Complément au cours#5 : Règle de sélection

S. Bernon

A. Objectif

Dans le cours 5, nous avons vu que la règle d'or de Fermi qui donne la probabilité de transition de i vers f lorsque le système est perturbé par un hamiltonien $\hat{H}_1$ est proportionnel à l'élément de matrice $\langle f|\hat{H}_1|i\rangle$. Si cet élément est nul, l'état f ne pourra pas être peuplé par l'interaction. Dans ce complément, nous allons chercher à déterminer les états f pour lesquels cet élément est non nul lorsque l'on soumet un atome à un champ laser.

B. Résolution

Le couplage entre l'atome et le champ prend la forme d'un couplage dipolaire électrique $\hat{H}_1 = -\hat{\mathbf{D}}.\hat{\mathbf{E}}$ avec $\mathbf{E} = E_0 e^{i\omega t}\vec{\varepsilon}$ le champ laser de polarisation $\vec{\varepsilon}$ et $\hat{\mathbf{D}} = -e\hat{\mathbf{r}}$ le moment dipolaire électrique de l'atome (Voir par exemple Mécanique Quantique de Claude Cohen Tannoudji P 1297) . On obtient alors

$$\hat{H}_1 = -eE_0 e^{i\omega t}\hat{\mathbf{r}}.\vec{\varepsilon}$$

Nous traitons en premier lieu le couplage entre degrés de liberté externes et l'on néglige le role des interactions avec les degré de liberté interne de l'atome. En d'autre terme on néglige la structure fine et hyperfine. Les états sont alors caractérisés par 3 nombres quantiques n, l et m. Nous cherchons alors à déterminer l'élément de matrice : $H^{l_2,m_2}_{l_1,m_1} = \langle n_2, l_2, m_2|\hat{H}_1|n_1, l_1, m_1\rangle$

Pour traiter ce problème nous allons considérer la base de polarisation (linéaire, circulaire gauche et circulaire droite). En utilisant cette base de polarisation, on obtient :

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{r}}.\vec{\varepsilon} = z = r\cos\theta = rY_{1,0}(\theta,\varphi)(\text{l=1, m=0}) & \text{Linéaire} \\ \hat{\mathbf{r}}.\vec{\varepsilon} = x+iy = r\sin\theta e^{i\varphi} = rY_{1,1}(\theta,\varphi)(\text{l=1, m=1}) & \text{Circulaire droite} \\ \hat{\mathbf{r}}.\vec{\varepsilon} = x-iy = r\sin\theta e^{-i\varphi} = rY_{1,-1}(\theta,\varphi)(\text{l=1, m=-1}) & \text{Circulaire gauche} \end{cases}$$

En utilisant cette expression de $\hat{\mathbf{r}}.\vec{\varepsilon}$, on a

$$H^{l_2,m_2}_{l_1,m_1} = \iint Y^*_{l_2,m_2}(\theta,\phi)Y_{1,m}(\theta,\phi)Y_{l_1,m_1}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi \times \int {R^{n_2}_{l_2,m_2}}^*(r)R^{n_1}_{l_1,m_1}(r)r^3 dr$$

et on pose $I = \iint Y^*_{l_2,m_2}(\theta,\phi)Y_{1,m}(\theta,\phi)Y_{l_1,m_1}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi$

Cette expression de I fait intervenir le produit $Y_{1,m}(\theta,\phi)Y_{l_1,m_1}(\theta,\phi)$ qui n'est autre que la composante angulaire de la fonction d'onde de l'état découplé : $|1,m\rangle_{\text{lumière}} \otimes |l_1,m_1\rangle_{\text{atome}} = |1,m,l_1,m_1\rangle$.

Nous avons vu au cours 3 qu'il existe 2 bases équivalentes pour décrire deux moments cinétiques ou autrement dit 2 ECOC équivalents. L'ECOC découplé $\{\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1,z}, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{2,z}\}$ ayant pour base $|l_1,m_1,l_2,m_2\rangle$ et l'ECOC couplé $\{\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z\}$ ayant pour base $|l_1,l_2,m_1,m_2\rangle$ avec $l \in$

$[|l_1 - l_2|, \ldots, l_1 + l_2]$ et $m_3 = m_1 + m_2 \in [-l, ..., l]$. En décomposant l'état $|l_1, m_1, l_2, m_2\rangle$ dans la base $|l_1, l_2, m_1, m_2\rangle$, on obtient :

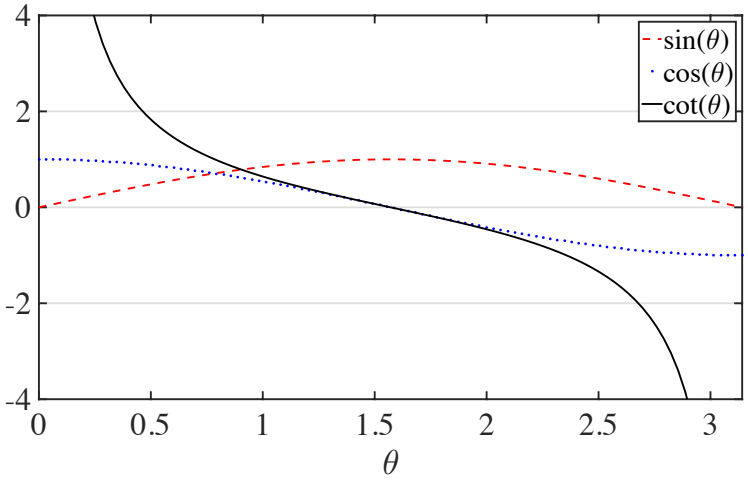
$Y_{1,m}(\theta,\phi)Y_{l_1,m_1}(\theta,\phi) = \sum C^{l_3,m_3}_{1,m,l_1,m_1} Y_{l_3,m_3}(\theta,\phi)$ avec $l_3 \in [l_1 - 1, l_1, l_1 + 1]$ et $m_3 \in [-l_3, ..., l_3]$. et

$$I = \sum C^{l_3,m_3}_{1,m,l_1,m_1} \iint Y^*_{l_2,m_2}(\theta,\phi) Y_{l_3,m_3}(\theta,\phi) \sin\theta d\theta d\phi$$

Comme les harmoniques sphériques sont orthonormées, on obtient $l_2 = l_3$ et $m_2 = m_3$.

On a donc $l_2 = l_1 \pm 1, l_1$ et $m_2 = m_1, m_1 \pm 1$.

Nous allons maintenant démontrer que le couplage $l_1 = l_2$ est nul. On suppose $l_1 = l_2$. Trois cas peuvent se rencontrer : $\begin{cases} m_2 = m_1 \text{ et } m = 0 & (i) \\ m_2 = m_1 + 1 \text{ et } m = 1 & (ii) \\ m_2 = m_1 - 1 \text{ et } m = -1 & (iii) \end{cases}$



Sur la figure ci-dessus sont représentés des fonctions importantes pour notre démonstration. Par abus de language, on appellera une fonction "paire" si elle est symétrique par rapport à $\pi/2$ et "impaire" si elle est anti-symétrique. Avec ce langage, la fonction $sin(\theta)$ est donc paire. Les opérateurs montant et descendant s'écrivent

$$\hat{L}_\pm = -\hbar e^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot(\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

. Ils changent donc la parité en θ des fonctions sur lesquels ils sont appliqués.

(i) $Y_{1,0}(\theta,\varphi) = \cos(\theta)$: impaire et $Y_{l_1,m_1}(\theta,\varphi) = Y_{l_2,m_2}(\theta,\varphi)$.
La fonction $Y^*_{l_2,m_2}.Y_{1,0}.Y_{l_1,m_1}(\theta,\varphi)$ est donc impaire et l'intégral I est nulle

(ii) $Y_{1,1}(\theta,\varphi) = \sin(\theta)e^{i\varphi}$: paire et $Y_{l_2,m_2=m_1+1}(\theta,\varphi) \propto \hat{L}_+ Y_{l_1,m_1}(\theta,\varphi)$.
La fonction $Y^*_{l_2,m_2}.Y_{1,1}.Y_{l_1,m_1}(\theta,\varphi)$ est donc impaire et l'intégral I est nulle

(iii) $Y_{1,-1}(\theta,\varphi) = \sin(\theta)e^{-i\varphi}$: paire et $Y_{l_2,m_2=m_1-1}(\theta,\varphi) \propto \hat{L}_- Y_{l_1,m_1}(\theta,\varphi)$.
La fonction $Y^*_{l_2,m_2}.Y_{1,-1}.Y_{l_1,m_1}(\theta,\varphi)$ est donc impaire et l'intégral I est nulle.

C. Résultats

La **condition de couplage atome-champ** est donc :

$$\begin{cases} \Delta l &= \pm 1 \\ \Delta m &= \pm 1, 0 \end{cases}$$ pour le moment cinétique orbital.

La structure fine est caractérisé par le moment cinétique total de l'électron $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$. L'excursion finie pour l se traduit par une excursion finie pour J :

$$\begin{cases} \Delta l &= \pm 1 \\ \Delta J &= \pm 1, 0 \\ \Delta m_J &= \pm 1, 0 \end{cases}$$

La structure hyperfine est caractérisé par le moment cinétique total de l'atome $\hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{I}}$. L'excursion finie pour I se traduit par une excursion finie pour F :

$$\begin{cases} \Delta l &= \pm 1 \\ \Delta J &= \pm 1, 0 \\ \Delta F &= \pm 1, 0 \\ \Delta m_F &= \pm 1, 0 \end{cases}$$