Problèmes dépendant du temps en mécanique quantique

Au programme

Formulation générale du problème

Théorie des perturbations dépendant du temps

Etats discrets: Evolution cohérente et approximation séculaire

Couplage aux états du continuum et relaxation

Motivation

Pourquoi étudier des problèmes dépendant du temps ?

- Pour étudier la dynamique dans les cas complexes (impliquant plus de 2 niveaux), par exemple les réactions nucléaires
- Besoin de faire évoluer l'état quantique vers un état pré-défini (RMN, inversion des populations, ordinateurs quantiques: quantum control, en appliquant par exemple un champ B)
- Besoin de comprendre l'évolution (parfois non désirée) d'un état quantique, notamment sous l'action d'une action externe (relaxation)

Équation fondamentale, dite de « Schroedinger » $i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$

Supposons dans un premier temps que le Hamiltonien ne dépende pas explicitement du temps

Partie A : Hamiltonien indépendant du temps

Solution générique (pour un H indép du temps)

On suppose l'existence d'un ensemble d'états dits « propres » ou « stationnaires » $\{|n\rangle\}$ (*orthogonaux entre eux*) tels que

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

Énergie de l'état |n>

Sous l'action de l'équation de Schroedinger, tout état stationnaire va acquérir une phase au cours du temps :

$$|n(t=0)\rangle = |n\rangle \rightarrow |n(t)\rangle = e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|n\rangle$$

En effet

$$i\hbar\frac{d}{dt}|n(t)\rangle = i\hbar \times \left(-i\frac{E_n}{\hbar}\right) \times e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|n\rangle = E_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|n\rangle = E_n|n(t)\rangle = \hat{H}|n(t)\rangle$$

Ce résultat se généralise aisément à toute CL d'états propres :

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_{n=1}^{N} a_n|n\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{N} a_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|n\rangle$$

A noter que la probabilité d'observer un état |m> donné ne change pas au cours du temps (exo simple)…

Solution générique (pour un H indép du temps)

En effet on sait que $p_m(t) = |\langle m|\psi(t)\rangle|^2$ (postulats de la méca Q)

Et

$$\begin{aligned}
\langle m|\psi(t)\rangle &= \langle m| \left(\sum_{n=1}^{N} a_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle \right) \\
&= \sum_{n=1}^{N} a_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{m,n}} \qquad \text{(orthogonalité)} \\
&= a_m e^{-i\frac{E_m t}{\hbar}}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad p_m(t) = |a_m e^{-i\frac{E_m t}{\hbar}}|^2 = |a_m|^2$$

Solution générique (pour un H indép du temps)

… par contre, l'état quantique développe des interférences qui sont « visibles » dès que l'on considère des observables O telles que $\langle m|\hat{O}|n\rangle \neq 0$ pour $|m\rangle \neq |n\rangle$:

$$\langle\psi(t)|\hat{O}|\psi(t)\rangle = \sum_n \sum_{n'} a_n^\star a_{n'} e^{i\frac{(E_n - E_{n'})t}{\hbar}} \langle n|\hat{O}|n'\rangle$$

$$= \sum_n |a_n|^2 \langle n|\hat{O}|n\rangle + \sum_n \sum_{n'\neq n} a_n^\star a_{n'} e^{i\frac{(E_n - E_{n'})t}{\hbar}} \langle n|\hat{O}|n'\rangle$$

$$= \frac{1}{2}\left(\sum_n \sum_{n'\neq n} a_n^\star a_{n'} e^{i\frac{(E_n - E_{n'})t}{\hbar}} \langle n|\hat{O}|n'\rangle + \sum_n \sum_{n'\neq n} a_{n'}^\star a_n e^{-i\frac{(E_n - E_{n'})t}{\hbar}} \langle n'|\hat{O}|n\rangle \right)$$

n<->n' pour la moitié de la somme

Hermiticité : $\langle n'|\hat{O}|n\rangle = \langle n|\hat{O}^\dagger|n'\rangle^\star = \langle n|\hat{O}|n'\rangle^\star$

$$= \frac{1}{2}\left(\sum_n \sum_{n'\neq n} a_n^\star a_{n'} e^{i\frac{(E_n - E_{n'})t}{\hbar}} \langle n|\hat{O}|n'\rangle + \text{c.c.} \right)$$

$$\langle\psi(t)|\hat{O}|\psi(t)\rangle = \sum_n |a_n|^2 \langle n|\hat{O}|n\rangle + \sum_n \sum_{n'\neq n} \Re\left(a_n^\star a_{n'} e^{i\frac{(E_n - E_{n'})t}{\hbar}} \langle n|\hat{O}|n'\rangle \right)$$

Solution générique (pour un H indép du temps)

$$\langle\psi(t)|\hat{O}|\psi(t)\rangle = \sum_n |a_n|^2\langle n|\hat{O}|n\rangle + \sum_n \sum_{n'\neq n} \Re\left(a_n^\star a_{n'} e^{i\frac{(E_n-E_{n'})t}{\hbar}}\langle n|\hat{O}|n'\rangle\right)$$

Phénomène de battement, sur une fenêtre temporelle $\Delta t \approx \frac{\hbar}{E_n - E_{n'}}$

Si système à 2 niveaux (ou juste 2 niveaux peuplés), alors 1 fréquence de battement.

Si système à *N* niveaux, alors $\frac{N\times(N-1)}{2}$ fréquences de battement (peut vite devenir compliqué)

Cas particulier : oscillateur harmonique

Résultat important : les états propres d'un hamiltonien forment une base de l'espace de Hilbert $\mathcal{E}$ sur lequel il est défini.

$\Rightarrow$ Tout état $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ admet, pour évolution temporelle : $|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|n\rangle$

où $a_n = \langle n|\psi\rangle$

On remarque en particulier, pour t=0 : $|\psi\rangle = \underbrace{\sum_n |n\rangle\langle n|}_{\mathbb{I}} |\psi\rangle$

Solution générique (pour un H indép du temps)

Remarques:

- Ce n'est pas parce qu'on possède une solution explicite qu'elle est nécessairement simple♠, en particulier lorsque 1) l'espace de Hilbert est de dimension infinie et 2) lorsque les niveaux d'énergie forment un continuum.
- Dans de nombreux cas, on ne peut effectuer la somme infinie et on doit la « tronquer ». On considère pour ce faire un niveau

$$N | E_N \gg E \,\text{typique}$$

- On a fait exprès de ne pas préciser la nature de la base et de travailler avec des kets génériques.

♠ : Il est en général plus difficile de sommer des fonctions oscillantes

Exercices qui illustrent bien ce concept de superposition:

- Paquet libre
- Paquet gaussien dans un puits harmonique
- Oscillation des neutrinos

Système à 2 niveaux + perturbation

On considère un système à 2 niveaux, correspondant par exemple à un spin plongé dans champ magnétique :

E_2

E_1

$$\Leftrightarrow H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

dans la base {|1>,|2>}

Appliquons une perturbation λ W qui va coupler les deux états :

$$\Rightarrow \hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & \lambda W_{12} \\ \lambda W_{12}^{\star} & E_2 \end{pmatrix}$$

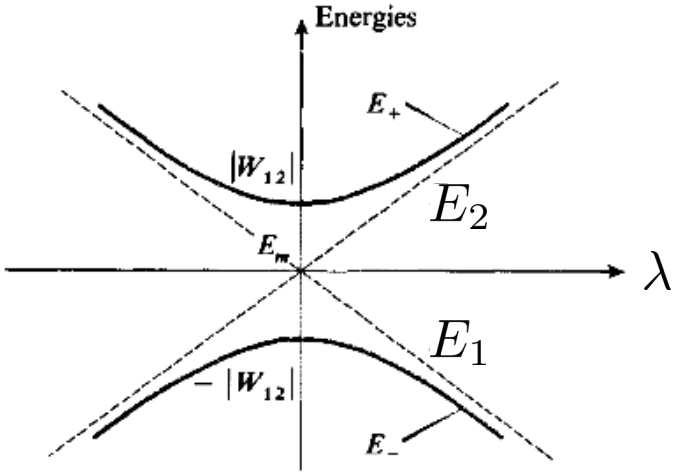
N.B.: On peut aussi considérer des éléments W_{11} et W_{22}, mais cela n'a pas une grande valeur ajoutée

On recherche les nouvelles énergies propres en résolvant le système

$$\det\left(\hat{H} - E\mathbb{I}\right) = 0 \Leftrightarrow \det\begin{pmatrix} E_1 - E & \lambda W_{12} \\ \lambda W_{12}^{\star} & E_2 - E \end{pmatrix} = 0$$

Soit $(E - E_1)(E - E_2) - \lambda^2 |W|^2 = 0$

$$\Rightarrow E_{\pm} = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_1 - E_2)^2}{4} + \lambda^2 |W_{12}|^2}$$



Système à 2 niveaux + perturbation

Les états propres associés sont

$$|\psi_+\rangle = \cos\tfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}|1\rangle + \sin\tfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}|2\rangle$$

$$|\psi_-\rangle = -\sin\tfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}|1\rangle + \cos\tfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}|2\rangle$$

avec

$$\tan\theta = \frac{2|W_{12}|}{E_1 - E_2}, \quad \varphi = \arg(W_{12})$$

Soit une transformation unitaire

$$\begin{pmatrix} |\psi_+\rangle \\ |\psi_-\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2} \\ -\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix}$$

Avec la relation inverse :

$$\begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2} & -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_+\rangle \\ |\psi_-\rangle \end{pmatrix}$$

<u>Evolution temporelle:</u>

On s'intéresse à l'évolution de l'état |1> en supposant que la perturbation W est appliquée en t=0. On veut prédire l'évolution des populations sur les niveaux |1> et |2>

Système à 2 niveaux + perturbation

Evolution temporelle:

État initial : $|\psi(0)\rangle = |1\rangle = e^{-i\varphi/2}\left[\cos\frac{\theta}{2}|\psi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}|\psi_-\rangle\right]$

Chaque état propre du hamitonien complet évolue avec sa fréquence propre :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\varphi/2}e^{-i\frac{E_1+E_2}{2\hbar}t}\left[\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\sqrt{\Delta E^2+|W_{12}|^2}\,t}{\hbar}}|\psi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\sqrt{\Delta E^2+|W_{12}|^2}\,t}{\hbar}}|\psi_-\rangle\right]$$

On en déduit alors l'amplitude suivant |2> au temps t:

$$\Delta E = \frac{E_2-E_1}{2}$$

$$\langle 2|\psi(t)\rangle = e^{i\Phi}\left[\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\sqrt{\Delta E^2+|W_{12}|^2}\,t}{\hbar}}\langle 2|\psi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\sqrt{\Delta E^2+|W_{12}|^2}\,t}{\hbar}}\langle 2|\psi_-\rangle\right]$$

$$= e^{i\Phi'}\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\left[e^{-i\frac{\sqrt{\Delta E^2+|W_{12}|^2}\,t}{\hbar}} - e^{i\frac{\sqrt{\Delta E^2+|W_{12}|^2}\,t}{\hbar}}\right]$$

$$= -ie^{i\Phi'}\sin\theta\sin\frac{\sqrt{\Delta E^2+|W_{12}|^2}\,t}{\hbar}$$

De même que la probabilité d'observer l'état selon |2>:

$$\mathcal{P}_2(t) = \sin^2\theta\sin^2\frac{\sqrt{\Delta E^2+|W_{12}|^2}\,t}{\hbar} = \frac{|W_{12}|^2}{\Delta E^2+|W_{12}|^2}\sin^2\frac{\sqrt{\Delta E^2+|W_{12}|^2}\,t}{\hbar}$$

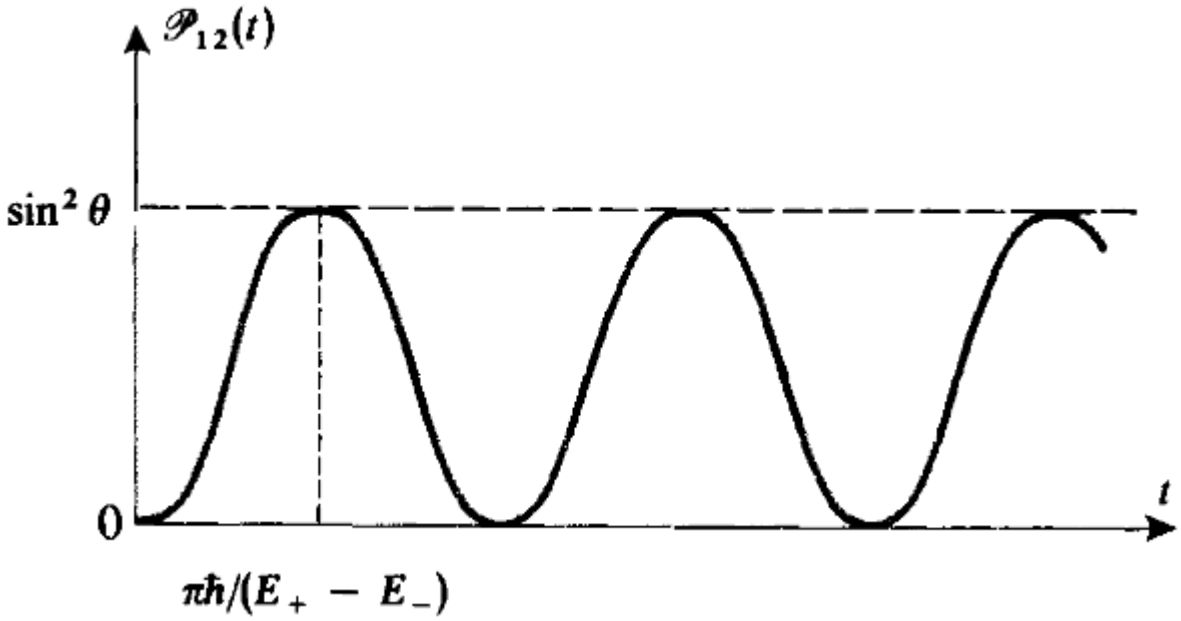
Système à 2 niveaux + perturbation

Evolution temporelle: $\mathcal{P}_2(t) = \frac{|W_{12}|^2}{\Delta E^2 + |W_{12}|^2} \sin^2 \frac{\sqrt{\Delta E^2 + |W_{12}|^2}\, t}{\hbar}$

=2*Différence d'énergie entre les deux niveaux perturbés

Remarques :

- La P_2 reste « limitée » par l'ampleur de la perturbation W => limitation de la capacité d'induire une transition entre 2 états (2 valeurs du Qbit, par exemple)
- Oscillations dites « de Rabi »



Fonction de Green (opérateur d'évolution)

Vu la linéarité du problème, on peut exprimer plus synthétiquement l'évolution d'un état quantique $|\psi(t=0)\rangle$ sous la forme

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t=0)|\psi(0)\rangle$$

En écrivant l'équation de Schroedinger, on déduit

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt}\hat{U}(t, t=0)|\psi(0)\rangle = \hat{H}\hat{U}(t, t=0)|\psi(0)\rangle, \quad \forall|\psi(0)\rangle$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{d}{dt}\hat{U}(t, t=0) = \hat{H}\hat{U}(t, t=0)$$ Équation « opératorielle »

Solution :

$$\hat{U}(t, t=0) = c_0 \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)$$

Preuve : Il suffit d'écrire la série terme à terme et de dériver.

De plus, on doit avoir $\hat{U}(0,0) = \mathbb{I} \Rightarrow c_0 = 1$ $\Rightarrow$ $\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right)$

Propriétés essentielles :

- L'opérateur d'évolution U est unitaire: $U^\dagger = U^{-1}$ Il préserve donc la norme
- On a la propriété de factorisation $\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_1)\,\hat{U}(t_1, t_0)$

Fonction de Green (opérateur d'évolution)

N.B.: Pour le moment, nous sommes restés assez vagues quant à la formulation explicite de l'opérateur d'évolution…

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t=0)|\psi(0)\rangle$$

… mais on peut se placer dans la base qui nous convient (en général, celle qui entraîne le plus de simplifications).

Ainsi :
$$\underbrace{\langle x|\psi(t)\rangle}_{\psi(x,t)} = \langle x|\hat{U}(t,t=0) \times \underbrace{\mathbb{I}}_{=\int dx'|x'\rangle\langle x'|} |\psi(0)\rangle$$

$$= \int dx' \, \langle x|\hat{U}(t,t=0)|x'\rangle \times \langle x'|\psi(0)\rangle$$

$$= \int dx' \, \underbrace{U(x,t;x',0)} \, \psi(x',0)$$

En général ≠ 0 pour x ≠ x' (fonction dite « non locale » compliquée à calculer)

Mais aussi :
$$\underbrace{\psi(p,t)} = \int dp' \, U(p,t;p',0) \, \psi(p',0)$$

Espace de Fourier

Fonction de Green (opérateur d'évolution)

Cas particulier d'un Hamiltonien sans potentiel (mouvement libre)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

On écrit alors : $\langle p|\hat{H}|p'\rangle = \frac{p^2}{2m}\,\delta(p-p')$

$$\hookrightarrow \langle p|\hat{H}^n|p'\rangle = \left(\frac{p^2}{2m}\right)^n \delta(p-p')$$

$$\hookrightarrow \langle p|\exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)|p'\rangle = \exp\left(-i\underbrace{\frac{p^2}{2m\hbar}}_{\text{Pulsation } \omega(p)}t\right)\delta(p-p')$$

Fonction locale en p

Et donc simplement : $\psi(p,t) = \int dp'\, U(p,t;p',0)\,\psi(p',0)$

$$= \exp\left(-i\frac{p^2}{2m\hbar}t\right)\psi(p,0)$$

2 Images du monde

La vision de Schroedinger :



Les états « tournent » les opérateurs n'évoluent pas

$$E_O(t) := \langle \hat{O}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle$$

La vision de Heisenberg



Les états ne « tournent » pas et les opérateurs évoluent

$$E_O(t) := \langle \hat{O}(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{O}_H(t) | \psi(0) \rangle$$

Représentation de Heisenberg

Evolution de la valeur moyenne d'une observable:

On a: $$E_O(t) := \langle\psi(t)|\hat{O}|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)\hat{U}^\dagger(t,0)|\hat{O}|\hat{U}(t,0)\psi(0)\rangle$$
$$= \langle\psi(0)|\hat{U}^\dagger(t,0)\hat{O}\hat{U}(t,0)|\psi(0)\rangle$$

Dans l'interprétation de Heisenberg, ce ne sont pas les états qui dépendent du temps mais bien les opérateurs ! On définit ainsi :

$$\hat{O}_H(t) := \hat{U}^\dagger(t,0)\hat{O}_{(S)}\hat{U}(t,0) = \hat{U}^{-1}(t,0)\hat{O}_{(S)}\hat{U}(t,0)$$
$$= e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{O}_{(S)}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

On établit l'équation d'évolution

$$\frac{d}{dt}\hat{O}_H(t) = \frac{d}{dt}\left(e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\right)\hat{O}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} + e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{O}\frac{d}{dt}\left(e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\right)$$
$$= \frac{i\hat{H}}{\hbar}e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{O}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} - e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{O}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\frac{i\hat{H}}{\hbar}$$
$$= \frac{i\hat{H}}{\hbar}\hat{O}_H(t) - \hat{O}_H(t)\frac{i\hat{H}}{\hbar} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{O}_H(t)\right]$$

Équation de Heisenberg

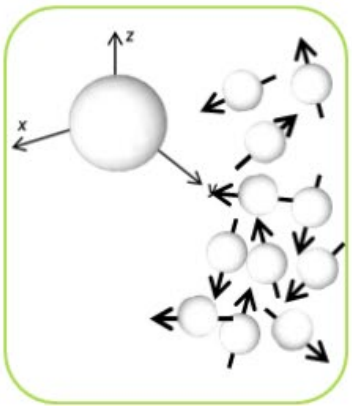
$$\boxed{\frac{d}{dt}\hat{O}_H(t) = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{O}_H(t)\right]}$$

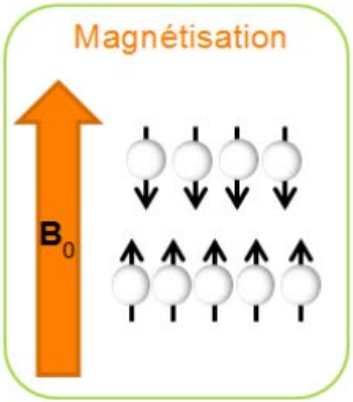
Problème : Autour de l'IRM (RMN)

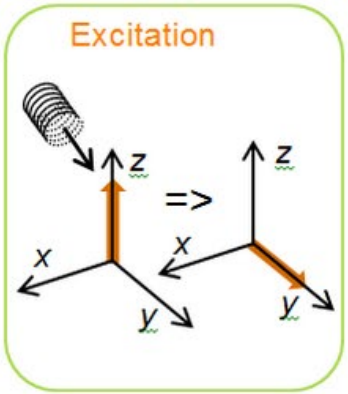
- Soit un proton de moment dipolaire magnétique $\gamma\vec{S}$ plongé dans un champ magnétique de 1T orienté selon Oz. Exprimez la différence d'énergie entre les deux niveaux en MHz ainsi qu'en eV (valeur numérique: γ=42.576 MHz/T)

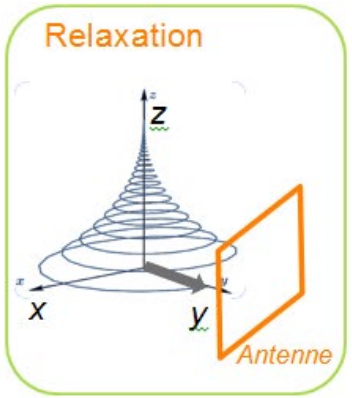
Soit une population de spin.

- Au temps t=0, tous les spins sont alignés selon la direction OZ (état |+>). 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 Sx, Sy et Sy. Comment qualifiez-vous un tel mécanisme ?











Bruit de roulement de tambours

Partie B : Hamiltonien dépendant du temps

Hamiltonien dépendant du temps

Positionnement du problème:

On considère – dans la représentation usuelle de schroedinger – :

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}(t)$$

On écrit le hamiltonien dépendant du temps de cette manière afin de faire référence à un problème où le hamiltonien stationnaire est « perturbé » par un hamiltonien d'interaction H_{int} résultant le plus souvent d'une interaction avec un autre système (comme par exemple une onde électromagnétique ou un bain thermique).

Dans un premier temps, on peut s'interroger sur la possibilité de calculer explicitement la solution de l'équation de Schroedinger. On essaie pour ce faire de généraliser l'équation gouvernant l'opérateur d'évolution :

$$i\hbar \frac{d}{dt}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0)$$

Remarquons que **si** le hamiltonien était une fonction usuelle (et non pas un opérateur), la solution explicite de cette équation serait triviale :

$$\hat{U}(t,t_0) = \underbrace{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 H(t_1)\right)}\hat{\mathbb{I}}$$

Simple facteur de phase

Mais ce résultat n'est **pas correct en général**.

Théorie des perturbations dépendant du temps

Motivation:

Le problème général étant très complexe à résoudre en général, on va se limiter ici à traiter les cas où le Hamiltonien est dominé par sa partie indépendante du temps. On écrit alors

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}(t) \quad \text{avec} \quad \hat{H}_{\text{int}}(t) = \lambda \hat{W}(t) \quad \text{où } \lambda \ll 1$$

Ceci nous permet de nous souvenir que le Hamiltonien d'interaction est très petit devant H_0. La stratégie consiste alors à chercher des solutions qui s'écrivent sous la forme de séries de λ.

Pour ce faire, on développe naturellement la solution sur la base des états propres de H_0 :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{+\infty} a_n(t)|n\rangle$$

Et on se propose d'établir un ensemble d'équations couplées pour les coefficient a_n. Avant de se lancer avec fougue, on se souvient toutefois qu' **en l'absence** de H_{int}, on a

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{+\infty} b_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|n\rangle \quad \text{avec} \quad b_n = \langle n|\psi(t=0)\rangle$$

On a donc une phase « rapide » qui provient de H_0, de même qu'un comportement plus lent résultant du Hamiltonien d'interaction. On va donc écrire les coefficients a_n(t) comme

$$a_n(t) = b_n(t) \times e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$$

Evolution lente

Théorie des perturbations dépendant du temps

Evolution des b_n :

On écrit alors le membre de gauche de l'équation de Schroedinger comme :

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle &= i\hbar\sum_k\left(\dot{b}_k(t)e^{-i\frac{E_kt}{\hbar}} - i\frac{E_kt}{\hbar}b_k(t)\right)|k\rangle \\ &= \sum_k\left(i\hbar\dot{b}_k(t) + E_kb_k(t)\right)e^{-i\frac{E_kt}{\hbar}}|k\rangle \end{aligned}$$

Tandis que le membre de droite s'écrit :

$$\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle = \sum_k b_k(t)e^{-i\frac{E_kt}{\hbar}}\left(\hat{H}_0 + \lambda\hat{W}(t)\right)|k\rangle = \sum_k b_k(t)e^{-i\frac{E_kt}{\hbar}}\left(E_k + \lambda\hat{W}(t)\right)|k\rangle$$

On projette alors sur l'état |n>. Le membre de gauche conduit à

$$\sum_k\left(i\hbar\dot{b}_k(t) + E_kb_k(t)\right)e^{-i\frac{E_kt}{\hbar}}\underbrace{\langle n|k\rangle}_{\delta_{k,n}} = \left(i\hbar\dot{b}_n(t) + E_nb_n(t)\right)e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}$$

Tandis que le membre de droite conduit à

$$\langle n|\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle = \cdots = b_n(t)e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}E_n + \lambda\sum_k b_k(t)e^{-i\frac{E_kt}{\hbar}}\langle n|\hat{W}(t)|k\rangle$$

Soit au final

$$\dot{b}_n(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_k e^{i\frac{(E_n-E_k)t}{\hbar}}\langle n|\lambda\hat{W}(t)|k\rangle\, b_k(t)$$

Pas de perte de généralité

Théorie des perturbations dépendant du temps

Evolution des b_n: $\dot{b}_n(t) = -\frac{i\lambda}{\hbar}\sum_k e^{i\omega_{nk}t}\langle n|\hat{W}(t)|k\rangle\, b_k(t), \quad \forall n \quad$ où $\quad \omega_{nk} := \frac{E_n - E_k}{\hbar}$

On obtient alors la solution implicite :

$$b_n(t) = b_n(0) - \frac{i\lambda}{\hbar}\int_0^t dt_1 \sum_k e^{i\omega_{nk}t_1}\langle n|\hat{W}(t_1)|k\rangle\, b_k(t_1), \quad \forall n$$

que l'on peut itérer, ce qui conduit à

$$b_n(t) = b_n(0) - \frac{i\lambda}{\hbar}\sum_k \int_0^t dt_1 e^{i\omega_{nk}t_1}\langle n|\hat{W}(t_1)|k\rangle\, b_k(0) +$$
$$\left(-\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^2 \sum_{k,m}\int_0^t dt_1 e^{i\omega_{nk}t_1}\langle n|\hat{W}(t_1)|k\rangle \int_0^{t_1} dt_2 e^{i\omega_{km}t_2}\langle k|\hat{W}(t_2)|m\rangle\, b_m(t_0) + \cdots$$

Soit la série en λ recherchée.

On va maintenant étudier quelques grands « classiques ». On notera toutefois deux grands cas de figure rencontrés en pratique:

- Soit l'ordre 1 permet de conclure et on se limite alors généralement à ce terme
- Soit l'ordre 1 est insuffisant pour conclure et il faut alors recourir à certaines approximations supplémentaires

Théorie des perturbations dépendant du temps

$$b_n(t) \approx b_n(0) - \frac{i\lambda}{\hbar}\int_0^t dt_1 \sum_k e^{i\omega_{nk}t_1}\langle n|\hat{W}(t_1)|k\rangle\, b_k(0).$$

Cas d'une perturbation harmonique: $\langle n|\lambda\hat{W}(t)|k\rangle = \cos(\omega t) \times \underbrace{\langle n|\lambda\hat{W}|k\rangle}_{W_{nk}}$

Comme le problème est linéaire, on peut partir d'une répartition simple des états initiaux:

$$b_n(0) = \delta_{n,i}$$

On s'intéresse alors, au premier ordre, à la population d'un niveau dit « final » ***f≠i***. (on pourra étudier l'évolution de la population du niveau *i* dans un second temps):

$$\begin{aligned} b_f(t) &\approx -\frac{iW_{fi}}{\hbar}\int_0^t dt_1 e^{i\omega_{fi}t_1}\cos(\omega t_1) \\ &\approx -\frac{iW_{fi}}{2\hbar}\int_0^t dt_1 \left(e^{i(\omega_{fi}+\omega)t_1} + e^{i(\omega_{fi}-\omega)t_1}\right) \\ &\approx -\frac{W_{fi}}{2\hbar}\left(\frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}-1}{\omega_{fi}+\omega} + \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}-1}{\omega_{fi}-\omega}\right) \end{aligned}$$

$$\omega_{fi} := \frac{E_f - E_i}{\hbar}$$

Evolution aux **petits temps** : $b_f(t) \approx -\frac{iW_{fi}}{\hbar}t$

Transition douce, indépendante de ω, proportionnelle à l'amplitude de la perturbation.

Théorie des perturbations dépendant du temps

Cas d'une perturbation harmonique:

$$\langle n|\lambda\hat{W}(t)|k\rangle = \cos(\omega t) \times \underbrace{\langle n|\lambda\hat{W}|k\rangle}_{W_{nk}}$$

$$b_f(t) \approx -\frac{W_{fi}}{2\hbar}\left(\frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}-1}{\omega_{fi}+\omega} + \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}-1}{\omega_{fi}-\omega}\right)$$

Evolution aux **temps intermédiaires** (plusieurs cycles) : On peut distinguer deux cas:

- Si ω n'est pas proche de $|\omega_{fi}|$, aucun des dénominateurs n'est grand et on a

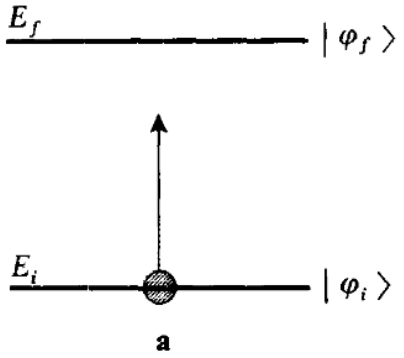
$$0 \lesssim |b_f(t)| \lesssim \frac{|W_{fi}|}{2\hbar||\omega_{if}|-\omega|}$$

avec un comportement oscillant entre ces deux bornes

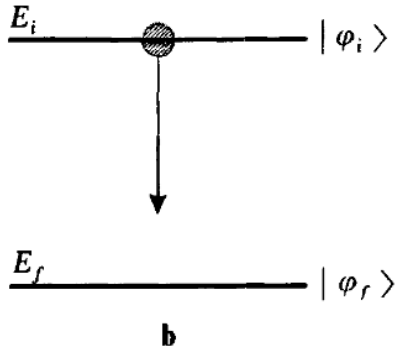
- Si ω est proche de $|\omega_{fi}|$, l'un des deux termes va dominer sur l'autre et on va observer un comportement résonant

Transition entre 2 états discrets :

$\omega_{fi} > 0$



$\omega_{fi} < 0$



Terme dominant :

$$\frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}-1}{\omega_{fi}-\omega}$$

$$\frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}-1}{\omega_{fi}+\omega}$$

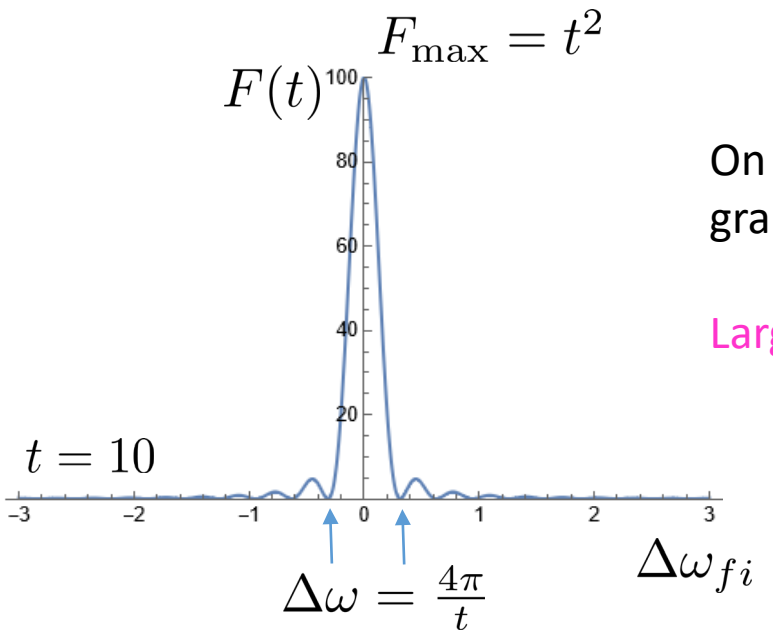
Théorie des perturbations dépendant du temps

Exemple d'une transition d'un niveau i -> f | $E_f > E_i$: Il s'agit du cas **a**.

$$b_f(t) \approx -\frac{W_{fi}}{2\hbar}\frac{e^{i(|\omega_{fi}|-\omega)t}-1}{|\omega_{fi}|-\omega} \approx -\frac{W_{fi}}{2\hbar}e^{i\frac{|\omega_{fi}|-\omega}{2}t} \times \frac{e^{i\frac{\omega-|\omega_{fi}|}{2}t}-e^{-i\frac{\omega-|\omega_{fi}|}{2}t}}{\omega-|\omega_{fi}|}$$

$$\hookrightarrow \quad |b_f(t)|^2 \approx \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\underbrace{\left(\frac{\sin\Delta\omega_{fi}t}{\Delta\omega_{fi}}\right)^2}_{F(t,\Delta\omega_{fi})} \quad \text{avec} \quad \Delta\omega_{fi} := \frac{\omega-|\omega_{fi}|}{2}$$

On obtient un résultat similaire pour le cas **b**.
On analyse la physique soit en considérant une valeur fixe de t :



Facteur de resonance bien connu

On atteint une valeur maximale d'autant plus grande que ω est proche de $|\omega_{fi}|$.

Largeur en fréquence x temps ≈ 1 (Heisenberg)

Théorie des perturbations dépendant du temps

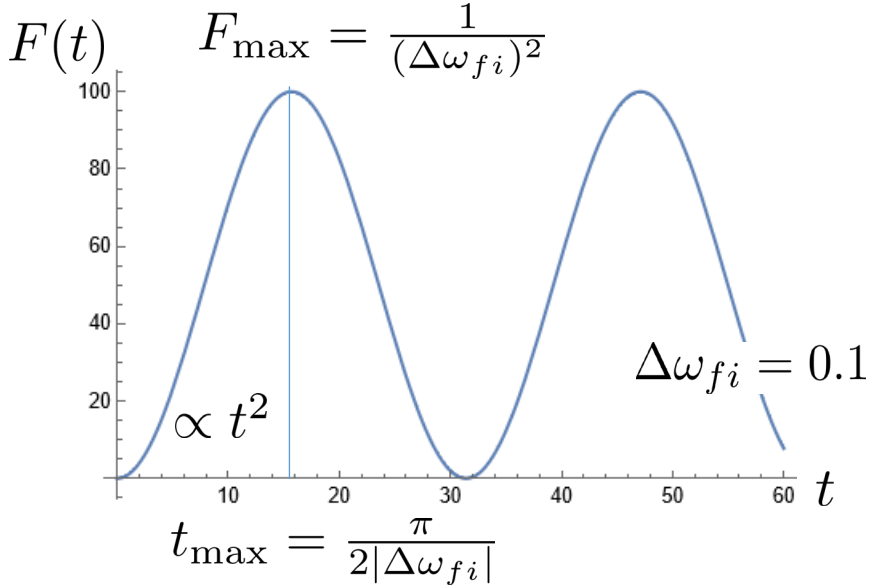
Exemple d'une transition d'un niveau i -> f | $E_f > E_i$: Il s'agit du cas **a**.

$$b_f(t) \approx -\frac{W_{fi}}{2\hbar}\frac{e^{i(|\omega_{fi}|-\omega)t}-1}{|\omega_{fi}|-\omega} \approx -\frac{W_{fi}}{2\hbar}e^{i\frac{|\omega_{fi}|-\omega}{2}t} \times \frac{e^{i\frac{\omega-|\omega_{fi}|}{2}t}-e^{-i\frac{\omega-|\omega_{fi}|}{2}t}}{\omega-|\omega_{fi}|}$$

$$\hookrightarrow \quad |b_f(t)|^2 \approx \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\underbrace{\left(\frac{\sin\Delta\omega_{fi}t}{\Delta\omega_{fi}}\right)^2}_{F(t,\Delta\omega_{fi})} \quad \text{avec} \quad \Delta\omega_{fi} := \frac{\omega-|\omega_{fi}|}{2}$$

On obtient un résultat similaire pour le cas **b**.

On analyse la physique soit en considérant une valeur fixe de $\Delta\omega_{if}$:



On atteint une valeur maximale d'autant plus grande que ω est proche de $|\omega_{fi}|$.

La population sur le niveau *f* finit toujours par décroître, sauf dans le cas improbable où $\Delta\omega_{fi} = 0$.

Théorie des perturbations dépendant du temps

Limite du développement à l'ordre 1:

$$|b_f(t)|^2 \approx \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left(\frac{\sin \Delta\omega_{fi} t}{\Delta\omega_{fi}}\right)^2$$

On sait que, par contrainte, la probabilité d'occupation d'un niveau ne peut être supérieure à l'unité.

Dans le cas où $\frac{|W_{fi}|}{2\hbar|\Delta\omega_{fi}|} \ll 1$, le résultat précédent satisfait bien cette contrainte et paraît acceptable en tout temps.

Par contre, dans le cas $\frac{|W_{fi}|}{2\hbar|\Delta\omega_{fi}|} \gtrsim 1$ voire >> 1, le résultat ne peut être acceptable que jusqu'à un temps $t \approx \frac{2\hbar}{|W_{fi}|}$.

Remarques :

- La plupart des résultats discutés précédemment s'appliquent également pour les évolutions temporelles résultant d'une perturbation fixe, en prenant simplement ω=0. La résonance a alors lieu entre deux états dégénérés.
- On n'a pas dit grand-chose des éléments $W_{fi} := \langle f|\lambda\hat{W}|i\rangle$ (amplitudes de transition), mais il faut être conscient que dans la pratique, ils ne sont pas tous différents de 0 (règles dites de « sélection »)… En particulier, on a souvent $W_{ii} = W_{ff} = 0$
- Contrairement à la formule de Rabi, les probabilités de transitions peuvent être grandes

Problèmes

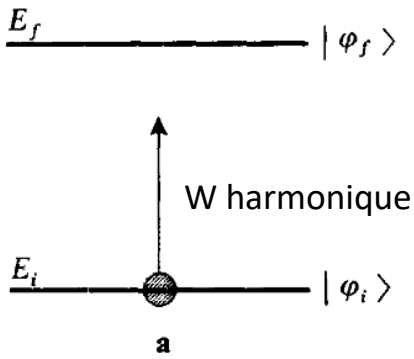
1. Reprendre le problème « Autour de l'IRM » et proposer une meilleure stratégie pour réaliser le pulse qui va permettre la « bascule des spins » dans le plan OXY. Décrivez le matériel que vous allez devoir vous procurer.

2. Soit un dipôle plongé dans un champ électrique variable (périodique) dans le temps. On supposera ici 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^e état excité.

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

Résumé méthode perturbation dép. du temps

Formule générique $\dot{b}_n(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_k e^{i\frac{(E_n-E_k)t}{\hbar}}\langle n|\lambda\hat{W}(t)|k\rangle\, b_k(t)$

	Niveaux discrets	Niveaux continus
Ordre 1	 $\|b_f(t)\|^2 \approx \frac{\|W_{fi}\|^2}{4\hbar^2}\left(\frac{\sin\Delta\omega_{fi}t}{\Delta\omega_{fi}}\right)^2$	
Ordres supérieurs		

Résolution exacte pour système à 2 niveaux et approximation séculaire

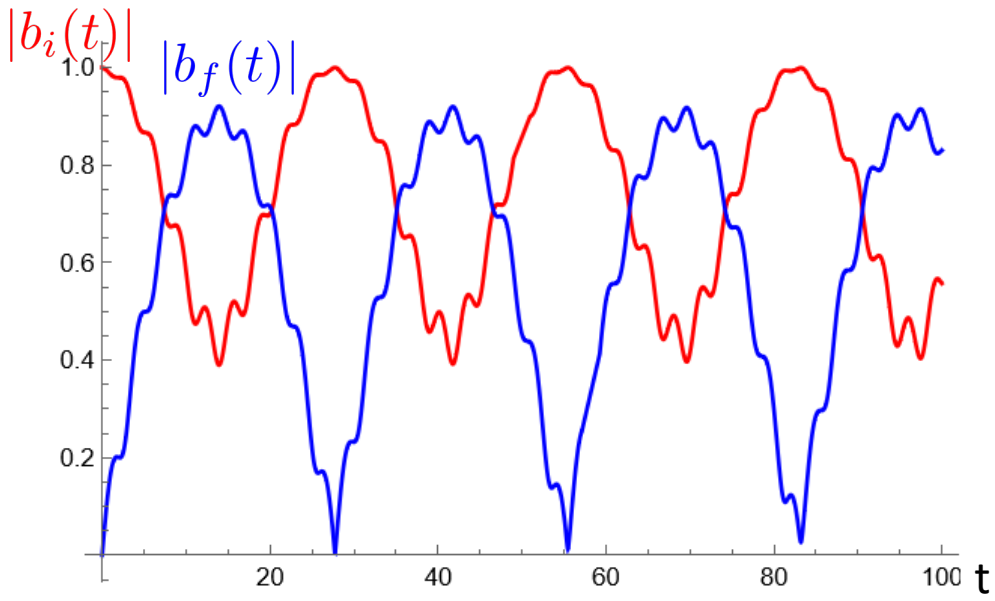
Au-delà de l'ordre 1:

Afin d'illustrer les concepts, on va considérer un système à 2 niveaux tel que la perturbation harmonique externe satisfait $W_{ii}=W_{ff}=0$. Dans ce cas, les deux équations couplées s'écrivent

$$\dot{b}_f(t) = -\frac{i}{\hbar} e^{i\omega_{fi}t} \cos(\omega t) W_{fi}\, b_i(t)$$

$$\dot{b}_i(t) = -\frac{i}{\hbar} e^{-i\omega_{fi}t} \cos(\omega t) W_{if} = -\frac{i}{\hbar} e^{-i\omega_{fi}t} \cos(\omega t) W_{fi}^{\star}\, b_f(t)$$

En injectant l'une de ces deux équations dans la dérivée de la seconde, on obtient une équation différentielle linéaire du 2e ordre à coefficients non constants, en général insoluble analytiquement => approche numérique…



$$\hbar = 1, W_{fi} = 0.2$$

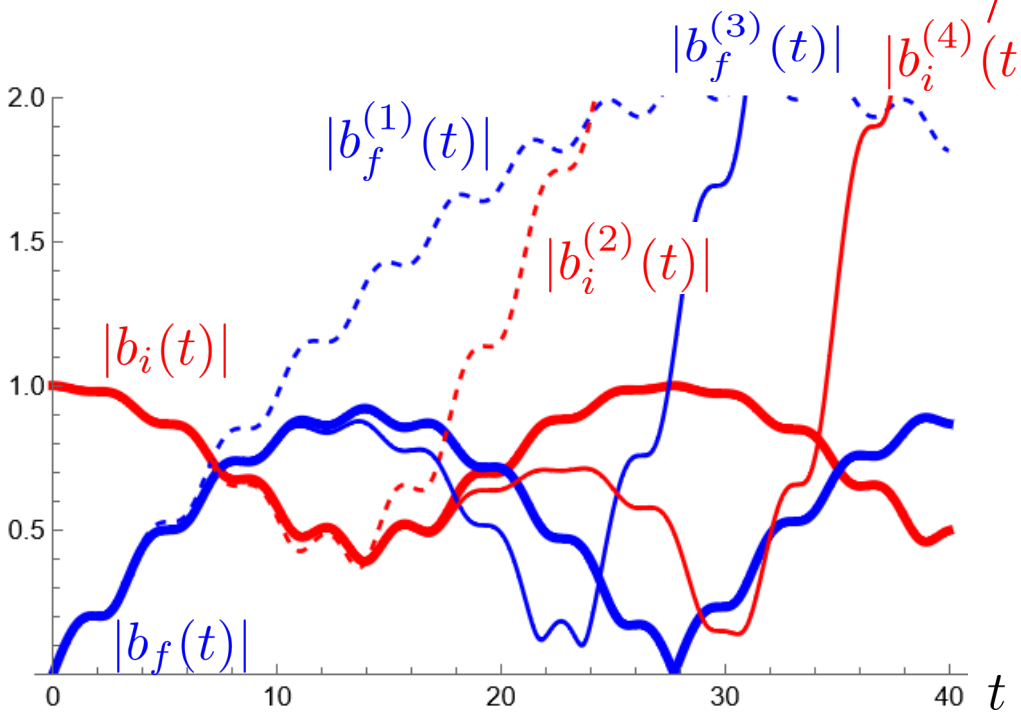
$$\omega_{fi} = 1, \omega = 0.9$$

Structure compliquée, caractérisée par des oscillations lentes et des oscillations rapides de moindre ampleur … **Que peut-on en comprendre ?**

Résolution exacte pour système à 2 niveaux et approximation séculaire

Au-delà de l'ordre 1: Comparaison avec le développement perturbatif

$$1-\frac{1}{128}\,\mathrm{Wfi}^2\left(\frac{16\,t^2\,\mathrm{Wfi}^2\,\omega\mathrm{if}^2}{(\omega-\omega\mathrm{if})^2\,(\omega+\omega\mathrm{if})^2}-\frac{8\,\mathrm{Wfi}^2\,\omega\mathrm{if}}{\omega\,(\omega-\omega\mathrm{if})^2\,(-3\,\omega+\omega\mathrm{if})\,(\omega+\omega\mathrm{if})}-\frac{8\,\mathrm{Wfi}^2\,\omega\mathrm{if}}{\omega\,(\omega-\omega\mathrm{if})\,(\omega+\omega\mathrm{if})^2\,(3\,\omega+\omega\mathrm{if})}+\frac{\mathrm{Wfi}^2}{\omega^2\,(\omega+\omega\mathrm{if})\,(3\,\omega+\omega\mathrm{if})}+\frac{\mathrm{Wfi}^2}{\omega^2\,(3\,\omega^2-4\,\omega\,\omega\mathrm{if}+\omega\mathrm{if}^2)}-\frac{32\,i\,t\,\omega\mathrm{if}\,\left(-2\,(\omega^2-\omega\mathrm{if}^2)^2+\mathrm{Wfi}^2\,(\omega^2+3\,\omega\mathrm{if}^2)\right)}{(\omega-\omega\mathrm{if})^3\,(\omega+\omega\mathrm{if})^3}-\left(4\,(-4\,(3\,\omega-\omega\mathrm{if})\,(\omega^2-\omega\mathrm{if}^2)^2+\mathrm{Wfi}^2\,(\omega^3+7\,\omega^2\,\omega\mathrm{if}+15\,\omega\,\omega\mathrm{if}^2-7\,\omega\mathrm{if}^3))\right)/\left(\omega\,(\omega-\omega\mathrm{if})^3\,(3\,\omega-\omega\mathrm{if})\,(\omega+\omega\mathrm{if})^2\right)-\left(4\,(-4\,(3\,\omega+\omega\mathrm{if})\,(\omega^2-\omega\mathrm{if}^2)^2+\mathrm{Wfi}^2\,(\omega^3-7\,\omega^2\,\omega\mathrm{if}+15\,\omega\,\omega\mathrm{if}^2+7\,\omega\mathrm{if}^3))\right)/\left(\omega\,(\omega-\omega\mathrm{if})^2\,(\omega+\omega\mathrm{if})^3\,(3\,\omega+\omega\mathrm{if})\right)+\left(8\,\omega\mathrm{if}\,(-8\,\omega\,(\omega^2-\omega\mathrm{if}^2)^2\,(9\,\omega^2-\omega\mathrm{if}^2)+\mathrm{Wfi}^2\,(41\,\omega^5-27\,\omega^4\,\omega\mathrm{if}+138\,\omega^3\,\omega\mathrm{if}^2+6\,\omega^2\,\omega\mathrm{if}^3-19\,\omega\,\omega\mathrm{if}^4-\omega\mathrm{if}^5))\right)/\left(\omega\,(-\omega+\omega\mathrm{if})^3\,(\omega+\omega\mathrm{if})^4\,(-9\,\omega^2+\omega\mathrm{if}^2)\right)+\left(8\,\omega\mathrm{if}\,(-8\,\omega\,(\omega^2-\omega\mathrm{if}^2)^2\,(9\,\omega^2-\omega\mathrm{if}^2)+\mathrm{Wfi}^2\,(41\,\omega^5-27\,\omega^4\,\omega\mathrm{if}+138\,\omega^3\,\omega\mathrm{if}^2-6\,\omega^2\,\omega\mathrm{if}^3-19\,\omega\,\omega\mathrm{if}^4+\omega\mathrm{if}^5))\right)/\left(\omega\,(-\omega+\omega\mathrm{if})^3\,(\omega+\omega\mathrm{if})^4\,(-9\,\omega^2+\omega\mathrm{if}^2)\right)-\left(8\,e^{-i\,t\,\omega\mathrm{if}}\,\omega\mathrm{if}\,(-8\,\omega\,(\omega^2-\omega\mathrm{if}^2)^2\,(9\,\omega^2-\omega\mathrm{if}^2)+\mathrm{Wfi}^2\,(-27\,\omega^4\,\omega\mathrm{if}-6\,\omega^2\,\omega\mathrm{if}^3+\omega\mathrm{if}^5+\omega\,\omega\mathrm{if}^4\,(-19-4\,i\,t\,\omega\mathrm{if})+2\,\omega^3\,\omega\mathrm{if}^2\,(69+20\,i\,t\,\omega\mathrm{if})+\omega^5\,(41-36\,i\,t\,\omega\mathrm{if}))\,(\mathrm{Cos}[t\,\omega]-i\,\mathrm{Sin}[t\,\omega])\right)/\left(\omega\,(-\omega+\omega\mathrm{if})^3\,(\omega+\omega\mathrm{if})^4\,(-9\,\omega^2+\omega\mathrm{if}^2)\right)-\left(8\,e^{-i\,t\,\omega\mathrm{if}}\,\omega\mathrm{if}\,(-8\,\omega\,(\omega^2-\omega\mathrm{if}^2)^2\,(9\,\omega^2-\omega\mathrm{if}^2)+\mathrm{Wfi}^2\,(27\,\omega^4\,\omega\mathrm{if}+6\,\omega^2\,\omega\mathrm{if}^3-\omega\mathrm{if}^5+\omega\,\omega\mathrm{if}^4\,(-19-4\,i\,t\,\omega\mathrm{if})+2\,\omega^3\,\omega\mathrm{if}^2\,(69+20\,i\,t\,\omega\mathrm{if})+\omega^5\,(41-36\,i\,t\,\omega\mathrm{if}))\,(\mathrm{Cos}[t\,\omega]+i\,\mathrm{Sin}[t\,\omega])\right)/\left(\omega\,(\omega-\omega\mathrm{if})^4\,(\omega+\omega\mathrm{if})^3\,(-9\,\omega^2+\omega\mathrm{if}^2)\right)+\left(4\,(-4\,(3\,\omega-\omega\mathrm{if})\,(\omega^2-\omega\mathrm{if}^2)^2+\mathrm{Wfi}^2\,(3\,\omega\,\omega\mathrm{if}^2\,(5-2\,i\,t\,\omega\mathrm{if})+\omega^2\,\omega\mathrm{if}\,(7-2\,i\,t\,\omega\mathrm{if})+\omega\mathrm{if}^3\,(-7+2\,i\,t\,\omega\mathrm{if})+\omega^3\,(1+6\,i\,t\,\omega\mathrm{if})))\,(\mathrm{Cos}[2\,t\,\omega]-i\,\mathrm{Sin}[2\,t\,\omega])\right)/\left(\omega\,(\omega-\omega\mathrm{if})^3\,(3\,\omega-\omega\mathrm{if})\,(\omega+\omega\mathrm{if})^2\right)+\left(4\,(-4\,(3\,\omega+\omega\mathrm{if})\,(\omega^2-\omega\mathrm{if}^2)^2+\mathrm{Wfi}^2\,(3\,\omega\,\omega\mathrm{if}^2\,(5-2\,i\,t\,\omega\mathrm{if})+\omega\mathrm{if}^3\,(7-2\,i\,t\,\omega\mathrm{if})+\omega^2\,\omega\mathrm{if}\,(-7+2\,i\,t\,\omega\mathrm{if})+\omega^3\,(1+6\,i\,t\,\omega\mathrm{if})))\,(\mathrm{Cos}[2\,t\,\omega]+i\,\mathrm{Sin}[2\,t\,\omega])\right)/\left(\omega\,(\omega-\omega\mathrm{if})^2\,(\omega+\omega\mathrm{if})^3\,(3\,\omega+\omega\mathrm{if})\right)+\frac{8\,e^{-i\,t\,\omega\mathrm{if}}\,\mathrm{Wfi}^2\,\omega\mathrm{if}\,(\mathrm{Cos}[3\,t\,\omega]-i\,\mathrm{Sin}[3\,t\,\omega])}{\omega\,(\omega-\omega\mathrm{if})\,(\omega+\omega\mathrm{if})^2\,(3\,\omega+\omega\mathrm{if})}+\frac{8\,e^{-i\,t\,\omega\mathrm{if}}\,\mathrm{Wfi}^2\,\omega\mathrm{if}\,(\mathrm{Cos}[3\,t\,\omega]+i\,\mathrm{Sin}[3\,t\,\omega])}{\omega\,(\omega-\omega\mathrm{if})^2\,(-3\,\omega+\omega\mathrm{if})\,(\omega+\omega\mathrm{if})}-\frac{\mathrm{Wfi}^2\,(\mathrm{Cos}[4\,t\,\omega]-i\,\mathrm{Sin}[4\,t\,\omega])}{\omega^2\,(3\,\omega^2-4\,\omega\,\omega\mathrm{if}+\omega\mathrm{if}^2)}-\frac{\mathrm{Wfi}^2\,(\mathrm{Cos}[4\,t\,\omega]+i\,\mathrm{Sin}[4\,t\,\omega])}{\omega^2\,(\omega+\omega\mathrm{if})\,(3\,\omega+\omega\mathrm{if})}\right)$$



Augmenter les ordres du traitement perturbatif permet de gagner en précision sur les premiers cycles « courts », mais ne permet pas de décrire / comprendre les cycles lents…

Résolution exacte pour système à 2 niveaux et approximation séculaire

Au-delà de l'ordre 1:

En décomposant le cosinus :

$$\dot{b}_i(t) = -\frac{i\,W_{fi}^{\star}}{2\hbar}\left(e^{i(\omega-\omega_{fi})t} + e^{-i(\omega_{fi}+\omega)t}\right) b_f(t)$$

$$\dot{b}_f(t) = -\frac{i\,W_{fi}}{2\hbar}\left(e^{i(\omega_{fi}+\omega)t} + e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}\right) b_i(t)$$

On considère $\omega_{fi}>0$ et ω proche de ω_{fi}. Les termes en exp(i(ω_{fi}+ω)t) et exp(-i(ω_{fi}+ω)t) vont, après intégration, donner des contributions proportionnelles à $1/|\omega_{fi}+\omega|$ – pourvu que la variation temporelle des *b*(t) soit lente, i.e. pourvu que W_{fi} ne soit pas trop important (ce qui est bien l'esprit d'une perturbation) – et peuvent dès lors être négligées : **approximation dite « séculaire »** (rotating phase approximation).

On obtient alors :

$$\dot{b}_f(t) \approx -\frac{i\,W_{fi}}{2\hbar} e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}\, b_i(t) \qquad \dot{b}_i(t) \approx -\frac{i\,W_{fi}^{\star}}{2\hbar} e^{i(\omega-\omega_{fi})t}\, b_f(t)$$

⇩ dérivation ./. t

$$\ddot{b}_f(t) \approx -\frac{i\,W_{fi}}{2\hbar} e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}\left(i(\omega_{fi}-\omega)b_i(t) + \dot{b}_i(t)\right)$$

$$\approx i(\omega_{fi}-\omega)\dot{b}_f(t) - \frac{i\,W_{fi}}{2\hbar} e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}\,\dot{b}_i(t)$$

⇩

$$\ddot{b}_f(t) \approx -i(\omega-\omega_{fi})\dot{b}_f(t) - \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\, b_f(t)$$

qui est une simple EDO à coefficients constants

Résolution exacte pour système à 2 niveaux et approximation séculaire

Approximation séculaire: $$\ddot{b}_f(t) \approx -i(\omega - \omega_{fi})\dot{b}_f(t) - \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} b_f(t)$$

Avec, pour conditions initiales : $$b_f(0) = 0, \dot{b}_f(0) = -\frac{i\,W_{fi}}{2\hbar}$$

Problème : résoudre cette équation – en commençant éventuellement par le cas le plus simple $\omega=\omega_{fi}$; pour le cas le plus général on pourra poser $a_f(t)=b_f(t)*\exp(i\,\alpha\,t)$ avec α bien choisi pour éliminer le terme contenant la dérivée par rapport au temps –, analyser la structure de la solution obtenue puis comparer avec la solution exacte numérique et commenter.

Résolution exacte pour système à 2 niveaux et approximation séculaire

Approximation séculaire: $\ddot{b}_f(t) \approx -i(\omega - \omega_{fi})\dot{b}_f(t) - \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} b_f(t)$

Avec, pour conditions initiales : $b_f(0) = 0, \dot{b}_f(0) = -\frac{i\,W_{fi}}{2\hbar}$

Problème : résoudre cette équation – en commençant éventuellement par le cas le plus simple $\omega=\omega_{fi}$ –, analyser la structure de la solution obtenue puis comparer avec la solution exacte numérique et commenter.

Réponse : après calcul, on obtient : $\mathscr{P}_{if}(t;\omega) = \frac{|W_{if}|^2}{|W_{if}|^2 + \hbar^2(\omega - \omega_{fi})^2} \sin^2\left[\sqrt{\frac{|W_{if}|^2}{\hbar^2} + (\omega - \omega_{fi})^2}\,\frac{t}{2}\right]$

- Cette solution est fort proche de la formule de Rabi, avec ω_{fi} -> $\omega_{fi} - \omega$ (et aussi W_{fi} réduit d'un facteur 2; pourquoi ?)…
- En conséquence, pour ω proche de ω_{fi}, la transition vers l'état « f » peut se faire avec une probabilité 1 au temps $t_{\text{trans}} = \frac{\hbar\pi}{|W_{fi}|}$, ce qui constitue une différence essentielle.
- Par rapport au résultat à l'ordre 1, le temps en lequel la probabilité dans *f* atteint son maximum n'est plus $\frac{\pi}{2||\omega_{fi}|-\omega|}$ (qui peut être arbitrairement grand) mais bien $\frac{\pi}{\sqrt{\frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2}+(\omega_{fi}-\omega)^2}}$
- Il y a donc une limite intrinsèque au phénomène de résonance, due au fait que le « réservoir » de probabilité dans l'état *i* diminue au cours du temps => saturation de la probabilité de transition -> *f*.

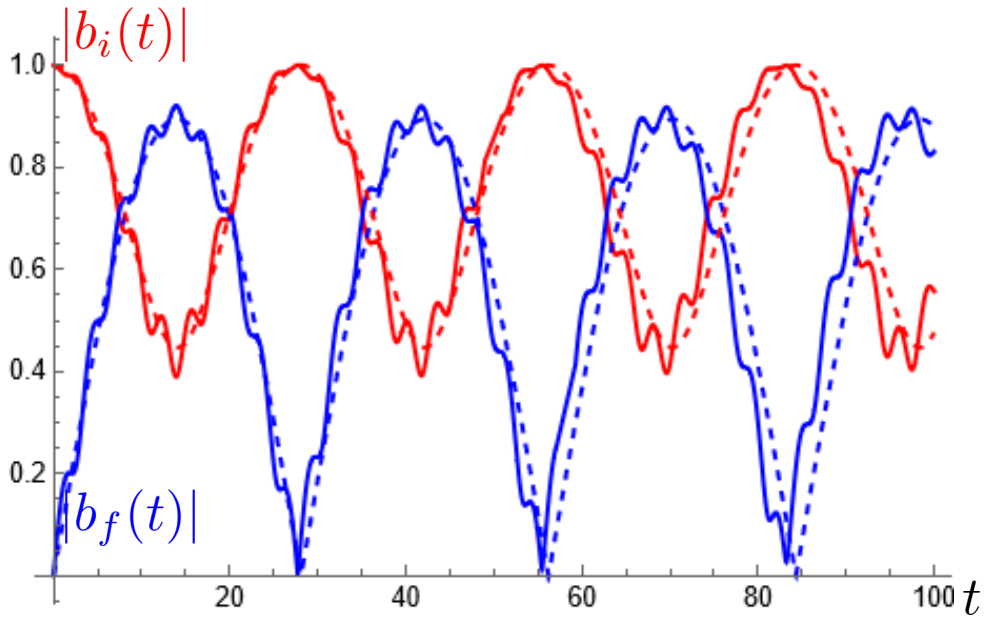
Résolution exacte pour système à 2 niveaux et approximation séculaire

Approximation séculaire: $\ddot{b}_f(t) \approx -i(\omega - \omega_{fi})\dot{b}_f(t) - \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} b_f(t)$

Avec, pour conditions initiales : $b_f(0) = 0, \dot{b}_f(0) = -\frac{i\,W_{fi}}{2\hbar}$

Problème : résoudre cette équation – en commençant éventuellement par le cas le plus simple $\omega=\omega_{fi}$ –, analyser la structure de la solution obtenue puis comparer avec la solution exacte numérique et commenter.

Réponse : Comparaison avec le résultat numérique exact:



Les résultats de l'approximation séculaire (trait interrompu) reproduisent bien les variations lentes du résultat numérique « exact ». Par contre:

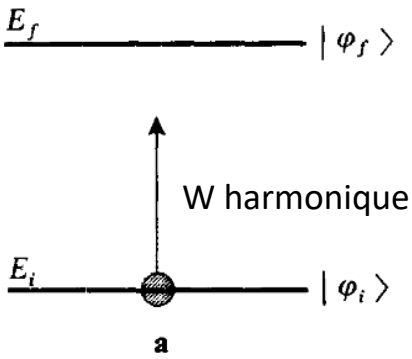
- les oscillations plus rapides ne sont pas captées par cette approximation
- on observe un déphasage progressif.

Résumé méthode perturbation dép. du temps

Formule générique $\dot{b}_n(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_k e^{i\frac{(E_n-E_k)t}{\hbar}}\langle n|\lambda\hat{W}(t)|k\rangle\, b_k(t)$

Ordre 1

Niveaux discrets



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

Niveaux continus

Ordres supérieurs

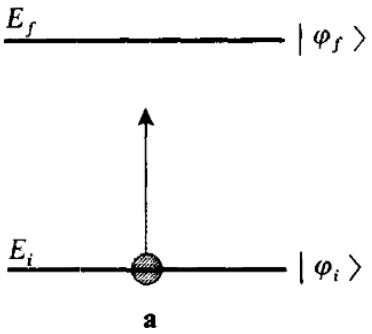
Approximation séculaire

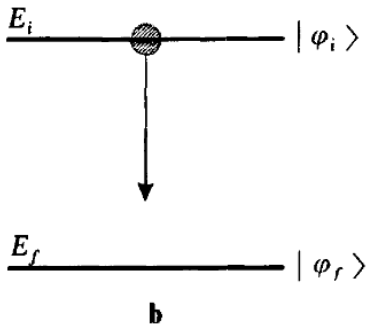
$$\mathcal{P}_f(t) \approx \frac{|W_{fi}|^2}{|W_{fi}|^2+\hbar^2(\omega-\omega_{fi})^2}\times \sin^2\left[\sqrt{\frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2}+(\omega_{fi}-\omega)^2}\,\frac{t}{2}\right]$$

Théorie des perturbations dépendant du temps

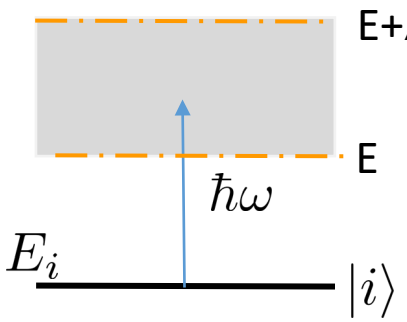
Couplage d'un état discret **au continu**:

Auparavant : transition simple entre 2 états discrets:
Résultat important : même avec un couplage faible, on peut faire transiter toute la probabilité de i -> f pourvu que l'on ait $\hbar\omega \approx |E_f - E_i|$





Etudions la situation suivante :



Continuum d'états finaux

La grande différence est que le continuum d'états doit être décrit par une densité de niveaux : $\rho(\beta, E)$ telle que la probabilité de trouver le quanton entre une énergie E et E+ΔE s'écrit

$$\mathcal{P}(E, E+\Delta E; t) = \int d\beta dE' \rho(E', \beta) |\langle E', \beta | \psi(t) \rangle|^2$$

Autres nombres quantiques (moment angulaire, spin)

Avec un peu de recul : les interactions "système quantique – environnement" mettent en jeu un continuum d'états => important de bien maîtriser ces concepts

Théorie des perturbations dépendant du temps

Couplage d'un état discret au continu:

Pour un état initial |i>, la densité de probabilité admet une expression identique au cas de 2 états discrets :

$$|\langle E', \beta|\psi(t)\rangle|^2 \approx \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} \underbrace{\left(\frac{\sin \Delta\omega_{fi} t}{\Delta\omega_{fi}}\right)^2}_{F(t,\Delta\omega_{fi})} \quad \text{avec} \quad \Delta\omega_{fi} := \frac{\omega - \frac{E'-E_i}{\hbar}}{2}$$

Avec le temps croissant, la fonction F devient de plus en plus piquée au voisinage de $\Delta\omega_{fi}$=0, soit au sens des distributions :

$$\lim_{t\to\infty} F\left(t, \Delta\omega_{fi}\right) = \pi t \delta(\Delta\omega_{fi}) = 2\pi t\hbar\, \delta(E' - E_i - \hbar\omega)$$

Et il vient alors

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(E, E+\Delta E; t) &= \tfrac{\pi t}{2\hbar} \int d\beta dE' \rho(E', \beta) |\langle E', \beta|W|i\rangle|^2 \delta(E' - E_i - \hbar\omega) \\ &= \tfrac{\pi t}{2\hbar} \int d\beta \rho(E_i + \hbar\omega, \beta) |\langle E_i + \hbar\omega, \beta|W|i\rangle|^2\end{aligned}$$

qui croît linéairement dans le temps. On définit dès lors le taux de transitions (par unité de temps) comme le taux d'accroissement de la probabilité, soit

$$\mathcal{W} = \tfrac{\pi}{2\hbar} \int d\beta \rho(E_f = E_i + \hbar\omega, \beta) |\langle E_f = E_i + \hbar\omega, \beta|W|i\rangle|^2$$

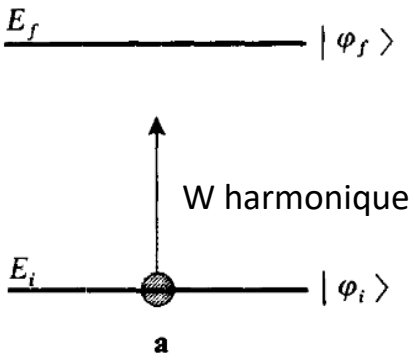
Règle d'or de Fermi ; formule équivalente si ω=0 (facteur x4)

Résumé méthode perturbation dép. du temps

Formule générique $\dot{b}_n(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_k e^{i\frac{(E_n-E_k)t}{\hbar}}\langle n|\lambda\hat{W}(t)|k\rangle\, b_k(t)$

Ordre 1

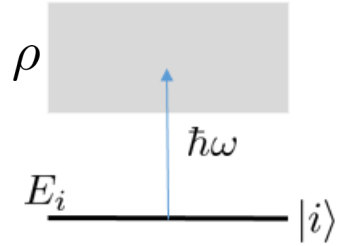
Niveaux discrets



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

Niveaux continus

Règle d'or de Fermi



$\omega \neq 0$

$$\frac{d\mathcal{P}}{dt} = \mathcal{W} = \frac{\pi}{2\hbar}\int d\beta\rho(E_f = E_i + \hbar\omega, \beta) \times |\langle E_f = E_i + \hbar\omega, \beta|W|i\rangle|^2$$

Ordres supérieurs

Approximation séculaire

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

Travail en semi-autonomie

Théorie des perturbations dépendant du temps

Remarques importantes:

- Un cas important d'interaction entre un système quantique et le monde externe est celui d'une particule plongée dans un champ électromagnétique appliqué. Le hamiltonien s'écrit alors

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} - q\vec{A}(\vec{x},t)\right)^2 + V(\vec{x}) - \gamma\vec{S}\cdot\vec{B}(\vec{x},t)$$

Charge de la particule

rapport gyromagnétique (voir cours sur les moments cinétiques)

Énergie potentielle usuelle (par exemple, puits coulombien)

$$\vec{B} = \mathrm{rot}\vec{A}$$

- On peut aussi écrire ce hamiltonien sous la forme

$$\hat{H}(t) = \underbrace{\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\vec{x})}_{H_0} - \frac{q}{m}\hat{\vec{p}}\cdot\vec{A}(\vec{x},t) - \gamma\vec{S}\cdot\vec{B}(\vec{x},t) + \underbrace{\frac{q^2\vec{A}^2(\vec{x},t)}{2m}}$$

En général faible car quadratique en le champ externe

avec un hamiltonien d'interaction linéaire en le champ électromagnétique appliqué :

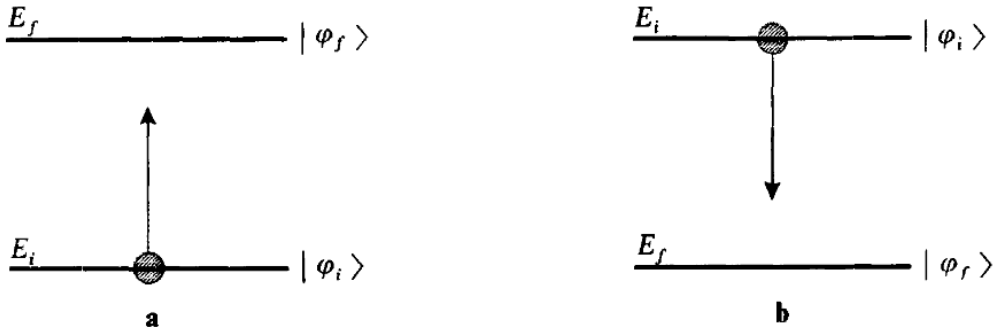
$$\hat{H}_{\mathrm{int}}(t) := \underbrace{-\frac{q}{m}\hat{\vec{p}}\cdot\vec{A}(\vec{x},t)}_{\hat{H}_{\mathrm{int},1}} \underbrace{-\gamma\vec{S}\cdot\vec{B}(\vec{x},t)}_{\hat{H}_{\mathrm{int},2}}$$

Théorie des perturbations dépendant du temps

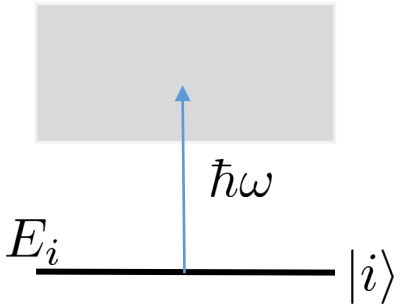
Remarques importantes:

- Dans ce contexte, les transitions considérées précédemment prennent tout leur sens :

Transitions induites entre états discrets des atomes :



Ionisation



Continuum d'états

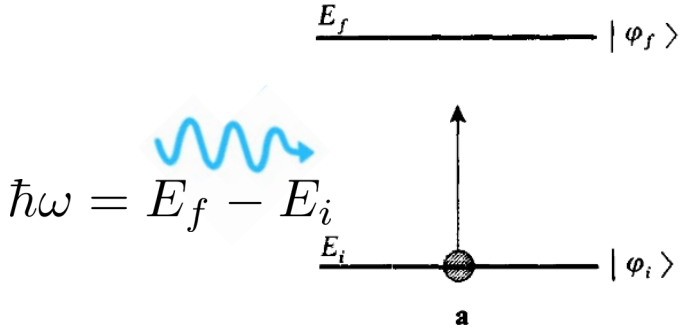
- On ne pourra toutefois pas entrer dans le détail des règles de sélection, même si elles sont fort importantes en pratique.

- Exercice : Montrer que H_{int1} implique une amplitude de transition dipolaire électrique de type $\langle f|\vec{x}|i\rangle$; l'évaluer pour des cas simples.

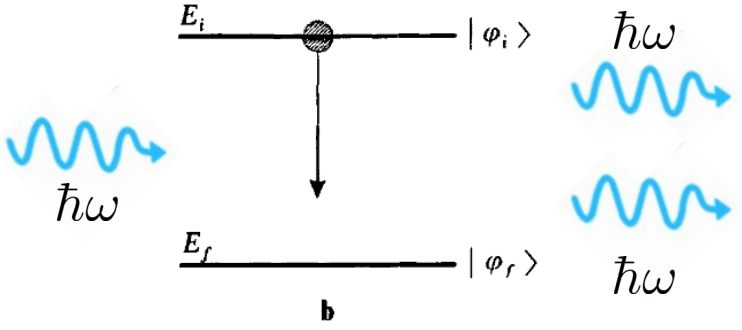
Théorie des perturbations dépendant du temps

Remarques importantes:

- Dans le hamiltonien particule – champ électrique affiché précédemment, il y a une dissymétrie importante entre le traitement de la particule (mécanique quantique) et celui du champ électromagnétique (traitement classique).
- En réalité, il est connu que les champs électromagnétiques sont quantifiés et constitués de photons. Dans une version plus complète de la mécanique quantique, on a :



Absorption d'un photon et excitation de la particule vers un niveau supérieur



Création d'un 2e photon à partir d'un photon incident et d'un niveau excité (avec transition -> état inférieur)

- Ces deux mécanismes peuvent toutefois être correctement décrits en supposant un champ classique (tant que le nombre de photons qu'il renferme est tel qu'il peut être considéré comme « macroscopique »)…

Au-delà de la (dé)croissance linéaire

Couplage d'un état discret au continu, **suite**:

Il est clair que la croissance linéaire (en temps) de la probabilité de transition de |i> -> |f> ne peut se poursuivre indéfiniment (voir cas de la transition entre 2 états discrets)

Question pour un champion : va-t-on observer des phénomènes d'oscillation « lente » comme dans le cas de 2 états discrets ?

Pour répondre à une telle question, il faut évidemment soit aller au-delà de l'ordre 1 dans la théorie des perturbations, soit adopter une méthode plus globale.

Au-delà de la (dé)croissance linéaire

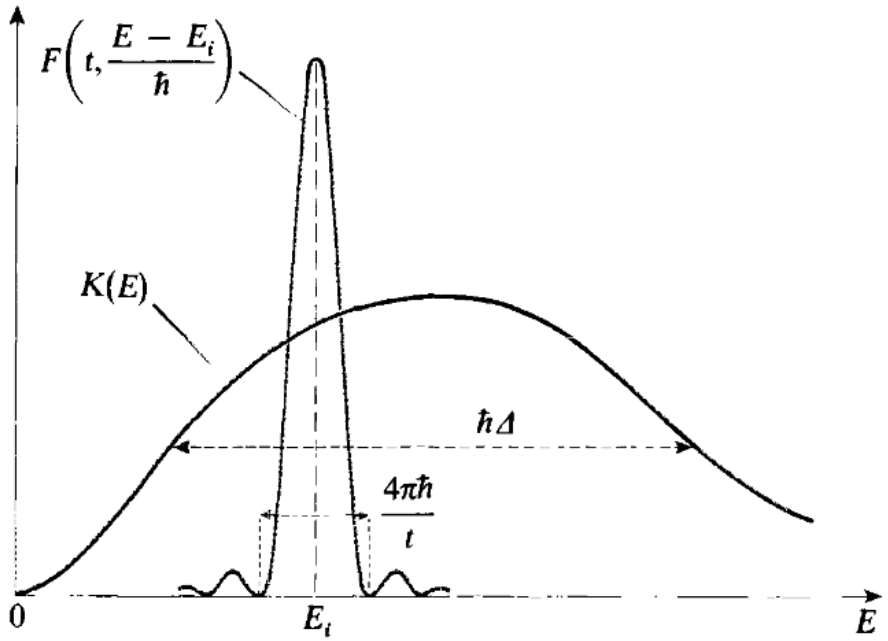
Rappel des principaux résultats de la TPDT : (désormais: ω=0 => pas de transfert d'énergie)

Probabilité de transition vers les états |f> du continuum d'énergie E :

$$\mathcal{P}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\int d\beta dE \rho(E,\beta)|\langle E,\beta|W|i\rangle|^2 F(t,\omega_{fi}) \qquad \text{où} \quad F(t,\Delta\omega_{fi}) = \left(\frac{\sin\frac{\omega_{fi}}{2}t}{\frac{\omega_{fi}}{2}}\right)^2$$

A la limite des « grands » temps, on a $\mathcal{P}(t) \approx \Gamma t$ … et donc, la probabilité de survie sur l'état |i> vaut $\mathcal{P}_i(t) \approx 1 - \Gamma t$, ce qui ne peut être vrai que pour Γt << 1.

Posons $K(E) = \int d\beta \rho(E,\beta)|\langle E,\beta|W|i\rangle|^2$ et supposons que cette fonction possède un support $\hbar\Delta$ sur lequel elle varie doucement :



On voit facilement que la croissance linéaire est établie dès que la largeur de la fonction F – de l'ordre de $\frac{\hbar}{t}$ – devient (nettement) inférieure a $\hbar\Delta$, soit t>>1/Δ.

La croissance linéaire en temps est donc valable pour

$$\frac{1}{\Delta} \ll t \ll \frac{1}{\Gamma} = \frac{\hbar}{2\pi K(E_i)}$$

On suppose par la suite que la fonction K satisfait $K(E_i) \ll \hbar\Delta$ de sorte qu'un tel régime est possible

Au-delà de la (dé)croissance linéaire

Modèle étendu (évolution de l'état |i>):

$$|\psi(t)\rangle = b_i(t)e^{-\frac{iE_it}{\hbar}}|\varphi_i\rangle + \int \mathrm{d}\alpha\; b(\alpha,t)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}|\alpha\rangle$$

$$= \{E,\beta\}$$

On néglige les transitions entre les états du continuum + approximation séculaire

$$\begin{cases} i\hbar\dot{b}_i(t) = \int \mathrm{d}\alpha\; e^{\frac{i(E_i-E)t}{\hbar}}\langle\varphi_i|W|\alpha\rangle b(\alpha,t) \\ i\hbar\dot{b}(\alpha,t) = e^{\frac{i(E-E_i)t}{\hbar}}\langle\alpha|W|\varphi_i\rangle b_i(t) \end{cases}$$

L'état |i> bénéficie d'un « retour » de la part de **tous** les états du continuum

On intègre la dernière équation et on injecte la solution dans la première. Il en résulte :

$$\dot{b}_i(t) = -\frac{1}{\hbar^2}\int \mathrm{d}\alpha \int_0^t \mathrm{d}t' e^{\frac{i(E_i-E)(t-t')}{\hbar}}|\langle\alpha|W|\varphi_i\rangle|^2 b_i(t')$$

On intègre sur β au sein de α= {E,β} et on utilise la définition de K(E):

$$\dot{b}_i(t) = -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^{+\infty} \mathrm{d}E \int_0^t \mathrm{d}t' K(E) e^{\frac{i(E_i-E)(t-t')}{\hbar}} b_i(t')$$

Équation intégro-différentielle sur b_i

Au-delà de la (dé)croissance linéaire

Modèle étendu :

On définit alors $$g(E_i, t-t') = -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^{+\infty} \mathrm{d}E\; K(E) e^{\frac{i(E_i-E)(t-t')}{\hbar}}$$

Comme étant le noyau de l'équation intégro-différentielle.

On comprend bien que *g* est essentiellement non nulle pour t-t' de l'ordre $1/\Delta$ ou plus petit. Pour t-t' > $1/\Delta$, l'exponentielle effectue plusieurs cycles sur le domaine d'intégration $\hbar\Delta$ et s'amenuise rapidement.

Pourvu que b_i varie peu sur cette échelle – ce qui est exactement notre hypothèse de travail ($\Gamma \ll \Delta$) –, on peut alors approximer $b_i(t')$ par $b_i(t)$ au sein de l'équation ID, et on obtient.

$$\dot{b}_i(t) = \int_0^t \mathrm{d}t' g(E_i, t-t')\; b_i(t)$$

Il reste à procéder à l'intégrale sur t' pour obtenir la valeur du coefficient directeur de l'ED.
On montre que cette intégrale atteint sa valeur asymptotique dès que $t \gtrsim \frac{1}{\Delta}$

Avec $$\lim_{t\to+\infty}\int_0^{+\infty} \mathrm{d}\tau e^{\frac{i(E_i-E)\tau}{\hbar}} = \hbar\left[\pi\delta(E_i-E) + i\mathcal{P}\left(\frac{1}{E_i-E}\right)\right]$$

Partie principale $\mathcal{P}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{f(x)}{x-x_0} := \lim_{\epsilon\to 0}\left(\int_{-\infty}^{x_0-\epsilon} dx \frac{f(x)}{x-x_0} + \int_{x_0+\epsilon}^{+\infty} dx \frac{f(x)}{x-x_0}\right)$

Et donc, dans ce régime :

$$\dot{b}_i(t) \approx -\tfrac{1}{\hbar}\int_0^{+\infty} dE K(E)\left[\pi\delta(E-E_i) + i\mathcal{P}\left(\tfrac{1}{E_i-E}\right)\right] b_i(t)$$

Au-delà de la (dé)croissance linéaire

Modèle étendu : $\dot{b}_i(t) \approx -\frac{1}{\hbar}\int_0^{+\infty} dE K(E)\left[\pi\delta(E-E_i) + i\mathcal{P}\left(\frac{1}{E_i-E}\right)\right] b_i(t)$

$$\approx -\frac{i}{\hbar}\int_0^{+\infty} dE K(E)\left[\mathcal{P}\left(\frac{1}{E_i-E}\right) - i\pi\delta(E-E_i)\right] b_i(t)$$

En reprenant les équations diff. génériques des b_n dans la méthode des pert.dep. de t :

$$\dot{b}_n(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_k e^{i\frac{(E_n-E_k)t}{\hbar}}\langle n|\lambda\hat{W}(t)|k\rangle\, b_k(t)$$

on comprend que l'on peut formuler

$$\int_0^{+\infty} dE K(E)\left[\mathcal{P}\left(\frac{1}{E_i-E}\right) - i\pi\delta(E-E_i)\right] \equiv \langle n|H_{\text{int,eff}}|k\rangle\,\delta_{n,k}$$

i.e. un hamiltonien d'interaction effectif agissant sur l'état |i>.

En posant $\delta E = \mathcal{P}\int_0^{+\infty} dE\frac{K(E)}{E_i-E}$, il vient $\langle i|H_{\text{int,eff}}|i\rangle = \delta E - i\pi K(E_i)$

$$\Rightarrow \dot{b}_i(t) = -\frac{i}{\hbar}\left(\delta E - i\pi K(E_i)\right) b_i(t)$$

$$\Rightarrow b_i(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(\delta E - i\pi K(E_i))t}\, b_i(0) = e^{-\frac{i\delta E}{\hbar}t - \frac{\pi K(E_i)}{\hbar}t}$$

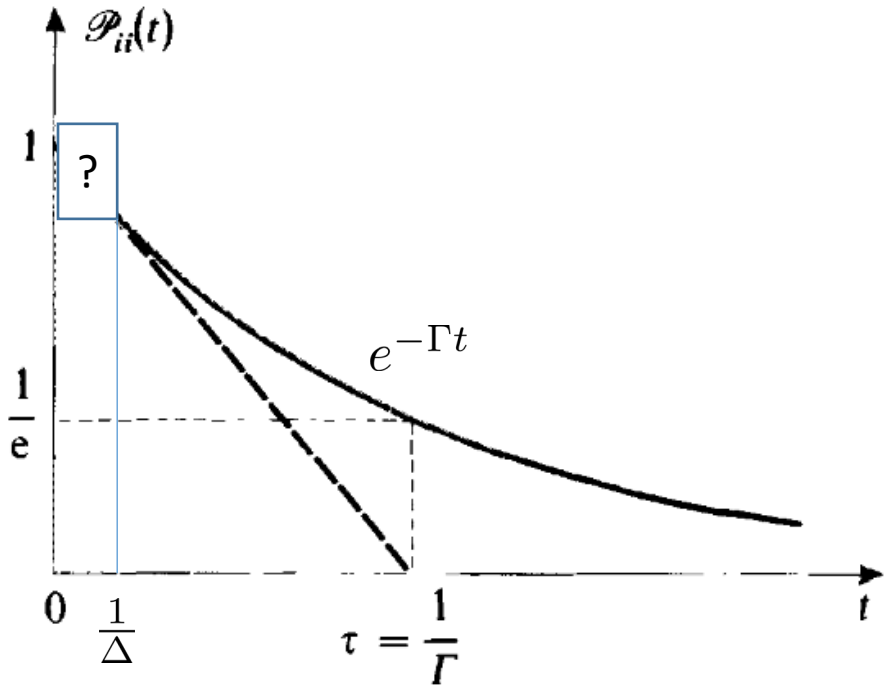
Déplacement de l'énergie de l'état $E_i \to E_i + \delta E$ dû au couplage avec les états du continuum (peut aussi être déduit dans une théorie des perturbations indépendante du temps); peut être omis en 1re lecture.

Au-delà de la (dé)croissance linéaire

Modèle étendu : $b_i(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(\delta E - i\pi K(E_i))t}\, b_i(0) = e^{-\frac{i\delta E}{\hbar}t - \frac{\pi K(E_i)}{\hbar}t}$

Décroissance exponentielle de la population dans l'état |i> !!!

$$\mathcal{P}_{ii}(t) = |b_i(t)|^2 = e^{-\frac{2\pi K(E_i)}{\hbar}t} = e^{-\Gamma t}$$



Temps de vie

Contrairement au cas à deux niveaux, la probabilité ne « rebondit » pas lorsqu'elle quitte l'état |i>. Le poids a en fait tendance à se répartir sur tous les niveaux continus sans retour majeur vers l'état |i> : **irréversibilité**.

Ceci est le premier exemple que nous rencontrons en mécanique quantique de **relaxation**.

Pour un système constitué de charges électriques, tous les niveaux excités sont affectés par ce phénomène… seul l'état fondamental est préservé (pas de décroissance possible).

Au-delà de la (dé)croissance linéaire

Modèle étendu : population des états du continuum

On a maintenant $b_i(t) = e^{-\frac{i\delta E}{\hbar}t - \frac{\pi K(E_i)}{\hbar}t}$ pour $t \gtrsim \frac{1}{\Delta}$

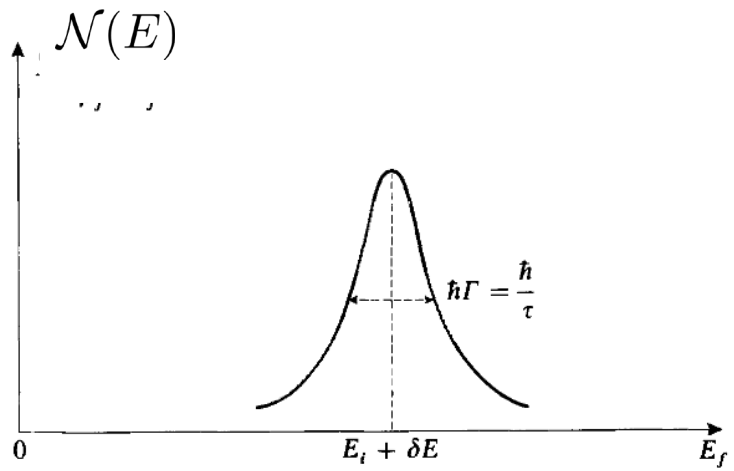
Et $\dot{b}(\alpha = \{E, \beta\}, t) = \frac{1}{i\hbar} e^{i\frac{E-E_i}{\hbar}t} \langle \alpha | W | i \rangle b_i(t) = \frac{1}{i\hbar} e^{i\frac{E-E_i-\delta E}{\hbar}t - \frac{\Gamma}{2}t} \langle \alpha | W | i \rangle$

Après intégration, on trouve asymptotiquement :

$$b(\alpha, \infty) = \langle \alpha | W | i \rangle \times \frac{1}{E - E_i - \delta E + i\frac{\hbar\Gamma}{2}}$$

d'où une distribution de niveaux (après intégration sur β)

$$\mathcal{N}(E) = \frac{K(E)}{(E-E_i-\delta E)^2 + \frac{\hbar^2\Gamma^2}{4}} \approx \frac{K(E_i)}{(E-E_i-\delta E)^2 + \frac{\hbar^2\Gamma^2}{4}} \approx \frac{1}{2\pi} \frac{\hbar\Gamma}{(E-E_i-\delta E)^2 + \frac{\hbar^2\Gamma^2}{4}}$$



- Distribution piquée en $E_i + \delta E$.
- Largeur $\hbar\Gamma$!!! « l'état |i> peut seulement être observé durant son temps de vie τ. Lorsqu'on essaie de déterminer son énergie en mesurant l'état final du système, l'incertitude ΔE sur le résultat ne peut être inférieure à $\hbar/\tau$ » Cohen-Tanoudji.

Résumé

- Résolution exacte: souvent impossible. Une formule de référence : oscillations de Rabi

- Méthode des perturbations dépendant du temps « brute »: s'applique dans le cas des niveaux discrets et des continuum… fonctionne tant que l'évolution globale des probabilités reste modérée (pas trop près de la fréquence de résonance ou alors pour des petits temps).

- Pour aller plus loin : approximation séculaire dans le cas des états discrets => cycles longs et quasi périodicité.

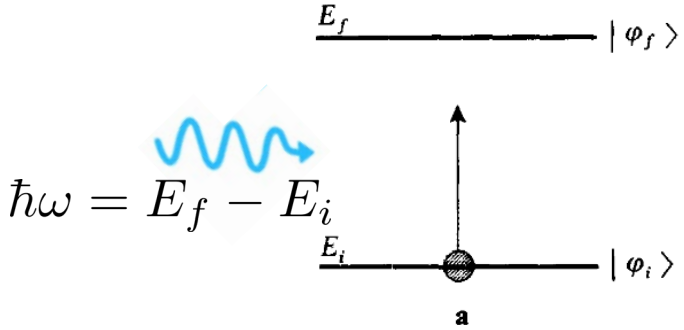
- A grand temps, les transitions vers le continuum se font de manière irréversible : relaxation

- En particulier, les niveaux atomiques ou moléculaires excités peuvent émettre un photon de manière spontanée (couplage avec le champ quantifié). Il en résulte une largeur spectrale en accord avec le principe de Heisenberg.

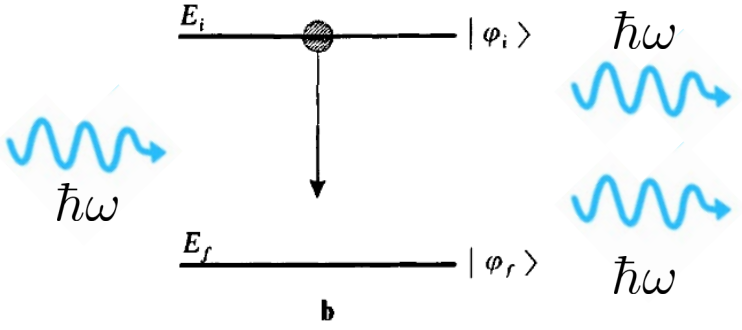
Théorie des perturbations dépendant du temps

Remarques importantes:

- Dans le hamiltonien particule – champ électrique affiché précédemment, il y a une dissymétrie importante entre le traitement de la particule (mécanique quantique) et celui du champ électromagnétique (traitement classique).
- En réalité, il est connu que les champs électromagnétiques sont quantifiés et constitués de photons. Dans une version plus complète de la mécanique quantique, on a :



Absorption d'un photon et excitation de la particule vers un niveau supérieur



Création d'un 2e photon à partir d'un photon incident et d'un niveau excité (avec transition -> état inférieur)

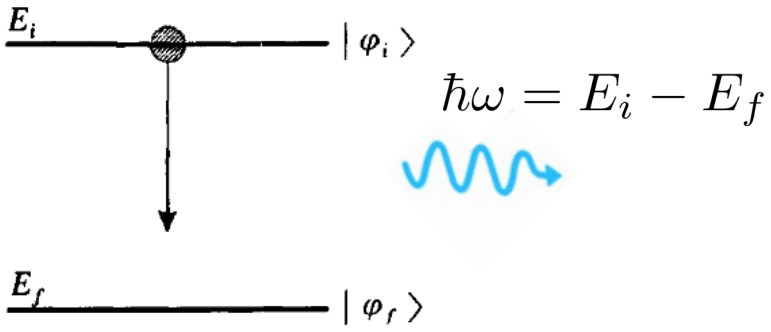
- Ces deux mécanismes peuvent toutefois être correctement décrits en supposant un champ classique (tant que le nombre de photons qu'il renferme est tel qu'il peut être considéré comme « macroscopique »)…

Théorie des perturbations dépendant du temps

Remarques importantes:

- … mais il existe un 3e mécanisme propre aux champs électromagnétiques quantiques :

Emission spontanée : le photon est « auto généré » tandis que la particule transite dans un état d'énergie inférieure, par exemple l'état fondamental !!!



- => Les états excités d'une particule chargée (ou possédant un moment gyromagnétique) ne sont pas stables vis-à-vis du processus d'émission spontanée. C'est un des mécanismes qui contribuent à la relaxation des systèmes quantiques. Relaxation = retour d'un système perturbé à l'équilibre.

- Puisque les photons forment un continuum d'états, on est proche de la dernière situation discutée : transition $|i, 0\gamma\rangle \rightarrow |f, 1\gamma\rangle$, qui permet alors d'évaluer la demi-vie de l'état excité.

- N.B.: Un tel calcul ne peut être effectué rigoureusement que dans le cadre de l'électrodynamique quantique… Voir par exemple cours « bonus TQC » sur le moodle de la physique quantique

Interlude « TQC » : le champ quantique

- En supposant la lecture des slides « TQC », au moins jusqu'à la planche 42…
- Le $H_{int,1}$ s'écrit alors, dans une version TQC : $\hat{H}_{\mathrm{int},1}(t) := -\frac{q}{m}\,\hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{A}}(\vec{x},t)$ où la nouveauté est le potentiel vecteur quantique $\hat{\vec{A}}(\vec{x},t)$.
- Ce dernier s'écrit explicitement en fonction d'opérateurs de création $a^\dagger$ et de destruction a sous la forme suivante (généralisation du champ scalaire $\hat{\phi}$ de TQC page 29)

$$\hat{\vec{A}}(\vec{x},t) \propto \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3\,2\omega_{\vec{k}}}} \sum_{r=1}^{2} \left(\vec{\xi}_r \hat{a}_r(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} + \vec{\xi}_r^{\star} \hat{a}_r^\dagger(\vec{k}) e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} \right)$$

Somme sur les polarisations transverses

- Les opérateurs de création satisfont les relations de quantification

$$[\hat{a}_r(\vec{k}), \hat{a}_s^\dagger(\vec{l})] = \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{l})\delta_{rs}$$

- Toutes les expériences de photoniques étant réalisées dans des cavités, il est plus réaliste de considérer une somme discrète sur les nombres d'onde. On écrit alors

$$\hat{\vec{A}}(\vec{x},t) \propto \sum_{\vec{k}} \sum_{r=1}^{2} \left(\vec{\xi}_r \hat{a}_{\vec{k},r} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} + \vec{\xi}_r^{\star} \hat{a}_{\vec{k},r}^\dagger e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} \right)$$

avec dans ce cas $[\hat{a}_{\vec{k},r}, \hat{a}_{\vec{l},s}^\dagger] = \delta_{\vec{k},\vec{l}}\,\delta_{rs}$

Bonus hors cours !!!

Interlude « TQC » : état de photons

- Avant de procéder au calcul des processus d'émission et d'absorption de photon, il convient de bien définir les états, notamment les **états à plusieurs photons** (correspondant, à la limite d'un grand nombre de photons, à des ondes classiques).
- Les **états à un photon** correspondent simplement à $|1_{\vec{k},r}\rangle = \hat{a}^\dagger_{\vec{k},r}|0\rangle$ comme dans le cours de TQC. On a en effet la relation d'orthogonalité

vide (état sans photon)

$$\langle 1_{\vec{l},s}|1_{\vec{k},r}\rangle = \langle 0|\hat{a}_{\vec{l},s}\hat{a}^\dagger_{\vec{k},r}|0\rangle = \langle 0|\underbrace{[\hat{a}_{\vec{l},s},\hat{a}^\dagger_{\vec{k},r}]}_{\delta_{\vec{k},\vec{l}}\,\delta_{rs}} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k},r}\hat{a}_{\vec{l},s}|0\rangle = \delta_{\vec{k},\vec{l}}\,\delta_{rs}\underbrace{\langle 0|0\rangle}_{1}$$

Ce dernier terme appliqué au vide -> 0 (on ne peut pas détruire un photon qui n'est pas present)

qui est de plus correctement normalisé.

- Pour les **états à deux photons**, on comprend assez bien qu'ils sont obtenus en appliquant deux opérateurs de création au vide : $|2_{\{\vec{k}_1,r_1;\vec{k}_2,r_2\}}\rangle \propto \hat{a}^\dagger_{\vec{k}_1,r_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_2,r_2}|0\rangle$

… dans n'importe quel ordre (les opérateurs de creation commutent entre eux), ce qui est la signature des bosons

- La normalisation est toutefois plus complexe. On a en effet

$$\langle 0|\hat{a}_{\vec{l}_1,s_1}\hat{a}_{\vec{l}_2,s_2}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_1,r_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_2,r_2}|0\rangle = \delta_{\vec{l}_1,\vec{k}_1}\delta_{\vec{l}_2,\vec{k}_2}\delta_{s_1,r_1}\delta_{s_2,r_2} + \delta_{\vec{l}_1,\vec{k}_2}\delta_{\vec{l}_2,\vec{k}_1}\delta_{s_1,r_2}\delta_{s_2,r_1}$$

… où toutes les permutations sont possibles au vu de l'indiscernabilité des photons

Bonus hors cours !!!

Interlude « TQC » : état de photons

$$\langle 0|\hat{a}_{\vec{l}_1,s_1}\hat{a}_{\vec{l}_2,s_2}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_1,r_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_2,r_2}|0\rangle = \delta_{\vec{l}_1,\vec{k}_1}\delta_{\vec{l}_2,\vec{k}_2}\delta_{s_1,r_1}\delta_{s_2,r_2} + \delta_{\vec{l}_1,\vec{k}_2}\delta_{\vec{l}_2,\vec{k}_1}\delta_{s_1,r_2}\delta_{s_2,r_1}$$

… où toutes les permutations sont possibles au vu de l'indiscernabilité des photons

- En particulier, pour la normalisation

$$\langle 0|\hat{a}_{\vec{k}_1,r_1}\hat{a}_{\vec{k}_2,r_2}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_1,r_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_2,r_2}|0\rangle = 1 + \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_2}\delta_{r_1,r_2}$$

- Dans le cas où $\vec{k}_1 \neq \vec{k}_2$ ou $r_1 \neq r_2$, la double application d'un opérateur de création produit un état correctement normalisé. Dans le cas contraire, les 2 photons occupent le même état quantique et on doit diviser par un facteur $\sqrt{2}$:

$$|2_{\{\vec{k}_1,r_1;\vec{k}_2,r_2\}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+\delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_2}\delta_{r_1,r_2}}}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_1,r_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_2,r_2}|0\rangle$$

Il s'agit d'une relation générique pour tous les bosons

- Pour un tel état, on écrit plus synthétiquement $|2_{\vec{k},r}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}^\dagger_{\vec{k},r}\right)^2|0\rangle$.

- La conséquence directe de la normalisation (due à la nature bosonique des photons) :

$$\hat{a}^\dagger_{\vec{l},s}|1_{\vec{k},r}\rangle = |2_{\{\vec{k},r;\vec{l},s\}}\rangle \quad \text{tandis que} \quad \hat{a}^\dagger_{\vec{k},r}|1_{\vec{k},r}\rangle = \sqrt{2}\,|2_{\vec{k},r}\rangle$$

- **On a donc une probabilité supérieure de créer un état à deux photons *identiques*, et donc en cohérence (effet de renforcement)**

Bonus hors cours !!!

Interlude « TQC » : état de photons

- Les relations précédentes se généralisent au **cas de n photons**, avec 2 cas limites :
- Lorsque tous les nombres d'ondes (et les polarisations) sont distinct(e)s, on a $|n_{\{\vec{k}_1,r_1;\ldots;\vec{k}_n,r_n\}}\rangle = \Pi_{o=1}^{n}\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}_o,r_o}|0\rangle$ et $\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}_{n+1},r_{n+1}}|n_{\{\vec{k}_1,r_1;\ldots;\vec{k}_n,r_n\}}\rangle = |n+1_{\{\vec{k}_1,r_1;\ldots;\vec{k}_{n+1},r_{n+1}\}}\rangle$, pourvu que $\vec{k}_{n+1}, r_{n+1}$ ne corresponde à aucun des photons déjà existant.
- Lorsque les n photons sont dans le même état, on a $|n_{\vec{k},r}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},r}\right)^n|0\rangle$ et l'ajout d'un photon de même nature conduit à

$$\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},r}|n_{\vec{k},r}\rangle = \sqrt{n+1}|n+1_{\vec{k},r}\rangle$$

- **L'effet d'amplification lié au fait de créer un photon dans le même état que les photons présents se trouve donc amplifié avec le nombre !!!**
- Toujours dans ce cas de n photons identiques, notons la relation suivante (pour n>0):

$$\hat{a}_{\vec{k},r}|n_{\vec{k},r}\rangle = \sqrt{n}|n-1_{\vec{k},r}\rangle$$

- On est maintenant prêt pour aborder les notions d'absorption et d'émission de photons… On négligera l'indice de polarisation dans les notations par souci de légèreté, mais il est bien entendu sous-entendu.

Bonus hors cours !!!

Interlude « TQC » : absorption d'un photon

$$\hat{\vec{A}}(\vec{x},t) \propto \sum_{\vec{k}} \sum_{r=1}^{2} \left(\vec{\xi}_r \hat{a}_{\vec{k},r} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} + \vec{\xi}_r^{\star} \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},r} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} \right)$$

- Supposons que l'on soit en présence d'un **état initial contenant un photon** de nombre d'onde $\vec{l}$. Alors, l'opérateur de destruction correspondant *a* dans l'expression de $\hat{\vec{A}}(\vec{x},t)$ va amener le contenu photonique à 0 photon, via l'amplitude de transition $\langle 0_\gamma | \hat{\vec{A}} | 1_{\vec{l}} \rangle$, où $|0_\gamma\rangle$ représente le vide des photons et $|n_{\vec{l}}\rangle$ un état contenant n photons de nbre d'onde $\vec{l}$. On a en effet

$$\hat{a}_{\vec{k}} |n_{\vec{l}}\rangle = \delta_{\vec{k},\vec{l}} \sqrt{n} |(n-1)_{\vec{l}}\rangle$$

On ne peut détruire un photon de nbre d'onde $\vec{k}$ que si $\vec{k} = \vec{l}$.

et donc $\langle 0_\gamma | \hat{\vec{A}} | 1_{\vec{l}} \rangle \propto \vec{\xi}_r e^{i(\vec{l}\cdot\vec{x}-\omega_{\vec{l}}t)}$

- On constate au signe du facteur de phase temporel qu'il s'agit d'une perturbation harmonique qui va faire passer l'atome d'un état d'énergie $E_i \longmapsto E_f = E_i + \hbar\omega_{\vec{l}}$. On interprète donc ce processus comme l'excitation de l'atome résultant de l'absorption du photon incident.
- Pour calculer la probabilité de transition, il faut effectuer le calcul de la partie « atomique » de l'amplitude de transition : $-\frac{q}{m} \langle f | e^{i\vec{l}\cdot\vec{x}} \vec{\xi}_r \cdot \hat{\vec{p}} | i \rangle$

Bonus hors cours !!!

Interlude « TQC » : émission spontanée

$$\hat{\vec{A}}(\vec{x},t) \propto \sum_{\vec{k}} \sum_{r=1}^{2} \left(\vec{\xi}_r \hat{a}_{\vec{k},r} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} + \vec{\xi}_r^{\star} \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},r} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} \right)$$

- Supposons maintenant que l'on soit en présence d'un **état initial ne contenant aucun photon**. Dans ce Alors, l'opérateur de création $a^{\dagger}$ dans l'expression de $\hat{\vec{A}}(\vec{x},t)$ permet de créer un photon dans l'état final. C'est le processus **d'émission spontanée qui requiert la TQC**. La partie « photonique » de amplitude de transition s'écrit $\langle 1_{\vec{l}}|\hat{\vec{A}}|0_{\gamma}\rangle$ où $|0_{\gamma}\rangle$ On a en effet

$$\hat{a}^{\dagger}_{\vec{l}}|0_{\gamma}\rangle = |1_{\vec{l}}\rangle$$

  et donc $\langle 1_{\vec{l}}|\hat{\vec{A}}|0_{\gamma}\rangle \propto \vec{\xi}_r e^{-i(\vec{l}\cdot\vec{x}-\omega_{\vec{l}}t)}$

- On constate au signe du facteur de phase temporel qu'il s'agit d'une perturbation harmonique qui va faire passer l'atome d'un état d'énergie $E_i \longmapsto E_f = E_i - \hbar\omega_{\vec{l}}$. On interprète donc ce processus comme la désexcitation de l'atome résultant en l'émission d'un photon ayant l'énergie perdue par l'atome.

- Pour calculer la probabilité de transition, il faut à nouveau effectuer le calcul de la partie « atomique » de l'amplitude de transition :

$$-\frac{q}{m}\langle f|e^{i\vec{l}\cdot\vec{x}}\vec{\xi}_r\cdot\hat{\vec{p}}|i\rangle$$

Bonus hors cours !!!

Interlude « TQC » : émission induite

$$\hat{\vec{A}}(\vec{x},t) \propto \sum_{\vec{k}} \sum_{r=1}^{2} \left(\vec{\xi}_r \hat{a}_{\vec{k},r} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} + \vec{\xi}_r^{\star} \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},r} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} \right)$$

- Revenons sur le cas d'un **état initial contenant un (ou plusieurs) photon(s)** de nombre d'onde $\vec{l}$. On peut également considérer l'effet des opérateurs de création dans $\hat{\vec{A}}(\vec{x},t)$. On a déduit le résultat suivant (directement issu de la nature bosonique des photons)

$$\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}} |n_{\vec{l}}\rangle = (1-\delta_{\vec{k},\vec{l}})|n_{\vec{l}}\, 1_{\vec{k}}\rangle + \delta_{\vec{k},\vec{l}}\sqrt{n+1}|(n+1)_{\vec{l}}\rangle$$

- Le premier terme traduit le fait que le champ A peut conduire à la création d'un nouveau photon de nombre d'onde k – dont l'énergie est égale à la différence E_i-E_f – mais qui évolue somme toute indépendamment des n photons de nombre d'onde l déjà présents. C'est un peu comme si un processus de désexcitation spontanée venait se superposer aux n photons initiaux.
- Le second terme traduit quant à lui le « renforcement » de la probabilité de créer n+1 photons de nombre d'onde l à partir des n préexistants (émission stimulée). Cela n'est évidemment possible que si ces photons possèdent une énergie $\hbar\omega_l = \hbar\omega_k = E_i - E_f$
- Les deux processus sont « en concurrence probabiliste », mais si les conditions sont bien choisies et que n est suffisamment grand, alors l'émission stimulée devient le mode dominant et l'amplification cohérente peut avoir lieu.

Bonus hors cours !!!

Interlude « TQC » : conclusion

$$\hat{\vec{A}}(\vec{x},t) \propto \sum_{\vec{k}} \sum_{r=1}^{2} \left(\vec{\xi}_r \hat{a}_{\vec{k},r} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} + \vec{\xi}_r^{\star} \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},r} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} \right)$$

- Dans les deux cas de l'absorption ou de l'émission stimulée par un état comprenant n>>1 dans l'état initial, les amplitudes de transitions sont fort proches, $\propto \sqrt{n}$ de sorte que les probabilités de transition sont proportionnelles à ce nombre de photons.

- C'est un résultat cohérent avec celui obtenu en considérant l'électromagnétisme dans sa version classique. On a en effet un taux de transition proportionnel au carré du champ électrique (ou magnétique), ce qui est proportionnel à la densité d'énergie contenue dans l'onde et donc au nombre de photons.

- Comme on le voit et le comprend, la nature bosonique des photons est l'élément central qui permet de passer de la nature quantique de la lumière à une description classique correcte en présence d'un grand nombre de photons.

Bonus hors cours !!!