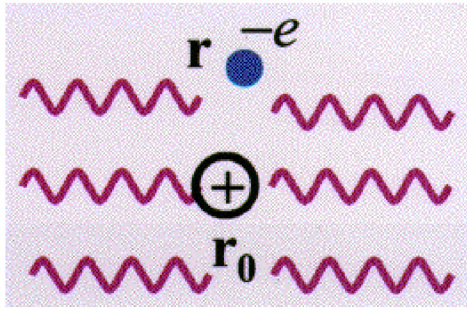
ATOME A 1 ELECTRON
EN INTERACTION AVEC UN CHAMP ELECTROMAGNETIQUE

1 électron (charge -*e*) dans

- énergie potentielle coulombienne (noyau *q*)

$$V_{\mathrm{coul}}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{-qe}{|\vec{r}-\vec{r}_0|}$$



- champ oscillant

$$\vec{E} = \vec{E}_0\cos\left(\omega t - \vec{k}.\vec{r}\right)$$

Hamiltonien de l’électron

$$\boxed{\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m} + V_{\mathrm{coul}}(\hat{\vec{r}})}_{\hat{H}_0\ :\ \text{Hamiltonien atomique}} + \hat{H}_1 = \hat{H}_0 + \hat{H}_1}$$

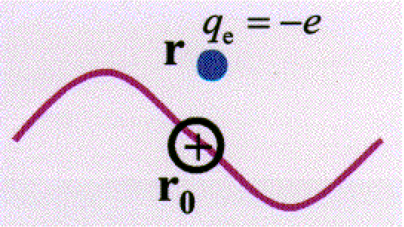
Hamiltonien d’interaction

ATOME A 1 ELECTRON EN INTERACTION AVEC UN CHAMP ELECTROMAGNETIQUE

Approximation des grandes longueurs d'onde

$$|\vec{r}-\vec{r}_0| << \lambda = \frac{2\pi}{k} = 2\pi\frac{c}{\omega}$$

$\Rightarrow$ champ uniforme sur l'atome



$$\boxed{\hat{H}_1 = -q_e\left(\hat{\vec{r}} - \hat{\vec{r}}_0\right).\vec{E}\left(\hat{\vec{r}}_0, t\right)} \longrightarrow$$

Hamiltonien d'interaction dipolaire électrique

opérateur « position » de l'électron

Justification de $\hat{H}_1$: quantification du terme classique d'interaction dipolaire électrique, mais démonstration rigoureuse délicate.

En fait, premier terme d'un développement dont le terme suivant est :

$$\boxed{\hat{H}_1^{\text{diamagnétique}} = \frac{-q_e}{2m}\left(\hat{\vec{L}} + 2\hat{\vec{S}}\right).\vec{B}\left(\vec{r}_0, t\right)}$$

interaction dipolaire magnétique

GENERALISATION : atome à *n* électrons

On montre que sous certaines conditions, très souvent vérifiées, on peut encore écrire : $\boxed{\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1}$

$$\hat{H}_1 = -\hat{\vec{D}}.\vec{E}(\vec{r}_0, t)$$

atome isolé $\{E_n \, ; |n\rangle\}$

Hamiltonien d'interaction dipolaire électrique

$\hat{\vec{D}}$: opérateur dipolaire électrique de l'atome à plusieurs électrons

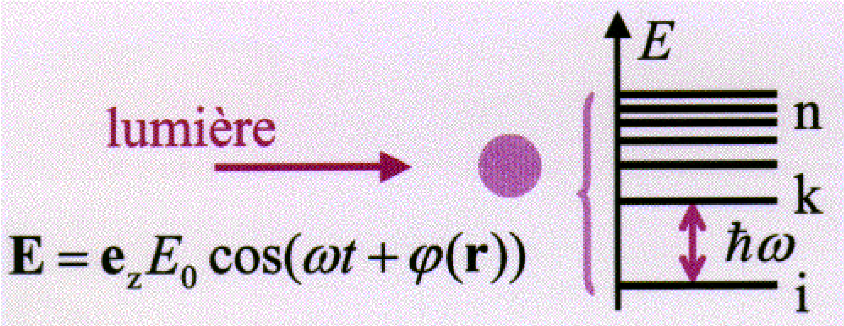
* agit dans l'espace des états atomiques internes $\{|n\rangle\}$

$\hat{\vec{D}}$: matrice dans $\{|n\rangle\}$

* analogue du moment dipolaire électrique classique

$$\vec{D} = \sum_i q_i \vec{r}_i \text{ avec } \sum_i q_i = 0$$

INTERACTION QUASI RESONNANTE : APPROCHE PERTURBATIVE



$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}\cos(\omega t + \varphi)$$

$$H_0 \left| \Psi_n \right\rangle = E_n \left| \Psi_n \right\rangle$$

$$\hat{W} = -\hat{\vec{D}}.\vec{e}_z E_0 = -\hat{D}_z E_0$$

Elément de matrice de l'interaction $W_{ki} = -E_0 \left\langle \Psi_k \left| \hat{D}_z \right| \Psi_i \right\rangle$

Atome à un électron : $W_{ki} = -E_0 q_e \int d^3 r \Psi_k^*(\vec{r})(z - z_0)\Psi_i(\vec{r})$

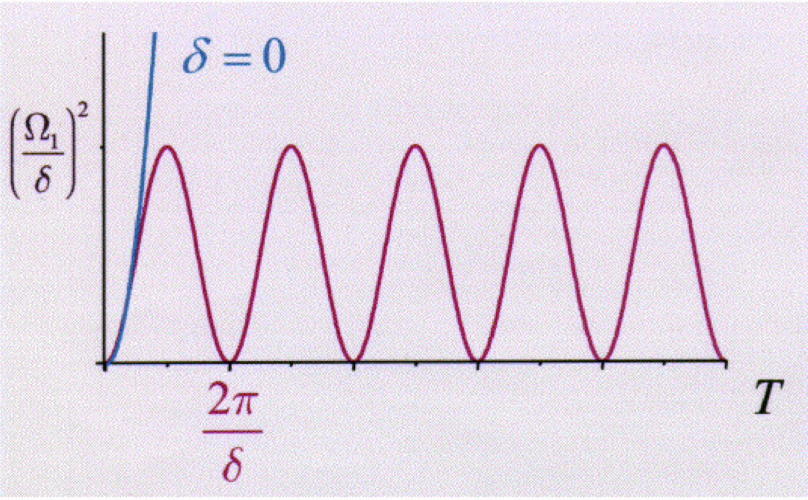
Perturbation au 1er ordre : transition possible si $\begin{cases} W_{ki} \neq 0 \\ E_k - E_i \approx \pm\hbar\omega \end{cases}$

$$\boxed{P_{i\to k}(T) = \left(\frac{W_{ki}}{2\hbar}\right)^2 \left\{\operatorname{sin c}\left(\frac{E_k - E_i \pm \hbar\omega}{2\hbar}\right)\right\}^2}$$

INTERACTION QUASI RESONNANTE : APPROCHE PERTURBATIVE

$$\boxed{P^{(1)}_{i\to k}(T) = \left(\frac{\Omega_1}{\delta}\right)^2 \sin^2(\delta T)}$$

$$\delta = \omega \pm \frac{E_k - E_i}{\hbar} \approx 0 \text{ désaccord}$$



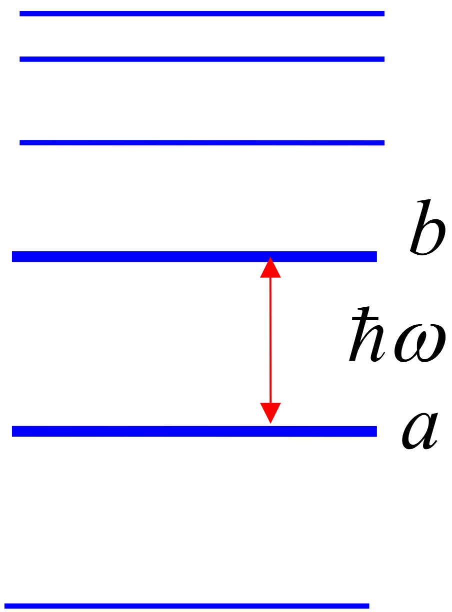
$$\Omega_1 = \frac{W_{ki}}{\hbar} = -\frac{dE_0}{\hbar} \text{ pulsation de Rabi}$$

Oscillation entre *i* et *k*

Pour $\delta = 0$ il faut avoir recours à un traitement non perturbatif :

Facile dans le cadre du modèle de « l’ atome à deux niveaux »

INTERACTION QUASI RESONNANTE :
MODELE DE L'ATOME A DEUX NIVEAUX



Interaction quasi résonnante avec une transition donnée

- on se limite aux deux niveaux de la transition

$\Rightarrow$ espace des états de dimension 2

$\Rightarrow$ observables $=$ matrices 2×2

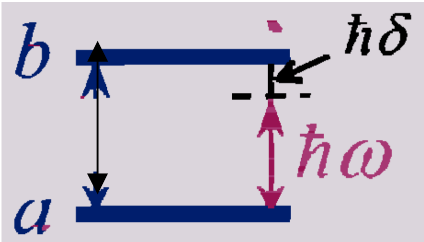
- on ne garde que les termes résonnants de l'Hamiltonien d'interaction

$$\hat{H}_1 = \hbar\Omega_1 \begin{pmatrix} 0 & \cos\omega t \\ \cos\omega t & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar\Omega_1}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix}$$

On peut alors résoudre exactement l'équation de Schrödinger

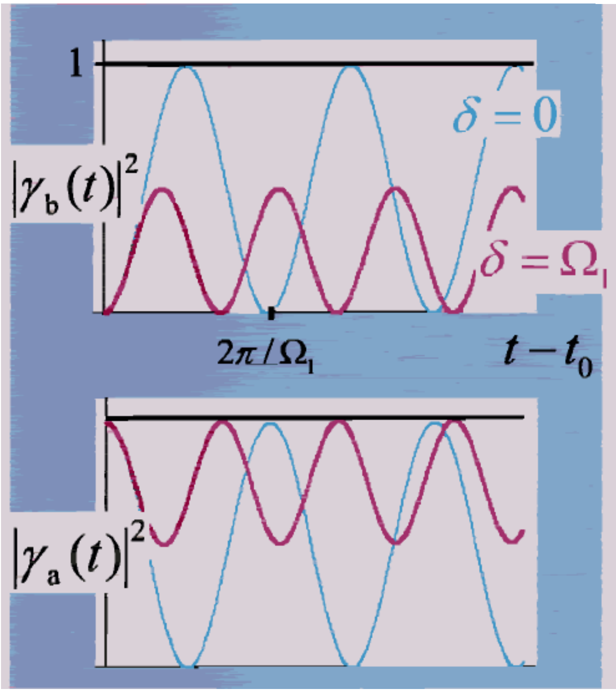
INTERACTION QUASI RESONNANTE POUR UN ATOME A DEUX NIVEAUX

OSCILLATION DE RABI



A t_0, atome dans a : $\gamma_a(t_0)=1\,;\gamma_b(t_0)=0$

$$\boxed{\left|\gamma_b(t)\right|^2=\frac{\Omega_1^2}{\Omega_1^2+\delta^2}\sin^2\frac{\sqrt{\Omega_1^2+\delta^2}}{2}(t-t_0)}$$



Oscillation de Rabi

Si $\Omega_1 \ll \delta$

résultat perturbatif

Amplitude de l'oscillation résonnante pour

$\omega=\omega_0$