

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) :

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

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

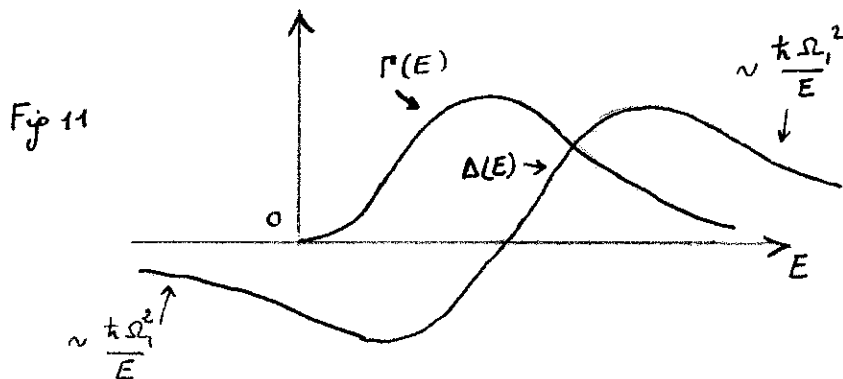
où $\Delta(E) = \frac{1}{2\pi} \int \mathcal{P} \frac{1}{E - E'} \Gamma(E') dE'$ (III-7)

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 $\Delta(E)$



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 :

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

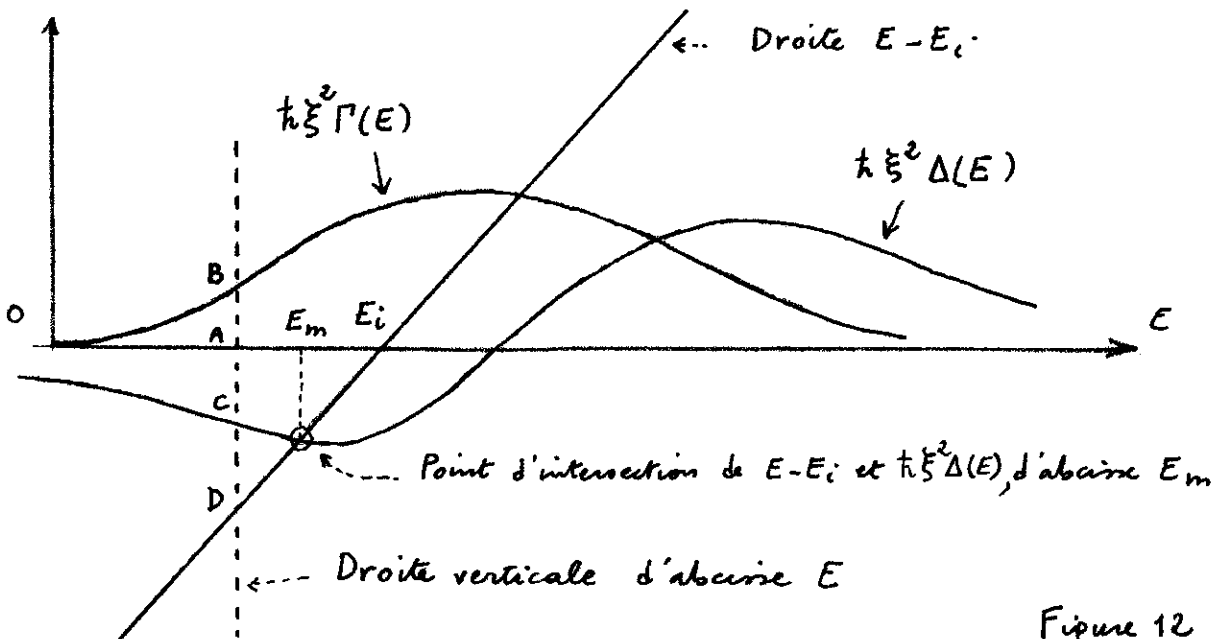
Pour étudier comment les phénomènes varient en fonction de l'intensité du couplage, il est commode de multiplier $v(\beta, E)$ par un coefficient ξ sans dimensions, indépendant de β et E . Ceci revient à multiplier dans (III-11) $\Gamma(E)$ et $\Delta(E)$ par ξ^2 . Si l'on suppose que $\Gamma(E)$ est 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 :

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

(III-12)

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



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).

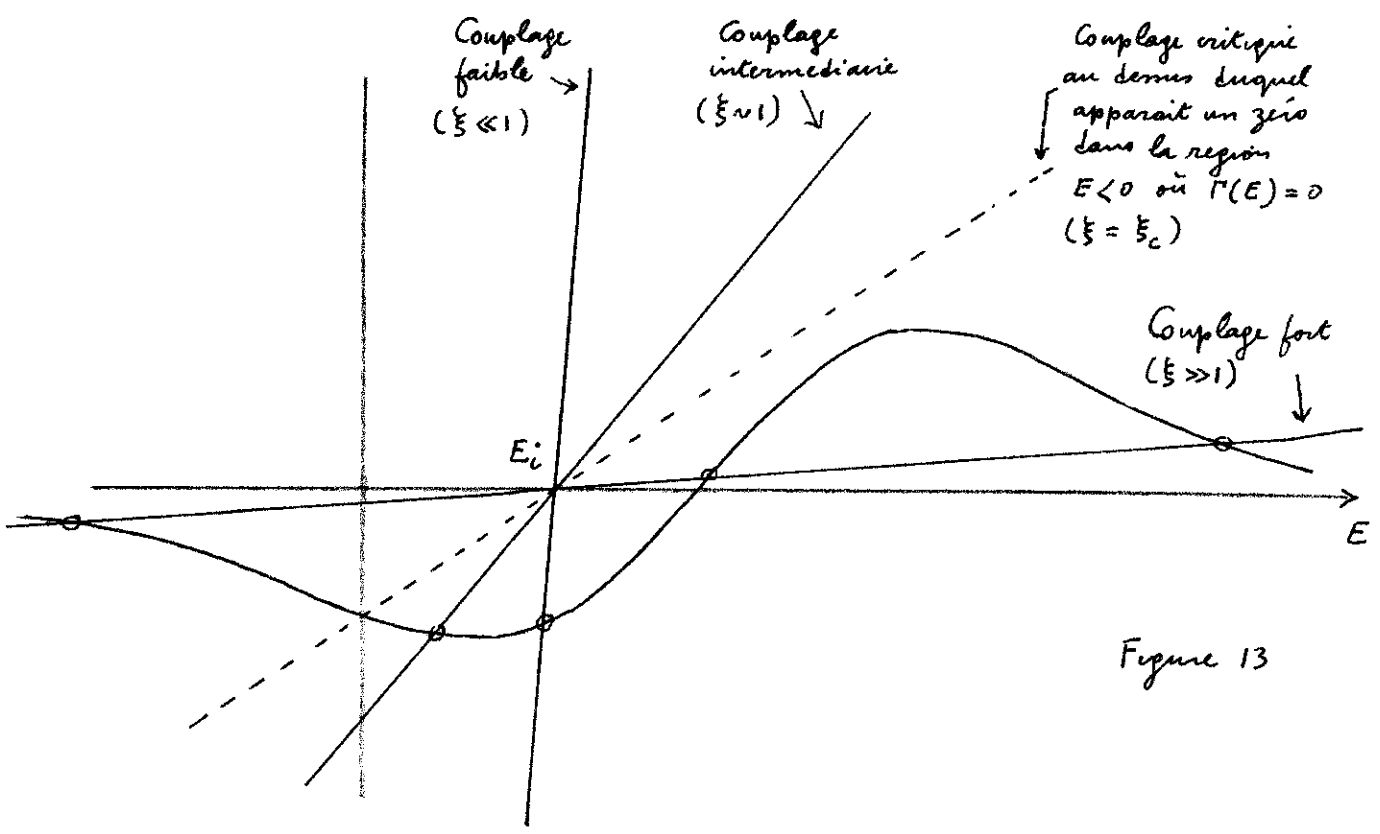


Figure 13

- 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).

$$\xi > \xi_c$$

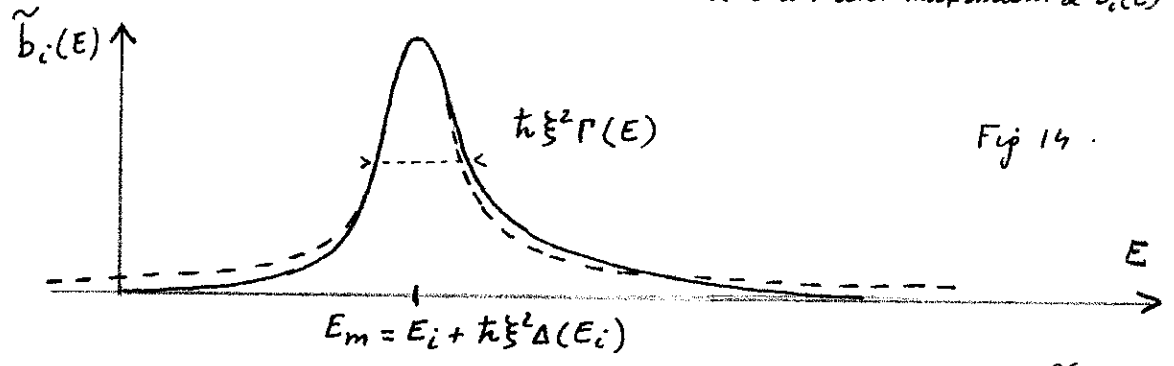
Dans la région $E < 0$ où $AB = 0$, CD s'annule pour $E = E_m < 0$.

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 $\tilde{b}_i(E)$



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 $\tilde{b}_i(E)$

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

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

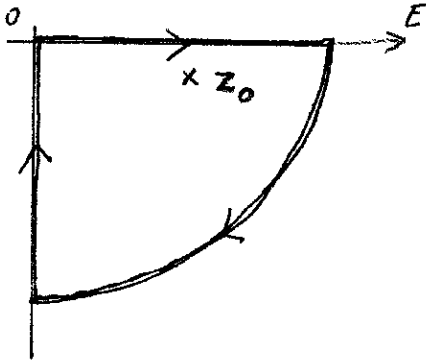


Fig 8

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) :

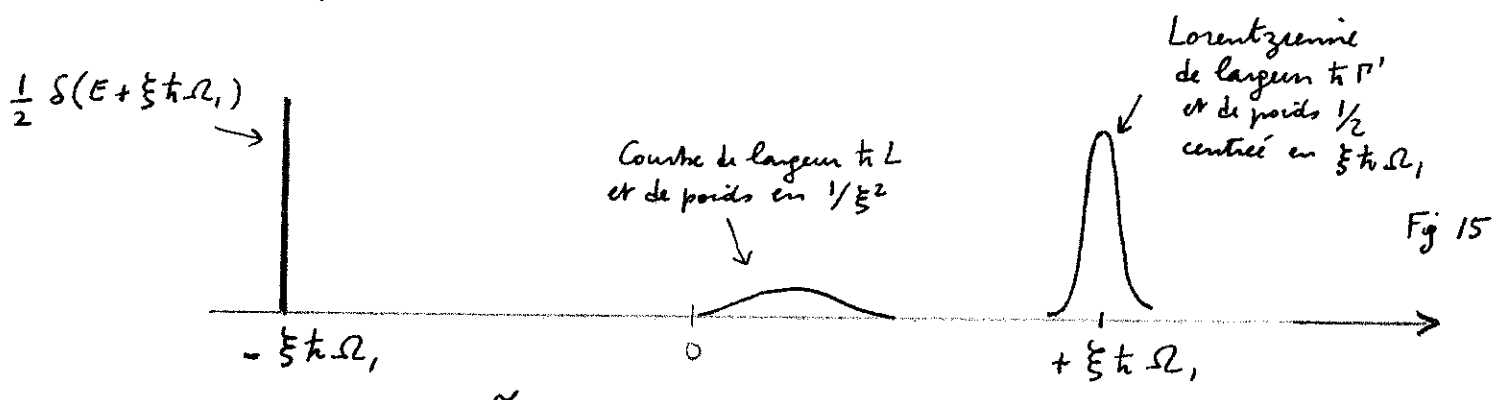
$$\tilde{b}_i(E) \underset{\text{E voisin de } +\xi \hbar \Omega_1}{\sim} \frac{1}{2} \frac{1}{\pi} \frac{\hbar \Gamma'/2}{(E - \xi \hbar \Omega_1)^2 + (\hbar \Gamma'/2)^2} \quad (\text{III-32})$$

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 $\frac{1}{L} \ll t \ll \frac{1}{\Gamma'}$

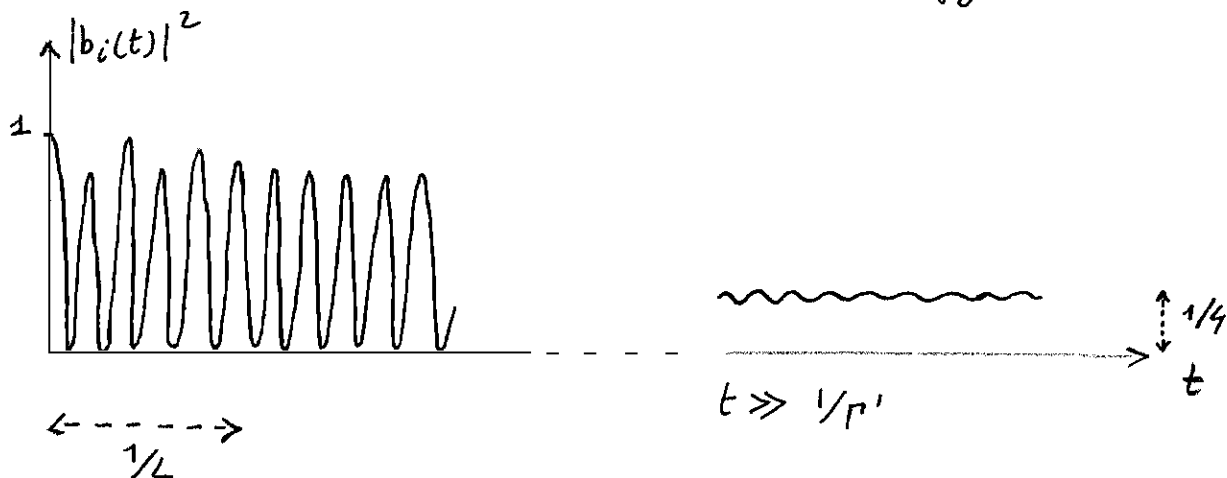
- La contribution de la Lorentzienne centrée en $\xi \mp \Omega$, s'amortit avec une constante de temps $1/\rho'$.

Pour $t \gg 1/\rho'$, cette Lorentzienne ne contribue plus (de même bien sur que la courbe du milieu), 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 $\frac{1}{L}$ 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