

Calcul du temps de vie radiatif d'un niveau quantique

Cristian Florea

TM

1. Introduction	1
2. Force d'oscillateur et force de raie - Transition $1s \leftrightarrow 2p$ de l'atome hydrogène ..	1
2.1. Calcul en utilisant les symboles $3j$	3
2.2. Calcul en utilisant les coefficients C^k	3
2.3. Calcul en utilisant les coefficients de Clebsch-Gordan	4
3. Coefficients d'Einstein	4
4. Probabilité de transition par unité de temps	6
5. Bibliographie	6

1. Introduction

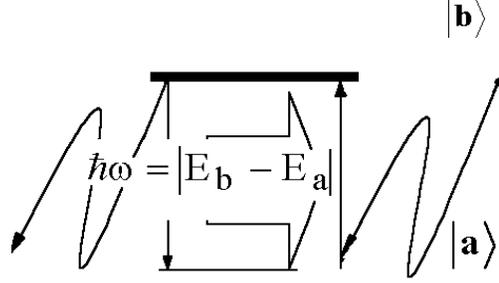
Pour la connaissance de la structure électronique des atomes et des ions, la phase gazeuse c'est le milieu qui représente le moins de difficultés. Ça permet d'atteindre un ensemble de valeurs essentielles. Pour cet état physique, le paramètre à calculer est surtout la force de raie S . La mise au point de lasers à gaz exige plutôt les valeurs des probabilités de transition par unité de temps W . Aussi bien pour la force de raie que pour la probabilité de transition il est utile d'introduire un paramètre sans dimensions appelé force d'oscillateur f qui apporte une information à titre de comparaison entre les transitions d'absorption et d'émission au sein d'un même édifice électronique.

L'évaluation est moins aisée lorsqu'on fait appel à l'état condensé - qu'il soit solide ou liquide. Ici la notion de force d'oscillateur est essentielle. Pour l'état solide à partir d'un spectre on peut estimer une force d'oscillateur " expérimentale ". De cette force d'oscillateur on peut, par la théorie de Judd-Ofelt, obtenir les valeurs des probabilités de transition. Toutefois il faut s'assurer que la transition a bien lieu entre niveaux électroniques purs. C'est à dire sans contribution des énergies de vibration du réseau. Il faut aussi que la symétrie du site que l'ion occupe dans le cristal soit bien connue de façon à pouvoir prendre en compte les effets de champ cristallin. Les calculs assez récents (voir Georgescu et al) sont assez satisfaisants par rapport aux observations expérimentales.

2. Force d'oscillateur et force de raie - Transition $1s \leftrightarrow 2p$ de l'atome hydrogène

Concentrons-nous sur un cas simple: la transition $1s \leftrightarrow 2p$ de l'atome hydrogène (considéré appartenant à un système gazeux très raréfié). Cette transition est observée à $\lambda = 1216,68 \text{ \AA}$.

Une transition quantique (absorption ou émission) entre deux états électroniques est représentée par le schéma suivant:



La force d'oscillateur $f_{(ba)}$ de la transition en absorption de $|a\rangle$ vers $|b\rangle$ est liée à la "force de raie" $S_{(ba)}$ par le biais de la relation:

$$f_{(ba)} = \frac{2m_0 \cdot \omega_{b \leftrightarrow a}}{3\hbar \cdot e_0^2 \cdot g_a} S_{(ba)}.$$

Dans cette relation m_0 est la masse propre de l'électron, \hbar est la constante de Planck rationalisée (h divisée par 2π), et e_0 est la charge normalisée de l'électron (charge élémentaire de l'électron divisée par $\sqrt{4\pi\epsilon_0}$).

$S_{(ba)}$ ne dépend pas du sens suivant lequel la transition est effectuée absorption ou émission, i.e.:

$$S_{(ba)} = S_{(ab)} = e_0^2 \cdot \sum_{M_a M_b} |\langle \alpha_b J_b M_b | R | \alpha_a J_a M_a \rangle|^2.$$

α_a et α_b sont des nombres quantiques supplémentaires qui précisent mieux les états $|a\rangle$ et $|b\rangle$; J_a , J_b et M_a , M_b sont respectivement les moments angulaires totaux et les nombres quantiques de "projection" associés à J .

R est un opérateur, i.e. $R \leftrightarrow \hat{R}$. Il représente le vecteur de position et correspond à la distance moyenne, par rapport au noyau, de l'électron "i" (celui qui effectue la transition). Pour un atome à N électrons nous pouvons écrire $\hat{R} = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N \hat{r}_i$.

Pour l'atome d'hydrogène (ayant un seul électron), $R = r$ (représenté par : \hat{r}).

Lors d'une absorption (du niveau $|a\rangle$ vers le niveau $|b\rangle$), la force de raie est reliée au coefficient d'Einstein $B_{(ba)}$ par la relation suivante:

$$B_{(ba)} = \frac{4\pi^2}{3\hbar^2 \cdot g_a} \cdot S_{(ba)}.$$

Lors d'une émission (du niveau $|b\rangle$ vers le niveau $|a\rangle$), la force de raie et le coefficient d'Einstein $A_{(ab)}$ sont reliés par:

$$A_{(ab)} = \frac{4\omega^3}{3\hbar \cdot c^3 \cdot g_b} \cdot S_{(ab)} \quad ; c \approx 3 \cdot 10^8 m \cdot s^{-1}.$$

Par définition $\omega = \frac{2\pi \cdot c}{\lambda}$; alors: $A_{(ab)} = \frac{32\pi^3}{3\hbar \cdot \lambda^3 \cdot g_b} \cdot S_{(ab)}$.

Les unités (S.I. = système international) de la force de raie $S_{(ab)}$ sont les unités du produit $e_0^2 \times a_0^2$. Dans le système S.I., le facteur e_0^2 représente la charge élémentaire au carré (e^2) divisée par $4\pi\epsilon_0$ ($\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \approx 9 \times 10^9 \text{ F}^{-1} \cdot \text{m}$). Le calcul de l'élément de matrice fait intervenir a_0 au carré. Ainsi, avec les valeurs courantes pour la charge élémentaire et le rayon de la première orbite de Bohr nous pouvons calculer:

$$\left. \begin{array}{l} e \approx 1,6 \cdot 10^{-19} \text{C} \quad ; \quad e_0 = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \\ a_0 \approx 0,529 \text{Å} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{m} \end{array} \right\} \Rightarrow e_0^2 \cdot a_0^2 \approx 0,644 \cdot 10^{-48} \text{u.s.i. (Joule} \cdot \text{mètre}^3 = \text{J} \cdot \text{m}^3).$$

Si nous voulons exprimer λ en Å, en sachant que $\hbar \approx 1,054 \times 10^{-34} \text{ u.s.i.}$, il faut écrire le coefficient d'Einstein sous la forme: $A_{(ab)} = \frac{2,02 \times 10^{18}}{\lambda^3 \cdot g_b} \cdot S_{(ab)}$; λ exprimé en Å.

Ce coefficient a une dimension correspondant à l'inverse d'un temps: (seconde) $^{-1} = \text{s}^{-1}$.

Faisons le calcul de la force de raie $S_{(ab)}$ pour l'atome d'hydrogène, i.e. $R \rightarrow \hat{r}$:

$$S_{(ab)} = e_0^2 \cdot \sum_{M_a M_b} \|\langle \alpha_b J_b M_b | \hat{r} | \alpha_a J_a M_a \rangle\|^2.$$

Pour ce type de calcul il est commode d'exprimer le vecteur \mathbf{r} sur la base des harmoniques sphériques, i.e.: $r_0 = z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \cdot \|r\| \cdot Y_{10}$ et $r_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (x \pm iy) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \cdot \|r\| \cdot Y_{1\pm 1}$. Dans la suite des calculs nous écrivons habituellement: $\|r\| = r$.

Dans le cas de l'émission ce calcul est écrit en utilisant les états électroniques Φ_i (mono):

$$\|\langle \alpha_b J_b M_b | \hat{r} | \alpha_a J_a M_a \rangle\|^2 = \|\langle \Phi_{2p} | \hat{r} | \Phi_{1s} \rangle\|^2; \quad |\Phi_i\rangle = \frac{1}{r} \cdot P_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi) = R_{nl} \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Un état mono électronique Φ_i s'exprime comme un produit entre un facteur radial et un facteur angulaire dépendant de θ et de φ . Le vecteur \mathbf{r} s'exprime en fonction de $r \cdot Y_{LM}$.

Considérons l'ensemble (n' l' m') pour la fonction 2p, et (nml) pour la fonction 1s. Séparons ensuite les parties radiales des parties angulaires. Cela donne:

$$\langle \Phi_{2p} | \hat{r} | \Phi_{1s} \rangle = \langle n'l'm' | \hat{r} | nlm \rangle = \langle P_{2p} | r | P_{1s} \rangle \cdot \langle l'm' | Y_{LM} | lm \rangle.$$

Considérons d'abord les parties radiales:

$$\begin{aligned} P_{2p}(r) &= \frac{1}{2\sqrt{6}} \cdot \frac{r^2}{a_0^{3/2}} \cdot \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \quad ; \quad P_{1s}(r) = \frac{2r}{a_0^{3/2}} \cdot \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \\ \langle P_{2p} | r | P_{1s} \rangle &= \int_0^\infty \frac{1}{2\sqrt{6}} \cdot \frac{r^2}{a_0^{5/2}} \cdot \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \cdot r \cdot \frac{2r}{a_0^{3/2}} \cdot \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) dr = \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \cdot \frac{1}{a_0^4} \int_0^\infty r^4 \cdot \exp\left(-\frac{3r}{2a_0}\right) \cdot dr. \end{aligned}$$

Nous avons fait intervenir les intégrales du genre: $\int_0^{\infty} x^n \cdot \exp(-\alpha x) dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$.

Dans le cas considéré auparavant : $n = 4$ et $\alpha = (3/2) \cdot (1/a_0)$; alors le calcul donne :

$$\frac{4!}{\sqrt{6}} \cdot \frac{1}{a_0^4} \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^5 \cdot a_0^5 \approx \sqrt{\frac{5}{3}} \cdot a_0.$$

Donc dans le calcul de la force de raie, la norme carrée de la partie radiale est: $\|\langle P_{2p} | r | P_{1s} \rangle\|^2 \approx \frac{5}{3} \cdot a_0^2$.

Pour les parties angulaires, il faut calculer

$$\begin{aligned} \langle l'm' | Y_{LM} | lm \rangle &= \int_0^{\pi} \sin \theta \cdot d\theta \int_0^{2\pi} Y_{l'm'}^* \cdot Y_{LM} \cdot Y_{lm} d\varphi = \\ &= \int_{\theta \in [0, \pi]; \varphi \in [0, 2\pi]} Y_{l'm'}^* \cdot Y_{LM} \cdot Y_{lm} d\Omega, \end{aligned}$$

où $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$.

Les intégrales angulaires on les calcule de plusieurs façons différentes: avec les symboles "3j" ; avec les coefficients C^k ou bien avec les coefficients de Clebsch-Gordan.

2.1. Calcul en utilisant les symboles 3j

Les symboles 3j (voir les tables de Rotenberg) correspondent au couplage de trois moments angulaires (deux moments par rapport à un troisième).

$$\langle l'm' | Y_{LM} | lm \rangle = (-1)^{m'} \sqrt{\frac{(2l'+1) \cdot (2L+1) \cdot (2l+1)}{4\pi}} \cdot \begin{pmatrix} l' & L & l \\ -m' & M & m \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} l' & L & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Les calculs donnent des résultats qui sont différents de zéro si les conditions correspondant à la règle de triangulation sont satisfaites. Il faut, premièrement, que $-m' + M + m$ soit 0, donc $M = m' - m$ et il faut ensuite que la somme $l' + L + l$ soit un nombre entier pair. Pour une transition dipolaire électrique l'expression de "r" en harmoniques sphériques nous impose $L = 1$.

2.2. Calcul en utilisant les coefficients C^k

Les coefficients C^k correspondent directement aux intégrales que l'on recherche:

$$C^k(lm; l'm') = \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} \langle Y_{lm} | Y_{km-m'} | Y_{l'm'} \rangle.$$

Il faut observer aussi que :

$$C^k(lm; l'm') = (-1)^{m-m'} C^k(l'm'; lm).$$

Pour les harmoniques sphériques de Φ_{2p} nous avons: $l' = 1$ et $m' = +1, 0, -1$. Les Y_{lm} à considérer sont donc: Y_{11} ; Y_{10} et Y_{1-1} .

Pour Φ_{1s} : $l = 0$ et $m = 0$, donc la seule possibilité pour Y_{lm} est: Y_{00} .
En tenant compte des règles de triangulation:

$$\begin{aligned}\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \langle Y_{11} | Y_{11} | Y_{00} \rangle &= C^0(11; 00) = \frac{1}{\sqrt{3}}; \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \langle Y_{10} | Y_{10} | Y_{00} \rangle = \\ &= C^0(10; 00) = \frac{1}{\sqrt{3}} \text{ et } \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \langle Y_{1-1} | Y_{1-1} | Y_{00} \rangle = \\ &= C^0(1-1; 00) = \frac{1}{\sqrt{3}}.\end{aligned}$$

Alors : $\left(\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \langle l'm' | Y_{LM} | Y_{00} \rangle \right)^2 = \frac{1}{3}$.

Finalement, le calcul la valeur de $\langle r \rangle^2$ entre $1s$ et $2p$ donne:

$$\|\langle \Phi_{2p} | r | \Phi_{1s} \rangle\|^2 = \|\langle P_{2p} | r | P_{1s} \rangle\|^2 \cdot \|\langle l'm' | Y_{LM} | lm \rangle\|^2 \approx \frac{5}{9} a_0^2.$$

Pour les parties radiales l'intégrale n'intervient que par une seule valeur. Les trois intégrales pour les parties angulaires représentent chacune une possibilité d'absorption suivant la polarisation des photons (selon x, y , ou z). C'est pour cela que nous avons utilisé le symbole $\sum_{M_a M_b}$.

On se rappelle que : $S_{(ab)} = e_0^2 \cdot \sum_{M_a M_b} \|\langle \alpha_b J_b M_b | \hat{r} | \alpha_a J_a M_a \rangle\|^2$.

La somme de ces trois possibilités, correspondant aux trois intégrales, est: $1/3 + 1/3 + 1/3 = 1$.

Nous obtenons ainsi la force de raie de la transition $1s \rightarrow 2p$:

$$S_{(1s \rightarrow 2p)} = e^2 \cdot \sum \|\langle \Phi_{2p} | \hat{r} | \Phi_{1s} \rangle\|^2 = \frac{5}{3} \cdot e_0^2 \cdot a_0^2.$$

2.3. Calcul en utilisant les coefficients de Clebsch-Gordan

Les coefficients de Clebsch-Gordan sont reliés aux symboles "3j" par la relation suivante:

$$\frac{(-1)^{j_1 - j_2 - m}}{\sqrt{2j + 1}} \cdot \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j - m \rangle = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix}.$$

Les j et m jouent le rôle de j_3 et m_3 dans l'expression générale du symbole "3j".

Les tables des coefficients de Clebsch-Gordan nous indiquent que: $\langle 11 - 1 - 1 | 1100 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}$.

Donc le premier symbole "3j" que nous avons calculé auparavant pourrait être obtenu aussi par l'utilisation des coefficients de Clebsch-Gordan:

$$\frac{(-1)^{1-1-0}}{\sqrt{2 \cdot 0 + 1}} \cdot \langle 11 - 11 | 1100 \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^0}{\sqrt{1}} \frac{1}{\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

3. Coefficients d'Einstein

Lors d'une transition de type émission $b \rightarrow$ le temps de vie radiatif τ du niveau de départ b est définie en tant qu'inverse du coefficient $A_{(ab)}$ d'Einstein. La transition $1s \leftrightarrow 2p$ de l'hydrogène est observée à: $\lambda = 1216,68 \text{ \AA}$ et le niveau initial $2p$, en tant qu'orbitale de type p , a une dégénérescence de 3, donc $g_{2p} = 3$.

Dans ce cas on peut calculer le coefficient d'Einstein à l'émission spontanée, et on obtient:

$$A_{(1s,2p)} = \frac{2,02 \cdot 10^{18} \cdot S_{(a,b)}}{\lambda^3 (\text{\AA}) g_{2p}} \approx 6,25 \cdot 10^8 s^{-1}.$$

Du coefficient $A_{(1s2p)}$ on tire le temps de vie radiatif du niveau $2p$: $\tau = (A_{(1s,2p)})^{-1} \approx 0,16 \cdot 10^{-8} \text{ s}$.

A partir de la connaissance de la force de raie $S_{(1s \rightarrow 2p)} = S_{(2p \rightarrow 1s)}$ on peut accéder directement à la valeur de la force d'oscillateur à l'absorption $f_{(2p1s)}$. Pour cela nous allons suivre la même démarche que précédemment en exprimant les facteurs constants de la formule générale dans le système S.I., en ne conservant que les variables λ et g_a dans l'expression finale. Compte tenu du produit $e_0^2 \times a_0^2$ (unité de $S_{(ba)}$), nous avons:

$$f_{(ba)} = \frac{2m_0 \cdot 2\pi\nu}{3\hbar \cdot e_0^2 \cdot g_a} \cdot S_{(ba)} = \frac{2m_0 \cdot 2\pi \frac{c}{\lambda}}{3\hbar \cdot e_0^2 \cdot g_a} \cdot S_{(ba)} \approx \frac{303,7}{\lambda(\text{\AA}) \cdot g_a} \cdot S_{(ba)} \text{ (en unités } e_0^2 \cdot a_0^2 \text{)}$$

Pour l'atome d'hydrogène cela correspond à l'absorption du niveau $1s$ vers le $2p$:

$$f_{(2p1s)} = \frac{2m_0 \cdot 2\pi\nu_{2p \leftarrow 1s}}{3\hbar \cdot e_0^2 \cdot g_{1s}} \cdot \frac{5}{3} = \frac{2m_0 \cdot 2\pi \frac{c}{\lambda_{2p \leftarrow 1s}}}{3\hbar \cdot e_0^2 \cdot g_{1s}} \cdot \frac{5}{3} \approx \frac{303,7}{\lambda_{2p \leftarrow 1s} (\text{\AA}) \cdot g_{1s}} \cdot \frac{5}{3}.$$

Lors de la transition $1s \rightarrow 2p$, le niveau $1s$ étant non dégénéré, on a $g_{1s} = 1$ et $\lambda_{2p \leftarrow 1s} = 1216,68 \text{ \AA}$.

Dans ces conditions, à l'absorption la force d'oscillateur $f_{(2p1s)}$ est égale à $\approx 0,416$.

On vérifie facilement que la force d'oscillateur " f " est sans dimension.

De cette valeur, on peut aussi extraire la force d'oscillateur à l'émission à l'aide de la relation:

$$f_{(1s2p)} = -\frac{g_{1s}}{g_{2p}} \cdot f_{(2p1s)} \approx -\frac{1}{3} \cdot 0,416 \approx -0,139.$$

L'émission est de signe contraire à l'absorption ; cette dernière est prise positive.

La force de raie permet aussi le calcul du coefficient d'Einstein en absorption:

$$B_{(ba)} = \frac{4\pi^2}{3\hbar^2 \cdot g_a} \cdot S_{(ba)}.$$

Soit pour la transition $1s \rightarrow 2p$ le coefficient d'Einstein est : $B_{(2p1s)} = \frac{4\pi^2}{3(1,054 \cdot 10^{-34})^2 \cdot 1} \cdot S_{(2p1s)}$,

$$B_{(2p1s)} \approx \frac{4\pi^2}{3 \cdot 1,1 \cdot 10^{-68}} \cdot \frac{5}{3} \cdot 0,644 \cdot 10^{-48} \approx 1,26 \cdot 10^{21} \text{ m}^3 \cdot \text{J}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}.$$

Le coefficient d'émission spontanée s'exprime en seconde⁻¹. Celui qui caractérise l'absorption est en $m^3 \times J^{-1} \times s^{-2}$. En fait, la notion même d'absorption implique

que le système sur lequel on réalise l'expérience se trouve soumis à un faisceau photonique (de lumière monochromatique). Ce faisceau délivre au niveau de l'échantillon un nombre constant de photons à une fréquence donnée et fixe. Dans ces conditions, nous sommes conduits à introduire la quantité: $U_\omega d\omega$ (densité spectrale d'énergie).

$U_\omega d\omega$ représente l'énergie de n photons (d'énergie individuelle $\varepsilon = \hbar\omega$) par unité de volume et dans l'intervalle allant de ω à $\omega+d\omega$:

$$U_\omega = n \cdot \frac{\hbar \cdot \omega^3}{\pi^2 \cdot c^3} = n \cdot \frac{2\hbar}{\pi \cdot \lambda^3}$$

L'énergie par unité de volume est parfois définie en fréquence ν et non pas en pulsation ω . Comme $\omega = 2\pi\nu$, et que: $U_\omega d\omega = U_\nu d\nu$, les expressions de U_ω , et U_ν sont reliées par: $U_\omega = U_\nu/2\pi$. Les expressions qui relient les coefficients sont:

$$B_{(ba)} = \frac{\pi^2 \cdot c^3}{\hbar \cdot \omega^3} \cdot A_{(ba)}.$$

Donc, en revenant au calcul précédent U_ω est: $U_\omega = n \cdot \frac{0,67 \cdot 10^{-4}}{\lambda^3(\text{\AA})} \quad J \cdot s \cdot m^{-3}$

Dimensionnellement, on voit alors que le produit correspond à:

$$[B_{(ba)} \cdot U_\omega]_{dim} = \langle m^3 \cdot J \cdot s^{-2} \rangle \cdot \langle J \cdot s \cdot m^{-3} \rangle = \langle s^{-1} \rangle.$$

Le produit $B_{(ba)} \times U_\omega$ a comme $A_{(ab)}$ la dimension de l'inverse d'un temps. Pour l'atome d'hydrogène, avec $\lambda = 1216,18 \text{ \AA}$ les calculs conduisent à:

$$U_\omega = n \cdot \frac{0,67 \cdot 10^{-4}}{(1,21618 \cdot 10^3)^3} \approx n \cdot 3,7 \cdot 10^{-14} \quad J \cdot s \cdot m^{-3}.$$

Le coefficient d'Einstein d'absorption stimulée $\times U_\omega$ donne :

$$B_{(2p1s)} \cdot U_\omega \approx 1,26 \cdot 10^{21} \cdot n \cdot 3,7 \cdot 10^{-14} \approx n \cdot 4,66 \cdot 10^7 \quad \langle s^{-1} \rangle.$$

On observe sans difficulté particulière qu'on obtient la même valeur de la force d'oscillateur en absorption si on utilise la relation qui exprime cette force en fonction du coefficient d'Einstein.

Pour la transition $1s \rightarrow 2p$, avec $\lambda = 1216,18 \text{ \AA}$ cela donne: $f_{(2p,1s)} = 0,415$.

Voici les "détails" du calcul :

$$\begin{aligned} f_{(2p,1s)} &= \frac{m_0 \cdot \hbar \cdot \omega_{2p \leftarrow 1s}}{2\pi^2 \cdot e_0^2} \cdot B_{(2p1s)} = \frac{m_0 \cdot \hbar \cdot 2\pi \cdot c}{2\pi^2 \cdot \frac{e^2}{4\pi \cdot \varepsilon_0} \cdot \lambda_{2p \leftarrow 1s}} \cdot B_{(2p1s)} \\ f_{(2p,1s)} &\approx \frac{(9,1 \cdot 10^{-31}) \cdot (1,054 \cdot 10^{-34}) \cdot 2 \cdot (3 \cdot 10^8)}{2(3,14) \cdot (1,6 \cdot 10^{-19})^2 \cdot (9 \cdot 10^9) \cdot \lambda_{(\text{\AA})} \cdot (10^{-10})} \cdot (1,26 \cdot 10^{21}) \\ f_{(2p,1s)} &\approx \frac{505}{\lambda_{(\text{\AA})}} = \frac{505}{1216,18} \approx 0,415. \end{aligned}$$

Pareillement que les forces d'oscillateurs, les coefficients d'Einstein sont reliés entre eux par les dégénérescences des niveaux. Il est donc possible de calculer le coefficient d'Einstein en émission stimulée connaissant celui en absorption. Ainsi: $g_a \times B_{(ba)} = g_b \times B_{(ab)}$. Dans notre cas particulier cela donne :

$$g_{1s} \times B_{(2p,1s)} = g_{2p} \times B_{(1s,2p)} \Rightarrow 1 \times 1, 26 \times 10^{21} = 3 \times B_{(1s,2p)}.$$

Finalement on obtient : $B_{(1s,2p)} = 0,42 \cdot 10^{21} m^3 \times J^{-1} \times s^{-2}$.

4. Probabilité de transition par unité de temps

Il existe une troisième voie de mise en équation de ces phénomènes qui consiste à les formuler en terme de probabilité de transition par unité de temps. Cette dernière manière de procéder est plus commode lorsque l'on souhaite faire un bilan. Ce bilan se réalise entre l'énergie qui entre dans le système à l'absorption et celle qui en sort à l'émission, peu importe que ça soit sous forme spontanée ou stimulée.

Les formules pour la probabilité d'émission spontanée généralise celles des coefficients:

$$W_{spont}^{(a \leftarrow b)} = A_{(a \leftarrow b)} = \frac{4\omega_{a \leftarrow b}^3}{3\hbar \cdot c^3 \cdot g_b} \cdot S_{(ba)}.$$

Nous avons donc :

$$W_{spont}^{(1s \leftarrow 2p)} = A_{(1s \leftarrow 2p)} = \frac{4\omega_{1s \leftarrow 2p}^3}{3\hbar \cdot c^3 \cdot g_{2p}} \cdot S_{(2p1s)} \approx 6,25 \cdot 10^8 \langle s^{-1} \rangle.$$

Pareillement, pour les probabilités d'absorption et d'émission stimulée:

$$W_{abs}^{(b \leftarrow a)} = W_{stim}^{(b \leftarrow a)} = B_{(ba)} \cdot U_\omega = \frac{4\omega^3 \cdot n}{3\hbar \cdot c^3 \cdot g_a} \cdot S_{(ab)}.$$

En effet:

$$W_{abs}^{(2p \leftarrow 1s)} = W_{stim}^{(2p \leftarrow 1s)} = B_{(2p1s)} \cdot U_\omega = n \cdot 4,66 \cdot 10^7 \langle s^{-1} \rangle.$$

Considérons les relations:

$$W_{abs}^{(b \leftarrow a)} \cdot g_a = W_{stim}^{(b \leftarrow a)} \cdot g_a = W_{abs}^{(a \leftarrow b)} \cdot g_b = W_{stim}^{(a \leftarrow b)} \cdot g_b.$$

Dans le cas $1s \rightarrow 2p$ cela donne:

$$\begin{aligned} W_{abs}^{(2p \leftarrow 1s)} \cdot 1 &= W_{stim}^{(2p \leftarrow 1s)} \cdot 1 = W_{abs}^{(1s \leftarrow 2p)} \cdot 3 = W_{stim}^{(1s \leftarrow 2p)} \cdot 3 \\ W_{stim}^{(1s \leftarrow 2p)} &= \frac{W_{abs}^{(2p \leftarrow 1s)} \cdot 1}{3} = n \cdot \frac{4,66 \cdot 10^7}{3} \approx n \cdot 1,55 \cdot 10^7 \langle s^{-1} \rangle. \end{aligned}$$

5. Bibliographie

- [1] S. Georgescu, V. Lupei, A. Petraru, C. Hapenciuc, C. Florea, C. Naud, et C. Porte : Excited-state-absorption in low concentrated Er:YAG crystals for pulsed and cw pumping; J. of Luminescence, v. 1183, pp. 281-292 (2001).

- [2] M. Rotenberg, R. Bivins, N. Metropolis, Jr. K. Wooten: "The $3j$ and $6j$ symbols"; Massachusetts Institute of Technology Press, Cambridge - Massachusetts (1959).

Cristian FLOREA

Laboratoire SIGTEL (SIGNAUX et TÉLÉCOMMUNICATIONS)
École Supérieure d'Ingénieurs en Électrotechnique et Électronique,
Groupe ÉSIÉÉ – Paris, France.