité de manipuler des atomes à raie étroite et nous verrons apparaître la possibilité d'accumuler les atomes dans des classes de vitesses peu couplées à la lumière.
- Cette notion d'accumulation d'atomes « dans l'obscurité » sera approfondie au chapitre 4, avec l'utilisation d'états noirs et la discussion des lois statistiques très particulières (lois de Lévy) qui peuvent apparaître.
- Le chapitre 5 sera consacré à l'effet Sisyphé, qui est à l'œuvre dans la plupart des expériences de refroidissement et conduit très simplement à des distributions en vitesse limitées seulement par le recul associé à un seul photon. Nous nous intéresserons en particulier aux développements récents concernant les « mélasses grises », qui permettent d'étendre le concept de refroidissement Sisyphé à des espèces

atomiques non concernées jusqu'ici.

- Enfin le chapitre 6 sera consacré au refroidissement par bande latérale, et nous donnera l'occasion de faire le point sur la densité dans l'espace des phases maximale qu'on peut espérer atteindre dans ce type d'expérience de refroidissement radiatif.

Insistons encore une fois sur le fait que notre but n'est pas de faire une revue exhaustive des tous les dispositifs qui ont été proposés ou étudiés depuis les articles initiaux de Hänsch & Schawlow (1975) et de Wineland & Dehmelt (1975). C'est plutôt de dégager les principes des mécanismes actuellement utilisés et de les illustrer avec des expériences récentes (en espérant ainsi stimuler l'exploration de nouvelles voies...)

Références

- Einstein, Albert (1916), « Strahlungs-emission und absorption nach der quantentheorie », in *Deutsche Physikalische Gesellschaft* 18, pp. 318–323.
- Einstein, Albert (1917), « Zur Quantentheorie der Strahlung [traduction française par F. Balibar, B. Jech et O. Darrigol] », in *Physikalische Zeitschrift* 18, p. 121.
- Hänsch, T. W. & A. L. Schawlow (1975), « Cooling of gases by laser radiation », in *Optics Comm.* 13, p. 68.
- Kastler, Alfred (1950), « Quelques suggestions concernant la production optique et la détection optique d'une inégalité de population des niveaux de quantification spatiale des atomes. Application à l'expérience de Stern et Gerlach et à la résonance magnétique », in *J. phys. radium* 11.6, pp. 255–265.
- Ketterle, W. & D. E. Pritchard (1992), « Atom Cooling By Time-Dependent Potentials », in *Phys. Rev. A* 46, pp. 4051–4054.
- Wineland, D. J. & H. Dehmelt (1975), « Proposed $10^{14} \Delta\nu < \nu$ laser fluorescence spectroscopy on TI^+ mono-ion oscillator III », in *Bulletin of the American Physical Society* 20, p. 637.

Chapitre 1

Atomes et lumière en équilibre thermique

Sommaire

1	Einstein 1916 : absorption et émission	2
1-1	Processus élémentaires et état d'équilibre	2
1-2	Contraintes sur les coefficients d'Einstein	4
2	L'approche quantique	4
2-1	Densité d'énergie et nombre de photons par mode	5
2-2	Transition atomique modèle	5
2-3	Utilisation de la règle d'or de Fermi	5
3	Le mouvement brownien	7
3-1	L'approche « équation de Langevin »	7
3-2	L'approche « équation de Fokker–Planck »	8
3-3	Diffusion spatiale	10
4	Einstein 1917 : thermalisation du gaz	10
4-1	Diffusion en impulsion de l'atome	11
4-2	Force de friction agissant sur l'atome	11
4-3	Équilibre thermique ?	12
4-4	Ordres de grandeur et critère de validité	13

Le point de départ de ce cours va être le rayonnement du corps noir, c'est-à-dire le rayonnement électromagnétique émis par un corps matériel en équilibre thermodynamique avec son environnement. La distribution spectrale de ce rayonnement est une loi universelle qui ne dépend que de la température du corps. Elle est donnée par la loi de Planck, qui l'a proposée en 1900 :

$$\rho(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}, \quad (1.1)$$

où $\rho(\omega) d\omega$ représente l'énergie électromagnétique par unité de volume correspondant à un rayonnement de pulsation comprise entre ω et $\omega + d\omega$.

Une version « moderne » (et complètement équivalente comme nous allons le voir dans ce qui suit) de cette loi consiste à se donner un volume de quantification de taille finie et à poser que le nombre moyen de photons dans un mode de pulsation ω est donné par la loi de Bose–Einstein de potentiel chimique nul

$$\bar{n}(\omega, T) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}. \quad (1.2)$$

Considérant la loi de Planck (1.1) acquise, Einstein (1917) va étudier comment un rayonnement avec cette densité spectrale d'énergie va imposer sa température à une collection d'atomes. Pour cela, il va introduire la notion de force de friction causée par la lumière sur un atome en mouvement, force de friction en tout point identique à celle proposée près de 60 ans plus tard par Hänsch & Schawlow (1975) et à l'œuvre dans les mélasses

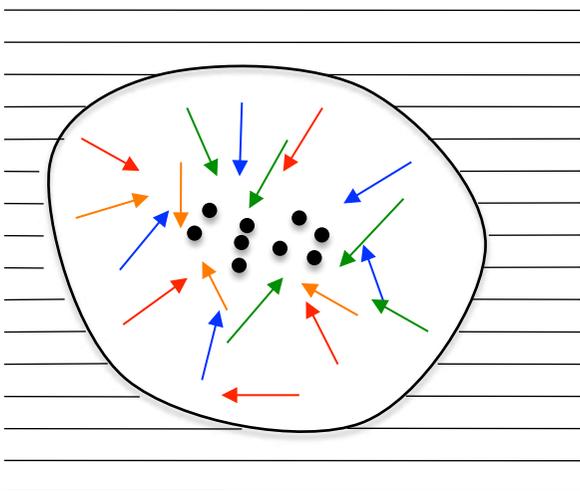


FIGURE 1.1. Le problème considéré par Einstein : une assemblée d’atomes indépendants est éclairée par le rayonnement d’un corps noir à température T . Cette assemblée d’atomes va-t-elle se thermaliser avec le corps noir, aussi bien en ce qui concerne ses degrés de libertés internes qu’externes ?

Doppler utilisées dans les laboratoires d’aujourd’hui. De plus, le raisonnement d’Einstein est également identique à celui que nous serons amenés à utiliser pour traiter du mouvement des atomes dans des faisceaux lumineux : il s’agit d’arguments fondés sur la notion de mouvement brownien, que nous allons également passer en revue dans ce chapitre.

1 Einstein 1916 : absorption et émission

En 1916, alors qu’il vient de publier sa théorie de la Relativité Générale, Einstein revient vers l’étude des processus d’échanges d’énergie et d’impulsion entre atomes et rayonnement (Einstein 1916). Pour approfondir ce thème qu’il avait abordé dès 1905 dans son étude de l’effet photoélectrique, il va prendre comme fil directeur l’atteinte de l’équilibre thermodynamique.

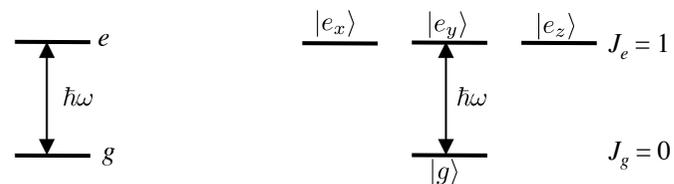


FIGURE 1.2. Les deux modèles de transition atomique considérés dans ce chapitre. À gauche, atome à deux niveaux ; à droite, transition $J_g = 0 \leftrightarrow J_e = 1$ permettant de prendre correctement en compte les phénomènes liés à la polarisation de la lumière. On prendra comme base du niveau excité les états $|e_j\rangle$ dont la projection du moment cinétique sur l’axe j est nulle ($j = x, y, z$).

Einstein considère une collection d’atomes éclairés par un rayonnement de type corps noir à température T (figure 1.1). Son but est de modéliser la manière selon laquelle l’atome et le rayonnement peuvent échanger de l’énergie. La seule contrainte qu’il s’impose est la cohérence de la physique statistique : il faut que la répartition des populations moyennes des différents niveaux d’énergie de l’atome soit une distribution de Boltzmann avec la même température T . Dans un modèle d’atome à deux niveaux, avec un état fondamental g et un état excité e séparés une énergie $\hbar\omega_A$ (figure 1.2, gauche), le rapport des populations $P_{g,e}$ doit être tel que :

$$\frac{P_e}{P_g} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega_A}{k_B T}\right). \tag{1.3}$$

1-1 Processus élémentaires et état d’équilibre

Pour expliquer comment un tel état d’équilibre peut être obtenu, Einstein étudie la compétition entre processus d’absorption de photons¹ et processus d’émission :

- Si l’atome est dans l’état fondamental, il peut absorber un photon et passer dans l’état excité (figure 1.3). Einstein postule que la probabilité pour que ce processus se produise pendant un intervalle de temps

1. Einstein n’utilise pas le terme de photon, qui ne sera introduit que bien plus tard (1926) par Lewis.

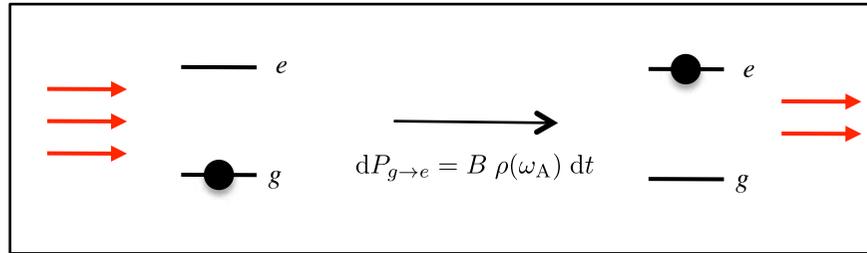


FIGURE 1.3. Processus d'absorption

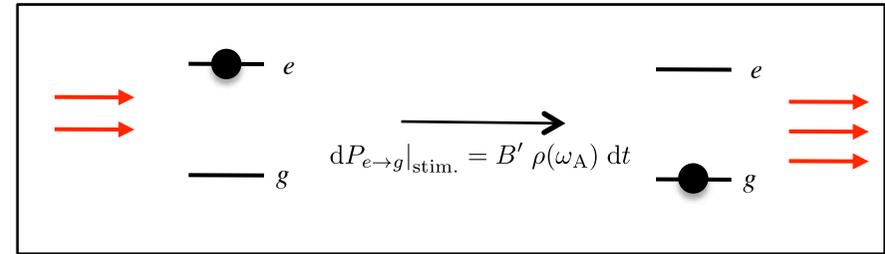


FIGURE 1.5. Processus d'émission stimulée.

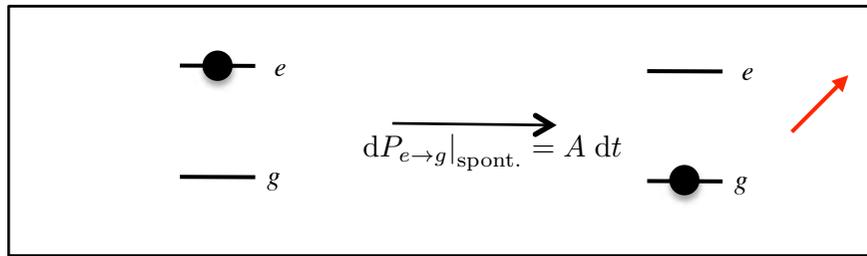


FIGURE 1.4. Processus d'émission spontanée : le photon est émis dans une direction aléatoire.

l'infinitésimal dt est proportionnelle à dt et à la densité d'énergie du rayonnement ρ , prise à la fréquence² de résonance atomique ω_A :

$$dP_{g \to e} = B \rho(\omega_A) dt, \tag{1.4}$$

où B est un coefficient indéterminé à ce stade.

- Si l'atome est dans l'état excité, il peut tomber sur l'état fondamental en émettant un photon. La probabilité pour que cette émission se produise pendant dt est la somme de deux termes. D'une part, même si aucun photon n'est initialement présent, l'atome peut passer de e à g

2. Nous utiliserons fréquemment la dénomination usuelle *fréquence* pour la quantité ω , bien qu'il s'agisse en réalité d'une *pulsation*, la fréquence étant $\omega/2\pi$.

par émission spontanée (figure 1.4) avec la probabilité :

$$dP_{e \to g}|_{spont.} = A dt, \tag{1.5}$$

c'est-à-dire une loi qui, comme Einstein le remarque, est identique à celle de la décroissance radioactive. D'autre part, l'émission peut être stimulée par le rayonnement déjà présent à la fréquence atomique, avec une probabilité

$$dP_{e \to g}|_{stim.} = B' \rho(\omega_A) dt. \tag{1.6}$$

L'évolution des probabilités $P_{g,e}$ est alors donnée par une équation de taux :

$$\frac{dP_g}{dt} = -B \rho(\omega_A) P_g + [A + B' \rho(\omega_A)] P_e, \quad P_g + P_e = 1, \tag{1.7}$$

qui entraîne que ces probabilités tendent vers l'état stationnaire

$$P_g = \frac{A + B' \rho(\omega_A)}{A + (B + B') \rho(\omega_A)}, \quad P_e = \frac{B \rho(\omega_A)}{A + (B + B') \rho(\omega_A)}, \tag{1.8}$$

avec le temps caractéristique

$$\tau_{int.} = [A + (B + B') \rho(\omega_A)]^{-1}. \tag{1.9}$$

L'indice "int." signifie qu'il s'agit ici du temps de mise à l'équilibre des variables internes, différent de celui que nous rencontrerons plus loin pour la mise à l'équilibre du centre de masse de l'atome.

1-2 Contraintes sur les coefficients d'Einstein

La comparaison de l'état stationnaire trouvé en (1.8) avec le résultat attendu pour l'équilibre thermodynamique (1.3) entraîne la contrainte suivante

$$\frac{B \rho(\omega_A)}{A + B' \rho(\omega_A)} = \exp(-\hbar\omega_A/k_B T), \quad (1.10)$$

qui doit être satisfaite à toute température T , les coefficients A, B, B' étant quant à eux indépendants de la température.

Prenons d'abord la limite haute température, pour laquelle $\rho(\omega) \rightarrow +\infty$: on en déduit immédiatement :

$$B' = B. \quad (1.11)$$

Les processus d'absorption et d'émission stimulée sont donc intimement liés.

Plus généralement, la contrainte (1.10) pourra être satisfaite si la densité d'énergie $\rho(\omega_A)$ du rayonnement est égale à :

$$\rho(\omega_A) = \frac{A/B'}{\exp(\hbar\omega_A/k_B T) - 1}. \quad (1.12)$$

Cette relation est compatible avec la loi de Planck donnée en (1.1) pourvu que le rapport A/B' soit égal à

$$\frac{A}{B'} = \frac{\hbar\omega_A^3}{\pi^2 c^3}. \quad (1.13)$$

Avec les contraintes (1.11) et (1.13), les hypothèses d'Einstein concernant l'absorption et l'émission de lumière par l'atome conduisent donc bien à une mise en équilibre thermodynamique des populations des niveaux d'énergie atomiques avec le rayonnement du corps noir. Einstein conclut son article de 1916 en remarquant que, bien que la vérification de cette mise à l'équilibre ne constitue pas une preuve de validité rigoureuse des hypothèses (1.4-1.5-1.6), il y a une forte probabilité pour que ces processus soient effectivement à la base d'une future construction théorique. Par ailleurs, il note que les coefficients A, B et B' pourraient être calculables *ab initio*, et donc les relations (1.11,1.13) testées, si l'on disposait « d'une version modifiée de l'électrodynamique et de la mécanique compatible avec

l'hypothèse quantique ». C'est précisément ce que nous allons faire au paragraphe suivant.

Remarque : le cas de niveaux dégénérés. Dans son étude, Einstein considère également le cas où les niveaux d'énergie peuvent être dégénérés. En notant d_e et d_g ces dégénérescences, un raisonnement similaire au précédent conduit à

$$d_g B = d_e B', \quad \frac{A}{B'} = \frac{\hbar\omega_A^3}{\pi^2 c^3}. \quad (1.14)$$

Nous rencontrons plus loin le cas d'une transition $J_g = 0 \leftrightarrow J_e = 1$, pour laquelle $d_g = 1$ et $d_e = 3$ et pour laquelle l'équation d'évolution de la population P_g du niveau g , donnée en (1.7) pour un système à deux niveaux, devient en utilisant $B = 3B'$:

$$\frac{dP_g}{dt} = A \left\{ -3 \frac{B'}{A} \rho(\omega_A) P_g + \sum_j \left[1 + \frac{B'}{A} \rho(\omega_A) \right] P_{e,j} \right\}, \quad (1.15)$$

où l'indice j repère les trois sous-niveaux composant le niveau excité e . Nous verrons un peu plus loin [eq. (1.33)] une écriture plus compacte de cette relation en terme de nombre de photons par mode.

2 L'approche quantique

Dans ce paragraphe, nous allons reformuler le traitement d'Einstein pour l'absorption et l'émission de lumière par un atome dans un champ lumineux isotrope et incohérent, en nous appuyant sur le formalisme quantique « moderne ». Nous allons utiliser la notion de nombre moyen \bar{n} de photons par mode, légèrement plus facile à manipuler que la densité d'énergie ρ , et considérer une transition atomique réaliste pour laquelle nous pourrions traiter l'interaction atome-champ à partir de la règle d'or de Fermi.

2-1 Densité d'énergie et nombre de photons par mode

Pour retrouver en langage quantique « moderne » les coefficients A et B introduits par Einstein, commençons par relier la densité d'énergie $\rho(\omega)$ au nombre moyen de photons par mode \bar{n} pour un champ électromagnétique confiné dans une boîte de volume L^3 . On considère des conditions aux limites périodiques dans cette boîte, de sorte que les modes du champ sont repérés par leur vecteur d'onde \mathbf{k} et leur polarisation ϵ , avec

$$k_j = \frac{2\pi}{L}n_j, \quad n_j \in \mathbb{Z}, \quad j = x, y, z \quad (1.16)$$

et $\epsilon \perp \mathbf{k}$. L'énergie totale du champ s'écrit en fonction de $\rho(\omega)$ sous la forme

$$E = L^3 \int_0^{+\infty} \rho(\omega) d\omega \quad (1.17)$$

et s'exprime d'autre part en terme de l'occupation des modes

$$E = \sum_{\mathbf{k}, \epsilon} \hbar\omega \bar{n}_{\mathbf{k}, \epsilon}, \quad \omega = ck. \quad (1.18)$$

Remplaçons la somme discrète par une intégrale dans cette dernière expression, et supposons que la population $\bar{n}_{\mathbf{k}, \epsilon}$ d'un mode ne dépend que de la fréquence ω de ce mode, et est indépendante de la polarisation. On a alors

$$E = 2 \times \frac{L^3}{8\pi^3} \int_0^{+\infty} \hbar\omega \bar{n}(\omega) 4\pi k^2 dk, \quad (1.19)$$

où le facteur 2 correspond à la somme sur les deux polarisations indépendantes associées à un vecteur \mathbf{k} donné. La comparaison de (1.17) et (1.19) donne :

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \bar{n}(\omega), \quad (1.20)$$

comme on pouvait le voir directement en comparant (1.1) et (1.2).

Si l'on reprend le raisonnement d'Einstein en terme du nombre de photons par mode \bar{n} plutôt que de la densité d'énergie ρ , on est alors conduit à remplacer le coefficient B par le coefficient \tilde{B} tel que

$$B \rho(\omega_A) = \tilde{B} \bar{n}(\omega_A), \quad \text{c'est-à-dire} \quad \tilde{B} = B \frac{\hbar\omega_A^3}{\pi^2 c^3} \quad (1.21)$$

et idem pour B' . Les contraintes (1.14) pour atteindre l'équilibre thermodynamique se résument alors à :

$$d_g \tilde{B} = d_e \tilde{B}' \quad \text{et} \quad A = \tilde{B}'. \quad (1.22)$$

2-2 Transition atomique modèle

Pour pouvoir prendre en compte de manière satisfaisante la nature vectorielle du champ électromagnétique, il est préférable de considérer une structure de niveau légèrement plus compliquée que l'atome à deux niveaux de la section précédente. Nous allons nous intéresser ici à une transition entre un niveau fondamental de moment cinétique nul, donc non dégénéré, et un niveau excité de moment cinétique unité, donc dégénéré trois fois (figure 1.2, droite). Une base possible de ce niveau excité est obtenue en choisissant un trièdre de référence \mathbf{u}_j , $j = x, y, z$, et en considérant les trois états Zeeman orthogonaux $|e_j\rangle$ ayant chacun une projection de moment cinétique nulle le long de l'axe j : $(\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{u}_j) |e_j\rangle = 0$.

Le couplage atome-rayonnement s'écrit à l'approximation dipolaire électrique et à l'approximation du champ tournant

$$\hat{V} = d \left(\sum_j \mathbf{u}_j |g\rangle \langle e_j| \right) \cdot \hat{\mathbf{E}}^{(-)} + \text{H.c.} \quad (1.23)$$

où d est le dipole atomique réduit caractérisant la transition atomique. L'opérateur champ électrique s'écrit en terme des opérateurs de création ($a_{\mathbf{k}, \epsilon}^\dagger$) et de destruction ($a_{\mathbf{k}, \epsilon}$) d'un photon dans un mode donné :

$$\hat{\mathbf{E}}^{(-)} = \sum_{\mathbf{k}, \epsilon} \mathcal{E}_k a_{\mathbf{k}, \epsilon}^\dagger \boldsymbol{\epsilon}, \quad \hat{\mathbf{E}}^{(+)} = \left(\hat{\mathbf{E}}^{(-)} \right)^\dagger, \quad \mathcal{E}_k = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 L^3}}. \quad (1.24)$$

2-3 Utilisation de la règle d'or de Fermi

Nous allons maintenant déterminer complètement les coefficients d'Einstein en utilisant l'électrodynamique quantique. Nous allons utiliser la règle d'or de Fermi (Cohen-Tannoudji et al. 1973) qui donne, à l'ordre le

plus bas non nul, la probabilité par unité de temps pour passer d'un état initial donné vers un continuum d'états.

Décrivons par exemple un processus d'émission, spontanée ou stimulée. L'état initial correspond à l'atome placé dans un de ses états excités $|e_j\rangle$ en présence d'un état donné du champ électromagnétique. Cet état est caractérisé par l'ensemble des nombres d'occupation $\{n_{\mathbf{k},\epsilon}\}$ des modes du rayonnement :

$$|\Psi_i\rangle = |e_j, \{n_{\mathbf{k},\epsilon}\}\rangle. \quad (1.25)$$

L'état final correspond à l'atome dans son état fondamental, en présence d'un état du champ $\{n'_{\mathbf{k},\epsilon}\}$:

$$|\Psi_f\rangle = |g, \{n'_{\mathbf{k},\epsilon}\}\rangle, \quad (1.26)$$

où tous les $n'_{\mathbf{k},\epsilon}$ sont égaux aux $n_{\mathbf{k},\epsilon}$, sauf un qui est augmenté d'une unité, correspondant à l'émission d'un photon dans ce mode particulier³ :

$$n'_{\mathbf{k}_0,\epsilon_0} = n_{\mathbf{k}_0,\epsilon_0} + 1, \quad n'_{\mathbf{k},\epsilon} = n_{\mathbf{k},\epsilon} \quad \text{si } (\mathbf{k}, \epsilon) \neq (\mathbf{k}_0, \epsilon_0). \quad (1.27)$$

La probabilité de transition par unité de temps depuis l'état Ψ_i vers le continuum d'états Ψ_f est donnée par la règle d'or de Fermi :

$$\mathcal{P}_{\text{émission}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f \left| \langle \Psi_f | \hat{V} | \Psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i). \quad (1.28)$$

ce qui se calcule de manière explicite en terme d'une somme sur le mode \mathbf{k}_0, ϵ_0 dont la population a été augmentée d'une unité :

$$\mathcal{P}_{\text{émission}} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{k}_0,\epsilon_0} d^2 \mathcal{E}_{\mathbf{k}_0}^2 (\boldsymbol{\epsilon}_0 \cdot \mathbf{u}_j)^2 (n_{\mathbf{k}_0,\epsilon_0} + 1) \delta(\omega_0 - \omega_A), \quad (1.29)$$

où nous avons utilisé

$$\langle \{n'_{\mathbf{k},\epsilon}\} | a_{\mathbf{k}_0,\epsilon_0}^\dagger | \{n_{\mathbf{k},\epsilon}\} \rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}_0,\epsilon_0} + 1}. \quad (1.30)$$

Le calcul de la somme (1.29), que l'on remplace par une intégrale comme en (1.19), est un « classique » des cours d'optique quantique. Nous supposerons comme précédemment que la population moyenne d'un mode

3. On ne s'intéresse ici qu'à l'ordre le plus bas, donné par la règle d'or de Fermi. Des processus d'ordre supérieur correspondraient à une diffusion multiple de photons par l'atome, avec plusieurs $n'_{\mathbf{k},\epsilon}$ différents des $n_{\mathbf{k},\epsilon}$.

(\mathbf{k}, ϵ) ne dépend que de la fréquence de ce mode : c'est l'hypothèse d'un état isotrope pour le champ. Donnons simplement le résultat, une fois la moyenne prise sur l'état initial Ψ_i :

$$\mathcal{P}_{\text{émission}} = [\bar{n}(\omega_A) + 1] \Gamma, \quad \Gamma = \frac{d^2 \omega_A^3}{3\pi \epsilon_0 \hbar c^3}, \quad (1.31)$$

où la quantité Γ est la largeur naturelle de l'état excité, c'est-à-dire la probabilité par unité de temps pour que l'atome se désexcite si le rayonnement est vide de photons.

Un calcul en tout point similaire donne la probabilité par unité de temps pour qu'un atome initialement dans l'état fondamental absorbe un photon et passe dans un des trois états excités :

$$\mathcal{P}_{\text{absorption}} = 3 \bar{n}(\omega_A) \Gamma. \quad (1.32)$$

L'équation d'évolution d'une des populations, P_g par exemple, est alors donnée par l'équation

$$\dot{P}_g = -3\bar{n} \Gamma P_g + \sum_j (\bar{n} + 1) \Gamma P_{e_j}, \quad (1.33)$$

où l'on a posé pour simplifier $\bar{n} \equiv \bar{n}(\omega_A)$. Cette équation est formellement identique à celle que nous avons écrite en (1.15) à partir du raisonnement d'Einstein, mais son écriture est nettement plus compacte grâce à l'utilisation de la variable \bar{n} au lieu de la densité d'énergie ρ . L'état stationnaire

$$P_g = \frac{\bar{n} + 1}{4\bar{n} + 1}, \quad P_{e_j} = \frac{\bar{n}}{4\bar{n} + 1}, \quad (1.34)$$

est atteint en un temps de l'ordre de

$$\tau_{\text{int}} = \frac{\Gamma^{-1}}{4\bar{n} + 1}. \quad (1.35)$$

La structure du résultat, avec les termes d'absorption, d'émission stimulée et d'émission spontanée, correspond bien au résultat pressenti par Einstein avec

$$A = \Gamma. \quad (1.36)$$

En particulier, à l'équilibre, le rapport entre la population d'un état excité et celle de l'état fondamental :

$$\frac{P_{e_j}}{P_g} = \frac{\bar{n}}{\bar{n} + 1} \quad (1.37)$$

est égale au résultat attendu

$$\frac{P_{e_j}}{P_g} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega_A}{k_B T}\right) \quad (1.38)$$

si on injecte la loi du corps noir donnée en (1.2) :

$$\bar{n}(\omega) = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}. \quad (1.39)$$

Le traitement que nous venons de faire répond donc au souhait d'Einstein quand il écrivait la phrase déjà citée : les coefficients A et B peuvent effectivement être calculés *ab initio*, et donc la relation (1.13) testée, car on dispose « d'une version modifiée de l'électrodynamique et de la mécanique, compatible avec l'hypothèse quantique ». En d'autres termes, nous avons vérifié la relation de proportionnalité entre A et B , ainsi que la relation $B = 3B'$ à partir des premiers principes de l'électrodynamique quantique. La cohérence de l'interaction matière-rayonnement et de la thermodynamique est donc bien assurée, au moins en ce qui concerne la dynamique atomique interne.

3 Le mouvement brownien

Dans le paragraphe précédent, nous nous sommes intéressés à la manière selon laquelle les variables atomiques internes, c'est-à-dire les populations des états g et e , atteignent l'équilibre thermique compatible avec la température imposée par le rayonnement du corps noir. Dans la suite de ce chapitre, nous allons considérer le mouvement du centre de masse de l'atome et vérifier que l'état stationnaire de ce mouvement est également compatible avec l'équilibre thermique à température T . Plus précisément, nous voulons vérifier que la distribution de probabilité stationnaire pour l'impulsion de l'atome est la gaussienne

$$\mathcal{P}_{\text{stat.}}(\mathbf{p}) \propto e^{-p^2/2p_0^2} \quad (1.40)$$

avec

$$\frac{p_0^2}{2M} = \frac{1}{2}k_B T. \quad (1.41)$$

La thermalisation de l'atome dans le rayonnement résulte de la succession des processus d'absorption et d'émission de photons par l'atome. Comme chaque processus s'accompagne d'un changement de l'impulsion du centre de masse atomique, la situation est voisine de celle du mouvement brownien : l'atome joue le rôle de la particule brownienne et les photons du rayonnement du corps noir jouent le rôle des molécules du fluide. Les outils développés pour l'étude du mouvement brownien sont donc tout à fait adaptés pour étudier le problème qui nous intéresse ici et nous allons les résumer brièvement dans les paragraphes qui suivent [pour en savoir plus, on pourra consulter par exemple l'ouvrage de Van Kampen (1992)]. Nous reviendrons ensuite au problème de la thermalisation de l'atome dans le rayonnement thermique.

3-1 L'approche « équation de Langevin »

On suppose dans le cadre de cette approche que l'équation du mouvement de la particule brownienne comporte deux forces :

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\alpha\mathbf{p} + \mathbf{F}(t). \quad (1.42)$$

La première force, déterministe, correspond à un frottement fluide qui amortit l'impulsion en une durée caractéristique α^{-1} . La seconde force $\mathbf{F}(t)$, appelée *force de Langevin*, est aléatoire et caractérisée par ses propriétés statistiques. L'équation (1.42) est donc une équation différentielle stochastique.

En pratique, on impose les deux premiers moments de la force aléatoire $\mathbf{F}(t)$:

$$\langle \mathbf{F}(t) \rangle = 0, \quad \langle F_i(t)F_j(t') \rangle = 2D_p \delta_{i,j} \delta(t-t'), \quad i, j = x, y, z, \quad (1.43)$$

où les moyennes sont prises sur différentes réalisations du désordre associé aux positions et vitesses des molécules du fluide. Le coefficient D_p est appelé *coefficient de diffusion en impulsion*, pour une raison qui va apparaître un peu plus loin.

Nous allons maintenant montrer que les deux coefficients α et D_p intervenant dans (1.42-1.43) sont reliés si l'on impose que l'état stationnaire de la distribution en impulsion de la particule corresponde à l'équilibre thermique, c'est-à-dire :

$$\left\langle \frac{p_i^2}{2M} \right\rangle = \frac{1}{2} k_B T, \quad i = x, y, z. \quad (1.44)$$

Pour trouver cette relation, intégrons l'équation du mouvement (1.42) entre l'instant initial $t = 0$ et un instant t quelconque :

$$\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}(0) e^{-\alpha t} + \int_0^t e^{-\alpha(t-t')} \mathbf{F}(t') dt'. \quad (1.45)$$

En moyennant cette équation sur différentes réalisations du désordre, on trouve :

$$\langle \mathbf{p}(t) \rangle = \langle \mathbf{p}(0) \rangle e^{-\alpha t}. \quad (1.46)$$

L'impulsion moyenne de la particule tend donc vers 0 avec le temps caractéristique α^{-1} . Considérons maintenant l'évolution du carré d'une composante de l'impulsion et prenons à nouveau la moyenne sur le désordre :

$$\begin{aligned} \frac{d\langle p_j^2(t) \rangle}{dt} &= 2\langle p_j(t) \frac{dp_j}{dt} \rangle \\ &= -2\alpha \langle p_j^2(t) \rangle + 2\langle p_j(t) F_j(t) \rangle. \end{aligned} \quad (1.47)$$

Le deuxième terme se calcule⁴ en injectant le résultat (1.45) :

$$\begin{aligned} \langle p_j(t) F_j(t) \rangle &= \langle p_j(0) F_j(t) \rangle e^{-\alpha t} + \int_0^t e^{-\alpha(t-t')} \langle F_j(t') F_j(t) \rangle dt' \\ &= 0 + 2D_p \int_0^t e^{-\alpha\tau} \delta(\tau) d\tau \\ &= D_p \quad (\text{pour } t > 0). \end{aligned} \quad (1.48)$$

L'impulsion quadratique moyenne évolue donc sous l'effet de deux termes :

$$\frac{d\langle p_j^2(t) \rangle}{dt} = -2\alpha \langle p_j^2(t) \rangle + 2D_p. \quad (1.49)$$

Le premier terme correspond à une décroissance exponentielle due à la dissipation, et le second correspond à une croissance linéaire en temps due aux fluctuations de la force de Langevin. La pente de cette croissance est $2D_p$, d'où l'appellation *coefficient de diffusion en impulsion* pour D_p . L'équilibre entre dissipation et fluctuations est atteint en un temps caractéristique $(2\alpha)^{-1}$ et correspond à

$$\langle p_j^2 \rangle_{\text{stat.}} = \frac{D_p}{\alpha}. \quad (1.50)$$

Si le bain de molécules dans lequel la particule brownienne est plongée est à la température T , l'équilibre thermodynamique (1.44) sera atteint si

$$\frac{\langle p_j^2 \rangle}{2M} = \frac{1}{2} k_B T \quad \Rightarrow \quad \frac{D_p}{M\alpha} = k_B T. \quad (1.51)$$

Dans une modélisation phénoménologique du mouvement brownien, on peut estimer le coefficient de friction α à partir de la loi de Stokes, et on impose la valeur du coefficient de diffusion en impulsion pour que (1.51) soit satisfaite. Si on dispose d'un modèle microscopique de l'interaction entre particule brownienne et molécules du fluide, on peut calculer séparément α et D_p : la vérification de la relation (1.51) est alors un test de la cohérence du modèle. C'est ce que nous serons en mesure de faire dans le paragraphe suivant pour la thermalisation du mouvement atomique dans le rayonnement du corps noir.

3-2 L'approche « équation de Fokker-Planck »

L'approche en terme d'équation de Langevin nous a permis de déterminer les deux premiers moments de la distribution en impulsion. On pourrait itérer cette démarche pour obtenir tous les moments, caractériser ainsi l'état stationnaire et vérifier qu'il s'agit bien d'une gaussienne. Toutefois, il est plus rapide d'utiliser pour cela une autre approche, consistant à établir l'équation d'évolution de la distribution en impulsion $\mathcal{P}(\mathbf{p}, t)$.

Pour simplifier l'écriture, considérons un problème à une dimension de sorte que l'impulsion p est maintenant un scalaire. Nous nous intéressons à une classe de problèmes pour lesquels l'évolution de $\mathcal{P}(p, t)$ est décrite par une équation pilote du type

$$\frac{\partial \mathcal{P}(p, t)}{\partial t} = - \left(\int W(q|p) dq \right) \mathcal{P}(p, t) + \int W(q|p-q) \mathcal{P}(p-q, t) dq. \quad (1.52)$$

4. On utilise la relation $\int_0^\infty f(x) \delta(x) dx = \frac{1}{2} f(0)$.

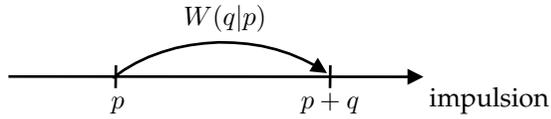


FIGURE 1.6. Marche aléatoire dans l'espace des impulsions (modèle unidimensionnel) ; la quantité $W(q|p)$ représente la probabilité de transition par unité de temps pour un saut d'amplitude q partant de l'impulsion p .

La signification de cette équation est la suivante. La particule brownienne étant initialement dans l'état p , elle a la probabilité $W(q|p) dt$ de gagner l'impulsion q pendant l'intervalle de temps dt . La quantité $W(q|p)$ est donc la probabilité de transition par unité de temps pour un saut d'amplitude q partant de p (figure 1.6). Le premier terme de (1.52) correspond au départ total depuis la classe d'impulsion p par des gains d'impulsion q . Le deuxième terme correspond à l'alimentation de la classe d'impulsion p par des sauts d'amplitude q partant de l'impulsion $p - q$. On vérifiera que la normalisation de $\mathcal{P}(p, t)$, $\int \mathcal{P}(p, t) dp = 1$, est bien préservée par cette évolution.

Toute la physique du problème est contenue dans le choix de la fonction $W(q|p)$. Par exemple, pour un problème présentant de la friction fluide, cette fonction devra être telle que, pour $p > 0$, les sauts avec $q < 0$ seront favorisés par rapport aux sauts avec $q > 0$ (et inversement pour une impulsion $p < 0$), pour que l'impulsion de la particule soit en moyenne ramenée vers 0.

Faisons maintenant l'hypothèse de sauts d'amplitude faible : nous supposons plus précisément que $W(q|p)$ est piquée autour de la valeur $q = 0$ avec une largeur caractéristique q_c , tout en variant doucement avec l'impulsion de départ p . Supposons par ailleurs que la distribution en impulsion \mathcal{P} est une fonction lentement variable de p à l'échelle de q_c . En particulier q_c doit être petit devant la largeur $\sqrt{Mk_B T}$ attendue pour $\mathcal{P}(p)$ à l'équilibre thermodynamique. Nous allons donc faire un développement du terme intervenant dans le deuxième membre de (1.52) :

$$\begin{aligned} W(q|p-q) \mathcal{P}(p-q, t) &= W(q|p) \mathcal{P}(p, t) - q \frac{\partial}{\partial p} [W(q|p) \mathcal{P}(p, t)] \\ &+ \frac{q^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial p^2} [W(q|p) \mathcal{P}(p, t)] + \dots \end{aligned} \quad (1.53)$$

On peut bien sûr pousser ce développement à un ordre arbitrairement élevé (développement de Kramers–Moyal), mais l'ordre deux sera suffisant pour ce qui suit. Injectons ce développement dans l'équation pilote (1.52). On obtient alors pour $\mathcal{P}(p, t)$ l'équation aux dérivées partielles (équation de Fokker–Planck) :

$$\frac{\partial \mathcal{P}(p, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial p} [\mathcal{F}(p) \mathcal{P}(p, t)] + \frac{\partial^2}{\partial p^2} [\mathcal{D}(p) \mathcal{P}(p, t)], \quad (1.54)$$

avec

$$\mathcal{F}(p) = \int q W(q|p) dq, \quad \mathcal{D}(p) = \frac{1}{2} \int q^2 W(q|p) dq. \quad (1.55)$$

Le premier terme de (1.54) correspond à l'évolution de la densité de probabilité $\mathcal{P}(p, t)$ sous l'effet de la force $\mathcal{F}(p)$. Pour s'en convaincre, on peut évaluer l'évolution de l'impulsion moyenne $\langle p(t) \rangle = \int p \mathcal{P}(p, t) dp$ pour une distribution de probabilité relativement piquée autour de p_0 . On trouve après une intégration par parties :

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \int \mathcal{F}(p) \mathcal{P}(p, t) dp \approx \mathcal{F}(p_0). \quad (1.56)$$

Le second terme de (1.54) correspond à une diffusion dans l'espace des impulsions. Pour le montrer, considérons à nouveau une distribution piquée autour de p_0 et étudions l'évolution de l'impulsion quadratique moyenne :

$$\begin{aligned} \frac{d\langle p^2 \rangle}{dt} &= 2 \int p \mathcal{F}(p) \mathcal{P}(p, t) dp + 2 \int \mathcal{D}(p) \mathcal{P}(p, t) dp, \\ &\approx 2p_0 \mathcal{F}(p_0) + 2\mathcal{D}(p_0). \end{aligned} \quad (1.57)$$

On retrouve effectivement une structure similaire à celle obtenue en (1.49) par l'approche équation de Langevin, avec les deux contributions de la force moyenne et de la diffusion en impulsion.

À ce stade, la classe de problèmes décrits par l'équation de Fokker–Planck est plus générale que celle décrite par l'équation de Langevin (1.42), puisque la force déterministe \mathcal{F} n'est pas nécessairement linéaire en impulsion et le coefficient de diffusion \mathcal{D} n'est pas nécessairement constant. Nous verrons dans la suite de ce cours que cette généralisation peut être

très utile quand il s'agit de modéliser certains types de refroidissement lumineux. Pour l'instant, nous pouvons nous restreindre au cas simple

$$\mathcal{F}(p) = -\alpha p, \quad \mathcal{D}(p) = D_p, \quad (1.58)$$

et modéliser le mouvement brownien par l'équation de Fokker-Planck linéaire :

$$\frac{\partial \mathcal{P}(p, t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial (p \mathcal{P}(p, t))}{\partial p} + D_p \frac{\partial^2 \mathcal{P}(p, t)}{\partial p^2}. \quad (1.59)$$

Une solution stationnaire de cette équation est la gaussienne

$$\mathcal{P}_{\text{stat.}}(p) = \frac{1}{p_0 \sqrt{2\pi}} e^{-p^2/2p_0^2}, \quad \text{avec } p_0^2 = \frac{D_p}{\alpha}, \quad (1.60)$$

ce qui correspond bien à la distribution de Maxwell-Boltzmann attendue pour une particule en contact avec un réservoir à température T , pourvu que $k_B T = D_p/(M\alpha)$ [cf. (1.51)].

3-3 Diffusion spatiale

Dans ce qui précède, nous nous sommes intéressés au mouvement de l'atome dans l'espace des impulsions. Nous avons vu que ce mouvement était la résultante d'une diffusion en impulsion caractérisée par D_p et d'une force de friction caractérisée par α . Dans la suite de ce cours, nous serons également amenés à considérer le mouvement de l'atome dans l'espace des positions. Nous allons voir ici que ce mouvement est purement diffusif et caractérisé par le coefficient de diffusion spatial $D_x = D_p/(M\alpha)^2$.

Pour calculer ce coefficient de diffusion spatiale, repartons de l'équation de Langevin

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\alpha \mathbf{p} + \mathbf{F}(t), \quad (1.61)$$

et de sa solution entre un instant initial t_i et l'instant t

$$\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}(t_i) e^{-\alpha(t-t_i)} + \int_{t_i}^t e^{-\alpha(t-t')} \mathbf{F}(t') dt'. \quad (1.62)$$

Intéressons nous à la distance parcourue par la particule entre t_i et t :

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}(t_i) + \frac{1}{M} \int_{t_i}^t \mathbf{p}(t') dt'. \quad (1.63)$$

Du fait de l'isotropie du mouvement brownien, il est clair que si la particule est au point $\mathbf{r}(t_i)$ à l'instant initial, sa position moyenne sera encore $\mathbf{r}(t_i)$ à l'instant t . Considérons maintenant l'écart quadratique moyen

$$\Delta r^2(t) = \langle [\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t_i)]^2 \rangle \quad (1.64)$$

et calculons sa dérivée par rapport au temps :

$$\frac{d\Delta r^2}{dt} = \frac{2}{M} \langle \mathbf{p}(t) \cdot [\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t_i)] \rangle = \frac{2}{M^2} \int_{t_i}^t \langle \mathbf{p}(t) \cdot \mathbf{p}(t') \rangle dt'. \quad (1.65)$$

Il nous faut donc évaluer la fonction de corrélation de l'impulsion à deux instants différents, ce qui se déduit immédiatement de (1.62) : puisque la force de Langevin à l'instant t n'est pas corrélée avec la valeur de l'impulsion à un instant antérieur t' , on a :

$$\langle \mathbf{p}(t) \cdot \mathbf{p}(t') \rangle = \langle \mathbf{p}^2(t') \rangle e^{-\alpha(t-t')} \quad \text{pour } t > t'. \quad (1.66)$$

Nous supposons qu'aux instants t' contribuant à l'intégrale (1.65), la particule est à l'équilibre thermique, de sorte que $\langle \mathbf{p}^2(t') \rangle = 3p_0^2$ (à trois dimensions). On obtient donc, pour un intervalle de temps $t - t_i \gg \alpha^{-1}$:

$$\frac{d\Delta r^2}{dt} = \frac{6p_0^2}{M^2\alpha}, \quad (1.67)$$

soit une croissance constante de Δr^2 , caractéristique d'une diffusion selon chaque composante de l'espace x, y, z :

$$\frac{d\Delta x^2}{dt} = 2D_x \quad \text{avec } D_x = \frac{p_0^2}{M^2\alpha} = \frac{D_p}{M^2\alpha^2}. \quad (1.68)$$

Ce coefficient de diffusion peut être interprété comme le résultat d'une marche au hasard dans l'espace des positions, avec le pas v_0/α (c'est-à-dire la distance parcourue par la particule de vitesse moyenne $v_0 = p_0/M$ pendant le temps α^{-1} caractéristique d'amortissement de cette vitesse) et le taux α .

4 Einstein 1917 : thermalisation du gaz

Dans son article de 1917, Einstein reprend les arguments développés en 1916 pour dégager les trois processus élémentaires de l'interaction atome-

rayonnement : absorption, émission stimulée, émission spontanée. Il développe un raisonnement qui va venir conforter ses conclusions de 1916 : si l'on admet que ces trois processus sont présents, alors non seulement les variables atomiques internes (populations $P_{g,e}$) atteignent l'état d'équilibre thermique attendu, mais également la distribution en impulsion $\mathcal{P}(p)$ du centre de masse de l'atome. Pour établir ce résultat, Einstein développe un formalisme qui est le parent direct du refroidissement Doppler tel qu'on le met en œuvre dans les expériences modernes. Le but de ce paragraphe est de présenter l'argument d'Einstein, avec des outils qui seront directement transposables à l'étude du refroidissement d'atomes par laser.

Nous allons utiliser ici une approche inspirée du mouvement brownien, en décomposant l'action mécanique du rayonnement sur l'atome en deux parties, d'une part une force de friction $-\alpha p$, d'autre part une diffusion en impulsion caractérisée par le coefficient D_p . Nous allons calculer séparément les deux coefficients α et D_p , puis vérifier que l'équilibre atteint correspond bien à ce qui est attendu, c'est-à-dire que $D_p/\alpha = Mk_B T$, où T est la température du corps noir. En pratique, le calcul du coefficient de diffusion est plus simple que celui du coefficient de friction et nous allons donc commencer par lui.

4-1 Diffusion en impulsion de l'atome

Considérons un atome initialement au repos ($p = 0$). Si l'image du mouvement brownien est correcte, l'évolution de son impulsion quadratique moyenne sous l'effet des chocs aléatoires constitués par les processus élémentaires d'absorption et d'émission est donnée par

$$\frac{d\langle p_j^2(t) \rangle}{dt} = -2\alpha \langle p_j^2(t) \rangle + 2D_p. \quad (1.69)$$

L'impulsion quadratique moyenne commence donc par croître linéairement avec une pente D_p pour saturer au temps longs à la valeur D_p/α .

Considérons un temps Δt suffisamment court pour la contribution de la friction $-2\alpha \langle p_j^2(t) \rangle$ soit négligeable devant la diffusion, mais suffisamment long pour que plusieurs processus élémentaires puissent avoir lieu (nous vérifierons *a posteriori* qu'un tel intervalle de temps existe). Le taux R avec

lequel ces processus se produisent vaut :

$$R = 3\bar{n}\Gamma P_g + \sum_j (\bar{n} + 1)\Gamma P_{e_j}. \quad (1.70)$$

En utilisant les valeurs stationnaires des populations données en (1.34), nous obtenons

$$R = 6\Gamma \frac{\bar{n}(\bar{n} + 1)}{4\bar{n} + 1}. \quad (1.71)$$

Pendant l'intervalle de temps Δt , $\Delta N = R \Delta t$ processus élémentaires vont se produire, chacun correspondant à un choc transférant à l'atome une impulsion de module $\hbar k$ dans une direction aléatoire. L'impulsion de l'atome effectue donc une marche aléatoire de pas $\hbar k$ et de taux R . Au bout du temps Δt , l'impulsion moyenne de l'atome reste nulle, mais l'impulsion quadratique moyenne selon une des trois directions de l'espace a augmenté de

$$\langle p_j^2(\Delta t) \rangle = \frac{1}{3} \hbar^2 k^2 \Delta N, \quad (1.72)$$

On en déduit le coefficient de diffusion en impulsion

$$D_p = \frac{1}{2} \frac{\langle p_j^2(\Delta t) \rangle}{\Delta t}, \quad \text{ou encore} \quad D_p = \hbar^2 k^2 \Gamma \frac{\bar{n}(\bar{n} + 1)}{4\bar{n} + 1}. \quad (1.73)$$

4-2 Force de friction agissant sur l'atome

Considérons maintenant un atome en mouvement à la vitesse $v = p/M$. Nous supposons $v \ll c$ de sorte que la particule est non relativiste. L'origine de la force de friction est l'effet Doppler : dans le référentiel \mathcal{R} en mouvement avec l'atome, le rayonnement du corps noir n'est pas isotrope, contrairement à ce que l'on trouve dans le référentiel du laboratoire. Or l'atome « sonde » le rayonnement dans \mathcal{R} à sa fréquence de résonance ω_A ; il va donc interagir avec des modes du champ qui ne sont pas tous peuplés de manière égale.

Considérons par exemple deux modes de directions opposées, l'un allant dans le même sens que l'atome, l'autre dans le sens opposé, susceptibles d'interagir avec l'atome. Le mode allant dans le même sens que l'atome a pour fréquence ω_A dans le référentiel atomique, donc $\omega_A(1 + v/c)$ dans le référentiel du laboratoire. Le mode allant dans le sens opposé à

l'atome a lui aussi pour fréquence ω_A dans le référentiel atomique, donc $\omega_A(1 - v/c)$ dans le référentiel du laboratoire. Or, le nombre de photons par mode $\bar{n}(\omega)$ est une fonction décroissante de ω pour le rayonnement du corps noir. Par conséquent

$$\bar{n}[\omega_A(1 - v/c)] > \bar{n}[\omega_A(1 + v/c)]. \quad (1.74)$$

L'atome en mouvement « voit » plus de photons résonnants venir à sa rencontre que de photons allant dans le même sens que lui : il y aura donc plus de chocs diminuant la vitesse atomique que de chocs qui l'augmentent : c'est l'origine de la force de friction.

Pour une évaluation quantitative du coefficient de friction α , prenons un atome bougeant selon une direction de l'espace, z par exemple. Notons v_z sa vitesse et supposons cet atome dans l'état fondamental g . Le changement moyen d'impulsion pendant un intervalle de temps infinitésimal Δt se calcule en utilisant un formalisme très similaire à celui qui nous a permis d'évaluer les probabilités d'absorption et d'émission à partir de la règle d'or de Fermi. Il s'obtient en considérant tous les gains d'impulsion $\hbar k$ résultant de l'absorption d'un photon dans un mode donné du champ k_0, ϵ_0 , accompagnée du passage de l'atome dans l'état $e_j, j = x, y, z$:

$$\Delta p_z = \Delta t \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_j \sum_{k_0, \epsilon_0} \hbar k_z \left| \langle e_j, \{n'_{k, \epsilon}\} | \hat{V} | g, \{n_{k, \epsilon}\} \rangle \right|^2 \delta(\omega_0 - \omega_{at}). \quad (1.75)$$

La distribution de Dirac $\delta(\omega_0 - \omega_A)$ vient sélectionner les modes de fréquence ω_A dans le référentiel atomique⁵, donc de fréquence $\omega_A + k_z v_z$ dans le référentiel du laboratoire. La population d'un mode correspondant à cette résonance vaut

$$\bar{n}(\omega_A + k_z v_z) \approx \bar{n}(\omega_A) + k_z v_z \left. \frac{\partial \bar{n}}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_A}. \quad (1.76)$$

Le calcul de la somme sur les modes se fait alors d'une manière similaire à celui des taux d'absorption et d'émission. Après une algèbre quelque peu fastidieuse, on trouve pour les processus d'absorption :

$$\frac{\Delta p_z}{\Delta t} = \hbar k^2 \Gamma \frac{\partial \bar{n}}{\partial \omega} v_z \quad (1.77)$$

5. On peut également faire le raisonnement directement dans le référentiel du laboratoire. La distribution de Dirac exprimant la conservation de l'énergie sélectionne alors des modes de pulsation ω tel que $E_i - E_f = [\mathbf{p}^2/2M + \hbar\omega] - [(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k})^2/2M + \hbar\omega_A] = 0$, ce qui revient à prendre $\omega = \omega_A + k_z v_z$, à l'énergie de recul $\hbar^2 k^2/2M$ près, qui joue ici un rôle négligeable.

et un résultat identique, mais de signe opposé, pour les processus d'émission après moyenne sur les trois états e_j . Au final, en pondérant les changements d'impulsion entre absorption et émission par les populations stationnaires (1.34), on arrive à la force de friction :

$$F_z = -\alpha p_z \quad \text{avec} \quad \alpha = -\frac{\hbar k^2}{M} \frac{\Gamma}{4\bar{n} + 1} \frac{\partial \bar{n}}{\partial \omega}. \quad (1.78)$$

Le coefficient de friction est donc directement proportionnel à la dérivée de la population des modes par rapport à la fréquence, autour de la fréquence de résonance atomique. Ce résultat confirme l'intuition basée sur l'effet Doppler discutée plus haut [cf. (1.74)] : c'est le différentiel entre la population des modes allant dans le même sens que l'atome et ceux s'opposant à son mouvement qui crée la force de friction.

4-3 Equilibre thermique ?

Nous sommes maintenant en mesure d'appliquer les résultats généraux de la théorie du mouvement brownien : le mouvement de l'atome est caractérisé par un coefficient de friction α et un coefficient de diffusion en impulsion D_p , de sorte que la distribution d'impulsion à l'équilibre est une gaussienne à laquelle on peut associer une température effective

$$k_B T_{\text{eff}} = \frac{D_p}{M\alpha} = \hbar \frac{\bar{n}(\bar{n} + 1)}{\left| \frac{\partial \bar{n}}{\partial \omega} \right|}. \quad (1.79)$$

Si l'on injecte dans cette relation l'occupation des modes pour le rayonnement du corps noir :

$$\bar{n} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}, \quad (1.80)$$

on vérifie que le modèle est bien cohérent sur le plan thermodynamique, c'est-à-dire que la température effective associée à la distribution en impulsion de l'atome coïncide avec la température du corps noir :

$$T_{\text{eff}} = T. \quad (1.81)$$

Pour Einstein, ce résultat constituait la confirmation des hypothèses faites sur la nature des échanges entre atomes et rayonnement. L'argument de

1916, qui portait sur les populations des états internes de l'atome, ne concernait que l'énergie. Au contraire, pour ce problème de la thermalisation, il est essentiel de poser que l'impulsion de l'atome augmente ou diminue de $\hbar k$ quand l'atome absorbe ou émet un photon. Einstein concluait son article sur deux remarques prémonitoires. D'une part, tout en reconnaissant les « faiblesses » de son modèle dans lequel « les instants et les directions des processus élémentaires y sont livrés au hasard », il indiquait « j'ai pleinement confiance dans la sûreté de la démarche ici suivie ». Par ailleurs, il remarquait que presque toutes les théories du rayonnement thermique ne prenaient en compte que les échanges d'énergie entre lumière et matière, mais pas les échanges d'impulsion : « On s'y croit volontiers autorisé par le fait que les impulsion que transfère le rayonnement sont petites, et donc en réalité presque toujours négligeables devant les autres causes du mouvement ». Il continuait ensuite sur l'importance de prendre ces échanges d'impulsion en compte sur le plan théorique pour une théorie justifiée. Le refroidissement d'atomes par la lumière montre qu'il est également essentiel de prendre ces échanges en compte sur le plan pratique !

4-4 Ordres de grandeur et critère de validité

Nous avons obtenu dans ce qui précède la valeur du coefficient de friction pour le mouvement d'un atome dans le rayonnement d'un corps noir [eq. (1.78)]. Considérons un atome de sodium et modélisons cet atome par sa raie de résonance à $\lambda = 589 \text{ nm}$. La température nécessaire pour atteindre $k_B T = \hbar \omega$ est considérable, de l'ordre de 25 000 Kelvins. Même s'il s'agit d'une situation peu réaliste (y compris en ce qui concerne notre modélisation sous forme d'atome à deux niveaux), on peut calculer le coefficient de friction correspondant et on trouve un temps α^{-1} de l'ordre de 10 minutes. Pour un corps noir de température plus raisonnable, $k_B T \ll \hbar \omega$, le temps de thermalisation diverge exponentiellement :

$$\alpha^{-1} \approx \frac{M}{\hbar k^2} \frac{k_B T}{\hbar \Gamma} e^{\hbar \omega / k_B T}. \quad (1.82)$$

Un corps noir de 6000 Kelvins (un atome proche de la surface de soleil) conduit ainsi $\bar{n}(\omega_A) = 0.017$ et à un temps de thermalisation de 40 minutes. La vitesse thermique $v_0 = \sqrt{k_B T / M}$ correspond dans ce cas à 1500 m/s, et la distance moyenne parcourue pendant un temps de thermalisation,

c'est-à-dire le pas de la marche au hasard dans l'espace des positions, vaut 3600 km. Même dans un milieu astrophysique, il est probable que d'autres processus de thermalisation, comme les collisions avec d'autres atomes ou molécules, vont limiter le libre parcours moyen de notre atome de sodium à des valeurs bien inférieures. Tout l'intérêt de l'utilisation de sources laser sera de produire des valeurs de $|\frac{\partial \bar{n}}{\partial \omega}|$ beaucoup plus grandes, le temps de thermalisation étant alors simplement le premier terme de (1.82), à savoir $M / \hbar k^2$.

Remarquons pour terminer que notre hypothèse de sauts d'amplitude faible, indispensable pour l'approche en terme de mouvement brownien, est bien vérifiée dans cet exemple. La vitesse de recul de l'atome de sodium quand il absorbe ou émet un photon vaut $v_r = \hbar k / M = 3 \text{ cm/s}$, ce qui est effectivement très faible devant la largeur caractéristique de la distribution en vitesse thermique à 6000 K, de l'ordre de 1500 m/s.

Références

- Cohen-Tannoudji, C., B. Diu & F. Laloë (1973), *Mécanique Quantique*, Hermann.
- Einstein, Albert (1916), « Strahlungs-emission und absorption nach der quantentheorie », in *Deutsche Physikalische Gesellschaft* 18, pp. 318–323.
- Einstein, Albert (1917), « Zur Quantentheorie der Strahlung [traduction française par F. Balibar, B. Jech et O. Darrigol] », in *Physikalische Zeitschrift* 18, p. 121.
- Hänsch, T. W. & A. L. Schawlow (1975), « Cooling of gases by laser radiation », in *Optics Comm.* 13, p. 68.
- Van Kampen, Nicolaas Godfried (1992), *Stochastic processes in physics and chemistry*, vol. 1, Elsevier.