

Atomes à deux niveaux couplés au champ

M2 de physique quantique 2008-2009

Examen de mécanique quantique I

Y. Castin et A. Sinatra

On considère une assemblée de N atomes à deux niveaux couplés au champ électromagnétique. Chaque atome comporte un état fondamental $|f\rangle$ et un état excité $|e\rangle$, et sa position est rigidement fixée en un point \mathbf{r}_i dépendant de l'atome i considéré, $1 \leq i \leq N$. Pour simplifier, on remplace le vrai champ électromagnétique par un champ bosonique scalaire $\mathcal{E}(\mathbf{r})$. Ce champ est quantifié dans une boîte cubique de côté L avec des conditions aux limites périodiques, mais cette boîte fictive n'est qu'un intermédiaire de calcul, ce qui nous intéresse est la limite $L^3 \rightarrow +\infty$. Les atomes sont couplés au champ dans l'approximation dipolaire, mais l'on **n'effectue pas** l'approximation du champ tournant. Comme d'habitude en électrodynamique quantique, pour régulariser la théorie, il faut introduire une coupure en vecteur d'onde k_M , ou de façon équivalente en énergie $\epsilon_M = \hbar ck_M$, sur les modes du champ, c étant la vitesse de la lumière et \hbar la constante de Planck divisée par 2π . On écrit alors le Hamiltonien sous la forme

$$H = H_0 + V, \quad (1)$$

où H_0 est le Hamiltonien des atomes et du champ libre, et V est le couplage entre atomes et champ. Donnons d'abord l'expression de H_0 :

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \hbar\omega_0 |i : e\rangle \langle i : e| + \sum_{\mathbf{k}}' \epsilon_k a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}. \quad (2)$$

Dans cette expression, $|i : e\rangle$ représente l'atome numéro i dans l'état excité, d'énergie non perturbée $\hbar\omega_0$, l'énergie d'un "photon" de vecteur d'onde $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$ est $\epsilon_k = \hbar ck$, la somme \sum' porte sur les vecteurs d'onde tels que $0 < k < k_M$, et les opérateurs de création $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ et d'annihilation $a_{\mathbf{k}}$ obéissent aux relations de commutation bosoniques habituelles, comme par exemple

$$[a_{\mathbf{k}_1}, a_{\mathbf{k}_2}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}. \quad (3)$$

Donnons maintenant l'expression du couplage V :

$$V = - \sum_{i=1}^N D_i \mathcal{E}(\mathbf{r}_i). \quad (4)$$

On a introduit l'opérateur dipôle de l'atome numéro i ,

$$D_i = d (|i : e\rangle \langle i : f| + |i : f\rangle \langle i : e|) \quad (5)$$

où le moment dipolaire d est un nombre réel. On a également introduit le champ quantique dépendant de la position \mathbf{r} :

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_k \left(a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right) \quad (6)$$

avec l'amplitude

$$\mathcal{E}_k = \left(\frac{\epsilon_k}{2\epsilon_0 L^3} \right)^{1/2}, \quad (7)$$

où ϵ_0 est la permittivité diélectrique du vide. Dans la suite, l'état vide du rayonnement est noté $|0\rangle$.

Il est conseillé de traiter les questions et les parties dans leur ordre d'apparition. Cependant, la partie 1 (cas d'un atome seul) et la partie 2 (nombre d'atomes $N \geq 2$) sont largement indépendantes.

1 Cas d'un atome seul

Dans cette partie, le système comporte un seul atome, situé à l'origine des coordonnées. On étudie d'abord l'état fondamental, puis l'état à un atome excité et son évolution en présence du vide de rayonnement.

1.1 État fondamental

- Quel est l'état fondamental de H_0 , et quelle est son énergie ? Cet état est-il dégénéré ? Vérifier que cet état serait aussi un état propre en présence du couplage au champ si l'on faisait l'approximation du champ tournant, mais qu'il ne l'est pas pour le Hamiltonien complet H .
- Calculer l'énergie E_f de l'état fondamental du Hamiltonien complet H jusqu'au second ordre de la théorie des perturbations en V . On donnera le résultat sous forme d'une somme sur les vecteurs d'onde \mathbf{k} .
- Dans le résultat précédent, on passe à la limite $L \rightarrow +\infty$. Montrer qu'on obtient une intégrale sur le module de k , intégrale que l'on ne cherchera pas à calculer explicitement. On aura cependant effectué l'intégration angulaire en étant passé en coordonnées sphériques.
- On souhaite comparer les deux échelles d'énergie $\hbar\omega_0$ et ϵ_M pour voir laquelle est la plus grande. Pour estimer $\hbar\omega_0$ on considère le cas de l'atome d'hydrogène, dont le rayon de Bohr est noté a_0 . Donner l'ordre de grandeur de $\hbar\omega_0$ en fonction de a_0 et de la quantité

$$e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}, \quad (8)$$

où q est la charge de l'électron. Pour estimer k_M , on utilisera le fait que l'approximation dipolaire dans le couplage atome-champ suppose l'atome quasi ponctuel et n'est

donc justifiée qu'aux grandes longueurs d'onde électromagnétiques. En déduire que

$$\epsilon_M \gg \hbar\omega_0. \quad (9)$$

On rappelle la valeur de la constante de structure fine

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}. \quad (10)$$

- e) En déduire qu'on peut négliger $\hbar\omega_0$ dans l'expression de l'énergie de l'état fondamental obtenue à la question c). Donner l'expression approchée correspondante. Dépend-elle de la coupure k_M ?
- f) Donner l'expression de l'état fondamental de H au premier ordre en V de la théorie des perturbations. En déduire que l'atome dans l'état fondamental perturbé est en fait entouré d'un halo photonique, avec un nombre moyen de photons

$$N_{\text{ph}} \simeq \frac{1}{8\pi^2} \frac{d^2 \epsilon_M^2}{\epsilon_0 (\hbar c)^3}. \quad (11)$$

On obtiendra ce résultat dans la limite $L \rightarrow +\infty$ avec les mêmes approximations que celles utilisées pour l'énergie du fondamental.

- g) Estimer la valeur de d en fonction de q et a_0 . En déduire que N_{ph} est relié à la constante de structure fine.
- h) Est-il possible de détecter le halo photonique avec un photodétecteur ? On s'appuiera sur un argument de conservation de l'énergie.

1.2 État excité : étude stationnaire

- a) On considère l'état $|e, 0\rangle$ d'un atome excité en présence du vide du rayonnement. Est-ce un état propre de H_0 ? Si oui, est-il dégénéré ? Dans la réponse à cette question, on **ne considérera pas** d'éventuelles dégénérescences avec des valeurs propres de H_0 faisant partie du spectre continu à la limite $L^3 \rightarrow +\infty$.
- b) Donner l'expression de l'énergie E_e de l'atome excité pour le Hamiltonien complet jusqu'au second ordre en le couplage V , en utilisant la théorie des perturbations, sous forme d'une somme sur les vecteurs d'onde \mathbf{k} .
- c) On passe maintenant à la limite $L \rightarrow +\infty$ dans le résultat précédent. Montrer que le remplacement de la somme sur \mathbf{k} par une intégrale conduit à une intégrale divergente. En s'appuyant sur le cours, rappeler ce qu'il faut ajouter au dénominateur d'énergie apparaissant dans E_e pour régulariser l'intégrale. En déduire que E_e est en fait complexe. Une telle E_e peut-elle être une valeur propre de H ? Comment lui donner un sens précis ?
- d) On note $-\hbar\Gamma/2$ la partie imaginaire de E_e . Calculer explicitement $\hbar\Gamma$ en fonction de d , ω_0 , ϵ_0 et c .

- e) Quelle est la signification physique de Γ ?
 f) On définit l'énergie complexe d'excitation d'un atome par

$$E_{\text{exc}} \equiv E_e - E_f = \hbar\omega_A - i\hbar\Gamma/2 \quad (12)$$

où la pulsation ω_A est réelle. Sans chercher à faire un calcul explicite de sa valeur, montrer que $\omega_A - \omega_0$ diverge à la limite $k_M \rightarrow +\infty$, avec une loi de puissance que l'on précisera.

- g) D'un point de vue pratique, quelles sont les quantités mesurables parmi ω_0 et ω_A ? Si l'on obtient une prédiction physique en fonction de ω_A plutôt que de ω_0 , se pose-t-on encore avec angoisse la question de la dépendance en la coupure k_M ? À quelle technique théorique standard en électrodynamique quantique ces considérations vous font-elles penser ?

1.3 État excité : évolution temporelle

- a) On introduit la résolvante du Hamiltonien complet H :

$$G(z) = \frac{1}{z - H}, \quad (13)$$

où z est un nombre complexe. On introduit le projecteur orthogonal $P = |e, 0\rangle\langle e, 0|$ et son supplémentaire $Q = 1 - P$. On pose

$$PG(z)P = \frac{P}{F(z)} \quad (14)$$

où $F(z)$ est une fonction de z à valeurs dans \mathbb{C} . À l'aide du cours, donner une expression formelle exacte de la fonction $F(z)$ à l'aide des opérateurs V , Q et H .

- b) Effectuer un calcul perturbatif de $F(z)$ jusqu'au second ordre inclus en V . Exprimer le résultat sous forme d'une somme sur \mathbf{k} .
 c) Dans l'expression précédente, on passe à la limite $L \rightarrow +\infty$. À l'aide d'un changement de variable que l'on précisera, montrer que l'on se ramène à l'expression

$$F(z) = z - \hbar\omega_0 - A \int_0^{\epsilon_M} d\epsilon \frac{\epsilon^3}{z - \epsilon}, \quad (15)$$

où l'on donnera la valeur du coefficient A en fonction de d , ϵ_0 et $\hbar c$.

- d) Montrer que la fraction rationnelle en z qui à z associe $(z^3 - \epsilon^3)/(z - \epsilon)$ est en fait un polynôme en z que l'on précisera.
 e) En déduire que

$$F(z) = P(z) + Az^3 u(z) \quad (16)$$

où $P(z)$ est un polynôme que l'on précisera et $u(z)$ est la fonction définie par

$$u(z) = \int_0^{\epsilon_M} \frac{d\epsilon}{\epsilon - z}. \quad (17)$$

- f) À quelle condition sur z la définition (17) conduit-elle à une intégrale bien définie ? En déduire l'existence d'une ligne de coupure de $u(z)$, donc de $\langle e, 0|G(z)|e, 0\rangle$, que l'on précisera. Au vu des propriétés spectrales de H_0 , ce résultat était-il prévisible ?
- g) On introduit la fonction logarithme de la variable complexe, $\ln z$, avec la ligne de coupure mise sur le demi-axe imaginaire du demi-plan inférieur. Plus explicitement, pour un nombre complexe $z = \rho e^{i\theta}$ avec $\rho > 0$ et $\theta \in]-\pi/2, 3\pi/2[$, on pose

$$\ln z = \ln \rho + i\theta. \quad (18)$$

Montrer qu'il est alors naturel d'effectuer un prolongement analytique de $u(z)$ comme suit :

$$u_a(z) = \ln(z - \epsilon_M) - \ln z, \quad (19)$$

ce qui induit le prolongement analytique $F_a(z)$ de la fonction F . Montrer sur une figure la position de la ou des lignes de coupure de $u_a(z)$.

- h) À partir du lien entre la résolvante et l'opérateur d'évolution $U(t)$, $t > 0$, et par une déformation astucieuse du contour d'intégration dans le plan complexe, on admet qu'on peut obtenir le résultat suivant :

$$\langle e, 0|U(t)|e, 0\rangle = \frac{e^{-iz_0t/\hbar}}{F'_a(z_0)} + \int_0^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} e^{-Et/\hbar} \frac{F_a(-iE - \eta) - F_a(-iE + \eta)}{F_a(-iE - \eta)F_a(-iE + \eta)} + \text{reste}. \quad (20)$$

Ici, $\eta \rightarrow 0^+$, z_0 est la position d'un pôle du prolongement analytique de la résolvante, et l'on négligera le "reste" dans la suite. z_0 a été calculé au second ordre en V dans la sous-partie 1.2 et conduit dans (20) à un terme décroissant exponentiellement en $\exp(-\Gamma t/2)$. Pour obtenir l'amplitude de ce terme, calculer $F'_a(z_0)$ en remplaçant z_0 par sa valeur à l'ordre zéro en V et en utilisant l'expression (15) de la fonction $F(z)$; comme dans des calculs précédents, on gardera seulement le terme dominant de $F'(z_0)$ à la limite $\epsilon_M/(\hbar\omega_0) \rightarrow +\infty$.

- i) En déduire que l'écart de $|F'_a(z_0)|^2$ à l'unité s'exprime très simplement en fonction de la quantité N_{ph} introduite à la question f) de la sous-partie 1.1.
- j) On s'attaque maintenant à la correction à la décroissance exponentielle dans (20). En utilisant (19) et notre définition du logarithme, calculer

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} u_a(-iE - \eta) - u_a(-iE + \eta) \quad (21)$$

pour $E > 0$. En déduire la valeur de $F_a(-iE - \eta) - F_a(-iE + \eta)$ pour $\eta \rightarrow 0^+$.

- k) Montrer qu'aux temps $t \gg 1/\omega_0$, on peut remplacer le dénominateur dans l'intégrand de (20) par sa valeur en $E = 0$, et que cette valeur peut être prise égale à $(\hbar\omega_0)^2$ à l'ordre considéré en V .

- l) En déduire la correction à la décroissance exponentielle

$$\langle e, 0|U(t)|e, 0\rangle \Big|_{\text{non exp.}} \simeq \frac{3}{\pi} \left(\frac{\Gamma}{\omega_0} \right)^5 \frac{1}{(\Gamma t)^4}. \quad (22)$$

On rappelle la valeur de l'intégrale $\int_0^{+\infty} dx x^n e^{-x} = n!$ pour n entier naturel.

2 Cas de plusieurs atomes

On suppose dans cette partie que le nombre N d'atomes à deux niveaux est supérieur ou égal à deux. On construit d'abord un Hamiltonien effectif dans le sous-espace à une excitation atomique et zéro excitation de champ. On étudie ensuite une application physique. On se place ici directement à la limite $L^3 \rightarrow +\infty$.

Mais considérons d'abord la question préliminaire suivante :

- a) Montrer qu'au second ordre de la théorie des perturbations, l'énergie $E_f^{(N)}$ de l'état fondamental de H pour N atomes est simplement donnée par

$$E_f^{(N)} = N E_f \quad (23)$$

où E_f est l'énergie de l'état fondamental à un atome calculée à la question b) de la sous-partie 1.1.

2.1 Construction du Hamiltonien effectif

- a) On considère le sous-espace propre de H_0 avec un atome excité, $N - 1$ atomes dans l'état fondamental et zéro photon. Ce sous-espace est-il dégénéré ? Si oui, indiquer sa dimension. On appelle P le projecteur orthogonal sur ce sous-espace.
- b) À l'aide du formalisme de la résolvante et de la méthode des projecteurs vus en cours, montrer que les "énergies propres" correspondantes de H calculées perturbativement au second ordre en V sont données par les valeurs propres du Hamiltonien effectif

$$H_{\text{eff}} = \hbar\omega_0 P + P V G_0 (\hbar\omega_0 + i\eta) V P \quad (24)$$

avec $\eta \rightarrow 0^+$. On a introduit ici $G_0(z) = 1/(z - H_0)$ la résolvante du Hamiltonien non perturbé.

- c) Nous allons calculer les éléments de matrice de H_{eff} . Pour chaque $i \in \{1, \dots, N\}$, on introduit le vecteur d'état

$$||i : e\rangle \equiv |1 : f\rangle \otimes \dots \otimes |i - 1 : f\rangle \otimes |i : e\rangle \otimes |i + 1 : f\rangle \dots \otimes |N : f\rangle \otimes |0\rangle, \quad (25)$$

qui représente l'atome numéro i dans l'état excité, les autres atomes dans l'état fondamental et le champ dans l'état vide. Montrer que les éléments de matrice diagonaux du Hamiltonien effectif valent

$$\langle i : e || H_{\text{eff}} || i : e \rangle = E_f^{(N)} + \hbar\omega_A - i \frac{\hbar\Gamma}{2} \quad (26)$$

où l'on a utilisé les résultats (12) et (23).

- d) Montrer que chaque élément de matrice $\langle i : e || H_{\text{eff}} || j : e \rangle$ non diagonal de H_{eff} est la somme de deux contributions, l'un des facteurs V dans (24) étant pris égal à $-D_i \mathcal{E}(\mathbf{r}_i)$ et l'autre facteur V étant pris égal à $-D_j \mathcal{E}(\mathbf{r}_j)$. On donnera le résultat sous la forme d'une intégrale sur \mathbf{k} , contenant le facteur de phase $e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}$, le facteur de phase complexe conjugué pouvant s'y ramener par un changement de \mathbf{k} en $-\mathbf{k}$ dans l'intégrale.

- e) Toujours dans le cas non diagonal, vérifier que, dans l'une des deux contributions mentionnées précédemment, le dénominateur d'énergie ne peut pas s'annuler, ce qui autorise à y remplacer $i\eta$ par $-i\eta$. Montrer qu'une simplification se produit alors, lorsqu'on met la somme des deux contributions au même dénominateur. On doit arriver au résultat simple, pour $i \neq j$:

$$\langle i : e || H_{\text{eff}} || j : e \rangle = \int_{k < k_M} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{d^2}{\epsilon_0} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \left[-1 + \frac{(\hbar\omega_0)^2}{(\hbar\omega_0 + i\eta)^2 - \epsilon_k^2} \right] \quad (27)$$

où $\eta \rightarrow 0^+$.

- f) Sans faire de calcul explicite, expliquer pourquoi le terme -1 entre les crochets de (27) donne naissance, après intégration sur \mathbf{k} , à une fonction étroite de la distance r_{ij} entre les atomes i et j , négligeable lorsque la distance interatomique est bien supérieure à la taille d'un atome. Désormais, on négligera cette contribution étroite.
- g) On introduit le nombre d'onde $k_0 = \omega_0/c$, et l'on effectue le changement de variables $\mathbf{k} = k_0 \mathbf{q}$ dans l'intégrale sur \mathbf{k} . On rappelle la valeur d'une intégrale vue en cours :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}}{(1 + i\eta)^2 - q^2} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ix}}{x} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{3*}, \quad (28)$$

où $\eta \rightarrow 0^+$. En déduire que les éléments de matrice non diagonaux de H_{eff} admettent la limite finie suivante lorsque $\epsilon_M/(\hbar\omega_0) \rightarrow +\infty$:

$$\langle i : e || H_{\text{eff}} || j : e \rangle \rightarrow -\frac{\hbar\Gamma}{2} \frac{e^{ik_0 r_{ij}}}{k_0 r_{ij}} \quad \forall i \neq j. \quad (29)$$

On a introduit ici la quantité Γ définie à la question d) de la sous-partie 1.2.

2.2 Application

- a) On considère d'abord le cas $N = 2$. Calculer les deux valeurs propres de H_{eff} et donner les deux vecteurs propres correspondants.
- b) Montrer que, dans la limite $k_0 r_{12} \ll 1$, la partie imaginaire de l'une des valeurs propres tend vers zéro, et la partie imaginaire de l'autre valeur propre tend vers $-\hbar\Gamma$. Justifier les appellations d'état subradiant et d'état superradiant.
- c) Discuter le comportement des parties réelles des valeurs propres dans la même limite $k_0 r_{12} \ll 1$. Quelle est leur signification physique ? Si l'on autorisait les atomes à se déplacer librement, pourrait-il y avoir *a priori* des états liés entre un atome dans l'état fondamental et un atome dans l'état excité ?
- d) On considère maintenant le cas $N \gg 1$ et l'on se demande s'il existe des états superradiants. À l'instant $t = 0$, le vecteur d'état du système est de la forme

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N c_i |i : e\rangle \quad (30)$$

où les amplitudes c_i sont des nombres complexes. Le vecteur d'état est correctement normalisé, $\langle \psi | \psi \rangle = 1$. En supposant que l'évolution du système à l'intérieur du sous-espace engendré par les $|i : e\rangle$, $1 \leq i \leq N$, est donnée par le Hamiltonien effectif H_{eff} , montrer que le taux de départ de ce sous-espace vaut à l'instant $t = 0$:

$$\Gamma_{\text{eff}} = \Gamma \left[1 + \sum_{i \neq j} c_i^* c_j \frac{\sin(k_0 r_{ij})}{k_0 r_{ij}} \right] \quad (31)$$

On pourra décomposer la matrice de H_{eff} en sa partie hermitienne et sa partie antihermitienne, et noter qu'elle est symétrique.

e) Pour chercher à maximiser le taux de départ, l'intuition conduit au choix

$$c_j = N^{-1/2} e^{ik_0 \mathbf{u} \cdot \mathbf{r}_j} \quad \forall j \in \{1, \dots, N\} \quad (32)$$

où \mathbf{u} est un vecteur unitaire choisi arbitrairement. De plus, on suppose que les positions des atomes sont des variables aléatoires indépendantes tirées chacune suivant la loi gaussienne $\rho(\mathbf{r}) \propto \exp[-r^2/(2\sigma^2)]$. On introduit la représentation

$$\frac{\sin(k_0 r_{ij})}{k_0 r_{ij}} = \int \frac{d^2 \mathbf{n}}{4\pi} e^{-ik_0 \mathbf{n} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}, \quad (33)$$

où l'intégrale est prise uniformément sur la sphère unité (c'est-à-dire sur tous les angles solides). On rappelle que

$$\langle e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \rangle = e^{-q^2 \sigma^2 / 2}, \quad (34)$$

où $\langle \dots \rangle$ représente la moyenne prise sur la distribution de probabilité $\rho(\mathbf{r})$. On prend la moyenne de (31) sur les positions des atomes. Montrer qu'on aboutit à une intégrale sur les angles solides que l'on sait calculer en coordonnées sphériques d'axe \mathbf{u} , et donner la valeur explicite de $\langle \Gamma_{\text{eff}} \rangle$.

f) En déduire qu'à la limite d'un grand diamètre du gaz atomique, $k_0 \sigma \gg 1$, on a

$$\langle \Gamma_{\text{eff}} \rangle \simeq \Gamma \left[1 + \frac{N-1}{2k_0^2 \sigma^2} \right]. \quad (35)$$

À quelle condition sur N observe-t-on un net effet de superradiance ?