

Liens entre l'approche entièrement quantique et la théorie des perturbations dépendant du temps.

- But de ce § : - Présenter un certain nombre d'approches du problème reposant sur une description classique du champ électromagnétique, les autres basées sur une résolution itérative des équations d'évolution (§A), les autres sur une résolution par fractions continues (§B).
- Etablir le lien étroit existant entre l'approche entièrement quantique (atome habillé) et des méthodes de résolution exacte de l'équation de Schrödinger correspondant à un hamiltonien dépendant du temps de manière périodique (états quasi-périodiques, quasi-énergies ...)
 - Discuter des avantages et inconvénients respectifs de ces diverses méthodes.

A - Résolution itérative des "équations de Bloch" du problème.

Pour un exposé plus détaillé de cette approche, voir la ref A2 (donnée à la fin du § A). Nous insisterons plutôt ici sur les avantages et inconvénients de cette approche.

① les "équations de Bloch" d'un système à 2 niveaux interagissant avec une onde monochromatique.

- Représentation du spin fictif.

$\vec{M}$: aimantation globale de l'ensemble des spins fictifs, reliée à l'opérateur densité ρ par

$$M_z \sim (\rho_{++} - \rho_{--}) \quad M_x \sim (\rho_{+-} + \rho_{-+}) \quad M_y = i(\rho_{-+} - \rho_{+-}) \quad (V-1)$$

- Introduction phénoménologique de constantes d'amortissement des composantes de $\vec{M}$ pour décrire les phénomènes dissipatifs : Temps de relaxation T_R . (possibilité de 2 Temps de relaxation différents pour les composantes longitudinale et transversales de $\vec{M}$)

- Equations de Bloch

$$\frac{d}{dt} \vec{M}(t) = n \vec{\mu}_0 - \frac{1}{T_R} \vec{M}(t) + \gamma \vec{M}(t) \times \vec{B}(t) \quad (V-2)$$

$$\vec{B}(t) = B_0 \vec{e}_z + B_1 \cos \omega t \vec{e}_x \quad (V-3)$$

γ : rapport gyromagnétique

$n \vec{\mu}_0$: terme source (n spins fictifs préparés par unité de temps avec l'aimantation élémentaire $\vec{\mu}_0$)

- 2 possibilités de termes source.

- (i) $\vec{\mu}_0 = \mu_0 \vec{e}_z$ pompage longitudinal (ou facteur de Boltzmann dans le champ $B_0 \parallel$ à Oz)
- (ii) $\vec{\mu}_0 = \mu_0 \vec{e}_x$ pompage transversal (préparation des atomes dans une superposition cohérente des 2 états)

- Remarques

- (i) Si l'on fait r.w.2. (ou si l'on a un vrai champ tournant), (V-2) est exactement soluble
- (ii) Possibilité de situations plus compliquées (3 niveaux, spins $J > 1/2$...)

② Développement en série de Fourier de $\vec{M}$

(V-2)

- Comme $\vec{B}(t)$ est périodique, l'équation (B-2) admet une solution périodique développable en série de Fourier :

$$\begin{cases} M_z = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} p M_z e^{ip\omega t} \\ M_{\pm} = M_x \pm i M_y = \sum_p p M_{\pm} e^{ip\omega t} \end{cases} \quad (V-4)$$

- En reportant (V-4) dans (V-2), on obtient en posant $\omega_0 = -\gamma B_0$,

$$\begin{cases} \left(ip\omega + \frac{1}{T_R} \right) p M_z = n\mu_0 \delta_{p0} + i \frac{\omega_1}{4} \left[M_{-} + M_{-} - M_{+} - M_{+} \right] \\ \left[i(p\omega \mp \omega_0) + \frac{1}{T_R} \right] p M_{\pm} = \mp i \frac{\omega_1}{2} \left[M_z + M_z \right] \end{cases} \quad (V-5)$$

On a supposé le pompage longitudinal

③ Développement en puissances de ω_1

- Chaque composante de Fourier de M_z ou $M_{\pm}$ peut être développée en puissances de ω_1 . Par exemple :

$$p M_z = {}^{(0)}_p M_z + {}^{(1)}_p M_z \omega_1 + {}^{(2)}_p M_z \omega_1^2 + \dots \quad (V-6)$$

- En reportant (V-6) (et les développements analogues pour $p M_{\pm}$) dans (V-5) on obtient :

$$\begin{cases} \left(ip\omega + \frac{1}{T_R} \right) {}^{(n)}_p M_z = \frac{i}{4} \left[{}^{(n-1)}_{p+1} M_{-} + {}^{(n-1)}_{p-1} M_{-} - {}^{(n-1)}_{p+1} M_{+} - {}^{(n-1)}_{p-1} M_{+} \right] + n\mu_0 \delta_{p0} \delta_{n0} \\ \left[i(p\omega \mp \omega_0) + \frac{1}{T_R} \right] {}^{(n)}_p M_{\pm} = \mp \frac{i}{2} \left[{}^{(n-1)}_{p+1} M_z + {}^{(n-1)}_{p-1} M_z \right] \end{cases} \quad (V-7)$$

- La solution s'obtient alors de proche en proche.

$n=0$

$$\begin{cases} {}^{(0)}_0 M_z = n\mu_0 T_R \\ {}^{(0)}_p M_z = 0 \text{ pour } p \neq 0 \end{cases} \quad {}^{(0)}_p M_{\pm} = 0 \text{ pour tout } p \quad (V-8)$$

$n \neq 0$

$$\begin{cases} {}^{(n)}_p M_z = \frac{i}{4 \left(ip\omega + \frac{1}{T_R} \right)} \left[{}^{(n-1)}_{p+1} M_{-} + {}^{(n-1)}_{p-1} M_{-} - {}^{(n-1)}_{p+1} M_{+} - {}^{(n-1)}_{p-1} M_{+} \right] \\ {}^{(n)}_p M_{\pm} = \mp \frac{i}{2 \left[i(p\omega \mp \omega_0) + \frac{1}{T_R} \right]} \left[{}^{(n-1)}_{p+1} M_z + {}^{(n-1)}_{p-1} M_z \right] \end{cases} \quad (V-9)$$

④ Structure en "arbre" de la solution

(a) Pompage longitudinal

Seul ${}^{(0)}_0 M_z$ est $\neq 0$ à l'ordre 0. De (V-9), on voit en à l'ordre 1 on obtient ${}^{(1)}_{\pm 1} M_{\pm}$, puis à l'ordre 2 ${}^{(2)}_0 M_z$ et ${}^{(2)}_{\pm 2} M_z$ et ainsi de suite...

Voir tableau I

(b) Pompage transversal

Le terme source $n\mu_0 S_{p0} S_{p\pm}$ apparaît maintenant dans la 2^{ème} équation (V-7) de sorte que seul $^{(0)}M_{\pm}$ est $\neq 0$ à l'ordre 0 puis $^{(1)}M_{\pm}$ à l'ordre 1, $^{(2)}M_{\pm}$ et $^{(2)}M_{\pm}$ à l'ordre 2 et ainsi de suite. Voir tableau II

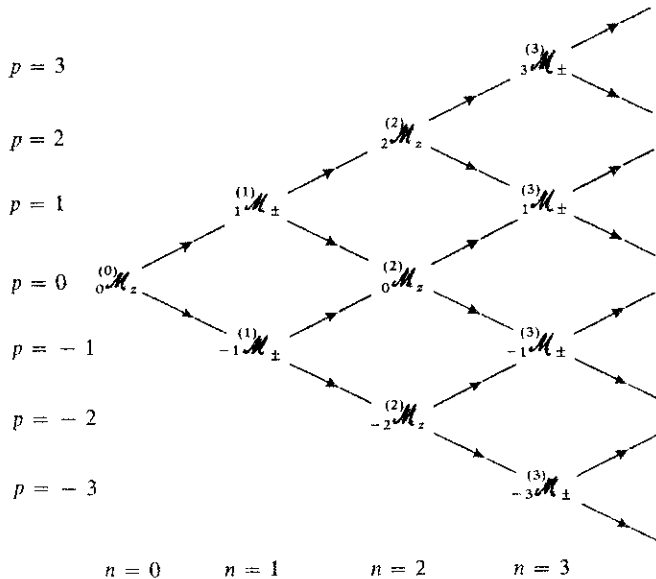


Tableau I

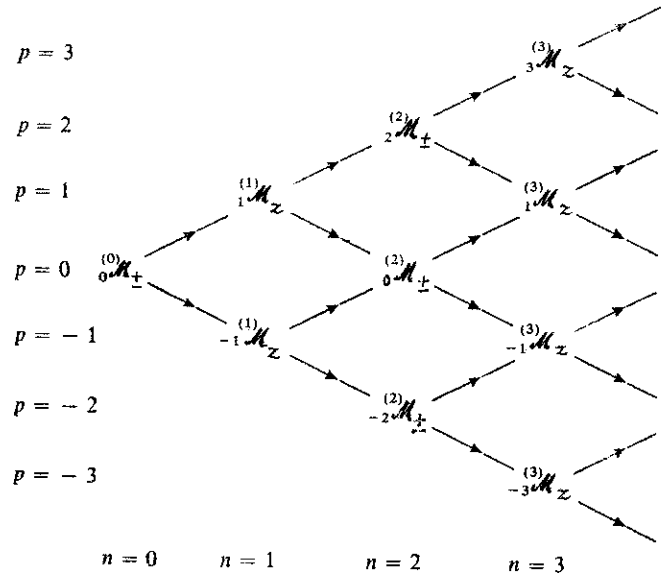


Tableau II

5) Discussion physique.

(a) Pompage longitudinal (voir discussion plus détaillée dans la réf. A2)

Ordre 0 : différence de population initiale (en l'absence d'onde c.m.)

Ordre 1 : dipôle induit - Susceptibilité linéaire

Ordre 2 $^{(2)}M_z$: diminution de la différence de population due à l'absorption et l'émission induite.

$^{(2)}M_z$: génération d'harmonique 2

Ordre 3 $^{(3)}M_{\pm}$: saturation de la susceptibilité linéaire
Susceptibilité non linéaire

$^{(3)}M_{\pm}$: Harmonique 3. Résonne en $\omega_0 = 3\omega$
Transitions à 3 quanta (la variation correspondante de la différence de population se manifeste sur $^{(6)}M_z$)

(b) Pompage transversal (voir discussion plus détaillée dans la réf. A3)

Ordre 0 : $^{(0)}M_{\pm}$: aimantation transversale résonnante en $\omega_0 = 0$
Effet Hanle

Ordre 1 $^{(1)}M_z$: Modulation à ω de la différence de population

Ordre 2 $^{(2)}M_{\pm}$: Modification de l'effet Hanle

$^{(2)}M_{\pm}$: Aimantation transversale résonnante en $\omega_0 = 2\omega$
Résonance de cohérence $\omega_0 = 2\omega$

On retrouve ainsi les diverses résonances (transitions à plusieurs quanta et résonances de cohérence) étudiées plus haut.

⑥ Comment apparaissent dans ce point de vue les déplacements et élargissements radiatifs ?

D'après la discussion présentée lors du survol de la Spectroscopie Hertziennne, une résonance apparaissant en $\omega_0 = p\omega$ subit en général un déplacement radiatif $\delta(\omega_1)$ dépendant de ω_1 , un élargissement radiatif $E(\omega_1)$ (en plus de la largeur intrinsèque $1/T_R$). Enfin son intensité $S(\omega_1)$ varie aussi avec ω_1 , de sorte que, mathématiquement, la résonance doit apparaître comme

$$\frac{S(\omega_1)}{\omega_0 - p\omega - \delta(\omega_1) + i\frac{1}{T_R} + iE(\omega_1)} \quad (V-10)$$

Or, dans la solution trouvée plus haut, les dénominateurs résonnants sont toujours de la forme $-\frac{1}{p\omega + \frac{i}{T_R}}$ ou $\frac{1}{\omega_0 - p\omega + \frac{i}{T_R}}$

En fait, pour $\omega_1 \ll \frac{1}{T_R}$, on peut développer (V-10) sous la forme :

$$\sum_{q=0}^{\infty} \frac{S(\omega_1) [\delta(\omega_1) - iE(\omega_1)]^q}{\left(\omega_0 - p\omega + \frac{i}{T_R}\right)^{q+1}} \quad (V-11)$$

Il faut en plus, dans (V-11), développer $S(\omega_1)$, $\delta(\omega_1)$, $E(\omega_1)$ en puissances de ω_1 .

Pour retrouver un comportement du type de (V-10), il faut donc resommer complètement la série des perturbations.

Si l'on se contente de calculer un petit nombre de termes après l'ordre le plus bas auquel la résonance apparaît, il est difficile de dégager sur ces termes la contribution au déplacement radiatif (développement de $\delta(\omega_1)$), celle de l'élargissement radiatif ($E(\omega_1)$) et de la saturation ($S(\omega_1)$).

⑦ Avantages et inconvénients de ce point de vue.

Avantages

- (i) Compréhension perturbative des phénomènes, faisant intervenir des nombres croissants d'interactions entre l'atome et l'onde ω_1 .
Possibilité de représentations diagrammatiques.
- (ii) Très grande souplesse d'emploi.
 - Introduction de l'effet Doppler
On écrit les équations de Bloch pour une classe de vitesses.
 - Interactions avec plusieurs ondes. Développement perturbatifs.
Interprétation des phénomènes en termes de processus faisant intervenir plusieurs interactions avec les diverses ondes (processus Raman, à 2 photons...)
(Voir référence A4 et références vis)
 - Interactions avec 2 ondes dont l'une est intense (pompe)

l'autre faible (sonde). Possibilité, grâce à r.w. 2., de calculer exactement l'effet de l'onde pompe, perturbativement l'effet de l'onde sonde (refs A1, A4, A5) (V-5)

- Possibilité d'introduire dans le calcul les variations spatiales de l'intensité lumineuse, la courbure des fronts d'onde... (ref A6)

(iii) Très grande richesse d'applications

- Théorie du laser (calcul de la réponse atomique) ref A7
- Optique non linéaire - génération d'harmoniques...
- Spectroscopie de saturation des systèmes à 2 et 3 niveaux... (ref A4 et références in)

Inconvénients

Approche perturbative mal adaptée à l'étude des effets d'ordre supérieur, des élargissements et déplacements radiatifs. Pas de vision globale des divers effets.

Références

- A-1 N. Bloembergen and Y.R. Shen Phys. Rev. (1964), 133, 137
- A-2 C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe Mécanique quantique ^(tome II) Complément B_{XIII} p.1311
- A-3 C. Cohen-Tannoudji et S. Haroche C.R (1967), 264, 626
- A-4 I.M. Beterov and V.P. Chebotarev, Progress in Quantum Electronics Vol 3, Pergamon Press 1974
+ Articles T. Hänsch et P. Toschek cités dans cette référence
+ Article M. Feld et A.J. cités dans cette référence
- A-5 S. Haroche and F. Hartmann Phys. Rev. (1972), A6, 1280
- A-6 C.J. Bordé, J.L. Hall, C.V. Kunasz and D.G. Hummer Phys. Rev. (1976), A14, 236
- A-7 W.E. Lamb Jr Phys. Rev. (1964), 134, A 1429

B - Résolution des équations de Bloch par la méthode des "fractions continues"

① Idee générale (voir refs B2 et B.1)

Elle consiste à essayer de résoudre directement les équations de récurrence (V-5) pour les composantes de Fourier de $\vec{M}$, sans effectuer le développement en puissances de ω , (V-6). Nous allons voir qu'une telle résolution est possible et fournit des expressions explicites des composantes de Fourier de $\vec{M}$ sous forme d'une fraction continue.

Auparavant nous allons partiellement ^(changer) les notations de § A (qui sont celles de la ref A2) pour nous adapter à celles de la référence B.2. Au lieu d'utiliser les composantes de $\vec{M}$, on utilise des éléments de la matrice densité ρ dont les développements de Fourier s'écrivent

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_{--} - \rho_{++} = \sum_P d_P e^{iP\omega t} \\ \rho_{+-} - \rho_{-+} = \sum_P s_P e^{iP\omega t} \\ \rho_{+-} + \rho_{-+} = \sum_P c_P e^{iP\omega t} \end{array} \right. \quad (V-12)$$

(Notons que nous conservons les notations ω et ω_0 pour la fréquence du laser et la fréquence atomique respectivement au lieu de ν et ω comme dans B.2.) (V-6)

Avec les notations (V-12), les équations (V-5) deviennent (avec 2 constantes d'amortissement différentes γ_1 et γ_2 pour les éléments diagonaux et non diagonaux de ρ):

$$\begin{cases} p\omega d_p = \frac{1}{2}\omega_1 (s_{p+1} + s_{p-1}) + i\gamma_1 d_p - i\lambda \delta_{p0} \\ p\omega s_p = \omega_0 c_p + \frac{1}{2}\omega_1 (d_{p+1} + d_{p-1}) + i\gamma_2 s_p \\ p\omega c_p = \omega_0 s_p + i\gamma_2 c_p \end{cases} \quad (V-13)$$

(On a appelé λ le terme source ρ_{p0} de V-5). Si l'on élimine c_p entre les 2 dernières équations (V-13), on obtient :

$$\begin{cases} s_p = \frac{i}{2} \left[\frac{1}{\gamma_2 + i[p\omega - \omega_0]} + \frac{1}{\gamma_2 + i[p\omega + \omega_0]} \right] \frac{\omega_1}{2} (d_{p+1} + d_{p-1}) \end{cases} \quad (V-14)$$

$$\begin{cases} d_p = i \left[\frac{1}{\gamma_1 + ip\omega} \right] \frac{\omega_1}{2} (s_{p+1} + s_{p-1}) + \frac{\lambda}{\gamma_1} \delta_{p0} \end{cases} \quad (V-15)$$

que l'on peut combiner sous forme d'une seule équation

$$\boxed{x_p = i \frac{1}{2} \omega_1 D(p) [x_{p+1} + x_{p-1}] + \delta_{p0}} \quad (V-16)$$

après avoir posé

$$\begin{cases} x_p = d_p \gamma_1 / \lambda & p \text{ pair} \\ x_p = s_p \gamma_1 / \lambda & p \text{ impair} \end{cases} \quad (V-17)$$

$$\begin{cases} D(p) = \frac{1}{\gamma_1 + ip\omega} & p \text{ pair} \\ D(p) = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\gamma_2 + i(p\omega - \omega_0)} + \frac{1}{\gamma_2 + i(p\omega + \omega_0)} \right] & p \text{ impair} \end{cases} \quad (V-18)$$

② Résolution des équations de récurrence (voir aussi ref. B.1)

- Pour $p \neq 0$, l'équation (V-16) est une équation de récurrence "homogène" qui peut se réécrire après division par x_p

$$1 = \frac{i\omega_1}{2} D(p) \left[\frac{x_{p+1}}{x_p} + \frac{x_{p-1}}{x_p} \right] \quad (V-19)$$

- Supposons d'abord $p \geq 1$. Si l'on pose

$$b_p = \frac{x_{p+1}}{x_p} \quad (V-20)$$

il vient

$$1 = \frac{i\omega_1}{2} D(p) \left[b_p + \frac{1}{b_{p-1}} \right] \quad (V-21)$$

d'où l'on tire

$$b_{p-1} = \frac{i\omega_1}{2} D(p) [1 - \frac{i\omega_1}{2} D(p) b_p]^{-1} \quad (V-22)$$

Dans (V-22), faisons $p=1, p=2, \dots$ On obtient

$$\begin{aligned} b_0 &= i \frac{\omega_1}{2} D(1) \left[1 - i \frac{\omega_1}{2} D(1) b_1 \right] \\ b_1 &= i \frac{\omega_1}{2} D(2) \left[1 - i \frac{\omega_1}{2} D(2) b_2 \right] \end{aligned} \quad (V-23)$$

On en déduit :

$$b_0 = \frac{x_1}{x_0} = \frac{s_1}{d_0} = i \frac{\frac{\omega_1}{2} D(1)}{1 + \frac{\frac{\omega_1^2}{4} D(1) D(2)}{1 + \frac{\frac{\omega_1^2}{4} D(2) D(3)}{1 + \dots}}} \quad (V-24)$$

- Supposons maintenant $p \leq -1$ et posons :

$$g_p = \frac{x_p}{x_{p+1}} \quad (V-25)$$

Il vient
$$g_p = i \frac{\omega_1}{2} D(p) \left[1 - i \frac{\omega_1}{2} D(p) g_{p-1} \right]^{-1} \quad (V-26)$$

d'où l'on tire, après un calcul analogue au précédent :

$$g_{-1} = \frac{x_{-1}}{x_0} = \frac{s_{-1}}{d_0} = i \frac{\frac{\omega_1}{2} D(-1)}{1 + \frac{\frac{\omega_1^2}{4} D(-1) D(-2)}{1 + \frac{\frac{\omega_1^2}{4} D(-2) D(-3)}{1 + \dots}}} \quad (V-27)$$

- On voit sur (V-18) que

$$D(-p) = D(p)^* \quad (V-28)$$

ce qui, utilisé dans (V-24) et (V-27) montre que

$$g_{-1} = -b_0^* \quad (V-29)$$

Reprenons alors les définitions (V-20) et (V-25) qui donnent

$$\begin{cases} x_1 = b_0 x_0 \\ x_{-1} = g_{-1} x_0 = -b_0^* x_0 \end{cases} \quad (V-30)$$

On peut alors reporter (V-30) dans l'équation de récurrence (V-16) écrite pour $p=0$, ce qui donne une équation permettant de calculer x_0

$$x_0 = i \frac{\omega_1}{2} D(0) (b_0 - b_0^*) x_0 + 1 \quad (V-31)$$

- Utilisant l'expression (V-24) de b_0 et le fait que, d'après (V-18), $D(0) = \frac{1}{\gamma_1}$, on obtient

$$d_0 = x_0 \frac{\lambda}{\gamma_1} = \frac{\lambda}{\gamma_1} \frac{1}{1 + \frac{\omega_1^2}{2\gamma_1^2} \sum} \quad (V-32)$$

où $\sum$ est donné par

$$\Sigma = \text{Re} \frac{\gamma_1 D(1)}{1 + \frac{\frac{\omega_1^2}{4} D(1) D(2)}{1 + \frac{\frac{\omega_1^2}{4} D(2) D(3)}{1 + \dots}}} \quad (\text{V-33})$$

- On a ainsi déterminé d_0 . On en déduit immédiatement S_1 et S_{-1} à partir de (V-24) et (V-27).
 Pour calculer les coefficients de Fourier d'ordre plus élevé, il suffit d'utiliser un nombre suffisant de fois l'équation (V-19), on ce qui revient au même (V-22) ou (V-26). Par exemple, si l'on veut calculer S_3 , on écrit

$$S_3 = \frac{S_3}{d_2} \frac{d_2}{S_1} \frac{S_1}{d_0} d_0 = b_2 b_1 b_0 d_0 = \left(\frac{i\omega_1}{2} \right)^3 \left(\frac{D(3)}{1 + \frac{\frac{\omega_1^2}{4} D(3) D(4)}{1 + \frac{\frac{\omega_1^2}{4} D(4) D(5)}{1 + \dots}}} \right) \left(\frac{D(2)}{1 + \frac{\frac{\omega_1^2}{4} D(2) D(3)}{1 + \frac{\frac{\omega_1^2}{4} D(3) D(4)}{1 + \dots}}} \right) \left(\frac{D(1)}{1 + \frac{\frac{\omega_1^2}{4} D(1) D(2)}{1 + \frac{\frac{\omega_1^2}{4} D(2) D(3)}{1 + \dots}}} \right) d_0 \quad (\text{V-36})$$

On a ainsi résolu entièrement le problème.

- On a considéré uniquement le cas d'un pompage longitudinal. Des calculs tout à fait analogues peuvent être développés à propos du pompage transversal (voir ref B.4).

③ Exemple d'application : élargissement et déplacement radiatif de la résonance $\omega_0 = \omega$

- On voit sur (V-18) que, de toutes les quantités $D(p)$, seule $D(1)$ résonne en $\omega_0 = \omega$.
 Calculons une expression approchée de d_0 (aimantation statique longitudinale) en remplaçant dans (V-32) Σ par l'expression obtenue en négligeant dans (V-33) tous les termes ne contenant pas $D(1)$.

$$\Sigma \simeq \text{Re} \frac{\gamma_1 D(1)}{1 + \frac{\omega_1^2}{4} D(1) D(2)} \quad (\text{V-37})$$

- D'autre part, au voisinage de $\omega_0 = \omega$, on peut d'après (V-18) écrire :

$$D(1) \simeq \frac{1}{2} \frac{1}{\gamma_2 + i(\omega - \omega_0)} \quad D(2) \simeq \frac{1}{2i\omega} \quad (\text{V-38})$$

ce qui, reporté dans (V-37) donne :

$$\Sigma \simeq \frac{1}{2} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_2^2 + [\omega - \omega_0 - \frac{\omega_1^2}{16\omega}]^2} \quad (\text{V-39})$$

En reportant alors (V-39) dans (V-32), on voit que le dénominateur de l'expression donnant d_0 s'écrit :

$$\left[\omega - \omega_0 - \frac{\omega_1^2}{16\omega} \right]^2 + \gamma_2^2 + \frac{\omega_1^2 \gamma_2}{4\gamma_1} \quad (V-40)$$

ce qui montre clairement l'existence d'un déplacement radiatif en $\omega_1^2/16\omega$ (Déplacement de Bloch-Siegert), et d'un élargissement radiatif (largeur en γ_2 pour $\omega_1 \ll \gamma_1, \gamma_2$ en $\frac{\omega_1}{2} \sqrt{\frac{\gamma_2}{\gamma_1}}$ pour $\omega_1 \gg \gamma_1, \gamma_2$).

- Des calculs analogues pourraient être faits pour les transitions à plusieurs quanta et les résonances de cohérence ^(refs B.3 et B.4). En conservant un plus grand nombre de termes dans la fraction continue, c.-à-d. en l'arrêtant moins tôt, on améliore considérablement la précision.

④ Avantages et inconvénients de cette méthode.

- Très bien adaptée pour les calculs sur ordinateurs. Très rapidement convergente.
- Très bien adaptée au calcul des effets d'ordre supérieurs. En arrêtant la fraction continue à un certain stade, on obtient un produit de 2 polynômes beaucoup plus proche de la solution exacte qu'un développement en série entière.
- Méthode très générale, utile dans de nombreux cas. Voir par exemple, théorie non perturbative des lasers (ref B1).
- Par contre, interprétations physiques plus difficiles à dégager.

Références

- B-1 S. Stenholm and W.E. Lamb Jr (1969) Phys. Rev 181, 618
 B-2 S. Stenholm (1972) J. Phys. B, 5, 878
 B-3 S. Stenholm (1972) J. Phys. B, 5, 890
 B-4 S. Stenholm and C.A. Aminoff (1973) J. Phys. B, 6, 2350