Classe inversée IX : Perturbations dépendantes du temps

On suppose que le système est décrit par un hamiltonien principal H_0 dont les vecteurs propres $\{|\varphi_n^0\rangle\}$ (qui forment donc la base canonique) et valeurs propres respectives E_n^0 sont connus. On suppose que ce système est alors perturbé par un petit terme correctif dépendant explicitement du temps, d'hamiltonien noté $W(t)$. Pour des raisons de commodité de raisonnement mathématique et pour bien mettre en évidence que la perturbation est faible devant l'effet principal, nous noterons cette perturbation parfois sous la forme $W = \lambda\tilde{W}$, avec $\lambda \to 0$.

Il n'est plus question ici de résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire, puisque le problème dépend explicitement du temps. Soit $|\psi(t)\rangle$ le vecteur d'état du système à l'instant t. Nous supposerons $W(t < 0) = 0$ et que le système est initialement (à $t = 0$) dans un état propre $|\varphi_i^0\rangle$ de H_0. Nous noterons $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\varphi_n^0\rangle$. La question qui se pose ici est : sous quelles conditions est-ce que la perturbation peut induire une transition du système depuis son état initial, d'indice i, vers un autre état final $f \neq i$. Nous allons devoir calculer la probabilité de transition qui s'écrit

$$\mathcal{P}_{i\to f} = |\langle\varphi_f^0|\psi(t)\rangle|^2$$

1 Cas général

1.1 Notation dans la base canonique

Ecrivez cette probabilité en fonction des c_n

1.2 Equations séculaires

Ecrivez l'équation de Schrödinger dépendante du temps pour le vecteur d'état dans la base canonique. Projetez celle-ci sur un vecteur quelconque $|\varphi_k^0\rangle$ de la base canonique, pour trouver le système d'équations différentielles couplées

$$i\hbar\dot{c}_k = c_k E_k^0 + \lambda \sum_n c_n \tilde{W}_{k,n} \tag{1}$$

1.3 Evolution sans la perturbation

Rappelez la forme qu'auraient eu les fonctions $c_n(t)$ en absence de toute perturbation ($\lambda = 0$). On introduira le symbole de Kronecker $\delta_{i,j}$.

1.4 Changement de variables

On pose dorénavant $c_k(t) = b_k(t)\, e^{-iE_k^0 t/\hbar}$. Précisez les conditions initiales des fonctions b_k puis écrivez le système d'équations différentielles du premier ordre sur les b_k. On introduira la quantité $\omega_{k,n} = (E_k^0 - E_n^0)/\hbar$.

1.5 Développement en puissances de λ

Nous allons supposer qu'il est possible d'écrire les solutions b_k du système linéaire d'équations différentielles ci-dessus sous la forme d'un développement en puissances de λ :

$$b_k(t) = b_k^{(0)}(t) + \lambda\, b_k^{(1)}(t) + \lambda^2\, b_k^{(2)}(t) + ...$$

La fonction $b_k^{(0)}(t)$ est ainsi la valeur qu'aurait eu $b_k(t)$ en absence de perturbation et $b_k^{(1)}(t)$ la déviation au premier ordre en λ de $b_k(t)$ de sa dynamique non-perturbée. Explicitez les fonctions $b_k^{(0)}(t)$.

1.6 Premier ordre perturbatif

Insérez l'expression des $b_k(t)$ au premier ordre en λ dans les équations trouvées à la question 1.4. Identifiez les termes d'ordre 1 en λ, puis intégrez pour trouver

$$b_k^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{k,i} t'}\, \tilde{W}_{k,i}(t')\, dt'$$

1.7 Probabilité de transition

Déduisez-en la probabilité de transition au premier ordre :

$$\mathcal{P}_{i\to f} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{f,i} t'}\, W_{f,i}(t')\, dt' \right|^2$$

2 Perturbation oscillatoire

On suppose désormais $W(t) = W^0 \sin(\omega t)$, où W^0 est un terme stationnaire pour $t > 0$, mais nul pour $t < 0$.

2.1

Ecrivez $\mathcal{P}_{i\to f}$ grâce à deux fonctions

$$A_\pm(\omega) = -i \int_0^t e^{i(\omega_{f,i} \pm \omega)t'} dt'$$

On remarquera que $A_+(-\omega) = A_-(\omega)$.

2.2 Expression de A_+

Effectuez l'intégration pour trouver

$$A_+(t) = -i\, e^{i(\omega_{f,i}+\omega)t/2} \frac{\sin((\omega_{f,i}+\omega)t/2)}{(\omega_{f,i}+\omega)/2}$$

2.3 Approximation d'onde tournante

Nous supposons désormais que ω est proche de $|\omega_{f,i}|$. Prenons par exemple $\omega \approx \omega_{f,i}$ (ce qui suppose $E_f^0 > E_i^0$). Justifiez que sur les deux fonctions $A_\pm$ dans l'expression de $\mathcal{P}_{i\to f}$, l'une est fortement dominante sur l'autre, qui peut donc être négligée. On appelle cela l'approximation d'onde tournante (rotating wave approximation, RWA). Montrez que dans le cadre de cette approximation

$$\mathcal{P}_{i\to f} = \frac{|W_{f,i}^0|^2}{4\hbar^2} t^2 \left(\frac{\sin((\omega_{f,i}-\omega)t/2)}{(\omega_{f,i}-\omega)t/2} \right)^2$$

2.4 Propriétés de $\mathcal{P}_{i\to f}$

Représentez $\mathcal{P}_{i\to f}$ comme une fonction de ω. Comment varie $\mathcal{P}_{i\to f}(\omega \approx \omega_{f,i})$ avec le temps, aux temps longs et aux temps courts ?

3 Diffusion vers un spectre continu : Règle d'or de Fermi

3.1

A partir de la question 1.7, calculez $\mathcal{P}_{i\to f}$ pour une perturbation constante qui démarre à l'instant $t = 0$.

3.2

Justifiez que la probabilité que le système ait quitté son état initial à l'instant t s'écrit

$$\mathcal{P} = \sum_{f\neq i} \mathcal{P}_{i\to f}$$

Nous allons désormais supposer que les éléments de matrice $W_{f,i}$ dépendent essentiellement de l'énergie de l'état final, c'est-à-dire que la probabilité de transition vers deux états f et f' est la même si $E_f = E_{f'}$.

Supposons enfin que le spectre de H_0 est décrit par un continuum, de densité d'états $\rho(E)$.

Montrez que sous ces hypothèses

$$\mathcal{P} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dE\, \rho(E)\, |W_{f,i}|^2\, t^2\, \mathrm{sinc}^2 \left(\frac{(E-E_i)t}{2\hbar} \right)$$

3.3 Expression aux temps longs

Comme discuté précédemment, la fonction sinc^2 devient très étroite dans l'espace de fréquences aux temps longs. De fait, elle tend vers un delta de Dirac :

$$\lim_{a \to +\infty} \frac{a}{\pi} \text{sinc}^2 (ax) = \delta(x)$$

Déduisez-en l'expression de la règle d'or de Fermi

$$\Gamma = \frac{d\mathcal{P}}{dt} = \frac{2\pi \, |W_{f,i}|^2}{\hbar} \, \rho(E_f = E_i)$$

Solutions

1.1
$\mathcal{P}_{i\to f} = |c_f(t)|^2$

1.2

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

$$i\hbar \sum_n \dot{c}_n |\varphi_n^0\rangle = \sum_n \left(E_n c_n |\varphi_n^0\rangle + c_n \lambda \tilde{W} |\varphi_n^0\rangle \right)$$

On multiplie à gauche par $\langle \varphi_k^0 |$:

$$i\hbar \dot{c}_k = c_k E_k^0 + \lambda \sum_n c_n\, \tilde{W}_{k,n}$$

1.3
Si $\lambda = 0$, on a directement $c_k(t) = c_k(0)\, e^{-iE_k^0 t\hbar}$. Par hypothèse, $c_k(0) = \delta_{i,k}$ car le système est entièrement dans l'état i initialement.

1.4
On trouve

$$i\hbar \dot{b}_k(t) = \lambda \sum_n b_n(t)\, \tilde{W}_{k,n}(t)\, e^{i\omega_{k,n} t}$$

1.5
On injecte ce développement de b_k en puissances de λ dans l'équation ci-dessus et on identifie les termes d'ordre 0 en λ :

$$i\hbar \dot{b}_k^{(0)}(t) = 0$$

Donc $b_k^{(0)}(t) = b_k^{(0)}(0) = \delta_{k,i}$ (terme sans perturbation).

1.6
On trouve

$$i\hbar \dot{b}_k^{(1)}(t) = \sum_n b_n^{(0)}(t)\, \tilde{W}_{k,n}(t)\, e^{i\omega_{k,n} t} = \tilde{W}_{k,i}(t)\, e^{i\omega_{k,i} t}$$

d'où

$$b_k^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{k,i}t'}\, \tilde{W}_{k,i}(t')\, dt'$$

1.7

$$\mathcal{P}_{i\to f} = |c_f(t)|^2 = |b_f(t)|^2 \approx |b_f^{(1)} t)|^2$$

car $b_f^{(0)} = 0$ car $f \neq i$. Ceci conduit immédiatement au résultat énoncé.

2.1

$$\begin{aligned}\int_0^t e^{i\omega_{f,i}t'}\, \sin(\omega t')\, dt' &= \frac{1}{2i} \int_0^t \left(e^{i(\omega_{f,i}+\omega)t'} - e^{i(\omega_{f,i}-\omega)t'}\right)\, dt' \\ &= \frac{1}{2}(A_+(\omega) - A_-(\omega))\end{aligned}$$

D'où

$$\mathcal{P}_{i\to f} = \frac{|W_{f,i}^0|^2}{4\hbar^2}\, |A_+(\omega) - A_-(\omega)|^2$$

2.2

$$\begin{aligned}A_+(\omega) &= -i \int_0^t e^{i(\omega_{f,i}+\omega)t'} dt' \\ &= -\frac{1}{\omega_{f,i}+\omega}\left(e^{i(\omega_{f,i}+\omega)t} - 1\right) \\ &= -ie^{i(\omega_{f,i}+\omega)t/2}\, \frac{\sin((\omega_{f,i}+\omega)t/2)}{(\omega_{f,i}+\omega)/2}\end{aligned}$$

2.3

On voit que le terme $\omega_{f,i} \pm \omega$ au dénominateur apporte une quasi-divergence pour une des deux fonctions $A_\pm$ lorsque $\omega_{f,i} \approx \mp\omega$. Cette fonction A dominera ainsi fortement sur l'autre, que l'on négligera dans cette approximation. Pour $\omega_{f,i} \approx \omega$, on retient par exemple seulement $A_-(\omega)$. Par conséquent

$$\mathcal{P}_{i\to f} \approx \frac{|W_{f,i}^0|^2}{4\hbar^2}\, |A_-(\omega)|^2 = \frac{|W_{f,i}^0|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{\sin((\omega_{f,i}+\omega)t/2)}{(\omega_{f,i}+\omega)/2} \right|^2$$

2.4 A résonance on a $\mathcal{P}_{i\to f} \approx \frac{|W_{f,i}^0|^2}{4\hbar^2}\, t^2$, donc une croissance quadratique avec t. Ceci ne peut être vrai que tant que $\mathcal{P}_{i\to f} \ll 1$. La largeur de $\mathcal{P}_{i\to f}(\omega)$

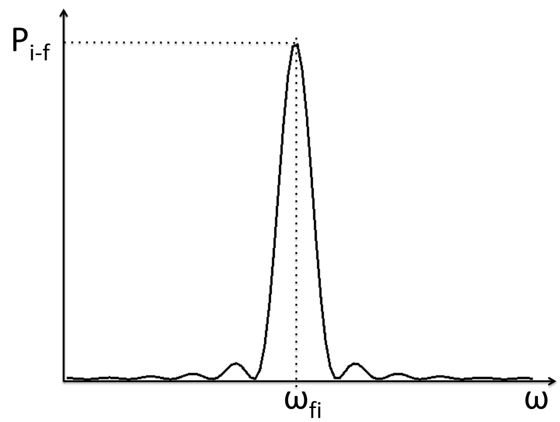

Figure 1: Tracé de $\mathcal{P}_{i\to f}(\omega)$

autour de son maximum est $\Delta\omega = 4\pi/t$ (distance entre les deux zéros de part et d'autre du pic).

3.1

$$\mathcal{P}_{i\to f} = \frac{|W_{f,i}|^2}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{i\omega_{f,i}t'}\,dt'\right|^2 = \frac{|W_{f,i}|^2}{\hbar^2}|A_+(0)|^2$$
$$= \frac{|W_{f,i}|^2}{\hbar^2}\left|\frac{\sin((\omega_{f,i})t/2)}{(\omega_{f,i})/2}\right|^2$$

3.2

La probabilité que le système ait quitté son état initial est bien sûr égal à la somme des probabilités de transition vers tous tous les autres états sauf i.

Dans ce cas

$$\mathcal{P} = \sum_{f\neq i}\frac{|W_{f,i}|^2}{\hbar^2}\,t^2\,\mathrm{sinc}^2\left(\frac{(E_f-E_i)t}{2\hbar}\right)$$

On passe à une sommation continue sur les énergies finales

$$\mathcal{P} = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{|W_{f,i}(E_f)|^2}{\hbar^2}\,t^2\,\mathrm{sinc}^2\left(\frac{(E_f-E_i)t}{2\hbar}\right)\,\rho(E_f)dE_f$$

3.3
Grâce à l'expression

$$\lim_{a\to+\infty} \frac{a}{\pi}\mathrm{sinc}^2\,(ax) = \delta(x)$$

où on prend $a = t/(2\hbar)$ et $x = E - E_i$, on trouve aux temps longs

$$\begin{aligned}\mathcal{P} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|W_{f,i}(E_f)|^2}{\hbar^2}\,\frac{2\hbar\pi}{t}\,t^2\,\delta(E-E_i)\,\rho(E_f)dE_f \\ &= t\,\frac{2\pi\,|W_{f,i}|^2}{\hbar}\,\rho(E_f = E_i)\end{aligned}$$