Chapitre VI
Probabilité de transition

Plan du chapitre

Objectifs

La théorie des perturbations dépendant du temps permet de calculer la probabilité que le système passe d'un état à un autre sous l'effet des ondes électromagnétique.

VI.1. Introduction

Pour comprendre l'évolution temporelle d'un système quantique entre un état initial et un état final donnés sous l'effet d'une interaction avec un champ électromagnétique, une méthode de perturbation dépendante du temps est utile pour calculer la probabilité de transition.
Nous aboutissons à la fin de ce chapitre à une expression particulièrement importante de la probabilité de transition, connue sous le nom de « règle d'or de Fermi », qui permet de déterminer un taux de transition par unité de temps.

VI.2. Système à deux niveaux

Le hamiltonien dépendant du temps d'un système quantique est

$$H\varphi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\varphi$$

Il est décrit à tout instant *t* par la fonction d'onde

$$\varphi(r,t) = \varphi(r)e^{iEt/\hbar}$$

Considérons un système physique non perturbé d'hamiltonien H^0; les valeurs propres et vecteurs propres de H^0 seront désignés par E_n et $|\psi_n\rangle$

$$H^0|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

Pour un système quantique non perturbé à deux états $|\psi_a\rangle$ et $|\psi_b\rangle$, l'équation de Schrödinger s'écrit pour chaque état

$$H^0|\psi_a\rangle = E_a|\psi_a\rangle$$
$$H^0|\psi_b\rangle = E_b|\psi_b\rangle$$

À l'instant $t = 0$, un ket $|\varphi(0)\rangle$ de l'espace des états peut s'écrire comme la superposition de ces deux états

$$|\varphi(0)\rangle = C_a|\psi_a\rangle + C_b|\psi_b\rangle$$

Ou C_a et C_b sont les composantes de cet état dans la base $\{|\psi_a\rangle, |\psi_b\rangle\}$

$$C_a = \langle\psi_a|\varphi(t)\rangle$$
$$C_b = \langle\psi_b|\varphi(t)\rangle$$

A un instant t le ket $|\varphi(t)\rangle$ peut s'écrire

$$|\varphi(t)\rangle = C_a(t)|\psi_a\rangle e^{-iE_at/\hbar} + C_b(t)|\psi_b\rangle e^{-iE_bt/\hbar}$$

Avec

$$|C_a|^2 + |C_b|^2 = 1$$

VI.3. Système perturbé

En appliquant une perturbation $H^{'}$sur le système, l'équation de Schrödinger total formé par le système et la perturbation prenne la forme

$$\left(H^0 + H^{'}(t)\right)|\varphi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(t)\rangle$$

Ainsi

$$(H^0 + H^{'})\left(C_a(t)|\psi_a\rangle e^{-iE_at/\hbar} + C_b(t)|\psi_b\rangle e^{-iE_bt/\hbar}\right) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(C_a(t)|\psi_a\rangle e^{-iE_at/\hbar} + C_b(t)|\psi_b\rangle e^{-iE_bt/\hbar}\right)$$

$$\begin{aligned} &C_aH^0|\psi_a\rangle e^{-iE_at/\hbar} + C_bH^0|\psi_b\rangle e^{-iE_bt/\hbar} + C_aH^{'}|\psi_a\rangle e^{-iE_at/\hbar} + C_bH^{'}|\psi_b\rangle e^{-iE_bt/\hbar} \\ &= i\hbar\left[\dot{C_a}|\psi_a\rangle e^{-iE_at/\hbar} + \dot{C_b}|\psi_b\rangle e^{-iE_bt/\hbar} + C_a|\psi_a\rangle\left(-\frac{iE_a}{\hbar}\right)e^{-iE_at/\hbar}\right. \\ &\left.+ C_b|\psi_b\rangle\left(-\frac{iE_b}{\hbar}\right)e^{-iE_bt/\hbar}\right] \end{aligned}$$

$$C_aH^{'}|\psi_a\rangle e^{-iE_at/\hbar} + C_bH^{'}|\psi_b\rangle e^{-iE_bt/\hbar} = i\hbar\left[\dot{C_a}|\psi_a\rangle e^{-iE_at/\hbar} + \dot{C_b}|\psi_b\rangle e^{-iE_bt/\hbar}\right]$$

Multiplions alors les deux membres de cette égalité par le bra $\langle\psi_a|$

$$C_a\left\langle\psi_a\middle|H^{'}\middle|\psi_a\right\rangle e^{-iE_at/\hbar} + C_b\left\langle\psi_a\middle|H^{'}\middle|\psi_b\right\rangle e^{-iE_bt/\hbar} = i\hbar\left[\dot{C_a}e^{-iE_at/\hbar}\right]$$

Et prenons

$$H_{ij}^{'} = \left\langle\psi_i\middle|H^{'}\middle|\psi_j\right\rangle$$

$H^{'}$ est hermitien donc $H_{ji}^{'} = \left(H_{ij}^{'}\right)^{*}$

$$\dot{C_a} = -\frac{i}{\hbar}\left[C_a H_{aa}^{'} + C_b H_{ab}^{'} e^{-i(E_b - E_a)t/\hbar}\right]$$

Multiplions maintenant les deux membres de cette égalité par le bra $\langle\psi_b|$

$$C_a\langle\psi_b|H^{'}|\psi_a\rangle e^{-iE_a t/\hbar} + C_b\langle\psi_b|H^{'}|\psi_b\rangle e^{-iE_b t/\hbar} = i\hbar\left[\dot{C_b} e^{-iE_b t/\hbar}\right]$$

$$\dot{C_b} = -\frac{i}{\hbar}\left[C_b H_{bb}^{'} + C_a H_{ba}^{'} e^{i(E_b - E_a)t/\hbar}\right]$$

Nous cherchons les valeurs de C_a et C_b, les éléments de la matrice diagonaux de $H^{'}$ sont nuls, alors

$$H_{aa}^{'} = H_{bb}^{'} = 0$$

Les équations seront simplifiées

$$\dot{C_a} = -\frac{i}{\hbar}\left[H_{ab}^{'} e^{-i\omega_0 t}\right] C_b$$

$$\dot{C_b} = -\frac{i}{\hbar}\left[H_{ba}^{'} e^{i\omega_0 t}\right] C_a$$

Avec

$$\omega_0 = (E_b - E_a)/\hbar$$

VI.3.1. Théorie de perturbation dépendante du temps

A l'instant $t = 0$, nous supposons que

$$C_a(0) = 1$$
$$C_b(0) = 0$$

Ordre 0

$$C_a^{(0)}(t) = 1$$
$$C_b^{(0)}(t) = 0$$

Ordre 1

$$\frac{dC_a^{(1)}}{dt} = 0 \rightarrow C_a^{(1)} = 1$$

$$\frac{dC_b^{(1)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\left[H_{ba}^{'} e^{i\omega_0 t}\right] \rightarrow C_b^{(1)} = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t H_{ba}^{'}(t^{'}) e^{i\omega_0 t^{'}} dt^{'}$$

VI.3.2. Probabilité de transition

La probabilité de transition est égale à $|C_b(t)|^2$

$$P_{a\rightarrow b}(t) = |C_b(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left[\int_0^t H_{ba}^{'}(t^{'}) e^{i\omega_0 t^{'} dt^{'}}\right]^2$$

VI.4. Interaction d'un système quantique avec une onde sinusoïdale

Supposant que la perturbation $H^{'}$ a une dépendance sinusoïdale dans le temps

$$H^{'}(r,t) = V(r)cos\omega t$$

Les éléments de la matrice de la perturbation sont

$$H_{ab}^{'} = V_{ab}cos\omega t$$

Ou

$$V_{ab} \equiv \langle\varphi_a|V|\varphi_b\rangle$$

Et ω la pulsation de l'onde électromagnétique

$C_b(t)$ s'écrira

$$\begin{aligned}
C_b(t) &= -\frac{i}{\hbar}V_{ab}\int_0^t cos(\omega t^{'})e^{i\omega_0 t^{'}}dt^{'} \\
&= -\frac{i}{\hbar}V_{ab}\int_0^t \left[e^{i(\omega_0+\omega)t^{'}} + e^{i(\omega_0-\omega)t^{'}}\right]dt^{'} \\
&= -\frac{i}{2\hbar}V_{ab}\left[\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t}-1}{\omega_0+\omega} + \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t}-1}{\omega_0-\omega}\right] \\
&= -\frac{i}{2\hbar}V_{ab}\frac{e^{i(\omega_0-\omega)t/2}}{\omega_0-\omega}\left[e^{i(\omega_0-\omega)t/2} - e^{-i(\omega_0-\omega)t/2}\right] \\
&= \frac{1}{\hbar}V_{ab}\frac{sin\big((\omega_0-\omega)\,t/2\big)}{\omega_0-\omega}\left[e^{i(\omega_0-\omega)t/2}\right]
\end{aligned}$$

La probabilité de transition est

$$P_{a\to b}(t) = |C_b(t)|^2 = \frac{|V_{ab}|^2}{\hbar^2}\frac{sin^2\big((\omega_0-\omega)\,t/2\big)}{(\omega_0-\omega)^2}$$

Cette probabilité est représentée sur la figure (6-1)

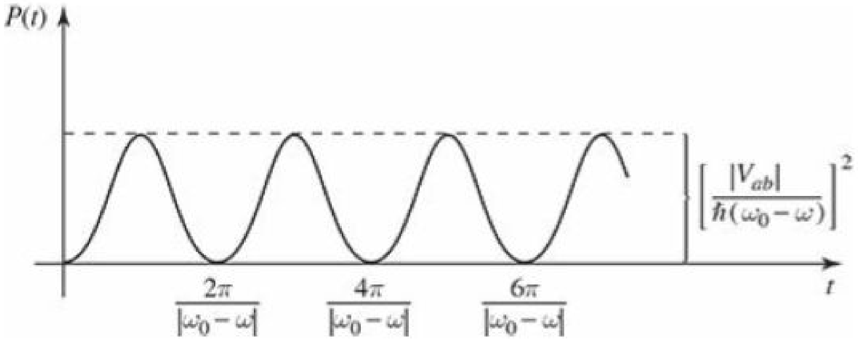

Figure 6.1 : Probabilité de transition en fonction du temps, pour une perturbation sinusoidale

Graphe 2

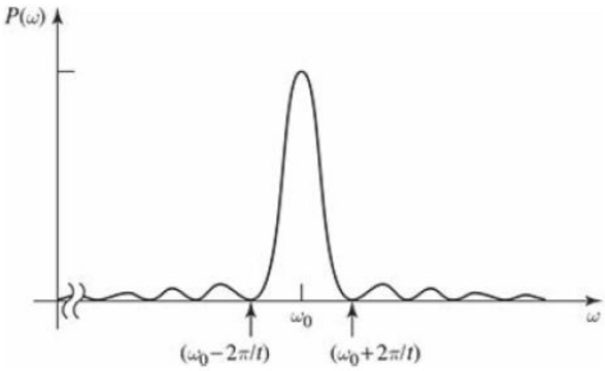

Figure 6.2 : Probabilité de transition en fonction de la pulsation

VI.4.1. Modèle de Rabi

Nous avons trouvé que

$$\dot{C}_a = -\frac{i}{\hbar}\left[H'_{ab}e^{-i\omega_0 t}\right]C_b$$
$$\dot{C}_b = -\frac{i}{\hbar}\left[H'_{ba}e^{i\omega_0 t}\right]C_a$$

Les éléments de la matrice de la perturbation donnée précédemment sont

$$H'_{ba} = V_{ab}cos\omega t$$

Nous savons que

$$cos\omega t = \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}$$

Nous avons trouvé

$$\dot{C}_b = -\frac{i}{\hbar}V_{ab}e^{-i(\omega_0-\omega)t}C_a$$
$$\dot{C}_a = -\frac{i}{\hbar}\left[H'_{ab}e^{-i\omega_0 t}\right]C_b$$

Après la derivation de $\dot{C}_b$, nous obtenons

$$\ddot{C}_b = -\frac{i}{2\hbar}V_{ab}[-i(\omega-\omega_0)]e^{-i(\omega_0-\omega)t}C_a - \frac{i}{2\hbar}V_{ab}e^{-i(\omega_0-\omega)t}\dot{C}_a$$

En rempalcant C_a et $\dot{C}_a$ par leurs valeurs, nous trouvons

$$\ddot{C}_b + i(\omega-\omega_0)\dot{C}_b + \frac{i}{4\hbar^2}V_{ba}^2C_b = 0$$

C'est une équation differentielle, qui a une solution de la forme

$$C_b = Ae^{i\lambda_+ t} + Be^{i\lambda_- t}$$

Ou

$$\lambda_\pm = \frac{1}{2}\left[\Delta \pm \left(\Delta^2 + \frac{V_{ab}}{\hbar^2}\right)^2\right]$$

Ou nous avons posé

$$\Delta = \omega_0 - \omega$$

À partir des conditions initiales

$$C_a(0) = 1$$
$$C_b(0) = 0$$

Nous trouvons

$$\Rightarrow A = -B$$

$$A = -B = -\frac{1}{2\hbar} V_{ab} \left(\Delta^2 + \frac{V_{ba}^2}{\hbar^2} \right)^{-1/2}$$

$$C_b = A\left(e^{i\lambda_+ t} - e^{i\lambda_- t}\right)$$

Le terme $\left(\Delta^2 + \frac{V_{ba}^2}{\hbar^2}\right)^{-1/2}$ est appelé la fréquence de Rabi Ω_R :

$$\Omega_R = \left(\Delta^2 + \frac{V_{ba}^2}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

On peut écrire maintenant C_b et C_a:

$$C_b = \frac{iV_{ba}}{\Omega_R \hbar} e^{i\Delta t/2} sin(\Omega_R\, t/2)$$

$$C_a = e^{i\Delta t/2} \left[cos(\Omega_R\, t/2) - \frac{i\Delta}{\omega_R} sin(\Omega_R\, t/2) \right]$$

VI.4.2. La résonance éxacte

La resonance exacte se passé quand

$$\Delta = 0$$

Transfert de population à $t = \frac{\pi\hbar}{V_{ba}}$

$$\Omega_R = \frac{V_{ba}}{\hbar}$$
$$C_b = isin(V_{ba}\, t/2\hbar)$$
$$C_a = cos(V_{ba}\, t/2\hbar)$$
$$t = \frac{n\pi\hbar}{V_{ba}}$$