Exercice 1 *Perturbation limitée dans le temps*

Dans cet exercice, on s'intéresse à l'évolution d'un système soumis à une perturbation $\hat{V}(t)$ dont l'effet est limité dans le temps. Plus précisément, on suppose que $\hat{V}(t) = 0$ si $t \leq 0$ ou si $t \geq T$, et que $\hat{V}(t)$ est une fonction continue en $t = 0$ et en $t = T$. On rappelle que si à l'instant t_0 le système est dans un état propre non perturbé $|i\rangle$, la probabilité pour qu'à l'instant $t > t_0$ il soit dans un autre état propre non perturbé $|n\rangle$ est donnée par

$$P_{i\to n} = \left| -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt_1 e^{i(E_n - E_i)(t_1 - t_0)/\hbar} \langle n|\hat{V}(t_1)|i\rangle \right|^2 \tag{1}$$

Par la suite, on suppose que $t_0 < 0$ et $t > T$.

1.

$$\begin{aligned} P_{i\to n} &= \left| -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0<0}^{t>T} dt_1 e^{i(E_n - E_i)(t_1 - t_0)/\hbar} \langle n|\hat{V}(t_1)|i\rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0<0}^{t>T} dt_1 e^{i(E_n - E_i)t_1/\hbar} \langle n|\hat{V}(t_1)|i\rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{0}^{T} dt_1 e^{i(E_n - E_i)t_1/\hbar} \langle n|\hat{V}(t_1)|i\rangle \right|^2, \end{aligned}$$

   puisque $\hat{V}(t) = 0$ si $t \leq 0$ ou si $t \geq T$. On voit que l'expression finale ne fait intervenir explicitement ni t_0 ni t, donc elle n'en dépend pas.

2. Faisons une intégration par partie sur l'intégrale :

$$\begin{aligned} \int_0^T dt_1 e^{i(E_n - E_i)t_1/\hbar} \langle n|\hat{V}(t_1)|i\rangle &= \left[\frac{\hbar e^{i(E_n - E_i)t_1/\hbar}}{i(E_n - E_i)} \langle n|\hat{V}(t_1)|i\rangle \right]_0^T \\ &- \int_0^T dt_1 \frac{\hbar e^{i(E_n - E_i)t_1/\hbar}}{i(E_n - E_i)} \frac{d}{dt_1}(\langle n|\hat{V}(t_1)|i\rangle) \end{aligned}$$

   Le premier terme s'annule parce que $\hat{V}(0) = \hat{V}(T) = 0$ par continuité, et le deuxième terme conduit à

$$P_{i\to n} = \left| \frac{1}{E_n - E_i} \int_0^T dt_1 e^{i(E_n - E_i)t_1/\hbar} \frac{d}{dt_1}(\langle n|\hat{V}(t_1)|i\rangle) \right|^2$$

3. On considère désormais une perturbation définie par

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad t \leq 0 \\ \frac{2t}{T}\hat{V} & \text{si} \quad 0 \leq t \leq \frac{T}{2} \\ (2 - \frac{2t}{T})\hat{V} & \text{si} \quad \frac{T}{2} \leq t \leq T \\ 0 & \text{si} \quad t \geq T \end{cases}, \tag{2}$$

   où $\hat{V}$ est un opérateur indépendant du temps.

(a) Pour calculer $P_{i\to n}$, on va utiliser l'expression qui découlait de l'exercice 2. À l'aide de la variable $\omega = \frac{E_n - E_i}{\hbar}$, l'intégrale s'écrit

$$\begin{aligned}\int_0^T dt_1 e^{i\omega t_1} \frac{d}{dt_1}(\langle n|\hat{V}(t_1)|i\rangle) &= \frac{2}{T}\langle n|\hat{V}|i\rangle \left(\int_0^{T/2} dt_1 e^{i\omega t_1} - \int_{T/2}^{T} dt_1 e^{i\omega t_1}\right) \\ &= \frac{2}{T}\langle n|\hat{V}|i\rangle \left(\frac{e^{i\omega T/2}-1}{i\omega} - \frac{e^{i\omega T} - e^{i\omega T/2}}{i\omega}\right),\end{aligned}$$

et donc

$$P_{i\to n} = \frac{\hbar^2}{(E_n - E_i)^4}\frac{4}{T^2}\left|\langle n|\hat{V}|i\rangle\right|^2 \left|2e^{i(E_n-E_i)T/(2\hbar)} - 1 - e^{i(E_n-E_i)T/\hbar}\right|^2$$

Le dernier terme peut se mettre sous la forme

$$\begin{aligned}\left|2e^{i\omega T/2} - 1 - e^{i\omega T}\right|^2 &= \left|e^{i\omega T/2}\right|^2 \left|2 - e^{-i\omega T/2} - e^{i\omega T/2}\right|^2 \\ &= 4\left(1 - \cos\frac{\omega T}{2}\right)^2 = 4\left(2\sin^2\frac{\omega T}{4}\right)^2 \\ &= 16\sin^4\frac{\omega T}{4},\end{aligned}$$

on trouve alors

$$P_{i\to n} = \frac{\hbar^2}{(E_n - E_i)^4}\frac{64}{T^2}\left|\langle n|\hat{V}|i\rangle\right|^2 \sin^4\frac{E_n - E_i}{\hbar}\frac{T}{4}$$

(b) Les valeurs de T pour lesquelles $P_{i\to n} = 0$ sont données par

$$T = 4k\pi\frac{\hbar}{E_n - E_i},$$

où k est un nombre entier.

(c) La condition $\left|\langle n|\hat{V}|i\rangle\right| \leq |E_n - E_i|$ permet d'obtenir une borne supérieure pour $P_{i\to n}$:

$$P_{i\to n} \leq \frac{\hbar^2}{(E_n - E_i)^2}\frac{64}{T^2},$$

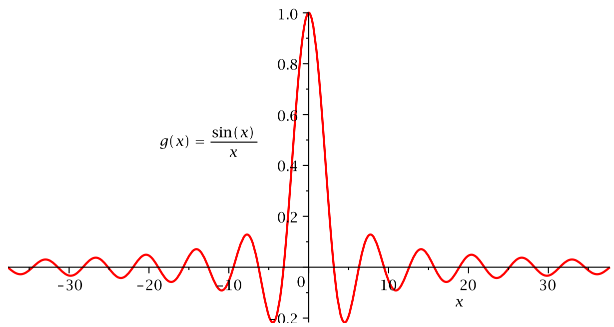
on voit alors que $P_{i\to n} \ll 1$ si $T^2 \gg \frac{\hbar^2}{(E_n-E_i)^2}$. Le résultat trouvé est à la base de la notion d'adiabaticité : si la perturbation varie assez lentement, le système reste dans l'état initial.

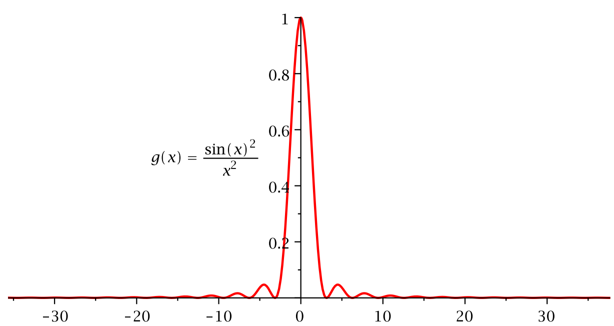
Exercice 2 *Perturbation harmonique*

Dans cet exercice, nous retrouvons le résultat donné dans les notes de cours concernant le calcul en perturbations d'un système soumis à une perturbation harmonique. Ce calcul simple est d'une grande portée puisqu'il permet la compréhension (partielle) d'un phénomène aussi fondamental que l'interaction entre lumière et matière (émission et absorption stimulée).

1. On veut estimer la probabilité $P_{i\to f}(t)$ de mesurer à l'instant t le système dans l'état $|n\rangle$ sachant qu'il est initialement dans l'état $|i\rangle$. Pour simplifier les notations, on définit la constante $\omega_{ni} = \frac{E_n - E_i}{\hbar}$

$$\begin{aligned}
P_{i\to n}(t) &= \left|\frac{-i}{\hbar}\int_0^t dt_1 e^{i\omega_{ni}t_1}\left(V_{ni}e^{i\omega t_1} + V_{in}^* e^{i\omega t_1}\right)\right|^2 \\
&= \frac{1}{\hbar^2}\left|\left[V_{ni}\frac{e^{it_1(\omega_{ni}+\omega)}}{\omega_{ni}+\omega} + V_{in}^*\frac{e^{it_1(\omega_{ni}-\omega)}}{\omega_{ni}-\omega}\right]_0^t\right|^2 \\
&= \frac{1}{\hbar^2}\left|V_{ni}\frac{e^{it(\omega_{ni}+\omega)}-1}{\omega_{ni}+\omega} + V_{in}^*\frac{e^{it(\omega_{ni}-\omega)}-1}{\omega_{ni}-\omega}\right|^2 \\
&= \frac{1}{\hbar^2}\left|e^{\frac{it(\omega_{ni}+\omega)}{2}}V_{ni}\frac{\sin\frac{(\omega_{ni}+\omega)t}{2}}{\frac{\omega_{ni}+\omega}{2}} + e^{\frac{it(\omega_{ni}-\omega)}{2}}V_{in}^*\frac{\sin\frac{(\omega_{ni}-\omega)t}{2}}{\frac{\omega_{ni}-\omega}{2}}\right|^2
\end{aligned}$$





2. Pour mettre $P_{i\to n}(t)$ sous la forme

$$\frac{1}{\hbar^2}|V_{in}|^2 t^2 f\left(\frac{(\omega_{ni}-\omega)t}{2}\right),$$

on fait apparaître la fonction $g(x) = \frac{\sin x}{x}$ (voir figure pour sa représentation) en divisant et multipliant par t les termes à l'intérieur du module :

$$P_{i\to n}(t) = \frac{t^2}{\hbar^2}\left|e^{\frac{it(\omega_{ni}+\omega)}{2}}V_{ni}\,g\left(\frac{(\omega_{ni}+\omega)t}{2}\right) + e^{\frac{it(\omega_{ni}-\omega)}{2}}V_{in}^*\,g\left(\frac{(\omega_{ni}-\omega)t}{2}\right)\right|^2$$

Les deux termes dans le module possèdent deux pics en $\pm\omega_{ni}$, de largeur environ π/t en ω. Comme $\omega_{ni}t \gg 1$, ils ne se recouvrent quasiment pas. On peut donc approximer le module au carré de la somme par la somme des modules carrés. Il reste :

$$\begin{aligned}
P_{i\to n}(t) &= \frac{t^2}{\hbar^2}\left(\left|V_{ni}\,g\left(\frac{(\omega_{ni}+\omega)t}{2}\right)\right|^2 + \left|V_{in}^*\,g\left(\frac{(\omega_{ni}-\omega)t}{2}\right)\right|^2\right) \\
&= \frac{t^2}{\hbar^2}\left(|V_{in}|^2 f\left(\frac{(\omega_{ni}-\omega)t}{2}\right) + |V_{ni}|^2 f\left(\frac{(\omega_{ni}+\omega)t}{2}\right)\right),
\end{aligned}$$

avec $f(x) = g(x)^2 = \frac{\sin^2 x}{x^2}$.
On reformule maintenant le résultat de façon à pouvoir utiliser l'indication :

$$\begin{aligned}
P_{i\to n}(t) &= \frac{t^2}{\hbar^2}\left(|V_{in}|^2\frac{\sin^2\left(\frac{(\omega_{ni}-\omega)t}{2}\right)}{\left(\frac{(\omega_{ni}-\omega)t}{2}\right)^2} + |V_{ni}|^2\frac{\sin^2\left(\frac{(\omega_{ni}+\omega)t}{2}\right)}{\left(\frac{(\omega_{ni}+\omega)t}{2}\right)^2}\right), \\
&= \frac{t}{\hbar^2}\left(|V_{in}|^2\frac{\sin^2(x_1 t)}{x_1^2 t} + |V_{ni}|^2\frac{\sin^2(x_2 t)}{x_2^2 t}\right),
\end{aligned}$$

où $x_1 = \frac{\omega_{ni}-\omega}{2}$ et $x_2 = \frac{\omega_{ni}+\omega}{2}$. Donc, lorsque $t \to \infty$ (tout en respectant les conditions de validité du développement de V comme une perturbation),

$$P_{i\to n}(t) \sim \frac{t\pi}{\hbar^2}\left(|V_{in}|^2\delta\left(\frac{\omega_{ni}-\omega}{2}\right) + |V_{ni}|^2\delta\left(\frac{\omega_{ni}+\omega}{2}\right)\right).$$

Attention en faisant sortir le 2 du δ :

$$P_{i\to n}(t) \sim \frac{2t\pi}{\hbar^2}\left(|V_{in}|^2\delta(\omega_{ni}-\omega) + |V_{ni}|^2\delta(\omega_{ni}+\omega)\right).$$

Aux temps longs, les transitions favorisées sont celles correspondant à une différence d'énergie égale à $\pm\hbar\omega$. La probabilité de transition est linéaire en temps. Donc, la probabilité de transition par unité de temps est constante (règle d'or de Fermi).

Remarque
Dans le cas où $t \ll \hbar/|V_{ni}|$ (développement en perturbation valable), deux cas limites sont à distinguer : $t \ll 1/\omega_{ni}$ et $t \gg 1/\omega_{ni}$ (si la valeur de ω_{ni} le permet). En effet, la fonction $\sin^2 x/x^2$ a une valeur proche de 1 pour x au voisinage de 0 puis devient presque nulle pour $|x| > \pi$ (voir figures). Or l'amplitude de transition contient deux termes en $\frac{\sin x}{x}$ respectivement centrés sur $\pm\omega_{ni}$.
Si $t \ll 1/\omega_{ni}$, les exponentielles sont ~ 1 et les deux termes sont représentés par des courbes très larges en comparaison de leur écartement (à gauche ci-dessous). La probabilité est alors le carré de la somme de ces deux termes. Dans ce cas, le maximum de la probabilité se trouve en $\omega = 0$. Lorsque t augmente, la largeur des cloches diminue (à droite ci-dessous). Pour t grand, le maximum de la probabilité se divise en deux maxima proches de $\pm\omega_{ni}$.