

18.11.75

RESUME DU COURS DE L'AN DERNIER

Après un bref rappel des résultats établis au cours de l'année antérieure, on a commencé par discuter le contenu physique de quelques états **quantiques du champ** électromagnétique libre. Les états propres de l'hamiltonien du champ décrivent bien l'aspect corpusculaire du rayonnement : ils permettent d'introduire simplement le concept de quantum d'énergie du champ, ou encore de "photon". Un état particulièrement intéressant est le "vide" de photons. On peut considérer que, dans un tel état, il règne en chaque point de l'espace un champ fluctuant, de valeur moyenne nulle, et de temps de corrélation infiniment court (fluctuations du vide). En superposant des états correspondant à des nombres de photons différents, on construit des états du champ mieux adaptés à l'aspect ondulatoire. Il existe une classe d'états qui réalisent le meilleur compromis possible entre les aspects corpusculaire et ondulatoire de la lumière, complémentaires l'un de l'autre. Ce sont les "états cohérents" de Glauber qui ont été introduits et étudiés très en détail. On a insisté en particulier sur l'intérêt qu'il y avait à développer l'opérateur densité du rayonnement sur la base des états cohérents : un tel développement permet d'introduire dans la plupart des cas des densités de "quasi-probabilité" présentant des analogies très étroites avec les densités de probabilité de la mécanique statistique classique. Une étude comparative de plusieurs types de densités de quasi-probabilité a été présentée.

Ayant ainsi discuté les propriétés du rayonnement libre quantifié, on a ensuite considéré l'hamiltonien décrivant l'interaction de ce rayonnement avec des particules chargées non-relativistes, traitées elles aussi par la mécanique quantique. La structure de cet hamiltonien d'interaction, qui fait intervenir le potentiel vecteur du champ et les impulsions des particules, a été analysée en détail. A la demande de nombreux auditeurs, on a également étudié une autre forme équivalente de l'hamiltonien d'interaction qui est plus commode à utiliser lorsqu'on s'intéresse à des systèmes globalement neutres de charges liées (par exemple des atomes ou des molécules neutres), dont les dimensions sont plus petites que la longueur d'onde du rayonnement. Cette nouvelle forme fait intervenir directement les champs électrique et magnétique du rayonnement et leurs gradients, ainsi que les moments multipolaires électriques et magnétiques des systèmes de charges. On a montré en détail comment on passait d'un hamiltonien d'interaction à l'autre en effectuant une transformation unitaire sur le système global. On a expliqué également comment cette transformation faisait disparaître les interactions électrostatiques instantanées entre un système de charges liées et un autre, ce qui rend le nouvel hamiltonien d'interaction beaucoup plus commode que le précédent pour l'étude des effets de retard dans les interactions interatomiques.

Une première application du formalisme précédent a consisté à étudier la diffusion non-résonnante de photons par un atome. L'am-

plitude de diffusion a été calculée au 2ème ordre de la théorie des perturbations en prenant un hamiltonien d'interaction, puis l'autre. On a vérifié que les phénomènes physiques prévus ne dépendaient pas de l'hamiltonien choisi, mais que, suivant l'énergie du photon incident, il était plus commode d'utiliser un hamiltonien ou l'autre. Une discussion physique détaillée des variations de la section efficace de diffusion en fonction de la fréquence du rayonnement incident a été présentée. On a montré comment on passait de la diffusion Rayleigh et Raman à basse fréquence à la diffusion Thomson puis Compton à haute fréquence. L'importance accrue de l'énergie de recul que le photon incident peut communiquer à l'électron atomique a permis de développer une analogie avec l'effet Mössbauer.

On a ensuite abordé le problème des interactions entre atomes neutres par échanges de photons et la discussion des effets de retard associés. Après avoir décrit quelques approches possibles de ce problème, basées sur la théorie des perturbations stationnaires, la théorie des perturbations dépendant du temps et les représentations diagrammatiques de l'amplitude de diffusion, on a montré que le choix de certaines conditions aux limites sur le propagateur du photon (conditions aux limites de Feynman) permettait de mener simplement le calcul jusqu'au bout dans le cas de 2 atomes d'Hydrogène immobiles, dans l'état fondamental, séparés par une distance R . Une expression analytique de l'énergie d'interaction a été obtenue qui donne, à courte distance, le résultat de la théorie de London (loi d'attraction en $1/R^6$ de Van der Waals), et à longue distance celui de la théorie de Casimir-Polder (loi d'attraction en $1/R^7$). Les divers facteurs apparaissant dans la formule de Casimir-Polder ont été analysés en détail et interprétés physiquement. On a également examiné le cas de 2 atomes identiques dont l'un est excité, l'autre dans l'état fondamental. On a montré qu'il existait un retard dans le transfert d'excitation d'un atome à l'autre, dû au temps de vol fini du photon qui est responsable de ce transfert d'énergie. On a établi que l'énergie d'interaction entre les 2 atomes variait en $1/R^3$ à courte distance, en $\frac{\cos kR}{R}$ à longue distance (où k est le nombre d'onde associé à la transition reliant l'état excité à l'état fondamental de l'atome). La probabilité d'émission d'un photon réel par un tel système de 2 atomes dont l'un est excité, l'autre dans l'état fondamental a été enfin calculée. On a montré que certains états du système étaient "super-radiants", d'autres "sub-radiants". Le passage au régime de la diffusion multiple cohérente a été discuté. Un calcul simple du taux d'affinement maximal des raies de résonance magnétique de l'état excité a été présenté.

RAPPEL DE QUELQUES FORMULES

Développement en ondes planes progressives du champ e.m. libre

- Dans le point de vue de Heisenberg, les opérateurs potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r}, t)$, champs électrique et magnétique $\vec{E}(\vec{r}, t)$ et $\vec{B}(\vec{r}, t)$, l'énergie H_R et l'impulsion \vec{P} du champ, sont donnés par les mêmes expressions que les grandeurs classiques correspondantes, à part que les coefficients du développement en ondes planes progressives $\alpha_{\vec{k}E}$ et $\alpha_{\vec{k}E}^*$ sont remplacés par des opérateurs adjoints l'un de l'autre, $a_{\vec{k}E}$ et $a_{\vec{k}E}^+$, ne commutant pas entre eux.

- Dans les formules qui suivent, $\omega = ck$. L^3 : volume dans lequel on enferme le champ et on impose les conditions de périodicité (les composantes de \vec{k} sont des multiples entiers ≥ 0 de $2\pi/L$) et que l'on fait tendre à l'infini à la fin des calculs; $\sum_{\vec{k}}$: sommation sur 2 vecteurs unitaires, \perp entre eux et à \vec{k} ; ϵ_0 permittivité du vide

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}, \vec{E}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega L^3}} \left[a_{\vec{k}, \vec{E}} \vec{E} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + a_{\vec{k}, \vec{E}}^+ \vec{E}^* e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right] \quad (1)$$

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{r}, t) = i \sum_{\vec{k}, \vec{E}} \sqrt{\frac{\hbar \omega}{2\epsilon_0 L^3}} \left[a_{\vec{k}, \vec{E}} \vec{E} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} - a_{\vec{k}, \vec{E}}^+ \vec{E}^* e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right] \quad (2)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \nabla \times \vec{A}(\vec{r}, t) = i \sum_{\vec{k}, \vec{E}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega L^3}} \left[a_{\vec{k}, \vec{E}} \vec{k} \times \vec{E} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} - a_{\vec{k}, \vec{E}}^+ \vec{k} \times \vec{E}^* e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right] \quad (3)$$

$$H_R = \frac{\epsilon_0}{2} \int_{L^3} d^3r (\vec{E}^2 + c^2 \vec{B}^2) = \sum_{\vec{k}, \vec{E}} \frac{\hbar \omega}{2} \left[a_{\vec{k}, \vec{E}} a_{\vec{k}, \vec{E}}^+ + a_{\vec{k}, \vec{E}}^+ a_{\vec{k}, \vec{E}} \right] \quad (4)$$

$$\vec{S} = \epsilon_0 \int_{L^3} d^3r \vec{E} \times \vec{B} = \sum_{\vec{k}, \vec{E}} \hbar \vec{k} a_{\vec{k}, \vec{E}}^+ a_{\vec{k}, \vec{E}} \quad (5)$$

$$[a_{\vec{k}, \vec{E}}, a_{\vec{k}', \vec{E}'}^+] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{E}, \vec{E}'} \quad (6)$$

- Pour passer du point de vue de Heisenberg au point de vue de Schrödinger, il suffit de supprimer les $e^{\pm i\omega t}$ dans (1), (2), (3)
- Espace des états du rayonnement quantifié (espace de Fock).

Champ électromagnétique: équivalent à une collection d'oscillateurs harmoniques indépendants, 1 pour chaque "mode" \vec{k}, \vec{E} . Excitation élémentaire de chacun de ces modes: "photon" d'énergie $\hbar\omega$, d'impulsion $\hbar\vec{k}$, de polarisation \vec{E}

Base orthonormée de l'espace de Fock: $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$

n_i : nombre d'occupations du "mode" i , ou encore nombre de photons dans ce mode.

Etat le plus général possible:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots} c_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots}(t) |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (7)$$

Plusieurs autres bases possibles, mieux adaptées au moment cinétique, à l'aspect ondulatoire...

Hamiltonien d'interactions entre le champ et un système de charges (Jauge de Coulomb).

$$H = H_{part} + H_R + H_I \quad (8)$$

Particules. Particule α : masse m_α , charge e_α , spin \vec{S}_α , rapport gyromagnétique γ_α , Position \vec{R}_α , Impulsion \vec{P}_α

$$[R_{\alpha i}, P_{\alpha' j}] = i\hbar \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{ij} \quad i, j = x, y, z \quad (9)$$

- Hamiltonien des particules : $H_{part} = \sum_{\alpha} \frac{\vec{P}_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{e_{\alpha} e_{\beta}}{R_{\alpha\beta}}$
- Hamiltonien du rayonnement : même expression que (4)
- Interaction

$$H_I = \sum_{\alpha} \left[-\frac{e_{\alpha}}{m_{\alpha}} \vec{P}_{\alpha} \cdot \vec{A}(\vec{R}_{\alpha}) + \frac{e_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} (\vec{A}(\vec{R}_{\alpha}))^2 - \gamma_{\alpha} \vec{S}_{\alpha} \cdot \vec{B}(\vec{R}_{\alpha}) \right] \quad (11)$$

Remarque : Si les particules se groupent en systèmes distincts A, B, C... le dernier terme de (10) comporte non seulement les interactions électrostatiques instantanées à l'intérieur de A, B, C..., mais également les interactions électrostatiques instantanées entre A et B, A et C, B et C... Les systèmes A, B, C... interagissent également (au 2^{ème} ordre) via le rayonnement (par H_I) : émission d'un photon par un système et réabsorption de ce photon par l'autre. Evidemment lorsqu'on tient compte de H_I et du dernier terme de (10), l'interaction globale est retardée.

Autres formes plus commodes de l'interaction, valable lorsque les charges se groupent en systèmes globalement neutres A, B, C... de dimensions petites devant λ , et suffisamment séparés.

Par une transformation unitaire, on transforme (8) en :

$$H' = H'_{part} + H'_R + H'_I \quad (12)$$

- H'_R même expression que (4)
- $H'_{part} = H_A + H_B + \dots$ (13)

H_A : énergie de A (somme des énergies cinétique des particules de A et des interactions électrostatiques instantanées entre particules de A)

Attention : H'_{part} ne comprend plus d'interactions électrostatiques instantanées entre systèmes différents A-B, A-C, B-C, ...

$$H'_I = -\sum_A \vec{D}_A \cdot \vec{E}(\vec{R}_A) - \sum_A \vec{M}_A \cdot \vec{B}(\vec{R}_A) - \sum_{\substack{A \\ i,j}} \varphi_{ij}^A \partial_i \vec{E}_j(\vec{R}_A) + \dots \quad (14)$$

\vec{E}, \vec{B} donnés en (2), (3)

\vec{R}_A : centre de masse de A.

\vec{D}_A : moment dipolaire électrique de A.

\vec{M}_A : moment dipolaire magnétique de A (orbital et de spin)

$\vec{\varphi}^A$: moment quadripolaire électrique de A.

- Avec ce nouvel hamiltonien, A et B ne peuvent interagir que par échange d'un photon transverse, et le caractère retardé de l'interaction apparaît beaucoup plus simplement.

Evolution d'un état discret couplé à un continuum Modèle simplifié

A. Introduction

Lien avec le problème de l'émission spontanée

- Etats propres de $H_0 = H_A + H_R$ couplés par V .
 - $\begin{cases} |e, 0\rangle : \text{atome dans niveau excité } e, 0 \text{ photon} - \text{Etat discret} \\ |f, \vec{k}, \vec{E}\rangle : \text{atome dans niveau fondamental} + 1 \text{ photon } \vec{k}, \vec{E} - \text{Continuum} \end{cases}$
- Autre exemple : photoionisation par une onde monochromatique.

Problèmes que l'on cherche à résoudre

- Comment l'état discret se vide-t-il ? Comment le continuum se remplit-il ?
- Rappel très bref de la théorie habituelle qui prévoit, en 1^{ère} approximation, une décroissance exponentielle. Ensuite, discussion détaillée des limites de cette approximation : comportement non exponentiel aux temps très courts et très longs, disparition complète du comportement exponentiel pour un couplage avec le continuum suffisamment fort et une "largeur" du continuum suffisamment faible, apparition d'un régime analogue à la précession de Rabi.

Modèle choisi - Méthode utilisée

- Modèle le plus simple possible : 1 seul état discret, 1 seul continuum, de manière à pouvoir mener le plus loin possible des calculs exacts.
- On essaie de résoudre l'équation de Schrödinger correspondant à une condition initiale donnée : à $t=0$, système dans l'état discret.
- Ensuite, pour des modèles plus réalistes, utilisation de méthodes plus puissantes (opérateurs de projections, équations pilote...), se prêtant moins bien à l'étude des transitions entre les divers types de régime (exponentiel, oscillant).

B. Notations

Hamiltonien non perturbé H_0

Etat discret : $H_0 |\varphi_i\rangle = E_i |\varphi_i\rangle$ (I-1)

Continuum : $H_0 |\alpha\rangle = E |\alpha\rangle, E \geq 0$ (I-2)



Autres notations : $|\alpha\rangle = |\beta, E\rangle$ (I-3)

β : paramètres autres que E caractérisant α (par exemple polarisation \vec{E} et direction du photon émis)

Densité d'états $\rho(\beta, E)$: $d\alpha = \rho(\beta, E) d\beta dE$ (I-4)

Couplage V

les seuls éléments de matrice non nuls de V couplent $|\alpha\rangle$ à $|\varphi_i\rangle$

$\langle \alpha | V | \alpha' \rangle = \langle \varphi_i | V | \varphi_i \rangle = 0$ (I-5)

$\langle \alpha | V | \varphi_i \rangle = \langle \beta, E | V | \varphi_i \rangle = \nu(\alpha) = \nu(\beta, E)$ (I-6)

Etats négligés dans le problème de l'émission spontanée : états à plusieurs photons
 $|e, 0\rangle \leftrightarrow |f, \vec{k}, \vec{E}\rangle \leftrightarrow |e', \vec{k}', \vec{E}'\rangle \leftrightarrow |e'', \vec{k}'', \vec{E}'', \vec{k}''\vec{E}''\rangle \dots$

Equation de Schrödinger

I-6

$$|\psi(t)\rangle = b_i(t) e^{-iEt/\hbar} |\varphi_i\rangle + \int d\alpha b(\alpha, t) e^{-iEt/\hbar} |\alpha\rangle \quad (I-7)$$

$$\left\{ \begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} b_i(t) &= \int d\alpha e^{i(E_i - E)t/\hbar} v^*(\alpha) b(\alpha, t) & (I-8-a) \\ i\hbar \frac{d}{dt} b(\alpha, t) &= e^{i(E - E_i)t/\hbar} v(\alpha) b_i(t) & (I-8-b) \end{aligned} \right.$$

Conditions initiales : $b(\alpha, 0) = 0 \quad b_i(0) = 1 \quad (I-9)$

Equation intégrodifférentielle équivalente à l'équation de Schrödinger.

On intègre (I-8-b) et on reporte $b_\alpha(t)$ dans (I-8-a), compte tenu de (I-9):

$$\frac{d}{dt} b_i(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int d\alpha \int_0^t dt' e^{i(E_i - E)(t-t')/\hbar} |v(\alpha)|^2 b_i(t') \quad (I-10)$$

En utilisant (I-4), et en intégrant sur β , on obtient :

$$\boxed{\frac{d}{dt} b_i(t) = -\frac{1}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dE \int_0^t dt' \Gamma(E) e^{i(E_i - E)(t-t')/\hbar} b_i(t')} \quad (I-11)$$

avec

$$\boxed{\Gamma(E) = \frac{2\pi}{\hbar} \int d\beta |v(\beta, E)|^2 \rho(\beta, E)} \quad (I-12)$$

La vitesse de variation de $b_i(t)$ à l'instant t dépend de toute "l'histoire antérieure" $b_i(t')$.

Allure de la fonction $\Gamma(E)$ - Largeur du continuum.

- $\Gamma(E)$: homogène à l'inverse d'un temps
- $\frac{\hbar}{2\pi} \Gamma(E) dE$: somme des carrés des éléments de matrice de V reliant $|\varphi_i\rangle$ à tous les états du continuum d'énergie comprise entre E et $E+dE$.
- $\Gamma(E)$ caractérise la dépendance en E du couplage de $|\varphi_i\rangle$ avec le continuum.

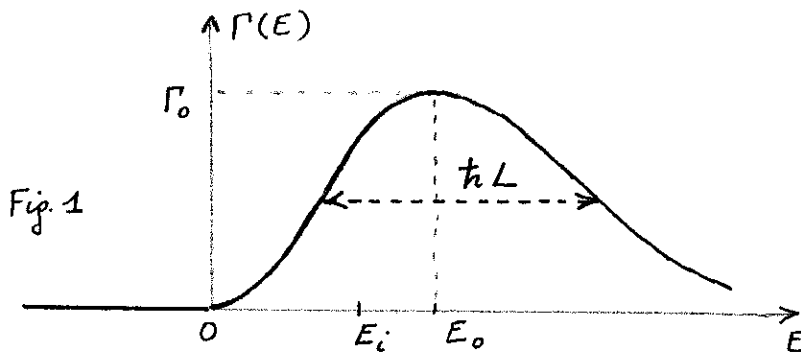


Fig. 1

$$\Gamma(E) \geq 0 \quad (I-13)$$

- Pour $E < 0$, $\rho(\beta, E) = 0$. Donc :

$$\Gamma(E) = 0 \text{ pour } E < 0 \quad (I-14)$$

- Pour $E \rightarrow \infty$, $\rho(\beta, E) \rightarrow \infty$ mais on suppose que $v(\beta, E) \rightarrow 0$ suffisamment vite pour que

$$\Gamma(E) \rightarrow 0 \text{ pour } E \rightarrow \infty \quad (I-15)$$

- Ceci permet de définir une "largeur $\hbar L$ " du continuum (voir fig. 1) L est homogène à l'inverse d'un temps.

- On suppose que $\Gamma(E) \rightarrow 0$ suffisamment vite quand $E \rightarrow \infty$ pour que $\int \Gamma(E) dE$ converge et on pose :

$$\int_0^\infty \Gamma(E) dE = 2\pi\hbar \Omega_i^2 \quad (I-16)$$

où Ω_i a les dimensions d'une fréquence caractérisant le couplage de $|\varphi_i\rangle$ avec tout le continuum. Si Γ_0 est le maximum de $\Gamma(E)$, on a :

$$\Omega_i^2 \sim \Gamma_0 L \quad (I-17)$$

C - Traitement perturbatif.

1) Principe.

- Pour t suffisamment petit, on peut remplacer dans (I-11) $b_i(t')$ par $b_i(0)=1$, ce qui permet d'effectuer immédiatement l'intégrale sur t' et donne :

$$\frac{d}{dt} b_i(t) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dE \Gamma(E) \left\{ \frac{\sin(E_i - E)t/\hbar}{E_i - E} + i \left[\frac{1 - \cos(E_i - E)t/\hbar}{E_i - E} \right] \right\} = -[A(t) + iB(t)] \quad (I-18)$$

- Pour avoir $A(t)$ et $B(t)$, il faut, pour chaque valeurs de t , multiplier les 2 fonctions de E représentées ~~sur~~ sur les figures 2a et 2b par $\Gamma(E)$, et intégrer sur E .

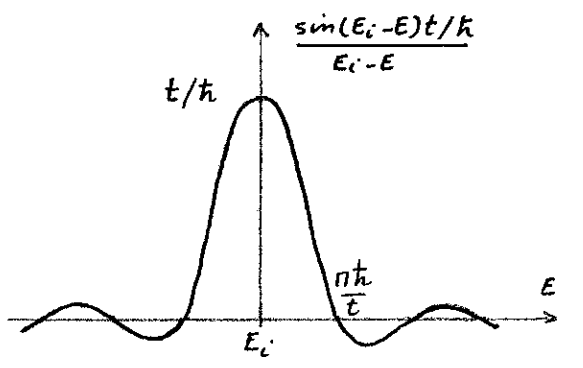


Fig 2a

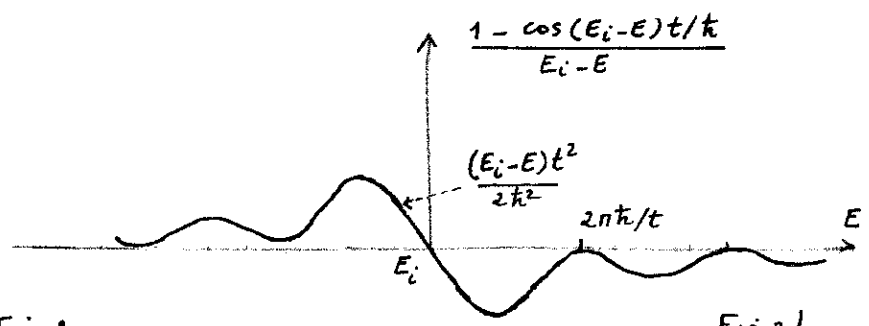


Fig 2b

Le résultat de cette intégration sur E dépend des largeurs relatives de $\Gamma(E)$ [largeur $\hbar L$] et des courbes 2a et 2b [largeur \hbar/t].

- Si $\frac{\hbar}{t} \gg \hbar L$, c-à-d si : $t \ll 1/L$ (I-19)

$$\begin{cases} A(t) \sim \frac{1}{2\pi} \int dE \Gamma(E) \frac{t}{\hbar} = \Omega_i^2 t & (I-20) \\ B(t) : \text{très petit terme en } t^2 & (I-21) \end{cases}$$

- Si $\frac{\hbar}{t} \ll L$, c-à-d si : $t \gg 1/L$ (I-22)

Le terme $\left\{ \right\}$ de (I-18) se comporte comme $\pi \delta(E_i - E) + i \mathcal{P} \frac{1}{E_i - E}$, et on a :

$$\begin{cases} A(t) \approx \frac{1}{2\pi} \int dE \Gamma(E) \delta(E_i - E) = \frac{\Gamma(E_i)}{2} = \frac{\Gamma_i}{2} & (I-23) \\ B(t) \approx \frac{1}{2\pi} \int dE \Gamma(E) \mathcal{P} \frac{1}{E_i - E} = \Delta(E_i) = \Delta_i & (I-24) \end{cases}$$

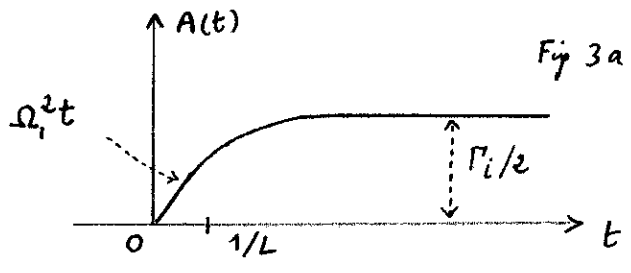


Fig 3a

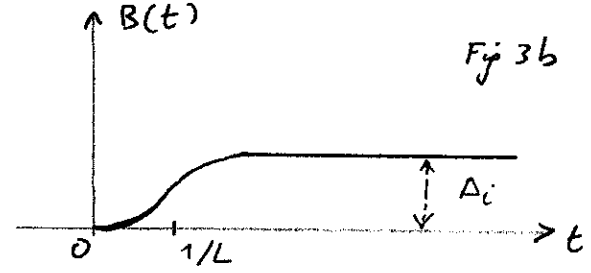


Fig 3b

- Finalement, on obtient $b_i(t)$ en intégrant (I-18)

$$b_i(t) = 1 - \int_0^t dt' [A(t') + iB(t')] \quad (I-25)$$

Encore faut-il prendre t suffisamment petit pour que $b_i(t)$ diffère très peu de 1.

2 cas sont alors à distinguer suivant que la valeur limite de t au delà de laquelle la théorie des perturbations cesse d'être valable est inférieure ou supérieure à la valeur $1/L$ qui sépare les 2 comportements limites différents de $A(t)$ et $B(t)$ représentés sur les figures 3a et 3b

2) Couplage fort avec un continuum de largeur faible

- Le maximum de la courbe $\Gamma(E)$, Γ_0 , est supposé grand devant la largeur L de cette courbe :

$$\Gamma_0 \gg L \quad (I-26)$$

ce qui entraîne d'après (I-17) :

$$\Omega_1 \gg L \quad (I-27)$$

(On suppose également $|E_i - E_0|/\hbar \ll \Gamma_0, \Omega_1$).

- Choisissons la borne supérieure de l'intégrale de (I-25) inférieure à $1/L$. On peut alors utiliser les formes limites (I-20) et (I-21) de $A(t')$ et $B(t')$. La contribution de $B(t')$ est négligeable, et il vient :

$$b_i(t) \approx 1 - \int_0^t dt' \Omega_1^2 t' = 1 - \frac{\Omega_1^2 t^2}{2} \quad (I-28)$$

Cette expression perturbative n'est valable que si $\Omega_1 t \ll 1$, c-à-d si :

$$t \ll \frac{1}{\Omega_1} \quad (I-29)$$

Comme d'après (I-27), $\frac{1}{\Omega_1} \ll \frac{1}{L}$, il était bien légitime d'utiliser les expressions limites (I-20) et (I-21).

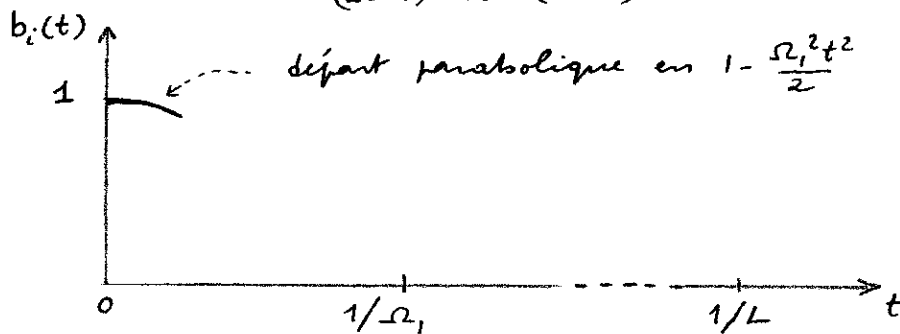


Fig 4

En conclusion, pour un couplage fort avec un continuum étroit, le départ de $b_i(t)$ est parabolique (pour des temps inférieurs à $1/\Omega_1$).

Questions : ce départ est-il celui d'une sinusoïde ? Que se passe-t-il pour $t \sim 1/\Omega_1$, $t \sim 1/L$?

3) Couplage faible avec un continuum large. Règle d'or de Fermi.

- On suppose maintenant :

$$\Gamma_0 \ll L \quad (I-30)$$

ce qui entraîne d'après (I-17) :

$$\Omega_1 \ll L \quad (I-31)$$

- Comme d'après les figures 3a et 3b

$$0 \leq A(t) \leq \Gamma_i/2 \quad 0 \leq B(t) \leq \Delta_i \quad (I-32)$$

on a :

$$\int_0^t |A(t') + iB(t')| dt' \leq \sqrt{(\Gamma_i/2)^2 + \Delta_i^2} t \approx \Gamma_0 t \quad (I-33)$$

le résultat perturbatif n'est valable que tant que :

$$t \ll 1/\Gamma_0 \quad (I-34)$$

- Comme d'après (I-30), $\frac{1}{\Gamma_0} \gg \frac{1}{L}$, il faut utiliser la dépendance complète en t de $A(t)$ et $B(t)$ représentée sur les figures 3a et 3b et on peut intégrer ces fonctions de 0 à des temps courts, tout en étant petits devant $\frac{1}{\Gamma_0}$, peuvent être grands devant $\frac{1}{L}$. On obtient ainsi pour les parties réelles et imaginaires de $b_i(t)$ les comportements représentés sur les figures 5a et 5b.

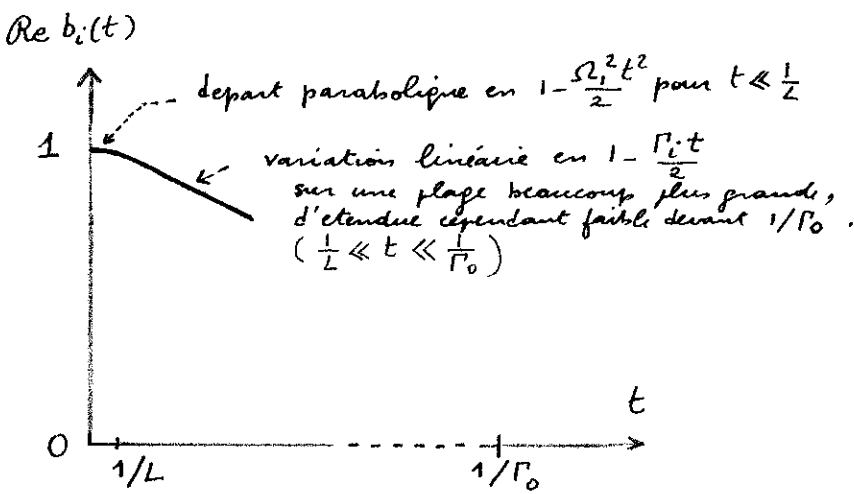


Fig 5a

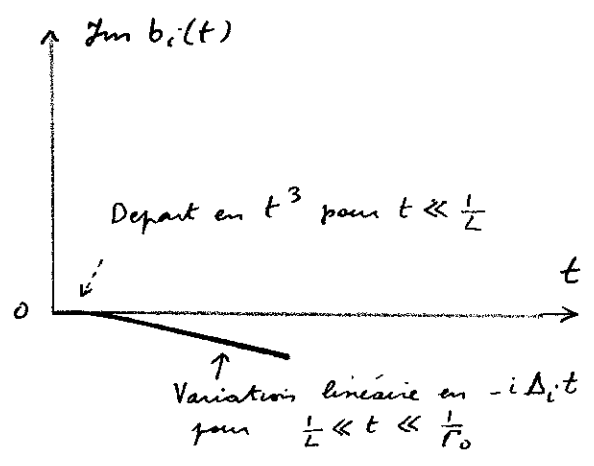


Fig 5b

En conclusion, pour $\frac{1}{L} \ll t \ll \frac{1}{\Gamma_0}$, la variation de $b_i(t)$ est linéaire.

$$b_i(t) \approx 1 - \left(\frac{\Gamma_i}{2} + i \Delta_i \right) t \tag{I-35}$$

Questions : ce départ est-il le début d'une exponentielle ? Que se passe-t-il pour $t \sim \frac{1}{\Gamma_0}$, pour $t \gg \frac{1}{\Gamma_0}$?

- lien avec la règle d'or de Fermi.

En négligeant des termes très petits $\sim \Gamma_0^2 t^2$, on obtient à partir de (I-35)

$$|b_i(t)|^2 = 1 - \Gamma_i t \tag{I-36}$$

Par suite de la conservation de la norme, $\Gamma_i t$ est la probabilité de trouver le système dans un état quelconque du continuum.

Comme cette probabilité croît linéairement avec t , on peut parler d'une probabilité de transition par unité de temps vers le continuum qui est donnée par $\Gamma_i = \Gamma(E_i)$, c-à-d d'après (I-12) par la règle d'or de Fermi.

Evolution d'un état discret couplé à un continuum

Modèle simplifié (suite).

D. Autre méthode (non-perturbative) de résolution approchée de l'équation de Schrödinger.

① Couplage faible avec un continuum large $(L \gg \Gamma_0)$. Décroissance exponentielle.

Principe Remplacer dans l'équation intégrodifférentielle (I-11) $b_i(t')$ non par $b_i(0)$ mais par $b_i(t)$

Justification Récrivons (I-11) sous la forme (on pose $\tau = t - t'$) :

$$\frac{d}{dt} b_i(t) = \int_0^t dt' g(E_i, t-t') b_i(t') = \int_0^t d\tau g(E_i, \tau) b_i(t-\tau) \quad (II-1)$$

avec $g(E_i, \tau) = -\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \Gamma(E) e^{i(E_i - E)\tau/\hbar} \quad (II-2)$

(on a utilisé $\Gamma(E) = 0$ pour $E < 0$). Le "noyau" $g(E_i, \tau)$ qui caractérise la "mémoire" du processus est la T.F. de $\Gamma(E)$. Il a donc une largeur de l'ordre de $1/L$.

Or d'après l'étude perturbative précédente (§ C3), le temps caractéristique d'évolution de $b_i(t)$ est $1/\Gamma_0$, très long devant $1/L$ (puisque nous supposons ici $L \gg \Gamma_0$). Dans l'intervalle $[0 - 1/L]$ de l'intégrale (II-1) où $g(E_i, \tau)$ varie très vite, $b_i(t-\tau)$ varie très peu et peut donc être remplacé par $b_i(t)$

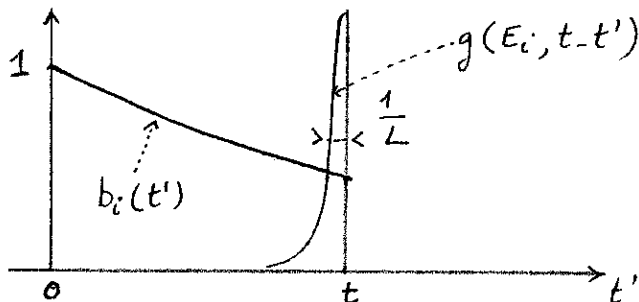


Fig 6

L'équation (II-1) peut donc être remplacé par l'équation approchée :

$$\frac{d}{dt} b_i(t) = b_i(t) \int_0^t d\tau g(E_i, \tau) = -b_i(t) \frac{1}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dE \Gamma(E) \int_0^t d\tau e^{i(E_i - E)\tau/\hbar} \quad (II-3)$$

La double intégrale est la même que celle rencontrée au § C (où l'on avait remplacé $b_i(t')$ par 1), et vaut donc $A(t) + iB(t)$, c-à-d pour $t \gg \frac{1}{L}$, $\frac{\Gamma_i}{2} + i\Delta_i$ (cf I-23 et I-24).

En conclusion, pour $t \gg \frac{1}{L}$, mais pas nécessairement petit devant $1/\Gamma_0$, l'équation intégrodifférentielle (I-11) peut être remplacée par l'équation différentielle :

$$\frac{d}{dt} b_i(t) \approx -\left(\frac{\Gamma_i}{2} + i\Delta_i\right) b_i(t) \quad (II-4)$$

dont la solution est, compte tenu de la condition initiale $b_i(0) = 1$:

$$b_i(t) = e^{-(\frac{\Gamma_i}{2} + i\Delta_i)t} \quad (\text{II-5}) \quad \text{II-2}$$

En reportant (II-5) dans (I-8-b) et en intégrant, on obtient compte tenu de (I-9) et en posant $\delta E_i = \hbar \Delta_i$

$$b(\alpha, t) = \frac{v(\alpha)}{\hbar} \frac{1 - e^{-\Gamma_i t/2} e^{i(E - E_i - \delta E_i)t/\hbar}}{[(E - E_i - \delta E_i)/\hbar] + i\Gamma_i/2} \quad (\text{II-6})$$

Discussion physique (voir référence 2)

(i) $\tau_i = 1/\Gamma_i$: durée de vie de l'état initial : $|b_i(t)|^2 = e^{-t/\tau_i}$ (II-7)

(ii) $\delta E_i = \hbar \Delta_i = \frac{\hbar}{2\pi} \int dE \mathcal{P}\left(\frac{1}{E_i - E}\right) \Gamma(E) = \int_0^\infty dE \mathcal{P}\left(\frac{1}{E_i - E}\right) \int d\beta \rho(\beta, E) |v(\beta, E)|^2$
 $= \mathcal{P} \int d\alpha \frac{|\langle \alpha | V | \psi_i \rangle|^2}{E_i - E}$ (II-8)

Déplacement (au 2^{em} ordre de la théorie des perturbations) de l'état discret $|\psi_i\rangle$ du au couplage avec les états $|\alpha\rangle$ (la partie principale éliminant la singularité en $E = E_i$). Dans le cas de l'émission spontanée, δE_i est le "Lamb-shift" de l'état excité.

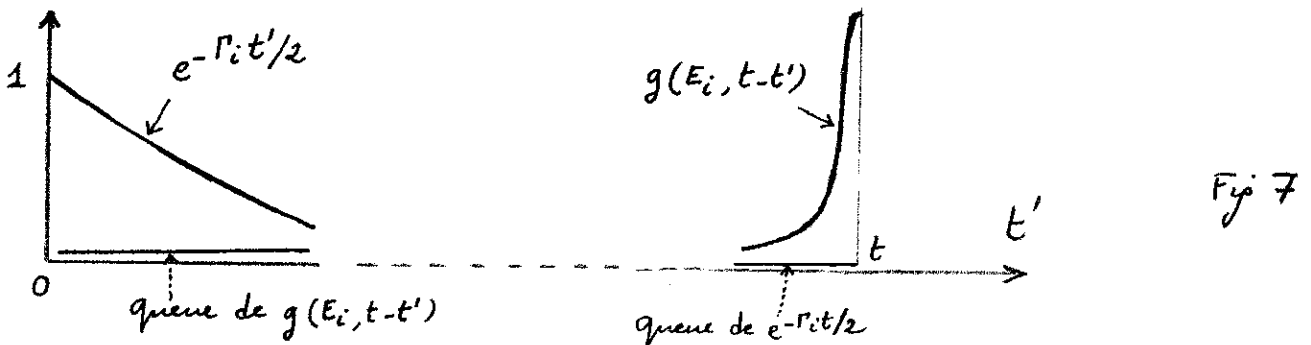
(iii) $|b(\alpha, t)|^2 \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} |v(\alpha)|^2 \frac{1}{(E - E_i - \delta E_i)^2 + \hbar^2 \Gamma_i^2 / 4}$ (II-9)

Distribution en énergie des états du continuum qui sont remplis à $t = \infty$ après la désintégration de l'état discret initial : courbe de Lorentz centrée en $E_i + \delta E_i$ et de largeur $\hbar \Gamma_i$.

Cas de l'émission spontanée : largeur naturelle des raies spectrales.

Insuffisances de la méthode précédente pour décrire le comportement aux temps très longs ($t \gg 1/\Gamma_0$)

Admettons que la solution (II-5) soit valable pour $t \gg 1/\Gamma_0$ et montrons que l'on aboutit à une contradiction, à savoir que $db_i(t)/dt$ ne décroît pas exponentiellement. Reprenons la figure 6 pour $t \gg 1/\Gamma_0$.



Pour avoir $\frac{d}{dt} b_i(t)$ il faut intégrer sur t' le produit des 2 fonctions $e^{-\Gamma_i t'/2}$ et $g(E_i, t-t')$ représentées ci-dessus. Nous montrons ci-dessous que, bien qu'ayant une largeur très étroite, de l'ordre de $1/L \ll 1/\Gamma_0$, la fonction $g(E_i, t-t')$ a une queue qui décroît beaucoup moins vite qu'exponentiellement, en $[1/(t-t')]^{n+1}$, où n est un entier qui sera défini. Pour $t \gg 1/\Gamma_0$, la contribution à l'intégrale du produit des 2 fonctions de la région $t' \approx t$ (qui était la

seule envisagé plus haut) est exponentiellement petite (en $e^{-\Gamma_0 t/2}$), alors que la contribution de la région $t \sim 0$ n'est qu'en $(1/t)^{n+1}$ et peut par suite l'emporter. Donc $db_i(t)/dt$ ne décroît pas exponentiellement.

L'approximation de "mémoire très courte" est donc insuffisante aux temps très longs $t \gg 1/\Gamma_0$. La valeur de $b_i(t)$ est devenue tellement petite que les valeurs passées de $b_i(t')$ (avec $t' \sim 0$), qui sont beaucoup plus grandes, finissent par contribuer de manière significative compte tenu du fait que la mémoire du processus ne décroît pas exponentiellement dans le passé.

Comportement de $g(E_i, t-t')$ pour $t-t' \gg 1/\Gamma_0$

Précisons tout d'abord le comportement de $\Gamma(E)$ pour $E \rightarrow 0$.

On suppose

$$\Gamma(E) \underset{E \rightarrow 0}{\sim} \Gamma_0 \left(\frac{E}{E_0}\right)^n \tag{II-10}$$

où n est un entier > 0 et où Γ_0 et E_0 sont l'ordonnée et l'abscisse du maximum de $\Gamma(E)$. Pour l'émission spontanée, $\rho(E) \sim E^2$ et $|v(E)|^2 \sim E$ pour $E \rightarrow 0$, de sorte que:

$$\Gamma(E) \sim E^3 \tag{II-11}$$

Récrivons $g(E_i, \tau)$ sous la forme

$$g(E_i, \tau) = -\frac{1}{2\pi\hbar} e^{iE_i\tau/\hbar} \int_0^\infty dE \Gamma(E) e^{-iE\tau/\hbar} \tag{II-12}$$

puisque $\Gamma(E) = 0$ pour $E < 0$. Supposons $\Gamma(z)$ analytique dans le plan complexe et considérons l'intégrale de $\Gamma(z) e^{-iz\tau/\hbar}$ le long du contour de la figure 8

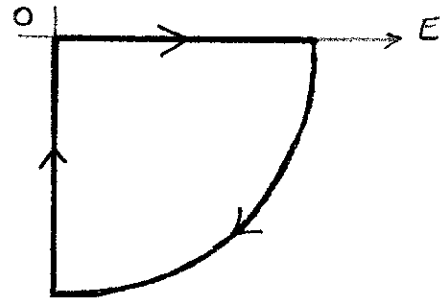


Fig 8

Comme $\text{Im}(z)\tau < 0$, la contribution du quart de cercle est nulle lorsque $\tau \rightarrow \infty$. Comme il n'y a pas de pôle à l'intérieur du contour, l'intégrale le long de l'axe réel est égale à l'intégrale le long de l'axe imaginaire.

$$\int_0^\infty dE \Gamma(E) e^{-iE\tau/\hbar} = i \int_0^{-\infty} dy e^{y\tau/\hbar} \Gamma(iy) = -i \int_0^\infty dy e^{-y\tau/\hbar} \Gamma(-iy) \tag{II-13}$$

L'exponentielle $e^{-y\tau/\hbar}$ coupe les contributions de $\Gamma(-iy)$ pour $y \gg \frac{\hbar}{\tau}$, ce qui montre que, pour $\tau \rightarrow \infty$, seul le comportement de $\Gamma(-iy)$ au voisinage de $y = 0$ intervient. En utilisant (II-10), on obtient, compte tenu de (II-12) et (II-13):

$$g(E_i, \tau) \underset{\tau \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{i}{2\pi\hbar} e^{iE_i\tau/\hbar} \int_0^\infty dy e^{-y\tau/\hbar} \Gamma_0 \left(\frac{-iy}{E_0}\right)^n = -\frac{(i)^{n+1}}{2\pi} \frac{e^{iE_i\tau/\hbar}}{\tau^{n+1}} \frac{\hbar^n}{E_0^n} \Gamma_0 \int_0^\infty dx e^{-x} x^n \tag{II-14}$$

$g(E_i, \tau)$ décroît bien en $\frac{1}{\tau^{n+1}}$

② Couplage fort avec un continuum étroit $(\Gamma_0 \gg L)$ - Précession de Rabi (II-4)

Principe Repartir de l'équation intégrodifférentielle (I-11) et dériver les 2 membres,

$$\frac{d^2}{dt^2} b_i(t) = - \left(\frac{1}{2\hbar k} \int_0^\infty \Gamma(E) dE \right) b_i(t) + \frac{1}{2\hbar k} \int_0^\infty dE \int_0^t dt' \Gamma(E) \frac{i(E_i - E)}{\hbar} e^{\frac{i(E_i - E)(t - t')}{\hbar}} b_i(t')$$

$= \Omega_1^2$ d'après (I-16) (II-15)

Négliger le dernier terme de (II-15), ce qui donne

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \Omega_1^2 \right) b_i(t) = 0 \quad (II-16)$$

dont la solution est, compte tenu des conditions initiales

$$b_i(t) = \cos \Omega_1 t$$

Justifications

Calculons un ordre de grandeur très grossier du terme négligé par rapport aux 2 autres (qui sont en $\Omega_1^2 b_i(t)$).

La double intégrale de (II-15) ressemble beaucoup à celle qui donne $\frac{d}{dt} b_i(t)$ [voir I-11] à part que $\Gamma(E)$ est remplacé par $\Gamma(E) \frac{i(E_i - E)}{\hbar}$.

- Si $|E_i - E_0| \gg \hbar L$ (voir figure 1), on peut remplacer $E_i - E$ par $E_i - E_0$. Le dernier terme de (II-15) peut alors s'écrire $i \frac{E_i - E_0}{\hbar} \frac{d}{dt} b_i(t)$ et son ordre de grandeur est $\frac{|E_i - E_0|}{\hbar} \Omega_1 b_i$.

Or, nous avons supposé $|E_i - E_0| \ll \hbar \Omega_1$ (cf page I-8 après la formule I-27). Le dernier terme de (II-15) est alors négligeable devant les autres.

De toute manière, on pourrait résoudre (II-15) en remplaçant le dernier terme par $i \frac{(E_i - E_0)}{\hbar} \frac{d}{dt} b_i(t)$. On trouverait en effet juste remplacer la fréquence de Rabi Ω_1 par $[\Omega_1^2 + \left(\frac{E_i - E_0}{2\hbar}\right)^2]^{1/2}$.

- Si $|E_i - E_0| \lesssim \hbar L$, on peut écrire $\frac{|E_i - E|}{\hbar} \Gamma(E) \lesssim L \Gamma(E)$, et l'ordre de grandeur du 3^{ème} terme de (II-15) est $L \frac{db_i}{dt} \approx L \Omega_1 b_i \ll \Omega_1^2 b_i$.

Critiques

Le calcul d'ordre de grandeur précédent est très grossier.

Le 3^{ème} terme de (II-15) produit-il simplement un changement de la fréquence de Rabi, ou introduit-il en plus un amortissement? Que se passe-t-il pour $t \gg \frac{1}{\Omega_1}$, pour $t \gg \frac{1}{L}$?

Pour répondre de manière plus précise aux critiques soulevées à la fin des §§ D1 et D2, il est plus simple de travailler dans l'espace des fréquences que dans l'espace des temps. On pourrait donc songer à remplacer le système d'équations différentielles couplées (I-8) pour $b_i(t)$ et $b(\alpha, t)$ par un système d'équations algébriques auxquelles obéiraient leurs transformées de Fourier ou de Laplace, et qui serait plus simple à manipuler (voir par exemple réf. 3).

Plutôt que de prendre la T.F. de (I-8), nous allons de manière plus générale étudier la T.F. de l'opérateur d'évolution et introduire à ce propos la résolvante $G(z)$ de l'hamiltonien H , car nous en aurons besoin par la suite.

E. Opérateur d'évolution et résolvante

① Opérateur d'évolution $U(t, t')$ et Fonctions de Green $K_{\pm}(t, t')$

On se limite dans tout ce qui suit au cas où H est indépendant de t

- Opérateur d'évolution

$$U(t, t') = e^{-iH(t-t')/\hbar} \tag{II-17}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t') = H U(t, t') \tag{II-18}$$

- Opérateurs $K_{\pm}(t, t')$

Définition

$$\begin{cases} K_+(t, t') = \theta(t-t') U(t, t') & \text{(II-19)} \\ K_-(t, t') = -\theta(t'-t) U(t, t') & \text{(II-20)} \end{cases}$$

$\theta(x)$: Fonction de Heaviside $= 0$ pour $x < 0$, $= 1$ pour $x > 0$

Equation différentielle

$$(i\hbar \frac{d}{dt} - H) K_{\pm}(t, t') = +i\hbar \delta(t-t') \tag{II-21}$$

Origine du mot "fonction de Green".

K_{\pm} satisfait à la même équation différentielle, mais différent pour les conditions aux limites (K_+ fonction de Green retardée, K_- avancée)

Intérêt

- Le développement de perturbation de U fait intervenir des intégrales multiples sur des temps ordonnés. Le développement correspondant de K_{\pm} est plus simple: grâce aux fonctions θ , on n'a plus besoin d'imposer explicitement aux divers temps d'être ordonnés de sorte qu'ils peuvent varier indépendamment de $-\infty$ à $+\infty$
- La transformée de Fourier de K_+ ou K_- est plus simple que celle de U

Expression de U en fonction de K_+ et K_- . Comme $\theta(x) + \theta(-x) = 1$

$$U(t, t') = K_+(t, t') - K_-(t, t') \tag{II-22}$$

② Transformées de Fourier de $K_{\pm}(t-t')$: Propagateurs $G_{\pm}(E)$

- Posons $t-t' = \tau$ et introduisons la T.F de $K_+(\tau)$ par:

$$K_+(\tau) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iE\tau/\hbar} G_+(E) dE \tag{II-23}$$

La constante $-1/2\pi i$ est introduite de manière à avoir la forme la plus simple possible pour $G_+(E)$, comme nous allons le voir en inversant (II-23):

$$\begin{aligned} G_+(E) &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iE\tau/\hbar} K_+(\tau) d\tau = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} e^{i(E-H)\tau/\hbar} d\tau \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0_+} \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} e^{i(E-H+i\epsilon)\tau/\hbar} d\tau = \lim_{\epsilon \rightarrow 0_+} \frac{1}{E-H+i\epsilon} \\ &= \mathcal{P}\left(\frac{1}{E-H}\right) - i\pi \delta(E-H) \end{aligned} \tag{II-24}$$

- De la même façon on introduit $G_-(E)$ par

$$K_-(\tau) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iE\tau/\hbar} G_-(E) dE \quad (\text{II-25})$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} G_-(E) &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iE\tau/\hbar} K_-(\tau) d\tau = -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 e^{i(E-H)\tau/\hbar} d\tau \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{i\hbar} \int_0^{+\infty} e^{i(E-H-i\epsilon)\tau/\hbar} d\tau = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E-H-i\epsilon} \\ &= \mathcal{P}\left(\frac{1}{E-H}\right) + i\pi \delta(E-H) \end{aligned} \quad (\text{II-26})$$

- Finalement, on a établi la formule très simple :

$$\boxed{G_{\pm}(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E-H \pm i\epsilon}} \quad (\text{II-27})$$

Remarque. Prenons les éléments de matrice des 2 membres de (II-23) et (II-25) entre $\langle \Psi_n |$ et $|\Psi_n\rangle$ ou $|\Psi_n\rangle$ est un état propre de H de valeur propre E_n . En utilisant (II-19), (II-20) et (II-27) on obtient :

$$\pm \theta(\pm\tau) e^{-iE_n\tau/\hbar} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{e^{-iE\tau/\hbar}}{E-E_n \pm i\epsilon} \quad (\text{II-28})$$

Il est intéressant de vérifier directement par la méthode des résidus que l'intégrale du 2^{ème} membre de (II-28) redonne bien le 1^{er}. Un tel calcul permet de bien comprendre l'importance des $+i\epsilon$ et $-i\epsilon$.

③ Ré-solvante $G(z)$ de H

Définition

La formule (II-27) suggère d'introduire l'opérateur $G(z)$ fonction de la variable complexe z et défini par :

$$\boxed{G(z) = \frac{1}{z-H}} \quad (\text{II-29})$$

On a

$$G_{\pm}(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} G(E \pm i\epsilon) \quad (\text{II-30})$$

Lien entre $U(\tau)$ et $G(z)$

En portant (II-23) et (II-25) dans (II-22), et en utilisant (II-30), on obtient la relation suivante entre $U(\tau)$ et $G(z)$

$$\boxed{U(\tau) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_+ + C_-} G(z) e^{-iz\tau/\hbar} dz} \quad (\text{II-31})$$

où $C_+ + C_-$ est le contour du plan complexe représenté sur la figure 9

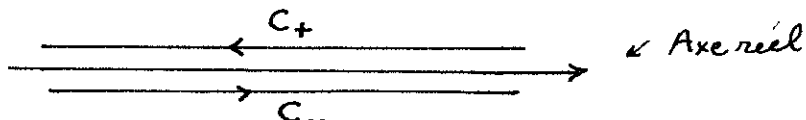


Fig 9

Pour $\tau > 0$, la contribution de C_- est nulle.

Pour $\tau < 0$, " " " C_+ est nulle.

Liens entre G(z) et G_0(z)

Si $H = H_0 + V$ (II, 32)

on pose $G_0(z) = \frac{1}{z - H_0}$ $G(z) = \frac{1}{z - H}$ (II-33)

De l'identité opératoirelle :

$\frac{1}{A} = \frac{1}{B} + \frac{1}{B} (B - A) \frac{1}{A}$ (II-34)

on déduit, en posant $A = z - H$ $B = z - H_0$ (on a $B - A = z - H_0 - z + H_0 + V = V$).

$G(z) = G_0(z) + G_0(z) V G(z)$ (II-35)

relation exacte que l'on peut itérer pour obtenir un développement perturbatif :

$G = G_0 + G_0 V G_0 + G_0 V G_0 V G_0 + \dots$ (II-36)

Propriétés analytiques de $G_u(z) = \langle u | G(z) | u \rangle$ ($|u\rangle$: état normé)

Dans le cas général, l'hamiltonien H possède un spectre continu partant de E_0 et un spectre discret E_n (dont une partie peut éventuellement être superposée au spectre continu).

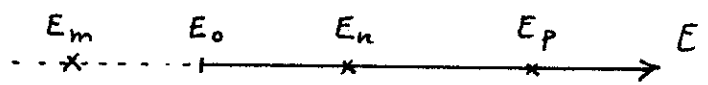


Fig 10

Relation de fermeture :

$\sum_n |E_n\rangle \langle E_n| + \iint d\gamma dE \rho(\gamma, E) |\gamma, E\rangle \langle \gamma, E| = 1$ (II-37)

$G_u(z) = \langle u | \frac{1}{z - H} | u \rangle = \sum_n \frac{|\langle E_n | u \rangle|^2}{z - E_n} + \iint d\gamma dE' \rho(\gamma, E') \frac{|\langle \gamma, E' | u \rangle|^2}{z - E'}$ (II-38)

(i) $G_u(z)$ est analytique en dehors de l'axe réel

Il suffit de montrer que $G_u(z)$ et $G'_u(z)$ sont bornés quand z est hors de l'axe réel.

$|z - E_n|$ et $|z - E|$ sont majorés par la distance δ de z à l'axe réel.

On déduit alors de (II-37) et (II-38) que :

$|G_u(z)| \leq \frac{1}{\delta}$ (II-39)

On démontrerait de même que $G'_u(z)$ est borné.

(ii) $G_u(z)$ a des poles aux valeurs propres discrètes de H.

Quand z tend vers une valeur propre discrète E_n de H, le terme prépondérant (de II-38) est $\frac{|\langle E_n | u \rangle|^2}{z - E_n}$. $G_u(z)$ a donc un pole en $z = E_n$, de résidu $|\langle E_n | u \rangle|^2$.

(iii) $G_u(z)$ a une coupure le long de la portion d'axe réel correspondant au spectre continu de H.

Montrons que la limite de $G_u(z)$ lorsque z tend vers une valeur propre E du spectre continu n'est pas la même suivant que z tend vers E par au dessus ($z = E + i\epsilon$, $\epsilon \rightarrow 0_+$), ou par au dessous ($z = E - i\epsilon$, $\epsilon \rightarrow 0_+$). De (II-38), on déduit :

$$G_u(E \pm i\epsilon) = \sum_n \frac{|\langle E_n | u \rangle|^2}{E \pm i\epsilon - E_n} + \int_{E_0}^{\infty} dE' \frac{f_u(E')}{E - E' \pm i\epsilon} \quad (\text{II-40})$$

ou $f_u(E') = \int d\gamma \rho(\gamma, E') |\langle \gamma, E' | u \rangle|^2$ (II-41)

Le 1^{er} terme de (II-40) tend, quand $\epsilon \rightarrow 0$, vers une valeur réelle $\sum_n \frac{|\langle E_n | u \rangle|^2}{E - E_n}$.

Quant au 2^{em} terme, il tend vers :

$$\int_{E_0}^{+\infty} \mathcal{P}\left(\frac{1}{E-E'}\right) f_u(E') dE' \mp i\pi f_u(E) \quad (\text{II-42})$$

Les limites de $G_u(E+i\epsilon)$ et $G_u(E-i\epsilon)$ pour $\epsilon \rightarrow 0_+$ existent donc mais ne sont pas les mêmes. Elle diffèrent de $-2i\pi f_u(E)$

Remarque

$G_u(z)$ est analytique dans le demi-plan supérieur. On peut faire un prolongement analytique au delà de la coupure dans le demi-plan inférieur (2^{em} feuillet de Riemann). La valeur prise par la fonction prolongée est différente de la valeur prise au même point par la détermination initiale puisque la coupure introduit justement une discontinuité dans cette détermination.

Alors que la 1^{er}e détermination de $G_u(z)$ ne possède pas de pôle en dehors du spectre discret de H, mais ne s'oppose que à ce que la fonction prolongée possède des pôles en dehors de l'axe réel (état instables)

Bibliographie

- (1) V.F. WEISSKOPF and E. WIGNER Z. Phys. 63, 54 (1930)
Article original
- (2) C. COHEN-TANNOUJJI, B. DIU, F. LALOE, Mécanique Quantique Hermann Paris 1973
Complément D_{XIII} p. 1332. Etude simple de la décroissance exponentielle (par la méthode de l'équation intégrodifférentielle)
- (3) W. HEITLER, The Quantum Theory of Radiation, 3rd edition, Oxford University Press (1954)
§ 16 : Utilise la méthode consistant à prendre la Transformée de Fourier du système d'équations différentielles équivalent à l'équation de Schrödinger (dans le cas d'un modèle plus compliqué que celui considéré ici : plusieurs niveaux atomiques)

Références sur la résolvante :

- (4) A. MESSIAH, Mécanique Quantique Dunod Paris 1964 Nouveau tirage
Chap XVI §§ 15 et 16, Chap XXI, § 13
- (5) M.L. GOLDBERGER and K.M. WATSON, Collision Theory Wiley, New-York (1964) Chap. 8

F. Etude par la méthode de la résolvante de l'évolution de l'état discret.

① Calcul de $\langle \varphi_i | G(z) | \varphi_i \rangle = G_i(z)$

- Itérons une fois (II.35) :

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z) V G_0(z) + G_0(z) V G_0(z) V G(z) \quad (III-1)$$

On a :

$$\begin{cases} \langle \varphi_i | G_0(z) | \varphi_i \rangle = \langle \varphi_i | \frac{1}{z - H_0} | \varphi_i \rangle = \frac{1}{z - E_i} \\ \langle \alpha | G_0(z) | \alpha' \rangle = \langle \alpha | \frac{1}{z - H_0} | \alpha' \rangle = \frac{1}{z - E} \delta(\alpha - \alpha') \end{cases} \quad (III-2)$$

- Comme V n'a d'éléments de matrice qu'entre $|\varphi_i\rangle$ et $|\alpha\rangle$, on obtient, en prenant l'élément de matrice de (III-1) entre $|\varphi_i\rangle$ et $\langle \varphi_i|$:

$$G_i(z) = \langle \varphi_i | G(z) | \varphi_i \rangle = \frac{1}{z - E_i} + 0 + \frac{1}{z - E_i} \int d\alpha' \frac{|V(\alpha')|^2}{z - E'} G_i(z) \quad (III-3)$$

$$G_i(z) = \frac{1}{z - E_i - \int d\alpha' \frac{|V(\alpha')|^2}{z - E'}} \quad (III-4)$$

- Calcul de $G_i(E \pm i\epsilon)$. De (III-4) on tire, en utilisant (I-12) :

$$G_i(E \pm i\epsilon) = \frac{1}{E \pm i\epsilon - E_i - \int d\alpha' \int d\beta' \frac{P(\beta', E') |V(\beta', E')|^2}{E - E' \pm i\epsilon}} = \frac{1}{E \pm i\epsilon - E_i - \frac{\hbar}{2\pi} \int dE' \frac{\Gamma(E')}{E - E' \pm i\epsilon}} \quad (III-5)$$

Comme $\frac{\hbar}{2\pi} \int dE' \frac{\Gamma(E')}{E - E' \pm i\epsilon} = \hbar \Delta(E) \mp i \frac{\Gamma(E)}{2}$ (III-6)

où $\Delta(E) = \frac{1}{2\pi} \int \mathcal{P} \frac{1}{E - E'} \Gamma(E') dE'$ (III-7)

on en tire la formule exacte :

$$G_i(E \pm i\epsilon) = \frac{1}{E \pm i\epsilon - E_i - \hbar \Delta(E) \pm i \frac{\hbar \Gamma(E)}{2}}$$

(III-8)

- Allure de $\Delta(E)$

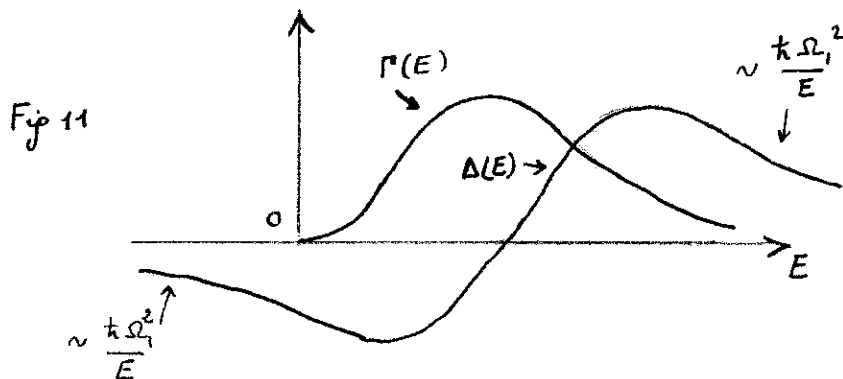


Fig 11

Forme de courbe de dispersion pour $\Delta(E)$.

Pour $|E| \gg \hbar L$, on peut négliger E' devant E dans le $\mathcal{P} \frac{1}{E - E'}$, qui apparaît dans (III-7), et on obtient :

$$\Delta(E) \sim \frac{1}{2\pi E} \int dE' \Gamma(E')$$

En utilisant (I,16), on obtient finalement :

Pour $|E| \gg \hbar L$, $\Delta(E) \sim \frac{\hbar \Omega_1^2}{E}$ (III-9)

② Calcul de $\langle \varphi_i | U(t) | \varphi_i \rangle = b_i(t) e^{-iEt/\hbar} = \tilde{b}_i(t)$

D'après (II-31) :

$$\langle \varphi_i | U(t) | \varphi_i \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \left[\int_{+\infty}^{-\infty} dE e^{-iEt/\hbar} G_i(E+i\epsilon) + \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt/\hbar} G_i(E-i\epsilon) \right]$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt/\hbar} [G_i(E-i\epsilon) - G_i(E+i\epsilon)] \quad (III-10)$$

Bien que la contribution du terme en $G_i(E-i\epsilon)$ soit nulle pour $t > 0$, nous avons gardé les 2 termes pour avoir une expression plus commode pour la discussion physique (seules des quantités réelles apparaissent).

En reportant (III-8) dans (III-10), on obtient :

$$\langle \varphi_i | U(t) | \varphi_i \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt/\hbar} \frac{E + \hbar \frac{\Gamma(E)}{2}}{[E - E_i - \hbar \Delta(E)]^2 + [E + \hbar \frac{\Gamma(E)}{2}]^2} \quad (III-11)$$

Pour étudier comment les phénomènes varient en fonction de l'intensité du couplage, il est commode de multiplier $v(\beta, E)$ par un coefficient ξ sans dimensions, indépendant de β et E . Ceci revient à multiplier dans (III-11) $\Gamma(E)$ et $\Delta(E)$ par ξ^2 . Si l'on suppose que $\Gamma(E)$ est telle que $\Gamma_0 \sim L$ et si l'on fait varier ξ de 0 à $+\infty$, on passe d'un couplage très faible pour $\xi \ll 1$ ($\xi \Gamma_0 \ll L$) à un couplage très fort pour $\xi \gg 1$ ($\xi \Gamma_0 \gg L$) [La largeur $\hbar L$ de $\Gamma(E)$ n'est pas modifiée par la multiplication par ξ^2].

En résumé, on obtient la formule exacte suivante :

$$\text{T.F. de } \langle \varphi_i | U(t) | \varphi_i \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{E + \hbar \xi^2 \frac{\Gamma(E)}{2}}{[E - E_i - \hbar \xi^2 \Delta(E)]^2 + [E + \hbar \xi^2 \frac{\Gamma(E)}{2}]^2}$$

③ Construction graphique de la T.F. de $\langle \varphi_i | U(t) | \varphi_i \rangle$ (III-12)

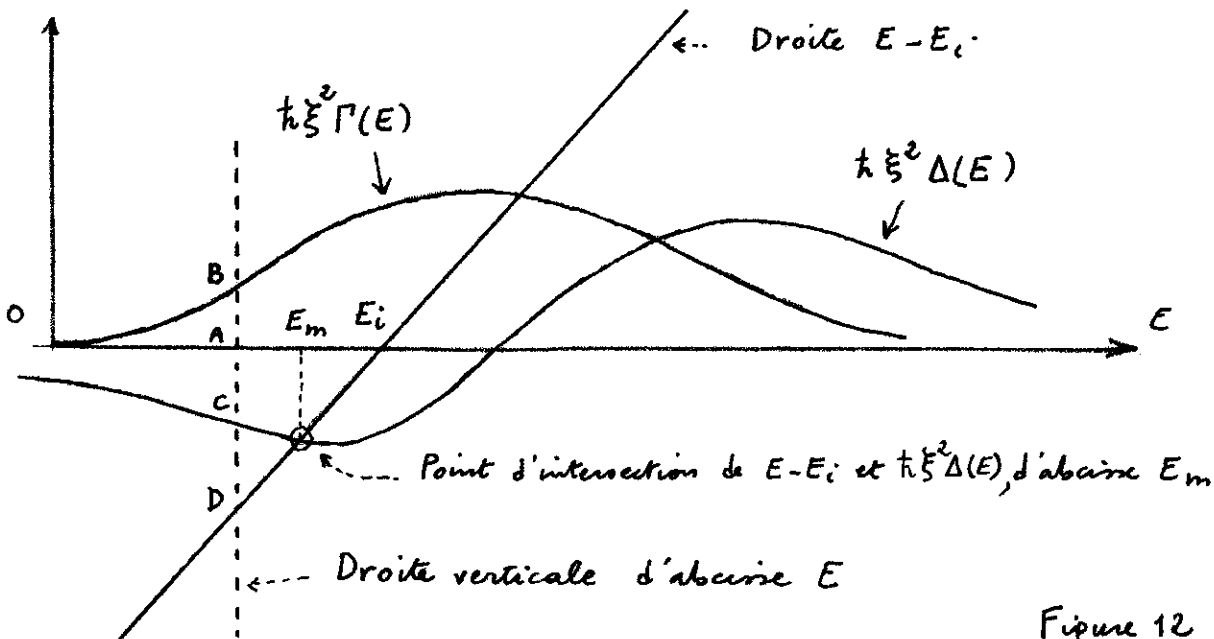


Figure 12

Soit $\tilde{b}_i(E)$ la T.F. de $\tilde{b}_i(t) = \langle \varphi_i | U(t) | \varphi_i \rangle$. D'après (III-12), on a:

$$\tilde{b}_i(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon + \frac{AB}{2}}{(D\epsilon)^2 + \left(\epsilon + \frac{AB}{2}\right)^2} \quad \text{(III-13)}$$

A, B, C, D étant les intersections de la droite verticale d'abscisse E avec respectivement l'axe des abscisses, la courbe $\hbar \xi^2 \Gamma(E)$, la droite E-E_i de pente 1 passant par E_i, la courbe $\hbar \xi^2 \Delta(E)$ [cf. fig. 12]

④ Quelques propriétés générales de la T.F. $\tilde{b}_i(E)$ de $\tilde{b}_i(t)$

(i) Zéros de $E - E_i - \hbar \xi^2 \Delta(E)$

Ce sont les abscisses E_m des points d'intersection de E-E_i avec $\hbar \xi^2 \Delta(E)$ [cf. fig 12]. Elles sont données par l'équation implicite :

$$E_m - E_i - \hbar \xi^2 \Delta(E_m) = 0 \quad \text{(III-14)}$$

- Pourquoi s'intéresser à ces zéros ?

Au voisinage de $E = E_m$, CD est très petit dans la formule (III-13) et $\tilde{b}_i(E)$ présente en général un maximum.

- Comment étudier leur évolution en fonction du couplage ?

Au lieu d'étudier, graphiquement l'intersection de E-E_i avec $\hbar \xi^2 \Delta(E)$, on peut garder $\hbar \Delta(E)$ fixe et couper $\hbar \Delta(E)$ par la droite $(E - E_i) / \xi^2$ passant par E_i et dont la pente $1/\xi^2$ est inversement proportionnelle à l'intensité du couplage (figure plus facile à faire).

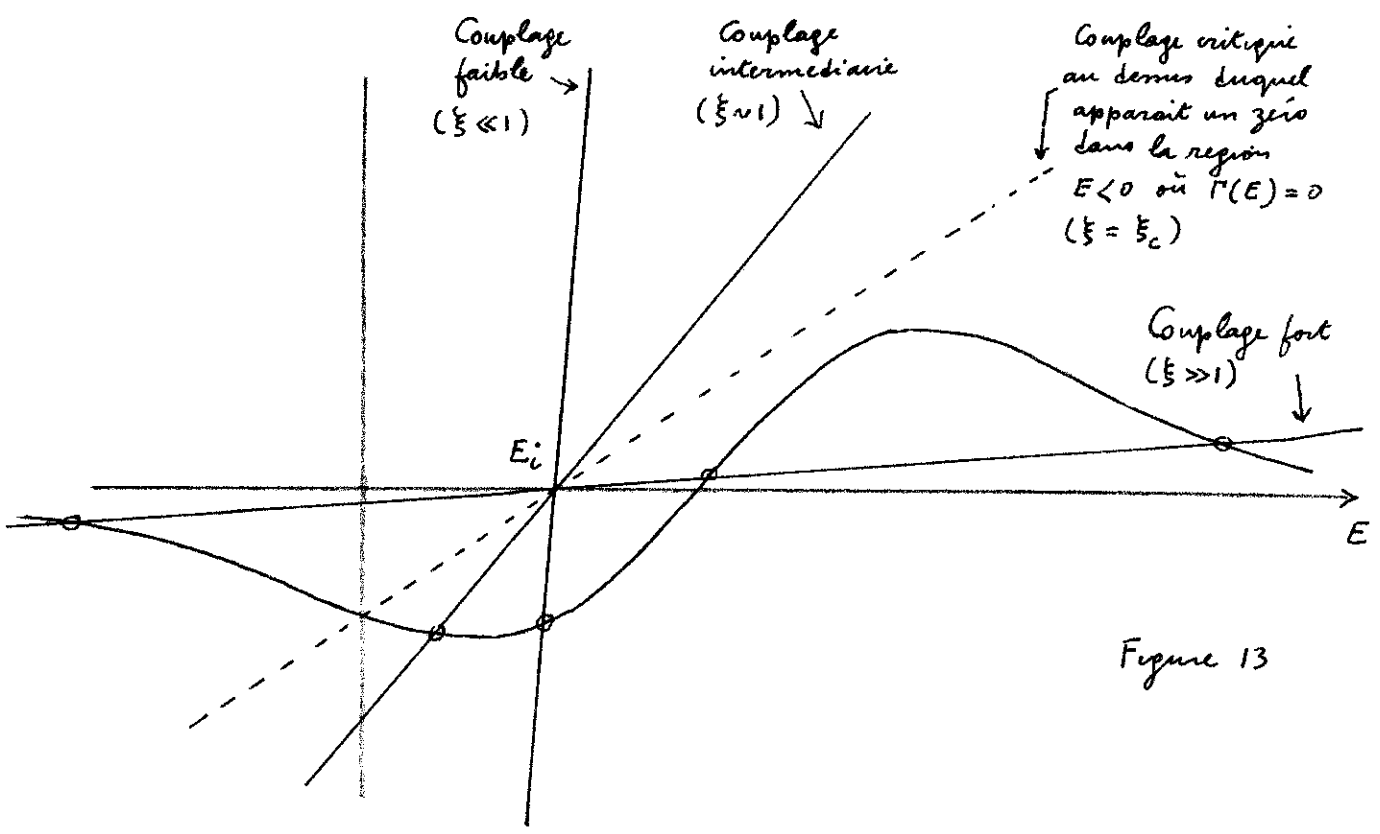


Figure 13

- Calcul approché des E_m dans certains cas limites.

Couplage faible

On voit sur la figure 13 qu'il y a un seul zéro E_m très voisin de E_i . Comme $\xi \ll 1$, on peut dans le dernier terme de (III-14), qui est très petit, remplacer E_m par E_i , ce qui donne :

$$E_m \simeq E_i + \hbar \xi^2 \Delta(E_i) \tag{III-15}$$

Couplage fort

On voit sur la figure 13 qu'il y a 3 zéros. Celui du milieu est très proche du point où $\Delta(E)$ s'annule en changeant de signe. Les 2 autres correspondent à une très grande valeur de $|E_m|$ et on peut donc utiliser la forme asymptotique (III-9) pour remplacer dans (III-14) $\Delta(E_m)$ par $\hbar \Omega_1^2 / E_m$, ce qui donne :

$$E_m - E_i - \hbar^2 \xi^2 \frac{\Omega_1^2}{E_m} = 0 \tag{III-16}$$

Comme $|E_m| \gg E_i$, on peut négliger E_i dans (III-16), et obtenir

$$E_m = \pm \xi \hbar \Omega_1 \tag{III-17}$$

- Couplage critique au delà duquel apparaît un zéro dans la région $E < 0$ ou $\Gamma(E) = 0$

On fait $E_m = 0$ dans (III-14) et on utilise l'expression (III-7) de $\Delta(E)$, ce qui donne :

$$\xi_c^2 = - \frac{E_i}{\hbar \Delta(0)} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{E_i}{\int_0^\infty dE' \frac{\Gamma(E')}{E'}} \tag{III-18}$$

(ii) Allure de la T.F. $\tilde{b}_i(E)$ au voisinage des zéros E_m .

- En remplaçant E_i par sa valeur tirée de (III-14), on peut écrire pour E voisin de E_m :

$$\begin{aligned} E - E_i - \hbar \xi^2 \Delta(E) &= E - [E_m - \hbar \xi^2 \Delta(E_m)] - \hbar \xi^2 \Delta(E) \\ &= E - E_m - \hbar \xi^2 [\Delta(E) - \Delta(E_m)] \\ &\simeq (E - E_m) [1 - \hbar \xi^2 \Delta'(E_m)] \end{aligned} \tag{III-19}$$

où $\Delta'(E_m)$ est la valeur prise en E_m par la dérivée $\Delta'(E)$ de $\Delta(E)$

En reportant (III-19) dans (III-12), on obtient pour le comportement de $\tilde{b}_i(E)$ au voisinage immédiat d'un zéro E_m de $E - E_i - \hbar \xi^2 \Delta(E)$

$$\tilde{b}_i(E) \underset{E \text{ voisin de } E_m}{\simeq} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{1 - \hbar \xi^2 \Delta'(E_m)} \frac{1}{\pi} \frac{\frac{\epsilon + \hbar \xi^2 \frac{\Gamma(E_m)}{2}}{1 - \hbar \xi^2 \Delta'(E_m)}}{(E - E_m)^2 + \left[\frac{\epsilon + \hbar \xi^2 \frac{\Gamma(E_m)}{2}}{1 - \hbar \xi^2 \Delta'(E_m)} \right]^2} \tag{III-20}$$

- Cas où $E_m > 0$

On a alors $\Gamma(E_m) \neq 0$ et la limite $E \rightarrow 0$ dans (III-20) se fait sans difficultés

On voit que pour E voisin de $E_m > 0$, $\tilde{b}_i(E)$ se comporte comme une lorentzienne de

$\frac{1}{2}$ largeur :

$$\frac{\hbar \xi^2 \Gamma(E_m)}{2 [1 - \hbar \xi^2 \Delta'(E_m)]} \tag{III-21}$$

poids

$$\frac{1}{1 - \hbar \xi^2 \Delta'(E_m)} \tag{III-22}$$

- Cas où $E_m < 0$

On a alors $\Gamma(E_m) = 0$, et la limite $E \rightarrow 0$ donne

$$\tilde{b}_i(E) \underset{E \text{ voisin de } E_m}{\sim} \frac{1}{1 - \hbar \xi^2 \Delta'(E_m)} \delta(E - E_m) \tag{III-23}$$

Dans la région $E < 0$, on a donc $\tilde{b}_i(E) = 0$ sauf si $\xi > \xi_c$ auquel cas on a une fonction δ centrée au zéro E_m d'abscisse < 0

(iii) Sens physique des zéros E_m de $E - E_i - \hbar \xi^2 \Delta(E)$

$\xi < \xi_c$

On peut exprimer $G_i(E \pm i\epsilon)$ donné par (III-8) en fonction de longueurs simples apparaissant sur la figure 12

$$G_i(E \pm i\epsilon) = \frac{1}{CD \pm i\epsilon \pm i \frac{AB}{2}} \tag{III-24}$$

Pour $E > 0$, AB ne s'annule jamais. Pour $E < 0$, comme $\xi < \xi_c$, CD ne s'annule jamais. $G_i(E \pm i\epsilon)$ ne tend vers l'infini en aucun point de l'axe réel

D'après la discussion sur les propriétés analytiques de $G(z)$ [cf § E3], $G_i(z)$ n'a aucun pôle sur l'axe réel, alors que $G_{0i}(z) = 1/(z - E_i)$ a un pôle en E_i . Donc, alors que H_0 a un état discret, $H = H_0 + V$ n'a plus d'état discret

On voit cependant sur (III-24) que $G_i(E \pm i\epsilon)$ varie vite au voisinage des zéros E_m de CD . En étudiant le prolongement analytique de $G_i(z)$ dans le 2ⁱⁿ feuillet de Riemann, on voit qu'il y a des pôles dans ce 2ⁱⁿ feuillet, dont l'abscisse est E_m . Le pôle qui était sur l'axe réel en l'absence de couplage est donc poussé dans le 2ⁱⁿ feuillet de Riemann sous l'effet du couplage (souvenir de l'état discret de H_0).

$\xi > \xi_c$

Dans la région $E < 0$ où $AB = 0$, CD s'annule pour $E = E_m < 0$.

On voit alors que $G_i(E \pm i\epsilon) \rightarrow \infty$ lorsque $E \rightarrow E_m < 0$. Le couplage est donc suffisamment fort pour faire apparaître un état discret de H en dessous de la limite inférieure $E = 0$ du continu.

⑤ Etude de l'évolution des phénomènes en fonction de l'intensité du couplage

(i) Couplage faible ($\xi \ll 1$)

Allure de $\tilde{b}_i(E)$. D'après la fig 13, il y a un seul zéro E_m très voisin de E_i donc un seul maximum de $\tilde{b}_i(E)$

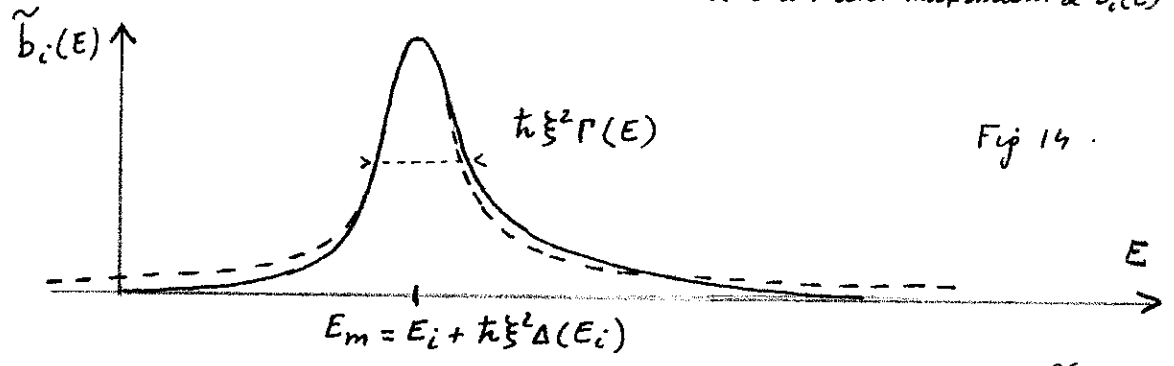


Fig 14 .

Sur la fig 14 sont dessinées : en traits pleins, la courbe $\tilde{b}_i(E)$, en traits tirés la forme limite (III-20) valable au voisinage de $E = E_m$, à savoir une lorentzienne de largeur totale à mi-hauteur $h\xi^2\Gamma(E_m)$ [cf III-21 où l'on néglige le terme en ξ^2 du dénominateur puisque $\xi \ll 1$] et de poids ≈ 1 [voir III-22] .

Comme $h\xi^2\Gamma(E) \ll hL$ (où L est la largeur de $\Gamma(E)$ et $\Delta(E)$), la courbe en traits pleins reste très proche de la lorentzienne sur un grand intervalle autour de E_m

Elle ne s'écarte de la lorentzienne que pour $E \gtrsim hL$ (sur la courbe de la fig 12, on voit que $BA \rightarrow 0$ quand $E \rightarrow \infty$) et pour E tendant vers 0 ($BA \rightarrow 0$ quand $E \rightarrow 0$ et $BA = 0$ pour $E < 0$)

$\tilde{b}_i(E)$ ressemble donc à une lorentzienne centrée en $E_i + h\xi^2\Delta(E_i)$ de largeur $h\xi^2\Gamma(E)$ et dont les "pieds" tendraient vers 0 beaucoup plus vite que ceux d'une vraie lorentzienne .

Conséquences sur $\tilde{b}_i(t)$

$\tilde{b}_i(t)$ est essentiellement une exponentielle amortie (résultat de Weisskopf - Wigner), légèrement modifiée au temps très courts $t \ll \frac{1}{L}$ (par suite du fait que $\tilde{b}_i(E)$ tend plus vite vers 0 qu'une vraie lorentzienne pour $E \gtrsim hL$) et aux temps très longs par suite du fait que $\tilde{b}_i(E)$ tend vers 0 plus vite qu'une vraie lorentzienne quand $E \rightarrow 0$

On retrouve ainsi très simplement les conclusions obtenues dans les paragraphes précédents

Etude quantitative du comportement aux temps très longs

Considérons la fonction de variable complexe $\tilde{b}_i(z)$ obtenue en remplaçant E par z dans $\tilde{b}_i(E)$

$$\tilde{b}_i(z) = \frac{1}{\pi} \frac{h\xi^2\Gamma(z)/z}{[z - E_i - h\xi^2\Delta(z)]^2 + [h\xi^2\Gamma(z)/z]^2} \tag{III-25}$$

Intégrons $\frac{1}{\pi} \tilde{b}_i(z) e^{-izt/k}$ le long de long du contour de la figure 8

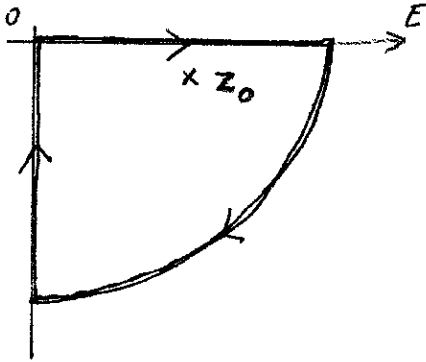


Fig 8

L'intégrale le long du $1/4$ de cercle tend vers 0 quand $|z| \rightarrow \infty$, car $|\tilde{b}_i(z)| \sim \frac{1}{|z|^2}$ quand $|z| \rightarrow 0$
 L'intégrale le long de l'axe réel n'est autre que $\tilde{b}_i(t)$ d'après (III-11)
 Comme $\xi \ll 1$, on voit sur (III-25) que $\tilde{b}_i(z)$ a un pôle en

$$z_0 \sim E_i + k \xi^2 \Delta(E_i) - i k \xi^2 \frac{\Gamma(E_i)}{2} \quad (\text{III-26})$$

En appliquant le théorème des résidus, on trouve alors aisément que :

$$\tilde{b}_i(t) = K e^{-iz_0 t/k} + \text{Intégrale le long de l'axe imaginaire} \quad (\text{III-27})$$

où dans le 1^{er} terme (qui représente le résidu du pôle z_0), K est très voisin de 1.

Un calcul identique à celui du § D2 montre que l'intégrale le long de l'axe imaginaire est pour t très grand en $1/t^{n+1}$. Bien que très petit en valeur absolue, ce terme finit par l'emporter sur l'exponentielle amortie aux temps très longs.

(ii) Couplage intermédiaire ($\xi \sim 1$)

Allure de $\tilde{b}_i(E)$

Le maximum de la figure 14 se déplace vers la gauche. La partie droite de $\tilde{b}_i(E)$ augmente et un ou 2 maxima nouveaux peuvent apparaître quand la droite de la fig. 13 coupe la partie positive de $\Delta(E)$.

Pour $\xi > \xi_c$, il apparaît en plus une fonction δ dans la région $E < 0$ (le maximum de la fig. 14 a disparu).

Conséquences sur $\tilde{b}_i(t)$

Comportement ni exponentiel amorti, ni oscillant pour $\xi < \xi_c$. Il faut faire un calcul numérique de T.F.

Pour $\xi > \xi_c$, il apparaît en plus un terme oscillant pour non amorti.

(iii) Couplage fort ($\xi \gg 1$)

Allure de $\tilde{b}_i(E)$ (D'après la fig. 13, il y a 3 maxima).

- Au voisinage du zéro de $\Delta(E)$ (dans un intervalle de largeur $\sim kL$).

Comme $\xi \gg 1$, on peut négliger dans (III-12) $E - E_i$ au dénominateur et on obtient :

$$\tilde{b}_i(E) \sim \frac{1}{\xi^2} \frac{1}{\pi k} \frac{\Gamma(E)/2}{[\Delta(E)]^2 + [\Gamma(E)/2]^2} \quad (\text{III-28})$$

Courbe de largeur $\sim kL$ et dont le poids tend vers 0 comme $1/\xi^2$

- Au voisinage de $E_m = \pm \xi \hbar \Omega_1$ [voir III-17]
 Comme $|E_m|$ est très grand, on peut utiliser la forme asymptotique (III-9) pour calculer $\Delta'(E_m)$

$$\Delta'(E_m) = - \frac{\hbar \Omega_1^2}{E_m^2} = - \frac{\hbar \Omega_1^2}{\hbar^2 \xi^2 \Omega_1^2} = - \frac{1}{\hbar \xi^2} \quad (\text{III-29})$$

on a par suite :

$$1 - \hbar \xi^2 \Delta'(E_m) = 2 \quad (\text{III-30})$$

On déduit alors de (III-23) et (III-30) que :

$$\tilde{b}_i(E) \underset{\text{E voisin de } -\xi \hbar \Omega_1}{\sim} \frac{1}{2} \delta(E + \xi \hbar \Omega_1) \quad (\text{III-31})$$

De même, on obtient à partir de (III-21), (III-22) et (III-30) :

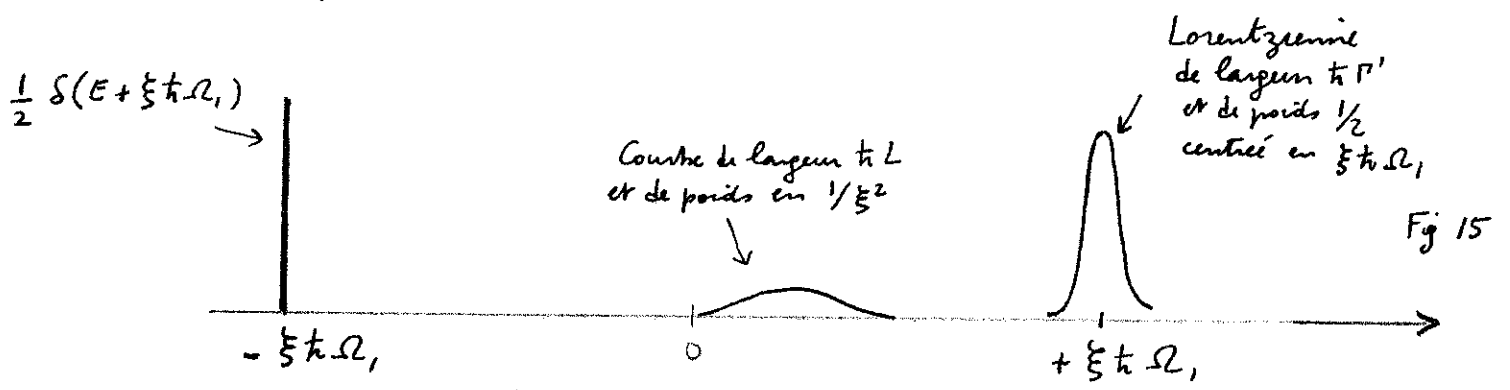
$$\tilde{b}_i(E) \underset{\text{E voisin de } +\xi \hbar \Omega_1}{\sim} \frac{1}{2} \frac{1}{\pi} \frac{\hbar \Gamma'/2}{(E - \xi \hbar \Omega_1)^2 + (\hbar \Gamma'/2)^2} \quad (\text{III-32})$$

avec
$$\Gamma' = \frac{\xi^2}{2} \Gamma(\xi \hbar \Omega_1) \quad (\text{III-33})$$

(III-32) représente une courbe de Lorentz centrée en $\xi \hbar \Omega_1$, de largeur à mi-hauteur $\hbar \Gamma'$ et de poids $1/2$.

Si $\Gamma(E) \rightarrow 0$ plus vite que $1/E^2$ on voit sur (III-33) que $\Gamma' \rightarrow 0$ quand $\xi \rightarrow \infty$.

- En résumé, on obtient pour $\tilde{b}_i(E)$ le comportement représenté sur la figure 15



Conséquences sur $\tilde{b}_i(t)$ (Nous supposons $\Gamma' \ll L$)

- Pour des temps $\ll 1/\Gamma'$, la largeur finie de la Lorentzienne centrée en $\xi \hbar \Omega_1$ ne se fait pas sentir. Combinée avec la fonction δ en $-\xi \hbar \Omega_1$, cette Lorentzienne donne une contribution en $\cos \xi \Omega_1 t$ à laquelle il faut ajouter la T.F. de la courbe de largeur $\hbar L$ qui a une poids très faible et s'amortit complètement au bout d'un temps de l'ordre de $1/L$.

On n'obtient donc une "précession de Rabi" non déformée que pour $\frac{1}{L} \ll t \ll \frac{1}{\Gamma'}$

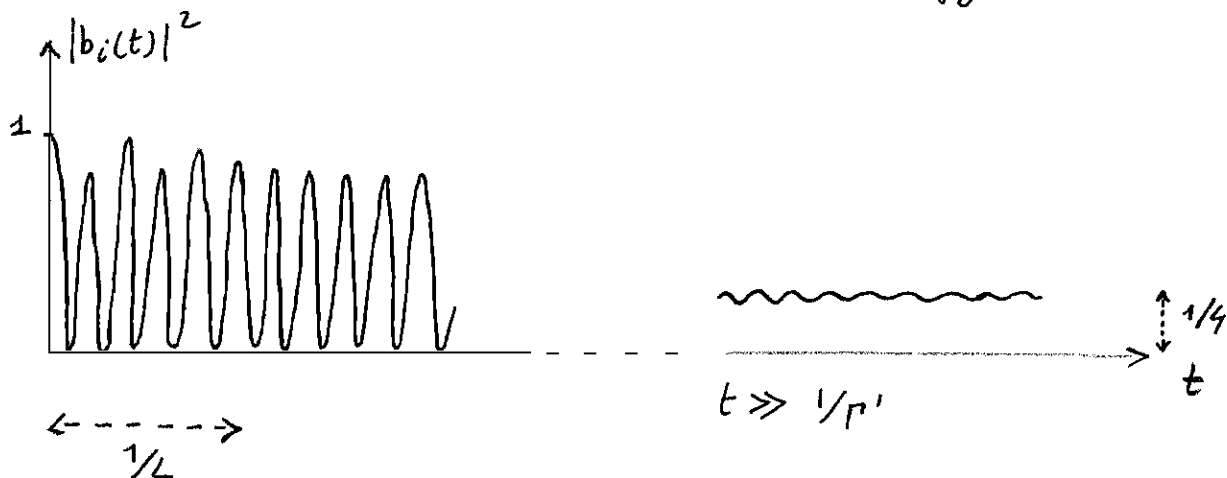
- La contribution de la Lorentzienne centrée en $\xi \mp \Omega$, s'amortit avec une constante de temps $1/\rho'$.

Pour $t \gg 1/\rho'$, cette Lorentzienne ne contribue plus (de même bien sûr que la courbe des milieux), et il ne reste plus que la contribution de $\frac{1}{2} \delta(\xi \mp \Omega, +E)$, de sorte que

$$b_i(t) \underset{t \gg 1/\rho'}{\sim} \frac{1}{2} e^{i\xi\Omega, t} \quad (\text{III-39})$$

- L'allure des variations avec t de $|\tilde{b}_i(t)|^2$ est représentée sur la figure 16

Fig 16



Après une 1^{ère} phase qui dure un temps de l'ordre de $\frac{1}{2}$ et où la précession de Rabi est légèrement perturbée (à cause de la T.F. de la partie centrale de la figure 15), la précession de Rabi devient régulière

Elle s'amortit ensuite lentement avec une constante de temps $1/\rho'$ et $|\tilde{b}_i(t)|$ tend vers $1/4$ quand $t \rightarrow \infty$.

Références

(6) Paul AVAN - Thèse de 3^{ème} cycle Paris 1975

① Démonstration du fait que le prolongement analytique de $G_i(z)$ a un pôle dans le 2^{ème} feuillet de Riemann.

- On se limite au cas d'un couplage faible. D'après (III-8) :

$$\left\{ \begin{array}{l} z = E + i\epsilon \\ z = E - i\epsilon \end{array} \right. \quad G_i(z) = \frac{1}{z - E_i - \frac{\hbar}{2}\Delta(E) + i\frac{\hbar}{2}\frac{\Gamma(E)}{2}} \quad (IV-1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} z = E + i\epsilon \\ z = E - i\epsilon \end{array} \right. \quad G_i(z) = \frac{1}{z - E_i - \frac{\hbar}{2}\Delta(E) - i\frac{\hbar}{2}\frac{\Gamma(E)}{2}} \quad (IV-2)$$

- Dans (IV-1) $\Gamma(E) > 0$ de même que $\text{Im} z$; la partie imaginaire du dénominateur de (IV-1) ne s'annule jamais. Il en est de même pour (IV-2) où les 2 parties imaginaires sont < 0 . On retrouve bien que $G_i(z)$ n'a pas de pôle hors de l'axe réel dans le 1^{er} feuillet de Riemann.

- Au voisinage de $z = E_i$, $z - E_i$ peut s'annuler dans (IV-1) et (IV-2) alors que $\Delta(E)$ et $\Gamma(E)$ varient lentement (largeur L de $\Gamma(E) \gg \Gamma(E_i)$)
On peut donc, au voisinage de $z = E_i$, remplacer dans les 2 fonctions $\Delta(E)$ et $\Gamma(E)$ de (IV-1) et (IV-2) E par E_i , ce qui donne, au dessus de l'axe réel par exemple :

$$z \text{ voisin de } E_i \text{ avec } \text{Im} z > 0 \quad G_i(z) \approx \frac{1}{z - E_i - \frac{\hbar}{2}\Delta(E_i) + i\frac{\hbar}{2}\frac{\Gamma(E_i)}{2}} \quad (IV-3)$$

- Prolongeons $G_i(z)$ dans le 2^{ème} feuillet de Riemann, en traversant la coupure sur l'axe réel de haut en bas.

La fonction prolongée de (IV-1), que nous noterons $\tilde{G}_i(z)$, se déduit par continuité de (IV-1) et ressemble donc au prolongement de (IV-3). On peut donc écrire

$$z \text{ voisin de } E_i \text{ avec } \text{Im} z < 0 \quad \tilde{G}_i(z) \approx \frac{1}{z - E_i - \frac{\hbar}{2}\Delta(E_i) + i\frac{\hbar}{2}\frac{\Gamma(E_i)}{2}} \quad (IV-4)$$

Notons que la fonction prolongée (IV-4) ne ressemble pas en dessous de l'axe réel à la détermination initiale $G_i(z)$ (dans le 1^{er} feuillet de Riemann) et qu'on est donné par IV-2.

- Comme $\text{Im} z < 0$ et $\Gamma(E_i) > 0$ dans (IV-4), le dénominateur de la fonction prolongée peut maintenant s'annuler. $\tilde{G}_i(z)$ a donc un pôle dans le 2^{ème} feuillet de Riemann dont la position est approximativement donnée par

$$z_0 \approx E_i + \frac{\hbar}{2}\Delta(E_i) - i\frac{\hbar}{2}\frac{\Gamma(E_i)}{2} \quad (IV-5)$$

L'abscisse et l'ordonnée de ce pôle donnent respectivement l'énergie et la largeur de l'état instable.

- C'est la présence de ce pôle dans le 2^{ème} feuillet de Riemann qui fait que la détermination initiale (IV-1) de $G_i(z)$ varie très vite au voisinage de $E_i + \frac{\hbar}{2}\Delta(E_i)$

② Autre contour d'intégration possible.

Au lieu de faire comme plus haut et de garder C_+ et C_- , afin de faire apparaître $G_i(E-i\epsilon) - G_i(E+i\epsilon)$ (cf III-10), on peut ne garder que C_+ , et par suite $G_i(E+i\epsilon)$, puisque C_- donne une contribution nulle pour $t > 0$

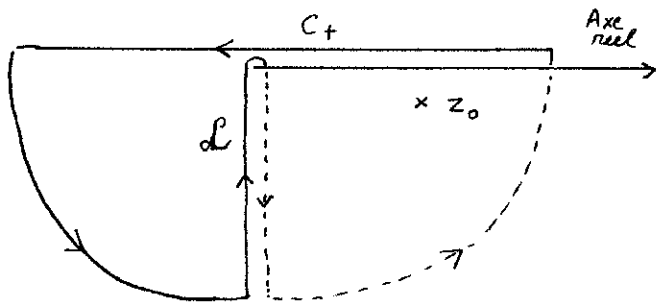


Fig. 17

Pour fermer le contour par continuité, il faut nécessairement passer dans le 2^{ème} feuillet de Riemann entourant le pôle z_0 qui s'y trouve, puis revenir dans le 1^{er} feuillet au moyen du lacet L (voir figure 17).

La contribution des 1/4 de cercle est nulle (à cause de $e^{-izt/t}$), celle du pôle donne la décroissance exponentielle, celle du lacet la décroissance en $1/t^{n+1}$.

③ Une approximation très souvent faite.

Comme $\Delta(E)$ et $\Gamma(E)$ sont très petits, on n'en tient compte (le long de C_+) de manière précise qu'au voisinage de $z = E_i$ où $z - E_i$ s'annule et où $\Delta(E)$ et $\Gamma(E)$ peuvent alors jouer un rôle important.

On remplace donc dans (IV-1) $\Delta(E)$ et $\Gamma(E)$ par $\Delta(E_i)$ et $\Gamma(E_i)$ non seulement au voisinage de $E = E_i$ comme en (IV-3) mais pour tout E . L'argument est que si $|E - E_i| \gg \hbar \Gamma(E_i)$, $\hbar \Delta(E)$ et $\hbar \Gamma(E)$ sont négligeables devant $E - E_i$ et le fait de les remplacer par $\hbar \Delta(E_i)$ et $\hbar \Gamma(E_i)/2$ n'introduit pas alors une grosse erreur.

(Dans ce point de vue, on ne garde ainsi que C_+ pour $t \geq 0$)

On oublie donc $G_i(z)$ et on introduit une nouvelle fonction de la variable complexe z :

$$\hat{G}_i(z) = \frac{1}{z - E_i - \hbar \Delta(E_i) + i \frac{\hbar}{2} \Gamma(E_i)} \quad (IV-6)$$

qui a des propriétés analytiques complètement différentes de celles de $G_i(z)$ mais qui est très proche de $G_i(z)$ le long de C_+ .

$\hat{G}_i(z)$ n'a qu'un pôle en $z = z_0$ (où z_0 est donné par IV-5) et n'a plus de coupure. L'intégration le long de C_+ fermée par un 1/2 cercle dans le demi-plan inférieur ne donne que le terme exponentiel. Une telle approximation fait donc perdre toutes les corrections aux temps très courts et très longs.

④ lien avec la théorie des perturbations.

$G_i(z)$ a été calculé sans approximations à partir de $G = G_0 + G_0 V G_0 + G_0 V G_0 V G_0$. On aurait pu aussi calculer $G_i(z)$ perturbativement à partir du développement :

$$G = G_0 + G_0 V G_0 + G_0 V G_0 V G_0 + G_0 V G_0 V G_0 V G_0 + \dots \quad (IV-7)$$

L'expression (III-4) rassemble donc la série des perturbations. Si l'on représente par un double trait le propagateur perturbé G , par un trait le propagateur non perturbé G_0 , par un rond V , on peut écrire (IV-7) sous la forme (après avoir pris l'élément de matrice entre $\langle \varphi_i |$ et $|\varphi_i \rangle$)

$$i \parallel = i | + \begin{array}{c} i \\ | \\ \alpha \\ | \\ i \end{array} + \begin{array}{c} i \\ | \\ \alpha \\ | \\ i \\ | \\ \alpha \\ | \\ i \end{array} + \dots \quad (IV-8)$$

Pour l'émission spontanée : $|\varphi_i \rangle = |e, 0\rangle$ $|\alpha \rangle = |f, \vec{k}, \vec{E}\rangle$ et (IV-8) devient (en représentant les photons par des traits ondulés) :

$$e \parallel = e | + \begin{array}{c} e \\ | \\ f \\ \text{---} \vec{k}, \vec{E} \\ e \end{array} + \begin{array}{c} e \\ | \\ f \\ \text{---} \vec{k}', \vec{E}' \\ e \\ | \\ f \\ \text{---} \vec{k}, \vec{E} \\ e \end{array} + \dots \quad (IV-9)$$

Si l'on fait la même approximation qu'en (IV-6), c-à-d si l'on remplace dans tous les propagateurs des états α de (IV-8) z par E_i , le développement (IV-8) donne après intégration sur le contour C_+ (et en posant $\Gamma_i = \Gamma(E_i)$, $\Delta_i = \Delta(E_i)$)

$$1 - \left(\frac{\Gamma_i}{2} + i\Delta_i\right)t + (-1)^2 \left(\frac{\Gamma_i}{2} + i\Delta_i\right)^2 \frac{t^2}{2!} + \dots = e^{-\left(\frac{\Gamma_i}{2} + i\Delta_i\right)t} \quad (IV-10)$$

Chacun des termes de (IV-8) conduit à un terme du développement en série de l'exponentielle décroissante.

Pour obtenir un comportement exponentiel, il faut donc resommer toute la série des perturbations. Sinon on aurait un comportement polynomial.

D'où l'intérêt d'essayer d'obtenir des formules exactes du type de (III-4) et de faire éventuellement des approximations seulement au stade final [par exemple celle qui consiste à remplacer la quantité $\int d\alpha' \frac{|V(\alpha')|^2}{z - E'}$ de (III-4) par $t\Delta(E_i) + i\Gamma(E_i)/2$ ce qui conduit à (IV-6)].

① Introduction

H_0 a un état discret et un continu. H n'a plus (en couplage faible) qu'un continu.

Lorsqu'un processus de diffusion peut être associé au continu de H et à celui de H_0 , nous allons voir que l'amplitude de diffusion présente, en fonction de l'énergie, une variation résonnante au voisinage de l'énergie E_i de l'état discret de H_0 . Cette variation résonnante constitue en quelque sorte un souvenir de l'état discret de H_0 qui disparaît lorsqu'on introduit le couplage.

Dans ce §, nous calculons l'amplitude de diffusion résonnante d'un photon par un atome. Nous prenons $|\varphi_i\rangle = |e, 0\rangle$, $|\alpha\rangle = |f, \vec{k}, \vec{E}\rangle$ et ignorons tous les autres états propres de H_0 . Nous montrons que l'amplitude de diffusion est très importante lorsque l'énergie $E = \hbar\omega = \hbar\omega'$ du photon incident est voisine de l'énergie $E_e - E_f$ de la transition atomique. Nous complétons ainsi l'étude de la diffusion non-résonnante présentée l'an dernier.

La connaissance de l'amplitude de diffusion pour chaque valeur de l'énergie permet également d'étudier la diffusion d'un paquet d'ondes au voisinage de la résonance. Une telle étude permet de préciser l'influence de la préparation de l'état initial sur l'observation des décroissances exponentielle et non-exponentielle calculées dans les §§ précédents.

Enfin un certain nombre d'effets importants de Physique Atomique liés à la diffusion résonnante sont passés en revue (spectre de la lumière de fluorescence pour une excitation monochromatique ou en raie large, battements quantiques).

② Calcul de $\langle f, \vec{k}', \vec{E}' | G(z) | f, \vec{k}, \vec{E} \rangle$

- On part des 2 relations équivalentes.

$$\left\{ \begin{array}{l} G(z) = G_0(z) + G_0(z) V G(z) \end{array} \right. \quad (V-1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} G(z) = G_0(z) + G(z) V G_0(z) \end{array} \right. \quad (V-2)$$

(V-1) a déjà été établi en (II-35) et (V-2) se démontre de la même manière en remplaçant l'identité (II-34) par $\frac{1}{A} = \frac{1}{B} + \frac{1}{A} \frac{(B-A)}{B}$.

- De (V-1) et (V-2) on déduit :

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z) V G_0(z) + G_0(z) V G(z) V G_0(z) \quad (V-3)$$

- Prenons l'élément de matrice de (V-3) entre $\langle f, \vec{k}', \vec{E}' |$ et $| f, \vec{k}, \vec{E} \rangle$.

En utilisant l'hypothèse simplificatrice sur V (V n'a d'éléments de matrice non nuls qu'entre $|e, 0\rangle$ et $|f, \vec{k}, \vec{E}\rangle$) et en prenant l'énergie de l'état fondamental atomique comme zéro d'énergie (l'énergie de l'état $|e, 0\rangle$ est E_e , celle de l'état $|f, \vec{k}, \vec{E}\rangle$ est $E = \hbar\omega = \hbar\omega'$), on obtient aisément à partir de (V-3) :

$$\langle f, \vec{k}' E' | G(z) | f, \vec{k} E \rangle = \frac{\delta_{\vec{k}' \vec{k}} \delta_{E' E}}{z - E} + A_{\vec{k}' E', \vec{k} E} \frac{1}{z - E'} \langle e, 0 | G(z) | e, 0 \rangle \frac{1}{z - E} \quad (V-4)$$

avec

$$A_{\vec{k}' E', \vec{k} E} = \langle f, \vec{k}' E' | V | e, 0 \rangle \langle e, 0 | V | f, \vec{k} E \rangle \quad (V-5)$$

- En particulier, nous avons besoin de la valeur de (V-4) le long du contour C_+ . En utilisant l'expression (III-8) de $G_i(\bar{E} + i\epsilon) = \langle e, 0 | G(\bar{E} + i\epsilon) | e, 0 \rangle$, on obtient :

$$\langle f, \vec{k}' E' | G(\bar{E} + i\epsilon) | f, \vec{k} E \rangle = \frac{\delta_{\vec{k}' \vec{k}} \delta_{E' E}}{\bar{E} + i\epsilon - E} + \frac{A_{\vec{k}' E', \vec{k} E}}{(\bar{E} + i\epsilon - E) \left(\bar{E} + i\epsilon - E - \frac{\hbar \Delta(\bar{E})}{2} + i\hbar \frac{\Gamma(\bar{E})}{2} \right) (\bar{E} + i\epsilon - E')} \quad (V-6)$$

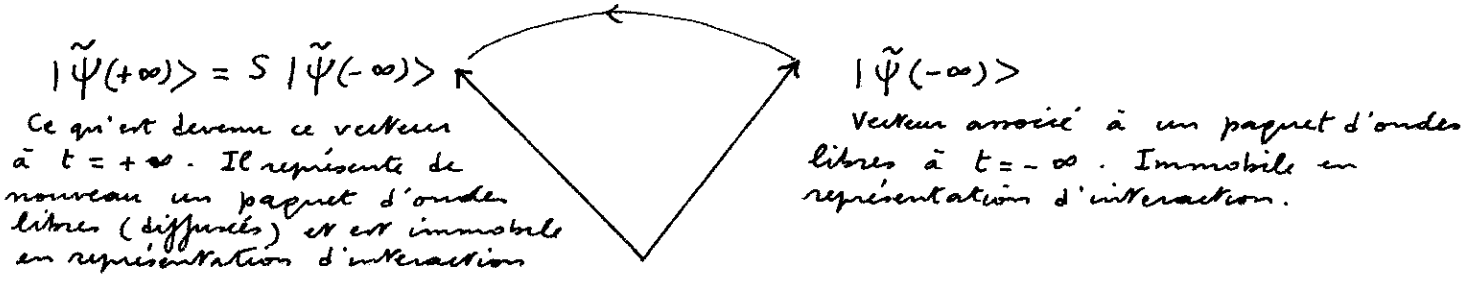
③ Calcul de l'amplitude de diffusion

- Matrice S

S est la limite pour $t \rightarrow \infty$ de l'opérateur d'évolution $\tilde{U}(\frac{t}{2}, -\frac{t}{2})$ en représentation d'interaction :

$$S = \lim_{t \rightarrow \infty} \tilde{U}(\frac{t}{2}, -\frac{t}{2}) \quad (V-7)$$

$$\tilde{U}(\frac{t}{2}, -\frac{t}{2}) = e^{iH_0 t/2\hbar} U(\frac{t}{2}, -\frac{t}{2}) e^{iH_0 t/2\hbar} \quad (V-8)$$



- Amplitude de diffusion

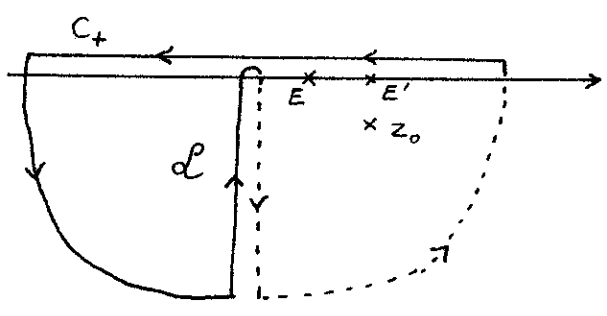
$$\langle f, \vec{k}' E' | S | f, \vec{k} E \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} e^{i(E+E')t/2\hbar} \langle f, \vec{k}' E' | U(\frac{t}{2}, -\frac{t}{2}) | f, \vec{k} E \rangle \quad (V-9)$$

Calculons tout d'abord l'élément de matrice de $U(\frac{t}{2}, -\frac{t}{2}) = U(t)$

$$\langle f, \vec{k}' E' | U(t) | f, \vec{k} E \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\pi i} \int_{C_+} e^{-izt/\hbar} \langle f, \vec{k}' E' | G(z) | f, \vec{k} E \rangle dz \quad (V-10)$$

en utilisant l'expression (V-6) de l'élément de matrice de $G(z)$.

Il faut fermer le contour de la manière suivante (cf remarque 2, page IV-2)



Le 1^{er} terme de V-6 donne un pôle sur l'axe réel, d'abscisse E.
 Le 2^{ème} terme de V-6 donne 2 pôles sur l'axe réel, d'abscisses E et E', et un pôle dans le 2^{ème} feuillet de Riemann en $z = z_0 \approx E_e + \hbar \Delta(E_e) - i\hbar \frac{\Gamma(E_e)}{2}$
 Comme nous serons amenés à prendre la limite $t \rightarrow \infty$ dans (V-9), on peut négliger la contribution du pôle z_0 qui décroît exponentiellement, de même que celle du cercle \mathcal{C} qui décroît en $1/t^{n+1}$

En ne gardant que la contribution des poles sur l'axe réel (contribution qui ne tend pas vers 0 quand $t \rightarrow \infty$) et en multipliant par $e^{i(E+E')t/2\hbar}$ pour passer de l'élément de matrice de U à celui de S , on obtient :

$$\langle f, \vec{k}' \vec{E}' | S | f, \vec{k} \vec{E} \rangle = \delta_{\vec{k} \vec{k}'} \delta_{E E'} + A_{\vec{k}' \vec{E}', \vec{k} \vec{E}} \times$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left[\frac{e^{-i(E-E')t/2\hbar}}{E-E'} \frac{1}{E-E_c - \hbar \Delta(E) + i\hbar \frac{\Gamma(E)}{2}} + \frac{e^{i(E-E')t/2\hbar}}{E'-E} \frac{1}{E'-E_c - \hbar \Delta(E') + i\hbar \frac{\Gamma(E')}{2}} \right] \quad (V-11)$$

Ecrivons $e^{\mp i(E-E')t/2\hbar}$ sous la forme $\cos \frac{(E-E')t}{2\hbar} \mp i \sin \frac{(E-E')t}{2\hbar}$ et regroupons les termes en cos et sin du crochet de V-11. On obtient :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} - \frac{\cos (E-E')t/2\hbar \left[1 - \hbar \frac{\Delta(E) - \Delta(E') + i \frac{\Gamma(E)}{2} + i \frac{\Gamma(E')}{2}}{EE'} \right]}{\left[E-E_c - \hbar \Delta(E) + i\hbar \frac{\Gamma(E)}{2} \right] \left[E'-E_c - \hbar \Delta(E') + i\hbar \frac{\Gamma(E')}{2} \right]} = 0 \quad (V-12)$$

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} -i \frac{\sin (E-E')t/2\hbar}{E-E'} & \left(\frac{1}{E-E_c - \hbar \Delta(E) + i\hbar \frac{\Gamma(E)}{2}} + \frac{1}{E'-E_c - \hbar \Delta(E') + i\hbar \frac{\Gamma(E')}{2}} \right) \\ & = -2\pi i \delta(E-E') \frac{1}{E-E_c - \hbar \Delta(E) + i\hbar \frac{\Gamma(E)}{2}} \quad (V-13) \end{aligned}$$

En reportant (V-12) et (V-13) dans (V-11), on obtient finalement compte tenu de (V-5) :

$$\langle f, \vec{k}' \vec{E}' | S | f, \vec{k} \vec{E} \rangle = \delta_{\vec{k} \vec{k}'} \delta_{E E'} - 2\pi i \delta(E-E') \frac{\langle f, \vec{k}' \vec{E}' | V | e, 0 \rangle \langle e, 0 | V | f, \vec{k} \vec{E} \rangle}{E-E_c - \hbar \Delta(E) + i\hbar \frac{\Gamma(E)}{2}} \quad (V-14)$$

④ Section efficace de diffusion

Le calcul de la section efficace différentielle de diffusion à partir de l'amplitude (V-14) est en tous points identique à celui exposé à la fin de la dernière leçon à propos de la diffusion non-résonnante (cf § B, page VIII-3). Nous ne le reprendrons donc pas ici. Dans une direction autre que la direction avant, $d\sigma/d\Omega$ est proportionnel au carré du module du coefficient de $-2\pi i \delta(E-E')$ dans V-14

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \frac{|\langle f, \vec{k}' \vec{E}' | V | e, 0 \rangle \langle e, 0 | V | f, \vec{k} \vec{E} \rangle|^2}{\left[E-E_c - \hbar \Delta(E) \right]^2 + \frac{\hbar^2 (\Gamma(E))^2}{4}} \quad (V-15)$$

En fonction de E , $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ présente une variation résonnante très importante au voisinage de $E_c + \hbar \Delta_c$ [on pose $\Delta_c = \Delta(E_c)$], la courbe ayant au voisinage de cette énergie l'allure d'une courbe de Lorentz de largeur $\hbar \Gamma(E_c)/2 = \hbar \Gamma_c/2$ (cf figure 1).

Lorsqu'on tient compte de manière précise de tous les facteurs apparaissant dans (V-15), on trouve que le maximum de la section efficace est de l'ordre de λ_c^2 , où λ_c est la longueur d'onde de la

Transition atomique. Rappelons que les sections efficaces non-résonnantes étudiées l'an dernier étaient de l'ordre de r_0^2 , où $r_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2} \approx 10^{-13}$ cm est le rayon classique de l'électron. L'effet de résonance est donc spectaculaire puisqu'il augmente la section efficace par un facteur de l'ordre de $(\Delta e/r_0)^2 \approx 10^{16}$

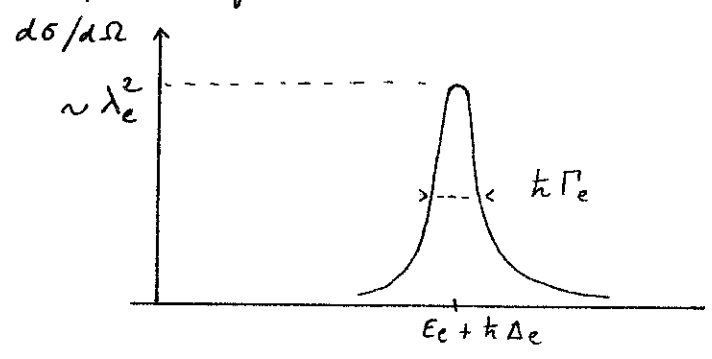


Fig 1.

⑤ Application: Spectre de la lumière de fluorescence aux faibles intensités

- Excitation monochromatique

A cause de la fonction $\delta(E-E')$ de (V-14), la lumière diffusée est également monochromatique avec la même fréquence que la lumière incidente, l'efficacité de la diffusion étant donné par V-15



Fig 2

- Excitation par un spectre large

Le photon incident est décrit par un mélange statistique d'états correspondant à une probabilité égale d'avoir une fréquence quelconque dans une bande spectrale large devant $\hbar\Gamma_e$.

L'efficacité de la diffusion étant donné par (V-15), la répartition en fréquences du photon diffusé est donnée par une courbe de Lorentz, centrée en $E_c + \hbar\Delta_e$ et de largeur $\hbar\Gamma_e$.

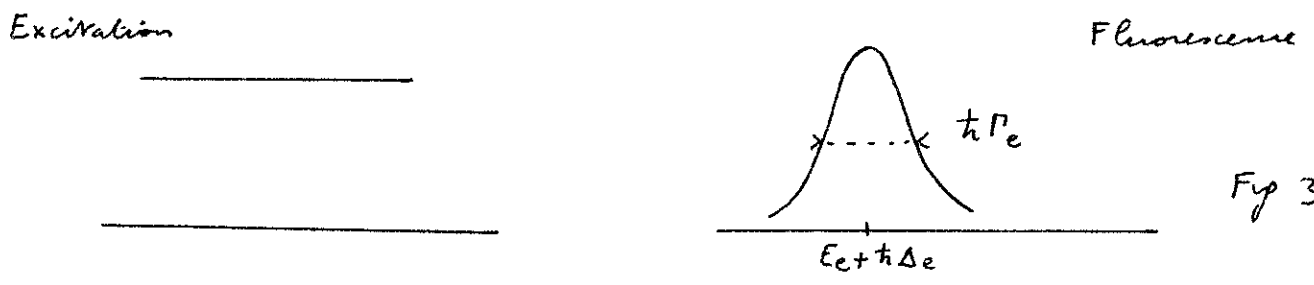


Fig 3

- Les résultats précédents ne sont valables qu'aux faibles intensités (processus à 1 photon). Aux fortes intensités (irradiations d'un jet atomique par un laser), le spectre de la lumière de fluorescence est complètement modifié (processus non-linéaires impliquant plusieurs photons, effet Stark dynamique...)

⑥ Diffusions d'un paquet d'ondes

a) Description schématisée de l'expérience

Envoyons sur l'atome dans l'état $|f\rangle$ un photon décrit par un paquet d'ondes qui, pour t suffisamment loin dans le passé, s'écrit :

$$|\psi(t)\rangle \sim \int dE c(E) e^{-iEt/\hbar} |\vec{k}\vec{E}\rangle \tag{V-16}$$

(V-16) est obtenue en superposant des ondes planes de même polarisation et de même direction. En réalité pour avoir une dimension transversale finie du paquet d'ondes, il faudrait introduire une légère dispersion sur la direction de ces ondes planes.

Après le processus de diffusion, et d'après la définition même de la matrice S , on a un paquet d'ondes libres diffusées :

$$|\psi(t)\rangle \sim \sum_{\vec{k}'\vec{E}'} \int dE c(E) e^{-iE't/\hbar} |\vec{k}'\vec{E}'\rangle \langle f, \vec{k}'\vec{E}' | S | f, \vec{k}\vec{E} \rangle \tag{V-17}$$

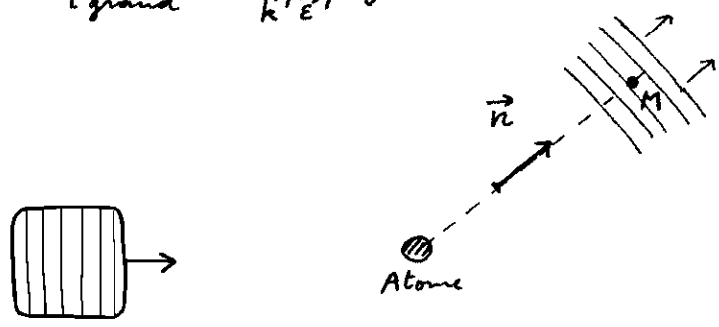


Figure 4.

Plaçons un photodétecteur au point M dans la direction \vec{n} suffisamment loin de l'atome

On peut montrer (cf cours de R.J. GLAUBER dans les Houches 64) que le signal donné par le photodétecteur est de la forme

$$\langle \psi(t) | E^{(-)}(\vec{r}) E^{(+)}(\vec{r}) | \psi(t) \rangle \tag{V-18}$$

où $E^{(+)}(\vec{r})$ [resp. $E^{(-)}(\vec{r})$] sont les composantes de fréquence > 0 (resp. < 0) de l'opérateur champ électromagnétique au point \vec{r} où se trouve le photodétecteur. On déduit alors de (V-18) et (V-17) que le signal observé est proportionnel à la valeur au point \vec{r} du carré du module d'un paquet d'ondes planes libres de même direction de propagation \vec{n} et d'énergies E différentes, l'amplitude de l'onde plane E étant :

$$\frac{\lambda(E) c(E)}{E - E_c - \hbar \Delta(E) + i\hbar \frac{\Gamma(E)}{2}} \tag{V-19}$$

$c(E)$ est la fonction définissant le paquet d'ondes incident ; le dénominateur résonnant de (V-19) provient de l'élément de matrice de S ; $\lambda(E)$ est une fonction de E dépendant de facteurs géométriques (angle entre les directions d'incidence et de détection, polarisations), de la dépendance en E des éléments de matrice de V (numérateur du dernier terme de V-14), de la densité d'états à l'énergie E (intervenant dans l'intégrale sur \vec{k}' de V-17), de la détection (dépendance en E des éléments de matrice de $E^{(+)}$ et $E^{(-)}$ dans V-19). En fait, $\lambda(E)$ est une fonction très lentement variable de E [devant $c(E)$ et l'inverse du dénominateur]. Comme $\Gamma(E)$, $\lambda(E)$ s'annule pour $E < 0$.

En conclusion :

Dépendance temporelle du paquet d'ondes incident

→ Carré du module de la T.F. de $c(E)$

Dépendance temporelle du signal de détection

→ Carré du module de la T.F. de V-13

b) Cas d'un paquet d'ondes résonnant.

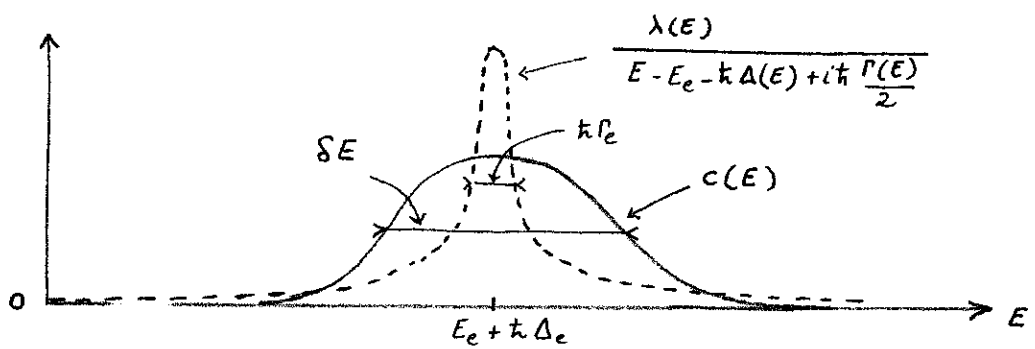
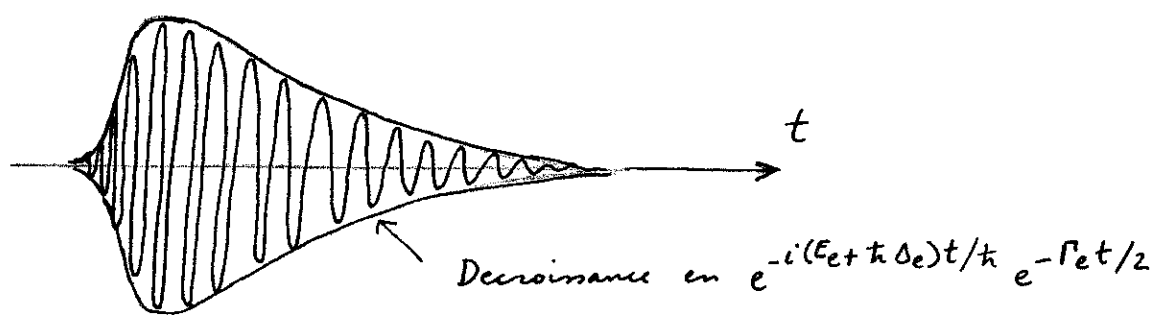


Fig 5

$E_c + h\Delta_c$ tombe à l'intérieur de la largeur δE de $c(E)$ qui est supposé très grande devant $h\Gamma_c$. Le temps de passage du paquet d'ondes incident sur l'atome est $h/\delta E$. Pour avoir une excitation aussi percutante que possible, il faut que δE soit aussi grand que possible.

Pour avoir le signal de détection il faut prendre la TF du produit des 2 courbes représentées en traits pleins et en traits tirés sur la fig. 5. Cette T.F. est donc le produit de convolution de la T.F. de $c(E)$ qui est une fonction de t de largeur $h/\delta E$ par la TF de $\lambda(E)/[E - E_c - h\Delta_c + i\frac{h\Gamma(E)}{2}]$ qui est voisine de $\Theta(t) e^{-i(E_c + h\Delta_c)t} e^{-\Gamma t/2}$. (Nous avons assimilé la courbe en traits tirés de la fig 5 à une Lorentzienne pure, approximation sur laquelle nous revenons au § suivant).

Le signal de détection est donc donné par le carré des modules de la courbe représentée sur la fig. 6



Phase de préparation durant un temps de l'ordre de $h/\delta E$

Fig 6

La probabilité d'avoir un événement sur le photodétecteur est d'abord nulle. Elle croît brusquement sur un intervalle de temps de l'ordre de $h/\delta E$ (phase de préparation de l'état excité) puis décroît exponentiellement en $e^{-\Gamma t}$

c) Peut-on aisément observer les déviations par rapport au comportement exponentiel ?

Ces déviations sont liées au fait que la courbe tracée en traits tiretés sur la fig. 5 n'est pas une vraie lorentzienne mais s'en écarte aux très grandes valeurs de E et aux très faibles valeurs de E. En particulier le comportement de cette courbe près de E=0 détermine l'allure de la décroissance aux temps très longs.

Or, on voit sur la fig. 5 que la courbe c(E) coupe les contributions de la courbe en traits tiretés en dehors d'un intervalle de largeur ΔE. En particulier c(E) coupe tout ce qui est près de E=0. Comme les largeurs ΔE correspondant aux impulsions couramment délivrées par des lasers sont de l'ordre de quelques largeurs Doppler et restent très petites devant E₀, on voit qu'il est exclu d'observer la décroissance en 1/tⁿ⁺¹ prévue dans les §§ précédents. Le comportement aux temps courts est lui aussi entièrement déterminé par la forme de c(E) comme cela apparaît sur la fig 6.

Pour observer les phénomènes discutés dans les §§ précédents il faudrait réaliser une excitation vraiment percussive correspondant à une fonction c(E) constante sur tout l'axe réel. Une telle excitation porterait également l'atome dans les autres niveaux excités.

d) Cas d'un paquet d'ondes non résonnant

Si les 2 courbes de la figure 5 ne sont pas centrées au même point et si elles sont suffisamment écartées l'une de l'autre, leur produit a l'allure d'une courbe présentant 2 maxima (cf figure 7)

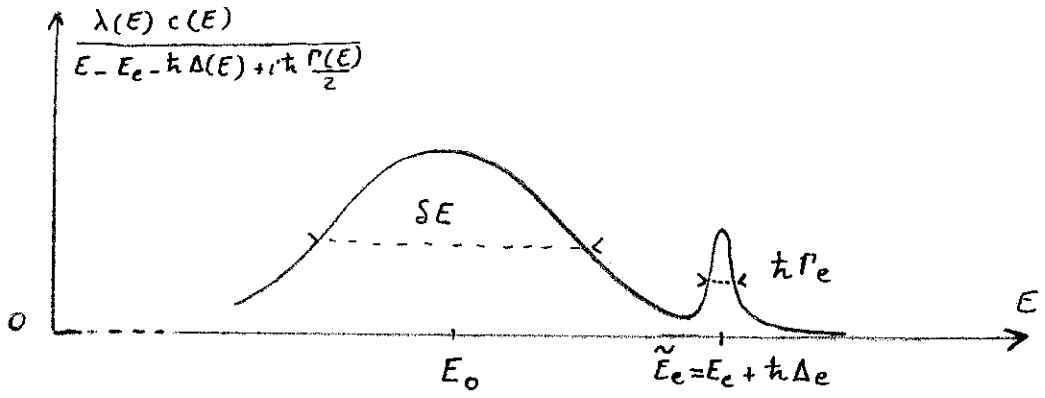


Fig. 7

Le carré du module de la T.F. de la courbe de la fig 7 peut avoir l'allure représentée sur la figure 8. Un premier pic ayant la forme du paquet d'ondes incident suivi d'une queue exponentielle d'amplitude beaucoup plus petite, mais durant beaucoup plus longtemps (un temps de l'ordre de 1/Γ_e)

L'observation de tels phénomènes et l'étude de leur évolution en fonction de l'écart à la résonance $\tilde{E}_c - E_0$ ont été réalisées

pour la 1^{ère} fois en 1974 sur la fluorescence de la molécule d'iode
 (P.F. Williams, D.L. Rousseau and S.H. Dworketsky
 Phys. Rev. Lett. 32, 196 (1974))

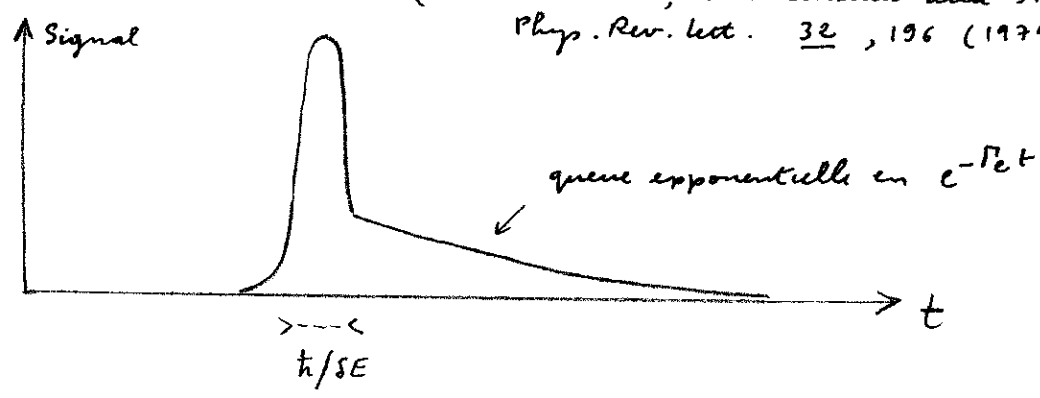


Fig 8

On peut montrer aisément que pour avoir un signal du type de celui de la fig. 8, la courbe $C(E)$ doit décroître plus vite que $\frac{1}{E}$ quand on s'éloigne de son centre.

e) Battements quantiques

Anticipant sur les résultats qui seront obtenus dans les chapitres ultérieurs, précisons que, lorsque l'état excité présente une structure (2 sous-niveaux e_1 et e_2), la formule V-14 se généralise, le dernier terme étant remplacé par une somme de 2 termes, 1 pour chaque état intermédiaire possible du processus de diffusion $|e_1, 0\rangle$ ou $|e_2, 0\rangle$.

Le "paquet d'ondes diffus" représenté sur la fig 6 est alors une somme de 2 paquets d'ondes. La queue du paquet d'ondes total est de la forme :

$$A_1 e^{-i(E_1 + \Delta_1)t/\hbar} e^{-\Gamma t/2} + A_2 e^{-i(E_2 + \Delta_2)t/\hbar} e^{-\Gamma t/2} \quad (V-20)$$

A_1 (et A_2) sont des constantes dépendant des éléments de matrice de V entre g et e_1 (et g et e_2). Nous avons supposé la même durée de vie $1/\Gamma$ pour e_1 et e_2 , dont les énergies sont notées E_1, E_2 les Lambshifts Δ_1, Δ_2 . Par suite du battement entre les 2 fréquences $E_1 + \Delta_1$ et $E_2 + \Delta_2$ la forme du paquet d'ondes (V-20) est différente de celle représentée sur la fig 6

Oscillation de l'enveloppe à la fréquence $\frac{E_2 + \Delta_2 - E_1 - \Delta_1}{\hbar}$

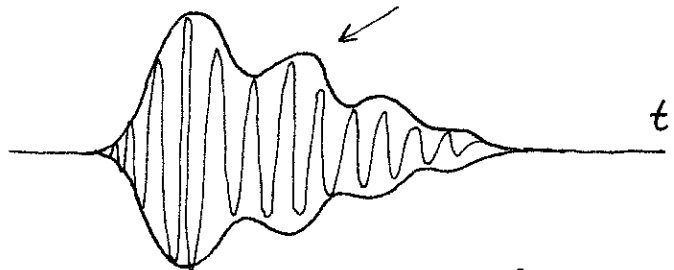


Fig 9

Lorsqu'on élève au carré le module du paquet d'ondes représenté sur la fig. 9, on trouve que la probabilité de détecter un événement sur le photodétecteur comporte une composante oscillante à la fréquence $(E_2 + \Delta_2 - E_1 - \Delta_1)/\hbar$, amortie avec une constante de temps $1/\Gamma$. C'est ce qu'on appelle les battements quantiques. (voir article de S. Haroche dans "High Resolution Spectroscopy", K. Shimoda éditeur Springer Verlag 1976 et les nombreuses références à la fin de cet article).

But de ce §

Les hypothèses simplificatrices faites sur le spectre de H_0 et sur le couplage V nous ont permis de calculer directement, dans les chapitres précédents, certains éléments de matrice importants de $G(z)$ entre 2 états propres de H_0 [voir par exemple III-4 et V-4]

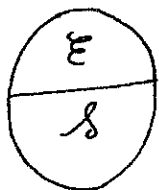
La situation est très souvent beaucoup plus complexe. Chaque élément de matrice de $G(z)$ est couplé à beaucoup d'autres et il n'est pas facile en général de résoudre le système d'équations correspondant. De plus, on peut s'intéresser à des problèmes plus compliqués où plusieurs continus sont couplés les uns aux autres (par exemple des cascades radiatives, où un atome émet successivement plusieurs photons en effectuant des transitions vers des niveaux d'énergie de plus en plus bas).

La technique des opérateurs de projection permet de concentrer le calcul sur les éléments de matrice de $G(z)$ dont on a besoin. Elle fournit des équations exactes auxquelles satisfait la projection de $G(z)$ qui sont intéressante. Cette technique permet de faire des approximations au stade final du calcul sur des expressions dont la structure se prête à des interprétations physiques simples.

Nous exposons ci-dessous cette technique et l'illustrons par quelques exemples concrets d'applications.

A - Calcul des restrictions de la résolvante $G(z)$ à l'intérieur de 2 sous-espaces supplémentaires (ou entre ces 2 sous-espaces)

① Notations - But du calcul



E : sous-espace de l'espace des états, somme directe de sous-espaces propres de H_0 .

D : sous-espace supplémentaire de E .

P : Projecteur sur E .

$Q = 1 - P$ Projecteur sur D .

- Relations caractéristiques de P et Q

$$P = P^+ \quad P^2 = P \quad (VI-1)$$

$$Q = Q^+ \quad Q^2 = Q \quad (VI-2)$$

$$PQ = QP = 0 \quad (VI-3)$$

$$P + Q = 1 \quad (VI-4)$$

Comme E est stable sous l'action de H_0 (puisque c'est une somme directe de sous-espaces propres de H_0), on a :

$$Q H_0 P = P H_0 Q = 0 \quad (VI-5)$$

- Ce que l'on désire calculer :

$P G(z) P$, $Q G(z) Q$: restrictions de $G(z)$ à l'intérieur de E , D .

$P G(z) Q$, $Q G(z) P$: restriction de $G(z)$ entre E et D ou entre D et E .

② Calcul de PG P, PGP, PG P, PGP

- On part de l'équation de définition de G(z)

$$(z - H_0 - V)G(z) = 1 \tag{VI-6}$$

qu'on multiplie à droite par P, à gauche par P ou par P.

Si l'on insère P + P = 1 entre (z - H_0 - V) et G(z) et qu'on utilise (VI-5), on obtient les 2 équations suivantes:

$$\begin{cases} P(z-H)P [PG(z)P] - PV P [\varphi G(z)P] = P & (VI-7) \\ -\varphi V P [PG(z)P] + \varphi(z-H)\varphi [\varphi G(z)P] = 0 & (VI-8) \end{cases}$$

qui sont 2 équations opératoires reliant les 2 opérateurs PG(z)P et PGP(z)P. De (VI-8) on tire

$$PG(z)P = \frac{P}{z - \varphi H_0 \varphi - \varphi V \varphi} V P G(z) P \tag{VI-9}$$

En reportant (VI-9) dans (VI-7) on obtient:

$$P \left[z - H_0 - V - V \frac{P}{z - \varphi H_0 \varphi - \varphi V \varphi} V \right] PG(z)P = P \tag{VI-10}$$

- Opérateur R(z)

Introduisons l'opérateur R(z) défini par:

$$R(z) = V + V \frac{P}{z - \varphi H_0 \varphi - \varphi V \varphi} V \tag{VI-11}$$

- Calcul de PG(z)P et PGP(z)P. En introduisant (VI-11) dans (VI-10), on obtient:

$$PG(z)P = \frac{P}{z - PH_0P - PR(z)P} \tag{VI-12}$$

ce qui donne à partir de VI-9:

$$PG(z)P = \frac{P}{z - \varphi H_0 \varphi - \varphi V \varphi} V \frac{P}{z - PH_0P - PR(z)P} \tag{VI-13}$$

- Calcul de PG(z)P. On part de la relation suivante, analogue à (VI-6)

$$G(z-H) = 1 \tag{VI-14}$$

et on la multiplie à gauche par P, à droite par P, en insérant P + P au milieu.

$$- [PG(z)P] PV P + [PG(z)P] \varphi (z - H_0 - V) \varphi = 0 \tag{VI-15}$$

On en déduit:

$$PG(z)P = \frac{P}{z - PH_0P - PR(z)P} V \frac{P}{z - \varphi H_0 \varphi - \varphi V \varphi} \tag{VI-16}$$

- Calcul de PGP(z)P. On multiplie (VI-6) à droite et à gauche par P

$$\varphi(z-H)\varphi[\varphi G(z)\varphi] - \varphi V P [P G(z)\varphi] = \varphi \tag{VI-17}$$

On en déduit, compte tenu de VI-16

$$\varphi G(z)\varphi = \frac{\varphi}{z - \varphi H_0 \varphi - \varphi V \varphi} + \frac{\varphi}{z - \varphi H_0 \varphi - \varphi V \varphi} V \frac{P}{z - P H_0 P - P R(z) P} V \frac{\varphi}{z - \varphi H_0 \varphi - \varphi V \varphi} \tag{VI-18}$$

- Autres expressions équivalentes de $\varphi G(z)P$, $P G(z)\varphi$, $\varphi G(z)\varphi$.

Appliquons l'identité $\frac{P}{A} = \frac{P}{B} + \frac{P}{B} \frac{(B-A)}{A} \frac{P}{A}$ en posant $A = z - \varphi H_0 \varphi - \varphi V \varphi$ et $B = z - \varphi H_0 \varphi$. On obtient, en multipliant les 2 membres de l'égalité à droite par V , et en utilisant la définition (VI-11) de $R(z)$:

$$\frac{P}{z - \varphi H_0 \varphi - \varphi V \varphi} V = \frac{P}{z - \varphi H_0 \varphi} \left[V + V \frac{\varphi}{z - \varphi H_0 \varphi - \varphi V \varphi} V \right] = \frac{P}{z - \varphi H_0 \varphi} R(z) \tag{VI-19}$$

Un calcul analogue utilisant $\frac{P}{A} = \frac{P}{B} + \frac{P}{A} \frac{(B-A)}{B} \frac{P}{B}$ donnerait de même :

$$V \frac{\varphi}{z - \varphi H_0 \varphi - \varphi V \varphi} = R(z) \frac{\varphi}{z - \varphi H_0 \varphi} \tag{VI-20}$$

En utilisant (VI-19) et (VI-20), on peut réécrire (VI-13), (VI-16) et (VI-18) sous la forme :

$$\varphi G(z)P = \frac{\varphi}{z - \varphi H_0 \varphi} R(z) \frac{P}{z - P H_0 P - P R(z) P} \tag{VI-21}$$

$$P G(z)\varphi = \frac{P}{z - P H_0 P - P R(z) P} R(z) \frac{\varphi}{z - \varphi H_0 \varphi} \tag{VI-22}$$

$$\varphi G(z)\varphi = \frac{\varphi}{z - \varphi H_0 \varphi - \varphi V \varphi} + \frac{\varphi}{z - \varphi H_0 \varphi} R(z) \frac{P}{z - P H_0 P - P R(z) P} R(z) \frac{\varphi}{z - \varphi H_0 \varphi} \tag{VI-23}$$

③ Discussion physique

(i) Interprétation de $R(z)$ et $P G(z)P$

Commençons par "oublier" que $R(z)$ dépend de z . Dans (VI-12), tous les opérateurs agissent dans \mathcal{E} . On peut alors considérer que $P G(z)P$ est, dans \mathcal{E} , la résolvante de l'opérateur $P H_0 P + P R P$, et $P R P$ apparaît comme un couplage effectif entre les différents états de \mathcal{E} tenant compte de toutes les transitions intermédiaires possibles à l'intérieur de \mathcal{E} . En effet, d'après (VI-11), le développement en puissances de V de $R(z)$ s'écrit :

$$R(z) = V + V \varphi \frac{1}{z - H_0} \varphi V + V \varphi \frac{1}{z - H_0} \varphi V \varphi \frac{1}{z - H_0} \varphi V + \dots \tag{VI-24}$$

Tous les états intermédiaires apparaissant dans (VI-24) appartiennent à \mathcal{S}

Montrons maintenant qu'il est légitime, dans certains cas, d'oublier la dépendance en z de $R(z)$

Supposons que P soit le projecteur sur un groupe d'états discrets de H_0 dont les énergies sont groupées autour d'une valeur E_0 et éloignées des énergies des autres états discrets de H_0 . Par contre, E_0 peut tomber à l'in-

térieur d'un ou plusieurs continuums de H_0 (Fig 1).

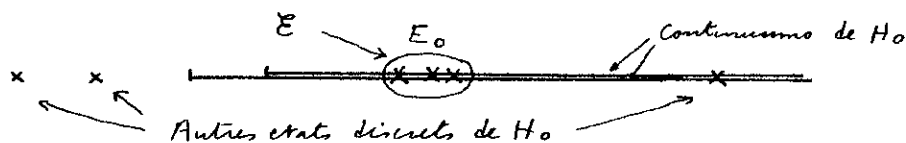


Fig. 1

Supposons de plus que V soit très petit. Il est alors aisé de montrer que $R(z)$ reste très petit lorsque z varie sur le contour C_+ au voisinage de E_0 . La sommation sur les états des continuums qui apparaissent intermédiairement dans (VI-24) n'introduit aucune divergence (grâce aux parties principales et fonctions S); cette sommation fait apparaître une coupure pour $R(z)$ sur l'axe réel si E_0 tombe à l'intérieur d'un continuum. Les seuls ennemis pourraient provenir des états discrets extérieurs à E (annulation des dénominateurs de VI-24), mais ils sont par hypothèse très loin de E_0 .

Si l'on considère maintenant (VI-12), on voit que $z-PH_0P$ peut prendre des valeurs très petites au voisinage de $z = E_0$. Comme $PR(z)P$ est petit, $PG(z)P$ peut devenir très grand. Comme $PR(z)P$ varie très lentement au voisinage de E_0 , on voit qu'il est légitime de ne tenir compte de $PR(z)P$ de manière précise qu'au voisinage de $z = E_0$ en remplaçant, dans $PR(z)P$, z par $E_0 + i\epsilon$. $PR(E_0 + i\epsilon)P$ apparaît donc bien comme un couplage effectif à l'intérieur de E . Si E_0 tombe à l'intérieur d'un continuum de H_0 , $PR(E_0 + i\epsilon)P$ n'est pas hermitique, ce qui traduit l'instabilité de E sous l'effet du couplage.

La variation résonnante de $PG(z)P$ lorsque z est voisin de $E_0 + i\epsilon$ sur C_+ est due à des pôles qui se trouvent sur l'axe réel ou dans le 2^{ème} feuillet de Riemann au voisinage de E_0 . En toute rigueur, lorsque z parcourt la droite C_+ d'autres variations rapides de $G(z)$ peuvent apparaître au voisinage des pôles associés à d'autres états discrets ou instables de H , mais on peut montrer que les résidus correspondants sont très petits si V est petit, de sorte que l'approximation consistant à remplacer z par $E_0 + i\epsilon$ dans $PR(z)P$ est très bonne.

En conclusion, l'évolution à l'intérieur du sous-espace E correspondant à un ensemble d'états discrets de H_0 groupés autour de E_0 , peut être, à une bonne approximation, décrite par un "hamiltonien en général non hermitique" qui s'écrit :

$$PH_0P + PR(E_0 + i\epsilon)P \quad (\text{VI-25})$$

(ii) Interprétation de $\varphi G(z)P$, $PG(z)P$, $\varphi G(z)P$

Les éléments de matrice de $\varphi G(z)P$ qui relient un état de E à un état de \mathcal{D} permettent de décrire l'état final dans \mathcal{D} d'un système effectuant une transition à partir d'un état de E . En lisant (VI-13) de la droite vers la gauche on voit qu'après évolution dans le sous-espace E décrite par "l'hamiltonien" (VI-25) le système passe grâce à V dans \mathcal{D} où il évolue sous l'effet de $\varphi H_0 P + \varphi V P$. Une interprétation analogue peut être donnée de (VI-16).

L'expression (VI-18) de $\varphi G(z)P$ permet d'étudier les transitions entre 2 états de \mathcal{D} . Elle sépare clairement la contribution des processus qui ne font jamais intervenir les états de E , et qui

sont décrits par le 1^{er} terme de (VI-18), de ceux qui font passer le système au moins une fois par E (dernier terme de VI-18). La structure de ce dernier terme est simple : après évolution dans D sous l'effet de $\mathcal{Q}H_0\mathcal{Q} + \mathcal{Q}V\mathcal{Q}$, le système passe dans E où il évolue sous l'effet de (VI-25), puis retourne dans D où il évolue de nouveau sous l'effet de $\mathcal{Q}H_0\mathcal{Q} + \mathcal{Q}V\mathcal{Q}$.

(iii) Les expressions obtenues se prêtent bien à des approximations.

Toutes les expressions obtenues dans le § ② sont exactes. Il est beaucoup plus commode de faire des approximations à ce stade final du calcul plutôt que sur une suite infinie de termes perturbatifs.

Exemples d'approximations que l'on peut faire :

- Remplacer dans $PR(z)P$ z par $E_0 + i\epsilon$. Point déjà discuté.
- Négliger $\mathcal{Q}V\mathcal{Q}$ dans $\frac{P}{z - \mathcal{Q}H_0\mathcal{Q} - \mathcal{Q}V\mathcal{Q}}$. On néglige l'interaction V dans l'état final du processus décrit par $\mathcal{Q}G(z)P$, ou dans les états initial et final des processus décrits par le dernier terme de (VI-18).
- Calculer $PR(E_0 + i\epsilon)P$ de manière approchée en ne gardant qu'un nombre fini de termes dans le développement (VI-24) de R .

$$PR(E_0 + i\epsilon)P \rightarrow P \tilde{R}(E_0 + i\epsilon)P \quad (VI-26)$$

Il faut bien voir en en procédant ainsi on garde cependant des puissances arbitrairement élevées de V dans le développement de $\mathcal{P}G(z)P$ qui s'écrivent compte tenu de (VI-12) et (VI-26) :

$$\frac{P}{z - PH_0P - P\tilde{R}(E_0 + i\epsilon)P} = \frac{P}{z - H_0} + \frac{P}{z - H_0} \tilde{R}(E_0 + i\epsilon) \frac{P}{z - H_0} + \frac{P}{z - H_0} \tilde{R}(E_0 + i\epsilon) \frac{P}{z - H_0} \tilde{R}(E_0 + i\epsilon) \frac{P}{z - H_0} + \dots \quad (VI-27)$$

L'approximation (VI-26) revient donc à effectuer une resommation partielle de la série des perturbations.

B. Exemples d'application des formules précédentes

① Emission spontanée d'un photon par un système de 2 atomes identiques dont l'un (A) est excité, l'autre (B) non.

- Etat initial $|e_A f_B, 0\rangle$: atome A dans l'état excité, atome B dans l'état fondamental, 0 photon. Comment cet état se désintègre-t-il ?
- L'état discret $|e_A f_B, 0\rangle$ est couplé au continu $|f_A f_B, \vec{k} \vec{\epsilon}\rangle$. Mais attention, il serait incorrect d'appliquer brutalement la règle d'or de Fermi à un tel système. On trouverait que la probabilité de désintégration par unité de temps est la même que celle de l'atome A isolé puisque B ne changeant pas d'état reste "spectateur". Un tel raisonnement est faux car il ignore l'existence d'un autre état discret $|f_A e_B, 0\rangle$ dégénéré avec le 1^{er} et couplé au même continu. Les 2 états discrets $|e_A f_B, 0\rangle$ et $|f_A e_B, 0\rangle$ sont couplés via le continu et on ne peut les étudier indépendamment l'un de l'autre.
- Il faut donc considérer le sous-espace E à 2 dimensions sous-tendu par $|e_A f_B, 0\rangle$ et $|f_A e_B, 0\rangle$ et calculer la matrice

2×2 , $PR(E_c + i\epsilon)P$, qu'on appelle souvent "matrice d'amortissement" (ou damping matrix)

- Si les 2 atomes sont suffisamment proches l'un de l'autre (à une distance inférieure à la longueur d'onde), on obtient pour cette matrice l'expression (on a ajouté PH_0P à PRP).

$$\begin{pmatrix} E_c + \hbar\Delta_c - i\hbar\frac{\Gamma_c}{2} & \hbar\Delta_c - i\hbar\frac{\Gamma_c}{2} \\ \hbar\Delta_c - i\hbar\frac{\Gamma_c}{2} & E_c + \hbar\Delta_c - i\hbar\frac{\Gamma_c}{2} \end{pmatrix} \quad (VI-28)$$

où $\hbar\Delta_c$ et $\hbar\Gamma_c$ sont le "lamb-shift" et la largeur naturelle du niveau excité c d'un atome isolé. Les valeurs propres et vecteurs propres de (VI-28) sont :

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|e_A f_B, 0\rangle + |f_A e_B, 0\rangle) \longrightarrow E_c + 2\hbar\Delta_c - i\hbar\Gamma_c \quad (VI-29)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|e_A f_B, 0\rangle - |f_A e_B, 0\rangle) \longrightarrow E_c \quad (VI-30)$$

On voit ainsi que la désintégration de l'état initial $|e_A f_B, 0\rangle$ ne se fait pas avec une constante de temps $\frac{1}{\Gamma_c}$ mais avec une constante de temps 2 fois plus courte $\frac{1}{2\Gamma_c}$. De plus, à $t = \infty$, le système n'a pas quitté complètement le sous-espace \mathcal{E} mais a une probabilité $\frac{1}{2}$ de se trouver dans l'état (VI-30) (qui est stable).

Nous n'étudierons pas davantage ce problème qui a déjà été analysé l'an dernier par une autre méthode (introduisant d'emblée les états VI-29 et VI-30 pas des considérations de symétrie ; voir pages XIII-1 à XIV-8 du cours 1974-75).

- Nous retiendrons de l'exemple précédent le point important suivant : si plusieurs états discrets proches les uns des autres sont couplés au même continuum, ils n'évoluent pas en général de manière indépendante l'un de l'autre. Il faut les traiter globalement ce qui montre l'intérêt en il y a à introduire les opérateurs de projection P et Q et la matrice d'amortissement $PR(E_0 + i\epsilon)P$.

Notons cependant que si les éléments non diagonaux de la matrice d'amortissement sont petits devant les différences entre énergies non perturbées des états discrets, ces éléments non diagonaux peuvent être négligés et on obtient alors, en première approximation, une évolution indépendante des divers états discrets.

② Emission spontanée d'un niveau excité de moment cinétique $J_e \neq 0$

- Jusqu'ici nous n'avons pas tenu compte de la dégénérescence du niveau atomique excité. En général un tel niveau possède plusieurs sous-niveaux Zeeman $|J_e, m_e\rangle$ ($-J_e \leq m_e \leq J_e$). Ces sous-niveaux se désintègrent-ils tous à la même vitesse ?

- Lorsqu'on étudie l'émission spontanée, il est facile de voir sur l'expression (VI-11) de R que R est invariant par rotation. V fait intervenir en effet le couplage de l'atome avec un ensemble de

modes ayant toutes les directions de propagation et toutes les polarisations possibles : V est donc invariant lors d'une rotation du système d'axes. Il en est de même de $Q_e = 1 - P_e$ (puisque $P_e = \sum_{m_e} |J_e m_e\rangle \langle J_e m_e|$ est invariant par rotation) et des propagateurs $\frac{1}{z - H_0}$ (puisque l'hamiltonien atomique H_0 est invariant par rotation).

La matrice d'amortissement $P_e R(E_e + i\epsilon) P_e$ est donc scalaire, c-à-d multiple de la matrice unité :

$$\langle J_e m'_e | R(E_e + i\epsilon) | J_e m_e \rangle = \hbar (\Delta_e - i \frac{\Gamma_e}{2}) \delta_{m'_e m_e} \quad (VI-31)$$

Tous les sous-niveaux Zeeman $|J_e m_e\rangle$ ont donc même largeur naturelle $\hbar \Gamma_e$ et même Lamb-shift $\hbar \Delta_e$.

Le même raisonnement permet de montrer que 2 niveaux excités e et e' voisins l'un de l'autre, mais de symétries différentes (J différentes ou parités différentes) ne sont pas couplés par R et se désintègrent indépendamment l'un de l'autre (R commute avec \vec{J}^2 et avec la parité).

③ Diffusion d'un photon par un atome au voisinage d'une résonance.

- L'an dernier, nous avons étudié la diffusion non-résonnante d'un photon par un atome (cf pages VIII-1 à IX-8 du cours 74-75). Dans le chapitre précédent nous avons étudié la diffusion résonnante d'un photon par un atome qui n'aurait qu'un niveau excité non dégénéré. La formule (VI-18) établie plus haut permet de traiter simultanément les 2 cas précédents et de tenir compte éventuellement de la structure Zeeman du niveau résonnant e . P sera le projecteur sur les divers sous-niveaux de e .

- Le 1^{er} terme de VI-18 décrit la diffusion non résonnante. Le développement de ce terme au 2^{im} ordre en V donne :

$$\frac{P}{z - Q H_0 Q - Q V Q} = \frac{P}{z - H_0} + \frac{P}{z - H_0} V \frac{P}{z - H_0} + \frac{P}{z - H_0} V \frac{P}{z - H_0} V \frac{P}{z - H_0} + \dots \quad (VI-32)$$

Lorsqu'on choisit l'hamiltonien d'interaction $V = -\vec{D} \cdot \vec{E}(\vec{R})$ et qu'on prend l'élément de matrice de (VI-32) entre $|f, \vec{k} \vec{E}\rangle$ et $\langle f, \vec{k}' \vec{E}'|$, la première contribution non nulle vient du dernier terme de (VI-32) et représente la contribution à la diffusion des processus non résonnants schématisés par les diagrammes de la figure 2.

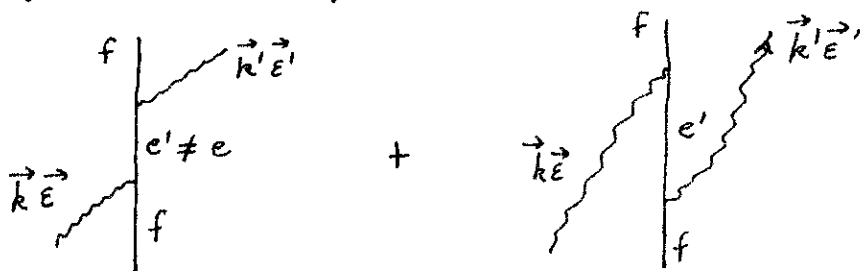


Fig 2

Le passage de $G(z)$ à $U(t)$ donne l'amplitude de diffusion obtenue l'an dernier.

- Dans le dernier terme de (VI-18), nous négligerons QVQ dans $\frac{Q}{z - QH_0Q - QVQ}$ (ceci revient à négliger le couplage dans l'état f , c-à-d le Lamb-shift de l'état fondamental).

En utilisant l'expression (VI-31) de $PR(E_c + i\epsilon)P$ et en supposant que les divers sous-niveaux Zeeman ont des énergies E_{me} on obtient aisément à partir de (VI-18) l'amplitude de diffusion résonnante sous la forme

$$\sum_{me} \frac{\langle f, \vec{k}' \vec{E}' | V | J_e, m_e, 0 \rangle \langle J_e, m_e, 0 | V | f, \vec{k} \vec{E} \rangle}{\hbar c k - E_{me} - \hbar \Delta_c + i \hbar \frac{\Gamma_e}{2}} \quad (VI-33)$$

Cette amplitude apparaît comme une somme d'amplitudes correspondant aux $2J_e + 1$ états intermédiaires possibles $|J_e, m_e, 0\rangle$ du processus de diffusion (cf figure 3)

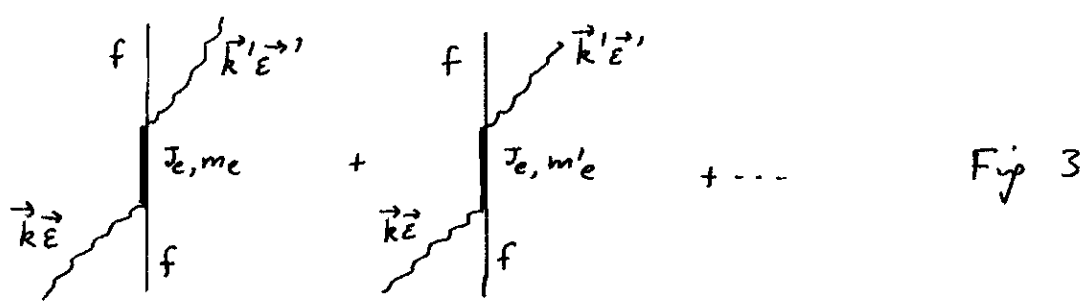


Fig 3

(Le trait gras utilisé pour les états intermédiaires J_e, m_e, J_e, m_e' indique qu'on a tenu compte du couplage et de l'amortissement correspondant dans les états intermédiaires)

- Au voisinage de la résonance les processus de la figure 3 sont beaucoup plus importants que ceux de la figure 2. Lorsqu'on élève (VI-33) au carré (en module) pour avoir la section efficace on obtient des termes carrés + des termes d'interférence qui représentent les interférences entre les divers chemins que le système peut suivre pour aller de l'état initial $|f, \vec{k} \vec{E}\rangle$ à l'état final $|f, \vec{k}' \vec{E}'\rangle$ (chemins représentés sur la figure 3).

Ce sont les variations de ces termes d'interférence avec un champ externe appliqué (qui fait varier différemment les énergies E_{me} des sous-niveaux J_e, m_e) qui sont à l'origine des résonances de croisement de niveaux qui jouent un rôle très important en spectroscopie de haute résolution (Effet Hanle, Effet Francken).

Opérateurs de projection - Applications (suite)

C - Factorisation de $R(z)$ ① But d'un tel calcul

- Ajoutons un indice 1 aux sous-espaces E et S introduits en A ainsi qu'aux projecteurs P et Q correspondants.

La formule (VI-21) devient :

$$P_1 G(z) P_1 = \frac{P_1}{z - P_1 H_0 P_1} R_1(z) \frac{P_1}{z - P_1 H_0 P_1 - P_1 R_1(z) P_1} \quad (\text{VII-1})$$

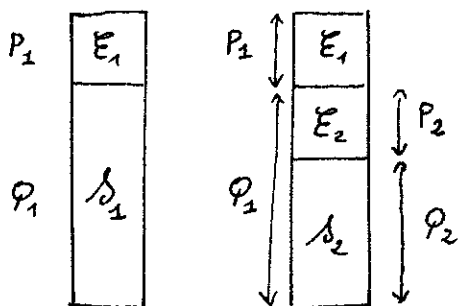
avec

$$R_1(z) = V + V \frac{Q_1}{z - Q_1 H_0 Q_1 - Q_1 V Q_1} V \quad (\text{VII-2})$$

(VII-1) permet de calculer l'amplitude de transition d'un état initial $|i\rangle \in E_1$ à un état final $|f\rangle \in S_1$.

- Considérons une partition (E_2, S_2) dans S_1 .

Fig 4



Soient P_2 et Q_2 les projecteurs sur E_2 et S_2 qui sont 2 sous-espaces supplémentaires de S_1

$$P_2 + Q_2 = P_1 \quad (\text{VII-3})$$

$$Q_2 = Q_1 - P_2 = 1 - P_1 - P_2 \quad (\text{VII-4})$$

$$P_2 Q_1 = Q_1 P_2 = P_2 \quad (\text{VII-5})$$

$$Q_2 Q_1 = Q_1 Q_2 = Q_2 \quad (\text{VII-6})$$

- But du calcul

Transformer l'expression (VII-2) de $R_1(z)$ de manière à distinguer clairement parmi toutes les transitions qui vont de $|i\rangle$ à $|f\rangle$ celle qui passent intermédiairement par un état de E_2 .

② Transformation de l'expression donnant $R_1(z)$

- Récrivons (VII-2), en posant pour simplifier les notations :

$$z - P_1 H_0 P_1 - Q_1 V Q_1 = C \quad (\text{VII-7})$$

$$\text{Il vient :} \quad R_1 = V + V \frac{P_1}{C} V \quad (\text{VII-8})$$

- Nous allons, dans ce qui suit, travailler dans S_1 . L'opérateur $Q_1 H_0 P_1 + Q_1 V Q_1$ est un hamiltonien de S_1 , dont la résolvante est $\frac{P_1}{C}$. Comme (E_2, S_2) est une partition de S_1 , on a :

$$\frac{P_1}{C} = P_2 \frac{P_1}{C} P_2 + Q_2 \frac{P_1}{C} P_2 + P_2 \frac{P_1}{C} Q_2 + Q_2 \frac{P_1}{C} Q_2 \quad (\text{VII-9})$$

Les 4 opérateurs du 2^{ème} membre de (VII-9) peuvent être calculés immédiatement à partir des formules (VI-12), (VI-13), (VI-16) et (VI-18) établies en A moyennant la substitution :

$$H_0 \rightarrow Q_1 H_0 P_1 \quad V \rightarrow Q_1 V Q_1 \quad P \rightarrow P_2 \quad Q \rightarrow Q_2 \quad (\text{VII-10})$$

- On obtient ainsi à partir de (VI-12), (VI-11), et compte tenu de VII-2
(VII-5), (VII-6) :

$$P_2 \frac{\varphi_1}{C} P_2 = G_2(z) = \frac{P_2}{z - P_2 H_0 P_2 - P_2 R_2(z) P_2} \quad (\text{VII-11})$$

avec

$$R_2(z) = V + V \frac{\varphi_2}{z - \varphi_2 H_0 \varphi_2 - \varphi_2 V \varphi_2} V \quad (\text{VII-12})$$

Notons que les 2 opérateurs P_2 et φ_2 qui apparaissent dans VII-11 et VII-12 ne profitent pas sur 2 sous-espaces supplémentaires dans l'espace des états total ($P_2 + \varphi_2 = \varphi_1 \neq 1$). Il ne faut donc pas confondre $G_2(z)$ avec $P_2 G(z) P_2$. $G_2(z)$ décrit une évolution dans E_2 excluant toute transition intermédiaire vers un état de E_1 .

Pour simplifier les notations, nous poserons

$$B = z - P_2 H_0 P_2 - P_2 R_2(z) P_2 \quad (\text{VII-13})$$

$$A = z - \varphi_2 H_0 \varphi_2 - \varphi_2 V \varphi_2 \quad (\text{VII-14})$$

de sorte que (VII-11) et (VII-12) s'écrivent :

$$P_2 \frac{\varphi_1}{C} P_2 = \frac{P_2}{B} = G_2(z) \quad (\text{VII-15})$$

$$R_2 = V + V \frac{\varphi_2}{A} V \quad (\text{VII-16})$$

- On obtient de même à partir de (VI-13), (VI-16) et (VI-18), et compte tenu de (VII-10), (VII-5), (VII-6), (VII-13), (VII-14) :

$$P_2 \frac{\varphi_1}{C} P_2 = \frac{\varphi_2}{A} V \frac{P_2}{B} \quad (\text{VII-17})$$

$$P_2 \frac{\varphi_1}{C} \varphi_2 = \frac{P_2}{B} V \frac{\varphi_2}{A} \quad (\text{VII-18})$$

$$\varphi_2 \frac{\varphi_1}{C} \varphi_2 = \frac{\varphi_2}{A} + \frac{\varphi_2}{A} V \frac{P_2}{B} V \frac{\varphi_2}{A} \quad (\text{VII-19})$$

- En insérant (VII-15), (VII-17), (VII-18), (VII-19) dans (VII-9), on obtient pour R_1 qui est donné par (VII-8) :

$$\begin{aligned} R_1 &= V + V \frac{P_2}{B} V + V \frac{\varphi_2}{A} V \frac{P_2}{B} V + V \frac{P_2}{B} V \frac{\varphi_2}{A} V + V \frac{\varphi_2}{A} V + V \frac{\varphi_2}{A} V \frac{P_2}{B} V \frac{\varphi_2}{A} V \\ &= V + V \frac{\varphi_2}{A} V + \left(V + V \frac{\varphi_2}{A} V \right) \frac{P_2}{B} \left(V + V \frac{\varphi_2}{A} V \right) \end{aligned} \quad (\text{VII-20})$$

c-à-d encore, compte tenu de (VII-16) et (VII-15)

$$\boxed{R_1(z) = R_2(z) + R_2(z) G_2(z) R_2(z)} \quad (\text{VII-21})$$

Le 1^{er} terme de (VII-21) donne les transitions induites par R_1 et ne passant jamais par E_2 ; le 2^{im} terme donne les transitions passant au moins 1 fois par E_2 .

- En reportant (VII-21) dans (VII-1), et en posant

$$G_1(z) = \frac{P_1}{z - P_1 H_0 P_1 - P_1 R_1(z) P_1} \quad (\text{VII-22})$$

on obtient

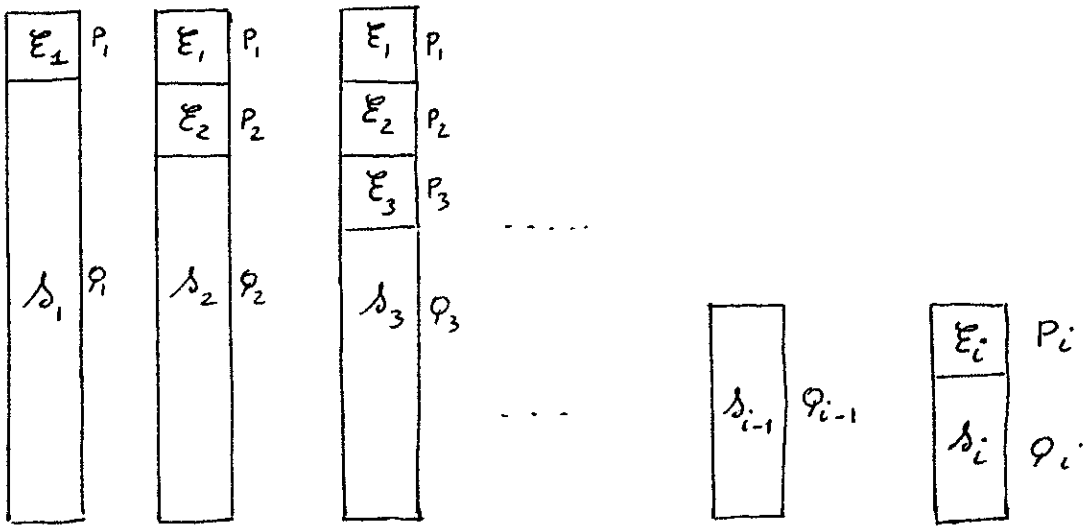
$$P_1 G(z) P_1 = \frac{1}{z - \rho_1 H_0 \rho_1} R_2(z) [1 + G_2(z) R_2(z)] G_1(z) \quad (VII-23)$$

Les 2 termes du crochet de (VII-23) sont respectivement associés aux transitions qui vont de $|i\rangle$ à $|f\rangle$ en passant 0 ou au moins 1 fois par E_2 .

③ Généralisation

- On effectue une partition (E_3, δ_3) dans $\delta_2, \dots (E_i, \delta_i)$ dans δ_{i-1} .

Fig 5



$$P_i + \rho_i = \rho_{i-1} \quad P_i \rho_{i-1} = \rho_{i-1} P_i = P_i \quad \rho_i \rho_{i-1} = \rho_{i-1} \rho_i = \rho_i \quad (VII-24)$$

- Par récurrence, on généralise aisément les résultats du § précédent. Une fois arrivé à $R_{i-1}(z)$ donné par :

$$R_{i-1}(z) = V + V \frac{\rho_{i-1}}{z - \rho_{i-1} H_0 \rho_{i-1} - \rho_{i-1} V \rho_{i-1}} V \quad (VII-25)$$

on transforme aisément (VII-25) en considérant la partition (E_i, δ_i) de δ_{i-1} . On obtient ainsi la relation suivante, analogue de (VII-21)

$$R_{i-1}(z) = R_i(z) + R_i(z) G_i(z) R_i(z) \quad (VII-26)$$

où

$$R_i(z) = V + V \frac{\rho_i}{z - \rho_i H_0 \rho_i - \rho_i V \rho_i} V \quad (VII-27)$$

$$G_i(z) = \frac{\rho_i}{z - \rho_i H_0 \rho_i - \rho_i R_i(z) \rho_i} \quad (VII-28)$$

(Là encore, comme $P_i + \rho_i \neq 1$, $G_i(z) \neq P_i G(z) P_i$. $G_i(z)$ décrit une évolution dans E_i excluant toute transition intermédiaire vers $E_1 \oplus E_2 \oplus E_3 \dots \oplus E_{i-1}$. Seul $G_1(z) = P_1 G(z) P_1$ puisque $P_1 + \rho_1 = 1$).

Parmi toutes les transitions passant dans δ_{i-1} et décrites par R_{i-1} , (VII-26) distingue celles qui ne passent jamais dans E_i de celles qui y passent au moins 1 fois.

- Remplaçons dans (VII-23) $R_2(z)$ par son expression en fonction de R_3 et G_3 calculée à partir de VII-26. Il vient :

$$P_1 G(z) P_1 = \frac{1}{z - P_1 H_0 P_1} R_3(z) [1 + G_3(z) R_3(z)] [1 + G_2(z) R_2(z)] G_1(z) \quad (VII-29)$$

et ainsi de suite jusqu'à :

$$P_1 G(z) P_1 = \frac{1}{z - P_1 H_0 P_1} R_i (1 + G_i R_i) (1 + G_{i-1} R_{i-1}) \dots (1 + G_2 R_2) G_1 \quad (VII-30)$$

Si l'on veut que le système partant de $|i\rangle$ aboutisse à $|f\rangle$ en passant intermédiairement et successivement par $E_2, E_3, \dots, E_{i-1}, E_i$, il faut nécessairement prendre, parmi les $(2)^{i-1}$ termes de (VII-30), le suivant :

$$\frac{1}{z - P_1 H_0 P_1} R_i G_i R_i G_{i-1} R_{i-1} \dots G_2 R_2 G_1 \quad (VII-31)$$

D- Application à l'étude de l'émission spontanée en cascade de 2 photons

① But de ce §

Un atome, initialement excité dans l'état e_1 retombe dans l'état fondamental f en passant intermédiairement par e_2 et en émettant successivement, 2 photons de fréquences voisines de ω_1 et ω_2 .
Quelle est la répartition spectrale du rayonnement émis par l'atome au cours de cette cascade ?

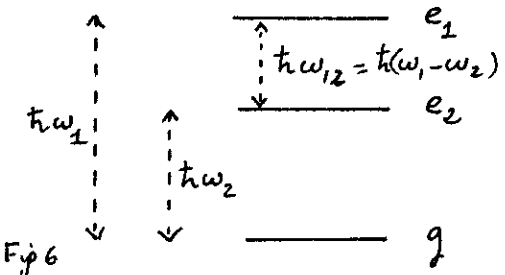


Fig 6

② Sous-espaces E_1 et E_2 . Etats initial et final - Amplitude de transition

- E_1 : sous espace à 1 dimension sous-tendu par $|e_1, 0\rangle$
- E_2 : sous espace à une infinité de dimension sous-tendu par l'ensemble des états $|e_2, \vec{k}, \vec{\epsilon}\rangle$ (pour tout \vec{k} et $\vec{\epsilon}$)

{ Etat initial : $|i\rangle = |e_1, 0\rangle \in E_1$ (VII-32)

{ Etat final : $|f\rangle = |g; \vec{k}_A \vec{\epsilon}_A, \vec{k}_B \vec{\epsilon}_B\rangle \in S_1$ (VII-33)

L'amplitude de probabilité pour que l'atome soit retombé dans l'état fondamental g en émettant 2 photons A et B d'énergies $h\omega_A = h\nu_{k_A}$ et $h\omega_B = h\nu_{k_B}$, s'obtient en intégrant le long de C_+ l'élément de matrice suivant de (VII-23) :

$$\frac{1}{z - h\omega_A - h\omega_B} \langle g, \vec{k}_A \vec{\epsilon}_A, \vec{k}_B \vec{\epsilon}_B | R_2(z) [1 + G_2(z) R_2(z)] G_1(z) | e_1, 0 \rangle \quad (VII-34)$$

(On a utilisé le fait que $\langle g, \vec{k}_A \vec{\epsilon}_A, \vec{k}_B \vec{\epsilon}_B |$ est bra propre de $P_1 H_c P_1$ de valeur propre $h\omega_A + h\omega_B$).

③ Approximations faites

L'expression (VII-34) est exacte. Nous allons maintenant introduire un certain nombre d'approximations

(i) Nous négligeons le facteur 1 du crochet de (VII-34)

Nous nous intéressons en effet à la cascade $e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow g$.

L'atome passe intermédiairement par e_2 . ω_A et ω_B seront donc voisins de ω_{12} et ω_2 et tous les processus correspondants à un état excité intermédiaire autre que e_2 (et compris entre g et e_1) seront non résonnants pour ces valeurs de ω_A et ω_B ; ils contribueront de manière très faible à l'amplitude de transition

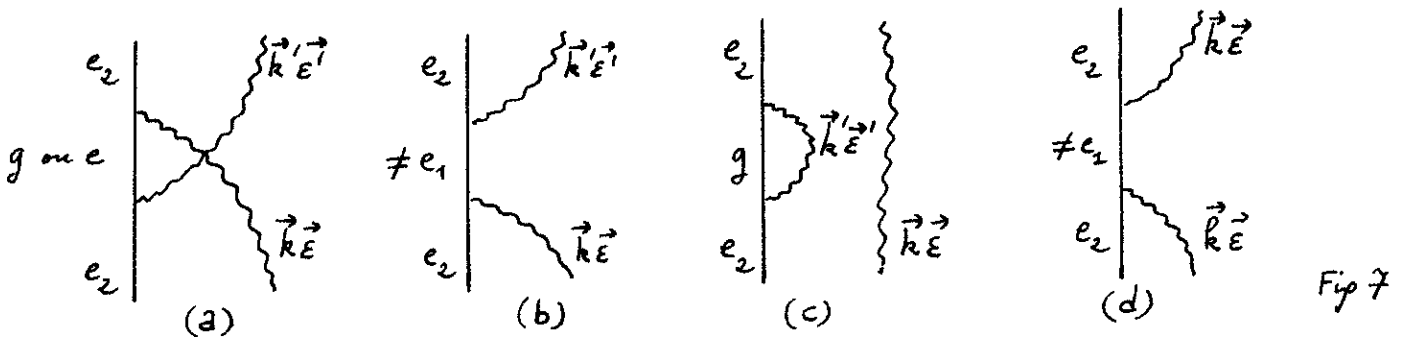
(ii) On remplace $G_1(z)$ par :

$$G_1(z) = \frac{1}{z - \hbar\omega_1 - \hbar\Delta_1 + i\hbar\frac{\Gamma_1}{2}} \quad (\text{VII-35})$$

où $\hbar\omega_1$ est l'énergie de e_1 , $\hbar\Delta_1$ et $\hbar\Gamma_1$ le Lamb-shift et la largeur naturelle de e_1 associés à l'émission spontanée d'un photon par un atome dans e_1 et qui tombe dans un état d'énergie inférieure (e_2 + tous les autres). On néglige la dépendance en z de Δ_1 et Γ_1 , ce qui revient à négliger la décroissance non exponentielle de e_1 [on remplace dans $\Delta_1(z)$ et $\Gamma_1(z)$, z par $\hbar\omega_1 + i\epsilon$].

(iii) Calcul approché de $G_2(z)$

Comme E_2 comporte plusieurs états, $G_2(z)$ a à la fois des éléments diagonaux et non diagonaux



- les éléments non diagonaux de $G_2(z)$ correspondent à la diffusion d'un photon $\vec{k}\vec{E}$ par l'atome dans l'état e_2 (voir par exemple les figures 7a et 7b). Comme on est parti de l'état $|e_1, 0\rangle$, le photon $\vec{k}\vec{E}$ a nécessairement été émis auparavant par l'atome. Cette diffusion ne peut être résonnante. le projecteur P_2 qui apparaît dans les expressions VII-11 et VII-12 de G_2 exclut par exemple que l'état intermédiaire du diagramme 7b soit e_1 , ce qui exclut toute diffusion résonnante du photon $\vec{k}\vec{E}$ (qui, ayant été émis par e_1 , a une fréquence voisine de ω_{12})
- les éléments diagonaux de G_2 correspondent à l'émission spontanée du niveau e_2 , le photon $\vec{k}\vec{E}$ étant "spectateur" (voir fig 7c), ou à la diffusion vers l'avant du photon $\vec{k}\vec{E}$ (voir 7d)
- Nous négligerons tous les processus de diffusion (non-résonnante) par l'atome d'un photon $\vec{k}\vec{E}$ émis auparavant et ne garderons que les éléments diagonaux de G_2 où le photon $\vec{k}\vec{E}$ est spectateur (fig 7c). Nous poserons donc

$$\langle e_2, \vec{k}'\vec{E}' | G_2(z) | e_2, \vec{k}\vec{E} \rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\vec{E}\vec{E}'} \frac{1}{z - \hbar\omega_2 - \hbar i\epsilon - \hbar\Delta_2 + i\hbar\frac{\Gamma_2}{2}} \quad (\text{VII-36})$$

où $\hbar\Delta_2$ et $\hbar\Gamma_2$ sont le Lamb-shift et la largeur naturelle de e_2 .

Dans les processus de la figure 7c, l'atome interagit avec tous les modes $\vec{k}'\vec{E}'$ du champ, et le fait que le mode $\vec{k}\vec{E}$ ne soit pas vide et contienne un photon introduit une correction négligeable. C'est pourquoi nous utilisons en VII-36 les quantités Δ_2 et Γ_2 relatives à l'état excité e_2 isolé.

- On voit que les éléments diagonaux de $G_2(z)$ écrits en VII-36 peuvent être de l'ordre de $1/\hbar\Delta_2$ ou $1/\hbar\Gamma_2$ au voisinage de $z = \hbar\omega_2 + \hbar\epsilon_k$. C'est ce qui justifie le fait de négliger les éléments non diagonaux de $G_2(z)$ qui sont de l'ordre de l'inverse d'une fréquence optique donc beaucoup plus petits.

(iv) Calcul approché de $R_2(z)$

On remplace $R_2(z)$ par son expression d'ordre le plus bas conduisant à un résultat non nul à partir de VII-34, c-à-d par V.

Les 4 approximations précédentes conduisent alors à l'expression suivante:

$$\frac{\langle g, \vec{k}_A \vec{E}_A, \vec{k}_B \vec{E}_B | V | e_2, \vec{k}_B \vec{E}_B \rangle \langle e_2, \vec{k}_B \vec{E}_B | V | e_1, 0 \rangle}{(z - \hbar\omega_A - \hbar\omega_B)(z - \hbar\omega_2 - \hbar\omega_B - \hbar\Delta_2 + i\hbar\frac{\Gamma_2}{2})(z - \hbar\omega_1 - \hbar\Delta_1 + i\hbar\frac{\Gamma_1}{2})} + \text{Terme analogue } A \rightleftharpoons B \quad (VII-37)$$

pour l'élément de matrice de ρ, G, P_1 entre $|i\rangle$ et $\langle f|$. Les 2 termes de (VII-37) correspondent aux 2 ordres possibles d'émission des 2 photons $\hbar\omega_A$ et $\hbar\omega_B$ (voir figures 8a et 8b)

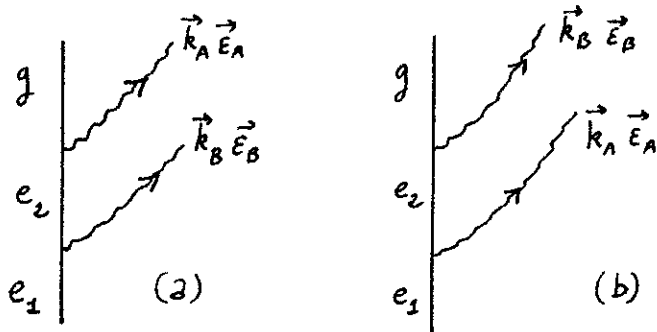


Fig. 8

(4) Calcul de l'amplitude de transition

On s'intéresse à la distribution spectrale du rayonnement émis, c-à-d à la limite $t \rightarrow \infty$ de l'amplitude de transition. Lors de l'intégration le long du contour C_+ , seul le pôle sur l'axe réel de (VII-37), en $z = \hbar\omega_A + \hbar\omega_B$, donne une contribution qui ne tend pas vers zéro quand $t \rightarrow \infty$ (les contributions des pôles associés aux états instables décroissent exponentiellement en $e^{-\Gamma_1 t/2}$ et $e^{-\Gamma_2 t/2}$). On obtient donc finalement pour l'amplitude de transition

$$\frac{V_{ge_2}^A V_{e_2e_1}^B}{(\omega_A - \omega_2 - \Delta_2 + i\frac{\Gamma_2}{2})(\omega_A + \omega_B - \omega_1 - \Delta_1 + i\frac{\Gamma_1}{2})} + \frac{V_{ge_2}^B V_{e_2e_1}^A}{(\omega_B - \omega_2 - \Delta_2 + i\frac{\Gamma_2}{2})(\omega_A + \omega_B - \omega_1 - \Delta_1 + i\frac{\Gamma_1}{2})} \quad (VII-38)$$

où $V_{\alpha\beta}^c = \langle \alpha, \vec{k}_c \vec{E}_c | V | \beta, 0 \rangle \quad (VII-39)$

est l'élément de matrice correspondant à l'émission d'un photon $\vec{k}_c \vec{E}_c$ par l'atome tombant de β à α . Nous négligerons la variation des V avec l'énergie des photons dont ils décrivent l'émission car cette variation est lente devant celle des dénominateurs.

La règle pour obtenir (VII-38) à partir des diagrammes (8a) et (8b) est simple. On ajoute aux énergies des états instables les énergies complexes $\Delta_1 - i\frac{\Gamma_1}{2}$ et $\Delta_2 - i\frac{\Gamma_2}{2}$, et on calcule la valeur des propagateurs correspondant à (8a) et (8b) pour l'énergie $\hbar\omega_A + \hbar\omega_B$ de l'état final qui est stable.

⑤ Distribution spectrale du rayonnement émis

- En élevant (VII-38) au carré (en module), on obtient la probabilité $I(\omega_A, \omega_B)$ d'avoir 2 photons émis de fréquences ω_A et ω_B . On a d'après (VII-38):

$$I(\omega_A, \omega_B) = I(\omega_B, \omega_A) \tag{VII-40}$$

- Un spectromètre ne mesure pas les corrélations entre les fréquences des 2 photons émis, mais la probabilité pour que l'un quelconque des 2 photons ait la fréquence ω_A . Un tel instrument mesure donc la densité spectrale réduite:

$$I(\omega_A) = \int d\omega_B I(\omega_A, \omega_B) \tag{VII-41}$$

- En élevant (VII-38) au carré (en module), et en effectuant l'intégrale sur ω_B par la méthode des résidus, on obtient aisément:

$$I(\omega_A) \sim \frac{|V_{ge_2}^A V_{e_2e_1}^B|^2}{\Gamma_1} \frac{1}{(\omega_A - \tilde{\omega}_2)^2 + (\frac{\Gamma_2}{2})^2} + \frac{|V_{ge_2}^B V_{e_2e_1}^A|^2 (\Gamma_1 + \Gamma_2)}{\Gamma_1 \Gamma_2} \frac{1}{(\omega_A - \tilde{\omega}_{12})^2 + (\frac{\Gamma_1 + \Gamma_2}{2})^2} - \frac{1}{\Gamma_2} 2\text{Re} \frac{V_{ge_2}^{B*} V_{e_2e_1}^{A*} V_{ge_2}^A V_{e_2e_1}^B}{(\omega_A - \tilde{\omega}_2 + i\frac{\Gamma_2}{2})(\omega_A - \tilde{\omega}_{12} + i\frac{\Gamma_1 + \Gamma_2}{2})} \tag{VII-42}$$

où l'on a posé

$$\begin{cases} \tilde{\omega}_2 = \omega_2 + \Delta_2 \\ \tilde{\omega}_{12} = \omega_1 + \Delta_1 - \omega_2 - \Delta_2 \end{cases} \tag{VII-43}$$

- Les 3 termes de (VII-42) proviennent respectivement du carré du 1^{er} terme de (VII-38), du carré du 2^{em} terme de (VII-38) et du double produit (terme d'interférence entre 8a et 8b)

(i) Cas de 3 niveaux e_1, e_2, g non-équirépartis: $|\tilde{\omega}_{12} - \tilde{\omega}_2| \gg \Gamma_1, \Gamma_2$

Les 2 parenthèses du dénominateur du 3^{em} terme de (VII-42) ne peuvent jamais être simultanément petites. Le terme d'interférence de (VII-42) est donc plus petit que les 2 termes carrés par un facteur de l'ordre de $|\Gamma / (\tilde{\omega}_2 - \tilde{\omega}_{12})| \ll 1$. Nous le négligerons.

La distribution spectrale du rayonnement émis consiste donc en 2 courbes de Lorentz (fig. 9)

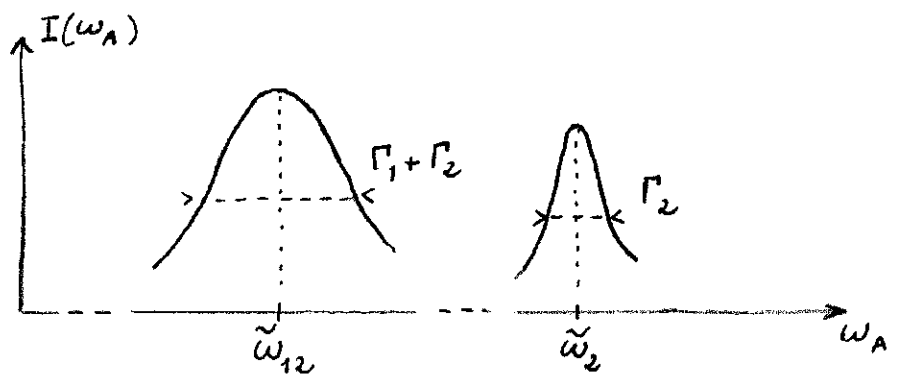


Fig 9

On obtient une courbe centrée en $\tilde{\omega}_2 = \omega_2 + \Delta_2$, de largeur Γ_2 (transition $e_2 \leftrightarrow g$) et une autre courbe centrée en $\tilde{\omega}_{12} = \omega_1 + \Delta_1 - \omega_2 - \Delta_2$ de largeur $\Gamma_1 + \Gamma_2$ (transition $e_1 \leftrightarrow e_2$). Une transition reliant 2 niveaux instables est donc déplacé d'une quantité égale à la différence entre les Lamb-shifts des 2 états; elle a pour largeur la somme des largeurs naturelle des 2 états.

(ii) Cas de 3 niveaux équidistants ($|\tilde{\omega}_{12} - \tilde{\omega}_2| \lesssim \Gamma_1, \Gamma_2$)

Cette fois le terme d'interférence de VII-42 est important, et il faut le garder car il peut modifier profondément les prévisions précédentes. Nous allons illustrer ce point en étudiant plus en détail l'émission spontanée d'un oscillateur harmonique.

E. Emission spontanée d'un oscillateur harmonique

① Largeur naturelle et Lamb-shift du niveau $|\varphi_n\rangle$

A l'approximation dipolaire électrique, la largeur naturelle et le Lamb-shift du niveau d'énergie $|\varphi_n\rangle$ d'un oscillateur harmonique sont proportionnels à $|\langle \varphi_{n-1} | X | \varphi_n \rangle|^2$, c.-à-d. à n .

Un déplacement du niveau $|\varphi_n\rangle$, proportionnel à n , ne modifie pas l'équidistance entre les niveaux d'énergie. Nous supposons le Lamb-shift réinclus dans la fréquence ω_0 de l'oscillateur. La largeur naturelle Γ_n du niveau $|\varphi_n\rangle$ sera notée

$$\Gamma_n = n \Gamma \quad (VII-44)$$

où Γ est la largeur naturelle du niveau $|\varphi_1\rangle$

Une généralisation brutale des résultats obtenus au § D5 précédent laisserait croire que la raie émise par l'oscillateur tombant de $|\varphi_n\rangle$ à $|\varphi_{n-1}\rangle$ a une largeur égale à $\Gamma_n + \Gamma_{n-1} = (2n-1)\Gamma$, ce qui signifierait que la largeur spectrale du rayonnement émis par un oscillateur croît avec l'excitation de cet oscillateur. Un tel résultat est faux comme nous allons le voir maintenant.

② Raie émise par l'oscillateur initialement excité en $|\varphi_1\rangle$

C'est une lorentzienne centrée en ω_0 et de largeur Γ

③ Raie émise par l'oscillateur initialement excité en $|\varphi_2\rangle$

On a alors une cascade $|\varphi_2\rangle \rightarrow |\varphi_1\rangle \rightarrow |\varphi_0\rangle$. Les 2 diagrammes analogues à ceux de la figure 8 sont représentés en 10.

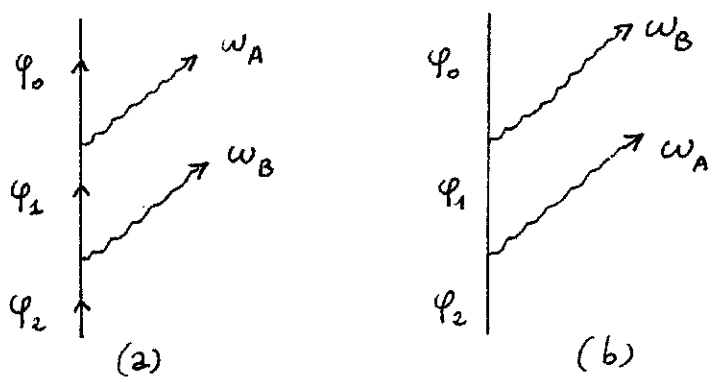


Fig 10

Comme les 3 niveaux $|\varphi_2\rangle, |\varphi_1\rangle, |\varphi_0\rangle$ sont équidistants les 2 diagrammes (10 a) et (10 b) peuvent être simultanément importants quand ω_A et ω_B sont voisins de ω_0 , de sorte que le carré de leur somme n'est pas égal à la somme de leur carrés. Pour le montrer, appliquons la formule (VII-38) au cas qui nous intéresse ici. On obtient pour l'amplitude globale de transition une quantité proportionnelle à :

$$\frac{\sqrt{1} \sqrt{2}}{(\omega_A - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})(\omega_A + \omega_B - 2\omega_0 + i\Gamma)} + \frac{\sqrt{1} \sqrt{2}}{(\omega_B - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})(\omega_A + \omega_B - 2\omega_0 + i\Gamma)} =$$

$$\frac{\sqrt{2}}{(\omega_A + \omega_B - 2\omega_0 + i\Gamma)} \left(\frac{1}{\omega_A - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2}} + \frac{1}{\omega_B - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2}} \right) = \frac{\sqrt{2}}{(\omega_A - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})(\omega_B - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})} \quad (VII-45)$$

On voit que la somme des 2 amplitudes associées à (10-a) et (10-b) se factorise et que les fréquences des 2 photons émis en cascade sont non-correlées. En élevant au carré (VII-45) et en intégrant sur ω_B , on trouve que la distribution spectrale du rayonnement émis est simplement :

$$\frac{1}{(\omega_A - \omega_0)^2 + (\frac{\Gamma}{2})^2} \quad (VII-46)$$

c.-à-d. une lorentzienne centrée en ω_0 et de largeur Γ (comme pour le cas de l'excitation en $|\varphi_1\rangle$). C'est donc bien le terme d'interférence entre (10 a) et (10 b) qui fait disparaître la raie de largeur 3Γ et centrée en ω_0 qui provient de l'intégration sur ω_B du carré de l'amplitude associée à (10 b).

④ Raie émise par l'oscillateur initialement excité en $|\varphi_3\rangle$

- Il y a maintenant $n! = 3! = 6$ amplitudes différentes correspondant aux 6 ordres possibles d'émission des photons $\omega_A, \omega_B, \omega_C$. Ces amplitudes se calculent au moyen de la

formule (VII-30) et des mêmes approximations que celles effectuées au § D-3. Comme dans ce §, on trouve qu'il suffit d'ajouter l'énergie complexe $-i\Gamma/2$ à l'énergie de chaque état intermédiaire instable $|\varphi_n\rangle$ et d'évaluer le propagateur correspondant à un diagramme donné pour la valeur de l'énergie de l'état stable final, qui vaut ici $\hbar\omega_A + \hbar\omega_B + \hbar\omega_C$. Ainsi l'amplitude associée au diagramme de la figure 11 vaut

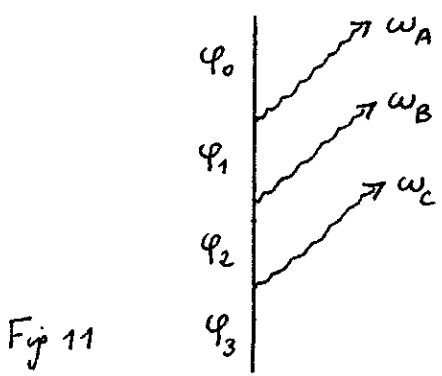


Fig 11

$$\sqrt{3!} \frac{1}{(\omega_A - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})} \frac{1}{(\omega_A + \omega_B - 2\omega_0 + i\Gamma)} \frac{1}{(\omega_A + \omega_B + \omega_C - 3\omega_0 + 3i\frac{\Gamma}{2})} \quad (VII-47)$$

Il faut maintenant sommer (VII-47) sur toutes les permutations possibles des 3 photons $\omega_A, \omega_B, \omega_C$

- Sommons tout d'abord sur les $2!$ permutations laissant inchangé le 1^{er} photon émis ω_c . D'après les résultats du § 3 précédent:

$$\sum_{\text{perm } A, B} \frac{1}{(\omega_A - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})(\omega_A + \omega_B - 2\omega_0 + i\Gamma)} = \frac{1}{(\omega_A - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})(\omega_B - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})} \quad (VII-48)$$

En multipliant haut et bas (VII-48) par $(\omega_c - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})$, on obtient pour amplitude de probabilité de l'ensemble des processus où le 1^{er} photon émis est ω_c [somme de VII-47 sur les permutations de A, B]:

$$\sqrt{3!} \frac{1}{\omega_A + \omega_B + \omega_c - 3\omega_0 + 3i\frac{\Gamma}{2}} \times \frac{\omega_c - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2}}{(\omega_A - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})(\omega_B - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})(\omega_c - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})} \quad (VII-49)$$

- Il faut maintenant sommer $n=3$ expressions analogues à (VII-49) et différent par la fréquence ω_c du 1^{er} photon émis. Ces 3 expressions ont même dénominateur. Il suffit donc d'ajouter les numérateurs

$$\sum (\omega_c - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2}) = \omega_A + \omega_B + \omega_c - 3\omega_0 + 3i\frac{\Gamma}{2} \quad (VII-50)$$

ce qui simplifie le 1^{er} dénominateur de (VII-49) et donne finalement pour l'amplitude de transition globale

$$\frac{\sqrt{3!}}{(\omega_A - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})(\omega_B - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})(\omega_c - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})} \quad (VII-51)$$

⑤ Généralisation : oscillateur initialement dans l'état $|\varphi_n\rangle$

Le raisonnement précédent se généralise aisément par récurrence. On somme d'abord sur les $(n-1)!$ processus laissant inchangé le 1^{er} photons émis, ce qui permet d'utiliser la factorisation supposée valable pour une excitation initiale du niveau $|\varphi_{n-1}\rangle$. Puis on somme l'expression ainsi obtenue (et analogue de VII-49) sur les n fréquences possibles du 1^{er} photon émis, ce qui permet d'éliminer le dénominateur $(\omega_A + \omega_B + \dots + \omega_N - n\omega_0 + ni\frac{\Gamma}{2})$ et d'obtenir l'amplitude

$$\frac{\sqrt{n!}}{(\omega_A - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})(\omega_B - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2}) \dots (\omega_N - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2})} \quad (VII-52)$$

Les N photons émis ont des fréquences non-corrélés. La distribution spectrale du rayonnement émis, obtenue en élevant (VII-52) au carré et en intégrant sur $\omega_B, \omega_C, \dots, \omega_N$ est toujours une lorentzienne centrée en ω_0 et de largeur Γ .

Références sur les opérateurs de projection

- 1 - Cours de N. KROLL dans les Houches 64.
- 2 - L. MOWER Phys. Rev. 142, 799 (1966) et 165, 195 (1968)
- 3 - A.S. GOLDHABER and K.M. WATSON Phys. Rev. 160, 1151 (1967)

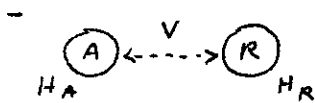
Autres problèmes intéressants non abordés

- Corrélations entre les polarisations de 2 photons émis dans une cascade.
- Corrélations angulaire perturbées par un champ magnétique

Equation pilote décrivant l'évolution

d'un petit système A couplé à un grand réservoir R

A - Introduction - Opérateur densité réduit du petit système.



Un petit système A, d'hamiltonien H_A , est couplé par V à un grand "réservoir" R d'hamiltonien H_R . Le problème est de décrire l'évolution de A

$$\text{Hamiltonien} \quad H = H_A + H_R + V \quad (\text{VIII-1})$$

Tous les opérateurs de A commutent avec ceux de R

- Opérateur densité ρ du système global A+R

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = [H, \rho] \quad (\text{VIII-2})$$

$$\langle G \rangle = \text{Tr}_{A,R} G \rho = \sum_{m,\alpha} \langle m, \alpha | G \rho | m, \alpha \rangle \quad (\text{VIII-3})$$

Tr_A (Tr_R) : Trace sur les variables de A (R)

$\{|m\rangle\}$: base orthonormée dans l'espace des états E_A de A (indices latins pour A)

$\{|\alpha\rangle\}$: " " " " " " E_R de R (indices grecs pour R)

- Supposons qu'on soit intéressé seulement par des observables G_A de A

$$\begin{aligned} \langle G_A \rangle &= \text{Tr}_{A,R} G_A \rho = \sum_{\substack{m,\alpha \\ m',\alpha'}} \underbrace{\langle m\alpha | G_A | m'\alpha' \rangle}_{\langle m | G_A | m' \rangle \delta_{\alpha\alpha'}} \langle m'\alpha' | \rho | m\alpha \rangle \\ &= \sum_{m,m'} \langle m | G_A | m' \rangle \sum_{\alpha} \langle m'\alpha | \rho | m\alpha \rangle \end{aligned} \quad (\text{VIII-4})$$

A partir de ρ , opérateur de $E_A \otimes E_R$, on peut introduire un opérateur σ_A de E_A défini par :

$$\langle m' | \sigma_A | m \rangle = \sum_{\alpha} \langle m'\alpha | \rho | m\alpha \rangle \quad (\text{VIII-5})$$

σ_A est appelé "opérateur densité réduit" de A et est obtenu à partir de ρ par "trace partielle sur R".

$$\rho \Rightarrow \sigma_A = \text{Tr}_R \rho \quad (\text{VIII-6})$$

De (VIII-4) et (VIII-5) on déduit :

$$\langle G_A \rangle = \sum_{m,m'} \langle m | G_A | m' \rangle \langle m' | \sigma_A | m \rangle = \text{Tr} G_A \sigma_A \quad (\text{VIII-7})$$

Toutes les prévisions relatives aux grandeurs de A peuvent être calculées à partir de l'opérateur densité réduit σ_A dans E_A .

- Si l'on s'intéresse uniquement aux observables de A, il est préférable d'essayer d'obtenir à partir de (VIII-2) une équation d'évolution pour σ_A , plutôt que d'essayer de résoudre (VIII-2), ce qui est beaucoup plus compliqué (puisque VIII-2 donne aussi des informations sur R)

$$\frac{d}{dt} \rho = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho] \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \sigma_A = \frac{d}{dt} \text{Tr}_R \rho = ? \quad (\text{VIII-8})$$

L'équation donnant $d\sigma_A/dt$ est appelée "équation pilote de A" et décrit la "relaxation" de A sous l'effet du couplage de A avec R.

Il est important de réaliser que, bien que l'évolution de ρ soit décrite par un hamiltonien H, ceci n'est pas en général le cas pour σ_A .

En d'autres termes, il n'est pas possible de trouver un opérateur hermitique H_A de E_A tel que $d\sigma_A/dt = [H_A, \sigma_A]/i\hbar$. Ceci est dû au fait que V dépend à la fois des opérateurs de A et R . Lorsqu'on trace sur R le membre de droite de (VIII-2), on obtient un terme difficile $\text{Tr}_R[V, \rho]$ qui ne peut être exprimé simplement en fonction de σ_A . Ce caractère "non-hamiltonien" de l'évolution de σ_A introduit une certaine irréversibilité dans le comportement de A .

- Dans ce chapitre, nous essayons d'établir une équation pilote pour σ_A dans des conditions où un traitement perturbatif de V est possible. De manière plus précise, nous allons montrer que, quand le temps de corrélation τ_c de la force exercée par R sur A est suffisamment court, il est possible de ne considérer qu'un processus d'interaction entre A et R durant ce temps τ_c .
- Auparavant, nous allons montrer qu'on peut récrire l'équation (VIII-2) comme une équation de Schrödinger ordinaire dans un espace plus grand que l'espace des états E et appelé espace de Liouville \mathcal{L} .

B- Généralités sur l'espace de Liouville

① Définition - Notations

- Soit E l'espace des états d'un système quantique. Les opérateurs agissant dans E forment un espace vectoriel \mathcal{L} appelé espace de Liouville.
- Les vecteurs de E sont notés $| \cdot \rangle$.
- Les vecteurs de \mathcal{L} , c.à.d. les opérateurs de E , sont notés $| \gg$.
- Exemples de vecteurs de \mathcal{L}
 - Opérateur densité $| \rho \gg$
 - Opérateur $| n \rangle \langle m |$ de $E \longrightarrow$ vecteur de \mathcal{L} noté $| n m^+ \gg$

② Produit scalaire dans \mathcal{L}

(i) Définition $\ll B | A \gg = \text{Tr } B^+ A$ (VIII-9)

(ii) Propriétés

- Linéaire par rapport au ket $| \gg$, antilinéaire par rapport au bra $\ll |$
- $\ll A | B \gg = \text{Tr } A^+ B = \sum_{n,k} \langle u_n | A^+ | u_k \rangle \langle u_k | B | u_n \rangle$
 $= (\sum_{n,k} \langle u_n | B^+ | u_k \rangle \langle u_k | A | u_n \rangle)^* = (\text{Tr } B^+ A)^* = \ll B | A \gg^*$
- $\hookrightarrow \ll A | B \gg = \ll B | A \gg^*$ (VIII-10)
- $\ll A | A \gg = \text{Tr } A^+ A = \sum_{k,n} \langle u_k | A^+ | u_n \rangle \langle u_n | A | u_k \rangle$
 $= \sum_{k,n} |\langle u_n | A | u_k \rangle|^2$
- $\hookrightarrow \ll A | A \gg \geq 0$ nul si et seulement si $A=0$ (VIII-11)

Remarque

$\{|n\rangle\}$ étant une base orthonormée de E , soit $|1\rangle$ le vecteur de \mathcal{L} défini par $|1\rangle = \sum_n |n, n^+\rangle$ (VIII-12)

$\ll 1 | A \gg = \text{Tr } \sum_n |n\rangle \langle n| A = \text{Tr } A$ (VIII-13)

③ Exemple de base orthonormée de \mathcal{L}

- $\{|n\rangle\}$ étant une base orthonormée de E , tout opérateur de E peut être développé sur les $|n\rangle\langle m|$

$$A = \sum_{n,m} A_{nm} |n\rangle\langle m| \quad (\text{VIII-14})$$

- Tous les vecteurs de \mathcal{L} peuvent donc être développés sur les $|n, m^+\rangle$

$$A = \sum_{n,m} A_{nm} |n, m^+\rangle \quad (\text{VIII-15})$$

les vecteurs de \mathcal{L} sont repérés par 2 indices.

$$\begin{aligned} \langle n', m'^+ | n, m^+ \rangle &= \text{Tr} (|n'\rangle\langle m'|)^+ |n\rangle\langle m| = \text{Tr} |m'\rangle \langle n'|n\rangle \langle m| \\ &= \delta_{n'n} \text{Tr} |m'\rangle\langle m| = \delta_{n'n} \langle m|m'\rangle = \delta_{n'n} \delta_{m'm} \end{aligned} \quad (\text{VIII-16})$$

$\{|n, m^+\rangle\}$ est donc une base orthonormée de \mathcal{L}

④ Opérateurs de \mathcal{L}

Un opérateur de \mathcal{L} fait correspondre à un vecteur de \mathcal{L} , c-à-d à un opérateur de E , un autre vecteur de \mathcal{L} , c-à-d un autre opérateur de E .
les opérateurs O de \mathcal{L} sont repérés par 4 indices

$$\langle n', m'^+ | O | n, m^+ \rangle = O_{n'm', nm} \quad (\text{VIII-17})$$

⑤ Exemple important d'opérateurs de \mathcal{L} : Opérateur de Liouville L

(i) Définition.

A partir de l'opérateur hamiltonien H agissant dans E , on définit l'opérateur de Liouville L agissant dans \mathcal{L} . L est défini par son action sur n'importe quel vecteur $|\rho\rangle$ de \mathcal{L} (ρ est un opérateur de E)

$$L |\rho\rangle = |[H, \rho]\rangle = |H\rho - \rho H\rangle \quad (\text{VIII-18})$$

(ii) Intérêt de L .

- L'équation d'évolution de ρ , VIII-2, peut être réécrite dans \mathcal{L} , compte tenu de (VIII-18), sous la forme

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\rho\rangle = L |\rho\rangle \quad (\text{VIII-19})$$

qui ressemble à une équation de Schrödinger ordinaire.

- De même l'équation d'évolution d'une observable A de E , dans le point de vue de Heisenberg

$$i\hbar \frac{d}{dt} A = [A, H] \quad (\text{VIII-20})$$

peut se réécrire

$$i\hbar \frac{d}{dt} |A\rangle = -L |A\rangle \quad (\text{VIII-21})$$

Noter la différence de signe entre (VIII-19) et (VIII-21).

(iii) Hermiticité de L .

$$\langle B | L | A \rangle = \langle B | HA - AH \rangle = \text{Tr} B^+ H A - \text{Tr} B^+ A H \quad (\text{VIII-22})$$

$$\langle A | L | B \rangle = \langle A | HB - BH \rangle = \text{Tr} A^+ H B - \text{Tr} A^+ B H \quad (\text{VIII-23})$$

$$\begin{aligned} \text{Or } \text{Tr} A^+ H B &= \text{Tr} A^+ H^+ B \text{ (car } H=H^+) = \text{Tr} (HA)^+ B = \langle HA | B \rangle \\ &= \langle B | HA \rangle^* = (\text{Tr} B^+ H A)^* \end{aligned} \quad (\text{VIII-24})$$

De même

$$T_2 A^\dagger B H = T_2 H A^\dagger B = T_2 H^\dagger A^\dagger B = T_2 (A H)^\dagger B = \langle\langle A H | B \rangle\rangle = \langle\langle B | A H \rangle\rangle^* = (T_2 B^\dagger A H)^* \quad (VIII-25)$$

En reportant (VIII-24) et (VIII-25) dans (VIII-22) et (VIII-23), on obtient :

$$\langle\langle B | L | A \rangle\rangle = (\langle\langle A | L | B \rangle\rangle)^* \quad \forall A, B \quad (VIII-26)$$

et donc

$$L = L^\dagger$$

- généralisation : à tout opérateur hermitique G de E , on peut associer un opérateur hermitique g de \mathcal{L} par

$$g | \rho \rangle\rangle = | [G, \rho] \rangle\rangle \quad (VIII-27)$$

On peut ainsi introduire les opérateurs impulsion, moment cinétique dans \mathcal{L} .

(iv) Forme de L dans la base $|n, m\rangle\rangle$ construite à partir des états propres de H

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (VIII-28)$$

$$L |n, m\rangle\rangle = | (H |n\rangle \langle m| - |n\rangle \langle m| H) \rangle\rangle = | (E_n - E_m) |n\rangle \langle m| \rangle\rangle = \hbar \omega_{nm} |n, m\rangle\rangle \quad (VIII-29)$$

les valeurs propres de L sont les fréquences de Bohr du système (à \hbar près), les vecteurs propres les $|n, m\rangle\rangle$

$$\langle\langle n', m' | L | n, m \rangle\rangle = \delta_{n'n} \delta_{m'm} \hbar \omega_{nm} \quad (VIII-30)$$

(v) Intégration de l'équation de Liouville lorsque H indépendant du temps

- Solution de $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$ lorsque H est indépendant de t

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle \quad (VIII-31)$$

- On en déduit

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle \langle \psi(0)| e^{iHt/\hbar} \quad (VIII-32)$$

relation vraie non seulement pour un cas pur mais un mélange statistique

$$\rho(t) = e^{-iHt/\hbar} \rho(0) e^{iHt/\hbar} \quad (VIII-33)$$

- D'autre part, la solution de $i\hbar \frac{d}{dt} |\rho\rangle\rangle = L |\rho\rangle\rangle$ pour L indépendant du temps est

$$|\rho(t)\rangle\rangle = e^{-iLt/\hbar} |\rho(0)\rangle\rangle \quad (VIII-34)$$

En comparant (VIII-33) et (VIII-34), on obtient

$$e^{-iLt/\hbar} |\rho\rangle\rangle = | e^{-iHt/\hbar} \rho e^{iHt/\hbar} \rangle\rangle \quad (VIII-35)$$

- Autre démonstration. De (VIII-18), on déduit :

$$L |\rho\rangle\rangle = | [H, \rho] \rangle\rangle$$

$$L^2 |\rho\rangle\rangle = | [H, [H, \rho]] \rangle\rangle$$

$$\vdots$$

$$L^n |\rho\rangle\rangle = | [H, [H, \dots [H, \rho] \dots]] \rangle\rangle$$

n commutateurs imbriqués

de sorte qu'on peut écrire

$$e^{-iLt/\hbar} |\rho\rangle\rangle = \sum_n \frac{1}{n!} \left(\frac{-it}{\hbar}\right)^n L^n |\rho\rangle\rangle = \sum_n \frac{1}{n!} \left(\frac{-it}{\hbar}\right)^n | [H, [H, \dots [H, \rho] \dots]] \rangle\rangle = e^{-iHt/\hbar} \rho e^{iHt/\hbar} \quad (VIII-36)$$

C. Etablissement de l'équation d'évolution de σ_A .

① Etat initial à $t=0$

Nous ferons 2 hypothèses sur cet état initial

Hypothèse 1 : L'opérateur densité du système global est factorisé à $t=0$

$$\rho(0) = \sigma_A(0) \otimes \sigma_R(0) \tag{VIII-37}$$

Nous verrons plus loin que cette hypothèse n'est pas très restrictive.

Hypothèse 2 : $\sigma_R(0)$ commute avec H_R

$$[\sigma_R(0), H_R] = 0 \tag{VIII-38}$$

$\sigma_R(0)$ et H_R peuvent donc être simultanément diagonalisés. Un exemple important est celui d'un réservoir en équilibre thermodynamique pour lequel on a $\sigma_R(0) \sim e^{-H_R/KT}$

② Introduction d'un opérateur de projection P dans l'espace de Liouville \mathcal{L}

(i) Définition de P

- A tout vecteur $|\rho\rangle\rangle$ de l'espace de Liouville du système global $\mathcal{L}_A \otimes \mathcal{L}_R$, P associe un autre vecteur par la relation :

$$P|\rho\rangle\rangle = |\sigma_R(0)\rangle\rangle \otimes T_{2R} \rho \tag{VIII-39}$$

On prend la trace sur R de ρ , ce qui donne un opérateur de E_A , c-à-d un vecteur de \mathcal{L}_A , puis on multiplie ce vecteur de \mathcal{L}_A par le vecteur $\sigma_R(0)$ de \mathcal{L}_R .

- Calculons $P^2|\rho\rangle\rangle$

$$\begin{aligned} P^2|\rho\rangle\rangle &= P(P|\rho\rangle\rangle) = |\sigma_R(0)\rangle\rangle \otimes T_{2R} [|\sigma_R(0)\rangle\rangle \otimes T_{2R} \rho] \rangle\rangle \\ &= (T_{2R} \sigma_R(0)) |\sigma_R(0)\rangle\rangle \otimes T_{2R} \rho \rangle\rangle = (T_{2R} \sigma_R(0)) P|\rho\rangle\rangle \end{aligned} \tag{VIII-40}$$

Si, comme nous le supposons à partir de maintenant

$$T_{2R} \sigma_R(0) = 1 \tag{VIII-41}$$

on a

$$P^2 = P \tag{VIII-42}$$

P est un projecteur.

Si l'on pose :

$$Q = 1 - P \tag{VIII-43}$$

on déduit de (VIII-42) :

$$PQ = QP = 0 \quad Q^2 = Q \tag{VIII-44}$$

- Remarque : Ecriture de P en notations de Dirac

D'après (VIII-13), on a : $T_{2R} \rho = \langle\langle 1_R | \rho \rangle\rangle$ (VIII-45)

$|1_R\rangle\rangle$ appartient à \mathcal{L}_R (c'est l'opérateur unité de E_R), alors que ρ appartient à $\mathcal{L}_A \otimes \mathcal{L}_R$. Le produit scalaire d'un vecteur de $\mathcal{L}_A \otimes \mathcal{L}_R$ par un vecteur de \mathcal{L}_R donne un vecteur de \mathcal{L}_A . Donc, on peut écrire :

$$P = |\sigma_R(0)\rangle\rangle \langle\langle 1_R | \tag{VIII-46}$$

On a bien en effet $P|\rho\rangle\rangle = |\sigma_R(0)\rangle\rangle \langle\langle 1_R | \rho \rangle\rangle = |\sigma_R(0)\rangle\rangle \otimes T_{2R} \rho \rangle\rangle$.

On voit à partir de (VIII-46) que $P^\dagger = |1_R\rangle\rangle \langle\langle \sigma_R(0) | \neq P$. P n'est donc pas hermitique (ce n'est pas un projecteur orthogonal)

(ii) Intérêt de P

Si, en appliquant les projecteurs P et $1-P$ à l'équation de Liouville (VIII-19), on arrive à obtenir une équation d'évolution pour $P|\rho\rangle\rangle$,

on aura du même coup trouvé l'équation d'évolution de $\sigma_A(t) = T_{2R} \rho(t)$, puisque l'autre partie de $P|P\rangle\rangle$, $\sigma_R(0)$, n'évolue pas. C'est ce que nous ferons au § 4. Auparavant, précisons les hypothèses sur L ainsi que les relations de commutation de L et P .

(3) Opérateurs de Liouville L du système global.

Comme $H = H_A + H_R + VAR$, on a :

$$L = L_A + L_R + L_{AR} \quad (\text{VIII-47})$$

(i) Montrons tout d'abord que L_A et P commutent.

Comme L_A et P sont linéaires et que tout vecteur de $\mathcal{L}_A \otimes \mathcal{L}_R$ est une somme de produits $|P_A \otimes P_R\rangle\rangle$ d'un vecteur de \mathcal{L}_A par un vecteur de \mathcal{L}_R , il suffit de comparer l'action de $P L_A$ et $L_A P$

$$P L_A |P_A \otimes P_R\rangle\rangle = P |(L_A P_A) \otimes P_R\rangle\rangle = (T_{2R} P_R) |(L_A P_A) \otimes \sigma_R(0)\rangle\rangle \quad (\text{VIII-48})$$

$$L_A P |P_A \otimes P_R\rangle\rangle = (T_{2R} P_R) L_A |P_A \otimes \sigma_R(0)\rangle\rangle = (T_{2R} P_R) |(L_A P_A) \otimes \sigma_R(0)\rangle\rangle \quad (\text{VIII-49})$$

On en déduit $P L_A = L_A P$ (VIII-50)

(ii) Étudions maintenant $P L_R$ et $L_R P$.

$$P L_R |P_A \otimes P_R\rangle\rangle = P |P_A \otimes (L_R P_R)\rangle\rangle = (T_{2R} L_R P_R) |P_A \otimes \sigma_R(0)\rangle\rangle \quad (\text{VIII-51})$$

Or, d'après (VIII-18), $L_R P_R = [H_R, P_R]$. Comme la trace d'un commutateur est nulle, $T_{2R} L_R P_R = 0$, et par suite :

$$P L_R = 0 \quad (\text{VIII-52})$$

$$\begin{aligned} L_R P |P_A \otimes P_R\rangle\rangle &= (T_{2R} P_R) L_R |P_A \otimes \sigma_R(0)\rangle\rangle = (T_{2R} P_R) |P_A \otimes L_R \sigma_R(0)\rangle\rangle \\ &= (T_{2R} P_R) |P_A \otimes [H_R, \sigma_R(0)]\rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{VIII-53})$$

D'après l'hypothèse 2 sur $\sigma_R(0)$, $L_R \sigma_R(0) = [H_R, \sigma_R(0)] = 0$ (voir VIII-38) et par suite

$$L_R P = 0 \quad (\text{VIII-54})$$

(VIII-52) est toujours vrai. (VIII-54) ne l'est que si H_R et $\sigma_R(0)$ commutent.

(iii) Hypothèse 3 sur VAR

- Nous supposons que : $T_{2R}(VAR \sigma_R(0)) = 0$ (VIII-55)

- Interprétation : $T_{2R}(VAR \sigma_R(0))$ est un opérateur de E_A qui représente l'énergie de A dans le potentiel moyen exercé par R sur A lorsque R est dans l'état décrit par $\sigma_R(0)$ (analogue à un "potentiel de Hartree"). Nous supposons donc ici que ce potentiel moyen est nul. Si ce n'était pas le cas, il serait facile de rajouter à l'équation jolote, un commutateur décrivant l'effet de ce potentiel de Hartree.

- Mathématiquement, (VIII-55) est réalisé si VAR n'a pas d'éléments diagonaux dans la base où $\sigma_R(0)$ et H_R sont diagonaux. Dans le cas de l'émission spontanée par exemple, VAR est une combinaison linéaire d'opérateurs a et a^\dagger qui n'ont pas d'éléments diagonaux dans la base des nombres d'occupations ($\sigma_R(0) = |0\rangle\langle 0|$).

(iv) Conséquence de cette hypothèse 3

Montrons que $P L_{AR} P = 0$ (VIII-56)

$$\begin{aligned}
 P L_A R P | \rho_A \otimes \rho_R \rangle \rangle &= (T_{2R} P_R) P L_A R | \rho_A \otimes \sigma_R(0) \rangle \rangle = \\
 &= (T_{2R} P_R) P | [V_{AR}, \rho_A \otimes \sigma_R(0)] \rangle \rangle = \\
 &= (T_{2R} P_R) | T_{2R} (V_{AR} \rho_A \sigma_R(0) - \rho_A \sigma_R(0) V_{AR}) \otimes \sigma_R(0) \rangle \rangle \quad (\text{VIII-57})
 \end{aligned}$$

Or, $T_{2R} V_{AR} \rho_A \sigma_R(0) = (T_{2R} (V_{AR} \sigma_R(0))) \rho_A = 0$ d'après (VIII-55)

$$T_{2R} \rho_A \sigma_R(0) V_{AR} = \rho_A T_{2R} (\sigma_R(0) V_{AR}) = \rho_A T_{2R} (V_{AR} \sigma_R(0)) = 0 \text{ d'après (VIII-55)}$$

on en déduit (VIII-56)

(v) Hypothèse 4 sur V_{AR}

V est un produit, ou une somme de produits, d'opérateurs de A et de R

$$V = A \cdot R \quad (\text{ou } V = \sum_P A^P R^P) \quad (\text{VIII-58})$$

④ Equation d'évolution de $P\rho$

- Appliquons les 2 opérateurs P et $1-P = \varphi$ à gauche à l'équation de Liouville (VIII-19). En insérant $P + \varphi = 1$ entre L et ρ , on obtient :

$$\left\{ \begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \underline{P\rho} &= P L \underline{P\rho} + P L \underline{\varphi\rho} \quad (\text{VIII-59}) \\ i\hbar \frac{d}{dt} \underline{\varphi\rho} &= \varphi L \underline{P\rho} + \varphi L \underline{\varphi\rho} \quad (\text{VIII-60}) \end{aligned} \right.$$

c-à-d un système de 2 équations différentielles couplées pour $P\rho$ et $\varphi\rho$.

- Commençons par intégrer (VIII-60). Si l'on pose

$$\varphi\rho(t) = e^{-i\varphi L t/\hbar} \sigma(t) \quad (\text{VIII-61})$$

on obtient pour σ l'équation :

$$i\hbar \dot{\sigma}(t) = e^{i\varphi L t/\hbar} \varphi L P \rho(t) \quad (\text{VIII-62})$$

En intégrant (VIII-62) et en reportant la solution dans (VIII-61), on obtient

$$\varphi\rho(t) = e^{-i\varphi L t/\hbar} \varphi\rho(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau e^{-i\varphi L \tau/\hbar} \varphi L P \rho(t-\tau) \quad (\text{VIII-63})$$

où l'on a posé $\tau = t - t'$

L'équation (VIII-63) permet de calculer $\varphi\rho(t)$ si l'on connaît $\varphi\rho(0)$ et $P\rho$ entre 0 et t .

- Reportons alors (VIII-63) dans (VIII-59). Le 1^{er} terme du 2^{em} membre de (VIII-59) peut être réécrit, compte tenu de (VIII-50), (VIII-52), (VIII-54) et (VIII-56) sous la forme $P(L_A + L_R + L_{AR})P\rho = P(L_A + L_R)P\rho = L_A P\rho$. On obtient ainsi :

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} P\rho(t) &= L_A P\rho(t) + P L e^{-i\varphi L t/\hbar} \varphi\rho(0) \\
 &+ \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau P L e^{-i\varphi L \tau/\hbar} \varphi L P \rho(t-\tau) \quad (\text{VIII-64})
 \end{aligned}$$

- Le 1^{er} terme de (VIII-64) représente l'évolution propre non perturbée de Pρ sous l'effet de L_A. Comme L_RP = 0, on peut aussi le réécrire sous la forme (L_A + L_R)Pρ = L₀'Pρ où l'on pose

$$L_0 = L_A + L_R \tag{VIII-65}$$

Il est commode d'éliminer ce terme en passant en représentation d'interaction, c-à-d en posant

$$P\rho(t) = e^{-iL_0 t/\hbar} P\tilde{\rho}(t) \tag{VIII-66}$$

L'équation (VIII-64) devient alors :

$$i\hbar \frac{d}{dt} P\tilde{\rho}(t) = e^{iL_0 t/\hbar} P L e^{-i\varphi L t/\hbar} \varphi \rho(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{iL_0 t'/\hbar} P L e^{-i\varphi L t'/\hbar} \varphi L e^{-iL_0(t-t')/\hbar} P\tilde{\rho}(t-t') \tag{VIII-67}$$

- Le 1^{er} terme du 2^{ème} membre de (VIII-67) dépend des conditions initiales (terme inhomogène).

Comme nous supposons ici, d'après (VIII-37), que $\rho(0) = \sigma_A(0) \otimes \rho_R(0)$ on a $P\rho(0) = \rho(0)$ et par suite $\varphi \rho(0) = (1-P)\rho(0) = 0$. Ce terme s'annule donc.

Il faudrait le garder pour étudier l'évolution de Pρ dans des conditions où l'état initial ne satisfait pas à la condition de factorisation (VIII-37).

- En développant en série l'exponentielle $e^{-i\varphi L \tau/\hbar}$ du 2^{ème} terme de (VIII-67), on voit que les 2 L qui apparaissent dans l'intégrale sont entre P et φ : PLφ pour le 1^{er}, φLP pour le 2^{ème} [P commute avec L₀]. Comme L_A et L_R commutent avec P et que Pφ = 0, on peut remplacer ces 2 L par L_{AR}. On obtient ainsi finalement.

$$\boxed{\frac{d}{dt} P\tilde{\rho}(t) = \int_0^t dt' K(t,t') P\tilde{\rho}(t-t')} \tag{VIII-68}$$

où le "noyau" K(t,τ) est donné par

$$K(t,\tau) = -\frac{1}{\hbar^2} e^{iL_0 t/\hbar} P L_{AR} e^{-i\varphi L \tau/\hbar} \varphi L_{AR} P e^{-iL_0(t-\tau)/\hbar} \tag{VIII-69}$$

En conclusion, l'évolution de P $\tilde{\rho}(t)$ est décrite par une équation intégral-différentielle de noyau K(t,τ). Cette conclusion est rigoureuse une fois que les 3 hypothèses (VIII-37), (VIII-38) et (VIII-55) sur l'état initial sont supposées satisfaites.

- Autre manière d'écrire le noyau.

Comme φ figure à droite de $e^{-i\varphi L \tau/\hbar}$ on voit, en développant cette exponentielle en série, qu'on peut remplacer $e^{-i\varphi L \tau/\hbar}$ par $e^{-i\varphi L \tau/\hbar}$. D'autre part, comme τ est > 0, on peut d'après (II-23) écrire :

$$e^{-i\varphi L \tau/\hbar} = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{e^{-iE\tau/\hbar}}{E + i\epsilon - \varphi L \varphi} \tag{VIII-70}$$

de sorte que l'on peut finalement mettre (VIII-69) sous la forme :

$$K(t, \tau) = \frac{1}{2\pi i \hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{iL_0 t / \hbar} P R(E+i\epsilon) P e^{-iE\tau / \hbar} e^{-iL_0(t-\tau) / \hbar} \quad (\text{VIII-71})$$

où $R(E+i\epsilon)$ est donné par :

$$R(E+i\epsilon) = L_{AR} + L_{AR} \phi \frac{1}{E+i\epsilon - \phi L_0 \phi - \phi L_{AR} \phi} \phi L_{AR} \quad (\text{VIII-72})$$

(On a utilisé $PL_{AR}P = 0$ pour rajouter L_{AR} dans VIII-72).

On notera l'analogie entre cet opérateur R de l'espace de Liouville et l'opérateur R de l'espace des états introduit en VI-11

⑤ Etat de R à l'instant t

Si l'on arrive à résoudre (VIII-68), on connaît $P\rho(t)$ c.-à-d. $\sigma_A(t)$ à tout instant t , c.-à-d. encore l'état du système A à tout instant t .

Pour connaître l'état de R , il faut tracer $\rho(t)$ par rapport à A

$$\text{Tr}_A \rho(t) = \text{Tr}_A P\rho(t) + \text{Tr}_A \phi \rho(t) \quad (\text{VIII-73})$$

Comme, d'après (VIII-39), $P\rho(t) = \sigma_R(0) \text{Tr}_R \rho(t) = \sigma_R(0) \sigma_A(t)$

on a $\text{Tr}_A P\rho(t) = \sigma_R(0) \text{Tr}_A \sigma_A(t) = \sigma_R(0)$.

En utilisant l'expression (VIII-63) de $\phi \rho(t)$ et le fait que $\phi \rho(0) = 0$, on a finalement

$$\sigma_R(t) = \text{Tr}_A \rho(t) = \sigma_R(0) + \frac{1}{i\hbar} \text{Tr}_A \int_0^t dt e^{-i\phi L \tau / \hbar} \phi L P \rho(t-\tau) \quad (\text{VIII-74})$$

Si l'on connaît $P\rho(t-\tau)$ après avoir résolu (VIII-68), on peut alors à partir de (VIII-74), étudier les modifications de $\sigma_R(t)$ par rapport à $\sigma_R(0)$.

Equation piloté décrivant l'évolution d'un petit système S couplé à un grand réservoir R (suite)

But de cette séance : Reprendre le problème précédent dans l'espace des fréquences (ou des énergies), ce qui revient à introduire la résolvante de l'opérateur de Liouville L dans l'espace de Liouville. Une telle approche permet d'utiliser directement les résultats de VI sur le calcul des restrictions de la résolvante à l'intersection de divers sous-espaces. Elle permet surtout d'opérer plus commodément un certain nombre d'approximations sur l'équation d'évolution du petit système A, d'en comprendre le sens physique et les conditions de validité (il est beaucoup plus facile de travailler sur des équations algébriques que sur des équations intégrodifférentielles).

D- Passage dans l'espace des fréquences

① Résolvante G(z) de L

- Soit $U(t) = e^{-iLt/\hbar}$ (IX-1)

l'opérateur d'évolution associé à l'équation de Liouville (VIII-19). On a :

$|p(t)\rangle\rangle = U(t) |p(0)\rangle\rangle$ (IX-2)

- D'après les résultats du cours II, on a :

Pour $t > 0$ $U(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_+} dz e^{-izt/\hbar} G(z)$ (IX-3)

où $G(z) = \frac{1}{z - L}$ (IX-4)

est la résolvante de L.

- Il sera plus commode de parler de fréquences (fréquences de Bohr du petit système) plutôt que d'énergies. En utilisant la définition du contour C_+ (fig 9 page (II-6)), en posant $E = \hbar\omega$, on réécrit (IX-3) et (IX-4) sous la forme :

$t > 0$ $U(t) = \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} G(\omega + i\epsilon)$ (IX-5)

$G(\omega + i\epsilon) = \frac{1}{\hbar\omega + i\epsilon - L}$ (IX-6)

② Restrictions de G(ω + iε). Opérateur R(ω + iε)

- Soit P un projecteur de l'espace de Liouville satisfaisant :

$P^2 = P$ (IX-7)

et ϕ l'opérateur $\phi = 1 - P$ (IX-8)

qui satisfait lui aussi $\phi^2 = \phi$ $P\phi = \phi P = 0$ (IX-9)

Nous ne précisons pas plus pour l'instant P et ϕ. Nous n'utili-

lisons dans ce § 2 que (IX-7), (IX-8), (IX-9) et l'hypothèse supplémentaire suivante:

$$P L_0 P = P L_0 P = 0 \quad (IX-10)$$

exprimant que P commute avec $L_0 = L_A + L_R$

- Supposons que l'on s'intéresse à l'évolution de $P|p(t)\rangle\rangle$

$$P|p(t)\rangle\rangle = P U(t) |p(0)\rangle\rangle = (P U(t) P + P U(t) Q) |p(0)\rangle\rangle \quad (IX-11)$$

On voit donc qu'on est amené à s'intéresser aux restrictions:

$$P U(t) P, \quad P U(t) Q, \quad \text{c-à-d d'après (IX-5), aux} \\ \text{restrictions } P G(\omega+i\epsilon) P, \quad P G(\omega+i\epsilon) Q.$$

On peut aussi étudier $Q|p(t)\rangle\rangle$, ce qui conduit à s'intéresser à $Q G(\omega+i\epsilon) P, \quad Q G(\omega+i\epsilon) Q$.

- Un tel calcul a déjà été fait dans le cours VI. Les seules relations écrites en VI et non en IX-7, 8, 9, 10 sont $P = P^+$ et $Q = Q^+$. Mais il est facile de vérifier que dans les calculs de VI, nulle part l'hermiticité de P et Q n'est utilisée, ce qui fait que les résultats obtenus en VI sont directement applicables ici (où nous envisageons plus loin des projecteurs P et Q qui ne sont pas hermitiques).

A partir de (VI-12) et (VI-11), on obtient ainsi:

$$P G(\omega+i\epsilon) P = \frac{1}{\hbar\omega+i\epsilon - P L_0 P - P R(\omega+i\epsilon) P} \quad (IX-12)$$

où

$$R(\omega+i\epsilon) = L_{AR} + L_{AR} Q \frac{1}{\hbar\omega+i\epsilon - Q L_0 Q - Q L_{AR} Q} Q L_{AR} \quad (IX-13)$$

et les expressions analogues à (VI-13), (VI-16), (VI-18) pour $Q G(\omega+i\epsilon) P, \quad P G(\omega+i\epsilon) Q, \quad Q G(\omega+i\epsilon) Q$.

- Si l'on part d'un état initial $|p(0)\rangle\rangle$ tel que $Q|p(0)\rangle\rangle = 0$ et si l'on ne s'intéresse qu'à $P|p(t)\rangle\rangle$, on voit sur (IX-11) que $P G(\omega+i\epsilon) P$ suffit. En multipliant (IX-5) à droite et à gauche par P et en utilisant IX-12 et (IX-13), on obtient

$$P|p(t)\rangle\rangle = \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\hbar\omega+i\epsilon - P L_0 P - P R(\omega+i\epsilon) P} P|p(0)\rangle\rangle \quad (IX-14)$$

Notons bien que (IX-14) n'est vraie que si $Q|p(0)\rangle\rangle = 0$. Sinon, il faudrait ajouter un autre terme. De plus, comme nous avons utilisé le contour C_+ dans IX-3, $U(t) = 0$ pour $t < 0$ [Nous avons donc pris en réalité $K_+(t) = \theta(t) U(t)$ plutôt que $U(t)$].

Donc $P|p(t)\gg$ défini par (IX-14) est nul pour $t < 0$ et prend brusquement la valeur $P|p(0)\gg$ à $t = 0$. Il évolue ensuite à partir de cet état initial.

③ Comment retrouver l'équation intégraldifférentielle à partir de ce point de vue ?

- Les avantages de l'espace des fréquences ne doivent pas faire complètement oublier ceux de l'espace des temps ! Certaines discussions se font mieux dans l'espace des temps : temps de corrélation d'une perturbation, mémoire d'un processus ...

Il est donc intéressant de savoir passer facilement de l'équation (IX-14) donnant la T.F. de $P|p(t)\gg$, à une équation d'évolution donnant la vitesse de variation de $P|p(t)\gg$, c-à-d $it\frac{d}{dt}P|p(t)\gg$

- Il suffit pour cela de dériver les 2 membres de (IX-14) par rapport à t . On trouve que la TF de $it\frac{d}{dt}P|p(t)\gg$ est

$$it\frac{d}{dt}P|p(t)\gg \quad \frac{it\omega}{it\omega + i\epsilon - PL_0P - PR(\omega + i\epsilon)P} P|p(0)\gg \quad (IX-15)$$

En ajoutant et retranchant au numérateur $PL_0P + PR(\omega + i\epsilon)P$ on trouve aisément que :

$$T.F. \text{ de } it\frac{d}{dt}P|p(t)\gg = it\frac{d}{dt}P|p(0)\gg + PL_0P \text{ T.F. de } P|p(t)\gg + PR(\omega + i\epsilon)P \times T.F. \text{ de } P|p(t)\gg \quad (IX-16)$$

Prendons la T.F. inverse des 2 membres de IX-16. Le membre de gauche donne $it\frac{d}{dt}P|p(t)\gg$. Le 1^{er} terme du membre de droite donne $it\delta(t)P|p(0)\gg$, le 2^{ème} $PL_0P|p(t)\gg$, le 3^{ème} la TF d'un produit, c-à-d le produit de convolution de la TF de $PR(\omega + i\epsilon)P$ par $P|p(t)\gg$. On obtient ainsi :

$$it\frac{d}{dt}P|p(t)\gg = it\delta(t)P|p(0)\gg + PL_0P|p(t)\gg + \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau PR(\tau)P P|p(t-\tau)\gg \quad (IX-17)$$

avec

$$PR(\tau)P = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} PR(\omega + i\epsilon)P e^{-i\omega\tau} d\omega \quad (IX-18)$$

- Le terme $it\delta(t)P|p(0)\gg$ n'est pas surprenant. $P|p(t)\gg$ est en effet nul pour $t < 0$ et ce terme permet d'introduire la condition initiale à $t = 0$.

- Si l'on compare les 2 intégrales sur τ de (IX-17) et (VIII-64), on

voit que les limites d'intégration ne sont pas les mêmes. En fait, ceci peut se comprendre aisément. Comme on impose à $P|p(t-\tau)\rangle\rangle$ d'être nul pour $t-\tau < 0$, c.-à-d. pour $\tau > t$, on peut étendre la borne supérieure de (VIII-64) à $+\infty$. D'autre part, à cause de $+i\epsilon$, on montre aisément que $PR(\tau)P$ défini par (IX-18) est nul pour $\tau < 0$. $PR(\tau)P$ n'est donc autre que $\frac{1}{i\hbar} \theta(\tau) PL e^{-i\phi L \tau / \hbar} \phi LP$. La présence de $\theta(\tau)$ permet donc d'étendre la borne inférieure de l'intégrale de (VIII-64) à $-\infty$.

- Remarquons enfin que l'équation (IX-17) n'est pas une équation différentielle parce que $PR(\tau)P$ n'est pas une fonction $\delta(\tau)$, c.-à-d. encore parce que $PR(\omega+i\epsilon)P$ n'est pas indépendant de ω .

Le temps de mémoire associé à l'équation intégrodifférentielle est donc l'inverse de la largeur spectrale de $PR(\omega+i\epsilon)P$.

- = Représentation d'interaction. On peut aisément éliminer le terme $PL_0 P|p(t)\rangle\rangle$ de (IX-17) en posant :

$$|p(t)\rangle\rangle = e^{-iL_0 t / \hbar} |\tilde{p}(t)\rangle\rangle \quad (IX-19)$$

On obtient alors :

$$i\hbar \frac{d}{dt} P|\tilde{p}(t)\rangle\rangle = i\hbar \delta(t) P|p(0)\rangle\rangle + \int_0^\infty dt P\tilde{R}(t,\tau)P P|\tilde{p}(t-\tau)\rangle\rangle \quad (IX-20)$$

$$\text{où } P\tilde{R}(t,\tau)P = P e^{iL_0 t / \hbar} R(\tau) e^{-iL_0(t-\tau) / \hbar} P \quad (IX-21)$$

④ Cas particulier de l'opérateur P défini au § C2. Opérateur $R_A(\omega+i\epsilon)$

- Supposons maintenant que P soit le projecteur défini en (VIII-46). En réalité, cette équation définit un projecteur de \mathcal{L}_R puisque

$$P_R = |\sigma_R(0)\rangle\rangle \langle\langle 1_R | \quad P_R^2 = P_R \quad (IX-22)$$

est un opérateur de \mathcal{L}_R . P est obtenu en prolongeant P_R dans $\mathcal{L}_A \otimes \mathcal{L}_R$. Il faudrait donc en toute rigueur écrire

$$P = P_R \mathbb{1}_A \quad (IX-23)$$

où $\mathbb{1}_A$ est l'opérateur unité de \mathcal{L}_A .

- Revenons à (IX-12) ou (IX-14). On voit apparaître au dénominateur $PR(\omega+i\epsilon)P$ qu'on peut écrire, compte tenu de (IX-22)

$$\begin{aligned} PR(\omega+i\epsilon)P &= |\sigma_R(0)\rangle\rangle \langle\langle 1_R | R(\omega+i\epsilon) | \sigma_R(0)\rangle\rangle \langle\langle 1_R | \\ &= P_R R_A(\omega+i\epsilon) \end{aligned} \quad (IX-24)$$

où

$$R_A(\omega+i\epsilon) = \langle\langle 1_R | R(\omega+i\epsilon) | \sigma_R(0)\rangle\rangle \quad (IX-25)$$

R_A est l'élément de matrice d'un opérateur de $\mathcal{L}_A \otimes \mathcal{L}_R$ entre 2 vecteurs de \mathcal{L}_R . C'est donc un opérateur de \mathcal{L}_A . PRP est ϕ un produit de 2 opérateurs, l'un P_R de \mathcal{L}_R , l'autre R_A de \mathcal{L}_A .

- On voit aussi apparaître dans IX-12 et IX-14 PL_0P . Comme d'après (VIII-56) et (VIII-52), $PL_0P = 0$, $PL_R = 0$, on peut écrire :

$$PL_0P = P_R L_A \quad (IX-26)$$

- Enfin, par définition même de P :

$$P |\rho(t)\rangle\rangle = |\sigma_R(0)\rangle\rangle |\sigma_A(t)\rangle\rangle \quad (IX-27)$$

$$\text{où } |\sigma_A(t)\rangle\rangle = \langle\langle 1_R | \rho(t)\rangle\rangle = |T_{2R} \rho(t)\rangle\rangle \quad (IX-28)$$

$$\text{De même : } P |\rho(0)\rangle\rangle = |\sigma_R(0)\rangle\rangle |\sigma_A(0)\rangle\rangle \quad (IX-29)$$

- On peut donc finalement réécrire (IX-14) sous la forme :

$$|\sigma_R(0)\rangle\rangle |\sigma_A(t)\rangle\rangle = \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\hbar\omega + i\epsilon - P_R L_A - P_R R_A(\omega + i\epsilon)} |\sigma_R(0)\rangle\rangle |\sigma_A(0)\rangle\rangle \quad (IX-30)$$

Comme P_R commute avec tout opérateur de L_A et que $P_R^2 = P_R^3 = \dots = P_R$, on voit aisément, en développant en série la fraction de IX-30, que l'on peut faire passer P_R du dénominateur au numérateur. Comme de plus $P_R |\sigma_R(0)\rangle\rangle = |\sigma_R(0)\rangle\rangle$, on peut finalement éliminer complètement P_R du second membre de (IX-30). En simplifiant par $|\sigma_R(0)\rangle\rangle$ des 2 côtés du signe =, on obtient finalement.

$$|\sigma_A(t)\rangle\rangle = \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\hbar\omega + i\epsilon - L_A - R_A(\omega + i\epsilon)} |\sigma_A(0)\rangle\rangle \quad (IX-31)$$

On voit alors tout l'intérêt de l'introduction des opérateurs de projection et du choix (IX-22) de P_R . On obtient en (IX-31) une équation ne portant que sur le petit système A et permettant d'étudier l'évolution de l'opérateur densité réduit $\sigma_A(t)$ de A . Toute l'interaction entre A et R est contenue dans le noyau $R_A(\omega + i\epsilon)$.

- Avant d'étudier plus en détail ce noyau, écrivons l'équation intégrodifférentielle associée à (IX-31). Un calcul identique à celui du § 3 précédent donne.

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\sigma_A(t)\rangle\rangle = i\hbar \delta(t) |\sigma_A(0)\rangle\rangle + L_A |\sigma_A(t)\rangle\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau R_A(\tau) |\sigma_A(t-\tau)\rangle\rangle \quad (IX-32)$$

où

$$R_A(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R_A(\omega + i\epsilon) e^{-i\omega\tau} d\omega \quad (IX-33)$$

E. Développement de $R_A(\omega+i\epsilon)$ en puissances de l'interaction.

- Développons en série de puissances de L_{AR} l'expression (IX-13) de $R(\omega+i\epsilon)$. Comme φ commute avec L_0 , on a :

$$R(\omega+i\epsilon) = L_{AR} + L_{AR} \frac{\varphi}{\hbar\omega+i\epsilon-L_0} L_{AR} + L_{AR} \frac{\varphi}{\hbar\omega+i\epsilon-L_0} L_{AR} \frac{\varphi}{\hbar\omega+i\epsilon-L_0} L_{AR} + \dots \quad (IX-34)$$

- Calculons maintenant $P R(\omega+i\epsilon) P$

(i) Comme $P L_{AR} P = 0$, le 1^{er} terme de (IX-34) disparaît.

(ii) Notons en plus qu'on peut faire disparaître les 2 opérateurs φ qui figurent à l'extrême gauche ou à l'extrême droite de chaque terme de IX-34 pris entre P et P :

$$P L_{AR} \varphi \dots \dots P \quad \text{ou} \quad P \dots \dots \varphi L_{AR} P$$

Comme $P L_{AR} P = 0$, on peut écrire :

$$\begin{aligned} P L_{AR} \varphi &= P L_{AR} \varphi + P L_{AR} P = P L_{AR} (P + \varphi) = P L_{AR} \\ \varphi L_{AR} P &= \varphi L_{AR} P + P L_{AR} P = (P + \varphi) L_{AR} P = L_{AR} P \end{aligned} \quad (IX-35)$$

- En utilisant l'expression IX-23 de P et la définition (IX-25) de $R_A(\omega+i\epsilon)$, on obtient finalement :

$$\begin{aligned} R_A(\omega+i\epsilon) &= \ll 1_R | \left[L_{AR} \frac{1}{\hbar\omega+i\epsilon-L_0} L_{AR} + L_{AR} \frac{1}{\hbar\omega+i\epsilon-L_0} L_{AR} \frac{1}{\hbar\omega+i\epsilon-L_0} L_{AR} \right. \\ &\quad \left. + L_{AR} \frac{1}{\hbar\omega+i\epsilon-L_0} L_{AR} \frac{\varphi}{\hbar\omega+i\epsilon-L_0} L_{AR} \frac{1}{\hbar\omega+i\epsilon-L_0} L_{AR} + \dots \right] \sigma_R(0) \gg \quad (IX-36) \end{aligned}$$

On constate que formellement ce développement est facile à écrire et qu'il démarre à l'ordre 2

- A l'ordre le plus bas, c-à-d 2, on a donc :

$$R_A^{(2)}(\omega+i\epsilon) = \ll 1_R | L_{AR} \frac{1}{\hbar\omega+i\epsilon-L_0} L_{AR} | \sigma_R(0) \gg \quad (IX-37)$$

- En reportant le développement (IX-36) dans (IX-33), on obtient un développement de $R_A(\tau)$ faisant intervenir des produits de convolutions d'ordre de plus en plus élevés. On peut ensuite reporter l'expression ainsi obtenue pour $R_A(\tau)$ dans (IX-32) et écrire l'équation intégrodifférentielle satisfaisante par σ_R sous forme d'un développement en série de V_{AR} .

Sans expliciter le détail des calculs (qui sont laborieux) donnons l'équation ainsi obtenue pour $\tilde{\sigma}_R^{(n)}(\tau)$ [on utilisera la représentation d'interaction, désigné par un indice n , et on repasse de l'espace de Liouville à l'espace des états].

- Ordre le plus bas

$$\frac{d}{dt} \tilde{\sigma}_A = - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau T_{2R} \left[\tilde{V}_{AR}(t), [\tilde{V}_{AR}(t-\tau), \sigma_R(0) \tilde{\sigma}_A(t-\tau)] \right] \quad (IX-38)$$

- Ordre suivant

$$- \frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' T_{2R} \left[\tilde{V}_{AR}(t), [\tilde{V}_{AR}(t-\tau+\tau'), [\tilde{V}_{AR}(t-\tau), \sigma_R(0) \tilde{\sigma}_A(t-\tau)]] \right] \quad (IX-39)$$

- Ordre suivant

$$- \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' \int_0^{\tau'} d\tau'' \left\{ T_{2R} \left[\tilde{V}_{AR}(t), [\tilde{V}_{AR}(t-\tau+\tau'), [\tilde{V}_{AR}(t-\tau+\tau''), [\tilde{V}_{AR}(t-\tau), \sigma_R(0) \tilde{\sigma}_A(t-\tau)]]]] \right] \right. \\ \left. - T_{2R} \left[\tilde{V}_{AR}(t), [\tilde{V}_{AR}(t-\tau+\tau'), \sigma_R(0) T_{2R} \left[\tilde{V}_{AR}(t-\tau+\tau''), [\tilde{V}_{AR}(t-\tau), \sigma_R(0) \tilde{\sigma}_A(t-\tau)]] \right]] \right] \right\} \quad (IX-40)$$

On constate bien sur que les équations sont bien plus lourdes à écrire dans le point de vue temporel et dans l'espace des états :

Dans la suite nous n'utiliserons pas ces 3 dernières équations. Nous revenons à (IX-31) et (IX-36). Dans le § suivant nous effectuerons un certain nombre d'approximations que nous discuterons ensuite.

F. Introduction d'un certain nombre d'approximations.

L'équation (IX-31) est exacte (moyennant les 3 hypothèses faites sur l'état initial en VIII-37, 38, 55). Nous allons faire maintenant un certain nombre d'approximations.

① Approximation de couplage faible

Nous supposons le couplage VAR entre A et R suffisamment petit pour que le développement (IX-36) de $R_A(\omega+i\epsilon)$ en puissances de L_{AR} soit très rapidement convergent et nous ne gardons que le terme d'ordre le plus bas $R_A^{(2)}$ donné en (IX-37)

$$R_A(\omega+i\epsilon) \longrightarrow R_A^{(2)}(\omega+i\epsilon) \quad (IX-41)$$

Dans un § ultérieur nous discuterons les conditions de validité d'une telle approximation en précisant l'infiniment petit qui caractérise le développement (IX-36).

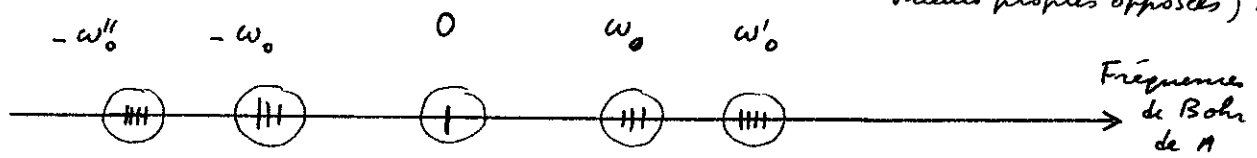
② Approximation séculaire

- D'après (IX-31), il nous faut, pour chaque valeur de ω , inverser l'opérateur $\hbar\omega+i\epsilon - L_A - R_A^{(2)}(\omega+i\epsilon)$. Quelle est la forme de la matrice représentant cet opérateur dans la base des états propres de L_A ?

- Nous avons vu plus haut que les valeurs propres de L_A sont (à \hbar près) les fréquences de Bohr de A (cf VIII-29). Comment se répartissent ces fréquences? Il y a tout d'abord la fréquence 0, correspondant aux états propres $|i i^+\rangle$ de L_A . (la projection de $|\sigma_A\rangle$ sur $|i i^+\rangle$ est l'élément diagonal σ_{ii}^A de σ_A , c-à-d encore la population du niveau $|i\rangle$). Il y a également les fréquences de Bohr non nulles de A , $\hbar\omega_{ij}$, correspondant aux kets $|i j^+\rangle$ avec $j \neq i$ (et aux éléments non diagonaux σ_{ij}^A de σ_A).

- Nous allons supposer que les fréquences de Bohr de A se répartissent en groupes suffisamment bien séparés, les uns des autres (cf figure 1. Notez que le spectre de fréquences est symétrique par rapport à 0 : $|i j^+\rangle$ et $|j i^+\rangle$ ont des valeurs propres opposées).

Fig 1

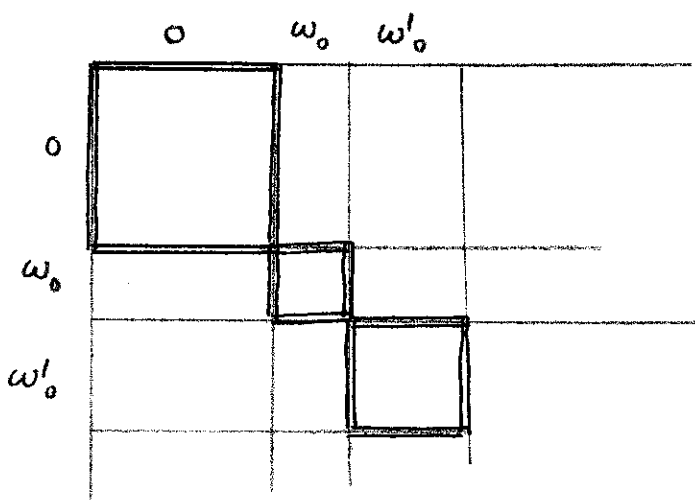


Plus précisément, nous allons supposer que la distance séparant 2 groupes distincts est nettement plus grande que $R_A^{(2)}$

$$\hbar |\omega'_0 - \omega_0| \ll R_A^{(2)}(\omega'_0), R_A^{(2)}(\omega_0) \quad (IX-42)$$

Par contre, à l'intérieur de chaque groupe, les différences de fréquences peuvent être petites ou comparables à $R_A^{(2)}(\omega_0)$

Fig 2



L'approximation séculaire consiste à ne garder de la matrice représentant l'opérateur $\hbar\omega + i\epsilon - L_A - R_A^{(2)}(\omega + i\epsilon)$ dans le base des états propres de L_A que les blocs diagonaux à l'intérieur de chaque groupe de fréquences de Bohr défini plus haut : 0, ω_0 , ω'_0 ... [carrés renforcés de la figure 2]

Pourquoi négliger les blocs non-diagonaux entre ω_0 et ω'_0 par exemple? Parce que d'après l'hypothèse (IX-42), les éléments

de l'operateur $t\omega - L_A - R_A^{(2)}(\omega + i\epsilon)$ figurant dans ces blocs ont un ordre de grandeur, $R_A^{(2)}(\omega)$, beaucoup plus petit que les differences entre les elements des blocs diagonaux ω_0 et ω'_0 qui sont de l'ordre de $t(\omega_0 - \omega'_0)$

- Notons bien cependant qu'a l'interieur de chaque bloc diagonal, nous ne negligions pas les elements non diagonaux de $R_A^{(2)}(\omega + i\epsilon)$.

L'approximation secularie permet donc de remplacer l'inversion d'une matrice infinie, par l'inversion d'une serie infinie de matrices ayant chacune une dimension plus petite, souvent finie.

③ Approximation de memoire courte

Concentrons nous sur un bloc diagonal, par exemple ω_0 . Tant que ω est different de ω_0 , de maniere plus precise tant que :

$$|t\omega - t\omega_0| \gg R_A^{(2)}(\omega_0 + i\epsilon), \quad (IX-43)$$

les elements diagonaux de ce bloc sont beaucoup plus grands que les elements non diagonaux. On peut donc ignorer ces derniers tant que (IX-43) est satisfait.

Les seules valeurs de ω pour lesquelles $R_A^{(2)}$ joue donc finalement un role sont celles voisines de ω_0 .

Nous remplacerons alors dans le bloc diagonal ω_0 $R_A^{(2)}(\omega + i\epsilon)$ par $R_A^2(\omega_0 + i\epsilon)$

$$R_A^{(2)}(\omega + i\epsilon) \rightarrow R_A^2(\omega_0 + i\epsilon) \quad (IX-44)$$

dans le bloc diagonal ω_0 .

A chaque bloc diagonal ω_0 de la fig 2 est associe un systeme d'equations integrodifferentielles couplant entre eux les elements de la matrice densite correspondant a des paires de niveaux separes par $t\omega_0$. Le moyen de cette equation est la T.F. de la restriction ^{dans le bloc ω_0} de $R_A^{(2)}(\omega + i\epsilon)$. Negliger la variation avec ω de la restriction de $R_A^{(2)}(\omega + i\epsilon)$ revient a approximer le moyen par une fonction $\delta(\epsilon)$, d'ou le nom d'approximation de memoire courte donnee a (IX-44).

On voit finalement que cette approximation conduit a un systeme d'equations differentielles (et non integro-differentielles) couplant entre eux les elements de matrice densite correspondant a des paires de niveaux separes par une distance voisine de $t\omega_0$.

Equations pilote décrivant l'évolution d'un petit système S couplé à un grand réservoir R (suite)

G. Contenu physique de l'équation pilote.

Dans ce §, on écrit explicitement l'équation d'évolution des divers éléments de la matrice densité σ_A du petit système, en faisant les 3 approximations décrites au § F. On interprète physiquement ces équations.

① Forme développée de l'équation pilote

- Compte tenu des 3 approximations de F, l'équation d'évolution (IX-32) donne, après projection sur $\langle\langle ij^+ |$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle\langle ij^+ | \sigma_A(t) \rangle\rangle = \hbar \omega_{ij} \langle\langle ij^+ | \sigma_A(t) \rangle\rangle + \sum_{\substack{k,l \\ \omega_{kl} \approx \omega_{ij} \approx \omega_0}} \langle\langle ij^+ | R_A^{(2)}(\omega_0 + i\epsilon) | kl^+ \rangle\rangle \langle\langle kl^+ | \sigma_A(t) \rangle\rangle \quad (X-1)$$

On suppose $t > 0$, ce qui permet de laisser tomber $i\hbar \delta(t) | \sigma_A(0) \rangle\rangle$.

R_A a été remplacé par $R_A^{(2)}$ à cause de l'approximation ① de F. Seuls les éléments de σ_A correspondant à des fréquences de Bohr très voisines sont couplés entre eux (approximation ② de F). Enfin, l'équation (IX-32) est remplacé par une équation différentielle à cause de la mémoire très courte de $R_A(t)$ (approximation ③ de F).
 Noter cependant que cette mémoire n'est pas infiniment courte puisque l'on garde la dépendance en ω_0 de $R_A^{(2)}(\omega_0 + i\epsilon)$.

- D'après (VIII-9) :

$$\langle\langle ij^+ | \sigma_A(t) \rangle\rangle = \text{Tr} (|i\rangle\langle j|)^+ \sigma_A(t) = \text{Tr} (|j\rangle\langle i| \sigma_A(t)) = \langle i | \sigma_A(t) | j \rangle = \sigma_{ij}(t)$$

Pour simplifier, on omet l'indice A de σ_A . L'équation (X-1) s'écrit donc: (X-2)

$$\dot{\sigma}_{ij} = -i\omega_{ij} \sigma_{ij} + \sum_{\substack{k,l \\ \omega_{kl} \approx \omega_{ij} \approx \omega_0}} R_{ijkl}(\omega_0) \sigma_{kl} \quad (X-3)$$

avec $R_{ijkl}(\omega_0) = \frac{1}{i\hbar} \langle\langle ij^+ | R_A^{(2)}(\omega_0 + i\epsilon) | kl^+ \rangle\rangle \quad (X-4)$

c-à-d compte tenu de l'expression (IX-37) de $R_A^{(2)}$:

$$R_{ijkl}(\omega_0) = \frac{1}{i\hbar} \langle\langle ij^+ | \mathbb{1}_R | L_{AR} \frac{1}{\hbar\omega_0 + i\epsilon - L_0} L_{AR} | kl^+ \sigma_R(0) \rangle\rangle \quad (X-5)$$

- On a : $|\sigma_R(0)\rangle\rangle = \sum_{\alpha} p(\alpha) |\alpha\alpha^+\rangle\rangle \quad (X-6)$

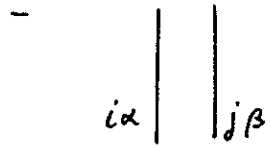
Rappelons que $\sigma_R(0)$ est diagonal dans la base des états propres $\{|\alpha\rangle\}$ de H_R (cf VIII-38). $p(\alpha)$ qui apparaît dans (X-6) est la probabilité pour que le réservoir R soit dans l'état $|\alpha\rangle$. D'autre part (d'après VIII-12) :

$$|\mathbb{1}_R\rangle\rangle = \sum_{\beta} |\beta\beta^+\rangle\rangle \quad (X-7)$$

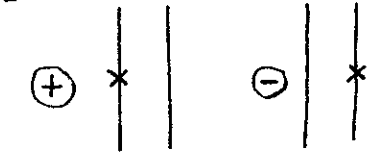
de sorte que finalement :

$$R_{ijkl}(\omega_0) = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} p(\alpha) \langle ij^+ \beta \beta^+ | L_{AR} \frac{1}{\hbar\omega_0 + i\epsilon - L_0} L_{AR} | kl^+ \alpha \alpha^+ \rangle \quad (X-8)$$

② Représentation diagrammatique de R_{ijkl}

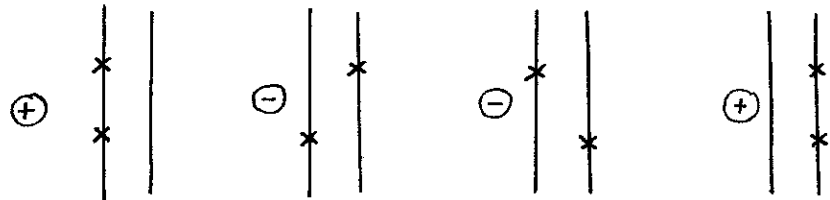


A chaque ket $|ij^+ \alpha \beta^+\rangle$ de \mathcal{L} (qui correspond à l'opérateur $|i\alpha\rangle\langle j\beta|$ de \mathcal{E}) est associé un double trait, le trait de gauche pour $|i\alpha\rangle$, le trait de droite pour $\langle j\beta|$.



A chaque L_{AR} est associé un commutateur (voir VIII-18), donc 2 éléments de matrice de V_{AR} , l'un sur le trait de gauche avec le signe + (action de V_{AR} sur le ket), l'autre sur le trait de droite avec le signe - (action de $-V_{AR}$ sur le bra)

Comme il y a 2 L_{AR} dans X-8, il y a donc 4 diagrammes, 2 avec le signe +, 2 avec le signe -.



A chaque état intermédiaire, est associé un propagateur :

$$\frac{1}{\hbar\omega_0 + i\epsilon - L_0} = \mathcal{P} \frac{1}{\hbar\omega_0 - L_0} - i\pi \delta(\hbar\omega_0 - L_0) \quad (X-9)$$

Dans (X-9) L_0 doit être remplacé par la différence entre les énergies non-perturbées associées au trait de gauche et au trait de droite dans l'état intermédiaire considéré.

Les règles précédentes se généralisent aisément à des termes d'ordre supérieur (8 diagrammes à l'ordre 3, 16 à l'ordre 4, ... 2^N à l'ordre N).

③ Hypothèse simplificatrice

Pour simplifier l'écriture des équations (X-3), nous supposons que A a des niveaux discrets non-dégénérés et que la distance entre 2 niveaux quelconques est grande devant les coefficients de couplage R_{ijkl}

$$|\hbar\omega_{ij}| \gg \hbar R \quad \text{pour } i \neq j \quad (X-10)$$

Dans ce cas, à cause de l'approximation séculaire, les éléments diagonaux σ_{ii} de σ_A , c-à-d les populations des niveaux d'énergie de A, ne sont couplés qu'aux éléments diagonaux et non aux éléments non diagonaux. L'équation (X-3) devient (comme $\omega_0 = 0$):

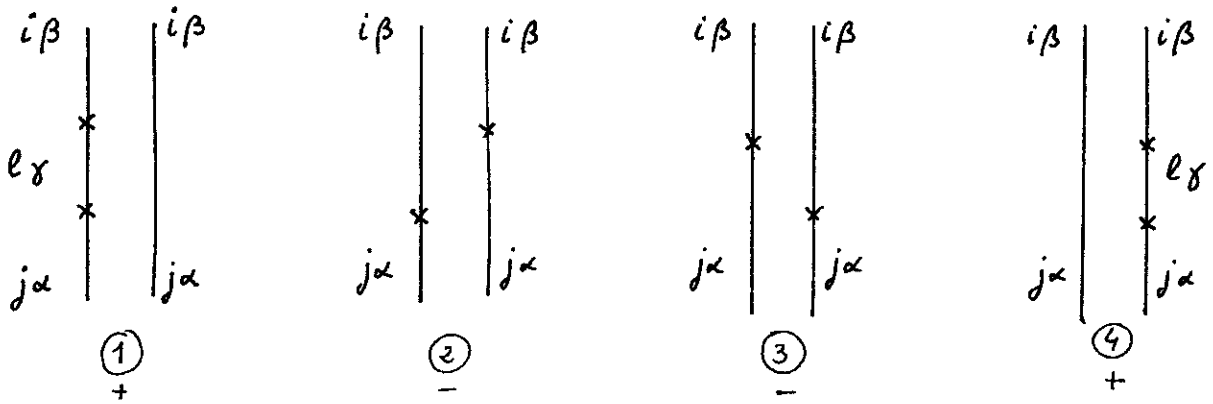
$$\dot{\sigma}_{ii} = \sum_j R_{iijj}(0) \sigma_{jj} \quad (X-11)$$

Un élément non diagonal σ_{ij} de σ_A correspondant à une fréquence de Bohr ω_{ij} non-dégénérée (c-à-d telle qu'il n'existe pas d'autre fréquence de Bohr ω_{kl} telle que $|\omega_{ij} - \omega_{kl}| \leq |R|$) n'est couplé qu'à lui-même.

- Si plusieurs éléments non-diagonaux de σ_A correspondent à la même fréquence de Bohr (ou à des fréquences de Bohr très voisines), ils sont complexés entre eux.

④ Equations d'évolution des populations

(i) Calcul de $R_{iijj}(0)$ avec $i \neq j$



- Sur les 4 diagrammes, on a d'après X-8 le même indice α sur les lignes entrantes, le même indice β sur les lignes sortantes. Comme on s'intéresse ici aux populations de A, on a également le même indice j sur les lignes entrantes, i sur les lignes sortantes.

- Sur le diagramme ①, il n'y a aucune interaction sur la ligne de droite. Comme nous supposons ici $i \neq j$, ce diagramme est donc nul. Il en est de même de 4.

- Contribution des diagrammes ② et ③

Ils se déduisent l'un de l'autre par réflexion par rapport à un axe vertical. Les valeurs propres de ρ_0 dans l'état intermédiaire sont donc opposés dans ② et ③. Les parties principales de (X-9) s'annulent donc quand on ajoute ② et ③ alors que les 2 fonctions δ sont égales et se doublent (rappelons qu'ici $\omega_0 = 0$). On obtient alors à partir de X-8 :

$$R_{iijj}^{(0)} = -\frac{1}{i\hbar} (-2i\pi) \sum_{\alpha} \sum_{\beta} p(\alpha) |\langle i\beta | V | j\alpha \rangle|^2 \delta(-\hbar\omega_{ij} - \hbar\omega_{\beta\alpha}) \quad (X-12)$$

avec $i \neq j$

$$\text{Or } \delta(-\hbar\omega_{ij} - \hbar\omega_{\beta\alpha}) = \delta(E_i - E_j + E_{\beta} - E_{\alpha}) = \delta(E_{i\beta} - E_{j\alpha}) \quad (X-13)$$

Si l'on pose $R_{iijj}(0) = \Gamma_{i \leftarrow j} \quad (X-14)$

on a

$$\Gamma_{i \leftarrow j} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} p(\alpha) |\langle i\beta | V | j\alpha \rangle|^2 \delta(E_{i\beta} - E_{j\alpha}) \quad (X-15)$$

(ii) Interprétation physique de $\Gamma_{i \leftarrow j}$

$\Gamma_{i \leftarrow j}$ représente la probabilité par unité de temps (calculée par la règle d'or de Fermi) pour que le système global A+R

faire une transition de l'état initial $|i\alpha\rangle$ (pondéré par la probabilité $p(\alpha)$ de trouver R dans l'état $|\alpha\rangle$) vers un état final quelconque $|j\beta\rangle$ ou A se trouve dans l'état j . La fonction δ exprime la conservation de l'énergie.

$$\underline{|i\alpha\rangle} \quad \Longrightarrow \quad \underline{|j\beta\rangle}$$

$\Gamma_{i \leftarrow j}$ est donc la probabilité par unité de temps pour que A fasse une transition de j vers i sous l'effet du couplage avec R .

(iii) Calcul de $R_{iiii}(0)$

- Faisons $i = j$ dans les lignes entrantes des 4 diagrammes dessinés plus haut.

- ② + ③ se calcule comme plus haut et on obtient

$$\text{②} + \text{③} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} p(\alpha) |\langle i\beta | V | i\alpha \rangle|^2 \delta(E_{i\beta} - E_{i\alpha}) \quad (X-16)$$

- ① et ④ se déduisent eux aussi ^(l'un de l'autre) par réflexion par rapport à un axe vertical. Comme pour ② et ③, les parties principale associées à ① et ④ s'annulent alors que les fonctions δ se doublent. Comme il n'y a aucune interaction sur l'une des 2 lignes, on a $\beta = \alpha$. Si l'on change de notation, en remplaçant α par β , on obtient alors :

$$\text{①} + \text{④} = -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\ell} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} p(\alpha) |\langle \ell\beta | V | i\alpha \rangle|^2 \delta(E_{\ell\beta} - E_{i\alpha}) \quad (X-17)$$

- On constate que le terme $\ell = i$ de (X-17) compense exactement (X-16). On a donc finalement, compte tenu de X-15

$$R_{iiii}(0) = - \sum_{\ell \neq i} \Gamma_{\ell \leftarrow i} \quad (X-18)$$

(iv) Equations de Pauli. Interprétation physique.

- En reportant (X-14) et (X-18) dans (X-11), on obtient finalement :

$$\dot{\sigma}_{ii} = - \left(\sum_{\ell \neq i} \Gamma_{\ell \leftarrow i} \right) \sigma_{ii} + \sum_{j \neq i} \Gamma_{i \leftarrow j} \sigma_{jj}$$

(X-19)

- La population du niveau i décroît à cause des transitions de i vers les autres niveaux ℓ , et croît à cause des transitions des autres niveaux j vers le niveau i .

- Etat stationnaire. Bilan détaillé ^(X-19)

Le plus souvent, la solution stationnaire satisfait à l'équation :

$$\sigma_{ii} \Gamma_{j \leftarrow i} = \sigma_{jj} \Gamma_{i \leftarrow j} \quad (X-20)$$

Le nombre de transitions de i vers j compense le nombre de transitions de j vers i (bilan détaillé). On peut cependant trouver des cas où la solution stationnaire de (X-19) ne satisfait pas (X-20).

(V) Cas particuliers d'un réservoir R en équilibre thermodynamique

- Dans ce cas, on a :

$$\frac{P(\alpha)}{P(\beta)} = e^{-(E_\alpha - E_\beta)/kT} \quad (X-21)$$

- Réécrivons (X-15) sous la forme :

$$\Gamma_{i \leftarrow j} = \frac{2\eta}{\hbar} \sum_\alpha \sum_\beta P(\beta) \frac{P(\alpha)}{P(\beta)} |\langle i\beta | V | j\alpha \rangle|^2 \delta(E_{i\beta} - E_{j\alpha}) \quad (X-22)$$

A cause de la fonction δ qui exprime que $E_i + E_\beta = E_j + E_\alpha$, c-à-d que $E_i - E_j = E_\alpha - E_\beta$, on peut écrire :

$$\frac{P(\alpha)}{P(\beta)} = e^{-(E_\alpha - E_\beta)/kT} = e^{-(E_i - E_j)/kT} \quad (X-23)$$

On peut alors sortir $\frac{P(\alpha)}{P(\beta)} = e^{-(E_i - E_j)/kT}$ en dehors de la sommation sur α et β et obtenir après quelques réarrangements

$$\begin{aligned} \Gamma_{i \leftarrow j} &= e^{-(E_i - E_j)/kT} \frac{2\eta}{\hbar} \sum_\beta P(\beta) \sum_\alpha |\langle j\alpha | V | i\beta \rangle|^2 \delta(E_{j\alpha} - E_{i\beta}) \\ &= e^{-(E_i - E_j)/kT} \Gamma_{j \leftarrow i} \end{aligned} \quad (X-24)$$

En d'autres termes :

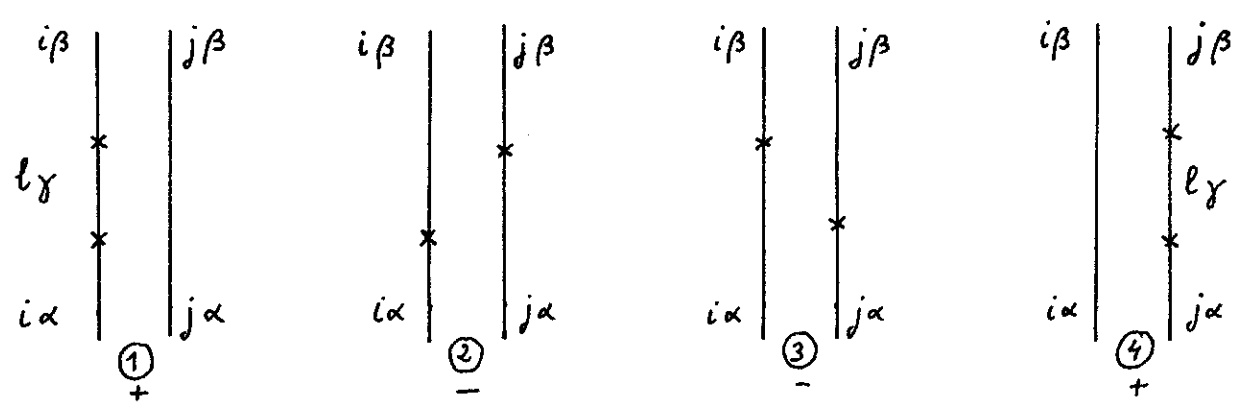
$$e^{-E_i/kT} \Gamma_{j \leftarrow i} = e^{-E_j/kT} \Gamma_{i \leftarrow j} \quad (X-25)$$

L'équation (X-25) n'est autre que le bilan détaillé pour des populations stationnaires $\sigma_{ii}, \sigma_{jj} \dots$ de M proportionnelles à $e^{-E_i/kT}, e^{-E_j/kT} \dots$. On vérifie aisément que ces valeurs de $\sigma_{ii}, \sigma_{jj} \dots$ sont des solutions stationnaires de (X-19) si les $\Gamma_{j \leftarrow i}$ satisfont (X-25).

On voit ainsi comment, en interagissant avec le réservoir R en équilibre à la température T, le petit système A atteint lui-même l'équilibre thermodynamique.

⑤. Evolution d'un élément non diagonal correspondant à une fréquence de Bohr non-dégénérée.

(i) Calcul de $R_{ij} \rho_{ij} (w_{ij})$



- Le calcul des 4 diagrammes précédents conduit à l'équation d'évolution suivante pour σ_{ij}

$$\dot{\sigma}_{ij} = -i\omega_{ij} \sigma_{ij} - (\Gamma_{ij} + i\Delta_{ij}) \sigma_{ij} \tag{X-26}$$

- Expression de Γ_{ij}

On trouve que Γ_{ij} est la somme d'une contribution "non-adiabatique" et d'une contribution "adiabatique".

$$\Gamma_{ij} = \Gamma_{ij}^{\text{non adiab.}} + \Gamma_{ij}^{\text{adiab.}} \tag{X-27}$$

avec
$$\Gamma_{ij}^{\text{non adiab.}} = \frac{1}{2} \left[\sum_{l \neq i} \Gamma_{l \leftarrow i} + \sum_{m \neq j} \Gamma_{m \leftarrow j} \right] \tag{X-28}$$

Mathématiquement, $\Gamma_{ij}^{\text{non adiab.}}$ provient des diagrammes ① et ④, plus précisément des fonctions δ associées aux états intermédiaires l, γ de ① et ④ avec $l \neq i$ pour ①, $l \neq j$ pour ④

Quand à $\Gamma_{ij}^{\text{adiab.}}$, il est donné par :

$$\Gamma_{ij}^{\text{adiab.}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} p(\alpha) \delta(E_{\alpha} - E_{\beta}) \times \left\{ \frac{1}{2} |\langle i\beta | V | i\alpha \rangle|^2 + \frac{1}{2} |\langle j\beta | V | j\alpha \rangle|^2 - \langle i\beta | V | i\alpha \rangle \langle j\alpha | V | j\beta \rangle \right\} \tag{X-29}$$

Les 2 premiers termes du crochet de (X-29) proviennent de fonctions δ associées aux états intermédiaires de ① et ④ avec $l = i$ pour ① et $l = j$ pour ④. (Comme il n'y a aucune interaction sur l'une des 2 lignes de ① et ④ on a $\alpha = \beta$, et on a changé de notations en remplaçant γ par β).

Le dernier terme du crochet de (X-29) représente la somme de ② et ③ (dont les parties principales s'annulent)

Noter la différence de signe entre les 2 premiers termes et le dernier terme du crochet de X-29.

- Expression de Δ_{ij}

On trouve
$$\Delta_{ij} = \Delta_i - \Delta_j \tag{X-30}$$

où
$$\hbar \Delta_i = \mathcal{P} \sum_l \sum_{\alpha} \sum_{\beta} p(\alpha) \frac{|\langle l\beta | V | i\alpha \rangle|^2}{E_{i\alpha} - E_{l\beta}} \tag{X-31}$$

et une expression analogue pour $\hbar \Delta_j$.

$\hbar \Delta_i$ provient de la partie principale associée à l'état intermédiaire de ① (avec aussi bien $l \neq i$ que $l = i$). Rappelons que sur ① et ④, $\alpha = \beta$, de sorte qu'on peut changer de notations et remplacer γ par β . De même $\hbar \Delta_j$ provient de la partie principale associée à l'état intermédiaire de ④

Ni ② ni ③ ne contribuent à Δ_{ij} .

(ii) Interprétation physique

- Γ_{ij} représente l'amortissement de la "cohérence" σ_{ij} entre les niveaux $|i\rangle$ et $|j\rangle$ de A.
- $\Gamma_{ij}^{\text{non adiab.}}$ est la $\frac{1}{2}$ somme des probabilités par unité de temps qu'a le système de quitter i ou j . Un processus arrachant le système de i ou j perturbe en effet l'oscillation de toute grandeur physique sensible à σ_{ij} .

- Interprétation de $\Gamma_{ij}^{\text{adiab.}}$

Le 1^{er} terme du crochet de (X-29) représente une destruction de "cohérence" entre i et j due à une "collision élastique" entre A et R au cours de laquelle $A+R$ transite de $|i\alpha\rangle$ vers $|i\beta\rangle$ (fig 1a). Cette collision est dite élastique (vis à vis de R) car, comme l'état de A ne change pas au cours de la collision et que l'énergie globale de $A+R$ ne doit évidemment pas changer, on doit avoir $E_\alpha = E_\beta$ [d'où la fonction $\delta(E_\alpha - E_\beta)$ apparaissant dans X-29]. De même le 2^{em} terme du crochet de (X-29) représente l'effet d'une collision élastique de $|j\alpha\rangle$ vers $|j\beta\rangle$ (fig 1 b).

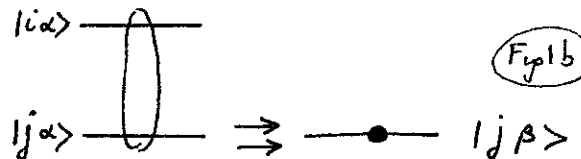
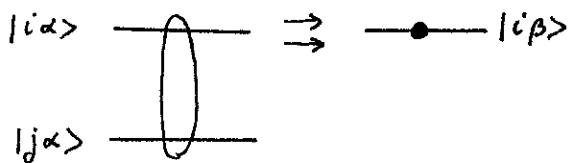


Fig 1a

Fig 1b

Le dernier terme du crochet de (X-29) représente une "restitution de cohérence" (changement de signe avec les 2 termes précédents) due à une collision élastique qui transfère une superposition linéaire de $|i\alpha\rangle$ et $|j\alpha\rangle$ vers une superposition linéaire de $|i\beta\rangle$ et $|j\beta\rangle$ (fig 2).

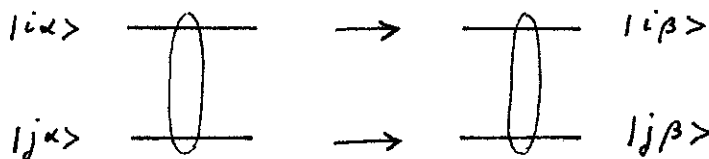


Fig 2

- Les transitions qui apparaissent dans $\Gamma_{ij}^{\text{non adiab.}}$ sont telles que $E_\beta \neq E_i$ (ou $E_\beta \neq E_j$), d'où l'on déduit: $E_\alpha \neq E_\beta$. Par contre celles qui apparaissent dans $\Gamma_{ij}^{\text{adiab.}}$ sont, comme nous l'avons vu, telles que $E_\alpha = E_\beta$.

C'est là l'origine des dénominations adiabatique et non adiabatique. Comme nous le verrons plus loin, les Γ sont proportionnels à certaines fonctions de corrélation des réservoirs R. Les $\Gamma_{ij}^{\text{adiab.}}$ sont sensibles à la valeur de la T.F. de ces fonctions de corrélation en $\omega = 0$ (fréquence nulle), alors que $\Gamma_{ij}^{\text{non adiab.}}$ est sensible aux valeurs en $\omega \neq 0$ de cette T.F.

- Interprétation de $\hbar \Delta_i$ (voir X-31)

C'est un déplacement (du 2^{em} ordre) des amp. transitionnelles virtuelles

que le système global $A+R$ effectue à partir de $|i\alpha\rangle$ (pondéré par $p(\alpha)$) vers tous les autres états $|l\beta\rangle$. La singularité du dénominateur en $E_{i\alpha} = E_{l\beta}$ est éliminée par la partie principale.

⑥ Evolution d'un ensemble d'éléments non-diagonaux de σ correspondant à une fréquence de Bohr dégénérée

(i) Termes nouveaux par rapport au cas précédent

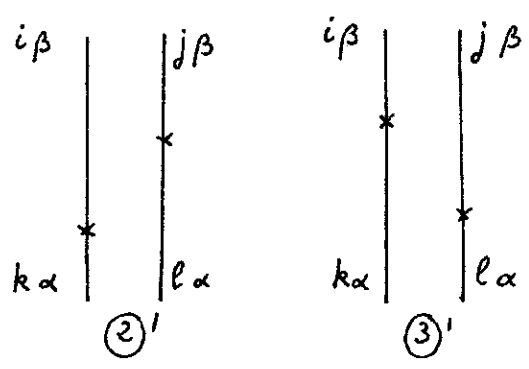
Les diagrammes du type ① et ④ de la page (X-5) restent les mêmes. Comme il n'y a pas d'interaction sur une ligne, on a forcément les mêmes indices sur les lignes entrantes que sortantes (aussi bien pour A que pour R).

En plus des diagrammes représentés en ② et ③ il faut maintenant ajouter les diagrammes ②' et ③' suivants, où, par

suite de l'approximation séculaire, on ne conserve que les σ_{kl} tels que :

$$|\omega_{ij} - \omega_{kl}| \ll \mathcal{R}$$

Le calcul de ②' + ③' ne présente pas de difficultés (les parties principales s'annulent, les fonctions δ se doublent) et on obtient :



$$\mathcal{R}_{ij\leftarrow kl}(\omega_{ij}) = \Gamma_{ij\leftarrow kl} = \tag{X-32}$$

$$\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} p(\alpha) \langle i\beta | V | k\alpha \rangle \langle l\alpha | V | j\beta \rangle \delta(E_{k\alpha} - E_{i\beta})$$

D'où l'équation d'évolution suivante pour σ_{ij} :

$$\dot{\sigma}_{ij} = -i\omega_{ij} \sigma_{ij} - (\Gamma_{ij} + i\Delta_{ij}) \sigma_{ij} + \sum_{kl \neq ij} \substack{\Gamma_{ij\leftarrow kl} \\ |\omega_{kl} - \omega_{ij}| \leq \mathcal{R}} \sigma_{kl} \tag{X-33}$$

où les Γ_{ij} et Δ_{ij} sont définis au § 5 et $\Gamma_{ij\leftarrow kl}$ en X-32

(ii) Interprétation physique de $\Gamma_{ij\leftarrow kl}$

$\Gamma_{ij\leftarrow kl}$ correspond à une "collision" entre A et R (non élastique du point de vue de R puisque $E_{\alpha} - E_{\beta} = E_{k} - E_{l} \neq 0$) qui transforme une superposition linéaire de $|k\alpha\rangle$ et $|l\alpha\rangle$ vers une superposition linéaire de $|i\beta\rangle$ et $|j\beta\rangle$ (Fig. 3)

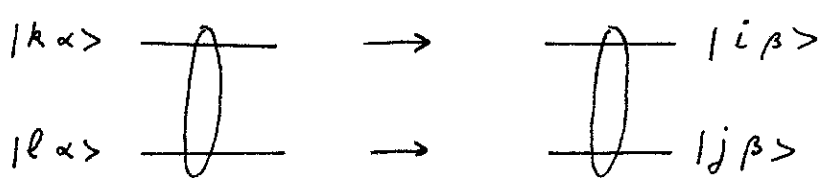


Fig. 3

⑦ Autre forme possible de l'équation pilote

- Dans le § précédent nous avons développé l'équation pilote en considérant l'équation d'évolution de chaque élément de matrice de σ . Pour certaines applications, il peut être utile de garder une forme opératoire de l'équation pilote.

- Pour cela, repartons de (IX-38). Négliger les termes suivants revient à calculer R_A à l'ordre le plus bas (approximation 1 de § F). Remplaçons $\tilde{\sigma}_A(t-\tau)$ par $\tilde{\sigma}_A(t)$ [approximation 3 de courte mémoire de § F]. En revenant de la représentation d'interaction à la représentation de Schrödinger et en utilisant la forme (VIII-58) $V = AR$ de V , on obtient:

$$\frac{d}{dt} \sigma_A = \frac{1}{i\hbar} [H_A, \sigma_A] - \frac{1}{\hbar^2} T_{FR} \int_0^\infty d\tau [AR, [\tilde{A}(-\tau)\tilde{R}(-\tau), \sigma_R(0)\sigma_A(t)]] \quad (X-34)$$

$$\text{où } \tilde{A}(-\tau) = e^{-iH_A\tau/\hbar} A e^{iH_A\tau/\hbar} \quad \tilde{R}(-\tau) = e^{-iH_R\tau/\hbar} R e^{iH_R\tau/\hbar} \quad (X-35)$$

Il faut en fait ne garder que la partie séculaire de X-34 (approx 2 de F)

- Remarque: on peut aussi obtenir (X-34) à partir de (IX-32) en remplaçant $R_A(\tau)$ par $R_A^{(2)}(\tau)$ et en remplaçant $\sigma_A(t-\tau)$ par $e^{iH_A\tau/\hbar} \sigma_A(t)$ [On ne tient compte que de l'évolution non perturbée de A entre $t-\tau$ et t].

- La partie relative à R se factorise dans (X-34) et fait intervenir la fonction de corrélation

$$g(\tau) = \text{Tr} \sigma_R(0) R \tilde{R}(-\tau) = \text{Tr} \sigma_R(0) R e^{-iH_R\tau/\hbar} R e^{iH_R\tau/\hbar} \quad (X-36)$$

On voit également apparaître $\text{Tr} \sigma_R(0) \tilde{R}(-\tau) R$. En utilisant l'invariance d'une trace par permutation circulaire et le fait que $[\tilde{R}(-\tau)]^\dagger = \tilde{R}(-\tau)$, on obtient:

$$\text{Tr} \sigma_R(0) \tilde{R}(-\tau) R = [\text{Tr} \sigma_R(0) R \tilde{R}(-\tau)]^* = g^*(\tau) \quad (X-37)$$

Comme il a été annoncé plus haut, le réseau ne se manifeste dans l'équation pilote (X-34) [qui est strictement équivalente aux équations développées étudiées plus haut] que par l'introduction de fonctions de corrélation des grandeurs R qui interviennent dans le couplage entre A et R.

- Explicitons le double commutateur et utilisons (X-36) et (X-37)
On obtient aisément:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sigma_A(t) &= \frac{1}{i\hbar} [H_A, \sigma_A(t)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \times \\ &\left\{ A \tilde{A}(-\tau) \sigma_A(t) g(\tau) + \sigma_A(t) \tilde{A}(-\tau) A g^*(\tau) \right. \\ &\left. - \tilde{A}(-\tau) \sigma_A(t) A g(\tau) - A \sigma_A(t) \tilde{A}(-\tau) g^*(\tau) \right\} \end{aligned}} \quad (X-38)$$

les termes de la 2^{ème} ligne correspondent aux diagrammes ① et ④ étudiés plus haut. Dans certains cas, on peut encore simplifier leur expression et les écrire sous forme de commutateurs et d'anticommutateurs (introduction d'un "hamiltonien non-hermitique")

Les termes de la 3^{ème} ligne correspondent aux diagrammes ② et ③ étudiés plus haut. Ils représentent physiquement des transferts.

Equation pilote décrivant l'évolution d'un petit système S couplé à un grand réservoir R (suite)

H - Discussion des approximations.

① Temps de corrélation τ_c de la force exercée par R sur A.

- Explicitons la fonction de corrélation $g(\tau)$ donnée en X-36 :

$$g(\tau) = \text{Tr} \left\{ \sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha| p(\alpha) R e^{-iH_R \tau / \hbar} R e^{iH_R \tau / \hbar} \right\}$$

$$= \sum_{\alpha, \beta} p(\alpha) |\langle\alpha|R|\beta\rangle|^2 e^{i\omega_{\alpha\beta} \tau} \tag{XI-1}$$

- On peut écrire (XI-1) sous la forme :

$$g(\tau) = \int d\omega \tilde{g}(\omega) e^{i\omega \tau} \tag{XI-2}$$

où $\tilde{g}(\omega) = \sum_{\alpha, \beta} p(\alpha) |\langle\alpha|R|\beta\rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{\alpha\beta})$ (XI-3)

$\tilde{g}(\omega)$ est la densité spectrale des fréquences de Bohr de la grandeur physique R du réservoir qui agit sur A. $\tilde{g}(\omega)$ est la T.F. de $g(\tau)$

- $g(\tau)$ tend vers 0 si $\tau \gg \tau_c$ où τ_c est l'inverse de la largeur de $g(\omega)$. Plus la densité spectrale $\tilde{g}(\omega)$ est large, plus τ_c est court.

② Ordre de grandeur des coefficients de l'équation pilote.

- D'après (X-38), cet ordre de grandeur est (ω_0 est une fréquence atomique):

$$\Gamma = \frac{1}{\hbar^2} A^2 \int_0^\infty dt e^{i\omega_0 t} g(t) \lesssim \frac{1}{\hbar^2} A^2 g(0) \tau_c \tag{XI-4}$$

- Or, d'après (XI-2) et (XI-3) :

$$g(0) = \int d\omega \tilde{g}(\omega) = \sum_{\alpha, \beta} p(\alpha) |\langle\alpha|R|\beta\rangle|^2 = \sum_{\alpha} p(\alpha) \langle\alpha|R^2|\alpha\rangle = \langle R^2 \rangle \tag{XI-5}$$

de sorte que $\Gamma \simeq \frac{1}{\hbar^2} \langle A^2 R^2 \rangle \tau_c \simeq \frac{v^2 \tau_c}{\hbar^2}$ (XI-6)

où v (défini par $v^2 = \langle A^2 R^2 \rangle = \langle \text{VAR}^2 \rangle$) caractérise l'intensité du couplage entre A et R.

③ Allure de la variation avec ω de $R_A(\omega + i\epsilon)$

- L'allure du noyau $R_A(\tau)$ apparaissant dans (IX-3) est, d'après (X-38):

$$R_A(\tau) \simeq \frac{1}{\hbar} A^2 g(\tau) e^{i\omega_0 \tau} \tag{XI-7}$$

- $R_A(\omega + i\epsilon)$ est la T.F. de $R_A(\tau)$. C'est une courbe de largeur $1/\tau_c$. La hauteur de $R_A(\omega + i\epsilon)$, H, est telle que $H \frac{1}{\tau_c} = \int d\omega R_A(\omega) = R_A(\tau=0) = \frac{1}{\hbar} A^2 R^2 = \frac{v^2}{\hbar}$. On en déduit $H = v^2 \tau_c / \hbar$

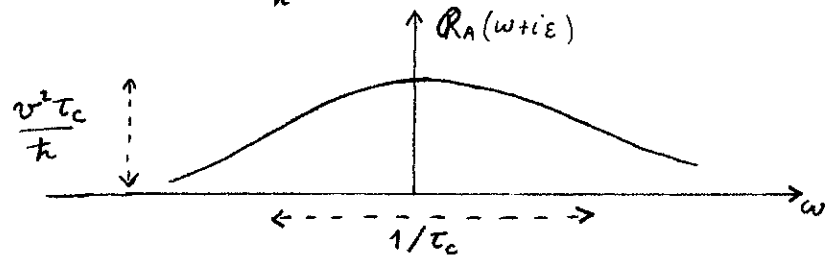


Fig 1

- Comparons la forme de la figure 1 avec l'expression (IX-37) de $R_A(\omega+i\epsilon)$ à l'ordre le plus bas en L_{AR} .

Comme L_{AR} est de l'ordre de v , on en déduit que :

$$\boxed{\frac{L_{AR}}{\hbar\omega+i\epsilon-L_0} \sim \frac{v\tau_c}{\hbar}} \quad (XI-8)$$

relation d'ordre de grandeur qui sera très utile par la suite.

④ Condition de validité du développement perturbatif de $R_A(\omega+i\epsilon)$

La relation (XI-8) montre que le développement de $R_A(\omega+i\epsilon)$ en puissances de L_{AR} est un développement en puissances de $v\tau_c/\hbar$. La condition de validité de ce développement est donc

$$\boxed{\frac{v\tau_c}{\hbar} \ll 1} \quad (XI-9)$$

La condition (XI-9) exprime que le temps de corrélation τ_c de la force exercée par R sur A est si court qu'on peut se limiter à considérer une seule interaction entre A et R durant ce temps τ_c .

⑤ Condition de validité de l'approximation séculaire

Les coefficients Γ de l'équation maîtresse doivent être petits devant les différences entre fréquences de Bohr des niveaux de A. Si ω_0 est une fréquence atomique caractéristique, on doit donc avoir :

$$\boxed{\Gamma \simeq \frac{v^2\tau_c}{\hbar^2} \ll \omega_0} \quad (XI-10)$$

⑥ Condition de validité de l'approximation de mémoire courte

- Point de vue temporel : le système A doit, en représentation d'interaction, évoluer très peu pendant le temps de corrélation τ_c . Comme le temps caractéristique d'évolution de A est $1/\Gamma$, on en déduit

$$\frac{1}{\Gamma} \gg \tau_c \quad (XI-11)$$

c-à-d compte tenu de (XI-6) :

$$\frac{v^2\tau_c^2}{\hbar^2} \ll 1 \quad (XI-12)$$

On retrouve la même condition de validité que (XI-9)

- Point de vue espace des fréquences : $R_A(\omega+i\epsilon)$, de largeur $1/\tau_c$, doit varier peu sur l'intervalle, Γ , ou $\frac{1}{\hbar\omega+i\epsilon-L_0} - R_A(\omega+i\epsilon)$ varie beaucoup. On retombe sur (XI-11)

Remarques

(i) Quand le terme d'ordre le plus bas de $R_A, R_A^{(2)}$, est non nul, il n'y a pas grand sens à inclure des termes d'ordre supérieurs du développement (IX-34) de R_A en puissances de L_{AR} tout en continuant simultanément à négliger la variation avec ω de $R_A^{(2)}$. Les 2 approximations sont caractérisées par le même infiniment petit et il faut les améliorer simultanément.

Il peut se faire cependant que $R_A^{(2)} = 0$. On peut alors pousser le calcul de R_A plus loin en gardant l'approximation de mémoire courte.

(ii) $\Gamma \approx \frac{v}{\hbar} \frac{v \tau_c}{\hbar} \ll \frac{v}{\hbar}$ "Retrecissement par le mouvement" | XI-3

(iii). Il est également très important de préciser la manière dont on prépare et observe le système A, en particulier l'échelle de temps qui caractérise l'observation (cf discussion du cours V sur les difficultés qu'il y a à observer une décroissance non exponentielle après une excitation non percutante)

I. Peut-on considérer l'opérateur densité factorisé à tout instant?

① Position du problème.

- On peut toujours supposer qu'à un certain instant $t=0$ A et R sont mis en contact. L'opérateur densité est alors factorisé :

$$|\rho(0)\rangle\rangle = |\sigma_A(0)\rangle\rangle \otimes |\sigma_R(0)\rangle\rangle \quad (X1-13)$$

- A un instant ultérieur t' , $|\rho(t')\rangle\rangle$ n'est plus factorisé. Négliger les corrélations apparues entre A et R reviendrait à remplacer $|\rho(t')\rangle\rangle$ par

$$|\rho(t')\rangle\rangle \rightarrow |\text{Tr}_R \rho(t')\rangle\rangle \otimes |\text{Tr}_A \rho(t')\rangle\rangle \quad (X1-14)$$

Si R est beaucoup plus gros que A, on peut négliger les modifications induites sur R par A et écrire :

$$|\text{Tr}_A \rho(t')\rangle\rangle \approx |\sigma_R(0)\rangle\rangle \quad (X1-15)$$

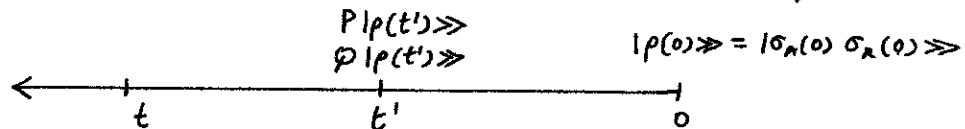
Donc, négliger les corrélations apparues entre A et R reviendrait à remplacer $|\rho(t')\rangle\rangle$ par

$$|\rho(t')\rangle\rangle \rightarrow |\text{Tr}_R \rho(t')\rangle\rangle |\sigma_R(0)\rangle\rangle = P |\rho(t')\rangle\rangle \quad (X1-16)$$

On en déduit que les corrélations apparues entre A et R sont contenues dans

$$(1-P) |\rho(t')\rangle\rangle = \phi |\rho(t')\rangle\rangle \quad (X1-17)$$

- Considérons alors l'évolution du système à partir de t'



Quelle est l'influence de $\phi |\rho(t')\rangle\rangle$ sur l'évolution ultérieure du système à partir de l'instant t' ?

Commencerait-on une grande erreur si, pour calculer $P |\rho(t)\rangle\rangle$, on négligeait purement et simplement $\phi |\rho(t')\rangle\rangle$?

② Etude dans l'espace des temps.

- L'équation intégrodifférentielle (VIII-64), réécrite en remplaçant 0 par t' permet de calculer la vitesse de variation $\frac{d}{dt} P |\rho(t)\rangle\rangle$ en fonction de la condition initiale $\phi |\rho(t')\rangle\rangle$ (terme inhomogène) et de toute l'histoire de $P |\rho(t)\rangle\rangle$ entre t' et t . Un calcul simple donne à partir de (VIII-64) en représentation d'interaction :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} P \tilde{|\rho(t)\rangle\rangle} &= e^{iL_0 t/\hbar} P L e^{-i\phi L(t-t')/\hbar} \phi |\rho(t')\rangle\rangle \\ &+ \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t-t'} dt e^{iL_0 t/\hbar} P L e^{-i\phi L \tau/\hbar} \phi L e^{-iL_0(t-\tau)/\hbar} P \tilde{|\rho(t-\tau)\rangle\rangle} \end{aligned} \quad (X1-18)$$

- La 1^{ère} ligne de (XI-18) représente l'influence de $\varphi|p(t')\rangle$ sur $\frac{d}{dt} P|p(t)\rangle$
- La 2^{ème} ligne de (XI-18) donne une contribution à cette vitesse de variation qui est nulle pour $t = t'$ et qui, pour $t - t' \gg \tau_c$, se stabilise et redonne la forme habituelle de l'équation pilote (produit de $P|p(t)\rangle$ par un coefficient Γ de l'ordre de $v^2 \tau_c / \hbar^2$). Voir courbe en traits tiretés de la figure 2

- Précisons davantage la 1^{ère} ligne de (XI-18). L'équation (VIII-63) (où l'on remplace t par t') permet de calculer $\varphi|p(t')\rangle$ en fonction de toute l'histoire de $P|p(t)\rangle$ entre 0 et t' :

$$\varphi|p(t')\rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} dt e^{-i\varphi L t / \hbar} \varphi L P e^{-i\varphi L_0(t'-t)/\hbar} \tilde{p}(t'-t)\rangle \quad (XI-19)$$

Reportons (XI-19) dans (XI-18). On obtient pour la 1^{ère} ligne de (XI-18) :

$$\frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} dt e^{i\varphi L_0 t / \hbar} P L e^{-i\varphi L(t-t')/\hbar} e^{-i\varphi L t / \hbar} \varphi L P e^{-i\varphi L_0(t'-t)/\hbar} \tilde{p}(t'-t)\rangle \quad (XI-20)$$

- Si l'on calcule (XI-20) à l'ordre le plus bas, en L_{NR} et si l'on repasse de l'espace de Liouville à l'espace des états on obtient :

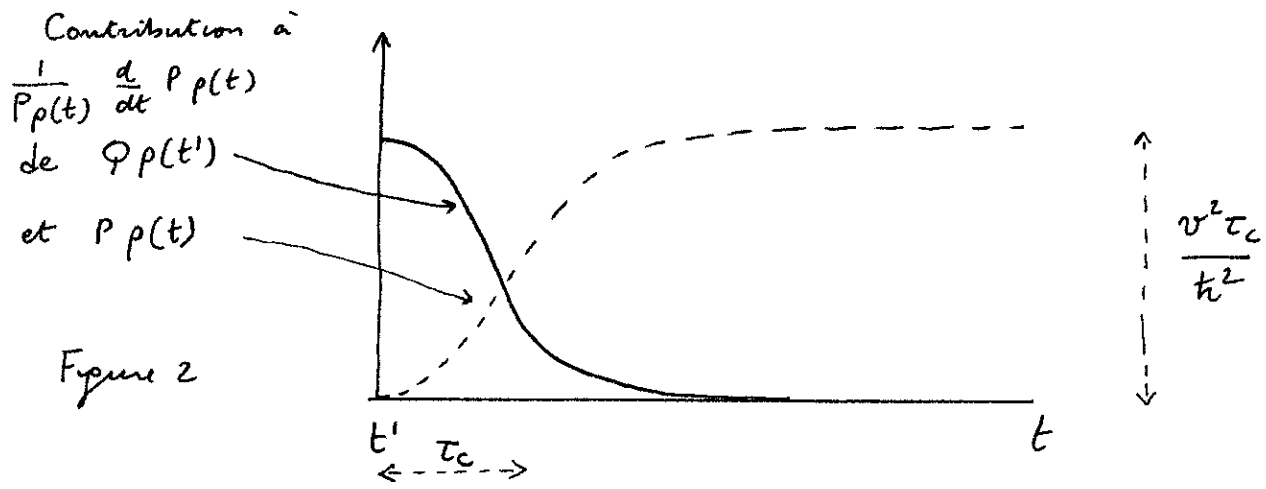
$$\frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} dt \text{Tr}_R \left[\tilde{V}(t), [\tilde{V}(t'-t), \sigma_R(0) \tilde{\sigma}_R(t'-t)] \right] \quad (XI-21)$$

La partie dépendant de R dans (XI-21) se factorise et fait intervenir la fonction de corrélation :

$$\text{Tr} \sigma_R(0) \tilde{R}(t) \tilde{R}(t'-t) = g(t-t'+t) \quad (XI-22)$$

- $t-t'+t$ est au moins égal à $t-t'$. On en déduit que

- (i) si $t-t' \gg \tau_c$, $g(t-t'+t) \approx 0$ et la contribution de $\varphi|p(t')\rangle$ à la vitesse de variations $\frac{d}{dt} P|\tilde{p}(t)\rangle$ est nulle.
- (ii) si $t-t' \lesssim \tau_c$, cette contribution n'est pas nulle. On trouve alors aisément à partir de (XI-21) que la contribution de $\varphi|p(t')\rangle$ à $\frac{d}{dt} P|p(t)\rangle$ est de l'ordre de $\frac{v^2 \tau_c}{\hbar^2}$ (cf courbe en traits pleins de la figure 2)



En conclusion :

L'existence de $\varphi p(t')$ n'influe plus sur $\frac{d}{dt} Pp(t)$ dès que $t-t' \gg \tau_c$. Par contre, pour $t-t' \leq \tau_c$, le comportement de $\frac{d}{dt} Pp(t)$ est entièrement déterminé par $\varphi p(t')$ [l'intervalle d'intégration de l'intégrale de la 2^{ème} ligne de XI-18 tend vers 0].

L'erreur commise ^{(sur $Pp(t)$)} en négligeant $\varphi p(t')$ est donc au maximum de l'ordre de l'intégrale de la courbe en traits pleins de la figure 2, c.-à-d $\frac{v^2 \tau_c}{k^2} \cdot \tau_c = \frac{v^2 \tau_c^2}{k^2} \ll 1$

Tant qu'on s'intéresse à une échelle de temps grande devant τ_c , on peut donc à une excellente approximation négliger toute corrélation entre A et R et remplacer $p(t')$ par $\sigma_A(t') \sigma_R(0)$.

L'étude précédente montre cependant que l'évolution de $Pp(t)$ à l'instant t est entièrement déterminée par les corrélations qui sont apparues ^(à t') entre A et R du fait de leur interaction. En d'autres termes, l'équation pilote étudiée plus haut tient compte des corrélations apparues entre A et R pendant un temps de l'ordre de τ_c . Mais A et R ne peuvent rester corrélés pendant un temps supérieur à τ_c .

③ Etude dans l'espace des fréquences.

- Au lieu de calculer $\frac{d}{dt} P|p(t)\rangle\rangle$, calculons directement $P|p(t)\rangle\rangle$ en écrivant :

$$P|p(t)\rangle\rangle = P U(t) P|p(0)\rangle\rangle = P U(t-t') U(t') P|p(0)\rangle\rangle = P U(t-t') P P U(t') P|p(0)\rangle\rangle + P U(t-t') \varphi \varphi U(t') P|p(0)\rangle\rangle \quad (XI-23)$$

Le dernier terme de la 2^{ème} ligne de (XI-23) donne directement l'effet de corrélations apparues à l'instant t' .

- Utilisons alors la relation (IX-5) entre $U(t)$ et $g(\omega+i\epsilon)$ [on suppose ici $t' > 0, t-t' > 0$]:

$$P|p(t)\rangle\rangle = \left(\frac{i\hbar}{2\pi}\right)^2 \iint d\omega d\omega' e^{-i\omega(t-t')} e^{-i\omega't'} \times \left\{ P g(\omega+i\epsilon) P P g(\omega'+i\epsilon) P|p(0)\rangle\rangle + P g(\omega+i\epsilon) \varphi \varphi g(\omega'+i\epsilon) P|p(0)\rangle\rangle \right\} \quad (XI-24)$$

- Il suffit alors d'utiliser les résultats du cours VI sur les restrictions $P g P, P g \varphi, \varphi g P$ pour obtenir finalement :

$$P|p(t)\rangle\rangle = \left(\frac{i\hbar}{2\pi}\right)^2 \iint d\omega d\omega' e^{-i\omega(t-t')} e^{-i\omega't'} \times \left\{ \frac{P}{\hbar\omega+i\epsilon - L_A - P R(\omega+i\epsilon) P} \frac{P}{\hbar\omega'+i\epsilon - L_A - P R(\omega'+i\epsilon) P} + \frac{P}{\hbar\omega+i\epsilon - L_A - P R(\omega+i\epsilon) P} L_{AR} \frac{\varphi}{(\hbar\omega+i\epsilon - \varphi L_0 \varphi - \varphi L_{AR} \varphi)} \frac{\varphi}{(\hbar\omega'+i\epsilon - \varphi L_0 \varphi - \varphi L_{AR} \varphi)} L_{AR} \frac{P}{\hbar\omega'+i\epsilon - L_A - P R(\omega'+i\epsilon) P} \right\} \quad (XI-25)$$

Le 1^{er} terme de (XI-25) (2^{ème} ligne) est plus petit que le second (3^{ème} ligne) par un facteur de l'ordre de :

$$L_{AR} \frac{\rho}{\hbar\omega + i\epsilon - \rho L_0 \rho - \rho L_{AR} \rho} \frac{\rho}{\hbar\omega + i\epsilon - \rho L_0 \rho - \rho L_{AR} \rho} L_{AR} \quad (X1-26)$$

Comme ce terme est déjà au moins d'ordre 2 en L_{AR} , on peut négliger dans les dénominateurs $\rho L_{AR} \rho$, ce qui montre, d'après (X1-8), que l'effet des corrélations apparues entre A et R à l'instant t' est d'ordre de

$$\left(\frac{L_{AR}}{\hbar\omega + i\epsilon - L_0} \right)^2 \approx \frac{v^2 \tau_c^2}{\hbar^2} \quad (X1-27)$$

On retrouve bien l'ordre de grandeur obtenu au § précédent (intégrale de la courbe en traits pleins de la figure 2)

J. Calcul des fonctions de corrélation. Théorème de régression quantique.

① Importance des fonctions de corrélation.

- Dans de nombreux cas, des signaux expérimentaux relatifs à A sont exprimables en fonction des quantités :

$$\langle D(t) C(t') \rangle \quad (X1-28)$$

qu'on appelle "fonctions de corrélation". C et D sont 2 opérateurs de A. On utilise le point de vue de Heisenberg de sorte que

$$D(t) = e^{iHt/\hbar} D e^{-iHt/\hbar} \quad (X1-29)$$

$$C(t') = e^{iHt'/\hbar} C e^{-iHt'/\hbar} \quad (X1-30)$$

où H est l'hamiltonien total de A+R. Dans (X1-28) la valeur moyenne est prise dans l'état du système global A+R, état qui est indépendant du temps dans le point de vue de Heisenberg et que l'on peut donc prendre égal à $\rho(0) = \sigma_A(0) \sigma_R(0)$

- Souvent, le signal fait intervenir la T.F. de la fonction de corrélation

$$J(\omega) = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{t_1}^{t_2} dt' e^{-i\omega(t-t')} \langle D(t) C(t') \rangle \quad (X1-31)$$

Par exemple la répartition spectrale de la lumière émise par un atome est donnée par la T.F. des fonctions de corrélation du dipôle atomique.

$T = t_2 - t_1$ est la durée de l'observation.

- Peut-on calculer simplement les fonctions de corrélation (X1-28) avec le formalisme développé dans ce chapitre ?

② Passage dans l'espace de Liouville.

- En utilisant (X1-29) et (X1-30), on obtient pour (X1-28) :

$$\langle D(t) C(t') \rangle = \text{Tr} \left\{ \rho(0) e^{iHt/\hbar} D e^{-iHt/\hbar} e^{iHt'/\hbar} C e^{-iHt'/\hbar} \right\} \quad (X1-32)$$

En écrivant le 1^{er} opérateur $e^{iHt/\hbar}$ sous la forme $e^{iHt'/\hbar} e^{iH(t-t')/\hbar}$, et en utilisant l'invariance d'une trace par permutation circulaire, on obtient :

$$\langle D(t) C(t') \rangle = \text{Tr} \left\{ D e^{-iH(t-t')/\hbar} C e^{-iHt'/\hbar} \rho(0) e^{iHt'/\hbar} e^{iH(t-t')/\hbar} \right\} \quad (X1-33)$$

- Or, d'après (VIII-35) :

$$e^{-iHt'/\hbar} \rho(0) e^{iHt'/\hbar} \rightarrow e^{-iLt'/\hbar} |\rho(0)\rangle\rangle \quad (X1-34)$$

- A partir de l'opérateur C de l'espace des états \mathcal{E}_A introduisons l'opérateur \mathcal{C} de l'espace de Liouville \mathcal{L} défini par son action sur n'importe quel ket produit de \mathcal{L}

$$\mathcal{C} \cdot |\rho_A \otimes \rho_R\rangle\rangle = |C\rho_A \otimes \rho_R\rangle\rangle \quad (X1-35)$$

On peut alors écrire :

$$C e^{-iHt'/\hbar} \rho(0) e^{iHt'/\hbar} \rightarrow \mathcal{C} e^{-iLt'/\hbar} |\rho(0)\rangle\rangle \quad (X1-36)$$

- La multiplication du 1^{er} membre de (X1-36), à gauche par $e^{-iH(t-t')/\hbar}$ à droite par $e^{iH(t-t')/\hbar}$ revient à multiplier le 2^{ème} membre de (X1-36) à gauche par $e^{-iL(t-t')/\hbar}$.

Enfin, multiplier le tout par D et prendre la trace revient à prendre dans \mathcal{L} le produit scalaire par $\langle\langle D^+ |$, de sorte que finalement :

$$\langle D(t) C(t') \rangle = \langle\langle D^+ | e^{-iL(t-t')/\hbar} \mathcal{C} e^{-iLt'/\hbar} | \rho(0)\rangle\rangle \quad (X1-37)$$

- Comme $\varphi|\rho(0)\rangle\rangle = 0$, on peut écrire $P|\rho(0)\rangle\rangle$ à la place de $|\rho(0)\rangle\rangle$ dans (X1-37).

- Insérons $P+\varphi=1$ à droite de \mathcal{C}
 En réalité \mathcal{C} est un opérateur de \mathcal{L}_A . P un opérateur de \mathcal{L}_R (rappelons que $P = P_R \mathbb{1}_A$. Il faudrait écrire de même $\mathcal{C} = \mathcal{C}_A \mathbb{1}_R$). \mathcal{C} commute donc avec P et φ et on peut écrire

$$\mathcal{C} = \mathcal{C}(P+\varphi) = P\mathcal{C}P + \varphi\mathcal{C}\varphi \quad (X1-38)$$

- Enfin $\langle\langle D^+ |$ est un bra de \mathcal{L}_A (il faudrait écrire en réalité $\langle\langle D_A^+ |$, de sorte qu'on peut écrire

$$\langle\langle D^+ | = \langle\langle D^+ | P \quad (X1-39)$$

Finalement, on peut transformer (X1-37) en l'expression suivante :

$$\langle D(t) C(t') \rangle = \langle\langle D^+ | P e^{-iL(t-t')/\hbar} P \mathcal{C} P e^{-iLt'/\hbar} P | \rho(0)\rangle\rangle + \langle\langle D^+ | P e^{-iL(t-t')/\hbar} \varphi \mathcal{C} \varphi e^{-iLt'/\hbar} P | \rho(0)\rangle\rangle \quad (X1-40)$$

- Comme au § précédent, introduisons les TF de $e^{-iL(t-t')/\hbar}$ et $e^{-iLt'/\hbar}$.

Nous supposons ici $t' > 0$ et $t > t'$ de sorte que nous utiliserons $g(\omega+i\epsilon)$ et $g(\omega'+i\epsilon)$. Si t était inférieur à t' , il faudrait utiliser $g(\omega-i\epsilon)$ [Avec le contour $C_+ + C_-$ et $g(\omega+i\epsilon) - g(\omega-i\epsilon)$, on pourrait d'ailleurs utiliser une formule valable quel que soit le signe de $t-t'$]

On obtient ainsi l'expression :

$$\langle D(t) C(t') \rangle = \left(\frac{i\hbar}{2\pi}\right)^2 \iint d\omega d\omega' e^{-i\omega(t-t')} e^{-i\omega't'}$$

$$\left\{ \langle D^+ | \frac{P}{\hbar\omega+i\epsilon-L_A - PR(\omega+i\epsilon)P} \mathcal{E} \frac{P}{\hbar\omega'+i\epsilon-L_A - PR(\omega'+i\epsilon)P} | \rho(0) \rangle \right. \\ \left. \langle D^+ | \frac{P}{\hbar\omega+i\epsilon-L_A - PR(\omega+i\epsilon)P} L_{AR} \frac{P}{\hbar\omega+i\epsilon-\rho_L\rho-\rho_{LAR}P} \mathcal{E} \frac{P}{\hbar\omega'+i\epsilon-\rho_L\rho-\rho_{LAR}P} L_{AR} \frac{P}{\hbar\omega'+i\epsilon-L_A - PR(\omega'+i\epsilon)P} | \rho(0) \rangle \right\} \quad (X1-41)$$

③ Théorème de répression quantique

- L'expression (X1-41) est exacte.

On voit cependant, par un raisonnement identique à celui du § I précédent, que le dernier terme (3^{ème} ligne de (X1-41)) est plus petit que le premier (2^{ème} ligne de (X1-41)) par un facteur de l'ordre de $\left(\frac{L_{AR}}{\hbar\omega+i\epsilon-L_0}\right)^2 \sim \frac{v^2 \tau_c^2}{\hbar^2} \ll 1$

- Nous ne garderons donc que le 1^{er} terme de (X1-41). On voit d'ailleurs que

$$\frac{i\hbar}{2\pi} \int d\omega' e^{-i\omega't'} \frac{P}{\hbar\omega'+i\epsilon-L_A - PR(\omega'+i\epsilon)P} | \rho(0) \rangle = | \sigma_A(t') \sigma_R(0) \rangle \quad (X1-42)$$

de sorte que le 1^{er} terme de (X1-41) peut se récrire

$$\langle D(t) C(t') \rangle = \frac{i\hbar}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} \langle D^+ | \frac{P}{\hbar\omega+i\epsilon-L_A - PR(\omega+i\epsilon)} \mathcal{E} | \sigma_A(t') \sigma_R(0) \rangle \quad (X1-43)$$

Or d'après la définition de \mathcal{E}

$$\mathcal{E} | \sigma_A(t') \sigma_R(0) \rangle = | C \sigma_A(t') \otimes \sigma_R(0) \rangle \quad (X1-44)$$

D'autre part, comme au § D-4, on peut se débarrasser de P et $\sigma_R(0)$ en introduisant l'opérateur $R_A(\omega+i\epsilon)$. Il vient ainsi finalement :

$$\langle D(t) C(t') \rangle \approx \frac{i\hbar}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} \langle D^+ | \frac{1}{\hbar\omega+i\epsilon-L_A - R_A(\omega+i\epsilon)} | C \sigma_A(t') \rangle \quad (X1-45)$$

Dans (X1-45) toutes les quantités sont définies dans L_A .

- En conclusion, on voit que si $\frac{v\tau_c}{\hbar} \ll 1$, on peut calculer la fonction de corrélation $\langle D(t) C(t') \rangle$ de la manière suivante ;

- (i) On calcule $\sigma_A(t')$ à partir de $\sigma_A(0)$ grace à l'équation pilote.
- (ii) On prend pour nouvel état initial $| C \sigma_A(t') \rangle$
- (iii) On laisse évoluer le système à partir de cet état initial pendant un intervalle de temps $t-t'$. L'évolution est toujours calculée par l'équation pilote.
- (iv) On calcule enfin la valeur moyenne de D dans l'opérateur densité ainsi obtenu.

- Cette possibilité de calculer une moyenne à 2 temps (ce qui est une fonction de corrélation) à partir de l'équation pilote en déterminant l'évolution des moyennes à 1 temps constitue le théorème de régression quantique. On voit qu'il n'est valable que si $v^2 \tau_c^2 / \hbar \ll 1$

④ Calcul direct d'un signal.

- En fait si le signal observé est la T.F. d'une fonction de corrélation, on voit que l'expression (X1-45) donne directement le signal.
- Supposons que les limites d'intégration t_1 et t_2 du signal (X1-31) soient toutes 2 suffisamment éloignées de 0 de sorte qu'on puisse remplacer $\sigma_A(t')$ par la solution stationnaire $\tilde{\sigma}_A$ de l'équation pilote. (Une telle situation est réalisée si $t_1 \gg \frac{1}{\Gamma}$)

L'intégrand de (X1-45) ne dépend plus alors de t' et l'intégrale sur t' de (X1-31) donne directement $t_2 - t_1 = T$ qui est le temps d'observation.

Reste à faire dans (X1-31) l'intégrale sur t , or ce qui revient au même sur $t - t'$. A la limite $T \rightarrow \infty$ et en retranchant $g(\omega - i\epsilon)$ de manière à inclure la possibilité $t' > t$, on obtient

$$\frac{\text{Signal}}{T} \sim \ll D^+ \left[\frac{1}{\hbar \omega + i\epsilon - L_A - R_A(\omega + i\epsilon)} - \frac{1}{\hbar \omega - i\epsilon - L_A - R_A(\omega - i\epsilon)} \right] \Big| C \tilde{\sigma}_A \gg \quad (\text{X1-46})$$

On voit ainsi toute l'importance de l'opérateur R_A .

Remarque

Comme on a négligé un terme en $\frac{v^2 \tau_c^2}{\hbar^2}$ en laissant tomber la 3^{ème} ligne de (X1-41), on voit qu'il n'y aurait pas grand sens à vouloir calculer dans (X1-46) $R_A(\omega + i\epsilon)$ à un ordre trop élevé, ou à vouloir tenir compte de manière précise de la variation de $R_A(\omega + i\epsilon)$ avec ω . Il vaut mieux évidemment s'en tenir aux 3 approximations du § F. Si on veut aller plus loin, il faut également tenir compte du dernier terme de X1-41

Applications de l'équation pilote

I : Oscillateur harmonique amorti.

① Description du modèle.

- Système S : oscillateur harmonique de fréquence ω_0
 Opérateurs de création et d'annihilation : a, a^+

$$H_A = \omega_0 a^+ a \quad (XII-1)$$

- Réservoir R : Ensemble d'oscillateurs harmoniques α de fréquences ω_α
 Opérateurs : b_α, b_α^+

$$H_R = \sum_\alpha \omega_\alpha b_\alpha^+ b_\alpha \quad (XII-2)$$

- Etat initial de R : équilibre thermodynamique à la température T

$$\sigma_R(0) = \prod_\alpha \sigma_\alpha = \prod_\alpha \frac{e^{-\frac{1}{2}\omega_\alpha b_\alpha^+ b_\alpha / kT}}{\text{Tr} e^{-k\omega_\alpha b_\alpha^+ b_\alpha / kT}} \quad (XII-3)$$

- Couplage V_{AR}

$$V_{AR} = \sum_\alpha g_\alpha (a b_\alpha^+ + a^+ b_\alpha) \quad (XII-4)$$

g_α : constante de couplage entre S et l'oscillateur α
 V_{AR} décrit des transitions où S gagne (ou perd) un quantum d'énergie $\hbar\omega_0$ aux dépens (ou au profit) d'un oscillateur α .
 (Nous ne gardons pas de termes du type $a b_\alpha$ ou $a^+ b_\alpha^+$ car ils sont forcément très anti-résonnants)

- Que peut-on décrire avec un tel modèle ?

(i) Comment un oscillateur matériel chargé (S), évolue-t-il par interaction avec tous les modes du champ électromagnétique (oscillateurs b_α) ? Si $T=0$, $\sigma_R(0)$ correspond au vide de photons et on étudie alors l'émission spontanée de (S). Si $T \neq 0$, on a également des processus d'absorption et d'émission induite.

(ii) Comment un mode propre d'une cavité ^{électromagnétique} (oscillateur S) s'amortit-il par suite du couplage avec des oscillateurs matériels (oscillateurs b_α) contenus dans les parois de la cavité qui est à la température T ?

② Etablissement de l'équation pilote.

Le modèle est suffisamment simple pour que l'on puisse obtenir une forme opératoire de l'équation pilote. On a en effet les relations simples :

$$\left\{ \begin{aligned} \tilde{a}(-T) &= e^{-iH_A T/\hbar} a e^{iH_A T/\hbar} = e^{i\omega_0 T} a \\ \tilde{a}^+(-T) &= e^{-i\omega_0 T} a^+ \\ \tilde{b}_\alpha(-T) &= e^{i\omega_\alpha T} b_\alpha \\ \tilde{b}_\alpha^+(-T) &= e^{-i\omega_\alpha T} b_\alpha^+ \end{aligned} \right. \quad (XII-5)$$

Nous utiliserons donc la forme (X-38) de l'équation pilote.

a) Fonctions de corrélation de R

- Le couplage VAR donné par XII-4 peut être réécrit sous la forme :

$$V = a B^{\dagger} + a^{\dagger} B \quad (XII-6)$$

avec
$$B = \sum_{\alpha} g_{\alpha} b_{\alpha} \quad B^{\dagger} = \sum_{\alpha} g_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} \quad (XII-7)$$

- Par suite de la forme (XII-3) de $\sigma_R(0)$ on a :

$$\langle B \tilde{B}(-\tau) \rangle = \langle \tilde{B}^{\dagger}(-\tau) B^{\dagger} \rangle = \langle B^{\dagger} \tilde{B}^{\dagger}(-\tau) \rangle = \langle \tilde{B}(-\tau) B \rangle = 0 \quad (XII-8)$$

(la valeur moyenne dans une matrice densité diagonale d'un produit de 2 opérateurs de création ou de 2 opérateurs d'annihilation est nulle).

L'équation (X-38) s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sigma_A = & -i\omega_0 [a^{\dagger} a, \sigma_A] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\infty} d\tau \times \left\{ \right. \\ & [a a^{\dagger} e^{-i\omega_0 \tau} \langle B^{\dagger} \tilde{B}(-\tau) \rangle + a^{\dagger} a e^{i\omega_0 \tau} \langle B \tilde{B}^{\dagger}(-\tau) \rangle] \sigma_A \\ & + \sigma_A [a^{\dagger} a e^{-i\omega_0 \tau} \langle \tilde{B}(-\tau) B^{\dagger} \rangle + a a^{\dagger} e^{i\omega_0 \tau} \langle \tilde{B}^{\dagger}(-\tau) B \rangle] \\ & - a \sigma_A a^{\dagger} e^{i\omega_0 \tau} \langle B \tilde{B}^{\dagger}(-\tau) \rangle - a^{\dagger} \sigma_A a e^{-i\omega_0 \tau} \langle B^{\dagger} \tilde{B}(-\tau) \rangle \\ & \left. - a \sigma_A a^{\dagger} e^{-i\omega_0 \tau} \langle \tilde{B}(-\tau) B^{\dagger} \rangle - a^{\dagger} \sigma_A a e^{i\omega_0 \tau} \langle \tilde{B}^{\dagger}(-\tau) B \rangle \right\} \quad (XII-9) \end{aligned}$$

- Il suffit donc de calculer les fonctions de corrélation :

$$\begin{aligned} \langle B \tilde{B}^{\dagger}(-\tau) \rangle &= \langle \tilde{B}(-\tau) B^{\dagger} \rangle^* = \sum_{\alpha, \alpha'} g_{\alpha} g_{\alpha'} e^{-i\omega_{\alpha} \tau} \langle b_{\alpha} b_{\alpha'}^{\dagger} \rangle \\ &= \sum_{\alpha} g_{\alpha}^2 e^{-i\omega_{\alpha} \tau} (\langle n_{\alpha} \rangle + 1) \quad (XII-10) \end{aligned}$$

En effet,
$$\langle b_{\alpha} b_{\alpha'}^{\dagger} \rangle = \langle b_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} \rangle \delta_{\alpha\alpha'} = \langle b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha} + 1 \rangle \delta_{\alpha\alpha'} = (\langle n_{\alpha} \rangle + 1) \delta_{\alpha\alpha'} \quad (XII-11)$$

où
$$\langle n_{\alpha} \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{\alpha}}{kT}} - 1} \quad (XII-12)$$

On voit de même apparaître :

$$\langle B^{\dagger} \tilde{B}(-\tau) \rangle = \langle \tilde{B}^{\dagger}(-\tau) B \rangle = \sum_{\alpha, \alpha'} g_{\alpha} g_{\alpha'} \langle b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha'} \rangle e^{+i\omega_{\alpha} \tau} = \sum_{\alpha} g_{\alpha}^2 \langle n_{\alpha} \rangle e^{i\omega_{\alpha} \tau} \quad (XII-13)$$

- En fait, il faut d'après (XII-9) calculer des intégrales sur τ faisant intervenir ces fonctions de corrélation. Ce calcul ne présente pas de difficultés. Par exemple :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\infty} d\tau \sum_{\alpha} g_{\alpha}^2 (\langle n_{\alpha} \rangle + 1) e^{i(\omega_0 - \omega_{\alpha})\tau} &= \frac{1}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\infty} d\tau \sum_{\alpha} g_{\alpha}^2 (\langle n_{\alpha} \rangle + 1) e^{i(\omega_0 - \omega_{\alpha} + i\epsilon)\tau} \\ &= \frac{i}{\hbar^2} \sum_{\alpha} g_{\alpha}^2 \frac{\langle n_{\alpha} \rangle + 1}{\omega_0 - \omega_{\alpha} + i\epsilon} = \frac{\pi}{\hbar^2} \sum_{\alpha} g_{\alpha}^2 (\langle n_{\alpha} \rangle + 1) \delta(\omega_0 - \omega_{\alpha}) \\ &\quad + \frac{i}{\hbar^2} \sum_{\alpha} \mathcal{P} \frac{1}{\omega_0 - \omega_{\alpha}} g_{\alpha}^2 (\langle n_{\alpha} \rangle + 1) \quad (XII-14) \end{aligned}$$

Les sommations sur α sont remplacées par des intégrales car on suppose qu'il y a une infinité continue d'oscillateurs α .

- Finalement, on trouve que les 2 seules quantités qui apparaissent dans l'équation pilote (après l'intégration sur τ) sont :

$$\gamma = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_{\alpha} g_{\alpha}^2 \delta(\omega_0 - \omega_{\alpha}) \quad (XII-15)$$

$$\delta = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha} \frac{g_{\alpha}^2}{\omega_0 - \omega_{\alpha}} \quad (XII-16)$$

ainsi que le nombre moyen $\langle n_0 \rangle$ ^{de quanta} correspondant aux oscillations de fréquence $\omega_2 = \omega_0$

$$\langle n_0 \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega_0/kT} - 1} \quad (XII-17)$$

b) Forme explicite de l'équation pilote.

Après avoir effectué, comme en (XII-14), les diverses intégrales sur τ apparaissant dans (XII-9), on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sigma_A &= -i(\omega_0 + \delta) [a^\dagger a, \sigma_A] \\ &+ \frac{\gamma}{2} [-a^\dagger a \sigma_A - \sigma_A a^\dagger a + 2 a \sigma_A a^\dagger] \\ &+ \gamma \langle n_0 \rangle [-a^\dagger a \sigma_A - \sigma_A a a^\dagger + a \sigma_A a^\dagger + a^\dagger \sigma_A a] \end{aligned} \quad (XII-18)$$

c) Interprétation physique

- 1^{ère} ligne de XII-18

On voit que la fréquence ω_0 de l'oscillateur S est déplacé par le couplage de ω_0 à $\omega_0 + \delta$ où δ est donné par (XII-16).

Chaque niveau n de S est déplacé d'une quantité proportionnelle à n et à δ_0 , de sorte que l'écart entre 2 niveaux consécutifs augmente de δ_0 .

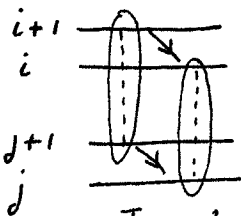
- 2^{ème} ligne de XII-18

Existe même pour $T=0$ ($\langle n_0 \rangle = 0$). Cette ligne décrit donc l'amortissement de S par émission spontanée.

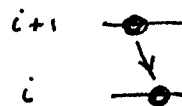
Les 2 premiers termes, $-\frac{\gamma}{2} a^\dagger a \sigma_A$ et $-\frac{\gamma}{2} \sigma_A a^\dagger a$ complètent $\dot{\sigma}_{ij}$ à lui-même et $\dot{\sigma}_{ij}$ décrivent un amortissement de σ_{ij} de constante d'amortissement $-\gamma \frac{n_i + n_j}{2}$ ($\frac{1}{2}$ somme des probabilités de quitter i et j)

le 3^{ème} terme $\gamma a \sigma_A a^\dagger$ couple $\dot{\sigma}_{ij}$ à $\sigma_{i+1, j+1}$.

Il décrit le transfert par émission spontanée d'une partie de la cohérence $\sigma_{i+1, j+1}$ (ou de la population $\sigma_{i+1, i+1}$) vers la cohérence σ_{ij} (ou la population σ_{ii})



Transfert de cohérence



Transfert de population

C'est l'existence de ce terme qui fait que σ_{ij} n'est pas un vecteur propre de l'équation pilote, de valeur propre $-\gamma \frac{\hbar(\omega_i + \omega_j)}{2}$, et que, par suite, la largeur de la raie émise par un oscillateur ne dépend pas de son excitation.

Nous étudions plus loin quelques vecteurs propres de l'équation pilote.

- 3^{ème} ligne de XII-18

décrit l'évolution de l'oscillateur sous l'effet des processus d'absorption et d'émission induite associés aux photons résonnants présents dont le nombre est $\langle n_0 \rangle$.

Les 2 premiers termes décrivent un amortissement supplémentaire de σ_{ij} due à des processus d'absorption ($i \rightarrow i+1, j \rightarrow j+1$) ou d'émission induite ($i \rightarrow i-1, j \rightarrow j-1$)

Le 3^{ème} terme décrit un transfert de cohérence (ou de population) par émission induite $i+1, j+1 \rightarrow i, j$ (ou $i+1, i+1 \rightarrow i, i$)

Le 4^{ème} terme décrit un transfert de cohérence (ou de population) par absorption $i-1, j-1 \rightarrow i, j$ (ou $i-1, i-1 \rightarrow i, i$)

Notons ici à la différence de ce qui se passe pour un atome, il n'y a pas de déplacement de fréquence du système S associé à l'absorption et à l'émission induite de photons de R.

d) Etude de l'évolution de la valeur moyenne de quelques observables.

Soit ρ une observable de S. Pour calculer $\frac{d}{dt} \langle \rho \rangle = \frac{d}{dt} \text{Tr}(\sigma_A \rho) = \text{Tr} \frac{d}{dt}(\sigma_A \rho)$, il suffit de multiplier les 2 membres de (XII-18) et de prendre la trace. On utilise ensuite l'invariance d'une trace lors d'une permutation circulaire et les propriétés de commutation de ρ avec a et a^\dagger

(i) 1^{er} exemple : évolution de $\langle a \rangle$

- Calculons en détail la contribution de la 2^{ème} ligne de (XII-18)

$$\frac{\gamma}{2} \text{Tr} \left\{ -a^\dagger a \sigma_A a - \sigma_A a^\dagger a a + 2a \sigma_A a^\dagger a \right\} \quad (\text{XII-19})$$

Faisons des permutations circulaires de manière à amener σ_A à l'extrême droite. (XII-19) devient

$$\frac{\gamma}{2} \text{Tr} \left\{ -a a^\dagger a \sigma_A - a^\dagger a a \sigma_A + 2a^\dagger a a \sigma_A \right\} =$$

$$\frac{\gamma}{2} \text{Tr} \left[\underbrace{-a a^\dagger - a^\dagger a + 2a^\dagger a}_{=-a^\dagger a - 1} \right] a \sigma_A = -\frac{\gamma}{2} \text{Tr} a \sigma_A = -\frac{\gamma}{2} \langle a \rangle \quad (\text{XII-20})$$

- On calcule de même la contribution de la 1^{ère} ligne

qui vaut $-i(\omega_0 + \delta)\langle a \rangle$, et celle de la 3^{ème} ligne qui est nulle.
de sorte que finalement :

$$\frac{d}{dt} \langle a \rangle = -i(\omega_0 + \delta)\langle a \rangle - \frac{\gamma}{2} \langle a \rangle \tag{XII-21}$$

Le couplage avec R amortit donc le dipôle de S avec une constante $-\frac{\gamma}{2}$ indépendante de $\langle n_0 \rangle$. Il déplace également sa fréquence d'une quantité δ_0 .

2 points sont à noter : On retrouve tout d'abord que l'amortissement du dipôle et donc la largeur de la raie émise sont indépendants de l'état initial de S, ce qui montre toute l'importance du terme de transfert $a^\dagger a$ de (XII-18). On voit aussi que l'amortissement et le déplacement du dipôle sont indépendants du nombre de photons de R présents (ce qui ne serait pas le cas si le système S était un atome et non un oscillateur harmonique)

(ii) 2^{ème} exemple : évolution de $\langle a^\dagger a \rangle$

Des calculs très semblables aux précédents conduisent à :

$$\frac{d}{dt} \langle a^\dagger a \rangle = -\gamma (\langle a^\dagger a \rangle - \langle n_0 \rangle) \tag{XII-22}$$

$\langle a^\dagger a \rangle$ tend vers la valeur d'équilibre thermodynamique $\langle n_0 \rangle$ avec une constante de temps $1/\gamma$.

③ Equation pilote écrite dans la base des états cohérents.

a) Rappel de quelques formules établies l'an dernier. (cours III et IV)

- Etat cohérent $|\alpha\rangle = e^{-\alpha\alpha^*/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \tag{XII-23}$

Comme $|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \tag{XII-24}$

on a aussi $|\alpha\rangle = e^{-\alpha\alpha^*/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} (a^\dagger)^n |0\rangle \tag{XII-25}$

c-à-d encore $|\alpha\rangle = e^{-\alpha\alpha^*/2} e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle \tag{XII-26}$

et par suite $|\alpha\rangle\langle\alpha| = e^{-\alpha\alpha^*} e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle\langle 0| e^{\alpha^* a} \tag{XII-27}$

- Représentation $P(\alpha)$ de σ_A

$$\sigma_A = \int d^2\alpha P(\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha| \tag{XII-28}$$

$P(\alpha)$ est une densité de "quasi probabilité" dans nous rappelons quelques propriétés importantes :

- (i) $P(\alpha)$ est réel (mais non nécessairement > 0)
- (ii) $P(\alpha)$ est normé $\int d^2\alpha P(\alpha) = 1$ (XII-29)
- (iii) $P(\alpha)$ permet de calculer très simplement les valeurs moyennes d'opérateurs mis sous forme normale (tous les opérateurs de création à gauche des opérateurs d'annihilation).

$$\langle (a^\dagger)^l (a)^m \rangle = \text{Tr} \sigma_A a^{\dagger l} a^m = \int d^2\alpha P(\alpha) \text{Tr} |\alpha\rangle\langle\alpha| a^{\dagger l} a^m$$

$$= \int d^2\alpha P(\alpha) \langle\alpha| a^{\dagger l} a^m |\alpha\rangle = \int d^2\alpha P(\alpha) \alpha^{*l} \alpha^m \quad (\text{XII-30})$$

On a utilisé pour établir (XII-30) les 2 relations fondamentales

| | |
|--|--|
| $a \alpha\rangle = \alpha \alpha\rangle$ | $\langle\alpha a^\dagger = \alpha^*\langle\alpha $ |
|--|--|

(XII-31)

- (iv) La densité $P(\alpha)$ associée à un opérateur densité σ_A en équilibre thermodynamique à la température T est

$$P(\alpha) = \frac{1}{\pi \langle n_0 \rangle} e^{-\alpha\alpha^* / \langle n_0 \rangle} \quad (\text{XII-32})$$

gaussienne centrée en $\alpha = \alpha^* = 0$, de largeur $\sqrt{\langle n_0 \rangle}$

b) Problème étudié dans ce § :

Quelle est l'équation d'évolution de la densité de quasi-probabilité $P(\alpha, t)$, sachant que σ_A obéit à l'équation pilote (XII-18) ?

c) Établissement de quelques autres formules utiles.

- Lorsqu'on porte (XII-28) dans (XII-18), on peut utiliser (XII-31) pour calculer $a|\alpha\rangle\langle\alpha|$ ou $|\alpha\rangle\langle\alpha|a^\dagger$. Mais on trouve également sur $a^\dagger|\alpha\rangle\langle\alpha|$ ou $|\alpha\rangle\langle\alpha|a$ qui sont moins évidents. Nous établissons ci-dessous 2 formules intéressantes concernant ces 2 quantités.

- Au lieu de considérer comme variables indépendantes $\text{Re } \alpha$ et $\text{Im } \alpha$, il sera plus simple de considérer α et α^* . Dérivons alors par rapport à α ou α^* l'expression (XII-27) :

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha| = -\alpha^* |\alpha\rangle\langle\alpha| + \alpha^\dagger |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (\text{XII-33})$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha^*} |\alpha\rangle\langle\alpha| = -\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| + |\alpha\rangle\langle\alpha| a \quad (\text{XII-34})$$

On en déduit :

| | |
|--|----------|
| $a^\dagger \alpha\rangle\langle\alpha = \left(\alpha^* + \frac{\partial}{\partial \alpha}\right) \alpha\rangle\langle\alpha $ | (XII-35) |
|--|----------|

| | |
|--|----------|
| $ \alpha\rangle\langle\alpha a = \left(\alpha + \frac{\partial}{\partial \alpha^*}\right) \alpha\rangle\langle\alpha $ | (XII-36) |
|--|----------|

d) Principe du calcul de l'équation d'évolution de $P(\alpha, t)$

- (i) On porte (XII-28) dans (XII-18).
- (ii) grâce à (XII-31), (XII-35), (XII-36) on remplace tous les opérateurs

a, a^\dagger par des nombres α, α^* ou des opérateurs différentiels $\frac{\partial}{\partial \alpha}, \frac{\partial}{\partial \alpha^*}$ agissant sur $|\alpha\rangle\langle\alpha|$

(iii) Dans l'intégrale sur $d^2\alpha$, on fait une intégration par parties qui permet de faire agir $\frac{\partial}{\partial \alpha}$ et $\frac{\partial}{\partial \alpha^*}$ non plus sur $|\alpha\rangle\langle\alpha|$ mais sur $P(\alpha)$ (multiplié éventuellement par des α et α^*). Le terme tout intégré obtenu lors de cette intégration par parties est nul car on suppose que $P(\alpha, \alpha^*, t)$ tend vers 0 suffisamment vite pour $|\alpha| = |\alpha^*| \rightarrow \infty$.

(iv) On égale alors les coefficients de $|\alpha\rangle\langle\alpha|$ dans les intégrales qui figurent des 2 côtés du signe =, ce qui donne $\frac{\partial}{\partial t} P(\alpha, \alpha^*, t) = \dots$

1^{er} exemple d'illustration : Contribution du terme $-\frac{\gamma}{2} a^\dagger a \sigma_A$ de la 2^{ème} ligne de XII-18

d'après XII-35

$$-\frac{\gamma}{2} \int d^2\alpha P(\alpha) a^\dagger a |\alpha\rangle\langle\alpha| = -\frac{\gamma}{2} \int d^2\alpha \alpha P(\alpha) a^\dagger |\alpha\rangle\langle\alpha| \leftarrow \text{d'après XII-31}$$
$$\rightarrow = -\frac{\gamma}{2} \int d^2\alpha \alpha \alpha^* P(\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha| - \frac{\gamma}{2} \int d^2\alpha \alpha P(\alpha) \frac{\partial}{\partial \alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (\text{XII-37})$$

Intégration par parties du dernier terme :

$$\text{Terme tout intégré nul} + \frac{\gamma}{2} \int d^2\alpha \left[\frac{\partial}{\partial \alpha} (\alpha P(\alpha)) \right] |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (\text{XII-38})$$

D'on finalement

$$-\frac{\gamma}{2} a^\dagger a \sigma_A \rightarrow -\frac{\gamma}{2} \int d^2\alpha \left[\alpha \alpha^* P(\alpha) - \frac{\partial}{\partial \alpha} (\alpha P(\alpha)) \right] |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (\text{XII-39})$$

2^{ème} exemple : Terme $\gamma \langle n_0 \rangle a^\dagger \sigma_A a$ de la 3^{ème} ligne de XII-18

$$\int d^2\alpha \gamma \langle n_0 \rangle P(\alpha) a^\dagger |\alpha\rangle\langle\alpha| a = \int d^2\alpha \gamma \langle n_0 \rangle P(\alpha) \left[\left(\alpha^* + \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) |\alpha\rangle\langle\alpha| \right] a \quad (\text{XII-40})$$

Comme l'opérateur a ne dépend pas du nombre α on peut faire entrer a dans le crochet du dernier terme de (XII-40). En utilisant alors (XII-36), on obtient pour (XII-40) :

$$\gamma \langle n_0 \rangle \int d^2\alpha P(\alpha) \left(\alpha^* + \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) \left(\alpha + \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \right) |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (\text{XII-41})$$

On fait alors une intégration par parties, simple pour les 2 termes en $\frac{\partial}{\partial \alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha|$ et $\frac{\partial}{\partial \alpha^*} |\alpha\rangle\langle\alpha|$, double pour le terme $\frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \alpha^*} |\alpha\rangle\langle\alpha|$ et on obtient pour (XII-41) :

$$\gamma \langle n_0 \rangle \int d^2\alpha \left[\alpha \alpha^* P(\alpha) + P(\alpha) - \frac{\partial}{\partial \alpha^*} (\alpha^* P(\alpha)) - \frac{\partial}{\partial \alpha} (\alpha P(\alpha)) + \frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \alpha^*} P(\alpha) \right] |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (\text{XII-42})$$

c) Forme explicite de l'équation d'évolution de $P(\alpha, \alpha^*, t)$

Tous les termes de (XII-18) étant ainsi calculés, on obtient finalement en posant $\tilde{\omega}_0 = \omega_0 + \delta$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \left(\frac{\gamma}{2} + i\tilde{\omega}_0\right) \frac{\partial}{\partial \alpha} (\alpha P) + \left(\frac{\gamma}{2} - i\tilde{\omega}_0\right) \frac{\partial}{\partial \alpha^*} (\alpha^* P) + \gamma \langle n_0 \rangle \frac{\partial^2 P}{\partial \alpha \partial \alpha^*} \quad (XII-43)$$

Ecrite dans la base des états propres $|p_i\rangle$ de H_R , l'équation précédente donnait un ensemble d'équations différentielles linéaires complexes. Lorsqu'on l'écrit dans la base des états $|x\rangle$ on obtient une équation aux dérivées partielles qui a la structure d'une équation de Fokker-Planck.

f) Interprétation simple des divers termes de l'équation de Fokker-Planck.

- Raisonnons pour simplifier sur une équation à une seule variable réelle x :

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \lambda \frac{\partial}{\partial x} (x P) + \mu \frac{\partial^2}{\partial x^2} P \quad (XII-44)$$

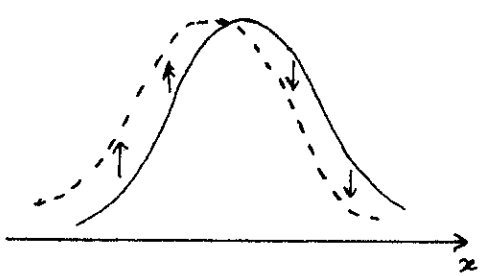
où λ et μ sont 2 constantes.

- 1^{er} terme : $\lambda \frac{\partial}{\partial x} (x P)$

Si la largeur en x de $P(x,t)$ est faible, la forme de la courbe $\lambda x P(x,t)$ est très voisine de celle de $P(x,t)$ (courbe en traits pleins de la fig 1).

Le 1^{er} terme de XII-44, $\lambda \frac{\partial}{\partial x} (x P)$, fait varier $P(x,t)$ au point x d'une quantité proportionnelle à dérivée par rapport à x de $\lambda x P(x,t)$. Le signe de cette dérivée est représenté par une flèche sur la figure 1 (\uparrow si > 0 , \downarrow si < 0) de manière à indiquer le sens de la déformation de $P(x,t)$ due au 1^{er} terme de (XII-44)

Fig 1

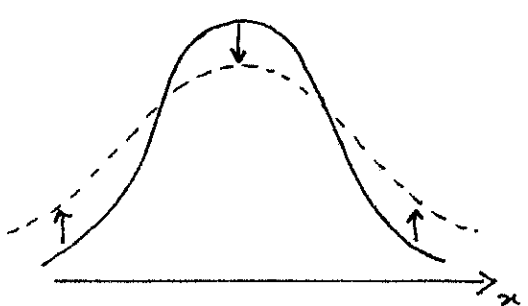


La nouvelle courbe obtenue un instant dt après est représentée en traits tirillés sur la fig. 1. On voit qu'elle correspond à un déplacement de la courbe $P(x,t)$ à gauche si $\lambda x > 0$, à droite si $\lambda x < 0$. Le terme $\lambda \frac{\partial}{\partial x} (x P)$ de l'équation de Fokker-Planck correspond donc à un drift de la densité de probabilité P dans la direction $-\lambda x$.

- 2^{ème} terme : $\mu \frac{\partial^2}{\partial x^2} P$

La vitesse de variation due au 2^{ème} terme de (XII-44), $\mu \frac{\partial^2}{\partial x^2} P$, est proportionnelle à la dérivée seconde de P . Son signe est représenté par des flèches sur la figure 2 : il est négatif au sommet de la courbe (courbure < 0 de P), positif sur les ailes. On voit que ce terme tend à élargir la courbe $P(x,t)$.

Fig 2



Le dernier terme de l'équation de Fokker-Planck décrit donc un élargissement par diffusion de la densité de probabilité.

g) Fonction de Green de l'équation de Fokker-Planck.

- On vérifie aisément par substitution que la fonction :

$$P(\alpha t | \alpha' 0) = \frac{1}{\pi \langle n_0 \rangle (1 - e^{-\gamma t})} \exp \left\{ - \frac{[\alpha - \alpha' e^{-(\frac{\gamma}{2} + i\tilde{\omega}_0)t}] [\alpha^* - \alpha'^* e^{-(\frac{\gamma}{2} - i\tilde{\omega}_0)t}]}{\langle n_0 \rangle (1 - e^{-\gamma t})} \right\} \quad (XII-45)$$

est une solution de (XII-43)

- C'est une gaussienne, centrée au point $\alpha' e^{-(\frac{\gamma}{2} + i\tilde{\omega}_0)t}$, de largeur $\sqrt{\langle n_0 \rangle (1 - e^{-\gamma t})}$, dont l'aire totale est égale à 1

$$\int d^2\alpha P(\alpha t | \alpha' 0) = 1 \quad (XII-46)$$

- Quand $t \rightarrow 0_+$, la largeur de la gaussienne tend vers 0. Comme son intégrale reste toujours égale à 1, on en déduit

$$\lim_{t \rightarrow 0_+} P(\alpha t | \alpha' 0) = \delta^{(2)}(\alpha - \alpha') = \delta(\alpha - \alpha') \delta(\alpha^* - \alpha'^*) \quad (XII-47)$$

$P(\alpha t | \alpha' 0)$ est donc la fonction de Green de l'équation de Fokker-Planck. On en déduit que la solution de (XII-45) correspondant à la condition initiale $P(\alpha, 0) = \phi(\alpha)$ s'écrit :

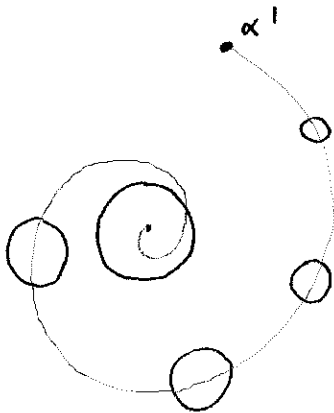
$$P(\alpha, t) = \int d^2\alpha' P(\alpha t | \alpha' 0) \phi(\alpha') \quad (XII-48)$$

- Quand $t \rightarrow \infty$, on a :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(\alpha t | \alpha' 0) = \frac{1}{\pi \langle n_0 \rangle} e^{-\alpha \alpha^* / \langle n_0 \rangle} \quad (XII-49)$$

On retrouve la densité (XII-32) correspondant à l'oscillateur en équilibre thermodynamique à la température T.

Fig 3



La fonction de Green (XII-45) permet d'étudier ce qui se passe en fonction du temps lorsqu'on part à $t=0$ du système S dans un état cohérent $|\alpha'\rangle$. La fonction $P(\alpha)$ est alors $\delta^{(2)}(\alpha - \alpha')$.

A un instant ultérieur, la fonction $P(\alpha)$ est devenue une gaussienne centrée au point $\alpha' e^{-(\frac{\gamma}{2} + i\tilde{\omega}_0)t}$ (Ce point décrit une spirale logarithmique) et dont la largeur croît au cours du temps.

Au bout d'un temps très long, $P(\alpha)$ a atteint un régime stationnaire et coïncide avec la distribution d'équilibre thermodynamique.

Remarque : Même dans un état cohérent les observables de S ne peuvent être déterminées simultanément avec une précision infinie (l'état $|\alpha\rangle$ est un état minimal). En plus de cette incertitude quantique fondamentale, le couplage de S avec R fait apparaître une incertitude supplémentaire qui se traduit par la largeur finie de $P(\alpha, t)$

On voit d'ailleurs que cet élargissement n'existe que si $\langle n_0 \rangle \neq 0$. Il est donc dû aux photons présents dans R. Si l'on se limite à l'émission spontanée ($\langle n_0 \rangle = 0$), S évolue en restant dans un état cohérent.

Applications de l'équation pilote

II - Emission spontanée d'un moment cinétique

① Hamiltonien - Notations

- A : moment cinétique \vec{J} plongé dans un champ magnétique \vec{B}_0 parallèle à Oz

$$\begin{array}{l} \text{----- } |J, J\rangle \\ \text{----- } |J, J-1\rangle \\ \vdots \\ \text{----- } |J, M\rangle \\ \text{----- } |J, M-1\rangle \\ \vdots \\ \text{----- } |J, -J\rangle \end{array} \quad H_A = \omega_0 J_z \quad (\text{XIII-1})$$

$$\omega_0 = -\gamma B_0 \quad \text{Fréquence de Larmor} \quad (\text{XIII-2})$$

(2J+1) niveaux équidistants $|J, M\rangle$

Fig 1

- R : champ électromagnétique. Modes α $b_\alpha b_\alpha^\dagger$

$$H_R = \sum_\alpha \hbar \omega_\alpha b_\alpha^\dagger b_\alpha \quad (\text{XIII-3})$$

Etat initial de R : vide $\sigma_R(0) = |0\rangle\langle 0| \quad (\text{XIII-4})$

- Couplage
$$V_{AR} = \sum_\alpha g_\alpha (J_+ b_\alpha + J_- b_\alpha^\dagger) \quad (\text{XIII-5})$$

A gagne (ou perd) un quantum $\hbar \omega_\alpha$ aux dépens (ou au profit) de R. (On ne garde pas de termes du type $J_+ b_\alpha^\dagger$ ou $J_- b_\alpha$).

② Equation pilote

- Nous écrivons ici l'équation pilote sous forme explicite (bien qu'il soit également possible, comme pour l'oscillateur harmonique, de l'écrire sous forme opératoire compacte).

- Comme R est dans l'état fondamental, les seules transitions possibles sont celles où R gagne de l'énergie et A en perd. Donc, A ne peut que tomber vers des niveaux d'énergie de plus en plus bas :

$$\Gamma_{N \leftarrow M} = 0 \quad \text{si} \quad N > M \quad (\text{XIII-6})$$

- Comme V est proportionnel à J_+ et J_- , on a forcément $N = M - 1$. Enfin, $\Gamma_{N \leftarrow M}$ est proportionnel au carré de l'élément de matrice de J_- entre $|M\rangle$ et $|M-1\rangle$, de sorte que

$$\Gamma_{N \leftarrow M} = \Gamma \delta_{N, M-1} [J(J+1) - M(M-1)] \quad (\text{XIII-7})$$

où Γ est une constante dépendant des g_α .

- De plus, comme V n'a pas d'éléments diagonaux, vaut en ce qui concerne A que R, tous les Γ sont nuls. Finalement, en plus des $\Gamma_{N \leftarrow M}$, seuls interviennent les coefficients de transfert (voir X-32)

$$\Gamma_{P \leftarrow NM} = \Gamma \delta_{P, N-1} \delta_{P, M-1} \left\{ [J(J+1) - N(N-1)] [J(J+1) - M(M-1)] \right\}^{1/2} \quad (\text{XIII-8})$$

- En réalité, il faut également calculer le déplacement Δ_M de chaque niveau M. Nous les supposons réintégrés dans

l'hamiltonien H_A . Notons cependant, qu'à la différence de ce qui se passe pour l'oscillateur harmonique, les niveaux d'énergie de la figure 1 ne restent plus équidistants lorsqu'on tient compte des Δ_M .

- Equations d'évolution des populations :

$$\dot{\sigma}_{MM} = -\Gamma_{M-1 \leftarrow M} \sigma_{MM} + \Gamma_{M \leftarrow M+1} \sigma_{M+1 M+1} \quad (\text{XIII-9})$$

- Equations d'évolution des éléments non-diagonaux de σ .

$$\dot{\sigma}_{MN} = -\left[\frac{1}{2}(\Gamma_{M-1 \leftarrow M} + \Gamma_{N-1 \leftarrow N}) + i(\Delta_M - \Delta_N) \right] \sigma_{MN} + \Gamma_{MN \leftarrow M+1 N+1} \sigma_{M+1 N+1} \quad (\text{XIII-10})$$

③ Problème étudié dans ce paragraphe.

(i) Hypothèses.

- On suppose J très grand : $J \gg 1$ (XIII-11)

- On part initialement d'un opérateur densité $\sigma(0)$ de la forme :

$$\sigma(0) = \sum_{M=-J}^{+J} p(M,0) |JM\rangle \langle JM| \quad (\text{XIII-12})$$

où $p(M,0)$ est une distribution "quasiclassique" ayant la forme suivante :

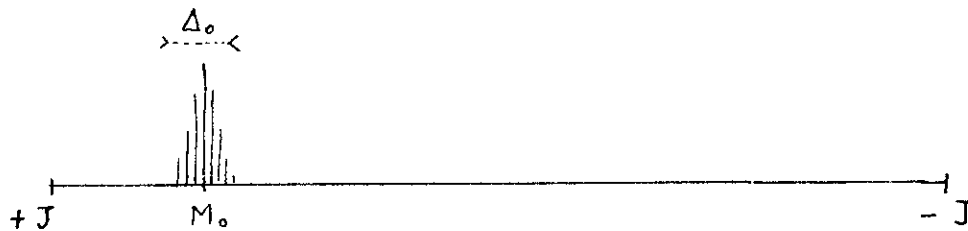


Fig 2

• $p(M,0)$ a la forme d'une courbe en cloche centrée en M_0 . On suppose M_0 très voisin de J

$$J - M_0 \ll J \quad (\text{XIII-13})$$

• La largeur Δ_0 de $p(M,0)$ est très grande en valeur absolue

$$\Delta_0 \gg 1 \quad (\text{XIII-14})$$

et très faible en valeur relative

$$\frac{\Delta_0}{J - M_0} \ll 1 \quad (\text{XIII-15})$$

Le caractère quasiclassique de la distribution $p(M,0)$ est lié aux 2 dernières conditions (XIII-14) et (XIII-15) [analogie avec les états cohérents d'un oscillateur harmonique].

(ii) Ce que l'on s'en va étudier.

L'évolution ultérieure de la distribution de la fig. 2 qui décrit comment A perd de l'énergie au profit de R. En particulier, l'énergie rayonnée par unité de temps à l'instant t s'écrit :

$$\frac{dW}{dt} = -\frac{d}{dt} \left(\sum_M M \hbar \omega_0 p(M,t) \right) = -\hbar \omega_0 \frac{d}{dt} \langle J_z \rangle (t) \quad (\text{XIII-16})$$

(iii) Pourquoi toutes ces hypothèses sur $\sigma(0)$?

- A la différence de ce qui se passe pour l'oscillateur harmonique, la quantité à laquelle on s'intéresse, $\langle J_z \rangle(t)$, n'est pas un vecteur propre de l'équation piloté XIII-9.
 - Nous montrons plus loin que la distribution quasi-classique initiale de la figure 2 garde son caractère quasi-classique à tout instant ultérieur t (à savoir distribution de largeur grande en valeur absolue, faible en valeur relative), pourvu que les conditions (XIII-13), (XIII-14) et (XIII-15) soient remplies.
- Nous pourrions alors obtenir une équation d'évolution approchée pour le centre $\langle J_z \rangle(t)$ de la distribution quasi-classique qui nous donnera une idée de la variation au cours du temps de l'énergie rayonnée par le système.

(iv) Pourquoi étudier un tel problème?

On peut montrer que, dans certaines conditions, le problème de l'émission spontanée de rayonnement par un système de $2N$ atomes à 2 niveaux initialement tous excités dans leur état supérieur peut être ramené, en première approximation, à celui de l'émission spontanée d'un moment cinétique $J = 2N$ préparé initialement dans l'état $|J, J\rangle$. (Le moment cinétique $J = 2N$ est obtenu en comptant les $2N$ spins fictifs $1/2$ associés à chacun des $2N$ atomes. Si ces $2N$ atomes sont tous initialement excités, ce moment cinétique J est dans l'état $|JJ\rangle$).

L'étude de dW/dt présentée dans ce paragraphe nous permettra de donner une première idée simple des caractéristiques de l'émission superradiante.

Remarques

- On peut se demander pourquoi on n'a pas pris $\sigma(0) = |JJ\rangle\langle JJ|$ (XIII-17) c'est que la distribution $p(M, t)$ obtenue à partir d'un tel état initial un instant t après n'est plus quasi-classique : elle a une largeur très grande en valeur relative.
 - Or l'évolution de $\langle J_z \rangle$ est, comme nous le verrons plus loin, couplée à celle de $\langle J_z^2 \rangle$, celle de $\langle J_z^2 \rangle$ à celle de $\langle J_z^3 \rangle$, ... et si la distribution $p(M, t)$ a une largeur relative trop grande, on ne peut plus écrire $\langle J_z^2 \rangle \approx \langle J_z \rangle^2$, $\langle J_z^3 \rangle \approx \langle J_z \rangle^3$... de sorte qu'il devient très difficile d'obtenir une équation d'évolution simple pour $\frac{d}{dt} \langle J_z \rangle$.
 - L'idée de superradiance a été introduite initialement par Dicke (R.H. DICKE, Phys. Rev. 93, 99 (1954)) en considérant $2N$ atomes à 2 niveaux contenus dans un volume petit devant λ_0^3 (où λ_0 est la longueur d'onde du rayonnement émis par les atomes).
- L'hamiltonien d'interaction de chaque spin $1/2$, \vec{S}_i , associé à chacun des $2N$ atomes, avec le champ de rayonnement

s'écrit alors à l'approximation dipolaire électrique ($e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} \ll 1$; on prend l'origine des coordonnées à l'intérieur du petit volume contenant les atomes):

$$\sum_{\alpha} g_{\alpha} (S_i^+ b_{\alpha} + S_i^- b_{\alpha}^+) \tag{XIII-18}$$

En sommant (XIII-18) sur i , on retrouve (XIII-5) à condition de poser:

$$\vec{J} = \sum_{i=1}^{2N} \vec{S}_i$$

Comme l'état initial $|+++...+\rangle = |J=2N, M=J=2N\rangle$ est complètement symétrique et que l'hamiltonien d'interaction (XIII-5) est symétrique par rapport aux permutations des $2N$ spins, le système évolue en restant dans le sous-espace $J=2N$ et le problème semble bien se ramener à celui de l'émission spontanée d'un moment cinétique $J=2N$.

En réalité il a été montré par R. FRIEDBERG, S.R. HARTMANN et J.T. MANASSAH (Phys. Lett. A 40, 365 (1972)) [voir aussi R. FRIEDBERG et S. HARTMANN, Phys. Rev. A 10, 1728 (1974)] qu'une telle situation (beaucoup d'atomes dans λ_0^3) se prêtait difficilement à l'observation de la superradiance à cause du potentiel d'interaction important (et anisotrope) existant entre les divers atomes [cf cours XIV de l'an dernier où l'on montre qu'à courte distance, le potentiel d'interaction entre 2 atomes, l'un excité, l'autre fondamental, est beaucoup plus grand que la probabilité d'émission d'un photon par unité de temps]. Physiquement, la fréquence d'un atome donné est déplacée de manière importante par suite des interactions avec les autres atomes; il s'en suit une largeur inhomogène très grande, très supérieure à l'inverse du temps de superradiance.

Le modèle décrit dans ce § s'appliquerait plutôt à l'émission d'un grand nombre d'atomes contenus dans un volume allongé dans une direction donnée avec une densité suffisamment faible pour qu'il y ait très peu d'atomes dans λ_0^3 [cf N.E. REHLER et J.H. EBERLY Phys. Rev. A 3, 1735 (1971) R. BONIFACIO, P. SCHWENDIMANN, et F. HAAKE Phys. Rev. A 4, 302 (1971) et Phys. Rev. A 4, 854 (1971)].

④ Evolution de $\langle J_z \rangle$. Discussion qualitative

- La figure 3 montre l'allure des variations avec M de la probabilité de transition $\frac{1}{\Gamma} \Gamma_{M-1 \leftarrow M} = J(J+1) - M(M-1)$ qui est en quelque sorte la vitesse de dérive vers la droite de la distribution de la figure 2. ($-J \leq M \leq +J$)
- Cette courbe est une parabole.
- Pour $M=J$ on a $\frac{1}{\Gamma} \Gamma_{J-1 \leftarrow J} = 2J$, ce qui montre que même pour $M=J$ l'émission spontanée fait partir le système vers la droite. Au voisinage de $M=J$ la courbe a

l'allure d'une droite $2J + 2J(J-M)$

le maximum est atteint pour $M \approx 0$ et vaut $J^2 \gg J$ (vu que nous supposons $J \gg 1$)

Enfin pour $M = -J$, $\Gamma = 0$: le système s'arrête en $-J$.

$$\frac{1}{\Gamma} \Gamma_{M \leftarrow M}$$

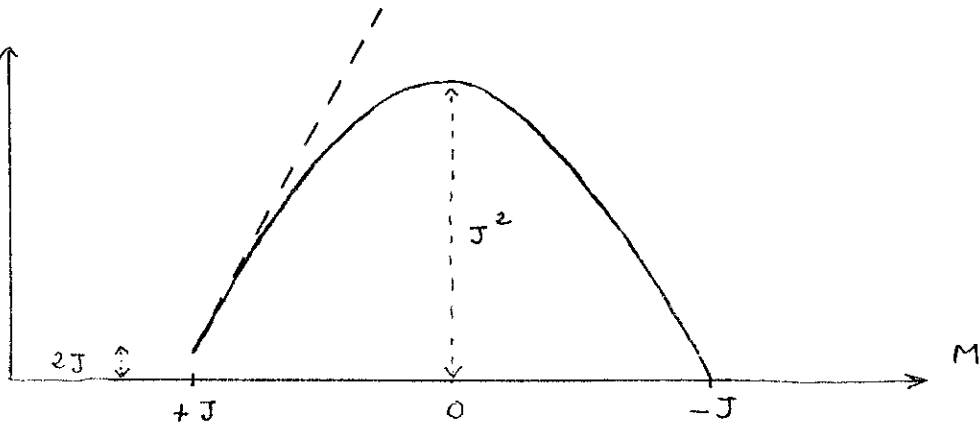


Fig 3

- le système partant au voisinage de $+J$ (cf figure 2) se déplace tout vers la droite de plus en plus rapidement, la vitesse maximale étant atteinte en $M = 0$. Puis il se ralentit et s'arrête en $-J$.

L'évolution de $\langle J_3 \rangle$ a donc la forme représentée sur la figure 4 : variation de $+J$ à $-J$ avec une vitesse maximale (en module) au voisinage de 0. Par suite l'énergie rayonnée, proportionnelle à $-\frac{d}{dt} \langle J_3 \rangle$ d'après XII-16 s'obtient en prenant la dérivée de la courbe 4 (avec le signe -) et la forme d'une impulsion très brève et très intense (cf figure 5)

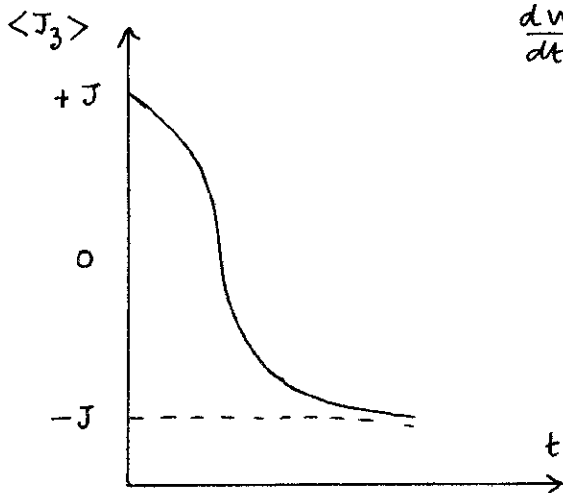


Fig 4

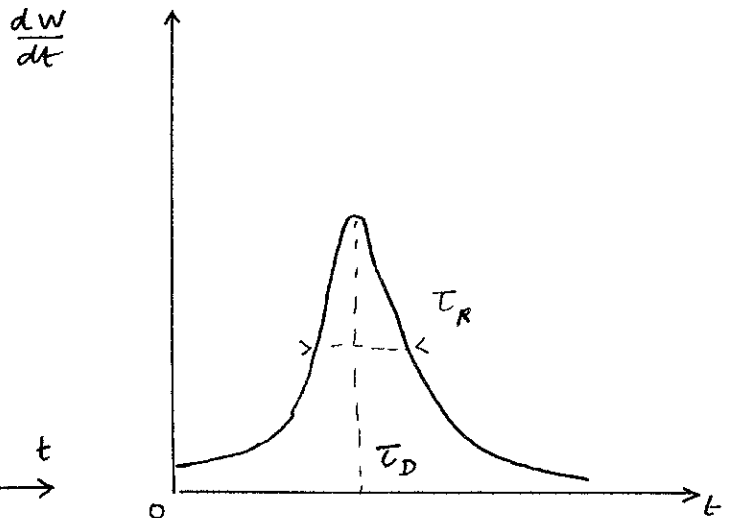


Fig 5

- Nous désirons maintenant calculer de manière un peu plus précise l'abscisse t_0 , l'ordonnée du maximum et la largeur de l'impulsion.

Nous établissons pour cela à partir de (XIII-9) l'équation d'évolution de $\langle J_3 \rangle$.

⑤ Equations d'évolution de $\langle J_3 \rangle$ (i) Equation rigoureuse

Multiplicons (XIII-9) par M et sommons sur M . On obtient (XIII-19)

$$\frac{d}{dt} \langle J_3 \rangle = \frac{d}{dt} \sum_M M \sigma_{MM} = - \sum_M \Gamma_{M-1 \leftarrow M} M \sigma_{MM} + \sum_M \Gamma_{M \leftarrow M+1} M \sigma_{M+1 M+1}$$

Remplaçons M par $M-1$ dans la 2^{ème} sommation. On obtient alors

$$\frac{d}{dt} \langle J_3 \rangle = - \sum_M \sigma_{MM} \Gamma_{M-1 \leftarrow M} [M - (M-1)] = - \sum_M \sigma_{MM} \Gamma_{M-1 \leftarrow M} \quad (\text{XIII-20})$$

Utilisons alors l'expression (XIII-7) de $\Gamma_{M-1 \leftarrow M}$. On obtient

$$\frac{d}{dt} \langle J_3 \rangle = - \Gamma J(J+1) \underbrace{\sum_M \sigma_{MM}}_1 - \Gamma \underbrace{\sum_M M \sigma_{MM}}_{\langle J_3 \rangle} + \Gamma \underbrace{\sum_M M^2 \sigma_{MM}}_{\langle J_3^2 \rangle} \quad (\text{XIII-21})$$

c-à-d encore :

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle J_3 \rangle = - \Gamma J(J+1) - \Gamma \langle J_3 \rangle + \Gamma \langle J_3^2 \rangle} \quad (\text{XIII-22})$$

Comme annoncé plus haut, l'évolution de $\langle J_3 \rangle$ est couplée à celle de $\langle J_3^2 \rangle$.

(ii) Approximation quasi-classique

Si la largeur relative de la distribution $p(M, t)$ est suffisamment faible, on peut approximer $\langle J_3^2 \rangle$ par $\langle J_3 \rangle^2$ et remplacer l'équation exacte (XIII-22) par l'équation approchée :

$$\frac{d}{dt} \langle J_3 \rangle = - \Gamma J(J+1) - \Gamma \langle J_3 \rangle + \Gamma \langle J_3 \rangle^2 \quad (\text{XIII-23})$$

Conditions de validité d'une telle approximation

- Remplaçons la courbe de la fig. 3 par sa tangente au point d'abscisse J . En procédant ainsi, on surestime l'étalement de la distribution. En effet avec la vraie valeur de $\Gamma_{M-1 \leftarrow M}$ (courbe en traits pleins de la fig. 3), l'aile droite de la distribution $p(M, t)$ subit une accélération moins grande que l'aile gauche (avant toutefois que le point d'abscisse $M=0$ soit atteint) alors qu'avec la courbe en traits tirillés cette accélération est la même. Si l'on montre donc qu'avec la courbe en traits tirillés de la fig. 3, la distribution reste quasi-classique, cette propriété sera a fortiori vraie pour la courbe en traits pleins.

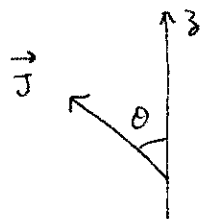
- L'intérêt d'introduire la droite en traits tirillés de la figure 3 est qu'on peut alors calculer exactement le centre $\bar{M}(t)$ de la distribution et sa largeur $\Delta(t)$. Un calcul simple que nous ne reproduisons pas montre alors que $\frac{\Delta(t)}{J - \bar{M}(t)}$ reste inférieur à $\frac{1}{1 + J - M_0}$.

Or les 2 conditions XIII-14 et XIII-15 impliquent que $J - M_0 \gg 1$. On en conclut que la largeur relative de la distribution (par rapport à son abscisse $J - \bar{M}(t)$) reste toujours très petite et qu'on a bien le droit d'appliquer l'approximation quasi-classique. Ceci ne serait pas valable si l'on prenait $M_0 = J$.

(iii) Changement de variables

Posons $\langle J_3 \rangle = J u$ (XIII-24)

où $-1 \leq u \leq 1$ (XIII-25)



u peut être considéré comme le cosinus de l'angle θ que forme le moment cinétique (quadrivecteur) \vec{J} avec l'axe O_3 .

L'équation (XIII-23) se réécrit alors sous la forme

$$\frac{du}{dt} = -\Gamma J(1-u^2) - \Gamma(1+u) \quad (\text{XIII-26})$$

(iv) Condition initiale

Si l'on pose $J - M_0 = k_0$ (XIII-27)

on obtient : $u_0 = 1 - \frac{k_0}{J}$ (XIII-28)

La condition (XIII-14) et (XIII-15) entraînent que $J \gg k_0 \gg 1$ (XIII-29)

Donc u_0 est très voisin de 1.

(6) Résolution de l'équation d'évolution

- On peut mettre $(1+u)$ en facteur au 2^{ème} membre de XIII-26 et réécrire cette équation sous la forme :

$$\frac{du}{(1+u)(1+\frac{1}{J}-u)} = -\Gamma J dt \quad (\text{XIII-30})$$

que l'on peut encore transformer en

$$du \left[\frac{1}{1+u} + \frac{1}{1+\frac{1}{J}-u} \right] = -(2J+1)\Gamma dt \quad (\text{XIII-31})$$

- L'équation (XIII-31) s'intègre alors immédiatement pour donner (en posant $u(0) = u_0$) :

$$\log \frac{1+\frac{1}{J}-u_0}{1+u_0} \frac{1+u}{1+\frac{1}{J}-u} = -(2J+1)\Gamma t \quad (\text{XIII-32})$$

Si l'on pose $\lambda_0 = \frac{1+\frac{1}{J}-u_0}{1+u_0}$ (XIII-33)

on obtient

$$u = \frac{(1+\frac{1}{J})e^{-(2J+1)\Gamma t} - \lambda_0}{\lambda_0 + e^{-(2J+1)\Gamma t}} \quad (\text{XIII-34})$$

- D'après l'expression (XIII-28) de u_0 et l'inégalité XIII-29, on a

$$\lambda_0 \simeq \frac{k_0}{2J} \quad (\text{XIII-35})$$

de sorte que u peut être encore écrit sous la forme (on néglige

$\frac{1}{J}$ devant 1 dans $(1 + \frac{1}{J})$:

XIII-8

$$u = \frac{2J - k_0 e^{2J\Gamma t}}{2J + k_0 e^{2J\Gamma t}} \quad (\text{XIII-36})$$

- On déduit alors immédiatement de (XIII-16) et (XIII-36) l'expression de l'énergie rayonnée

$$\frac{dW}{dt} = 8J^3 \Gamma k_0 \frac{e^{2J\Gamma t}}{(2J + k_0 e^{2J\Gamma t})^2} \quad (\text{XIII-37})$$

⑦ Caractéristiques de l'impulsion rayonnée

(i) Délai τ_D

C'est l'abscisse du maximum de la courbe de la figure 5.
(temps séparant l'instant initial du maximum de l'impulsion)

Le maximum de $\frac{dW}{dt}$ est le maximum de $-J \frac{du}{dt}$,
c-à-d le zéro de $\frac{d^2u}{dt^2}$.

En dérivant les 2 membres de (XIII-26) par rapport à t , on obtient

$$\frac{d^2u}{dt^2} = \Gamma \left[2Ju \frac{du}{dt} - \frac{du}{dt} \right] = \Gamma \frac{du}{dt} (2Ju - 1) \quad (\text{XIII-38})$$

Le zéro de $\frac{d^2u}{dt^2}$ correspond donc à

$$u = \frac{1}{2J} \approx 0 \quad (\text{XIII-39})$$

On en déduit d'après (XIII-36) que l'abscisse τ_D du maximum de $\frac{dW}{dt}$ satisfait à

$$2J = k_0 e^{2J\Gamma \tau_D} \quad (\text{XIII-40})$$

ce qui donne

$$\tau_D = \frac{1}{\Gamma} \frac{1}{2J} \text{Log} \frac{2J}{k_0} \quad (\text{XIII-41})$$

Comme, pour le problème de la superradiance, J est proportionnel à N (nombre d'atomes), on en conclut que le délai est en $\frac{\text{Log} N}{N}$.

(ii) Energie rayonnée maximale

En reportant (XIII-40) dans (XIII-37), on obtient immédiatement:

$$\left(\frac{dW}{dt} \right)_{\text{max}} = \Gamma J^2 \quad (\text{XIII-42})$$

Dans le problème de la superradiance, le maximum de l'impulsion superradiante est donc en N^2 .

(iii) Largeur de l'impulsion τ_R

Par suite de la conservation de l'énergie, l'aire totale sous la courbe de la figure 5 est en J . Comme le maximum est en J^2 , on en déduit que la largeur τ_R de l'impulsion est en $\frac{1}{J}$.

$$\tau_R \sim \frac{1}{\Gamma} \frac{1}{J} \quad (\text{XIII-43})$$

Dans le problème de la superradiance, la largeur de l'impulsion est en $\frac{1}{N}$. Comme $N \gg 1$, $\log N > 1$ et on en déduit que $\tau_D > \tau_R$

le délai est plus long que la largeur de l'impulsion si $N \gg 1$.

References sur l'équation pilote (liste non exhaustive).

- A. ABRAGAM : Principles of nuclear magnetism
R.K. WANGSNES and F. BLOCH Phys. Rev 89, 728 (1953)
- Technique des operateurs de projection
R.W. ZWANZIG in Lectures in Theoretical Physics Vol III
W.E. BRITTIN (ed.) New York, John Wiley 1961
Physica 33, 119 (1964)
- voir aussi
F. HAAKE Statistical Treatment of Open Systems by Generalized Master equation
in Quantum Statistics 1973
Springer Tracts in Modern Physics vol 66 Springer Verlag
- G.S. AGARWAL Quantum statistical theories of spontaneous emission and their relations to other approaches in Quantum Optics
Springer Tracts in Modern Physics vol 70 Springer Verlag 1974
- Traitement quantique de l'oscillateur harmonique amorti
W.H. LOUISELL and J.H. MARBURGER I.E.E.E. Journ. of Quant. Electronics 3, 348 (1967)
- Théorème de régression quantique
M. LAX Phys. Rev 172, 350 (1968)