Physique Quantique : Chapitre 5. Perturbation dépendante du temps

Mohammed EL Falaki

Master PM Rabat

13 octobre 2024

Dans ce chapitre on s'intéresse à l'étude de la perturbation dans le cas ou l'hamiltonien dépend explicitement du temps. cette dépendance est contenue dans $V(t)$

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + V(t) \tag{1}$$

H_0 est l'hamiltonien du système non perturbé dont le spectre est déterminé par les énergie E_n et les états propres $|n\rangle$, $H|n\rangle = E_n|n\rangle$.
La dynamique du système est déterminée par l'équation de Schrödinger :

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = (H_0 + V)|\psi(t)\rangle \tag{2}$$

Questions :

1. Si le système est préparé dans un état $|\psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n(0|n\rangle)$, quel serait l'état du système à un instant ultérieur $t > 0$.
2. Quelle est la probabilité de transition entre deux états.

Réponses :

1. Si $V(t) = 0$, l'état physique du système à $t > 0$, $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|n\rangle$
2. Si $V(t) \neq 0$, l'état physique du système à $t > 0$, $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|n\rangle$, $c_n(t) =?$

Pour développer la théorie de la perturbation, il est commode de passer à la représentation d'interaction (appelée aussi représentation de Dirac)
Pour ce faire, on définit respectivement les états et les opérateurs dans le schéma d'interaction par :

$$|\psi_I(t)\rangle \equiv e^{iH_0 t}|\psi(t)\rangle \quad O_I(t) \equiv e^{iH_0 t} O e^{-iH_0 t}, \tag{3}$$

où $|\psi(t)\rangle$ est l'état dans le schéma de Schrödinger et O est l'opérateur dans le schéma de Schrödinger. A $t = 0$ les schéma de Schrodinger et de l'interaction se coïncident

$$|\psi_I(0)\rangle = |\psi(0)\rangle$$

.
Dans le schéma d'interaction, la dynamique est déterminée par l'équation :

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle = V_I|\psi_I(t)\rangle \tag{4}$$

Il est important de noter que le terme de perturbation indépendant du temps V dans l'image de Schrödinger se transforme en une perturbation dépendante du temps $V_I(t)$ dans l'image d'interaction. L'évolution dans le temps des opérateurs évoluent dans le schéma d'interaction selon l'équation suivante :

$$i\frac{d}{dt}O_I(t) = [O_I(t), H_0]. \tag{5}$$

Dans la représentation d'interaction l'évolution des états satisfait :

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle &= e^{iH_0t}\left(i\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right)|\psi(t)\rangle_S && (6)\\ &= e^{iH_0t}\left(H - H_0\right)|\psi(t)\rangle && (7)\end{aligned}$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle = e^{iH_0 t}\left(i\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right)|\psi(t)\rangle_S \tag{9}$$

$$= e^{iH_0 t}\left(H - H_0\right)|\psi(t)\rangle \tag{10}$$

$$= \underbrace{e^{iH_0 t}V(t)e^{-iH_0 t}}_{V_I(t)}|\psi_I(t)\rangle. \tag{11}$$

Par conséquent on a :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle = V_I|\psi_I(t)\rangle\,, \quad V_I(t) = e^{iH_0 t}V(t)e^{-iH_0 t} \tag{12}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle = V_I(t)|\psi_I(t)\rangle\,, \quad V_I(t) = e^{iH_0t}V(t)e^{-iH_0t} \tag{13}$$

la décomposition de $|\psi_I(t)\rangle$ sur les états propres $|n\rangle$ de H_0 est donnée par :

$$|\psi_I(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle \tag{14}$$

avec $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$.

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n c_n(t)|n\rangle &= V_I(t)\sum_n c_n(t)|n\rangle \\ i\hbar\sum_n \dot{c}_n(t)|n\rangle &= e^{i\hat{H}_0t}V(t)e^{-i\hat{H}_0t}\sum_n c_n(t)|n\rangle \\ &= \sum_n c_n(t)e^{i\hat{H}_0t/\hbar}V(t)e^{-i\hat{H}_0t/\hbar}|n\rangle \end{aligned} \tag{15}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle = V_I(t)|\psi_I(t)\rangle\,, \quad V_I(t) = e^{iH_0 t}V(t)e^{-iH_0 t} \tag{16}$$

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n c_n(t)|n\rangle &= V_I(t)\sum_n c_n(t)|n\rangle \\
i\hbar\sum_n \dot{c}_n(t)|n\rangle &= e^{i\hat{H}_0 t}V(t)e^{-i\hat{H}_0 t}\sum_n c_n(t)|n\rangle \\
&= \sum_n c_n(t)e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}V(t)e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}|n\rangle \\
&= \sum_n c_n(t)e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}V(t)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|n\rangle
\end{aligned} \tag{17}$$

On projette sur $\langle\varphi_m|$ pour obtenir :

$$i\hbar\dot{c}_m(t) = \sum \langle m|V(t)|n\rangle e^{i(E_m-E_n)t/\hbar}c_n(t) \tag{18}$$

$$i\hbar\dot{c}_m(t) = \sum_n \langle m|V(t)|n\rangle e^{i(E_m-E_n)t/\hbar}c_n(t) \quad (19)$$

$$= \sum_n V_{mn}(t)e^{i\omega_{mn}t}c_n(t) \quad (20)$$

avec $V_{mn}(t) = \langle m|V(t)|n\rangle$ et $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$. En utilisant l'écriture matricielle :

$$\begin{pmatrix} \dot{c}_1(t) \\ \dot{c}_2(t) \\ \vdots \\ \dot{c}_k(t) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11}(t) & e^{i\omega_{12}t}V_{12(t)} & \dots & e^{i\omega_{1k}t}V_{1k}(t) & \dots \\ e^{-i\omega_{mn}t}V_{21}(t) & V_{22(t)} & \dots & e^{i\omega_{2k}t}V_{2k}(t) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ e^{-i\omega_{1k}t}V_{k1}(t) & e^{-i\omega_{2k}t}V_{k2(t)} & \dots & V_{kk}(t) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_k(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (21)$$

$$\begin{pmatrix} \dot{c}_1(t) \\ \dot{c}_2(t) \\ \vdots \\ \dot{c}_k(t) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11}(t) & e^{i\omega_{12}t}V_{12(t)} & \dots & e^{i\omega_{1k}t}V_{1k}(t) & \dots \\ e^{-i\omega_{mn}t}V_{21}(t) & V_{22(t)} & \dots & e^{i\omega_{2k}t}V_{2k}(t) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ e^{-i\omega_{1k}t}V_{k1}(t) & e^{-i\omega_{2k}t}V_{k2(t)} & \dots & V_{kk}(t) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_k(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{22}$$

- Résoudre ce système pour déterminer l'expression des coefficients $c_k(t)$.
- calculer la probabilité de transition, à un instant t entre deux états de H_0, par exemple d'un état initial $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$.

Considérons un atome à deux niveaux $|1\rangle$ et $|2\rangle$ associés respectivement aux énergie E_1 et E_2 :

$$H_0|1\rangle = E_1|1\rangle$$
$$H_0|2\rangle = E_2|2\rangle$$

On suppose que Le système est soumis à une perturbation $V(t)$:

$$V(t) = \begin{pmatrix} 0 & \hbar\gamma e^{i\omega t} \\ \gamma e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \tag{23}$$

γ et ω sont deux constantes. le système (22) donne deux équations :

$$\begin{cases} i\dot{c}_1(t) = \hbar\gamma e^{i(\omega-\omega_{21})t} c_2(t) \\ i\dot{c}_2(t) = \hbar\gamma e^{-i(\omega-\omega_{21})t} c_1(t) \end{cases} \tag{24}$$

avec $\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$

$$\begin{cases} i\dot{c}_1(t) = \gamma e^{i(\omega-\omega_{21})t} c_2(t) \\ i\dot{c}_2(t) = \gamma e^{-i(\omega-\omega_{21})t} c_1(t) \end{cases} \tag{25}$$

En combinant les deux équations pour obtenir :

$$\ddot{c}_2(t) - i(\omega - \omega_{21})\dot{c}_2(t) + \gamma^2 c_2(t) = 0 \tag{26}$$

C'est une équation différentielle de second ordre dont les solutions sont déterminées en utilisant les conditions initiales : $c_1(0) = 1$ et $c_2(0) = 0$:

$$\begin{cases} c_2(t) = -\frac{i\gamma}{\Omega} e^{-i\frac{(\omega-\omega_{21})t}{2}} \sin(\Omega t) \\ c_1(t) = -\frac{i(\omega-\omega_{21})}{2\Omega} e^{-i\frac{(\omega-\omega_{21})t}{2}} \sin(\Omega t) + \cos(\Omega t) e^{-i\frac{(\omega-\omega_{21})t}{2}} \end{cases} \tag{27}$$

avec $\Omega = \sqrt{\frac{\gamma^2+(\omega-\omega_{21})^2}{4}}$ est la **fréquence de Rabi.**

La probabilité de trouver l'atome, à un instant $t > 0$, dans l'état excité $|2\rangle$ est donnée par :

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2}{\Omega^2} \sin^2(\Omega t) \tag{28}$$

C'est une solution périodique qui décrit la transition de l'atone de l'état $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$, sa valeur maximale est :

$$|c_2(t)|^2_{max} = \frac{\gamma^2}{\Omega^2} \tag{29}$$

- La transition de l'état $|1\rangle$ à l'état $|2\rangle$ correspond à un processus d'absorption : le système, initialement dans l'état $|1\rangle$, absorbe une énergie $\hbar\omega_{21}$ provenant de la perturbation et passe à l'état $|2\rangle$.
- Inversement, la transition de l'état $|2\rangle$ à l'état $|1\rangle$ correspond à une émission induite : le système, dans l'état $|2\rangle$, émet une énergie $\hbar\omega_{12}$.

Perturbation dépendante du temps

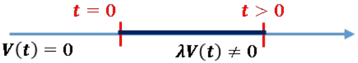
Cas général : développement pérturbatif

- Dans le cas général, l'utilisation de la méthode analytique est pratiquement impossible pour résoudre l'équation de Schrödinger.
- Utilisation le développement perturbatif comme une méthode alternative semble adéquat pour accomplir la tache.

Considérons l'hamiltonien

$$H(\lambda, t) = H_0 + \lambda V(t)$$

avec $V(t) \ll H_0$



l'état qui décrit le système à un instant $t > 0$ est

$$|\psi_I(\lambda, t)\rangle = \sum_n c_n(\lambda, t)|n\rangle \tag{30}$$

où les coefficients $c_n(t)$ vérifient l'équation séculaire :

$$i\hbar\dot{c}_n(\lambda, t) = \sum_k V_{nk}(t)e^{i\omega_{nk}t}c_k(\lambda, t) \tag{31}$$

$$i\hbar\dot{c}_n(\lambda,t) = \sum_k V_{nk}(t)e^{i\omega_{nk}t}c_k(\lambda,t) \tag{32}$$

Le développement des coefficients en puissance de λ :

$$c_k(\lambda,t) = c_k^{(0)}(t) + \lambda c_k^{(1)}(t) + \lambda^2 c_k^{(2)}(t) + \dots \tag{33}$$

En insérant cette expression dans l''équation (30), on obtient :

$$i\hbar\left(\dot{c}_k^{(0)}(t) + \lambda\dot{c}^{(1)}(t) + \lambda^2\dot{c}_k^{(2)}(t) + \dots\right) = \sum_n V_{nk}(t)e^{i\omega_{nk}t}\left(c_k^{(0)}(t) + \lambda c_k^{(1)}(t) + \lambda^2 c_k^{(2)}(t) + \dots\right)$$

La comparaison des termes de même ordre en puissance de λ permet d'écrire le système suivant :

$$\begin{cases} i\hbar\dot{c}_n^{(0)}(t) = 0 \\ i\hbar\dot{c}_n^{(1)}(t) = \sum_k V_{nk}(t)e^{i\omega_{nk}t}c_k^{(0)}(t) \\ i\hbar\dot{c}_n^{(2)}(t) = \sum_k V_{nk}(t)e^{i\omega_{nk}t}c_k^{(1)}(t) \\ \vdots \end{cases} \tag{34}$$

$$\begin{cases} i\hbar\dot{c}_n^{(0)}(t) = 0 \\ i\hbar\dot{c}_n^{(1)}(t) = \sum_k V_{nk}(t)e^{i\omega_{nk}t}c_k^{(0)}(t) \\ i\hbar\dot{c}_n^{(2)}(t) = \sum_k V_{nk}(t)e^{i\omega_{nk}t}c_k^{(1)}(t) \\ \vdots \end{cases} \tag{35}$$

- d'après l'équation (35-a) on déduit que $c_n^{(0)}(t) = cte = c_n^{(0)}(0)$, en particulier si le système est préparé dans l'état $|\psi(0)_I\rangle = |\psi(0)\rangle = |i\rangle$ alors $c_n^{(0)}(0) = \delta_{ni}$
- la deuxième équation du système :

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{c}_n^{(1)}(t) &= \sum_k V_{nk}(t)e^{i\omega_{nk}t}c_k^{(0)}(t) \\ &= \sum_k V_{nk}(t)e^{i\omega_{nk}t}\delta_{ki} \\ &= \sum V_{ni}(t)e^{i\omega_{ni}t} \end{aligned}$$

$$\begin{cases} i\hbar\dot{c}_n^{(0)}(t) = 0 \\ i\hbar\dot{c}_n^{(1)}(t) = \sum_k V_{nk}(t)e^{i\omega_{nk}t}c_k^{(0)}(t) \\ i\hbar\dot{c}_n^{(2)}(t) = \sum_k V_{nk}(t)e^{i\omega_{nk}t}c_k^{(1)}(t) \\ \vdots \end{cases} \tag{36}$$

- équation de perturbation au premier ordre :

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, e^{i\omega_{ni}t'/\hbar}V_{ni}(t') \tag{37}$$

- équation de perturbation au deuxième ordre :

$$c_n^{(2)}(t) = -\frac{1}{\hbar^2}\sum_m \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, e^{i\omega_{nm}t'/\hbar + i\omega_{mi}t''/\hbar}V_{nm}(t')V_{mi}(t'') \tag{38}$$

- pour les coefficients $c_n(t), \lambda = 1$, on a

$$c_n(t) = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \langle n|V_I(t')|i\rangle - \frac{1}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \sum_m \langle n|V_I(t')|m\rangle\langle m|V_I(t'')|i\rangle + \cdots$$

- Probabilité de transition d'un état initial $|i\rangle$ à un état $|n\rangle$ notée par $P_{i\to n}(t)$ est donnée par :

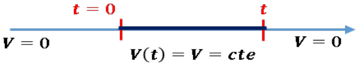
$$\begin{aligned} P_{i\to n}(t) &= |\langle n|\psi_I(t)\rangle|^2 \\ &= \left|\delta_{ni} + c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \ldots\right|^2 \end{aligned} \tag{40}$$

- Taux de transition est la probabilité par unité du temps :

$$R_{i\to f} = P_{i\to}/t \tag{41}$$

Une perturbation constante désigne un changement continu qui agit sur un système quantique , cela peut être une interaction avec un environnement et elle est représenté par une observable qui ne dépend pas explicitement du temps. La dépendance du temps de la perturbation vient du fait que la perturbation se déclenche à un instant $t \geq 0$.

$$V(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ V & t \geq 0 \end{cases} \qquad (42)$$



On suppose que le système est préparé dans un état $|i\rangle$ et transite vers un état final $|f\rangle \neq |i\rangle$.

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, e^{i\omega_{ni}t'/\hbar} V_{ni}(t'), \quad \int_0^t dt' e^{i\omega t'} = 2\frac{e^{i\omega t/2}\sin(\omega t/2)}{\omega}$$

$$c_n^{(1)}(t) = 2i\hbar V_{ni} e^{i\omega_{ni}t/2}\left(\frac{\sin(\omega_{ni}t/2)}{\omega_{ni}}\right)$$

$$c_n^{(1)}(t) = 2\frac{i}{\hbar}V_{ni}e^{i\omega_{ni}t/2}\left(\frac{\sin(\omega_{ni}t/2)}{\omega_{ni}}\right)$$

a probabilité de transition est donnée par :

$$P_{i\to f} = |c_n(t)|^2 \tag{43}$$

$$= \left|\delta_{if} + \frac{2i}{\hbar}V_{fi}e^{i\omega_{fi}t/2}\left(\frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}}\right)\right|^2 \tag{44}$$

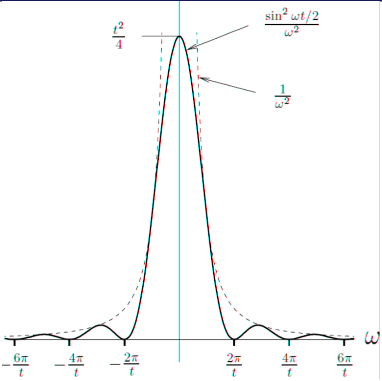
$\delta_{if} = 0$ car $i \neq f$

$$P_{i\to f} = \frac{4}{\hbar^2}|V_{fi}|^2\frac{\sin^2(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}^2} \tag{45}$$

$$= \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2(\omega_{fi}t/2)}{\left(\frac{\omega_{fi}}{2}\right)^2} \tag{46}$$

$$P_{i\to f} = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2}\sin^2(\omega_{fi}t/2)/\left(\frac{\omega_{fi}}{2}\right)^2 \quad (47)$$

- On constate que la probabilité de trouver le système dans l'état $|f\rangle$ dépend de l'amplitude V_{fi} et de la différence d'énergie $E_f - E_i$.
- $P_{i\to f} = f(\omega_{fi})$ est une fonction en cloche qui possède un maximum au point $\omega_{fi} = 0$.
- Le comportement de la probabilité est déterminé par la fonction $\sin^2(\omega_{fi}t/2)/\left(\frac{\omega_{fi}}{2}\right)^2$.
- Cette fonction $sin^2\alpha/\alpha^2$ est caractérisée par la valeur maximale de $\frac{t}{2}$ et une largeur de l'ordre de $1/t$, donnant ainsi une aire proportionnelle à t.
- La fonction s'évanouit en présentant d'autres pics aux points à $\omega_{fi}t = (2k+1)\,\pi$.


$\frac{t^2}{4}$
$\frac{\sin^2 \omega t/2}{\omega^2}$
$\frac{1}{\omega^2}$
ω
$-\frac{6\pi}{t}$
$-\frac{4\pi}{t}$
$-\frac{2\pi}{t}$
$\frac{2\pi}{t}$
$\frac{4\pi}{t}$
$\frac{6\pi}{t}$

- $\lim_{t\to\infty} P_{i\to f}(t) = \pi t \frac{\left|V_{fi}\right|^2}{\hbar^2}\delta\left(\frac{\omega_{fi}}{2}\right)$

  avec $\delta(x) = \lim_{a\to\infty} \frac{\sin^2(x)}{\pi a x^2}$ et $\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$
- $\lim_{t\to\infty} P_{i\to f}(t) = 2\pi t \frac{\left|V_{fi}\right|^2}{\hbar}\delta\left(E_f - E_i\right).$
- le taux de transition $R_{i\to f} = \frac{1}{t}\lim_{t\to\infty} P_{i\to f}(t)$.
- $R_{i\to f} = 2\pi \frac{\left|V_{fi}\right|^2}{\hbar}\delta\left(E_f - E_i\right).$: **Règle d'or de Fermi**
- la présence de $\delta\left(E_f - E_i\right)$ garantit la conservation d'énergie du système.
- une perturbation constante ne provoque ni gain ni perte d'énergie pour le système.
- la transition est permise seulement entre des états de même énergie.

Problème

Considérons un oscillateur harmonique quantique,

$$H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)$$

préparé dans l'état fondamental $|0\rangle$.
A l'instant $t = -\infty$, le système est soumis à une perturbation par un champ électrique $\vec{\mathcal{E}}$ faible et transitoire,

$$V(t) = -e\mathcal{E}xe^{-t^2/\tau^2}$$

- quelle est la probabilité de le trouver le système dans le premier état excité, $|1\rangle$, à l'instant$t = +\infty$?