

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]

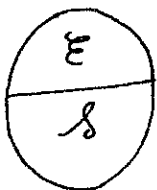
La situation est très souvent beaucoup plus complexe. Chaque élément de matrice de $G(z)$ est couplé à beaucoup d'autres et il n'est pas facile en général de résoudre le système d'équations correspondant. De plus, on peut s'intéresser à des problèmes plus compliqués où plusieurs continus sont couplés 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).

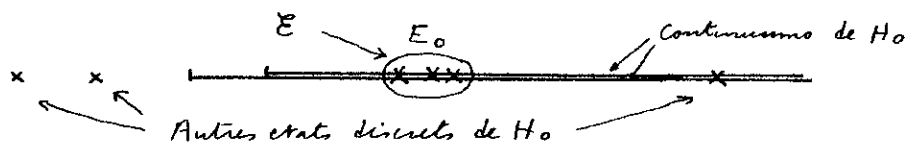


Fig. 1

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 :

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

(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 $\varphi H_0 \varphi + \varphi V \varphi$. 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 \mathcal{E} (dernier terme de VI-18). La structure de ce dernier terme est simple : après évolution dans \mathcal{D} sous l'effet de $\mathcal{Q}H_0\mathcal{Q} + \mathcal{Q}V\mathcal{Q}$, le système passe dans \mathcal{E} où il évolue sous l'effet de (VI-25), puis retourne dans \mathcal{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 \mathcal{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.

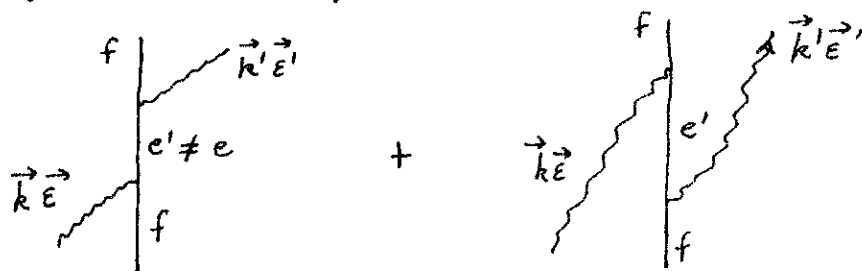


Fig 2

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)

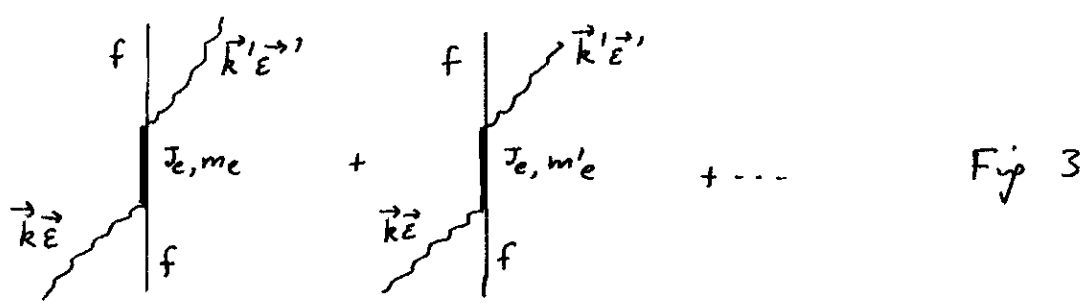


Fig 3

(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).