

A - Introduction

- 1 - Buts de cette 2<sup>ème</sup> partie (T1 à T3)
- 2 - Phénomènes que l'on continue à négliger (T-4)

B - Evolution du système atomique

- 1 - Hamiltonien (T-5)
- 2 - Fonction d'onde à plusieurs composantes (T6 à T7)
- 3 - Equation de Schrödinger pour la fonction d'onde atomique (T8 à T10)

C - Séparation en deux parties du paquet d'ondes atomiqueEffet Stern et Gerlach optique

- 1 - Conditions sur la fonction d'onde initiale (T-11)
- 2 - Cas d'une onde lumineuse stationnaire résonnante
  - a) Principe de l'expérience (T-12)
  - b) Etude du mouvement du paquet d'ondes - Ordres de grandeur (T13 à T17)
- 3 - Cas d'une onde lumineuse progressive résonnante
  - a) Effet Stern et Gerlach optique transversal (T18 à T19)
  - b) Double réfraction (T-20)
- 4 - Cas général
  - a) Etats propres et valeurs propres du potentiel (T-21)
  - b) Variation spatiale des valeurs propres du potentiel (T-22)
  - c) Entrée de l'atome dans le faisceau lumineux (T23 à T26)
    - limite adiabatique
    - limite non adiabatique - Dédoublement du paquet d'ondes

Buts de la 2<sup>ème</sup> partie

Etudier l'évolution du paquet d'ondes tout entier, et non pas seulement celle de son centre

$$\vec{R}(t) = \langle \vec{R}(t) \rangle$$

Exemples d'effets physiques non contenus dans le mouvement de  $\vec{R}(t)$

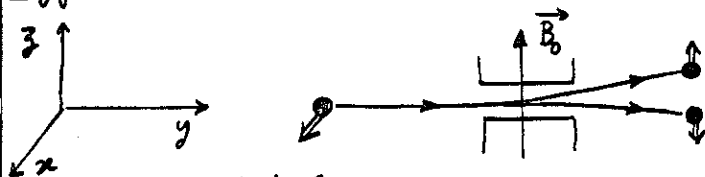
① Même si le paquet d'ondes initial est très petit, il peut se scinder en deux

↳ Effet Stern et Gerlach optique

② Dans certaines directions, la longueur d'onde de de Broglie atomique peut être très grande

↳ Phénomènes ondulatoires

Diffraction de Bragg de l'onde de de Broglie atomique

① Effet Stern et Gerlach habituel ②

- Etat initial

Paquet d'ondes très petit  $\psi(\vec{r})$

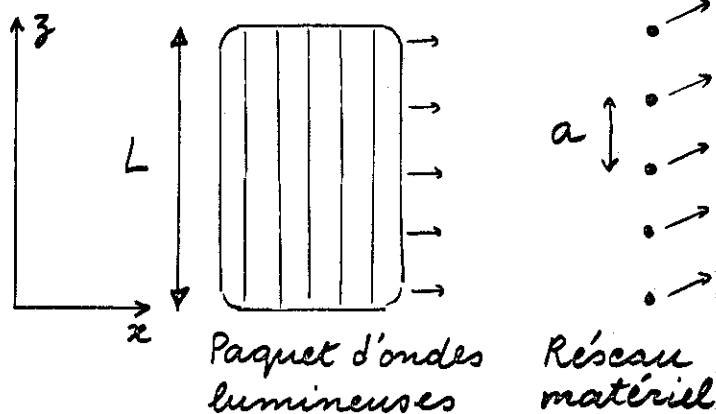
$$\text{Spin } \parallel \text{ à } Ox \quad |+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |+\rangle_z + |-\rangle_z ]$$

Superposition de 2 paquets d'ondes  $\psi_+(\vec{r})$  et  $\psi_-(\vec{r})$  correspondant à  $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$

- Les 2 paquets d'ondes  $\psi_{\pm}(\vec{r})$  subissent des déviations opposées car  $S_z$  a des valeurs opposées dans chacun d'eux

Points importants

- Corrélations entre variables internes et externes
- Caractère quantique des variables internes

Diffraction par un réseau (3)

Si la dimension transversale (le long de Oz) du paquet d'ondes lumineuses,  $L$ , est grande devant le pas du réseau,  $a$ , diffraction constructive dans certaines directions

Point important

$$L \gg a$$

Phénomènes que l'on continue à négliger dans cette 2<sup>ème</sup> partie (4)

Effets liés au caractère quantique du rayonnement

- Si le champ incident est dans un état cohérent, il est correct de le traiter classiquement

MOLLOW Phys. Rev. A 12, 1919 (1975)

- Par contre, le champ du vide est fondamentalement quantique Responsable (en partie) de l'émission spontanée et du caractère fluctuant des forces radiatives

Dans cette 2<sup>ème</sup> partie, on négligera l'émission spontanée, en supposant le temps d'interaction  $T$  court devant la durée de vie radiative  $\tau_R$

$$T \ll \tau_R$$

Hamiltonian (cf III-4) (5)

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} + h_A - D E(\vec{R}, t)$$

$\vec{R}, \vec{P}$  : Opérateurs position et impulsion du centre de masse

$h_A$  : Hamiltonien interne (2 niveaux  $e, f$  d'énergie  $\pm \frac{\hbar\omega_0}{2}$ )

$D$  : Opérateur dipole

Onde monochromatique

$$E(\vec{R}, t) = E^+(\vec{R}) e^{-i\omega t} + E^-(\vec{R}) e^{i\omega t}$$

$$E^\pm(\vec{R}) = \frac{E_0(\vec{R})}{2} e^{\mp i\phi(\vec{R})}$$

Approximation du champ tournant

$$- D E(\vec{R}, t) \simeq$$

$$- D_+ E^+(\vec{R}) e^{-i\omega t} - D_- E^-(\vec{R}) e^{i\omega t}$$

$$D_+ = d |e\rangle\langle f| \quad D_- = d |f\rangle\langle e|$$

$$\omega_1(\vec{R}) = -d E_0(\vec{R})/\hbar$$

Possibilité de décrire l'état atomique par une fonction d'onde (6)

Dans l'hamiltonien  $H$  n'apparaissent que des opérateurs atomiques puisque

- le champ du vide est ignoré
- le champ incident est décrit par une onde classique [ $\vec{R}$  est cependant un opérateur dans  $E(\vec{R}, t)$ ]

Il est donc possible d'utiliser un vecteur d'état atomique tel que

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$

Si le champ de rayonnement était quantifié, il faudrait, pour décrire l'état atomique, prendre la trace par rapport au rayonnement

Une description par opérateur densité réduit serait alors nécessaire

## Fonction d'onde atomique à plusieurs composantes (7)

- Base orthonormée atomique

$$|a, \vec{r}\rangle \quad a = e \text{ ou } f$$

$\vec{r}$  = valeur propre de  $\vec{R}$

- Composantes du vecteur d'état  $|\Psi(t)\rangle$  dans cette base

$$\langle a, \vec{r} | \Psi(t) \rangle = \Psi_a(\vec{r}, t)$$

Amplitude de probabilité de trouver, à l'instant  $t$ , l'atome au point  $\vec{r}$  dans l'état interne  $a$

Fonction d'onde à 2 composantes

$$\begin{pmatrix} \Psi_e(\vec{r}, t) \\ \Psi_f(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$$

- Densité de probabilité de présence de l'atome au point  $\vec{r}$  ( $\neq a$ )

$$\rho(\vec{r}, t) = |\Psi_e(\vec{r}, t)|^2 + |\Psi_f(\vec{r}, t)|^2$$

## Equation de Schrödinger (8)

Au lieu d'étudier, comme dans la 1<sup>ère</sup> partie, l'évolution de  $\langle \Psi(t) | \vec{R} | \Psi(t) \rangle$  (Théorème d'Ehrenfest) on s'intéresse ici à l'évolution de  $\Psi_e(\vec{r}, t)$  et  $\Psi_f(\vec{r}, t)$

Posons

$$\begin{cases} \Psi_e(\vec{r}, t) = c_e(\vec{r}, t) e^{-i\omega t/2} \\ \Psi_f(\vec{r}, t) = c_f(\vec{r}, t) e^{i\omega t/2} \end{cases}$$

On a donc

$$|\Psi(t)\rangle = \int d^3r \left[ c_e(\vec{r}, t) e^{-i\omega t/2} |e, \vec{r}\rangle + c_f(\vec{r}, t) e^{i\omega t/2} |f, \vec{r}\rangle \right]$$

Le développement de  $|\Psi(t)\rangle$  est ensuite porté dans l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle$$

et les coefficients de  $|e, \vec{r}\rangle$  et  $|f, \vec{r}\rangle$  égalés dans les 2 membres

## Evolution de $c_e(\vec{r}, t)$ et $c_f(\vec{r}, t)$ (9)

Equation matricielle

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_e(\vec{r}, t) \\ \dot{c}_f(\vec{r}, t) \end{pmatrix} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \begin{pmatrix} c_e(\vec{r}, t) \\ c_f(\vec{r}, t) \end{pmatrix} + [V(\vec{r})] \begin{pmatrix} c_e(\vec{r}, t) \\ c_f(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$$

avec  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

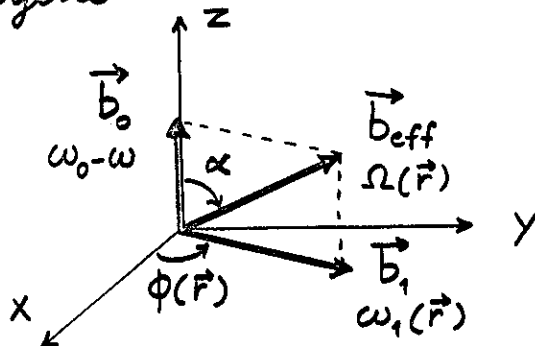
$[V(\vec{r})]$  matrice  $2 \times 2$  égale à

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 - \omega & \omega_1(\vec{r}) e^{-i\phi(\vec{r})} \\ \omega_1(\vec{r}) e^{i\phi(\vec{r})} & -(\omega_0 - \omega) \end{pmatrix}$$

Energie potentielle "effective" indépendante de  $t$ , dépendant de l'état interne et de  $\vec{r}$ , et représentant l'effet de l'irradiation lumineuse sur l'atome

## Problème équivalent (10)

Equations d'évolution strictement identiques à celles d'une particule de masse  $M$ , de spin  $\frac{1}{2}$ , évoluant dans un champ magnétique inhomogène



L'amplitude  $[\omega_1(\vec{r})]$ , et la direction  $[\phi(\vec{r})]$  de  $\vec{b}_1$  varient avec  $\vec{r}$

$$\Omega(\vec{r}) = \sqrt{[\omega_1(\vec{r})]^2 + (\omega_0 - \omega)^2}$$

Pulsation de Larmor autour du champ total  $\vec{b}_{\text{eff}} = \vec{b}_0 + \vec{b}_1$

Effet Stern et Gerlach optique (11)

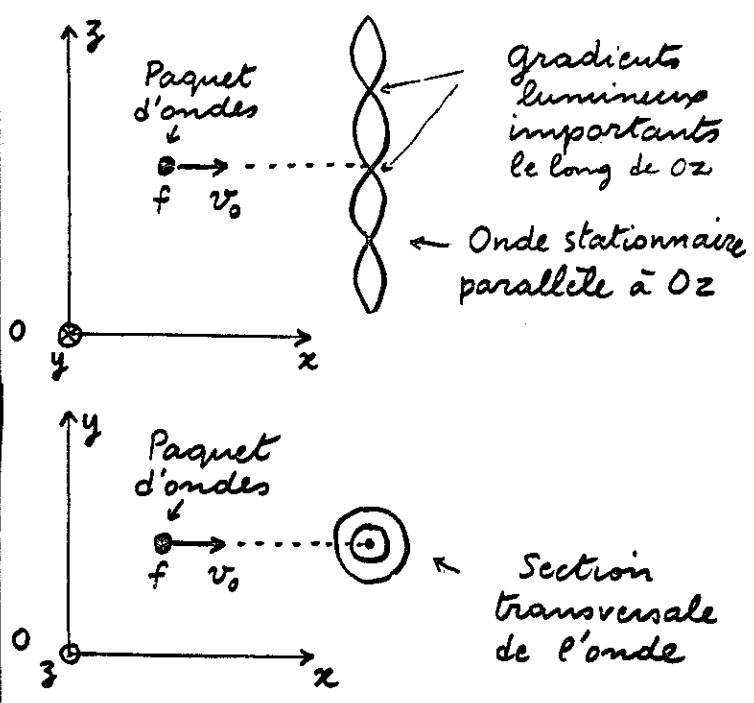
Conditions sur la fonction d'onde atomique

- Atome dans l'état f
- Paquet d'ondes très petit devant les longueurs caractérisant les variations spatiales de l'onde lumineuse (longueur d'onde  $\lambda_R \approx 0,5 \mu$  - diamètre focal  $w_0 \approx 10 \mu$ )
- Ce paquet d'ondes traverse une onde lumineuse en un point de fort gradient lumineux

Ordres de grandeur

Pour un atome de numéro atomique  $A = 25$ , d'énergie  $\frac{3}{2} k\Theta$  avec  $\Theta = 300^\circ K$   
 $\lambda_{de\ Broglie} \approx 0,3 \text{ \AA} \ll \lambda_R, w_0$   
 Il est donc possible d'avoir des paquets d'ondes très petits

Onde stationnaire résonnante (12)



Le paquet d'ondes, de vitesse  $\vec{v}_0 \parallel \text{à } Ox$ , est dans un plan de symétrie axial de l'onde  
 Pas de déviation en y  
 Déviation par contre en z

Potentiel lumineux (13)

- Onde stationnaire  $\rightarrow \phi(\vec{r}) = 0$
  - Résonance  $\rightarrow \omega_0 - \omega = 0$
  - $\hookrightarrow [V(\vec{r})] = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & \omega_1(\vec{r}) \\ \omega_1(\vec{r}) & 0 \end{bmatrix}$
  - avec  $\omega_1(\vec{r}) = 2\omega_1 \cos kz$
  - Les états propres de  $[V(\vec{r})]$  sont indépendants de  $\vec{r}$ . Ce sont les combinaisons linéaires symétrique et antisymétrique de  $|e, \vec{r}\rangle$  et  $|f, \vec{r}\rangle$
- Posons donc

$$c_{\pm}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [c_e(\vec{r}, t) \pm c_f(\vec{r}, t)]$$

On a bien sur

$$c_f(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [c_+(\vec{r}, t) - c_-(\vec{r}, t)]$$

$$c_e(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [c_+(\vec{r}, t) + c_-(\vec{r}, t)]$$

$$|c_e(\vec{r}, t)|^2 + |c_f(\vec{r}, t)|^2 = |c_+(\vec{r}, t)|^2 + |c_-(\vec{r}, t)|^2$$

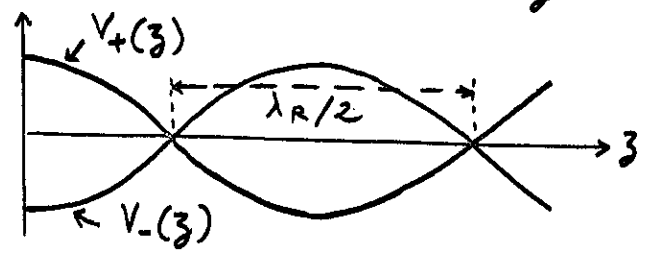
Evolution de  $c_{\pm}(\vec{r}, t)$  (14)

Les 2 équations couplées pour  $c_e$  et  $c_f$  deviennent 2 équations découplées pour  $c_+$  et  $c_-$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{\pm}(\vec{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \pm \frac{\hbar \omega_1(\vec{r})}{2} \right] c_{\pm}(\vec{r}, t)$$

Chaque équation décrit le mouvement d'une particule de masse M dans un potentiel

$$V_{\pm}(\vec{r}) = V_{\pm}(z) = \pm \hbar \omega_1 \cos kz$$

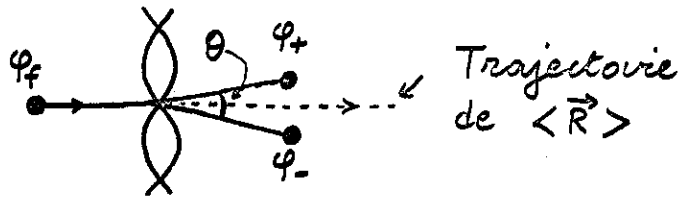


$$\left| \frac{d}{dz} V_{\pm}(z) \right| = \left| \mp \hbar k \omega_1 \sin kz \right|$$

Maximal quand  $\sin kz = \pm 1$   
 c-à-d quand  $\cos kz = 0$

Mouvement du paquet d'ondes (15)

Le paquet d'ondes initial  $\psi_f(\vec{r}, t)$  est une superposition linéaire de 2 paquets d'ondes  $\psi_+(\vec{r}, t)$  et  $\psi_-(\vec{r}, t)$  qui vont évoluer indépendamment l'un de l'autre, et subir des déviations opposées car  $v_+ = -v_-$



Dédoublément du paquet d'ondes comme dans le vrai effet Stern et Gerlach

Le théorème d'Ehrenfest ne rend pas compte de ce phénomène :  $\langle \vec{R} \rangle$  est au milieu des 2 paquets d'ondes, en un point où la densité de présence devient nulle, et la trajectoire de  $\langle \vec{R} \rangle$  n'est pas déviée.

Calcul de la déviation (16)

Comme chaque paquet d'ondes  $\psi_+$  ou  $\psi_-$  évolue en restant petit, on peut étudier son mouvement par le théorème d'Ehrenfest (alors que ce théorème, appliqué à l'ensemble des 2 ne donne rien)

Le centre de chaque paquet d'ondes évolue comme une particule de masse  $M$  soumise à une force  $\mp \frac{dV(z)}{dz}$  pendant un temps  $T$  (temps de traversée de l'onde, court devant  $\tau_R$ )

Impulsion (maximale) acquise suivant  $Oz$

$$\Delta p_z = \mp \left| \frac{dV}{dz} \right|_{\max} T = \mp \hbar k \omega_1 T$$

Ecart angulaire  $\theta$  à la sortie

$$\theta = \frac{2 \Delta p_z}{p_0} = \frac{2 \hbar k \omega_1 T}{M v_0}$$

Ordres de grandeur (17)

$$T = 10^{-8} \text{ sec} \quad \omega_1 = 10 \text{ GHz} = 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\hookrightarrow \Delta p_z = \mp 100 \hbar k$$

$$M v_0 = \frac{2\pi \hbar}{\lambda_{\text{de Broglie}}} \leftarrow \approx 0,3 \text{ \AA} \quad (\text{voir VII-11})$$

$$\hookrightarrow \theta = 2 \frac{2\pi \hbar}{M v_0} \frac{k}{2\pi} \omega_1 T = 2 \omega_1 T \frac{\lambda_{\text{de Broglie}}}{\lambda_R} \approx 200 \frac{0,3}{6000} \approx \frac{1}{100} \text{ Radian}$$

Largeur de chaque tache

Incertitude  $\delta p_z$  liée à la largeur  $\delta z$  du paquet d'ondes

$$\text{Si } \delta z = \lambda_R / 10 \quad \delta p_z = \hbar / \delta z \approx 10 \hbar k$$

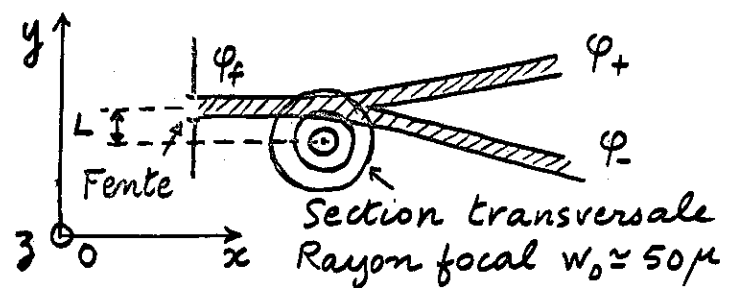
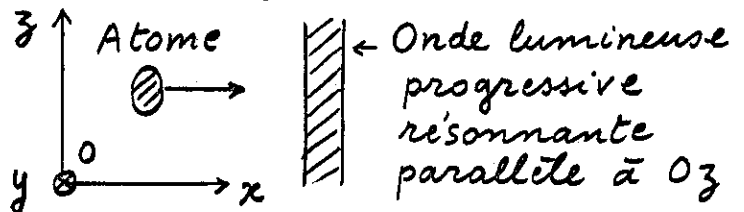
$$\delta p_z \ll \Delta p_z \rightarrow 2 \text{ taches bien séparées}$$

Difficultés d'une telle expérience

Paquet d'ondes très étroit ( $\lambda_R / 10 \approx 600 \text{ \AA}$ ). Fentes collimatrices très fines  $\rightarrow$  signal très petit

Proposition plus réaliste (18)

R. J. COOK Phys. Rev. Lett. 41, 1788 (1978)



Fente de largeur  $20 \mu$  (plus facile à faire que  $600 \text{ \AA}$ ) délimitant un jet se propageant à une distance  $L = \frac{w_0}{\sqrt{2}}$  de l'axe du faisceau lumineux

Le jet coupe le faisceau à une distance de l'axe correspondant au gradient lumineux maximal  
Déviation en  $y$

Ordres de grandeur

Faisceau gaussien  $P = 1 \text{ watt}$   $\omega_0 = 50 \mu$   
 Four  $\Theta = 1000^\circ \text{K}$  Fente  $20 \mu$   
 Vitesse =  $v$  la plus probable / 10  
 $A = 50$   $d = 1 \text{ Debye}$   
 L'écart angulaire prévu est  $\Theta = 0,31^\circ$   
 La divergence angulaire de chaque faisceau est  $\delta\Theta = 0,03^\circ$

Remarque

Il y a également des forces parallèles à  $Oz$  [la phase  $\phi$  de l'onde est non nulle et dépend de  $z$ , ce qui empêche en toute rigueur de découpler les évolutions de  $c_+$  et  $c_-$ ].

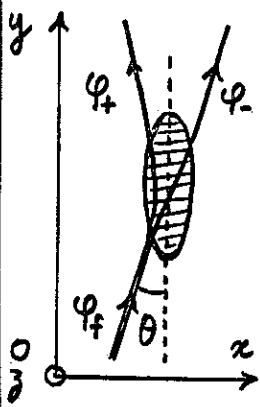
Mais, comme on néglige l'émission spontanée, transfert d'impulsion au plus égal à  $\hbar k$  suivant  $Oz$ . Peut être négligé devant le transfert suivant  $Oy$ .

(19)

Autre exemple : double réfraction (20)

A. P. KAZANTSEV, Sov. Phys. Usp 21, 58 (1978)

Onde progressive résonnante focalisée par une lentille cylindrique de sorte que la section de l'onde par le plan focal est une ellipse allongée



Jet atomique de largeur petite devant celle de l'ellipse et faisant un angle  $\Theta$  petit avec le grand axe de l'ellipse

Le paquet d'ondes  $\psi_-$  est attiré par le potentiel lumineux  $-\hbar\omega_1(\vec{r})/2$   
 Le paquet d'ondes  $\psi_+$  est repoussé par le potentiel  $+\hbar\omega_1(\vec{r})/2$ . Il est réfléchi si  $\frac{1}{2} M v_x^2 \leq \frac{\hbar\omega_1^{\text{max}}}{2}$

Cas général

(21)

Onde non nécessairement résonnante, stationnaire ou progressive

Retour au potentiel  $[V(\vec{r})]$

Etats propres

$$\begin{cases} |\bar{+}\rangle_{\vec{r}} = \cos\frac{\alpha}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} |e, \vec{r}\rangle + \sin\frac{\alpha}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} |f, \vec{r}\rangle \\ |\bar{-}\rangle_{\vec{r}} = -\sin\frac{\alpha}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} |e, \vec{r}\rangle + \cos\frac{\alpha}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} |f, \vec{r}\rangle \end{cases}$$

$\phi = \phi(\vec{r})$  Phase de l'onde  
 $\alpha = \alpha(\vec{r})$  tel que  $\sin\alpha(\vec{r}) = \frac{\omega_1(\vec{r})}{\Omega(\vec{r})}$

Valeurs propres  $\pm \frac{\hbar}{2} \Omega(\vec{r})$

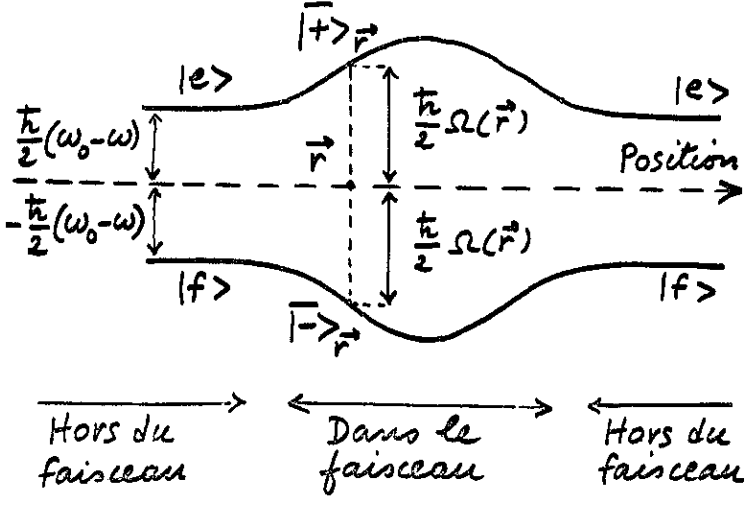
Interprétation géométrique

$|\bar{+}\rangle_{\vec{r}}$  et  $|\bar{-}\rangle_{\vec{r}}$  sont les états propres du spin le long du champ total  $\vec{b}_{\text{eff}}$  [voir figure VII-10]  
 $\alpha$  est l'angle entre  $Oz$  et  $\vec{b}_{\text{eff}}$

Diagramme d'énergie

(22)

Portons les 2 énergies potentielles  $\pm \frac{\hbar}{2} \Omega(\vec{r})$  en fonction de  $\vec{r}$



Dans le faisceau, les 2 états propres  $|\bar{\pm}\rangle_{\vec{r}}$  dépendent en général de  $\vec{r}$ , ce qui empêche de découpler l'équation de Schrödinger en 2 équations indépendantes

Entrée de l'atome dans le faisceau

Limite adiabatique

(23)

Si la vitesse de l'atome est suffisamment faible, et si les énergies  $\pm \hbar \Omega(\vec{r})/2$  sont suffisamment séparées, l'atome suit adiabatiquement la variation des niveaux.

Plus précisément, un petit paquet d'ondes, de centre  $\vec{r}_0$ , dans l'état  $|\vec{+}\rangle_{\vec{r}_0}$  (ou  $|\vec{-}\rangle_{\vec{r}_0}$ ), évolue en restant dans l'état  $|\vec{+}\rangle_{\vec{r}}$  (ou  $|\vec{-}\rangle_{\vec{r}}$ ) correspondant aux divers points  $\vec{r}$  explorés au cours du mouvement (le spin fictif reste aligné sur  $\vec{b}_{eff}$ )

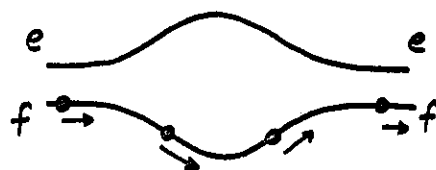
Le centre du paquet d'ondes évolue comme un point de masse  $M$  soumis à la force  $-\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \Omega(\vec{r})$  [ou  $+\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \Omega(\vec{r})$ ]

Le paquet d'ondes ne se dédouble pas à la limite adiabatique

(24)

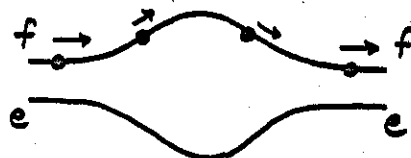
Avant d'entrer dans le faisceau, l'atome est dans l'état  $|f\rangle$ . Si  $|\delta| = |\omega - \omega_0|$  est suffisamment grand, et si la vitesse est suffisamment faible, l'atome reste dans l'état se raccordant à  $f$  par continuité

Cas  $\omega < \omega_0$



Attraction vers les hautes intensités

Cas  $\omega > \omega_0$



Répulsion hors des hautes intensités  
Rebroussement si  $\frac{1}{2} M v^2 \leq \frac{\hbar}{2} [\Omega_{max} \delta]$

Conditions de validité de l'approximation adiabatique

(25)

La vitesse de rotation du champ effectif  $\vec{b}_{eff}$  doit être plus petite que la fréquence de précession autour de  $\vec{b}_{eff}$

Etude dans le cas de la traversée d'un faisceau perpendiculairement à son axe

$$\left(\frac{d\alpha}{dt}\right)_{max} \approx \frac{1}{|\delta|} \left(\frac{d\omega_1}{dt}\right)_{max} \approx \frac{1}{|\delta|} \left(\frac{d\omega_1}{dr}\right)_{max} \frac{dr}{dt}$$

$$\approx \frac{1}{|\delta|} \frac{\omega_1^{max}}{\omega_0} v$$

$$(\Omega)_{min} = |\delta|$$

$$\left(\frac{d\alpha}{dt}\right)_{max} \ll (\Omega)_{min} \rightarrow \frac{1}{|\delta|} \frac{\omega_1^{max}}{\omega_0} v \ll |\delta|$$

Or  $\frac{\omega_0}{v} = T$  Temps de traversée

$$\rightarrow |\delta| = |\omega - \omega_0| \gg \sqrt{\frac{\omega_1^{max}}{T}}$$

Limite non adiabatique

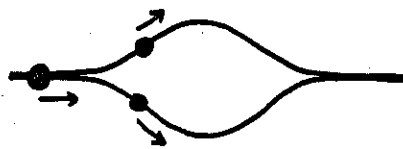
(26)

Dédoublément du paquet d'ondes

Les états  $|\pm\rangle_{\vec{r}}$  changent trop vite et l'atome ne peut suivre cette variation.

En entrant dans le faisceau, l'atome reste dans l'état  $|f\rangle$ , c.à.d dans une superposition linéaire de 2 paquets d'ondes qui vont subir ensuite des déviations différentes.

C'est ce qui se passe pour  $\delta = 0$



ou pour  $\delta$  suffisamment faible

$$|\delta| \ll \sqrt{\frac{\omega_1^{max}}{T}}$$