

# Problèmes dépendant du temps en mécanique quantique - TD

## Partim 1 : H indep du temps

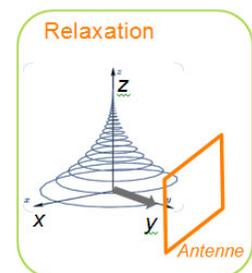
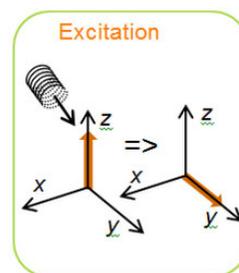
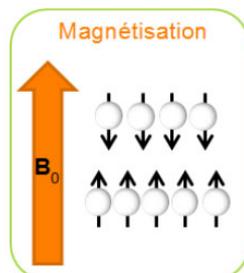
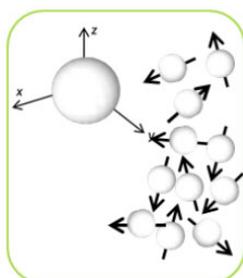
61

### Problème : Autour de l'IRM (RMN)

- Soit un proton de moment dipolaire magnétique  $\gamma\vec{S}$  plongé dans un champ magnétique de 1T orienté selon Oz. Exprimez la différence d'énergie entre les deux niveaux en MHz ainsi qu'en eV (valeur numérique:  $\gamma=42.576$  MHz/T)

Soit une population de spin.

- Au temps  $t=0$ , tous les spins sont alignés selon la direction OZ (état  $|+\rangle$ ). En vous plaçant dans la représentation de Heisenberg, décrivez l'évolution de l'opérateur spin, puis du spin moyen.
- En un temps ultérieur, un champ magnétique additionnel  $B_x$  est appliqué selon OX. Décrivez l'évolution de l'opérateur spin, de même que du spin moyen. Quel doit être le temps d'application de ce champ pour engendrer, en fin de pulse, une valeur moyenne nulle du spin selon OZ. Ceci est-il toujours possible ?
- Décrivez ensuite l'évolution des opérateurs  $S_x$ ,  $S_y$  et  $S_z$ . Comment qualifiez-vous un tel mécanisme ?



62

## Problème : Autour de l'IRM (RMN)

<http://www.cic-it-nancy.fr/fr/quest-ce-que-lirm/>

1) le rapport gyromagnétique est le rapport entre le moment magnétique et le moment cinétique d'une particule.

Noyaux	$\gamma$ ( $10^6 \text{ rad}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{T}^{-1}$ )	$\gamma/2\pi$ (MHz/T)
$^1\text{H}$	267,513	42,576

$$H_0 = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma \hat{S}_z B = -\hbar \underbrace{\gamma B_0}_{=\omega_0 \text{ fréquence de Larmor}} \frac{\sigma_z}{2} \quad \text{où} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

➔  $\omega_0 = 267,513 \text{ MHz}$

$\hbar \approx 6,582\,119\,570 \times 10^{-16} \text{ eV}\cdot\text{s} \Rightarrow E_- - E_+ = 0,176 \text{ }\mu\text{eV}$

$$\begin{array}{l} \hbar\omega_0 \quad | \downarrow \rangle = | - \rangle \\ \hbar\omega_0 \quad | \uparrow \rangle = | + \rangle \end{array}$$

2) On a l'équation de Heisenberg :  $\frac{d\hat{O}_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}_H(t)]$

$$[\hat{H}_0, \hat{S}_z] = 0 \Rightarrow \hat{S}_z = \text{cst}$$

En conséquence, le spin moyen n'évolue pas

63

## Problème : Autour de l'IRM (RMN)

3) On considère maintenant que le champ magnétique est orienté selon  $\vec{B} = B_0 \vec{e}_z + B_x \vec{e}_x$

$$\frac{d\hat{O}_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}_H(t)]$$

$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma \frac{\hbar}{2} (\hat{\sigma}_z B + \hat{\sigma}_x B_x) \quad \text{où} \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

On a les équations d'évolution

$$\frac{d\hat{S}_z}{dt} = \frac{i}{\hbar} [-\gamma \frac{\hbar}{2} (\sigma_z B + \sigma_x B_x), \hat{S}_z] = -i\gamma B_x \frac{\hbar}{4} \underbrace{[\sigma_x, \sigma_z]}_{2i\epsilon_{132}\sigma_y} = -\gamma B_x \underbrace{\frac{\hbar}{2}\sigma_y}_{\hat{S}_y}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{S}_y}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [-\gamma \frac{\hbar}{2} (\sigma_z B_0 + \sigma_x B_x), \hat{S}_y] = -i\gamma \frac{\hbar}{4} (B_x [\sigma_x, \sigma_y] + B_0 [\sigma_z, \sigma_y]) \\ &= \dots = \gamma (B_x \hat{S}_z - B_0 \hat{S}_x) \end{aligned}$$

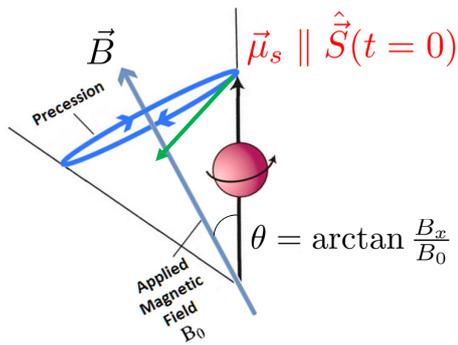
$$\frac{d\hat{S}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} [-\gamma \frac{\hbar}{2} (\sigma_z B_0 + \sigma_x B_x), \hat{S}_x] = -i\gamma \frac{\hbar}{4} B_0 [\sigma_z, \sigma_x] = \dots = \gamma B_0 \hat{S}_y$$

Que l'on résume sous la forme

$$\frac{d\hat{\vec{S}}}{dt} = -\gamma \vec{B} \wedge \hat{\vec{S}} \quad \text{Dont la solution est un mouvement de précession autour de } \vec{B}, \text{ à la fréquence angulaire } \omega = \gamma \|\vec{B}\|$$

64

## Problème : Autour de l'IRM (RMN)

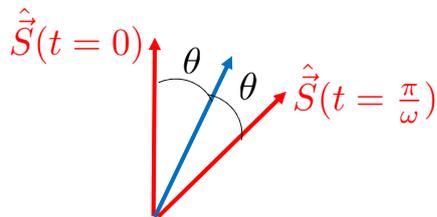


$$\frac{d\hat{S}}{dt} = -\gamma \vec{B} \wedge \hat{S}$$

Pour résoudre l'évolution, on décompose le spin selon

- une composante dans la direction de B qui est conservée
- 2 composantes dans le plan orthogonal à B, engendré par  $\{\vec{e}_\perp = \cos \theta \vec{e}_x - \sin \theta \vec{e}_z, \vec{e}_y\}$

Situation au bout de  $\pi/\omega$  :

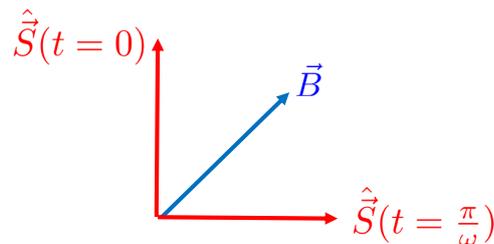


Le spin conserve une composante selon Oz si l'angle  $\theta$  ne vaut pas au moins  $45^\circ$ , ce qui demande que  $B_x$  soit au moins aussi grand que  $B_0$ ... pas simple en pratique, augmente les coûts de construction

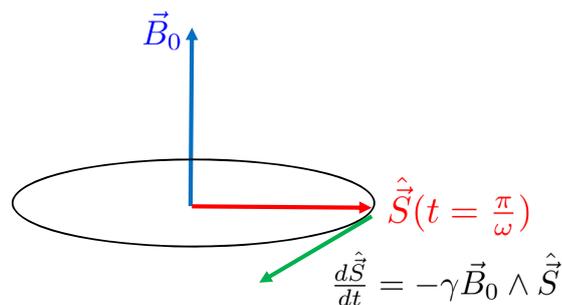
65

## Problème : Autour de l'IRM (RMN)

4) En supposant que  $B_x=B_0$ , le spin en fin de pulse est amené // Ox.



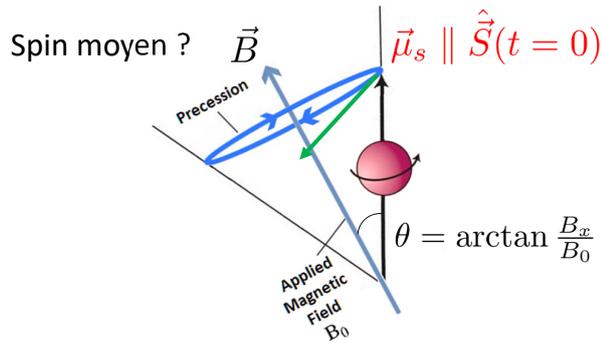
La valeur moyenne de  $S_z$  est alors nulle  $\langle +|S_x|+ \rangle = 0$ . On a ensuite une nouvelle situation initiale :



Et la précession va se poursuivre dans le plan Oxy...

66

## Problème : Autour de l'IRM (RMN)



Dans la representation de Heisenberg, on a que l'opérateur  $S_z$  initial évolue comme un vecteur // à  $Oz$  en  $t=0$ . L'opérateur correspondant au temps  $t$  s'écrit :

$$U^\dagger(t)\hat{S}_zU(t) = \left[ \cos \theta (\cos \theta \hat{S}_z + \sin \theta \hat{S}_x) - \sin \theta (\cos \omega t S_\perp + \sin \omega t S_y) \right]$$

$$\hat{S}_\perp = \cos \theta \hat{S}_x - \sin \theta \hat{S}_z$$

On doit ensuite moyenner cet opérateur sur l'état initial et seuls les opérateurs  $S_z$  engendrent une valeur non nulle si tous les spins sont "up".

Si on veut mesurer la projection sur  $x$  (ou  $y$ ) du spin à un instant  $t$ , il faut évaluer  $U^\dagger(t)\hat{S}_xU(t)$

...

67

## Autres idées de problèmes

- Cas des neutrino, molécule « onia »
- Couplage de 2 oscillateurs harmoniques CT (579)

68

# Problèmes dépendant du temps en mécanique quantique - TD

Partim 2 :  $H$  dépendant du temps (états discrets)

69

## Problèmes « états discrets »

1. Reprendre le problème « Autour de l'IRM » et proposer une meilleure stratégie pour réaliser le pulse qui va permettre la « bascule des spins » dans le plan OXY. Décrivez le matériel que vous allez devoir vous procurer. Pour les paramètres du problème, établissez la relation le temps typique au bout duquel la bascule peut avoir lieu.

70

## Problème : Autour de l'IRM (bis)

- Soit un proton de moment dipolaire magnétique  $\gamma \vec{S}$  plongé dans un champ magnétique de 1T orienté selon Oz. Exprimez la différence d'énergie entre les deux niveaux en MHz ainsi qu'en eV (valeur numérique:  $\gamma=42.576$  MHz/T)...
- On applique un champ magnétique auxiliaire oscillant dirigé selon  $B_x$ . Le hamiltonien d'interaction vaut dès lors

$$H_{\text{int}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_{\text{aux}}(t) = -\gamma \hat{S}_x B_{\text{aux}}(t) = -\hbar \underbrace{\gamma B_{\text{aux}}}_{=\omega_{\text{aux}}} \frac{\sigma_x}{2} \times \cos \omega t$$

- Les valeurs de  $W_{fi}$  sont alors données par  $-\frac{\hbar \omega_{\text{aux}}}{2} \times \langle \downarrow | \sigma_x | \uparrow \rangle = -\frac{\hbar \omega_{\text{aux}}}{2}$
- On désire basculer la population jusqu'à aligner le spin selon un état propre  $S_x$ , par exemple  $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$ , ce qui revient à exiger  $p_{\downarrow}(t) = \frac{1}{2}$
- Puisque l'on désire effectuer un basculement important mais pas total de la population, on s'attend à ce que les deux approches étudiées en cours (ordre 1 de la théorie des perturbations dépendant du temps et approximation séculaire) puissent fournir une bonne estimation de la réalité...

71

## Problème : Autour de l'IRM (bis)

- Ordre 1  $\mathcal{P}_f(t) = |b_f(t)|^2 \approx \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left( \frac{\sin \Delta\omega_{fi} t}{\Delta\omega_{fi}} \right)^2 = \frac{1}{2}$ .

➤ On choisit  $\omega = \omega_{fi} = 267,5$  MHz  $\Rightarrow \Delta\omega_{fi} \approx 0$

➤ On trouve alors  $\mathcal{P}_f(t) \approx \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} \times t^2 = \frac{1}{2}$ .

➤ ... et la population est alors atteinte au bout d'un temps

$$t \approx \sqrt{2} \frac{\hbar}{W_{fi}} = \frac{2\sqrt{2}}{\omega_{\text{aux}}} \approx \frac{10^{-8}}{B_{\text{aux}}[\text{T}]} \text{ s}$$

- Approximation séculaire  $\mathcal{P}_f(t) \approx \frac{|W_{fi}|^2}{|W_{fi}|^2 + \hbar^2(\omega - \omega_{fi})^2} \times \sin^2 \left[ \sqrt{\frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} + (\omega_{fi} - \omega)^2} \frac{t}{2} \right] \approx \frac{1}{2}$

➤ Toujours pour  $\omega = \omega_{fi}$ , on obtient  $\sin \frac{|W_{fi}|t}{2\hbar} \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \frac{|W_{fi}|t}{2\hbar} \approx \frac{\pi}{4} \Rightarrow t \approx \frac{\pi}{2} \frac{\hbar}{W_{fi}}$

Ce qui est un résultat très proche du précédent

On peut donc obtenir un basculement même en appliquant un champ auxiliaire même "modeste" en un temps assez petit.

72

## Problème : Bouge tes molécules

2. Soit une molécule considérée comme un dipôle électrique plongé dans le champ électrique associé à une onde électromagnétique (et donc périodique dans l'espace et le temps). On supposera de plus que le dipôle est aligné sur E en permanence. La distance relative entre les charges + et - est décrite par un hamiltonien harmonique.

- Quelle stratégie mettre en œuvre pour faire passer le dipôle dans son premier état excité ?
- ... idem pour le 2<sup>e</sup> état excité.
- Estimer, pour une source réaliste, le temps associé au « cycle long » (cf approximation séculaire) en estimant que les transitions se font majoritairement entre l'état fondamental et le premier état excité.

N.B.: dans cet exercice, vous vous attacherez au calcul explicite des éléments  $W_{fi}$ .

73

## Problème : Bouge tes molécules

2. Soit une molécule associée à un dipôle électrique plongé dans le champ électrique associé à une onde électromagnétique (et donc périodique dans l'espace et le temps). On supposera de plus que le dipôle est aligné sur E en permanence. La distance relative entre les charges + et - est décrite par un hamiltonien harmonique.

- **Quelle stratégie mettre en œuvre pour faire passer le dipôle dans son premier état excité ?**
- ...

On commence par mieux caractériser le Hamiltonien d'interaction en supposant que l'onde se déplace dans la direction z et est polarisée selon x :

$$\begin{aligned} E_x(z, t) &= E_0 \cos(k(z - ct)) && \text{Onde} \rightarrow \text{champ transverse} \\ &= \frac{E_0}{2} \left( e^{ik(z-ct)} + e^{-ik(z-ct)} \right) \end{aligned}$$

**Terme le plus efficace pour faire passer de  $E_i \rightarrow E_f > E_i$**

Pour passage  $\rightarrow$  le premier état, l'optimum est donc de considérer  $\omega \approx \omega_0$ . La partie spatiale du potentiel vaut donc

$$\vec{E}_0 \cdot \vec{d} \exp(ikz) = E_0 q x (\cos(kz) + i \sin(kz))$$

Par ailleurs – voir estimation numérique à venir – la variation des cos et sin sur la dimension de la molécule est très faible et pourra être négligé en première approximation

$$\Rightarrow \vec{E}_0 \cdot \vec{d} \exp(ikz) \approx E_0 q x e^{ikz_{\text{mol}}}$$

74

## Problème : Bouge tes molécules

On considère ensuite les états quantiques fondamentaux et excités. En principe, on a un oscillateur harmonique à 3D, qui n'a pas été décrit jusqu'à présent. Puisque le hamiltonien d'un oscillateur harmonique 3D s'écrit comme la somme de 3 oscillateurs harmoniques 1D (un dans chaque direction), les états propres peuvent s'écrire en général sous la forme

$$\phi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \phi_{n_x}(x) \times \phi_{n_y}(y) \times \phi_{n_z}(z)$$

Avec l'énergie associée  $E = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})\hbar\omega_0$

Il y a donc un seul état fondamental ( $n_x=n_y=n_z=0$ ), 3 états excités d'énergie  $E = \frac{5}{2}\hbar\omega_0$ , obtenus en faisant passer  $n_x$  (ou  $n_y$  ou  $n_z$ ) de 0 à 1 et 6 états excités d'énergie  $E = \frac{7}{2}\hbar\omega_0$  obtenus en prenant  $n_x=n_y=1$  et  $n_z=0$  (ou  $n_x=n_z=1$  et  $n_y=0$ , ou  $n_y=n_z=1$  et  $n_x=0$ ) ou  $n_x=2$  et  $n_y=n_z=0$  (ou ...).

Pour passage -> le premier état, le champ électrique appliqué selon Ox va induire une transition de  $n_x=0 \rightarrow n_x=1$  (les nombres quantiques  $n_y$  et  $n_z$  restent inchangés), soit

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2} \longrightarrow \phi_1(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} 2x e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2}$$

=> Les éléments de transition s'écrivent:

$$W_{fi} = q E_0 e^{ikz_{mol}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi_1^*(x) x \phi_0(x)$$

Valeur abs=1 => négligé ensuite

75

## Problème : Bouge tes molécules

Du coup, effectuons quelques estimations. Pour une molécule, on va supposer une énergie  $\hbar\omega_0 \approx 1 \text{ eV} \approx 2 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

On a donc  $\omega_0 \approx \frac{2 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{\hbar} \approx 2 \times 10^{15} \text{ s}^{-1} \Rightarrow k = \frac{\omega}{c} \approx \frac{2}{3} \times 10^7 \text{ m}^{-1}$

Pour  $x$ , on a des tailles de l'ordre du nanomètre. Dès lors, on peut considérer, que l'onde plane ne varie pas en effet sur la taille de la molécule =>  $W_{fi} \approx q E_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi_1^*(x) x \phi_0(x)$

On remarque:  $x \phi_0(x) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} \phi_1(x) \Rightarrow W_{fi} \approx \frac{q E_0}{2} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi_1^*(x) \phi_1(x)}_{=1}$

On sait par ailleurs que  $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} = \sqrt{\langle x^2 \rangle_0}$ , la taille du dipôle dans l'état fondamental.

On en déduit que  $W_{1,0} \approx \frac{1}{2} \sqrt{\langle x^2 \rangle_0} q E_0$  Les transitions d'état pair <-> impair se font donc de manière assez efficace.

76

## Problème : Bouge tes molécules

**Estimation réaliste de  $W_{10}$**  : On suppose que la molécule possède un moment dipolaire de l'ordre de 1 Debye ( $\approx 10^{-30}$  Cm). Soit une source de puissance P répartie sur une surface S. On peut par exemple considérer le cas d'un laser de puissance 100W dont le faisceau est réparti sur  $1\text{mm}^2$ , soit un flux de puissance de  $\Phi \approx 10^8 \text{ W m}^{-2}$ .

Ce flux est égal au vecteur de Poynting, qui représente typiquement la densité volumique de puissance électromagnétique ( $\epsilon_0 E^2$ ) x vitesse de la lumière. On en déduit

$$E_0 \approx \sqrt{\frac{\Phi}{\epsilon_0 c}} \approx \frac{10^4}{\sqrt{8 \times 10^{-12} \times 3 \times 10^8}} \approx 0.2 \times 10^5 \text{ V} \cdot \text{m}^{-1}$$

Et donc

$$W_{1,0} \approx \frac{1}{2} \times 10^{-30} \times 0.2 \times 10^5 \approx 10^{-26} \text{ J}.$$

Le temps de cycle long vaut dès lors  $\frac{\hbar}{W_{1,0}} \approx \frac{6 \times 10^{-34}}{1 \times 10^{-26}} \approx 6 \times 10^{-8} \text{ s}$

77

## Problème : Bouge tes molécules

2. Soit une molécule associée à un dipôle électrique plongé dans le champ électrique associé à une onde électromagnétique (et donc périodique dans l'espace et le temps). On supposera de plus que le dipôle est aligné sur E en permanence. La distance relative entre les charges + et - est décrite par un hamiltonien harmonique.

- Quelle stratégie mettre en œuvre pour faire passer le dipôle dans son premier état excité ?
- ... **idem pour le 2<sup>e</sup> état excité.**

**Peupler le 2<sup>e</sup> état ?**

- la piste naturelle consiste à vouloir appliquer une fréquence double pour effectuer une transition directe 0->2. Dans ce cas l'intégrale sur x est en fait **identiquement nulle** car elle correspond au recouvrement entre le premier ( $n_x=1$ ) et le 2<sup>e</sup> état excité ( $n_x=2$ ) !
- On peut rentrer dans les subtilités en reconsidérant les variations de l'onde selon z. En effectuant un développement de Taylor, on obtient un terme  $\propto k(z-z_{\text{mol}})$  et on peut donc bien obtenir une transition directe ( $n_x=n_y=n_z=0$ ) -> ( $n_x=n_z=1, n_y=0$ ) qui sera toutefois pénalisé par un facteur  $\propto k \sqrt{\langle x^2 \rangle_0}$  par rapport à la transition 0->1.

*D'autres idées ?*

Là, on demande aux étudiants de réfléchir

78

## Problème : Bouge tes molécules

2. Soit une molécule associée à un dipôle électrique plongé dans le champ électrique associé à une onde électromagnétique (et donc périodique dans l'espace et le temps). On supposera de plus que le dipôle est aligné sur  $E$  en permanence. La distance relative entre les charges  $+$  et  $-$  est décrite par un hamiltonien harmonique.

- Quelle stratégie mettre en œuvre pour faire passer le dipôle dans son premier état excité ?
- ... **idem pour le 2<sup>e</sup> état excité.**

### Peupler le 2<sup>e</sup> état ?

- la piste naturelle consiste à vouloir appliquer une fréquence double pour effectuer une transition directe  $0 \rightarrow 2$ . Dans ce cas l'intégrale sur  $x$  est en fait **identiquement nulle** car elle correspond au recouvrement entre le premier ( $n_x=1$ ) et le 2<sup>e</sup> état excité ( $n_x=2$ ) !
- On peut rentrer dans les subtilités en reconsidérant les variations de l'onde selon  $z$ . En effectuant un développement de Taylor, on obtient un terme  $a k (z-z_{mol})$  et on peut donc bien obtenir une transition directe ( $n_x=n_y=n_z=0$ )  $\rightarrow$  ( $n_x=n_z=1, n_y=0$ ) qui sera toutefois pénalisée par un facteur  $\propto k \sqrt{\langle x^2 \rangle_0}$  par rapport à la transition  $0 \rightarrow 1$ .
- Dans le cas d'un potentiel harmonique, on peut légitimement se dire que l'état  $n_x=2$  pourrait être peuplé en effectuant une double transition  $n_x=0 \rightarrow n_x=1 \rightarrow n_x=2$ . Ceci est possible car d'une part la différence d'énergie est identique entre les niveaux 0 et 1 et 1 et 2 et d'autre part parce que les amplitudes de transition  $\langle 1|x|0 \rangle$  et  $\langle 2|x|1 \rangle$  sont toutes deux non nulles. Le prix à payer est une croissance temporelle initiale plus faible car il faut en premier lieu peupler l'état  $n_x=1$ .

79

# Problèmes dépendant du temps en mécanique quantique - TD

Partim 3 :  $H$  dépendant du temps (continuum)

80

# Conséquence de la relaxation sur le peuplement d'un état excité

On désire reprendre le problème de la transition induite entre 2 niveaux par application d'une perturbation harmonique, en supposant que l'état initial est l'état fondamental et en se plaçant dans les conditions de l'approximation séculaire... **tout en considérant (nouveau) que l'état excité peut subir une émission spontanée de rayonnement électromagnétique et va donc décroître spontanément.**

On demande d'établir les équations d'évolution, de les résoudre, de commenter la physique et d'envisager les conséquences plus « technologiques » en vous plaçant dans le contexte de votre choix.

81

## Problème : conséquence de la relaxation

- Soit un état fondamental  $|0\rangle = |i\rangle \rightarrow |f\rangle$

$$\dot{b}_f = -\frac{iW_{fi}}{2\hbar} e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} b_i - \left(i\delta E + \frac{\Gamma}{2}\right) b_f \quad \dot{b}_i = -\frac{iW_{fi}^*}{2\hbar} e^{i(\omega-\omega_{fi})t} b_f$$

- On va absorber le nouveau terme en posant  $\tilde{b}_f = e^{i(\delta E - i\frac{\Gamma}{2})t} b_f$  auquel cas la première équation se simplifie en

$$\dot{\tilde{b}}_f = -\frac{iW_{fi}}{2\hbar} e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} \times e^{i(\delta E - i\frac{\Gamma}{2})t} b_i$$

- On pose  $\tilde{\omega}_{fi} = \frac{E_f + \delta E - i\frac{\Gamma}{2} - E_i}{\hbar}$ , ce qui correspond à un état excité  $|f\rangle$  dont l'énergie est déplacée dans le plan complexe. On a alors

$$\dot{\tilde{b}}_f = -\frac{iW_{fi}}{2\hbar} e^{i(\tilde{\omega}_{fi}-\omega)t} b_i$$

- Par ailleurs, on écrit

$$\dot{b}_i = -\frac{iW_{fi}^*}{2\hbar} e^{i(\omega-\omega_{fi})t} e^{-i(\delta E - i\frac{\Gamma}{2})t} \tilde{b}_f = -\frac{iW_{fi}^*}{2\hbar} e^{i(\omega-\tilde{\omega}_{fi})t} \tilde{b}_f$$

- On obtient ainsi un problème formellement similaire à celui de la transition induite en remplaçant simplement  $E_f \rightarrow E_f + \delta E - i\frac{\Gamma}{2}$

82

# Problème : conséquence de la relaxation

- On adapte alors simplement la relation

$$\mathcal{P}_{if}(t; \omega) = \frac{|W_{if}|^2}{|W_{if}|^2 + \hbar^2(\omega - \omega_{fi})^2} \sin^2 \left[ \sqrt{\frac{|W_{if}|^2}{\hbar^2} + (\omega - \omega_{fi})^2} \frac{t}{2} \right]$$

qui devient :

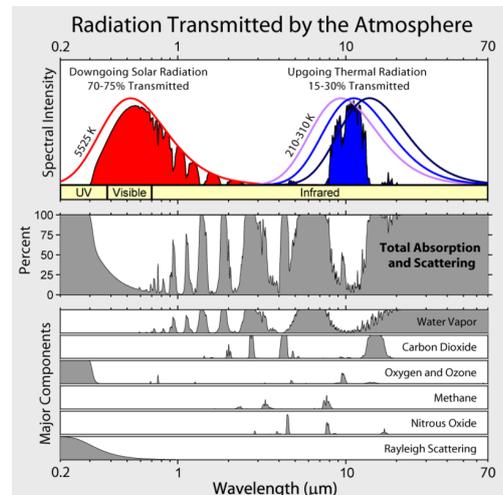
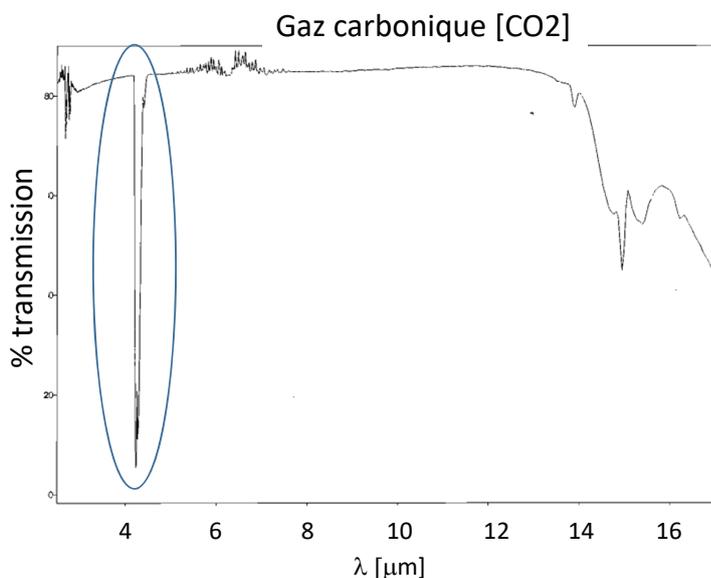
$$\mathcal{P}_{if}(t, \omega) = \frac{|W_{fi}|^2}{|W_{fi}|^2 + \frac{\hbar^2}{4}\Gamma^2 + (E_f + \delta E - E_i - \hbar\omega)^2} \times e^{-\Gamma t} \times \sin^2 \left[ \sqrt{\frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} + \frac{\Gamma^2}{4} + (E_f + \delta E - E_i - \hbar\omega)^2} \frac{t}{2} \right]$$

- Principales modifications :
  - La fréquence optimale est modifiée à cause du shift (pas un grand souci).
  - Dans le cas où  $|W_{fi}| \ll \hbar\Gamma$ , la probabilité maximale de transition est fortement réduite et advient en un temps nettement inférieur (plus complexe à contrôler)
  - Mais cette relaxation n'a pas que des conséquences négatives. En effet on constate un élargissement des valeurs de  $\omega$  pour lesquelles on peut exciter significativement le niveau excité; il suffit de choisir une fréquence (angulaire) comprise entre (typiquement)  $\omega_{fi} - \Gamma/2$  et  $\omega_{fi} + \Gamma/2$ . Le niveau excité se comporte donc comme s'il était « distribué » sur une bande, ce qui rend son excitation plus facile (on n'a pas besoin de disposer d'une fréquence hyper piquée).

83

# Problème : conséquence de la relaxation

- Application technologique : On peut reprendre le problème précédent pour une estimation de  $W_{fi}$ , et s'inspirer de quelques spectres trouvés sur internet pour se faire une idée du temps de vie et du  $\Gamma$  associé :



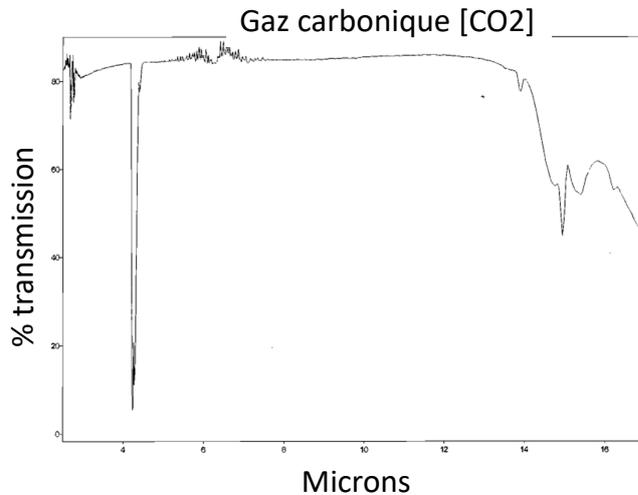
$$\Delta\lambda \approx 0.1\mu\text{m} \Rightarrow \Delta k \approx \dots \Rightarrow \Delta\omega \approx \dots$$

$\uparrow$   
 $\approx \Gamma$

84

# Problème : conséquence de la relaxation

- Application technologique : On peut reprendre le problème précédent pour une estimation de  $W_{fi}$ , et s'inspirer de quelques spectres trouvés sur internet pour se faire une idée du temps de vie et du  $\Gamma$  associé :



$$\Delta\lambda \approx 0.1\mu\text{m} \Rightarrow \frac{\Delta k}{k} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \Rightarrow \Delta k = \frac{2\pi}{\lambda} \times \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx 1.5 \times 10^6 \text{ m}^{-1} \times \frac{1}{40} \approx 4 \times 10^4 \text{ m}^{-1}$$
$$\Rightarrow \Delta\omega = c \times \Delta k \approx 3 \times 10^8 \times 4 \times 10^4 \approx 1.2 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$$
$$\Rightarrow \Gamma \approx \hbar\Delta\omega \approx 10^{-21} \text{ J} \gg W_{fi} \quad \text{Voir problème précédent}$$

On en conclut donc que les transitions sont fortement supprimées par les désintégrations spontanées et qu'on a du mal à peupler le niveau excité.