Cours du 4/3/80

Rappels

Principe

$$\boxed{\text{Hamiltonien} \quad H = H_A + H_R - e\vec{r}.\vec{E}(\vec{0},t)}$$

$\frac{d}{dt} a_{k\varepsilon} = \frac{1}{i\hbar}[a_{k\varepsilon}, H]$

Eq. de Maxwell avec sources

$\downarrow$

$\vec{E}(\vec{x},t) = \vec{E}_0(\vec{x},t) + \vec{E}_S(\vec{x},t)$

$\uparrow$ Champ du vide $\quad$ $\uparrow$ Champ des sources

$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\vec{r}, H] \qquad \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\vec{p}, H]$

Eq. de Newton avec champ

$\downarrow$

$\frac{d}{dt}\vec{p}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\vec{p}, H_A] + e\vec{E}(\vec{0},t)$

$\vec{x} = \vec{0}$

On obtient ainsi

$$m_0 \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -\vec{\nabla} H_A + e\vec{E}_S(\vec{0},t) + e\vec{E}_0(\vec{0},t)$$

Force atomique — Force due au champ des sources — Force due au champ du vide

En explicitant $\vec{E}_S$ et H_A

$$(m_0 + \delta m)\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -\vec{\nabla} V(\vec{r}) + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2}{3c^2}\dddot{\vec{r}} + e\vec{E}_0(\vec{0},t)$$

Inertie électromagnétique

$\delta m = \frac{e^2 k_M}{3\pi^2 \varepsilon_0 c^2}$

Réaction de rayonnement

Plan de ce cours

1 – Introduction
   - Intérêt d'étudier des observables autres que $\vec{r}$ et $\vec{p}$ (T1)
   - Modèles très simplifiés d'atomes – les avantages, les dangers, les notations (T2 à T4)

2 – Retour sur le champ rayonné par le dipole à son propre emplacement
   - Aspects nouveaux par rapport au calcul précédent (T5)
   - Calcul et approximations (T6 à T8)
   - Interprétation physique (T9 à T10)

3 – Equations de Heisenberg pour l'oscillateur harmonique
   - Calcul et interprétation physique (T11 à T13)

4 – Equations de Heisenberg pour l'atome à 2 niveaux
   - Calcul et interprétation physique (T14 à T20)

T1

$\vec{r}$ et $\vec{p}$ ne sont pas les seules observables atomiques intéressantes.

Les mesures spectroscopiques donnent plutôt les fréquences de Bohr atomiques $(E_p - E_n)/h$

$|\varphi_q\rangle$

$|\varphi_p\rangle$

$|\varphi_n\rangle$

$$H_A |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$$

$$S_{np} = |\varphi_n\rangle\langle\varphi_p|$$

$$\frac{d}{dt} S_{np} = \frac{1}{i\hbar}[S_{np}, H]$$

Peut-on obtenir une équation simple décrivant l'évolution de S_{np} sous l'effet du processus d'émission ?

Quels sont les rôles respectifs du champ du vide et du champ des sources dans l'élargissement et le déplacement radiatifs des raies atomiques ?

Le champ du vide est-il essentiel ?

T.2

Modèles simples à 2 niveaux

Très nombreux articles

Avantages

- Calculs plus simples
- Analogie avec des spins 1/2 ("Equations de Bloch optiques").

Dangers

- Base incomplète d'états. Effets non résonnants (déplacements) impossibles à calculer exactement
- Renormalisation. Ne peut être discutée sérieusement
- On perd l'aspect position et impulsion. Image de la charge vibrant sous l'effet du champ du vide et moyennant le potentiel atomique dans un volume fini. (Interprétation du "Lamb-shift" par Welton)

T3

Atomes à 2 niveaux

Opérateurs S_+, S_-, S_z

$|e\rangle$

ω_0

$|g\rangle$

$$\begin{cases} S_+ = |e\rangle\langle g| \\ S_- = |g\rangle\langle e| \\ S_z = \frac{1}{2}(|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|) \end{cases}$$

$$|e\rangle\langle e| + |g\rangle\langle g| = 1$$

Dipole atomique $\vec{D}$

Vibre le long de Oz

$$D_i = \delta_{iz}\, d\, (S_+ + S_-)$$

d : nombre réel ayant les dimensions d'un dipole

Hamiltonien atomique H_A

$$H_A = \hbar\omega_0 S_z$$

(Terme de "self-énergie" $A^2 \sim \mathbb{1}$)

Evolution non perturbée de $S_\pm$

$$S_\pm(t) \sim e^{\pm i\omega_0(t-t_0)}\, S_\pm(t_0)$$

T4

Un autre système simple
Oscillateur harmonique à 1 dimension

Hamiltonien H_A

$$H_A = \hbar\omega_0 (b^+ b + \tfrac{1}{2})$$

Dipole $\vec{D}$

Vibre le long de Oz

$$D_i = \delta_{iz}\, d\, (b^+ + b)$$

Comparaison avec le système à 2 niveaux

(i) Dans les 2 cas

$$D_i = \delta_{iz}\, d\, (A_+ + A_-)$$

avec $A_\pm(t) \sim e^{\pm i\omega_0 t}$

Une seule fréquence propre pour D_z

(ii) L'oscillateur harmonique est linéaire.

Le système à 2 niveaux est non-linéaire.

T-5

Calcul du champ rayonné par le dipole à son propre emplacement

Aspects nouveaux (par rapport au calcul précédent)

① - Pour la suite de la discussion, il faut calculer $\vec{E}^{(\pm)}(\vec{0},t)$ (et non pas seulement $\vec{E}(\vec{0},t)$)

② Moyennant certaines approximations, on peut exprimer $\vec{E}^{(\pm)}(\vec{0},t)$ en fonction de $\vec{D}(t)$ seulement (au lieu de $\vec{D}$, $\ddot{\vec{D}}$, $\dddot{\vec{D}}$)

③ Les coefficients des équations reliant $\vec{E}^{(\pm)}(\vec{0},t)$ à $\vec{D}(t)$ sont proportionnels aux élargissements et déplacements radiatifs des niveaux

T6

Rappel de l'expression de $a_{k\varepsilon}(t)$

$$a_{k\varepsilon}(t) = a_{k\varepsilon}(t_0)\, e^{-i\omega(t-t_0)} \quad \longleftarrow \text{vide}$$
$$+ \frac{\mathcal{N}_k}{\hbar}\int_0^{t-t_0} d\tau\ \varepsilon_j\, D_j(t-\tau)\, e^{-i\omega\tau} \quad \longleftarrow \text{source}$$

Report dans le développement de $\vec{E}^{(+)}(\vec{0},t)$

$$E_i^{(+)}(\vec{0},t) = \sum_{\vec{k}\,\vec{\varepsilon}} i\,\mathcal{N}_k\, \varepsilon_i\, a_{k\varepsilon}(t) =$$
$$E_{0i}^{(+)}(\vec{0},t) + \int_0^{t-t_0} d\tau\ F_{ij}^{(+)}(\tau)\, D_j(t-\tau)$$
$$F_{ij}^{(+)}(\tau) = \frac{2}{3}\delta_{ij}\,\frac{i}{\hbar}\sum_{\substack{\vec{k}\\ k<k_M}} \mathcal{N}_k^2\, e^{-i\omega\tau}$$

$F_{ij}^{(+)}(\tau)$: fonction "étroite", centrée en $\tau=0$, de largeur $1/ck_M$

Valeur de $D_{ij}(t-\tau)$ dans les modèle simples étudiés ici

$$D_j(t-\tau) = \delta_{ij}\, d\,\left[A_+(t-\tau) + A_-(t-\tau)\right]$$

T-7

Finalement,

$$E_i^{(+)}(\vec{0},t) - E_{0i}^{(+)}(\vec{0},t) =$$
$$d\,\delta_{iz}\int_0^{t-t_0} d\tau\ F_{ij}^{(+)}(\tau)\left[A_+(t-\tau) + A_-(t-\tau)\right]$$

Approximation (ordre le plus bas en d)

A cause de la présence de $F_{ij}^{(+)}(\tau)$, seules les valeurs très faibles de τ contribuent. L'évolution de $A_\pm$ entre t et $t-\tau$ peut être remplacée par l'évolution non perturbée

$$A_\pm(t-\tau) = A_\pm(t)\, e^{\mp i\omega_0\tau}$$

Ceci fait apparaître une double intégrale en τ et en k entièrement calculable (voir pages VII-5 et VII-6)

Approximation équivalente dans le calcul faisant apparaître $\ddot{D}$ et $\dddot{D}$

$$\dot{A}_+ = i\omega_0 A_+ \qquad \ddot{A}_+ = -\omega_0^2 A_+ \qquad \dddot{A}_+ = -i\omega_0^3 A_+$$

T8

Résultats du calcul

$$E_i^{(+)}(\vec{0},t) - E_{0i}^{(+)}(\vec{0},t) =$$
$$\pm\frac{i\hbar}{d}\delta_{iz}\left[\left(\frac{\gamma}{2} \pm i\delta\right) S_\mp(t) \pm i\,\bar{\delta}\, S_\pm(t)\right]$$

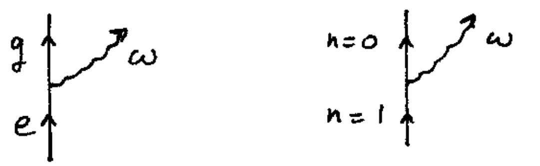
avec

$$\begin{cases} \gamma = \dfrac{2\pi}{\hbar}\displaystyle\sum_{\vec{k}\,\vec{\varepsilon}} d^2\varepsilon_z^2\,\mathcal{N}_k^2\,\delta(\hbar\omega - \hbar\omega_0) \\[2ex] \delta = \dfrac{1}{\hbar}\,\mathcal{P}\displaystyle\sum_{\vec{k}\,\vec{\varepsilon}} \dfrac{d^2\varepsilon_z^2\,\mathcal{N}_k^2}{\hbar\omega_0 - \hbar\omega} \\[2ex] \bar{\delta} = \dfrac{1}{\hbar}\,\mathcal{P}\displaystyle\sum_{\vec{k}\,\vec{\varepsilon}} \dfrac{d^2\varepsilon_z^2\,\mathcal{N}_k^2}{-\hbar\omega_0 - \hbar\omega} \end{cases}$$

Composante en quadrature avec $S_\pm$ proportionnelle à γ

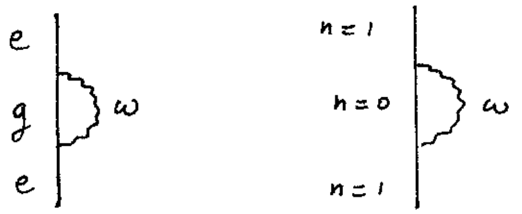
T9

Interprétation de γ



Probabilité d'émission spontanée d'un photon par unité de temps (Règle d'or de Fermi)

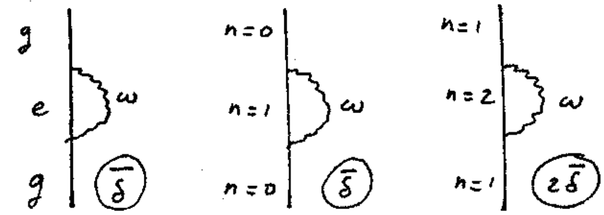
Interprétation de δ



Déplacement radiatif dû à l'émission et à la réabsorption virtuelle d'un photon (l'atome passant virtuellement dans un niveau inférieur)

T 10

Interprétation de $\bar{\delta}$



Déplacement radiatif dû à l'émission et à la réabsorption virtuelle d'un photon (l'atome passant virtuellement dans un niveau supérieur)

Récapitulation pour les déplacements

- Systèmes à 2 niveaux

$$\delta_e = \delta \qquad \delta_g = \bar{\delta}$$

- Oscillateur harmonique

$$\delta_1 = \delta + 2\bar{\delta} \qquad \delta_0 = \bar{\delta}$$

T 11

Equations de Heisenberg pour l'oscillateur harmonique

$$H = \hbar\omega_0 \left[b^+(t) b(t) + \tfrac{1}{2} \right] + H_R - d\,[b^+(t) + b(t)]\, E_z(\vec{0},t)$$

$$\frac{d}{dt} b(t) = \frac{1}{i\hbar} [b(t), H] = -i\omega_0 b(t) - \frac{d}{i\hbar} E_z(\vec{0},t)$$

$$E_z(\vec{0},t) = E_{0z}(\vec{0},t) + \frac{i\hbar}{d}\left[\left(\frac{\gamma}{2} + i\delta + i\bar{\delta}\right) b(t) - \left(\frac{\gamma}{2} - i\delta - i\bar{\delta}\right) b^+(t) \right]$$

$$\frac{d}{dt} b(t) = -i\omega_0 b(t) + \frac{id}{\hbar} E_{0z}(\vec{0},t) - \left(\frac{\gamma}{2} + i\delta + i\bar{\delta}\right) b(t) + \cancel{\left(\frac{\gamma}{2} - i\delta - i\bar{\delta}\right) b^+(t)}$$

On néglige ce couplage "non-séculaire" entre b et b^+ (r.w.a.)

T 12

Finalement,

$$\frac{d}{dt} b(t) = -\frac{\gamma}{2} b(t) - i(\omega_0 + \delta\omega_0) b(t) + \frac{id}{\hbar} E_{0z}(\vec{0},t)$$

avec $\delta\omega_0 = \delta + \bar{\delta} = \delta_1 - \delta_0$

Analogie avec une équation de Langevin : les termes en $\gamma/2$ et $\delta\omega_0$ proviennent de l'interaction de l'oscillateur avec son propre champ

Valeurs moyennes

- Etat initial du champ : vide ou état cohérent

$$|\psi_R(t_0)\rangle = |0\rangle \quad \text{ou} \quad |\psi_R(t_0)\rangle = |\{\alpha\}\rangle$$

- $$\langle 0 | E_{0z}(\vec{0},t) | 0 \rangle = 0$$

$$\langle \{\alpha\} | E_{0z}(\vec{0},t) | \{\alpha\} \rangle = \mathcal{E}_{0z}(\vec{0}\, t, \{\alpha\})$$

Champ classique associé à $\{\alpha\}$

T-13

Si l'on pose $\quad \langle b(t)\rangle_R = \langle\psi_R(t_0)|b(t)|\psi_R(t_0)\rangle$

$$\frac{d}{dt}\langle b(t)\rangle_R = -\frac{\gamma}{2}\langle b(t)\rangle_R - i(\omega_0+\delta\omega_0)\langle b(t)\rangle_R + \left\{\begin{array}{l} 0 \\ \frac{id}{\hbar}E_{0z}(\vec{0},t)\end{array}\right.$$

Equation d'un oscillateur amorti, attaqué par un champ classique (éventuellement nul si $|\psi_R(t_0)\rangle = |0\rangle$)

Conclusions

① Le déplacement de fréquence et l'amortissement sont dûs uniquement à la réaction de rayonnement

② Pour les valeurs moyennes, le champ libre ne joue aucun rôle dans le vide, a le même effet qu'un champ classique s'il est dans un état cohérent.

La quantification du champ ne semble jouer aucun rôle.

T-14

Equations de Heisenberg pour l'atome à 2 niveaux

$$H = \hbar\omega_0 S_z(t) + H_R - d\left[S_+(t)+S_-(t)\right]E_z(\vec{0},t)$$

$$[S_+(t),S_-(t)] = 2S_z(t) \qquad [S_z(t),S_\pm(t)] = \pm S_\pm(t)$$

$$\frac{d}{dt}S_+(t) = \frac{1}{i\hbar}[S_+(t),H]$$

$$\frac{d}{dt}S_+(t) = i\omega_0 S_+(t) + \frac{2id}{\hbar}S_z(t)E_z(\vec{0},t)$$

$$\frac{d}{dt}S_z(t) = \frac{1}{i\hbar}[S_z(t),H]$$

$$\frac{d}{dt}S_z(t) = \frac{id}{\hbar}\left[S_+(t)-S_-(t)\right]E_z(\vec{0},t)$$

$E_z(\vec{0},t)$ n'apparait pas seul (comme pour l'oscillateur harmonique) mais multiplié par un opérateur atomique (Effet des non-linéarités)

T-15

Problème de l'ordre des opérateurs

A l'instant initial t_0, les opérateurs atomiques $\{S_\pm(t_0), S_z(t_0)\}$ commutent avec les opérateurs de champ $\{E^{(\pm)}(\vec{x},t_0)\cdots\}$

L'évolution hamiltonienne entre t_0 et t conserve ces commutateurs. Les opérateurs "atomiques" $S_\pm(t)$ $S_z(t)$ commutent avec les champs totaux $\{E^{(\pm)}(\vec{x},t)\cdot\cdot\}$. On peut donc écrire

$$S_z(t)E_z(\vec{0},t) = S_z(t)\left[E_z^{(+)}(\vec{0},t)+E_z^{(-)}(\vec{0},t)\right]$$

$$= S_z(t)E_z^{(+)}(\vec{0},t) + E_z^{(-)}(\vec{0},t)S_z(t) \quad \leftarrow \text{Ordre normal}$$

$$= E_z^{(+)}(\vec{0},t)S_z(t) + S_z(t)E_z^{(-)}(\vec{0},t) \quad \leftarrow \text{Ordre antinormal}$$

$$= \frac{1}{2}\Big[S_z(t)E_z^{(+)}(\vec{0},t) + E_z^{(+)}(\vec{0},t)S_z(t) + S_z(t)E_z^{(-)}(\vec{0},t) + E_z^{(-)}(\vec{0},t)S_z(t)\Big] \quad \leftarrow \text{Ordre symétrique}$$

$$= \cdots$$

T-16

Remarque importante

Les opérateurs "atomiques" $S_\pm(t)$, $S_z(t)$ commutent avec le champ total $\vec{E}(t)$, non avec le champ du vide $\vec{E}_0(t)$ et le champ des sources.

Exemple : De la formule donnée plus haut pour $E_i^{(\pm)}(\vec{0},t) - E_{0i}^{(\pm)}(\vec{0},t)$ et de $[G_A(t), E_i^{(\pm)}(\vec{0},t)] = 0$ (où G_A est un opérateur atomique), on déduit

$$\left[G_A(t), E_{0i}^{(\pm)}(\vec{0},t)\right] = \mp\frac{i\hbar}{d}\delta_{iz}\Big\{\left(\frac{\gamma}{2}\pm i\delta\right)[G_A(t), S_\mp(t)] \pm i\bar{\delta}\,[G_A(t),S_\pm(t)]\Big\}$$

Un opérateur atomique initialement "pur" devient à l'instant t "contaminé" par le rayonnement

T-17

Equations de Heisenberg pour l'atome à 2 niveaux - Ordre normal.

Calculs pour $S_+(t)$

$$\frac{d}{dt} S_+(t) = i\omega_0 S_+(t) + \frac{2id}{\hbar}\left[S_z(t)\, E_z^{(+)}(\vec{0},t) + E_z^{(-)}(\vec{0},t)\, S_z(t)\right]$$

On remplace $E_z^{(\pm)}(\vec{0},t)$ par les expressions données plus haut.

$$\frac{d}{dt} S_+(t) = i\omega_0 S_+(t) + \frac{2id}{\hbar}\left[S_z(t)\, E_{0z}^{(+)}(\vec{0},t) + E_{0z}^{(-)}(\vec{0},t)\, S_z(t)\right]$$

$$+ \frac{2id}{\hbar}\left(\frac{i\hbar}{d}\right)\Big[\left(\frac{\gamma}{2}+i\delta\right)\underbrace{\cancel{S_z(t)S_-(t)}}_{\cancel{-\frac{1}{2}S_-(t)}} + i\bar{\delta}\, \underbrace{S_z(t)\, S_+(t)}_{\frac{1}{2}S_+(t)}\Big]$$

$$+ \frac{2id}{\hbar}\left(-\frac{i\hbar}{d}\right)\Big[\left(\frac{\gamma}{2}-i\delta\right)\underbrace{S_+(t)\, S_z(t)}_{-\frac{1}{2}S_+(t)} - i\bar{\delta}\, \underbrace{\cancel{S_-(t)\, S_z(t)}}_{\cancel{\frac{1}{2}S_-(t)}}\Big]$$

Couplages non-séculaires entre $S_+(t)$ et $S_-(t)$ négligés

T-18

En regroupant tout (avec $\delta\omega_0 = \delta - \bar{\delta} = \delta_e - \delta_g$)

$$\frac{d}{dt} S_+(t) = i(\omega_0 + \delta\omega_0)\, S_+(t) - \frac{\gamma}{2} S_+(t) + \frac{2id}{\hbar}\left[S_z(t)\, E_{0z}^{(+)}(\vec{0},t) + E_{0z}^{(-)}(\vec{0},t)\, S_z(t)\right]$$

Valeur moyenne dans le vide

Comme $E_{0z}^{(+)}(\vec{0},t)\,|0\rangle = 0 = \langle 0|\, E_{0z}^{(-)}(\vec{0},t)$

le champ du vide ne contribue pas

$$\frac{d}{dt}\langle S_+(t)\rangle_R = i(\omega_0+\delta\omega_0)\langle S_+(t)\rangle_R - \frac{\gamma}{2}\langle S_+(t)\rangle_R$$

Valeur moyenne dans un état cohérent $|\{\alpha\}\rangle$

$$E_{0z}^{(+)}(\vec{0},t)\,|\{\alpha\}\rangle = \mathcal{E}_{0z}^{(+)}(\vec{0}\,t,\{\alpha\})\,|\{\alpha\}\rangle$$

$$\langle\{\alpha\}|\, E_{0z}^{(-)}(\vec{0},t) = \mathcal{E}_{0z}^{(-)}(\vec{0}\,t,\{\alpha\})\,\langle\{\alpha\}|$$

$$\frac{d}{dt}\langle S_+(t)\rangle_R = i(\omega_0+\delta\omega_0)\langle S_+(t)\rangle_R - \frac{\gamma}{2}\langle S_+(t)\rangle_R + \frac{2id}{\hbar}\,\mathcal{E}_{0z}(\vec{0},t)\,\langle S_z(t)\rangle_R$$

Equations de Bloch avec relaxation ($\frac{\gamma}{2}$) déplacement ($\delta\omega_0$), et couplage avec un champ classique.

T-19

Calculs analogues pour S_z

$$\frac{d}{dt} S_z(t) = \frac{id}{\hbar}\Big\{\left[S_+(t) - S_-(t)\right] E_z^{(+)}(\vec{0},t) + E_z^{(-)}(\vec{0},t)\left[S_+(t)-S_-(t)\right]\Big\}$$

$$\downarrow$$

$$\frac{d}{dt} S_z(t) = -\gamma\left[\frac{1}{2} + S_z(t)\right] + \frac{id}{\hbar}\Big\{\left[S_+(t)-S_-(t)\right]E_{0z}^{(+)}(\vec{0},t) + E_{0z}^{(-)}(\vec{0},t)\left[S_+(t)-S_-(t)\right]\Big\}$$

Valeur moyenne dans le vide

$$\frac{d}{dt}\langle S_z(t)\rangle_R = -\gamma\left[\frac{1}{2} + \langle S_z(t)\rangle_R\right]$$

$P_e = |e\rangle\langle e|$ $\qquad$ $P_g = |g\rangle\langle g|$

$P_e(t) + P_g(t) = 1$ $\qquad$ $\frac{1}{2}\left(P_e(t) - P_g(t)\right) = S_z(t)$

$|e\rangle$

$\downarrow \gamma$

$|g\rangle$

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}\langle P_e(t)\rangle_R = -\gamma\,\langle P_e(t)\rangle_R \\ \dfrac{d}{dt}\langle P_g(t)\rangle_R = \gamma\,\langle P_e(t)\rangle_R \end{cases}$$

T-20

Conclusions pour l'atome à 2 niveaux

① Avec l'ordre normal, l'élargissement et le déplacement radiatifs de la transition atomique, les transferts radiatifs entre e et g, semblent dûs uniquement à la réaction de rayonnement

② Pour les valeurs moyennes, et pour un champ libre dans un état cohérent, on justifie rigoureusement les "équations de Bloch optiques" décrivant l'évolution de $\langle S_\pm(t)\rangle$, $\langle S_z(t)\rangle$ sous l'effet d'une excitation par un champ classique et d'une relaxation

Là encore, on a l'illusion qu'on peut se passer de la quantification du rayonnement.