Examen de physique quantique, le 27/01/2016

PHELMA PNS 2A

Désintégration d'un état quantique couplé à un continuum

On introduit

- la fonction $\delta(E)$ de Dirac.
- la fonction lorentzienne $L(x) = \frac{\gamma/(2\pi)}{(x-x_0)^2+(\gamma/2)^2}$, centrée en x_0, d'intégrale unité et de largeur à mi-hauteur γ.
- la notation *partie principale* $\mathcal{P}$ d'une fonction $f(x)$ avec $x \in \mathbb{R}$.

  $\mathcal{P}(f)$ est en tout point identique à f si ce n'est que si f a une divergence en $x = x_0$ (p. ex. $f(x) = 1/(x - x_0)$), alors pour $a < x_0 < b$

  $$\int_a^b \mathcal{P}(f)(x)\,dx = \lim_{\epsilon\to 0^+}\left[\int_a^{x_0-\epsilon} f(x)dx + \int_{x_0+\epsilon}^{b} f(x)dx\right].$$

  Avec l'exemple de f donné ci-dessus, l'intégrale de $\mathcal{P}(f)$ est bien définie et finie.

1 Modèle du couplage d'un niveau discret à un continuum

On considère un objet très petit, par exemple une molécule. Ainsi les états propres de l'hamiltonien H_0 décrivant cette molécule isolée sont très espacés en énergie, et nous restreindrons notre étude à un unique état propre $|\phi_i\rangle$, d'énergie $E_i > 0$.

1.1

Expliquez simplement pourquoi (de manière générale) plus un objet est petit, plus ses états propres propres sont espacés en énergie.

1.2

La molécule est maintenant posée sur la surface d'un métal ayant de densité d'états électroniques $\rho(E)$ continue. Les états propres du métal sont paramétrés par un nombre sans dimensions α, ils sont donc notés $|\alpha\rangle$ et d'énergie $E_\alpha \in [0, +\infty[$. Justifiez que pour toute fonction f qui ne dépend que de l'énergie, une sommation de f sur tous les états et un volume unité peut s'écrire

$$\int d\alpha\, f(E_\alpha) = \int_0^{+\infty} dE\, \rho(E)\, f(E),$$

En absence de couplage entre la molécule et le métal, qui permettrait aux électrons de tunneler de l'un à l'autre, l'hamiltonien du système peut donc se noter H_0, avec

$$H_0|\phi_i\rangle = E_i|\phi_i\rangle$$

et

$$H_0|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle.$$

On a par ailleurs les relations d'orthogonalité et de fermeture suivantes:

$$\langle\alpha'|\alpha\rangle = \delta(\alpha' - \alpha)$$
$$\langle\phi_i|\alpha\rangle = 0$$
$$\langle\phi_i|\phi_i\rangle = 1$$

et

$$|\phi_i\rangle\langle\phi_i| + \int d\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha| = \text{Ident}.$$

1.3

On introduit maintenant un couplage W perturbatif et indépendant du temps entre molécule et continuum. On suppose que

$$\langle\alpha|W|\alpha\rangle = \langle\phi_i|W|\phi_i\rangle = 0.$$

Que signifie cette hypothèse physiquement ?

1.4

On supposera dorénavant aussi $\langle\alpha|W|\alpha'\rangle = 0$ et que $\langle\phi_i|W|\alpha\rangle$ ne dépend pas de α. Ecrivez schématiquement l'hamiltonien total $H = H_0 + W$ sous forme matricielle dans la base $\{|\phi_i\rangle, |\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, ...\}$.

1.5

En vous appuyant sur le résultat de la question 1.2, discutez qualitativement le décalage en énergie du niveau quantique discret suite à cette perturbation. Discutez en particulier les valeurs de E qui pourraient poser problème.

2 Dynamique des amplitudes de probabilités

Cette partie suit une démarche parallèle à celle vue en cours pour aboutir à la règle d'or de Fermi, pour retrouver quantitativement la dynamique de la désintégration de l'état discret.

On suppose qu'il y a un électron dans l'état $|\phi_i\rangle$ à $t = 0$, instant où la perturbation W est branchée. Tous les états $|\alpha\rangle$ sont initialement vides.

2.1

L'état du système à l'instant $t \geq 0$ peut s'écrire

$$|\psi(t)\rangle = b_i(t)\, e^{-iE_i t/\hbar}|\phi_i\rangle + \int d\alpha\, b_\alpha(t)\, e^{-iE_\alpha t/\hbar}\, |\alpha\rangle.$$

Commentez cette écriture et précisez notamment le sens des fonctions $b_{i,\alpha}(t)$ et leur valeurs initiales. Donnez $b_{i,\alpha}(t)$ en absence de couplage.

2.2

Déduisez-en le jeu d'équations suivant:

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_i(t) = \int d\alpha\, b_\alpha(t)\, e^{i(E_i - E_\alpha)t/\hbar}\, \langle\phi_i|W|\alpha\rangle \tag{1}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_\alpha(t) = b_i(t)\, e^{i(E_\alpha - E_i)t/\hbar}\, \langle\alpha|W|\phi_i\rangle. \tag{2}$$

2.3

Démontrez finalement l'expression exacte

$$\frac{d}{dt} b_i(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} dE \int_0^t dt'\, K(E)\, e^{i(E_i - E)(t-t')/\hbar)}\, b_i(t'), \tag{3}$$

avec $K(E)$ une fonction que l'on définira.

2.4

Dans l'hypothèse où la densité d'états du métal est une fonction lente de l'énergie, ainsi que le couplage tunnel de $|\phi_i\rangle$ aux états du métal, qu'en est-il de $K(E)$?

3 Approximation aux temps courts

On admettra la relation

$$\int_0^t d\tau\, e^{i(E_i-E)\tau/\hbar} = \hbar \left[\pi\, \delta(E_i - E) + i\mathcal{P}\left(\frac{1}{E_i - E}\right) \right].$$

3.1

Aux temps $t' > 0$ courts, on peut supposer que $b_i(t')$ n'a pas beaucoup changé de sa valeur initiale. Montrez que dans cette approximation

$$\frac{d}{dt} b_i(t) = -\frac{\Gamma}{2} - i\frac{\Delta}{\hbar},$$

où on explicitera de manière formelle Γ et Δ. On pourra laisser en particulier Δ sous la forme d'une intégrale.

3.2

Montrez que la probabilité que l'électron soit toujours sur la molécule (c'est à dire dans l'état $|\phi_i\rangle$) est donnée par $P_i(t) = 1 - \Gamma t$ aux temps courts t. Donnez les limites de validité de cette expression (ce qui précise ce que nous avons appelé *temps courts* ci-dessus).

3.3

(Question difficile, peut être réservée pour la fin).

On suppose désormais que $|\langle\alpha|W|\phi_i\rangle|^2 \propto \exp\left[-\left(\frac{E_\alpha - E_i}{\sigma}\right)^2\right]$, avec $\sigma \ll E_i$. (Cette hypothèse permet de garantir la convergence des intégrales utilisées pour $E \to +\infty$.)

On suppose aussi une forme affine de la densité d'états au voisinage de E_i, du type $\rho(E) = \rho_0(1 + \beta\, \frac{E - E_i}{E_i})$, avec $|\beta| \ll 1$.

Tracez schématiquement les trois fonctions $|\langle\alpha|W|\phi_i\rangle|^2$, $1/(E_i - E)$ et $\rho(E)$ en fonction de E. Justifiez que le signe de Δ est l'opposé de celui de β.

4 Approximation valable au-delà des temps courts

4.1

Une bien meilleure approximation de $P_i(t)$ peut être obtenue si dans l'Eq. (3) on remplace $b_i(t')$ par $b_i(t)$ plutôt que par $b_i(0)$. Calculez $P_i(t)$ avec cette approximation.

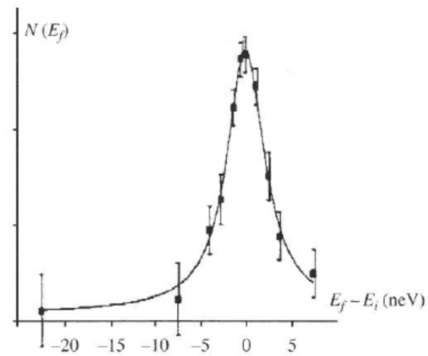

Figure 1: Spectre de photoémission de la désexcitation $^{57}\mathrm{Fe}^* \rightarrow {}^{57}\mathrm{Fe}$ + photon.

4.2

Comparez avec le résultat précédent. Que représente la quantité $1/\Gamma$ pour l'électron de la molécule ? Connaissez-vous d'autres systèmes quantiques avec une dynamique analogue ?

4.3

Quelle est la signification physique de Δ ? Pouvez-vous expliquer qualitativement le fait (trouvé à la question 3.3) que Δ est de signe opposé à la $d\rho(E)/dE|_{E=E_i}$?

4.4

En injectant l'expression de $b_i(t)$ trouvée à la question 4.1 dans l'Eq. (2), calculez $b_\alpha(t)$.

4.5

On se place aux temps très longs $t \gg 1/\Gamma$. Quelle est probabilité que l'électron ait tunnelé dans l'état $|\alpha\rangle$? Déduisez-en que pour une densité d'états $\rho(E)$ constante, la distribution en énergie des états finals (d'énergie E_f) atteints est

$$\frac{dP(E_f)}{dE_f} \propto \frac{1}{(E_f - E_i - \Delta)^2 + \hbar^2\Gamma^2/4}.$$

Décrivez l'allure de cette fonction de E_f en précisant le rôle de chacun des paramètres.

4.6

Résumez qualitativement tous les résultats ci-dessus : un électron est initialement dans un état quantique discret d'énergie E_i, puis il est couplé à un environnement. Que se passe-t-il, sur quelles échelles de temps, etc. ?

4.7

Expliquez pourquoi la mesure de photoémission montrée en Fig. 1 est tout à fait analogue au problème que l'on vient de traiter. Quel est le temps de vie de l'état $^{57}Fe^{*}$ (ordre de grandeur uniquement, pas besoin de calculatrice) ?

Le problème de la désintégration d'un état quantique couplé à un continuum a été décrit par Weisskopf et Wigner en1930.

Il est également étudié en détail dans Cohen-Tannoudji et al., "Mécanique quantique" (Hermann), ainsi que dans Le Bellac, "Quantum Physics" (Cambridge).