EVOLUTION DES SYSTEMES QUANTIQUES SOUS L’EFFET D’UNE INTERACTION : PROBABILITES DE TRANSITION

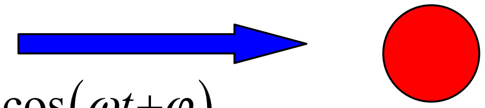
*** Exemple : évolution d’un atome par interaction avec une onde électromagnétique.**
*** Evolution d’un système quantique.**
*** Cas des systèmes conservatifs.**
*** Transition sous l’effet d’une interaction.**
*** Transition sous l’effet d’une interaction : Traitement perturbatif.**
*** Equation de Schrödinger dépendant du temps dans la base des états propres de l’Hamiltonien indépendant du temps.**
*** Développement perturbatif.**
*** Transition entre deux niveaux discrets : solution perturbative au 1er ordre.**
*** Exemples :**
Collision perturbative sur un atome.
Interaction atome - lumière.
*** Interaction constante de durée T.**
*** Interaction « branchée » et « débranchée » progressivement.**
*** Exemple :**
Excitation atomique par collision.
*** Interaction sinusoïdale.**
*** Perturbation appliquée pendant un temps T : Généralité du problème.**
*** Exemple :**
Atome soumis à un rayonnement constant.
*** Transition d’un état discret vers un quasi continuum : probabilité de départ.**
*** Taux de départ.**
*** Généralisation : Règle d’or de Fermi.**
- **Conclusion.**

« ATOME A 1 ELECTRON » EN INTERACTION AVEC UN CHAMP ELECTROMAGNETIQUE

*** Hamiltonien dipolaire électrique dans l’approximation des grandes longueurs d’onde.**
*** Hamiltonien dipolaire magnétique.**
*** Interaction quasi-résonnante : approche perturbative au premier ordre.**
Pulsation de Rabi.
*** Interaction quasi-résonnante : modèle de l’ « atome à deux niveaux ».**

EXEMPLE : EVOLUTION D'UN ATOME PAR INTERACTION AVEC UNE ONDE ELECTROMAGNETIQUE

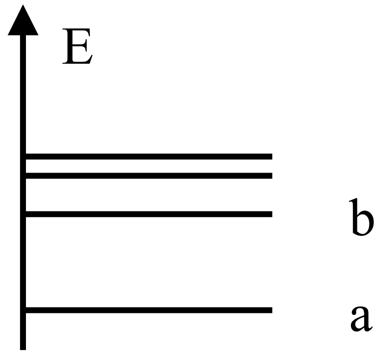
Lumière



$E = E_0 \cos(\omega t + \varphi)$

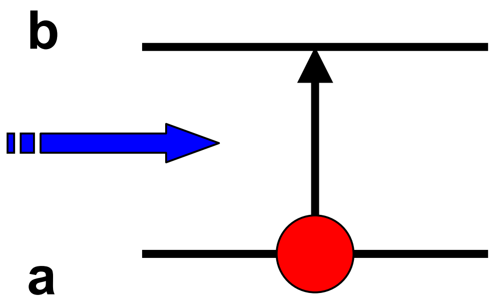
Atome : système quantique

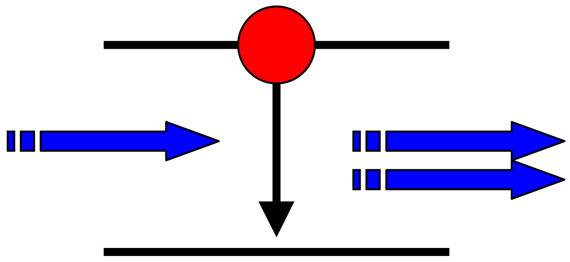
$\Rightarrow$ niveaux d'énergie



Si $\hbar\omega \approx |E_a - E_b|$

Transition possible





Absorption **Emission stimulée**

Interaction $\Rightarrow$ transition

Le système change d'état sous l'effet d'une interaction

$\Rightarrow$ **probabilité de transition**

EVOLUTION D'UN SYSTEME QUANTIQUE : rappels

E. de Schrödinger + condition initiale $\begin{cases} i\hbar \dfrac{d}{dt}\left|\Psi(t)\right\rangle = \hat{H}\left|\Psi(t)\right\rangle \\ \left|\Psi(t=0)\right\rangle = \left|i\right\rangle \end{cases} \Rightarrow \quad \left|\Psi(t)\right\rangle$

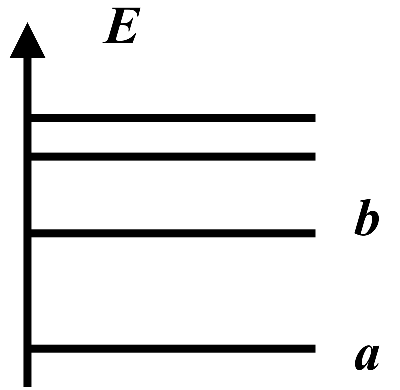
Probabilité de trouver le système dans l'état $\left|f\right\rangle$ à l'instant t :

$$\boxed{P_{i\to f}(t) = \left|\left\langle f \middle| \Psi(t)\right\rangle\right|^2}$$

Probabilité de transition de $\left|i\right\rangle$ vers $\left|f\right\rangle$ au bout du temps d'interaction t.

SYSTEME CONSERVATIF

Hamiltonien indépendant du temps $\hat{H}_0$ (système isolé ou placé dans un potentiel constant : énergie conservée)



$\{|n\rangle\}$: base des états propres de $\hat{H}_0$: $\hat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle$

solution de l'E. de Schrödinger :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n \gamma_n \, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \, |n\rangle$$

Indépendant de t

Système initialement dans un état propre de $\hat{H}_0$: $|\Psi(t=0)\rangle = |n\rangle$

$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \, |n\rangle \Rightarrow P_{n,m}(t) = \delta_{n,m}$ **Le système reste dans $|n\rangle$. Pas de transition !**

TRANSITION SOUS L'EFFET D'UNE INTERACTION

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

Interaction branchée entre $t = 0$ et $t = T$
(collision, allumage d'une source lumineuse…)

Système isolé

- A $t = 0$, système dans $|n\rangle$ état propre de $\hat{H}_0$
- Entre $t = 0$ et $t = T$, $|n\rangle$ n'est pas état propre de $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$

⇒ **évolution** $\langle m|\Psi(t)\rangle \neq 0$ pour $|m\rangle$ état propre de $\hat{H}_0$ différent de $|n\rangle$

$$\boxed{P_{n\to m}(T) = \left|\langle m|\Psi(T)\rangle\right|^2 \neq 0}$$

Proba de transition de $|n\rangle$ vers $|m\rangle$ entre 0 et T

TRANSITION SOUS L'EFFET D'UNE INTERACTION : TRAITEMENT PERTURBATIF

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

$\hat{H}_0$: système isolé. $\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$

$\{|n\rangle\}$: base de l'espace des états (internes) du système

$\hat{H}_1(t)$: interaction

Evolution sous l'effet de l'interaction :

SOUVENT IMPOSSIBLE A RESOUDRE

REGIME PERTURBATIF :

$$\begin{cases} |\Psi(t=0)\rangle = |i\rangle \quad \left(\text{état propre de } \hat{H}_0\right) \\ i\hbar \dfrac{d}{dt}|\Psi\rangle = \left(\hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)\right)|\Psi\rangle \end{cases}$$

$$\hat{H}_1(t) = \lambda \hat{H}_1^{'}(t) \text{ avec } \hat{H}_1^{'}(t) \approx \hat{H}_0 \;, \lambda << 1$$

On sait alors trouver des <u>solutions approchées</u>

EQUATION DE SCHRODINGER DEPENDANT DU TEMPS DANS LA BASE $\{|n\rangle\}$

On pose :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n \gamma_n \, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |n\rangle$$

On projette l'équation de Schrödinger sur $|k\rangle$

Membre de gauche

$$\langle k | i\hbar \frac{d}{dt} | \Psi \rangle = i\hbar \frac{d}{dt}\left(\gamma_k(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} \right)$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}\left(\gamma_k(t) E_k + i\hbar \frac{d}{dt}\gamma_k(t) \right)$$

Membre de droite

$$\langle k | \hat{H}_0 | \Psi \rangle + \lambda \langle k | \hat{H}_1^{'} | \Psi \rangle$$

$$\gamma_k E_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}$$

$$\lambda \sum_n \langle k | \hat{H}_1^{'} | n \rangle \gamma_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt}\gamma_k(t) = \lambda \sum_n \langle k | \hat{H}_1^{'} | n \rangle \gamma_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_k)t}$$

Pas d'approximation

DEVELOPPEMENT PERTURBATIF

On écrit : $\gamma_k(t) = \gamma_k^{(0)}(t) + \lambda\gamma_k^{(1)}(t) + \cdots + \lambda^r\gamma_k^{(r)}(t) + \cdots$

On reporte dans l'E.S. $i\hbar\dfrac{d}{dt}\gamma_k(t) = \lambda\sum_n \langle k|\hat{H}_1'|n\rangle\gamma_n(t)e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n-E_k)t}$

Et on identifie à chaque ordre de λ^r

➡ **Ordre 0** $i\hbar\dfrac{d}{dt}\gamma_k^{(0)}(t) = 0 \Rightarrow \gamma_k^{(0)}(t) = \gamma_k^{(0)}(0)$ conditions initiales

➡ **Ordre 1** $i\hbar\dfrac{d}{dt}\gamma_k^{(1)}(t) = \sum_n \langle k|\hat{H}_1'|n\rangle\gamma_n^{(0)}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n-E_k)t}$

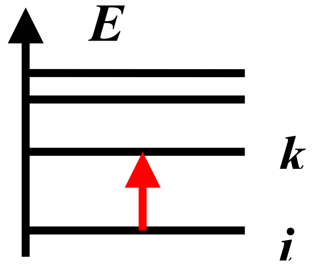
➡ **Ordre r** $i\hbar\dfrac{d}{dt}\gamma_k^{(r)}(t) = \sum_n \langle k|\hat{H}_1'|n\rangle\gamma_n^{(r-1)}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n-E_k)t}$

Itération : ordre 0 (conditions initiales) $\rightarrow$ **ordre 1** $\rightarrow\cdots$ **ordre r** $\rightarrow\cdots$

TRANSITION ENTRE 2 NIVEAUX DISCRETS : solution perturbative au 1er ordre

Système initialement dans l'état i : $\gamma_n^{(0)}(t=0)=\delta_{n,i}$

Probabilité d'être passé dans l'état $k \neq i$ à t ?



- ordre 0 : $i\hbar \dfrac{d}{dt}\gamma_n^{(0)}(t)=0 \Rightarrow \gamma_n^{(0)}(t)=\gamma_n^{(0)}(0)=\delta_{n,i} \Rightarrow \begin{cases}\gamma_k^{(0)}(t)=0 \\ \gamma_i^{(0)}(t)=1\end{cases}$

- ordre 1 : $i\hbar \dfrac{d}{dt}\gamma_k^{(1)}(t)=\sum_n \langle k|\hat{H}_1^{'}|n\rangle \gamma_n^{(0)}(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n-E_k)t}$

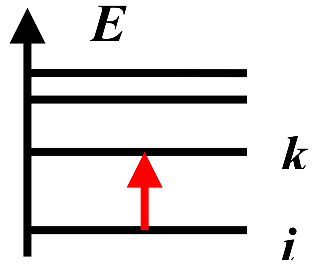
$$\Rightarrow \gamma_k^{(1)}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\langle k|\hat{H}_1^{'}|i\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(E_i-E_k)t'}$$

$$P_{i\to k}^{(1)}(t)=\left|\lambda\gamma_k^{(1)}(t)\right|^2=\left|\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\langle k|\hat{H}_1|i\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(E_i-E_k)t'}\right|^2$$

TRANSITION ENTRE 2 NIVEAUX DISCRETS : solution perturbative au 1er ordre

Système initialement dans l'état i **:** $\gamma_n^{(0)}(t=0)=\delta_{n,i}$

Probabilité d'être passé dans l'état $k \neq i$ à t ?



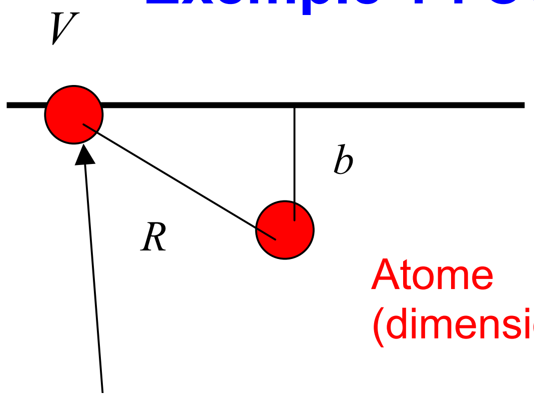
EN RESUME :

$$\boxed{P_{i\to k}^{(1)}(t)=\left|\lambda\gamma_k^{(1)}(t)\right|^2=\left|\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\langle k|\hat{H}_1|i\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(E_i-E_k)t'}\right|^2}$$

Condition nécessaire pour 1 transition : $\boxed{\langle k|\hat{H}_1|i\rangle \neq 0}$

Solution perturbative valable seulement si $\boxed{P_{i\to k}^{(1)}(t) << 1}$

Exemple 1 : COLLISION PERTURBATIVE SUR UN ATOME



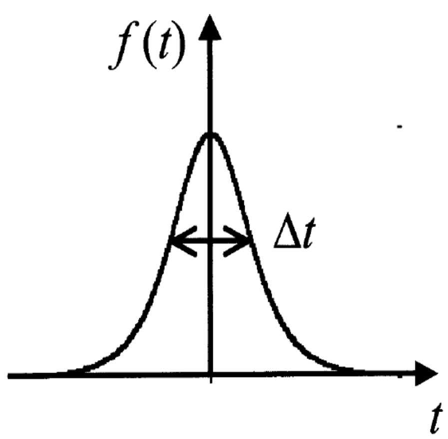
Atome
(dimension $\approx a_0 = 0,5 \times 10^{-10}\,\mathrm{m}$)

Projectile
(atome, ion, électron…)

Collision perturbative : $b > a_0$
b paramètre d'approche
(ou d'impact)

Durée typique de la collision $\Delta t \approx \dfrac{b}{V}$

Hamiltonien de l'atome : $\hat{H} = \hat{H}_0 + f(t)\hat{W}$ ⟵ Branchement de L'interaction

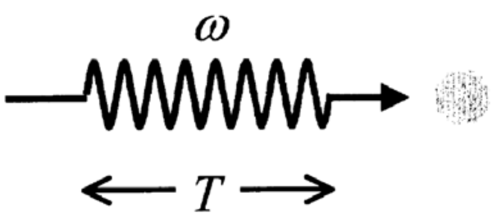


Atome « thermique » ($V \approx$ 500 m/s)

$$b \approx 10 a_0 = 0,5\ \mathrm{nm} \Rightarrow \Delta t \approx 10^{-12}\ \mathrm{s}$$

Electron à 50 eV $V \approx 5 \times 10^6\,\mathrm{m/s} \Rightarrow \Delta t \approx 10^{-16}\,\mathrm{s}$

Exemple 2 : INTERACTION ATOME-LUMIERE



Atome à la position $\vec{r}_{\text{at}}$ soumis pendant une durée *T* à $\vec{E}(\vec{r}_{\text{at}}) = \vec{E}_0 \cos\left(\omega t + \varphi(\vec{r}_{\text{at}})\right)$

$$\boxed{\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t) \qquad \text{avec} \qquad \hat{H}_1(t) = -\hat{\vec{D}}.\vec{E}(\vec{r}_{\text{at}})}$$

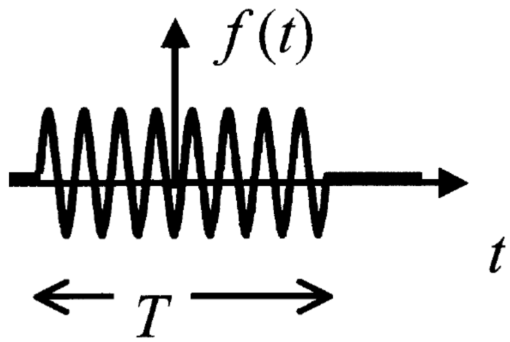
Atome isolé

Interaction Dipolaire électrique

Opérateur dipolaire Electrique (atomique)

$$\hat{H}_1(t) = f(t)\,\hat{\vec{D}}.\vec{E}_0(\vec{r}_{\text{at}}) = f(t)\,\hat{W}$$

$f(t)$: sinusoide de durée finie $>10^{-15}$ s

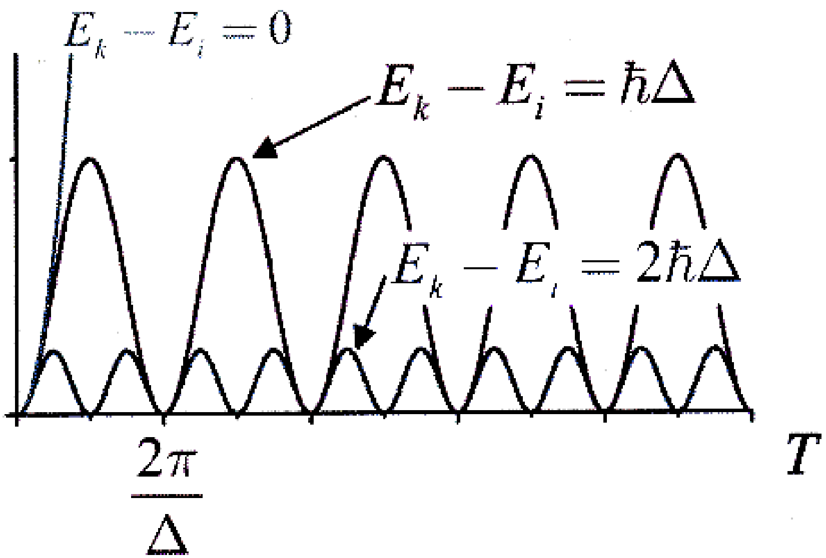


TRANSITION ENTRE 2 NIVEAUX DISCRETS

INTERACTION CONSTANTE DE DUREE *T*

Evolution en fonction de *T*

$$P_{i\to k}^{(1)}(T) = \left(\frac{2W_{ki}}{E_k - E_i}\right)^2 \sin^2\left(\frac{E_k - E_i}{\hbar}\frac{T}{2}\right)$$



Oscillation à $\omega = \dfrac{E_k - E_i}{\hbar}$

Oscille entre les deux niveaux

Amplitude maximale

$$\left(\frac{W_{ki}}{E_k - E_i}\right)^2$$

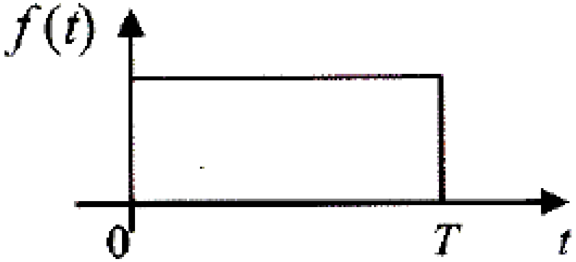
Calcul valable seulement si

$$P_{i\to k}^{(1)}(T) \ll 1$$

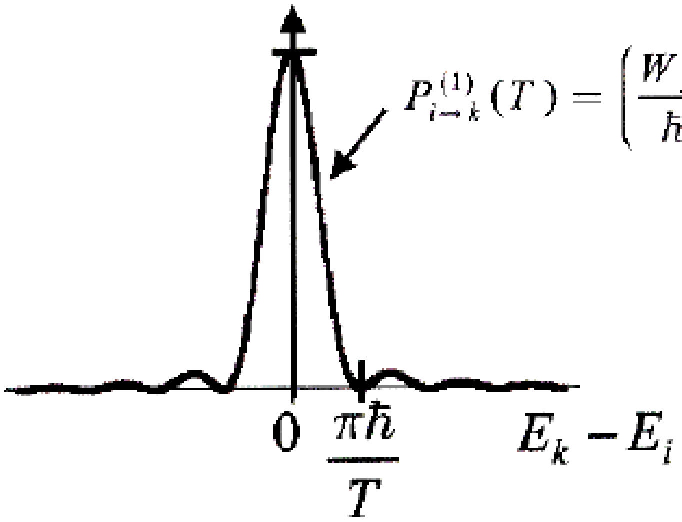
TRANSITION ENTRE 2 NIVEAUX DISCRETS

INTERACTION CONSTANTE DE DUREE *T*

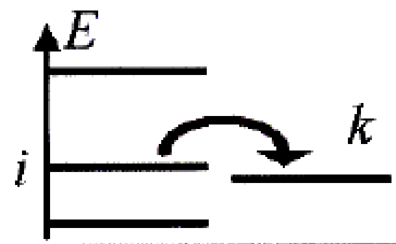
Perturbation constante entre 0 et T $\langle k|\hat{H}_1|i\rangle = W_{ki}\, f(t)$



$$\int_0^T dt' \exp\left\{i\frac{E}{\hbar}t'\right\} = \exp\left\{i\frac{ET}{2}\right\}\frac{\sin\frac{ET}{2\hbar}}{\frac{E}{2\hbar}}$$



$$P^{(1)}_{i\to k}(T) = \left(\frac{W_{ki}}{\hbar}\right)^2 \left(\frac{\sin\left(\frac{E_k - E_i}{\hbar}\frac{T}{2}\right)}{\frac{E_k - E_i}{2\hbar}}\right)^2$$



Proba de transition notable pour

$|E_k - E_i| < \frac{\pi\hbar}{T}$ $\qquad E_{\text{finale}} \approx E_{\text{initiale}}$

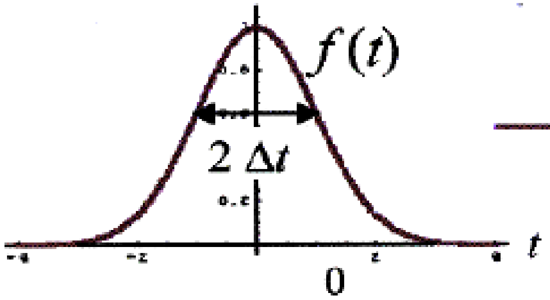
Condition sur l'énergie

TRANSITION ENTRE 2 NIVEAUX DISCRETS

INTERACTION BRANCHEE ET DEBRANCHEE PROGRESSIVEMENT

Perturbation « en cloche » de durée 2 Δt

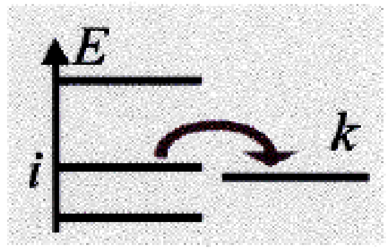
$$\langle k|\hat{H}_1|i\rangle = W_{ki}\, f(t)$$



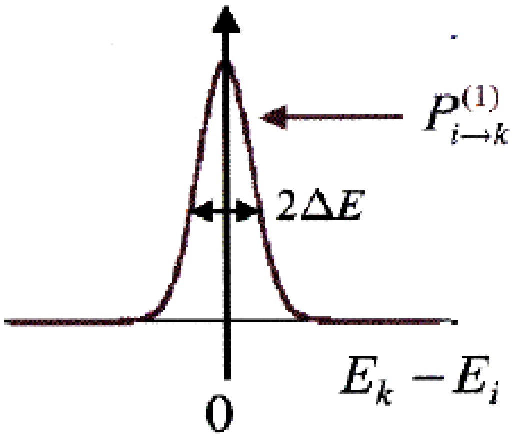
T. F.

$$\tilde{f}(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, f(t)\, \exp\left\{ i\frac{E}{\hbar} t \right\}$$

A la fin de l'interaction



$$P^{(1)}_{i\to k}(t=\infty) = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{ki}|^2 \left|\tilde{f}(E_k - E_i)\right|^2$$

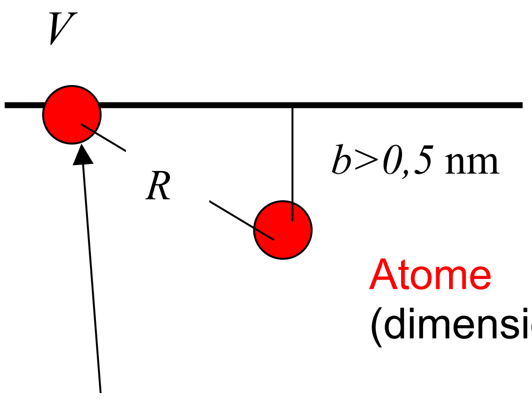


Proba de transition notable seulement si

$|E_k - E_i| < \Delta E$ $\qquad$ $\Delta E\, \Delta t \sim \hbar$

Conservation de l'énergie $(E_k = E_i)$ pour interaction constante $(\Delta t \to \infty)$

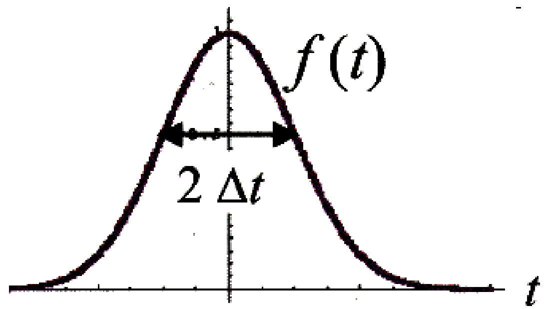
APPLICATION : EXCITATION ATOMIQUE PAR COLLISION



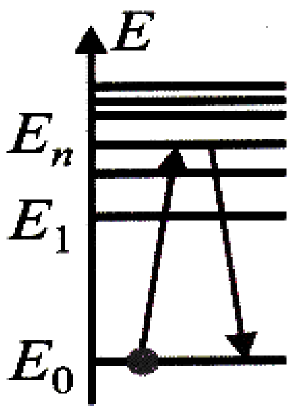
Atome
(dimension $\approx a_0 = 0,5\times10^{-10}\,\mathrm{m}$)

Projectile
(atome, ion, électron…)

$$\boxed{\Delta t \approx \frac{b}{V}}$$



Domaine d'énergie accessible par collision à grand paramètre d'impact



$$|E_n - E_0| < \frac{\hbar}{\Delta t}$$

Atome thermique $\Delta t \geq 10^{-12}\,\mathrm{s}$

$$\left(V \approx 500\,\mathrm{m.s^{-1}}\right) \quad \frac{|E_n - E_0|}{h} < 10^{12}\,\mathrm{Hz}\ \left(\text{Infrarouge lointain}\right)$$

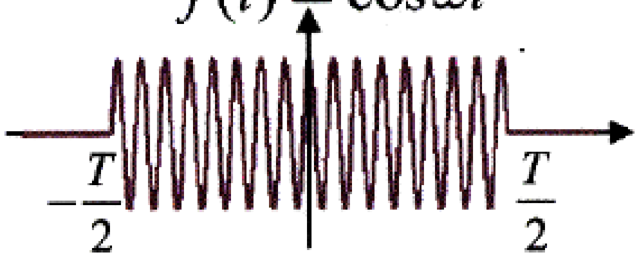
Electron à 50 eV $\Delta t \geq 10^{-16}\,\mathrm{s}$

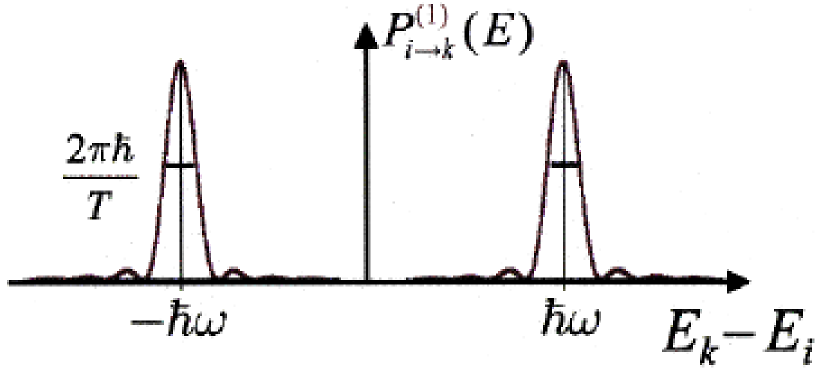
$$\left(V \approx 5\times10^{6}\,\mathrm{m.s^{-1}}\right) \quad \frac{|E_n - E_0|}{h} < 10^{16}\,\mathrm{Hz}\ \left(\text{Visible, UV}\right)$$

TRANSITION ENTRE 2 NIVEAUX DISCRETS : INTERACTION SINUSOÏDALE

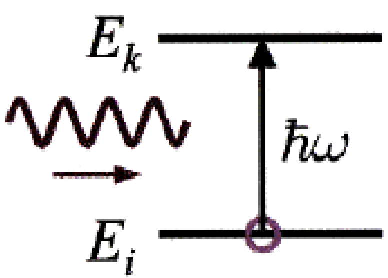
Perturbation sinusoïdale appliquée pendant T $\qquad \langle k|\hat{H}_1|i\rangle = W_{ki}\, f(t)$

$f(t) = \cos\omega t$

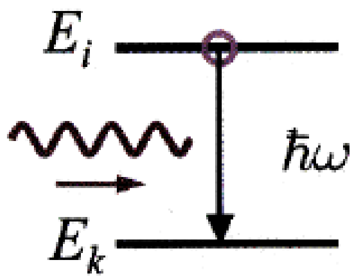




Transition possible si $E_k = E_i \pm \hbar\omega$ à $\dfrac{\pi\hbar}{T}$ près



Absorption



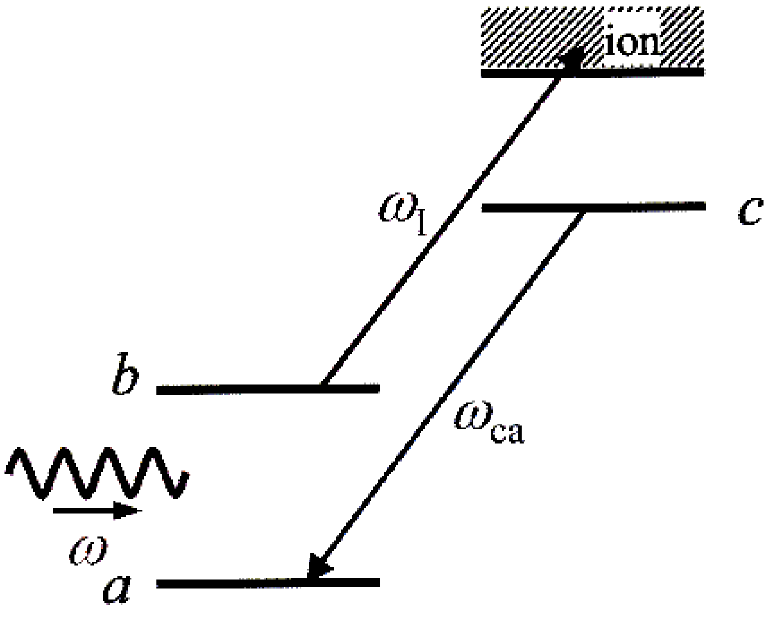
Emission stimulée

On n'a pas introduit la notion de photon !

PERTURBATION APPLIQUEE PENDANT *T* : GENERALITE DU PROBLEME

Il n'est pas nécessaire que le terme d'interaction soit physiquement branché à t=0 et débranché à T.

Exemple : atome soumis à un rayonnement constant ω

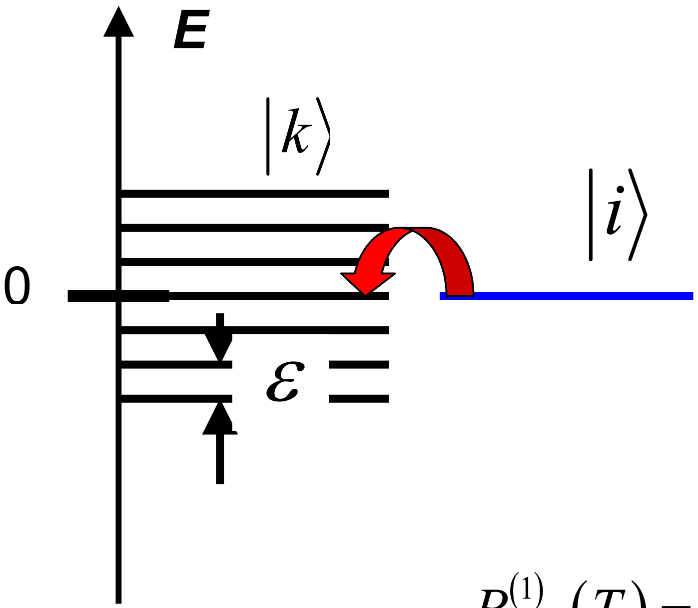


- A *t=0, on observe un photon* ω_{ca} *: on est sûr que l'atome est dans a.*
- *A T on envoie une impulsion laser ionisant sélectivement l'atome dans l'état b, et on détecte si un ion est produit*
- **On mesure ainsi** $P_{a\to b}(T)$
- → Rôle essentiel des mesures à *0* et *T*

TRANSITION D'UN ETAT DISCRET VERS UN QUASI CONTINUUM

PROBABILITE DE DEPART

Hypothèses simplificatrices



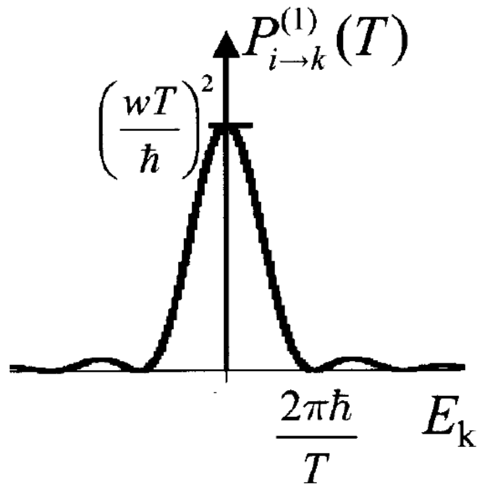
$$E_i = 0$$

$$E_k = k\varepsilon$$

$$\langle k|\hat{W}|i\rangle = w = \text{cste}$$

Transition vers un niveau *k* particulier :

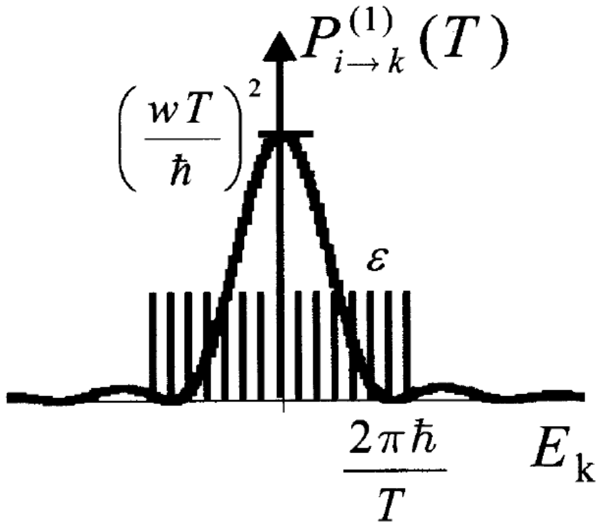
$$P^{(1)}_{i\to k}(T) = \left(\frac{w}{\hbar}\right)^2 \left(\frac{\sin\left(\frac{E_k T}{2\hbar}\right)}{\frac{E_k}{2\hbar}}\right)^2$$



TRANSITION D'UN ETAT DISCRET VERS UN QUASI CONTINUUM

TAUX DE DEPART

Probabilité totale d'avoir quitté *i* à *T* : $\sum_k P_{i\to k}(T)$

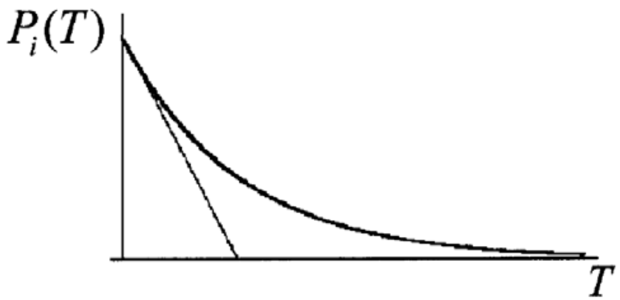


Niveaux serrés : $\sum_k P_{i\to k} \to \int \underbrace{\frac{dE}{\varepsilon}}_{\text{nombre d'états dans dE}} P_{i\to k}(E)$

$$\boxed{\sum_k P_{i\to k} = \frac{1}{\varepsilon}\int \left(\frac{wT}{\hbar}\right)^2 \operatorname{sinc}^2\left(\frac{TE}{2\hbar}\right) dE = \frac{1}{\varepsilon} w^2 \frac{2\pi}{\hbar} T}$$

Probabilité de départ par unité

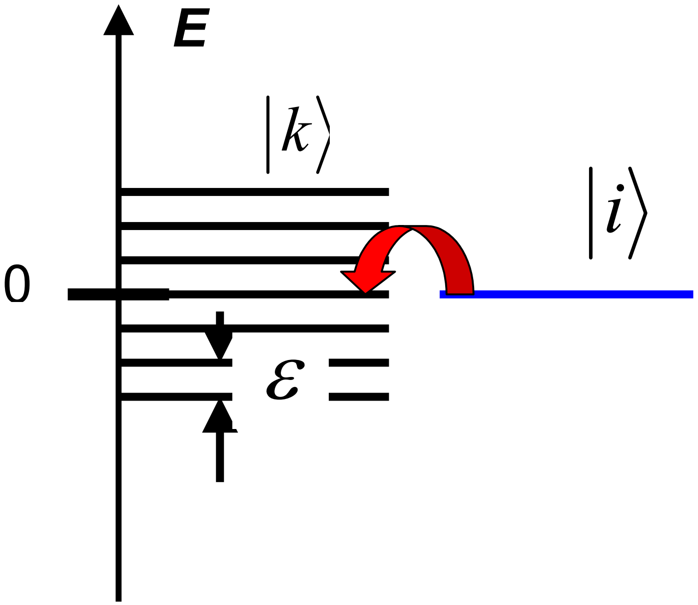
De temps : « taux de départ » : $\Gamma = \frac{1}{\varepsilon} w^2 \frac{2\pi}{\hbar}$



Probabilité d'être encore dans *i* à *T* : $P_i(T) = 1 - \Gamma T$

GENERALISATION : REGLE D'OR DE FERMI

Transition d'un état discret *i* vers un quasi continuum :



Densité d'états du quasi continuum : $\rho(E) = \dfrac{dN}{dE}$

Taux de transition : $$\boxed{\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar}\left|W_{fi}\right|^2 \rho\left(E_f = E_i\right)}$$

Cas d'un couplage sinusoïdal :

Transition vers $E_f \simeq E_i \pm \hbar\omega$

Taux de transition : $$\boxed{\Gamma = \frac{\pi}{2\hbar}\left|W_{fi}\right|^2 \rho\left(E_f = E_i \pm \hbar\omega\right)}$$

CONCLUSION

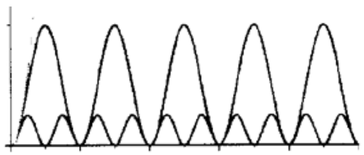
- Transition d'un état *i* vers un état *f* à condition que

$$\boxed{\langle f|\hat{W}|i\rangle \neq 0}$$

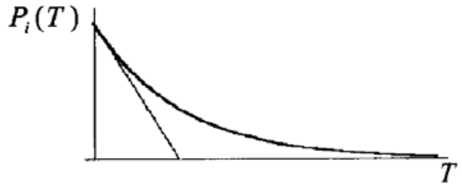
- Probabilité de transition importante seulement vers $E_f \simeq E_i$

$\left(E_f \simeq E_i \pm \hbar\omega \ : \ \text{cas sinusoidal}\right)$

- Entre 2 niveaux discrets : départ en T^2 puis oscillation entre les deux niveaux



- Entre un niveau discret et un continuum : départ linéaire (taux de départ Γ)



Remarques : $E_f \simeq E_i$ à $\hbar\Gamma$ près **: Energie du niveau de départ définie à $\Delta E = \hbar\Gamma$**

$\Rightarrow$ **Energie d'un niveau instable définie à $\hbar\Gamma$ près.**