

TD n°7

- (1) Un modèle simple de l'émission spontanée. (2) Symétrie dynamique de deux oscillateurs.
-

1 Un modèle simple de l'émission spontanée : un état quantique couplé à un continuum

Références : [3]CI, ou [2]DXIII.

Du fait du couplage au champ électromagnétique, un atome dans un état excité ne reste pas éternellement dans cet état : il retourne dans l'état fondamental tout en émettant un photon. Pour comprendre comment se fait ce processus au cours du temps et comprendre aussi la distribution d'énergies possibles pour le photon émis, on simplifie ce problème et on le modélise de la façon suivante. Le "système total" est : atome + champ électromagnétique.

On appelle $|\varphi\rangle$ **l'état quantique initial du système total, décrivant l'atome excité et le champ électromagnétique contenant zéro photon.**

D'autres états possibles du système total que l'on notera $|k\rangle$, **correspondent à l'atome dans l'état fondamental et le champ électromagnétique contenant un photon émit.** Il y a une infinité de tels états possibles (selon l'énergie et la direction de propagation du photon) ; ils forment un continuum d'état. Pour simplifier les calculs, on remplace ce continuum par une infinité d'états quantiques discrets notés :

$$|k\rangle, \quad k \in \mathbb{Z}$$

L'ensemble des états $\{|\varphi\rangle, |k\rangle\}$ avec $k = \dots, -1, 0, 1, 2, \dots$ forment donc une base orthonormée de l'espace quantique total \mathcal{H} considéré. La relation de fermeture s'écrit :

$$\hat{I} = |\varphi\rangle\langle\varphi| + \sum_{k \in \mathbb{Z}} |k\rangle\langle k|$$

On note \hat{H} le Hamiltonien qui décrit l'évolution de ce système couplé atome-photons. La matrice de cet opérateur dans la base $|\varphi\rangle, |k\rangle$ (avec les indices entiers $k \in \mathbb{Z}$) est :

$$\hat{H} \equiv \begin{pmatrix} E_\varphi & \dots & v & \dots \\ \vdots & \ddots & & 0 \\ v & & E_k & \\ \vdots & 0 & & \ddots \end{pmatrix}, \quad E_\varphi = 0, \quad E_k = k\delta, \quad v \in \mathbb{R}.$$

Autrement dit, les éléments de matrice sont (les autres sont nuls) :

$$\begin{aligned}\langle \varphi | H | \varphi \rangle &= E_\varphi = 0, & v &= \langle k | \hat{H} | \varphi \rangle = \langle \varphi | \hat{H} | k \rangle \in \mathbb{R} \\ \langle k | H | k \rangle &= E_k, & E_k &= k\delta, \quad k \in \mathbb{Z}\end{aligned}$$

Remarques :

- La première ligne (et 1ere colonne) sont pour l'état $|\varphi\rangle$ et les autres pour les états $|k\rangle, k \in \mathbb{Z}$. On choisit l'origine des énergie telle que $E_\varphi = 0$ (pour simplifier), et on suppose que $E_k = k\delta$ où $\delta \ll v$ est l'écart entre niveaux sera supposé très petit (δ^{-1} est la densité d'états). Le termes $v \in \mathbb{R}$ hors diagonal non nuls, traduisent le couplage de l'état atome excité au champ électromagnétique, et implique que les états $|\varphi\rangle$ et $|k\rangle$ ne sont pas des vecteurs propres de la matrice, ce qui signifie en terme physique que ce ne sont pas des états stationnaires. L'état excité $|\varphi\rangle$ va donc évoluer vers un mélange d'états $|k\rangle$.
- La **règle d'or de Fermi** (théorie perturbative, [2] D_{XIII}) stipule que le taux de transition de l'état $|\varphi\rangle$ vers le continuum est :

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \left(v^2 \frac{1}{\delta} \right)$$

A la fin du problème on considérera δ et v très petits, mais Γ fini afin de démontrer cette formule.

1. Les états propres et valeurs propres de \hat{H} sont notés

$$\hat{H}|\psi_\mu\rangle = \varepsilon_\mu|\psi_\mu\rangle, \quad \mu \in \mathbb{Z} \tag{1}$$

et sont inconnus pour le moment. Exprimer les composantes $\langle k|\psi_\mu\rangle$ à partir de $\langle \varphi|\psi_\mu\rangle, v, \varepsilon_\mu, E_k$ (Aide : multiplier (1) par $\langle k|$; utiliser la relation de fermeture sur les états $|\varphi\rangle$ et $|k\rangle$; on pourra supposer temporairement que $\varepsilon_\mu \neq E_k$).

2. Donner une relation faisant intervenir v, ε_μ, E_k . (Aide : multiplier (1) par $\langle \varphi|$). En utilisant la relation mathématique [1, p.188] $\sum_k \frac{1}{(z-k)} = \frac{\pi}{\tan(\pi z)}$, déduire alors que

$$\left(\frac{2}{\Gamma\hbar} \right) \varepsilon_\mu = \frac{1}{\tan(\pi\varepsilon_\mu/\delta)}$$

et montrer comment trouver graphiquement les solutions ε_μ de cette équation. Vérifier que $\varepsilon_\mu \neq E_k$.

3. En écrivant que l'état $|\psi_\mu\rangle$ est normalisé et en utilisant la relation mathématique [1, p.188] $\sum_k \frac{1}{(z-k)^2} = \frac{\pi^2}{\sin^2(\pi z)}$, déduire de ce qui précède que

$$|\langle \varphi | \psi_\mu \rangle|^2 = \left(1 + \frac{1}{\delta} \frac{\hbar\Gamma\pi}{2} \left(1 + \left(\frac{2}{\Gamma\hbar} \right)^2 \varepsilon_\mu^2 \right) \right)^{-1}$$

4. On suppose que à l'instant $t = 0$ l'atome est dans l'état excité $|\varphi\rangle$ (sans photon émis). Si l'on effectue une mesure de l'énergie sur l'état $|\varphi\rangle$, montrer que la probabilité de détecter l'énergie ε_μ dans l'intervalle $[E, E + dE]$, est (avec $\delta \ll dE \ll \hbar\Gamma$)

$$dP = \frac{\left(\frac{2}{\hbar\pi\Gamma}\right)}{\left(1 + \left(\frac{2}{\Gamma\hbar}\right)^2 E^2\right)} dE$$

Tracer l'allure de la courbe $(dP/dE)(E)$, et discuter comment cette courbe intervient dans une mesure expérimentale.

2 (Option) Symétrie dynamique de deux oscillateurs de même fréquence

1. On suppose toujours qu'à $t = 0$ l'atome est dans l'état $|\varphi\rangle$. Exprimer l'état $|\psi(t)\rangle$ à une date ultérieure t , à partir de $|\varphi\rangle$ et \hat{H} . Calculer la probabilité $P_\varphi(t) = |\langle\varphi|\psi(t)\rangle|^2$ pour que à la date t l'atome soit toujours excité (et le photon non émis). (Aide : utiliser la relation de fermeture sur les états $|\psi_\mu\rangle$, et $\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-i\alpha x} \frac{1}{1+x^2} = e^{-|\alpha|}$). Tracer la courbe $P_\varphi(t)$, et commentez la règle d'or de Fermi.

Références : [2] E_V .

Dans une molécule, supposons que deux mouvements de vibrations aient la même fréquence. On modélise alors chacune de ces vibrations par un mouvement harmonique¹, et le Hamiltonien sans dimension décrivant ces deux oscillations est alors :

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \\ &= \frac{1}{2} \left(\hat{P}_1^2 + \hat{Q}_1^2 \right) + \frac{1}{2} \left(\hat{P}_2^2 + \hat{Q}_2^2 \right) \end{aligned}$$

où \hat{P}_i, \hat{Q}_i sont des opérateurs d'impulsion et de position sans dimension, vérifiant :

$$\left[\hat{Q}_1, \hat{P}_1 \right] = i \hat{I}, \quad \left[\hat{Q}_2, \hat{P}_2 \right] = i \hat{I}$$

L'espace de Hilbert total est $L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R}) \equiv L^2(\mathbb{R}^2)$.

- En fonction des opérateurs \hat{P}_i, \hat{Q}_i , rappeler l'expression des opérateurs de création et d'annihilation associés, vérifiant $[a_1, a_1^+] = \hat{I}$, $[a_2, a_2^+] = \hat{I}$ et donner l'expression de \hat{H}_1 et \hat{H}_2 en fonction de $\hat{N}_1 = a_1^+ a_1$ et $\hat{N}_2 = a_2^+ a_2$?
- On rappelle que le spectre de $\hat{N}_i = a_i^+ a_i$ dans $L^2(\mathbb{R})$ est formé par les entiers $n_i = 0, 1, 2, 3, \dots$:

$$\hat{N}_1 |n_1\rangle = n_1 |n_1\rangle, \quad \hat{N}_2 |n_2\rangle = n_2 |n_2\rangle$$

1. On rappelle l'importance du modèle des oscillateurs harmoniques et des hamiltoniens quadratiques en physique : ils apparaissent à basse énergie près de l'état d'équilibre, dans "l'approximation linéaire" ou "la théorie des modes normaux".

En déduire que les niveaux d'énergie de \hat{H} dans $L^2(\mathbb{R}^2)$ sont des entiers. Donner une base de l'espace propre de \hat{H} d'énergie E ? Quelle est la multiplicité du niveau $E \in \mathbb{N}^*$? Note : ces dégénérescences sont souvent observées en physique moléculaire. On les appelle des “polyades”.

3. Les dégénérescences observées suggèrent que le problème possède un **groupe de symétrie dynamique** que l'on va chercher. On introduit les opérateurs :

$$\begin{aligned}\hat{J}_0 &= \frac{1}{2} (a_2^+ a_2 - a_1^+ a_1) \\ \hat{J}_+ &= a_2^+ a_1 \\ \hat{J}_- &= a_1^+ a_2\end{aligned}$$

- (a) Calculer le commutateur de chacun de ces opérateurs avec \hat{H} ? Aide : montrer que pour 3 opérateurs on a $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$. On calculera au préalable les commutateurs : $[\hat{N}_i, \hat{J}_\pm]$.
- (b) Calculer les commutateurs des opérateurs $\hat{J}_0, \hat{J}_+, \hat{J}_-$ entre eux? De quelle algèbre de groupe s'agit-il?
4. Calculer l'action des opérateurs $\hat{H}, \hat{J}_0, \hat{J}_+, \hat{J}_-$ sur un vecteur de base $|n_1, n_2\rangle$. Faire un schéma du réseau des entiers (n_1, n_2) , ou chaque point représente un état $|n_1, n_2\rangle$, et représenter l'action des opérateurs sur les points de ce réseau.
5. Montrer que le vecteur de base $|n_1, n_2\rangle$ peut s'écrire $|j, m\rangle$, avec $\hat{J}_0|j, m\rangle = m|j, m\rangle$, $\hat{J}^2|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle$ et exprimer j, m à partir de n_1, n_2 , et E à partir de j . Que peut on dire sur les espaces propres de \hat{H} par rapport à l'action de ce groupe de symétrie dynamique²?

Références

- [1] Lars V. Ahlfors. *Complex analysis. An introduction to the theory of analytic functions of one complex variable. 3rd ed.* International Series in pure and applied Mathematics. Düsseldorf etc. : McGraw-Hill Book Company. XIV, 331 p. DM 44.10 ; \$ 19.75 , 1979.
- [2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe. *Mécanique quantique.*
- [3] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg. *Processus d'interaction entre photons et atomes. ...*, 1988.

2. Pour le même modèle en mécanique classique, et les modèles analogues de plusieurs oscillateurs harmoniques ayant des fréquences égales ou en rapports rationnels, cette symétrie dynamique est présente.