

COLLÈGE DE FRANCE

COURS DE PHYSIQUE

ATOMIQUE ET MOLÉCULAIRE

Claude COHEN-TANNOUDJI

ANNÉE SCOLAIRE : 1988 - 1989

TABLE DES MATIÈRES

Introduction générale

- Thème choisi pour le cours 1988-89 I.1
- Quelques rappels de mécanique quantique I.1
- Importance des cohérences quantiques en physique atomique et moléculaire I.3
- Cohérences quantiques et corrélations I.4
- Cohérences quantiques et théorie de la mesure I.5
- Plan général du cours I.7

Etude d'un exemple simple : effet de l'émission spontanée d'un photon sur les cohérences quantiques de l'atome émetteur

- Introduction II.1
- 1 - Rappels de mécanique quantique II.2
- 2 - Application à l'émission spontanée II.3
- 3 - Etat initial d'impulsions bien définie II.5
- 4 - Etat initial du centre de masse : superposition linéaire de 2 paquets d'ondes bien séparés spatialement III.1
- 5 - Etat initial du centre de masse : superposition linéaire de 2 ondes planes III.7

Autre exemple de destruction des cohérences spatiales

Diffusion de photons ou de particules légères

- Introduction IV.1
- 1. Variation de la cohérence spatiale de la particule cible après un processus de diffusion IV.1
- 2. Effet de plusieurs processus de diffusion : temps moyen de destruction des cohérences spatiales de la particule cible IV.4
- 3. Rappels classiques sur le mouvement d'une particule lourde subissant des collisions avec des particules légères IV.5

- | | |
|---|------|
| 4. Recriture du temps de destruction des cohérences spatiales sous plusieurs formes équivalentes | IV.7 |
| 5. Discussion physique | V.1 |
| <u>Appendice</u> . Fonctions caractéristiques et représentation de Wigner associées à l'opérateur densité d'une particule | V.7 |

Etude quantitative de la destruction des cohérences spatiales d'une particule Brownienne.

- | | |
|--|-------|
| 1. Equation cinétique pour l'opérateur densité de la particule | VI.1 |
| 2. Résolution d'une équation aux dérivées partielles linéaire du 1 ^{er} ordre par la méthode des caractéristiques | VI.3 |
| 3. Première application : évolution temporelle de la cohérence spatiale globale à une distance u , $F(u, t)$ | VI.6 |
| 4. Deuxième application : solution de l'équation du mouvement de $C(u, v, t)$ | VI.8 |
| 5. Etude complète de l'évolution temporelle d'une particule Brownienne partant d'un état initial gaussien | VII.1 |

Etablissement de l'équation cinétique des mouvement Brownien sur un modèle simple

- | | |
|---|--------|
| 1. Présentation du modèle - Hamiltonien | VIII.1 |
| 2. Choix des paramètres de couplage | VIII.3 |
| <u>Appendice</u> . Rappels sur l'équation pilote décrivant la relaxation d'un système S couplé à un réservoir R | VIII.7 |
| 3. Moyennes à 2 temps de la force de Langevin | IX.1 |
| 4. Equation pilote | IX.4 |
| 5. Généralisation au cas d'une particule Brownienne dans un potentiel harmonique | IX.6 |

Cohérences quantiques et dissipation pour un oscillateur harmonique sous-amorti

1. Comment préparer un oscillateur harmonique dans une superposition linéaire de 2 états cohérents X.1
2. Etude de la dissipation dans la base des états propres de l'oscillateur X.3
3. Autre écriture possible de l'équation pilote X.4
4. Solution de l'équation d'évolution de C_N X.6
5. Interprétation physique X.8

Thème choisi pour le cours 1988-89

Cohérences quantiques et dissipation

Objectifs

- Comprendre comment une superposition linéaire de 2 états $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ d'un système quantique est transformée en mélange statistique par couplage dissipatif avec un environnement, et ce d'autant plus rapidement que $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont macroscopiquement différents.
- Analyser quelques exemples physiques simples : atome couplé au rayonnement, mouvement brownien...
- Discuter les implications de ces résultats pour la théorie quantique de la mesure.

Quelques rappels de mécanique quantiquePrincipe de superposition

- Les états sont linéairement superposables

$$|\psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle \quad (1.1)$$

Propriétés physiques du système dans l'état $|\psi\rangle$ qui dépendent de la phase relative de c_1 et c_2 et le rendent différent d'un mélange statistique des états $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ avec des poids $|c_1|^2$ et $|c_2|^2$.

"Interférences quantiques" entre les amplitudes associées à $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$

- Exemple d'un spin 1/2

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |\uparrow\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |\downarrow\rangle \quad (1.2)$$

Etat propre de la composante $\vec{u} \cdot \vec{S}$ du spin sur la direction \vec{u} d'angles polaires θ et φ , de valeur propre $+\hbar/2$. La phase relative φ a un sens physique précis.

Description de l'état du système par un opérateur densité ρ

- Description plus générale que celle utilisant un vecteur d'état $|\psi\rangle$, car elle s'applique aussi bien au cas où la connaissance de l'état du système est complète (cas pur), qu'à celui où cette connaissance est incomplète (mélange statistique d'états).

- Propriétés générales de ρ

- $\rho = \rho^\dagger$ (1.3)
- $\text{Tr} \rho = 1$ (1.4)
- $\langle u | \rho | u \rangle \geq 0 \quad \forall |u\rangle$ (1.5)
- $\langle A \rangle = \text{Tr} \rho A$ (1.6)
- $\dot{\rho}(t) = \frac{i}{\hbar} [H, \rho(t)] \rightarrow \rho(t) = e^{-iHt/\hbar} \rho(0) e^{iHt/\hbar}$ (1.7)

- Diagonalisation de ρ . D'après les propriétés précédentes, on peut écrire

- $\rho = \sum_i \pi_i |X_i\rangle \langle X_i|$ (1.8)
 - π_i réel, ≥ 0 $\sum_i \pi_i = 1$ (1.9)
 - $\langle X_i | X_j \rangle = 0$ si $\pi_i \neq \pi_j$ $\langle X_i | X_i \rangle = 1$ (1.10)
 - $\rho(t) = \sum_i \pi_i |X_i(t)\rangle \langle X_i(t)|$ avec $|X_i(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |X_i\rangle$ (1.11)
- les π_i ne changent pas au cours d'une évolution hamiltonienne (unitaire) de ρ

D'après (1.8), ρ peut être considéré comme un mélange statistique des états (orthonormés) $|X_i\rangle$ avec des poids π_i

- Propriété caractéristique du cas pur.

Tous les π_i sont nuls sauf un, qui vaut 1

$$\rho = |X_i\rangle \langle X_i| \quad \rightarrow \quad \rho^2 = \rho \quad (1.12)$$

ρ est un projecteur

- Entropie statistique d'un état, caractérisant l'information manquante sur cet état

$$S = -k_B \text{Tr} \rho \text{Log} \rho = -k_B \sum_i \pi_i \text{Log} \pi_i \quad (1.13)$$

- Pour un cas pur, $S = 0$ (aucune information manquante)
- Pour un mélange statistique, complètement indéterminé de N états, les π_i sont égaux à $1/N$ et

$$S = -k_B \sum_{i=1}^N \frac{1}{N} \text{Log} \frac{1}{N} = k_B \text{Log} N \quad (1.14)$$

Valeur maximale de S dans un ~~sons~~ espace de dimension N
Aucune information sur l'état du système

- S est invariant dans une évolution hamiltonienne (conséquence de l'invariance des π_i dans une telle évolution)

Matrice densité - Cohérence quantique entre 2 états

- Matrice représentant ρ dans une base orthonormée $\{|u_n\rangle\}$

$$\rho_{nn'} = \langle u_n | \rho | u_{n'} \rangle \quad (1.15)$$

- Si ρ est un cas pur, $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$ avec $|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle$, et on a

$$P_{nn'} = \langle u_n | \Psi \rangle \langle \Psi | u_{n'} \rangle = c_n c_{n'}^* \quad (1.16) \quad \text{I-3}$$

- Si ρ est un mélange statistique, $\rho = \sum_{\alpha} P_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}|$ des états $|\Psi_{\alpha}\rangle = \sum_n c_n^{\alpha} |u_n\rangle$ avec des poids P_{α} , on a

$$P_{nn'} = \sum_{\alpha} P_{\alpha} c_n^{\alpha} c_{n'}^{\alpha *} \quad (1.17)$$

- "Population" de l'état $|u_n\rangle$: probabilité de trouver le système dans l'état $|u_n\rangle$

$$P_{nn} = \sum_{\alpha} P_{\alpha} |c_n^{\alpha}|^2$$

- Pour $n \neq n'$, $c_n^{\alpha} c_{n'}^{\alpha *}$ est un nombre complexe dont l'argument dépend en général de α

Si $P_{nn'}$ est non nul, cela veut dire que les contributions des divers états du mélange ne se moyennent pas à zéro. Il y a une certaine cohérence entre ces contributions, d'où le nom de cohérence quantique entre $|u_n\rangle$ et $|u_{n'}\rangle$ parfois donné à $P_{nn'}$.

Importance des cohérences quantiques en physique atomique et moléculaire

- De nombreuses expériences utilisent un champ électromagnétique oscillant avec une phase bien définie pour exciter un système atomique ou moléculaire : expériences de RMN, de spectroscopie laser.

L'oscillation forcée du dipôle magnétique ou électrique s'effectue alors avec une phase bien définie, et la cohérence quantique entre les 2 états de la transition est alors non nulle.

↳ Impossibilité de décrire le système uniquement en termes de populations (exemple de l'oscillation de Rabi).

- Même si le champ optique incident n'a pas une phase bien définie, des "cohérences Zeeman" relatives à une paire de sous-niveaux Zeeman de l'état inférieur ou supérieur, peuvent apparaître pour certaines polarisations de la lumière incidente : par exemple, excitation à partir d'un sous-niveau Zeeman de l'état inférieur d'une superposition linéaire bien définie de 2 sous-niveaux Zeeman de l'état supérieur.

Exemples d'effets physiques liés aux cohérences Zeeman : résonances de croisements de niveaux (effets Hanle, Francken), battements quantiques, diffusion multiple cohérente ...

- Relaxation, due au couplage avec l'environnement (collisions, émission spontanée ...)

Les équations de Bloch (pour la R.M.N.), les équations de Bloch optiques (pour la spectroscopie laser), décrivent l'évolution de la matrice densité atomique sous l'effet combiné du couplage avec le champ cohérent incident et des processus de relaxation.

2 types de temps de relaxation apparaissent clairement dans ces équations : temps T_1 relatifs aux différences de population, temps T_2 relatifs aux cohérences quantiques entre états (terminologie T_1 et T_2 introduite initialement en R.M.N.)

- Fragilité des cohérences

les temps T_2 sont souvent beaucoup plus courts que les temps T_1 .

Exemple des collisions déphasantes, qui déphasent l'oscillation du dipôle entre a et b, sans transferts entre a et b.

Autre exemple: T_2 inhomogène dû à une dispersion des fréquences propres. L'amortissement des cohérences n'apparaît alors que sur ensemble de systèmes, et les cohérences peuvent éventuellement être remises en phase (méthode des échos de spins).

Cohérences quantiques et corrélations

Etude d'un exemple simple.

2 spins 1/2 A et B dans l'état singulet de spins

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|A\uparrow B\downarrow\rangle - |A\downarrow B\uparrow\rangle] \tag{1.18}$$

$|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$: états propres de S_z

Corrélations entre les 2 spins

- D'après (1.18), si l'un des 2 spins est dans l'état \uparrow , l'autre est certainement dans l'état \downarrow (corrélations parfaites)

- De plus, on peut vérifier que l'état (1.18) peut aussi s'écrire

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|A\rightarrow B\leftarrow\rangle - |A\leftarrow B\rightarrow\rangle] \tag{1.19}$$

ou $|\rightarrow\rangle$ et $|\leftarrow\rangle$ sont les états propres de S_x , et plus généralement

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|A\nearrow B\searrow\rangle - |A\searrow B\nearrow\rangle] \tag{1.20}$$

ou $|\nearrow\rangle$ et $|\searrow\rangle$ sont les états propres d'une composante quelconque $\vec{u} \cdot \vec{S}$

↳ Si l'un des 2 spins pointe dans une direction quelconque, l'autre pointe dans la direction opposée.

Paradoxe E.P.R. (Einstein - Podolsky - Rosen)

- Si les 2 spins sont très éloignés l'un de l'autre et dans l'état (1.18), et qu'on mesure une composante quelconque $\vec{u} \cdot \vec{S}_A$ de \vec{S}_A , on en déduit, grâce à la corrélation précédente, et sans aucune mesure sur \vec{S}_B qui est très loin, quelle est la valeur de $\vec{u} \cdot \vec{S}_B$.

Point de départ de l'argumentation de E.P.R. qui en déduisent, moyennant des hypothèses supplémentaires de séparabilité et de localité, que la mécanique quantique est une théorie incomplète.

- Tentation d'introduire des variables supplémentaires, non contenues dans la description (1.18) et qui pourraient expliquer les corrélations entre les 2 spins comme des corrélations classiques résultant d'une cause commune fluctuant dans le passé.

- Inégalités démontrées par Bell auxquelles doivent satisfaire les résultats de mesure si les variables

supplémentaires sont locales et décrites par une densité de probabilité définie positive. Contradiction entre ces inégalités et les prédictions de la mécanique quantique

- Violation expérimentale de ces inégalités de Bell. C'est la mécanique quantique qui a raison.

Les corrélations entre les 2 spins dans l'état (1.18) sont impossibles à comprendre en termes classiques. Il est impossible de considérer séparément chacun des 2 spins comme une entité ayant des propriétés propres

- La situation serait complètement différente et beaucoup plus proche d'une situation classique si, au lieu de la superposition linéaire (1.18), on considérait un mélange statistique des états $|A\uparrow B\downarrow\rangle$ et $|A\downarrow B\uparrow\rangle$ avec des poids égaux à $1/2$.

Les "corrélations quantiques non séparables" entre les 2 spins sont donc étroitement liées à l'existence d'une cohérence quantique entre les états $|A\uparrow B\downarrow\rangle$ et $|A\downarrow B\uparrow\rangle$.

Cohérences quantiques et théorie de la mesure

Mesure idéale

- Appareil de mesure M mesurant sur un système S la grandeur $A = \sum_n a_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$ de S .
- Si initialement S est dans un état propre $|\varphi_n\rangle$ de A et M dans un état quelconque $|\psi(0)\rangle$, on s'attend à ce que le système global $S+M$ évolue de la manière suivante

$$|\varphi_n\rangle \otimes |\psi(0)\rangle \longrightarrow |\varphi_n\rangle \otimes |M_n\rangle \quad (1.21)$$

S ne change pas d'état (état propre de la mesure) et M évolue vers un état $|M_n\rangle$ parfaitement corrélé avec $|\varphi_n\rangle$

- Si M est dans $|M_n\rangle$, ceci entraîne que S est dans $|\varphi_n\rangle$
- Les états $|M_n\rangle$ et $|M_p\rangle$ de M correspondant à des valeurs propres différentes a_p et a_n de A sont macroscopiquement différents (2 positions distinctes de l'aiguille de l'appareil de mesure)

Conséquence du principe de superposition

- S et M sont supposés obéir aux lois de la mécanique quantique. L'évolution associée à (1.21) est décrite par une équation de Schrödinger.

- Si initialement S est dans l'état $\sum_n c_n |\varphi_n\rangle$ et M dans l'état $|\psi(0)\rangle$, la linéarité de l'équation de Schrödinger pour $S+M$ entraîne, compte tenu de (1.21), que

$$\sum_n c_n |\varphi_n\rangle \otimes |\psi(0)\rangle \longrightarrow \sum_n c_n |\varphi_n\rangle \otimes |M_n\rangle \quad (1.22)$$

↳ Cohérences quantiques entre $|\varphi_n\rangle \otimes |M_n\rangle$ et $|\varphi_p\rangle \otimes |M_p\rangle$

- Les corrélations entre S et M décrites par (1.22) peuvent être du type de celles rencontrées dans l'étude du paradoxe E.P.R. Il peut arriver par exemple que (1.22) puisse être réécrit sous une forme équivalente

$$\sum_n c_n |\varphi_n\rangle \otimes |M_n\rangle = \sum_y d_y |\chi_y\rangle \otimes |M'_y\rangle \quad (1.23)$$

où les $|\chi_y\rangle$ sont les états propres d'une autre observable $B = \sum_y b_y |\chi_y\rangle \langle \chi_y|$ de S , ne commutant pas avec A , et où les $|M'_y\rangle$ sont un ensemble d'états de M corrélés avec les $|\chi_y\rangle$

- Ambiguïté : M mesure-t-il A ou B ?

Deuxième difficulté : peut-il exister des cohérences quantiques entre des états macroscopiquement différents comme $|\varphi_n\rangle \otimes |M_n\rangle$ et $|\varphi_p\rangle \otimes |M_p\rangle$?

Exemple du "chat de Schrödinger"

Le point de vue orthodoxe (Copenhague) :

- Les appareils de mesure sont classiques et n'obéissent pas à la mécanique quantique
- 2 types d'évolution pour S
 - (i) Evolution unitaire, réversible, entre 2 observations.
 - (ii) Evolution non unitaire, irréversible, lors d'une mesure.

- Evolution de S , partant de l'état $\sum c_n |\varphi_n\rangle$, lors d'une mesure de A (les valeurs propres a_n de A sont supposées pour simplifier non dégénérées).

- On peut trouver le résultat a_n avec la probabilité $|c_n|^2$
- Si on trouve le résultat a_p , l'état du système S passe de $\sum_n c_n |\varphi_n\rangle$ à $|\varphi_p\rangle$. Réduction du paquet d'ondes

$$\sum_n c_n |\varphi_n\rangle \longrightarrow |\varphi_p\rangle \quad (1.24)$$

- Si M effectue la mesure et qu'on n'observe pas le résultat, l'état final de S est un mélange statistique des états $|\varphi_n\rangle$ avec des poids $|c_n|^2$

$$\rho_{avant} = \sum_n \sum_{n'} c_n c_{n'}^* |\varphi_n\rangle \langle \varphi_{n'}| \longrightarrow \rho_{après} = \sum_n |c_n|^2 |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (1.25)$$

Notons que dans la transformation (1.25) les cohérences quantiques entre $|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_{n'}\rangle$ ont été détruites. Notons également qu'une telle transformation s'accompagne d'une augmentation d'entropie, puisque $S_{avant} = 0$ si ρ_{avant} est un cas pur, alors que $S_{après}$ est positif.

Autre approche, développé notamment par Zurek, et qui sera discuté dans le cours de cette année

- Les appareils de mesure M obéissent à la mécanique quantique

- Le système $S + M$ n'est pas isolé. Il est couplé à un environnement E . La prise en compte de ce couplage permet de résoudre, au moins partiellement, les difficultés mentionnées plus haut.

(i) L'interaction entre M et E privilégie une base particulière de M , la base des états propres de l'observable M de \mathcal{M} qui commute avec l'hamiltonien d'interaction H_{ME} entre M et E . (Dans la base des états propres de cette "observable P.N.D.", le T_1 dû au couplage H_{ME} est beaucoup plus long que le T_2)

L'observable de S qui est mesurée par M est l'observable S qui est corrélée avec M . On peut montrer que les corrélations introduites entre S et M par l'interaction entre S et M ne sont pas détruites par l'interaction entre M et E , alors que les corrélations relatives à d'autres paires d'observables corrélées S' et M' de S et M sont très rapidement détruites. L'ambiguïté, mentionnée plus haut, sur ce que mesure M est donc levée.

(ii) Les cohérences quantiques entre les états macroscopiquement différents $|\varphi_n\rangle \otimes |M_n\rangle$ et $|\varphi_p\rangle \otimes |M_p\rangle$ (où les $|M_n\rangle, |M_p\rangle, \dots$ sont les états propres de l'observable privilégiée M de \mathcal{M}) sont très rapidement détruites par le couplage entre M et E .

L'évolution décrite ^(par) (1.22) et due au couplage entre S et M doit donc être complétée par l'évolution suivante due au couplage entre M et E

$$\sum_n \sum_p c_n c_p^* |\varphi_n\rangle \langle \varphi_p| \otimes |M_n\rangle \langle M_p| \longrightarrow \sum_n |c_n|^2 |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \otimes |M_n\rangle \langle M_n| \quad (1.26)$$

L'interaction entre M et E brouille très vite les phases relatives entre c_n et c_p , mais ne perturbe que très lentement les modules $|c_n|^2$.

L'interaction entre M et E confère donc aux corrélations entre S et M un caractère beaucoup plus classique.

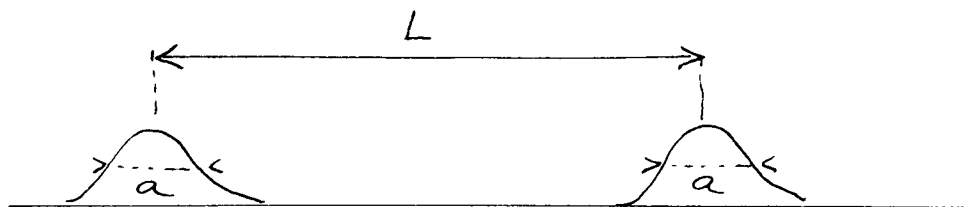
- Insistons sur le fait que l'approche précédente ne résout pas tous les problèmes relatifs à la mesure. Lors de la mesure, on observe en effet un état bien particulier du mélange statistique (1.26). Quel est le mécanisme qui fixe le choix d'un tel état ?

Plan général du cours

1^{ère} Partie

- Etude, sur des modèles simples, du temps de relaxation

d'une cohérence quantique entre 2 états nettement distincts. Par exemple, étude de l'évolution d'une particule se trouvant initialement dans une superposition de 2 paquets d'ondes, la distance L entre les centres des 2 paquets d'ondes étant plus grande que la largeur a de chaque paquet d'ondes.



Montrer que la cohérence entre les 2 paquets d'ondes est détruite avec un temps L^2/l_0^2 fois plus court que les temps caractérisant l'évolution de chaque paquet d'ondes. Interpréter physiquement un tel résultat et identifier les mécanismes ainsi que l'échelle caractéristique l_0 .

2^{ème} partie

Discuter quelques modèles simples de système S , d'appareil de mesure M et d'environnement E

Introduire la notion de base privilégiée de M à partir de la forme de l'interaction H_{ME} .

Montrer l'existence de "règles de superselection" interdisant à M d'être dans une superposition linéaire d'états propres de l'observable privilégiée

Bibliographie

- Mécanique Quantique, Opérateur Densité, Entropie
 - C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, Mécanique Quantique Hermann, Paris 1973, chapitre III E, Complément E_{III}
 - R. Balian, Cours de Physique Statistique à l'École Polytechnique, Ellipses, Paris 1982, chapitres 2 et 3
- Paradoxe Einstein-Podolsky-Rosen
 - Colloque de la Fondation Hugot du Collège de France sur les Implications Conceptuelles de la Physique Quantique Journal de Physique, Colloque C2, Tome 42, Mars 1981
 - Articles de F. Laloe, J. Bell, A. Aspect, A. Shimony, B. d'Espagnat
- Articles de Zurek
 - W. H. Zurek Phys. Rev. D 24, 1516 (1981)
 - Phys. Rev. D 26, 1682 (1982)

17.1.89

Etude d'un exemple simple

Effet de l'émission spontanée d'un photon
sur les cohérences quantiques de l'atome émetteur

Introduction

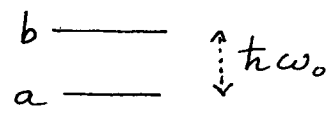
- Atome à 2 niveaux
 - Degrés de liberté internes
 - $\Gamma =$ Largeur naturelle de $b =$ Temps d'émission spontanée à partir de $b = 1/\tau$ (τ : Durée de vie radiative de b)
 - Degrés de liberté externes (ou de translation)
 - Position \vec{r} , Impulsion \vec{p} du centre de masse
 - Mass totale de l'atome: M
- A l'instant $t=0$, atome dans l'état excité b ; état du centre de masse décrit par l'opérateur densité ρ_0

Après un temps de l'ordre de quelques Γ^{-1} , atome dans l'état inférieur a après avoir émis un photon. Quel est son nouvel état externe ρ ?

Si initialement il y a des "cohérences spatiales" $\langle \vec{r}' | \rho_0 | \vec{r}'' \rangle \neq 0$ qu'advient-t-il de ces cohérences ? Même question pour les cohérences en impulsion $\langle \vec{p}' | \rho_0 | \vec{p}'' \rangle$.
- Dans les questions précédentes, on ne précise rien sur le photon émis. On ne l'observe pas. On s'intéresse seulement à l'atome.

Les réponses à ces questions sont-elles les mêmes si on détecte le photon émis, dans une direction bien définie mais sans sélection en énergie, dans une direction bien définie et avec une résolution en énergie meilleure que Γ ?
- Exemples d'état initial pour les degrés de liberté externes
 - Onde plane correspondant à un atome d'impulsion bien définie \vec{p}_0 .
 - Superposition linéaire de 2 paquets d'ondes bien séparés spatialement (distance entre les 2 paquets d'ondes supérieure à la largeur de chaque paquet)
 - Superposition linéaire de 2 ondes planes de vecteurs d'onde \vec{p}_1/\hbar et \vec{p}_2/\hbar
- Intérêt d'un tel problème
 - Simple mathématiquement: on peut résoudre exactement l'équation de Schrödinger et écrire explicitement le vecteur d'état final du système global atome + photon.

Possibilité notamment d'étudier les corrélations entre l'état final de l'atome et celui du champ, ce qui serait impossible dans un traitement du type équation pilote où la trace est prise sur le réservoir



- Importance de l'émission spontanée comme prototype de processus dissipatif en optique quantique.
L'émission spontanée introduit-elle une borne supérieure pour les longueurs de cohérence spatiales que le refroidissement laser permet d'obtenir ?

- Limites d'un tel problème

On considère un seul processus d'émission.

Il faudra ensuite étudier ce qui se passe quand l'atome est réexcité en permanence au moyen de photons incidents. Des généralisations de ce type seront étudiées ultérieurement.

① Rappels de mécanique quantique (sur l'évolution d'un état discret couplé à un continuum)

a) Hamiltoniens - Etats de base

$$H = H_0 + V \tag{2.1}$$

$$H_0 |\varphi_i\rangle = E_i |\varphi_i\rangle \quad \text{Etat discret} \tag{2.2.a}$$

$$H_0 |\varphi_f\rangle = E_f |\varphi_f\rangle \quad \text{Continuum} \tag{2.2.b}$$

$$\langle \varphi_f | V | \varphi_i \rangle = V_{fi} \tag{2.3.a}$$

$$\langle \varphi_i | V | \varphi_i \rangle = \langle \varphi_f | V | \varphi_f \rangle = 0 \tag{2.3.b}$$

b) Equation de Schrödinger - Equation integrodifferentielle équivalente

$$|\Psi(t)\rangle = c_i(t) e^{-iE_i t/\hbar} |\varphi_i\rangle + \sum_f c_f(t) e^{-iE_f t/\hbar} |\varphi_f\rangle \tag{2.4}$$

$$\begin{cases} i\hbar \dot{c}_i(t) = \sum_f V_{if} e^{-i(E_f - E_i)t/\hbar} c_f(t) \end{cases} \tag{2.5.a}$$

$$\begin{cases} i\hbar \dot{c}_f(t) = \sum_i V_{fi} e^{-i(E_i - E_f)t/\hbar} c_i(t) \end{cases} \tag{2.5.b}$$

A $t=0$, $c_i(0) = 1$, $c_f(0) = 0$

$$c_f(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V_{fi} e^{-i(E_i - E_f)t'/\hbar} c_i(t') \tag{2.6}$$

$$\begin{aligned} \dot{c}_i(t) &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \sum_f |V_{fi}|^2 e^{i(E_i - E_f)(t-t')/\hbar} c_i(t') \\ &= -\int_0^t dt' K(t-t') c_i(t') \end{aligned} \tag{2.7}$$

$$K(\tau) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_f |V_{fi}|^2 e^{i(E_i - E_f)\tau/\hbar} \tag{2.8}$$

c) Approximation de mémoire courte - Evolution de l'état discret

En général $|V_{fi}|^2$ varie très lentement avec l'énergie E_f de $|\varphi_f\rangle$ et $K(\tau)$ est une fonction de largeur τ_c beaucoup plus petite que le temps caractéristique d'évolution de l'état discret $|\varphi_i\rangle$.

Dans ce cas, on peut remplacer dans (2.7) $c_i(t')$ par $c_i(t)$ et le sortir de l'intégrale, ce qui donne l'équation différentielle

$$\dot{c}_i(t) \approx -c_i(t) \int_0^t d\tau K(\tau) \approx -c_i(t) \int_0^\infty d\tau K(\tau) \tag{2.9}$$

(On a supposé $t \gg \tau_c$). Pour calculer $\int_0^\infty K(\tau) d\tau$, on utilise

$$\int_0^\infty d\tau e^{i\omega\tau} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_0^\infty d\tau e^{i(\omega+i\epsilon)\tau} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{i}{\omega+i\epsilon} = i\mathcal{P}\frac{1}{\omega} + \pi\delta(\omega) \quad (2.10)$$

ce qui donne

$$\int_0^\infty d\tau k(\tau) = \frac{\Gamma}{2} + i\Delta \quad (2.11)$$

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |V_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f) = \text{Probabilité de transition par unité de temps de l'état discret vers le continuum} \quad (2.12)$$

$$\hbar\Delta = \mathcal{P} \sum_f \frac{|V_{fi}|^2}{E_i - E_f} = \text{Déplacement au 2ème ordre en V de l'état } |\varphi_i\rangle \text{ dû au couplage avec le continuum} \quad (2.13)$$

En supposant $\hbar\Delta$ réintégré dans E_i , on obtient finalement

$$\dot{c}_i(t) = -\frac{\Gamma}{2} c_i(t) \quad \rightarrow \quad c_i(t) = e^{-\Gamma t/2} \quad (2.14)$$

d) Etat final du système pour $t \gg \Gamma^{-1}$

En utilisant (2.6) et (2.14), on obtient pour $t \gg \Gamma^{-1}$

$$c_f(t) = -\frac{i}{\hbar} V_{fi} \int_0^t dt' e^{-i(E_i - i\hbar\frac{\Gamma}{2} - E_f)t'/\hbar} = \frac{V_{fi}}{E_f - E_i + i\hbar\frac{\Gamma}{2}} \quad (2.15)$$

En reportant (2.14) et (2.15) dans (2.4), on obtient pour $t \gg \Gamma^{-1}$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_f \frac{V_{fi}}{E_f - E_i + i\hbar\frac{\Gamma}{2}} e^{-iE_f t/\hbar} |\varphi_f\rangle \quad (2.16)$$

Superposition d'états propres du continuum de H_0 , évoluant librement, avec une distribution d'énergie lorentzienne autour de E_i

② - Application à l'émission spontanée

a) Etats de base - Energies non perturbées

$$|\varphi_i\rangle = |b, \vec{k}; 0\rangle \quad \begin{array}{l} \text{Atome dans l'état supérieur } b \\ \text{Centre de masse d'impulsion } \hbar\vec{k} \\ \text{Vide de photons } |0\rangle \end{array} \quad (2.17)$$

$$E_i = E_b + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2M} \quad (2.18)$$

$$|\varphi_f\rangle = |a, \vec{k}-\vec{k}; \vec{k}\vec{\epsilon}\rangle \quad \begin{array}{l} \text{Atome dans l'état inférieur } a \\ \text{Photon } \vec{k}\vec{\epsilon} \text{ émis (impulsion } \hbar\vec{k}, \text{ polarisation } \vec{\epsilon}) \\ \text{Centre de masse d'impulsion } \hbar(\vec{k}-\vec{k}) \end{array} \quad (2.19)$$

$$E_f = E_a + \frac{\hbar^2 (\vec{k}-\vec{k})^2}{2M} + \hbar\omega \quad (2.20)$$

Les éléments de matrice V_{if} de V ne sont différents de zéro que si les états reliés par V ont même impulsion globale, d'où le $\vec{k}-\vec{k}$ du centre de masse pour un photon \vec{k} émis

b) Etat final après l'émission d'un photon

- Si le système global atome + champ part à $t=0$ de l'état (2.17), l'application de (2.16) donne pour l'état du système à $t \gg \Gamma^{-1}$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\vec{k}\vec{\epsilon}} |a, \vec{k}-\vec{k}; \vec{k}\vec{\epsilon}\rangle \frac{\langle a, \vec{k}-\vec{k}; \vec{k}\vec{\epsilon} | V | b, \vec{k}; 0 \rangle}{\hbar(\omega - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2}) + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2M} - \frac{\hbar^2 \vec{k}\cdot\vec{k}}{M}} e^{-iE_f t/\hbar} \quad (2.21)$$

On reconnaît au dénominateur de (2.21) l'énergie de recul $\hbar^2 k^2 / 2M$ et le déplacement Doppler proportionnel au produit scalaire de \vec{k} par la vitesse initiale de l'atome $\hbar \vec{k} / M$

- Au lieu de partir d'un état d'impulsion bien définie pour le centre de masse, on aurait pu partir d'une superposition linéaire de tels états

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{\vec{k}} c(\vec{k}) |b, \vec{k}; 0\rangle \tag{2.22}$$

La linéarité de l'équation de Schrödinger donne alors, compte tenu de (2.21) et (2.20)

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}\vec{E}} \gamma(\vec{k}, \vec{k}\vec{E}) e^{-i[E_a + \hbar\omega + \frac{\hbar^2(\vec{k}-\vec{k})^2}{2M}]t/\hbar} |a, \vec{k}-\vec{k}; \vec{k}\vec{E}\rangle \tag{2.23}$$

$$\gamma(\vec{k}, \vec{k}\vec{E}) = c(\vec{k}) \frac{\langle a, \vec{k}-\vec{k}; \vec{k}\vec{E} | V | b, \vec{k}; 0 \rangle}{\hbar(\omega - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} - \frac{\hbar^2 \vec{k} \cdot \vec{k}}{M}} \tag{2.24}$$

c) Simplifications

- A cause du dénominateur de (2.24), $\gamma(\vec{k}, \vec{k}\vec{E})$ varie rapidement avec $|\vec{k}|$ (échelle de variation caractéristique de l'ordre de Γ/c) L'élément de matrice du numérateur varie beaucoup plus lentement avec $|\vec{k}|$. Nous le remplacerons par une constante égale à sa valeur en $|\vec{k}| = k_0 = \omega_0/c$
- De plus, nous négligerons pour simplifier la dépendance angulaire et la dépendance en \vec{E} de cet élément de matrice, ce qui revient à supposer un diagramme de rayonnement isotrope. Nous poserons donc

$$\langle a, \vec{k}-\vec{k}; \vec{k}\vec{E} | V | b, \vec{k}; 0 \rangle = v \tag{2.25}$$

où v est une constante. Compte tenu de ces simplifications, nous ne tiendrons plus compte dans ce qui suit du vecteur polarisation \vec{E} .

- Enfin, nous négligerons la variation de l'énergie de recul $\hbar^2 k^2 / 2M$ quand k varie autour de $k_0 = \omega_0/c$ sur un intervalle de largeur $\Gamma/c \ll k_0$ et la remplacerons par $\hbar^2 k_0^2 / 2M$. En posant

$$\tilde{\omega}_0 = \omega_0 - \frac{\hbar k_0^2}{2M} = \omega_0 \left[1 - \frac{\hbar \omega_0}{2Mc^2} \right] \approx \omega_0 \tag{2.26}$$

on obtient finalement, compte tenu de (2.25)

$$\gamma(\vec{k}, \vec{k}) = c(\vec{k}) \frac{v/\hbar}{\omega - \tilde{\omega}_0 - \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{k}}{M} + i\frac{\Gamma}{2}} \tag{2.27}$$

d) Opérateur densité décrivant l'état de l'atome après l'émission

- Dans (2.23), l'état interne atomique peut être factorisé. Pour $t \gg \Gamma^{-1}$, l'atome est certainement dans l'état inférieur a .

Par contre, l'état externe et l'état du rayonnement ne se factorisent pas, ce qui traduit l'existence de corrélations entre l'état du photon émis et l'état du centre de masse

- Si l'on ne s'intéresse qu'à l'état du centre de masse, il faut prendre la trace sur le rayonnement de l'opérateur densité associé à (2.23), ce qui donne

$$\begin{aligned} \rho_{at}(t) &= \text{Tr}_{\text{Ray}} |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = \sum_{\vec{k}} \langle\vec{k}|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|\vec{k}\rangle \\ &= |a\rangle\langle a| \otimes \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} \sum_{\vec{k}} \gamma(\vec{k}, \vec{k}') \gamma^*(\vec{k}', \vec{k}) e^{-i\left[\frac{\hbar^2(\vec{k}-\vec{k}')^2}{2M} - \frac{\hbar^2(\vec{k}'-\vec{k})^2}{2M}\right] \frac{t}{\hbar}} |\vec{k}-\vec{k}\rangle\langle\vec{k}'-\vec{k}| \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\gamma(\vec{k}, \vec{k}') \gamma^*(\vec{k}', \vec{k}) = \frac{c(\vec{k}) c^*(\vec{k}') |v|^2 / \hbar^2}{\left[\omega - \tilde{\omega}_0 - \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{k}}{M} + i\frac{\Gamma}{2}\right] \left[\omega - \tilde{\omega}_0 - \frac{\hbar \vec{k}' \cdot \vec{k}}{M} - i\frac{\Gamma}{2}\right]} \quad (2.29)$$

Il apparaît ainsi que, si avant l'émission il y a des cohérences entre les états $|\vec{k}\rangle$ et $|\vec{k}'\rangle$ ($c(\vec{k}) c^*(\vec{k}') \neq 0$), il apparaît après l'émission des cohérences entre les états $|\vec{k}-\vec{k}\rangle$ et $|\vec{k}'-\vec{k}\rangle$ où \vec{k} est le vecteur d'onde du photon émis

\vec{k} et \vec{k}' subissent la même translation $-\vec{k}$. Le transfert de cohérence par émission spontanée ne change pas la différence des vecteurs d'ondes $\vec{k}-\vec{k}'$

- Nous allons appliquer maintenant les résultats généraux précédents à un certain nombre d'états initiaux simples

③ Etat initial d'impulsion bien définie

$$c(\vec{k}) = \delta_{\vec{k}, \vec{k}_0} \quad |\psi(0)\rangle = |b, \vec{k}_0; 0\rangle \quad (2.30)$$

a) Cohérences initiales

- Etat externe initial : $\rho_0 = |\vec{k}_0\rangle\langle\vec{k}_0| \quad (2.31)$

- Cohérences en position $\langle\vec{r}'|\rho_0|\vec{r}''\rangle = \langle\vec{r}'|\vec{k}_0\rangle\langle\vec{k}_0|\vec{r}''\rangle \sim e^{i\vec{k}_0 \cdot (\vec{r}' - \vec{r}'')} \quad (2.32)$

Portée infinie : aussi éloignés que soient \vec{r}' et \vec{r}'' , il y a une cohérence quantique entre $|\vec{r}'\rangle$ et $|\vec{r}''\rangle$

- Cohérences en impulsion

$$\langle\vec{p}'|\rho_0|\vec{p}''\rangle = \langle\vec{p}'|\vec{k}_0\rangle\langle\vec{k}_0|\vec{p}''\rangle \sim \delta_{\vec{p}', \vec{p}_0} \delta_{\vec{p}'', \vec{p}_0} = \delta_{\vec{p}', \vec{p}''} \delta_{\vec{p}', \vec{p}_0} \quad (2.33)$$

Pas de cohérences avec $\vec{p}_0 = \hbar \vec{k}_0$

b) Etat final après émission d'un photon

- On peut toujours se placer dans le référentiel où l'atome est au repos initialement $\vec{k}_0 = \vec{0} \quad (2.34)$

- L'équation (2.28) donne alors pour état atomique final, compte

tenue de (2.29) et (2.34)

II-6

$$\rho_{at} = |a\rangle\langle a| \otimes \rho_{ext} \quad (2.35)$$

$$\begin{aligned} \rho_{ext} &= \sum_{\vec{k}} |\chi(\vec{0}, \vec{k})|^2 |\vec{k}\rangle\langle -\vec{k}| \\ &= \sum_{\vec{k}} \frac{|v|^2 / \hbar^2}{(\omega - \tilde{\omega}_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} |\vec{k}\rangle\langle -\vec{k}| \end{aligned} \quad (2.36)$$

- D'après (2.36), l'état externe final est un mélange statistique d'états d'impulsion bien définie $-\hbar\vec{k}$ avec des poids $|\chi(\vec{0}, \vec{k})|^2$. Il n'y a donc pas, dans l'état final, de cohérences entre états d'impulsions différentes.

La distribution de probabilité de l'impulsion finale est donnée par $P(\vec{p} = \hbar\vec{k}) = |\chi(\vec{0}, \vec{k})|^2$. D'après les hypothèses faites sur le diagramme d'émission, elle est isotrope. Le long d'une direction donnée, la distribution de $|\vec{p}| = \hbar|\vec{k}| = \hbar\omega/c$ est une lorentzienne de largeur $\hbar\Gamma/c$ centrée en $\hbar\tilde{\omega}_0/c$.

c) Densité de probabilité et cohérences finales en positions

- Dans l'état final, la densité de présence en \vec{r} de l'atome est donnée par $\langle \vec{r} | \rho_{ext} | \vec{r} \rangle$. Comme, d'après (2.36), ρ_{ext} ne contient que des projecteurs $|\vec{k}\rangle\langle -\vec{k}|$ et que $\langle \vec{r} | \vec{k}\rangle\langle -\vec{k} | \vec{r} \rangle \sim |e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}|^2 = 1$ ne dépend pas de \vec{r} , la densité de présence de l'atome est, comme dans l'état initial, uniforme dans l'espace.

- Cohérences finales

$$\langle \vec{r}' | \rho_{ext} | \vec{r}'' \rangle = \sum_{\vec{k}} |\chi(\vec{0}, \vec{k})|^2 e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}' - \vec{r}'')} \quad (2.37)$$

Elles ne dépendent que de $\vec{r}' - \vec{r}''$ et sont données par la transformée de Fourier de $|\chi(\vec{0}, \vec{k})|^2$, c'est à dire par la transformée de Fourier de la distribution finale d'impulsion.

- Calcul de $\langle \vec{r}' | \rho_{ext} | \vec{r}'' \rangle$

• Comme $|\chi(\vec{0}, \vec{k})|^2$ ne dépend pas, d'après (2.36), des angles polaires de \vec{k} , l'intégrale angulaire de (2.37) ne porte que sur l'exponentielle. En prenant l'axe Oz dans l'espace des \vec{k} le long de $\vec{r}' - \vec{r}''$ et en posant

$$|\vec{r}' - \vec{r}''| = \rho \quad (2.38)$$

on obtient, en désignant par θ l'angle entre \vec{k} et $\vec{r}' - \vec{r}''$

$$\begin{aligned} \int d\Omega_k e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} &= 2\pi \int_0^\pi \sin\theta d\theta e^{-ik\rho \cos\theta} \\ &= 2\pi \int_{-1}^{+1} du e^{-ik\rho u} = 4\pi \frac{\sin k\rho}{k\rho} \end{aligned} \quad (2.39)$$

• Il reste à calculer l'intégrale radiale, proportionnelle à

$$\int_0^\infty k^2 dk \frac{\sin kp}{kp} \frac{1}{(k-k_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4c^2}} \quad (2.40)$$

Comme la dernière fonction est très piquée autour de $k = k_0$ et que $k_0 \gg \Gamma/c$, on peut étendre la borne inférieure de l'intégrale à $-\infty$. L'intégration par les résidus donne alors

$$\langle \vec{r}' | P_{ext} | \vec{r}'' \rangle \sim \frac{\sin k_0 p}{k_0 p} e^{-\Gamma p/2c} \quad (2.41)$$

- Discussion physique

Alors que la portée des cohérences est infinie dans l'état initial, elles ne s'étendent plus, dans l'état final, que sur une distance de l'ordre de la longueur d'onde $\lambda_0 = 1/k_0$. La décroissance est encore plus rapide (exponentielle) à l'échelle c/Γ (distance parcourue par la lumière pendant une durée de vie Γ^{-1} , beaucoup plus grande que λ_0)

Le 1^{er} facteur $(\sin k_0 p / k_0 p)$ de (2.41) est lié au caractère aléatoire de la direction d'émission du photon, qui entraîne que la composante de l'impulsion de recul de l'atome le long d'une direction donnée varie aléatoirement entre $-tk_0$ et $+tk_0$. Le 2^{ème} facteur $(e^{-\Gamma p/2c})$ est dû au fait que, même si le photon était toujours émis dans la même direction, son impulsion, et donc l'impulsion de recul de l'atome, n'est pas définie à mieux que Γ/c .

Il apparaît ainsi que l'émission spontanée d'un seul photon détruit toute cohérence spatiale de portée supérieure à λ_0 .

d) Corrélations entre atome et rayonnement

- Au lieu de tracer sur le rayonnement, revenons à l'expression du vecteur d'état du système global atome + rayonnement après émission d'un photon. En faisant $\vec{k} = \vec{k}_0 = \vec{0}$ dans (2.21) et en utilisant (2.25), on obtient

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\vec{k}} |a\rangle \otimes |-\vec{k}\rangle \otimes |\vec{k}\rangle \frac{v}{\hbar[\omega - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2}]} e^{-i(E_a + \hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2M})\frac{t}{\hbar}} \quad (2.42)$$

↑ Etat interne ↑ Etat externe ↑ Photon

L'expression (2.42) montre l'existence d'une corrélation parfaite entre l'état externe de l'atome et l'état du photon émis. Si le photon émis a l'impulsion $\hbar\vec{k}$, le centre de masse de l'atome a l'impulsion $-\hbar\vec{k}$.

- Montrons également qu'il existe des corrélations entre la position de l'atome et l'état du photon émis

Introduisons pour cela la relation de fermeture sur \vec{r} ,

$\sum_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = \mathbb{1}$ et utilisons $\langle \vec{r} | -\vec{k} \rangle \sim e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$. On peut réécrire (2.42) sous la forme II-8

$$|\Psi(t)\rangle = |a\rangle \otimes \sum_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \otimes |\chi_{\vec{r}}\rangle \quad (2.43)$$

où $|\chi_{\vec{r}}\rangle$ est l'état du rayonnement défini par

$$|\chi_{\vec{r}}\rangle = \sum_{\vec{k}} \frac{v e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{\hbar [\omega - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2}]} |\vec{k}\rangle e^{-i(E_a + \hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m})t/\hbar} \quad (2.44)$$

Suivant le point \vec{r} où se trouve l'atome, l'état du rayonnement n'est pas le même. Là encore, on peut dire en quelque sorte que le rayonnement mesure la position de l'atome puisque de l'état du rayonnement on peut déduire la position de l'atome (voir cours 1 et la discussion sur les corrélations quantiques de type E.P.R.)

- Montrons enfin que la résolution de la mesure en \vec{r} est moins bonne que celle de la mesure en \vec{p} . Pour le voir, étudions le produit scalaire $\langle \chi_{\vec{r}'} | \chi_{\vec{r}''} \rangle$ des 2 états du rayonnement associés aux 2 états orthogonaux de l'atome $|\vec{r}'\rangle$ et $|\vec{r}''\rangle$. D'après (2.44)

$$\langle \chi_{\vec{r}'} | \chi_{\vec{r}''} \rangle \sim \sum_{\vec{k}} \frac{|v|^2}{\hbar^2 [(\omega - \tilde{\omega}_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}]} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}' - \vec{r}'')} \quad (2.45)$$

On retrouve la même intégrale qu'en (2.37) et donc le même résultat (2.41). La mesure de la position de l'atome par le photon émis a donc une résolution finie, de l'ordre de λ_0 , alors que la mesure de l'impulsion est, d'après (2.42), parfaite (les 2 états du rayonnement associés à \vec{p}' et $\vec{p}'' \neq \vec{p}'$ sont orthogonaux).

Références

- Etat discret couplé à un continu
C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, *Mécanique Quantique*
Hermann Paris 1973, Complément D XIII
- Pour un autre exemple d'étude des corrélations entre une particule et un réservoir et du lien avec la théorie de la mesure, voir
V. Hakim and V. Ambegaokar, *Phys. Rev. A* 32, 423, 1982

24.1.89

Etude d'un exemple simple

III-1

Effet de l'émission spontanée d'un photon sur les cohérences quantiques de l'atome émetteur (suite)

④ Etat initial du centre de masse : superposition linéaire de 2 paquets d'ondes bien séparés spatialement.

a) Description de l'état initial $|\Psi\rangle$

Etat $|\Psi_1\rangle$

$$|\Psi_1\rangle = \sum_{\vec{K}} c_1(\vec{K}) |b, \vec{K}; 0\rangle = |b\rangle \otimes \sum_{\vec{K}} c_1(\vec{K}) |\vec{K}\rangle \otimes |0\rangle \quad (3.1)$$

Atome excité dans l'état $|b\rangle$ - Vide de photons $|0\rangle$

Centre de masse dans l'état

$$|\varphi_1\rangle = \sum_{\vec{K}} c_1(\vec{K}) |\vec{K}\rangle \quad (3.2)$$

- On suppose $|\varphi_1(\vec{r})|^2 = |\langle \vec{r} | \varphi_1 \rangle|^2$ centré autour d'un point \vec{r}_1 dans un volume d'extension linéaire

$$\Delta r = \sigma \quad (3.3)$$

De même, $|\varphi_1(\vec{p})|^2 = |\langle \vec{p} | \varphi_1 \rangle|^2 = |c_1(\vec{K})|^2$ (avec $\vec{p} = \hbar \vec{K}$) est supposé centré on $\vec{p} = \vec{0}$, dans un volume d'extension linéaire

$$\Delta p \simeq \frac{\hbar}{\sigma} \quad (3.4)$$

Etat $|\Psi_2\rangle$

- Même état que $|\Psi_1\rangle$, l'état du centre de masse étant translaté de \vec{p}

$$|\Psi_2\rangle = |b\rangle \otimes |\varphi_2\rangle \otimes |0\rangle \quad (3.5)$$

$$|\varphi_2\rangle = e^{-i\vec{P}\cdot\vec{p}/\hbar} |\varphi_1\rangle \quad (3.6)$$

où \vec{P} est l'opérateur impulsions du centre de masse. On a donc

$$|\varphi_2\rangle = \sum_{\vec{K}} c_2(\vec{K}) |\vec{K}\rangle \quad \text{avec} \quad c_2(\vec{K}) = c_1(\vec{K}) e^{-i\vec{K}\cdot\vec{p}} \quad (3.7)$$

- Il s'ensuit que $|\varphi_2(\vec{r})|^2 = |\langle \vec{r} | \varphi_2 \rangle|^2$ est centré autour de

$$\vec{r}_2 = \vec{r}_1 + \vec{p} \quad (3.8)$$

en ayant la même forme de $|\varphi_1(\vec{r})|^2$, et que $|\varphi_2(\vec{p})|^2 = |\varphi_1(\vec{p})|^2$

Etat initial $|\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \lambda_1 |\Psi_1\rangle + \lambda_2 |\Psi_2\rangle \quad (3.9)$$

- Atome excité, dans le vide de photons. Etat du centre de masse superposition linéaire de 2 paquets d'ondes identiques centrés en \vec{r}_1 et \vec{r}_2

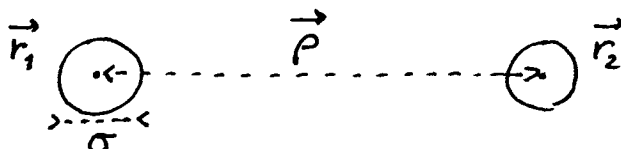


Fig. 1

On suppose les 2 paquets d'ondes bien séparés

$$|\vec{p}| \gg \sigma \quad (3.10)$$

- Distribution de \vec{r} et \vec{p} dans l'état

$$|\varphi\rangle = \lambda_1 |\varphi_1\rangle + \lambda_2 |\varphi_2\rangle \quad (3.11)$$

Comme les paquets d'ondes sont bien séparés, $\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = 0$ et

$$|\varphi(\vec{r})|^2 = |\lambda_1|^2 |\varphi_1(\vec{r})|^2 + |\lambda_2|^2 |\varphi_2(\vec{r})|^2 \quad (3.12)$$

D'après (3.2), (3.7) et (3.11)

$$\begin{aligned} |\langle \vec{p} | \varphi \rangle|^2 &= |\langle \vec{p} = \hbar \vec{k} | \varphi \rangle|^2 = |\lambda_1 c_1(\vec{k}) + \lambda_2 c_2(\vec{k})|^2 \\ &= |c_1(\vec{k})|^2 |\lambda_1 + \lambda_2 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}|^2 \end{aligned} \quad (3.13)$$

Oscillations en $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, de période \hbar/ρ , dues à l'interférence entre les 2 paquets d'ondes.

b) Hypothèse simplificatrice sur l'état initial.

- On suppose que l'effet Doppler $\Delta \nu_D$, lié à la distribution initiale des valeurs de p autour de $p=0$, est très petit devant la largeur naturelle Γ de l'état supérieur b .

$$\Delta \nu_D = \frac{k \Delta p}{M} = \frac{\hbar k \Delta k}{M} \ll \Gamma \quad (3.14)$$

- On peut alors négliger, dans les dénominateurs d'énergie apparaissant dans les coefficients (2.27) du développement de $|\psi(t)\rangle$, les termes $\hbar \vec{k} \cdot \vec{k} / M$ (effet Doppler) devant Γ

$$\frac{1}{\omega - \tilde{\omega}_0 - \hbar \frac{\vec{k} \cdot \vec{k}}{M} + i \frac{\Gamma}{2}} \approx \frac{1}{\omega - \tilde{\omega}_0 + i \frac{\Gamma}{2}} \quad (3.15)$$

- Condition sur la largeur σ de chaque paquet d'ondes

$$\Delta p \sim \frac{\hbar}{\sigma} \rightarrow \Delta \nu_D \sim \frac{\hbar k_0}{M \sigma}$$

$$\Delta \nu_D \ll \Gamma \rightarrow \frac{\hbar k_0}{M \sigma} \ll \Gamma \rightarrow \frac{\hbar k_0}{M \Gamma} \ll \sigma \rightarrow \frac{\hbar^2 k_0^2 / 2M}{\hbar \Gamma} \ll k_0 \sigma$$

$$\hookrightarrow \lambda_0 \frac{E_{excit}}{\hbar \Gamma} \ll \sigma \quad \text{où} \quad \lambda_0 = \frac{1}{k_0} \quad (3.16)$$

- Comme pour la plupart des transitions permises

$$E_{excit} \ll \hbar \Gamma \quad (3.17)$$

on peut choisir

$$\lambda_0 \frac{E_{excit}}{\hbar \Gamma} \ll \sigma \ll \lambda_0 \quad (3.18)$$

Chaque paquet d'ondes a une largeur spatiale σ très petite devant la longueur d'ondes $\lambda_0 \sim 1/k_0$ de la transition $a \leftrightarrow b$, mais cette largeur peut être suffisamment grande devant $\lambda_0 E_{excit} / \hbar \Gamma$ pour qu'on puisse négliger tout effet Doppler et utiliser (3.15).

c) Etat final du système global

Etat final atteint à partir de $|\psi_1\rangle$

D'après (2.23), (2.24), et compte tenu de (2.27) et (3.15), l'état final du système partant à $t=0$ de l'état $|\psi_1\rangle$ écrit en (3.1) est donné, pour $t \gg \Gamma^{-1}$, par :

$$|\Psi_1(t)\rangle = |a\rangle \otimes \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} c_1(\vec{k}) \frac{v/\hbar}{\omega - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2}} |\vec{k} - \vec{k}'\rangle \otimes |\vec{k}'\rangle e^{i[E_a + \hbar\omega + \frac{\hbar^2(\vec{k}-\vec{k}')^2}{2M}] \frac{t}{\hbar}} \quad (3.19)$$

C'est un état qui évolue librement (sous l'effet du seul hamiltonien non perturbé H_0) et qui semble provenir de l'état initial

$$|\Psi_1(0)\rangle = |a\rangle \otimes \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} c_1(\vec{k}) \frac{v/\hbar}{\omega - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2}} |\vec{k} - \vec{k}'\rangle \otimes |\vec{k}'\rangle \quad (3.20)$$

- Introduisons l'opérateur qui translate de $-\hbar\vec{k}$ l'impulsion $\hbar\vec{k}$ du centre de masse

$$|\vec{k} - \vec{k}'\rangle = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} |\vec{k}'\rangle \quad (3.21)$$

où \vec{R} est l'opérateur position du centre de masse. L'identité (3.21) permet d'écrire (3.20) sous la forme

$$\begin{aligned} |\Psi_1(0)\rangle &= |a\rangle \otimes \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \frac{v/\hbar}{\omega - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2}} \sum_{\vec{k}'} c_1(\vec{k}') |\vec{k}'\rangle \otimes |\vec{k}'\rangle \\ &= |a\rangle \otimes \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \frac{v/\hbar}{\omega - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2}} |\varphi_1\rangle \otimes |\vec{k}\rangle \end{aligned} \quad (3.22)$$

On a utilisé (3.2)

- Utilisons enfin le fait que la fonction d'onde $\langle \vec{r} | \varphi_1 \rangle$ associée à $|\varphi_1\rangle$ n'est différente de zéro que sur un intervalle de largeur σ autour de \vec{r}_1 . Comme par hypothèse $\sigma \ll \lambda_0$ et que donc $k\sigma \ll 1$, on peut écrire $e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_1} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{R}-\vec{r}_1)}$ et remplacer par 1 la 2^{ème} exponentielle qui est de l'ordre de $e^{-i\vec{k}\cdot\sigma} \sim 1$

$$|\Psi_1(0)\rangle = |a\rangle \otimes \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_1} \frac{v/\hbar}{\omega - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2}} |\varphi_1\rangle \otimes |\vec{k}\rangle \quad (3.23)$$

Etat final atteint à partir de $|\Psi_2\rangle$

Un raisonnement analogue montre que si le système global part de l'état (3.5), il aboutit au bout d'un temps $t \gtrsim \Gamma^{-1}$ dans un état $|\Psi_2(t)\rangle$ qui évolue librement et qui semble provenir de l'état

$$|\Psi_2(0)\rangle = |a\rangle \otimes \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_2} \frac{v/\hbar}{\omega - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2}} |\varphi_2\rangle \otimes |\vec{k}\rangle \quad (3.24)$$

Etat final atteint à partir de $|\Psi\rangle = \lambda_1 |\varphi_1\rangle + \lambda_2 |\varphi_2\rangle$

D'après la linéarité de l'équation de Schrödinger, c'est un état qui évolue librement et qui semble provenir de l'état initial

$$|\Psi(0)\rangle = |a\rangle \otimes \sum_{\vec{k}} \frac{v/\hbar}{\omega - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2}} [\lambda_1 e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_1} |\varphi_1\rangle + \lambda_2 e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_2} |\varphi_2\rangle] \otimes |\vec{k}\rangle \quad (3.25)$$

d) Etalement des paquets d'ondes pendant la durée Γ^{-1} de désintégration de l'état excité b

- L'état final de la désintégration ($t \gtrsim \Gamma^{-1}$) semble provenir par évolution libre de l'état (3.25). Dans l'état (3.25), la dispersion des valeurs de \vec{p} autour de $\vec{p} = 0$ est toujours de l'ordre de \hbar/σ , et \vec{r} est

toujours distribué dans 2 intervalles de largeur σ autour de \vec{r}_1 et \vec{r}_2 . L'évolution libre entre $t=0$ et $t=\text{quelques } \Gamma^{-1}$ "étale les paquets d'ondes" d'une quantité

$$\Delta r \sim \frac{\Delta p}{M} \Gamma^{-1} \sim \frac{\hbar}{M\sigma} \Gamma^{-1} \quad (3.26)$$

- On pourra négliger cet étalement devant la largeur des pics de la distribution de \vec{r} si

$$\frac{\hbar}{M\sigma} \Gamma^{-1} \ll \sigma \quad (3.27)$$

c'est à dire si

$$\frac{\hbar}{M\Gamma} \ll \sigma^2 \rightarrow \lambda_0^2 \frac{E_{rec}}{\hbar\Gamma} \ll \sigma^2 \quad (3.28)$$

- Nous supposons dans la suite

$$\lambda_0 \left[\frac{E_{rec}}{\hbar\Gamma} \right]^{1/2} \ll \sigma \ll \lambda_0 \quad (3.29)$$

Cette condition, qui est plus restrictive que (3.18), permet à la fois de prendre des paquets d'ondes de largeur très petite devant λ_0 , et de négliger l'effet Doppler et l'étalement des paquets d'ondes pendant la disintégration de l'état b. En particulier, on peut considérer que l'état final de la disintégration, pour t de l'ordre de quelques Γ^{-1} , est toujours donné par (3.25), puisqu'on peut négliger l'effet de l'évolution libre entre $t=0$ et $t=\Gamma^{-1}$.

$$|\Psi(t \sim \Gamma^{-1})\rangle = |a\rangle \otimes \sum_{\vec{k}} \frac{v/\hbar}{\omega - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2}} \left[\lambda_1 e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_1} |\varphi_1\rangle + \lambda_2 e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_2} |\varphi_2\rangle \right] \otimes |\vec{k}\rangle \quad (3.30)$$

- L'état (3.30) est l'état du système global, atome + photon, après la disintégration. Nous allons nous intéresser maintenant à l'état du seul atome. Pour faciliter la compréhension physique, nous allons supposer d'abord l'état final du photon parfaitement connu, puis diminuer progressivement cette information

e) Etat final de l'atome après émission d'un photon dans une direction bien définie et avec une énergie bien définie.

- On connaît l'état final $|\vec{k}_f\rangle$ du rayonnement. Par exemple, on a enregistré un événement sur un détecteur placé dans la direction \vec{k}_f/k_f et précédé d'un filtre très étroit en énergie autour de $\hbar\omega_f = \hbar ck_f$.

De tous les états de la superposition linéaire $\sum_{\vec{k}} \dots$ figurant dans (3.30), on sait donc quel est l'état sélectionné par la mesure. C'est l'état où figure $|\vec{k}_f\rangle$. L'état final du système global est alors factorisé et l'état final du centre de masse est, à une constante globale multiplicative près,

$$\lambda_1 e^{-i\vec{k}_f\cdot\vec{r}_1} |\varphi_1\rangle + \lambda_2 e^{-i\vec{k}_f\cdot\vec{r}_2} |\varphi_2\rangle \quad (3.31)$$

- Après émission d'un photon \vec{k}_f , l'état du centre de masse est toujours une superposition linéaire de 2 paquets d'ondes centrés en \vec{r}_1 et \vec{r}_2 . La cohérence quantique entre les 2 paquets d'ondes est simplement multiplié par un facteur de phase bien défini, dépendant de \vec{k}_f et $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$

$$\lambda_1 \lambda_2^* \rightarrow \lambda_1 \lambda_2^* e^{-i\vec{k}_f\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \quad (3.32)$$

Remarque.

Que se passe-t-il si l'on tourne dans l'espace le détecteur à bande étroite, c'est à dire si l'on change \vec{k}_f/k_f sans changer $\hbar\omega_f$? En d'autres termes, la dépendance angulaire de la probabilité d'émission d'un photon d'énergie bien définie est-elle sensible à la cohérence quantique entre les 2 paquets d'ondes décrivant l'état initial du centre de masse?

Si l'on raisonne sur des ondes lumineuses de fréquence bien définie, issues soit de \vec{r}_1 , soit de \vec{r}_2 , on pourrait penser à l'existence d'interférences lumineuses avec une différence de marche égale à $\vec{k}_f \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$. En fait, l'application des postulats de la mécanique quantique, à ce problème indique que la probabilité d'émission d'un photon \vec{k}_f est donnée par la norme de la projection de (3.30) dans le sous-espace correspondant à $\vec{k} = \vec{k}_f$. Cette probabilité est donc égale à

$$\frac{|\nu|^2/\hbar^2}{(\omega_f - \tilde{\omega}_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \text{ Norme de } [\lambda_1 e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_1} |\varphi_1\rangle + \lambda_2 e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_2} |\varphi_2\rangle] =$$

$$\frac{|\nu|^2/\hbar^2}{(\omega_f - \tilde{\omega}_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} [|\lambda_1|^2 \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle + |\lambda_2|^2 \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle + 2 \text{Re} \lambda_1 \lambda_2^* e^{-i\vec{k}_f \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle] \quad (3.33)$$

Comme $\langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle = 0$, cette probabilité ne dépend pas de $\lambda_1 \lambda_2^*$ et il n'y a donc pas d'interférences dans la probabilité d'émission.

Le calcul précédent montre d'ailleurs clairement l'erreur du raisonnement en termes d'ondes lumineuses. Ce raisonnement ignorait l'état final de l'atome. Si l'onde est issue de \vec{r}_1 , l'atome après émission est dans $|\varphi_1\rangle$ autour de \vec{r}_1 . Si l'onde est issue de \vec{r}_2 , l'atome après émission est dans $|\varphi_2\rangle$ autour de \vec{r}_2 . Comme $\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = 0$ les 2 états finals possibles de l'atome sont orthogonaux et les "ondes" issues de \vec{r}_1 et \vec{r}_2 ne peuvent donc interférer.

f) Etat final de l'atome après émission d'un photon dans une direction bien définie, mais avec une énergie quelconque.

- On ne connaît maintenant que la direction du photon émis. Le détecteur placé dans la direction \hat{K} est un détecteur à bande très large. Il n'est pas sélectif en énergie.

- D'après les postulats de la mécanique quantique, l'état final sélectionné par la mesure est la projection de (3.30) dans le sous-espace correspondant à $\vec{k}/k = \hat{K}$ fixé. Comme les coefficients $(\nu/\hbar)/[\omega - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2}]$, $e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_1}$, $e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_2}$ dépendent de $|\vec{k}|$, cette projection ne se factorise plus en une partie atomique et une partie de rayonnement. L'état final du centre de masse est donc un mélange statistique obtenu par trace partielle sur le rayonnement. C'est un mélange statistique des états

$$\lambda_1 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} |\varphi_1\rangle + \lambda_2 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} |\varphi_2\rangle$$

correspondant à tous les vecteurs \vec{k} , de direction $\hat{K} = \vec{k}/k$ fixé et de module k quelconque, chaque état du mélange ayant pour poids $(|\nu|^2/\hbar^2)/[(\omega - \tilde{\omega}_0)^2 + \Gamma^2/4]$

- Après émission d'un photon d'énergie quelconque dans une direction \hat{K} donnée, la distribution des valeurs de \vec{r} présente toujours 2 pics de largeur σ autour de \vec{r}_1 et \vec{r}_2 , puisque l'étalement des paquets

d'onde est négligeable pendant le temps Γ^{-1} . Par contre la cohérence quantique entre ces 2 paquets d'ondes est la moyenne de

$$\lambda_1 \lambda_2^* e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \frac{|v|^2 / \hbar^2}{(\omega - \tilde{\omega}_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (3.34)$$

sur $\omega = ck$, \vec{k}/k étant fixé.

L'intégrale correspondante s'effectue aisément par la méthode des résidus (en étendant à $-\infty$ la borne inférieure de l'intégrale sur k , comme dans le cours II) et donne, au lieu de (3.32)

$$\lambda_1 \lambda_2^* \rightarrow \lambda_1 \lambda_2^* e^{-ik_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \cos \theta} e^{-\Gamma |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| |\cos \theta| / 2c} \quad (3.35)$$

où θ est l'angle entre \hat{k} et $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$

La cohérence entre les 2 paquets d'ondes est donc détruite si

$$\rho = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \gg \frac{c}{\Gamma |\cos \theta|} \quad (3.36)$$

Interprétation physique de (3.36)

Revenons au détecteur permettant de savoir qu'un photon a été émis dans la direction \hat{k} avec une énergie quelconque. Comme ce détecteur a une bande très large ($\Delta\omega \gg \Gamma$), il a une résolution temporelle très bonne. Il peut donc en principe permettre de déterminer le temps où le photon est détecté à beaucoup mieux que Γ^{-1} .

Or, chaque paquet d'ondes lumineuses issu, soit de \vec{r}_1 , soit de \vec{r}_2 a une longueur temporelle de l'ordre de Γ^{-1} et se propage à la vitesse c . Si $\cos \theta = 1$ et si $\rho \gg \frac{c}{\Gamma}$, les 2 paquets d'ondes issus de \vec{r}_1 et \vec{r}_2 ne se recouvrent pas. En détectant le temps d'arrivée du photon à mieux que Γ^{-1} , on peut donc savoir en principe si le photon détecté est issu de \vec{r}_1 ou \vec{r}_2 , ce qui détruit toute cohérence entre les 2 états finals possibles de l'atome en \vec{r}_1 et \vec{r}_2 .

Par contre, si le détecteur est précédé d'un filtre très étroit en énergie, comme dans le paragraphe précédent, le photon est gardé pendant un temps très long dans ce filtre, et quand il est détecté, on ne peut ne plus dire s'il vient de \vec{r}_1 ou \vec{r}_2 .

g) Etat final de l'atome après émission d'un photon quelconque

- On n'observe pas le photon émis et on ne sait donc rien sur lui. Il faut donc garder l'état final (3.30) tel quel et moyenner (3.34) à la fois sur k et sur \vec{k}/k . Les intégrales angulaire et radiale sont les mêmes que dans le cours II et donnent

$$\lambda_1 \lambda_2^* \rightarrow \lambda_1 \lambda_2^* \frac{\sin k_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{k_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} e^{-\frac{\Gamma |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{2c}} \quad (3.37)$$

- Si on n'observe pas le photon émis, la distribution en \vec{r} associée aux 2 paquets d'ondes de l'état initial n'est pas modifiée après l'émission mais la cohérence quantique entre les 2 paquets d'ondes est détruite si $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \gg \lambda_0$.

⑤ Etat initial du centre de masse : superposition linéaire de 2 ondes planes

a) Description de l'état initial

- On peut toujours choisir de se placer dans le référentiel où les 2 ondes planes ont des vecteurs d'ondes opposés $+\vec{k}_0$ et $-\vec{k}_0$
L'état initial du système global est alors

$$|\psi\rangle = |b\rangle \otimes |\varphi\rangle \otimes |0\rangle \quad (3.38.a)$$

où l'état $|\varphi\rangle$ du centre de masse s'écrit

$$|\varphi\rangle = \mu_1 |+\vec{k}_0\rangle + \mu_2 |-\vec{k}_0\rangle \quad (3.38.b)$$

- Distribution des valeurs de $\vec{p} = \hbar \vec{k}$

$$|\langle \vec{p} | \varphi \rangle|^2 = |\mu_1|^2 \delta_{\vec{p}, \vec{p}_0} + |\mu_2|^2 \delta_{\vec{p}, -\vec{p}_0} \quad \text{avec } \vec{p}_0 = \hbar \vec{k}_0 \quad (3.39)$$

- Les seules cohérences initiales non nulles en \vec{p} sont

$$\langle \vec{p}_0 | \rho | -\vec{p}_0 \rangle = \mu_1 \mu_2^* \quad \langle -\vec{p}_0 | \rho | +\vec{p}_0 \rangle = \mu_1^* \mu_2 \quad (3.40)$$

- Distribution des valeurs de \vec{r}

$$|\langle \vec{r} | \varphi \rangle|^2 = |\mu_1 e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} + \mu_2 e^{-i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}|^2 \quad (3.41)$$

Si par exemple $\mu_1 = \mu_2 = 1/\sqrt{2}$

$$|\langle \vec{r} | \varphi \rangle|^2 = 1 + \cos 2\vec{k}_0 \cdot \vec{r} \quad (3.42)$$

Oscillations spatiales de $|\langle \vec{r} | \varphi \rangle|^2$, de période $1/2k_0$

- Hypothèse simplificatrice sur l'effet Doppler associé à \vec{p}_0/M

$$\Delta \nu_D = \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}_0}{M} \ll \Gamma \quad (3.43)$$

Comme dans le § 4 précédent, cette hypothèse permet d'écrire

$$\frac{1}{\omega - \tilde{\omega}_0 \pm \frac{\hbar \vec{k}_0 \cdot \vec{k}}{M} + i \frac{\Gamma}{2}} \approx \frac{1}{\omega - \tilde{\omega}_0 + i \frac{\Gamma}{2}} \quad (3.44)$$

b) Etat final du système global

- Un calcul analogue à celui du paragraphe précédent montre, compte tenu de (2.23), (2.27), (3.38) et (3.44), que après quelques Γ^{-1} , l'état du système global est un état qui évolue librement et qui semble provenir de l'état initial

$$|\psi(0)\rangle = |a\rangle \otimes \sum_{\vec{k}} \frac{v/\hbar}{\omega - \tilde{\omega}_0 + i \frac{\Gamma}{2}} [\mu_1 |+\vec{k}_0 - \vec{k}\rangle + \mu_2 |-\vec{k}_0 - \vec{k}\rangle] \otimes |\vec{k}\rangle \quad (3.45)$$

- D'ailleurs, la condition (3.43) entraîne que l'effet de l'évolution libre entre $t=0$ et $t = \text{quelques } \Gamma^{-1}$ est négligeable et permet de remplacer dans (3.45) $|\psi(0)\rangle$ par $|\psi(t \sim \Gamma^{-1})\rangle$

c) Cohérences en \vec{p} dans l'état final du centre de masse

- Pour un photon émis \vec{k}_f bien défini, l'état final du centre

de masse est

$$\mu_1 |\vec{K}_0 - \vec{k}_f\rangle + \mu_2 |\vec{K}_0 - \vec{k}_f\rangle \quad (3.46)$$

C'est une superposition linéaire bien définie de 2 états dont les impulsions diffèrent toujours de $2\vec{p}_0 = 2\hbar\vec{K}_0$, comme en (3.38). Mais les 2 impulsions de (3.38) sont toutes 2 traduites de $-\hbar\vec{k}_f$, c'est à dire diminuées de l'impulsion du photon émis, $\hbar\vec{k}_f$. La cohérence quantique garde la même valeur, $\mu_1\mu_2^*$ ou $\mu_1^*\mu_2$, qu'avant l'émission, mais entre les états $|\vec{K}_0 - \vec{k}_f\rangle$ et $|\vec{K}_0 - \vec{k}_f\rangle$ au lieu de $|\vec{K}_0\rangle$ et $|\vec{K}_0\rangle$

- Si on n'observe pas le photon émis \vec{k} , et si on définit la "cohérence globale" entre 2 états d'impulsions différant de $2\vec{p}_0 = 2\hbar\vec{K}_0$ comme

$$\sum_{\vec{k}} \langle \vec{p}_0 - \hbar\vec{k} | \rho | -\vec{p}_0 - \hbar\vec{k} \rangle \quad (3.47)$$

où ρ est l'opérateur densité final du centre de masse, obtenu par trace partielle sur le rayonnement de l'opérateur densité associé à (3.45), on obtient

$$\sum_{\vec{k}} \langle \vec{p}_0 - \hbar\vec{k} | \rho | -\vec{p}_0 - \hbar\vec{k} \rangle = \mu_1 \mu_2^* \sum_{\vec{k}} \frac{|v|^2 / \hbar^2}{(\omega - \tilde{\omega}_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (3.48)$$

Or, $|v|^2$ et Γ ne sont pas indépendants, puisque d'après (2.12) et (2.25)

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}} |v|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\tilde{\omega}_0) \quad (3.49)$$

On démontre alors aisément à partir de (3.49) que

$$\sum_{\vec{k}} \frac{|v|^2 / \hbar^2}{(\omega - \tilde{\omega}_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} = 1 \quad (3.50)$$

ce qui entraîne que

$$\sum_{\vec{k}} \langle \vec{p}_0 - \hbar\vec{k} | \rho | -\vec{p}_0 - \hbar\vec{k} \rangle = \mu_1 \mu_2^* \quad (3.51)$$

Il apparaît ainsi, en comparant (3.40) et (3.51), que la cohérence globale entre 2 états d'impulsions différant de $2\vec{p}_0$ ne change pas après l'émission d'un photon quelconque. Un tel résultat, qui est dû à la conservation de l'impulsion globale au cours de l'émission, montre, par comparaison avec les résultats du § 4 précédent, que les cohérences en impulsion sont beaucoup plus "résistantes" que les cohérences en position vis à vis du processus d'émission spontanée

Références : Calculs de ce cours faits en collaboration avec Y. Castin

31/01/89

IV-1

Autre exemple de destruction des cohérences spatiales Diffusion de photons ou de particules légères

Introduction

But de ce cours

Compléter le cours précédent en étudiant des cycles absorption-émission de photons, plus généralement des processus de diffusion de photons ou de particules matérielles plus légères que la particule diffusante.

De plus, on n'étudiera pas un seul processus de diffusion, mais l'effet moyen d'une suite aléatoire de processus de diffusion. L'objectif est de calculer la constante de temps avec laquelle est détruite la cohérence spatiale $\langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle$ de la particule diffusante.

Importance de ce problème

C'est grâce à la destruction des cohérences spatiales qu'une particule acquiert un comportement classique.

Les processus de diffusion sont un mécanisme très général d'interaction avec l'environnement. Le problème posé est donc : comment les propriétés classiques d'une particule émergent-elles lorsque cette particule diffuse les particules légères qui l'environnent ?

Approximations et simplifications

La particule diffusante, que nous appellerons désormais la particule cible, a une masse M très grande. Sa vitesse est très faible devant celle des particules "projectiles" qu'elle diffuse. Nous négligerons tous les effets en $1/M$, qui tendent vers 0 quand $M \rightarrow \infty$: étalement du paquet d'ondes associé à la cible, effet Doppler quand les projectiles sont des photons, variation de vitesse de la cible due aux collisions (et donc force de friction) ...

Attention, ceci ne veut pas dire qu'on néglige les échanges d'impulsion $\delta \vec{p}$ entre cible et projectiles. Nous allons montrer que ces échanges jouent un rôle crucial dans la destruction des cohérences spatiales. Ce que nous négligeons, c'est la variation de vitesse $\delta \vec{p}/M$ associée à $\delta \vec{p}$.

Les cours suivants présenteront des traitements plus précis s'approchant de cette approximation.

① Variation de la cohérence spatiale de la particule cible après un processus de diffusion

Etat initial du système global cible + projectile

$$|\Psi_{in}\rangle = |a\rangle \otimes |\varphi\rangle \otimes |\vec{k}_i\rangle$$

(4.1)

Particule cible dans l'état interne ^(1a), avec un centre de masse dans l'état

$$|\varphi\rangle = \sum_{\vec{k}} c(\vec{k}) |\vec{k}\rangle \quad (4.2)$$

superposition linéaire d'ondes planes \vec{k} (états d'impulsion $\vec{p} = \hbar\vec{k}$)
 Particule projectile dans l'état $|\vec{k}_i\rangle$, d'impulsion $\hbar\vec{k}_i$.

Etat final du système global $|\Psi_{fin}\rangle$

- On se place en représentation d'interaction par rapport à l'hamiltonien non perturbé (décrivant l'énergie propre des particules)
 Après la collision l'état du système global évolue librement et est donc constant en représentation d'interaction

- Si la particule projectile est dans l'état $|\vec{k}_f\rangle$ après la collision, chaque état $|\vec{k}\rangle$ de la superposition (4.2) est transformé en $|\vec{k} + \vec{k}_i - \vec{k}_f\rangle$ à cause de la conservation de l'impulsion globale au cours du processus de diffusion.

Si l'on appelle $\gamma(\vec{k}, \vec{k}_i, \vec{k}_f)$ l'amplitude de probabilité du processus $|\vec{k}\rangle \otimes |\vec{k}_i\rangle \rightarrow |\vec{k} + \vec{k}_i - \vec{k}_f\rangle \otimes |\vec{k}_f\rangle$, et si l'on utilise la linéarité de l'équation de Schrödinger, l'état final du système global partant de (4.1) s'écrit

$$|\Psi_{fin}\rangle = |a\rangle \otimes \sum_{\vec{k}_f} \sum_{\vec{k}} \gamma(\vec{k}, \vec{k}_i, \vec{k}_f) c(\vec{k}) |\vec{k} + \vec{k}_i - \vec{k}_f\rangle \otimes |\vec{k}_f\rangle \quad (4.3)$$

- En introduisant l'opérateur de translation d'impulsion $\exp[i(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot \vec{R}]$, où \vec{R} est l'opérateur position de la particule cible, on peut écrire

$$|\vec{k} + \vec{k}_i - \vec{k}_f\rangle = e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot \vec{R}} |\vec{k}\rangle \quad (4.4)$$

- Par ailleurs, comme la vitesse $\hbar\vec{k}/M$ de la particule cible dans l'état $|\vec{k}\rangle$ est très faible devant celle des projectiles, on peut négliger la dépendance en \vec{k} des amplitudes $\gamma(\vec{k}, \vec{k}_i, \vec{k}_f)$

$$\gamma(\vec{k}, \vec{k}_i, \vec{k}_f) \simeq \gamma(\vec{k}_i, \vec{k}_f) \quad (4.5)$$

Le fait de négliger la variation de vitesse de la particule cible au cours du processus de diffusion entraîne aussi que

$$|\vec{k}_i| = |\vec{k}_f| \quad (4.6)$$

La diffusion peut être considérée comme élastique

- Finalement, en reportant (4.4) et (4.5) dans (4.3), on obtient

$$|\Psi_{fin}\rangle = |a\rangle \otimes \sum_{\vec{k}_f} \gamma(\vec{k}_i, \vec{k}_f) e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot \vec{R}} |\varphi\rangle \otimes |\vec{k}_f\rangle \quad (4.7)$$

On a utilisé (4.2).

Cohérences spatiales de la particule cible dans l'état final

- Si l'on ne s'intéresse qu'à l'état du centre de masse de la particule cible, il faut prendre la trace de l'opérateur densité global (dans l'état final) sur l'état interne et sur la particule projectile diffusée

$$\langle \vec{r}' | \rho_{fin} | \vec{r}'' \rangle = \sum_{\vec{k}_f} \langle a, \vec{k}_f, \vec{r}' | \Psi_{fin} \rangle \langle \Psi_{fin} | a, \vec{k}_f, \vec{r}'' \rangle \quad (4.8)$$

- En reportant (4.7) dans (4.8), on obtient

$$\langle \vec{r}' | \rho_{fin} | \vec{r}'' \rangle = \sum_{\vec{k}_f} |\gamma(\vec{k}_i, \vec{k}_f)|^2 \langle \vec{r}' | e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot \vec{R}} | \psi \rangle \langle \varphi | e^{-i(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot \vec{R}} | \vec{r}'' \rangle$$

Pin

(4.9)

c'est-à-dire encore

$$\langle \vec{r}' | \rho_{fin} | \vec{r}'' \rangle = \sum_{\vec{k}_f} |\gamma(\vec{k}_i, \vec{k}_f)|^2 e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot (\vec{r}' - \vec{r}'')} \langle \vec{r}' | \rho_{in} | \vec{r}'' \rangle \quad (4.10)$$

- Dans ce qui précède, on a supposé \vec{k}_i bien défini. Si l'état initial de la particule projetile est un mélange statistique d'états \vec{k}_i avec des poids $\pi(\vec{k}_i)$, il faut en plus moyennner (4.10) sur tous les états initiaux possibles

$$\langle \vec{r}' | \rho_{fin} | \vec{r}'' \rangle = \sum_{\vec{k}_i} \pi(\vec{k}_i) \sum_{\vec{k}_f} |\gamma(\vec{k}_i, \vec{k}_f)|^2 e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot (\vec{r}' - \vec{r}'')} \langle \vec{r}' | \rho_{in} | \vec{r}'' \rangle \quad (4.11)$$

On a bien sur
$$\sum_{\vec{k}_i} \pi(\vec{k}_i) = 1 \quad (4.12)$$

- Conservation de la norme (unitarité de la matrice S)

En faisant $\vec{r}' = \vec{r}''$ dans (4.12) et en écrivant que $\text{Tr} \rho_{in} = \text{Tr} \rho_{fin} = 1$, on obtient, compte tenu de (4.12)

$$\sum_{\vec{k}_f} |\gamma(\vec{k}_i, \vec{k}_f)|^2 = 1 \quad (4.13)$$

Variation de la cohérence spatiale entre 2 points proches

- La sommation sur \vec{k}_f de (4.11) entraîne que $\langle \vec{r}' | \rho_{fin} | \vec{r}'' \rangle$ s'annule dès que $|\vec{r}' - \vec{r}''|$ est plus grand que la longueur d'onde de de Broglie $1/k_0$ de la particule projetile ($k_0 = |\vec{k}_i| = |\vec{k}_f|$). En effet, la projection de $\vec{k}_i - \vec{k}_f$ sur $\vec{r}' - \vec{r}''$ varie entre $-2k_0$ et $+2k_0$ et l'intégrale sur \vec{k}_f fait apparaître, comme dans le cours III, une fonction de diffraction de largeur $1/k_0$

- Pour $|\vec{r}' - \vec{r}''| \gtrsim 1/k_0$, la cohérence spatiale entre \vec{r}' et \vec{r}'' est détruite après une seule collision. Dans ce qui suit, nous nous limiterons au cas

$$|\vec{r}' - \vec{r}''| \ll 1/k_0 \quad (4.14)$$

On peut alors développer en série l'exponentielle de (4.11) en gardant les termes jusqu'au 2^{ème} ordre

$$e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot (\vec{r}' - \vec{r}'')} \approx 1 + i(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot (\vec{r}' - \vec{r}'') - \frac{1}{2} [(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot (\vec{r}' - \vec{r}'')]^2 \quad (4.15)$$

- Le terme d'ordre 0 de (4.15), 1, reporté dans (4.11), donne compte tenu de (4.12) et (4.13), $\langle \vec{r}' | \rho_{in} | \vec{r}'' \rangle$ que l'on veut faire passer dans le membre de gauche pour faire apparaître

$$\langle \vec{r}' | \rho_{fin} | \vec{r}'' \rangle - \langle \vec{r}' | \rho_{in} | \vec{r}'' \rangle = \delta \langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle \quad (4.16)$$

- Le terme d'ordre 1 de (4.15) donne 0 si nous supposons

$$|\gamma(\vec{k}_i, \vec{k}_f)|^2 = |\gamma(-\vec{k}_i, -\vec{k}_f)|^2 \quad (4.17)$$

(invariance des sections efficaces de diffusion dans une réflexion par rapport à l'origine) et

$$\pi(\vec{k}_i) = \pi(-\vec{k}_i) \quad (4.18)$$

(état initial de la particule incidente invariant par réflexion)

Il suffit en effet de changer \vec{k}_i en $-\vec{k}_i$ et \vec{k}_f en $-\vec{k}_f$ pour montrer que la contribution du terme d'ordre 1 de (4.15) à (4.11) est égale à son opposé, et donc s'annule.

- Il ne reste plus que la contribution du terme d'ordre 2, qui donne pour la variation (4.16) de la cohérence spatiale entre 2 points proches le résultat

$$\delta \langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_i} \pi(\vec{k}_i) \sum_{\vec{k}_f} |\chi(\vec{k}_i, \vec{k}_f)|^2 [(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot (\vec{r}' - \vec{r}'')]^2 \langle \vec{r}' | \rho_{in} | \vec{r}'' \rangle \quad (4.19)$$

② Effet de plusieurs processus de diffusion. Temps moyen de destruction des cohérences de la particule cible.

Principe du calcul

- Particule cible, plongée dans un gaz de particules légères (projectiles), et subissant des collisions bien séparées dans le temps
 temps de collision $\tau_c \ll$ temps entre collisions T_c (4.20)
- Les collisions successives subies par la particule cible ne sont pas corrélées entre elles.
- Considérons un intervalle de temps δt tel que
 $\tau_c \ll \delta t \ll T_c$ (4.21)

Comme $\delta t \ll T_c$, la probabilité pour qu'une collision se produise pendant δt est très faible. Par contre, comme comme $\delta t \gg \tau_c$, si une collision se produit, elle a le temps de se dérouler entièrement. Le but de ce paragraphe est de calculer la vitesse de variation moyenne de $\langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle$ entre t et $t + \delta t$ (vitesse de variation "à gros grains").

$$\frac{\delta}{\delta t} \langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle = \frac{\langle \vec{r}' | \rho(t + \delta t) | \vec{r}'' \rangle - \langle \vec{r}' | \rho(t) | \vec{r}'' \rangle}{\delta t} \quad (4.22)$$

- Le principe du calcul est le même que dans le § 1. On remplace ρ_{in} par $\rho(t)$, ρ_{fin} par $\rho(t + \delta t)$, $|\chi(\vec{k}_i, \vec{k}_f)|^2$ par la probabilité pour qu'une particule projectile quelconque passe de \vec{k}_i à \vec{k}_f entre t et $t + \delta t$, et on relie $\pi(\vec{k}_i)$ au nombre de particules projectiles par unité de volume dans l'état \vec{k}_i .

Calcul de la vitesse de variation de $\langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle$

- D'après (4.19), les seuls processus qui font varier $\langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle$ sont les processus de diffusion $\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f$ avec $\vec{k}_i \neq \vec{k}_f$ (le second membre de (4.19) s'annule pour $\vec{k}_i = \vec{k}_f$). Pour calculer la probabilité d'une diffusion $\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f$ avec $\vec{k}_i \neq \vec{k}_f$ on peut donc utiliser la section efficace différentielle de diffusion $\sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f)$
- La probabilité pour qu'une diffusion $\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f$ avec $\vec{k}_i \neq \vec{k}_f$ se produise entre t et $t + \delta t$ est égale à
 $n(\vec{k}_i) v_i \sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f) \delta t$ (4.23)

où $n(\vec{k}_i)$ est le nombre de projectiles d'impulsion $\hbar\vec{k}_i$ par unité de volume et

$$v_i = \frac{\hbar|\vec{k}_i|}{m} \tag{4.24}$$

le module de la vitesse de ces projectiles de masse m . Si les projectiles sont des photons, il faut bien sûr remplacer $n(\vec{k}_i)v_i$ par le flux de photons d'impulsion $\hbar\vec{k}_i$.

- Aux égalités (4.17) et (4.18) correspondent maintenant

$$\sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f) = \sigma(-\vec{k}_i \rightarrow -\vec{k}_f) \tag{4.25}$$

$$n(\vec{k}_i) = n(-\vec{k}_i) \tag{4.26}$$

- Compte tenu de (4.19), on obtient alors pour (4.22)

$$\frac{\delta}{\delta t} \langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_i} v_i n(\vec{k}_i) \sum_{\vec{k}_f} \sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f) [(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot (\vec{r}' - \vec{r}'')]^2 \langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle \tag{4.27}$$

- Le coefficient de $\langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle$ au second membre de (4.27) est négatif et proportionnel à $(\vec{r}' - \vec{r}'')^2$. Il apparaît ainsi que les collisions détruisent la cohérence spatiale de la particule cible entre \vec{r}' et \vec{r}'' , d'autant plus rapidement que le carré de la distance entre \vec{r}' et \vec{r}'' est plus grand.

Rappelons que nous ne tenons pas compte ici des autres causes d'évolution de $\langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle$, comme le vol libre (également du paquet d'ondes), la friction (variation de vitesse de la cible due aux collisions). Nous faisons en effet un calcul à l'ordre zéro en $1/M$.

- Plutôt que d'effectuer les moyennes angulaires figurant dans (4.27) et d'introduire une section efficace effective (comme dans la référence citée à la fin du cours), nous allons montrer maintenant que le coefficient de $\langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle$ au 2^{ème} membre de (4.27) peut être relié exactement à une quantité ayant un sens physique précis, le coefficient de diffusion de l'impulsion de la particule cible.

Pour cela, nous allons au préalable rappeler quelques résultats relatifs au mouvement d'une particule lourde plongée dans un gaz de particules légères.

③ Rappels classiques sur le mouvement d'une particule lourde subissant des collisions avec des particules légères.

Coefficient de diffusion de l'impulsion

- Particule de masse M initialement immobile, subissant des collisions avec des particules légères, de masse $m \ll M$, d'impulsion $\hbar\vec{k}_i$

- Collision avec une particule légère qui passe de \vec{k}_i à \vec{k}_f . Comme l'impulsion globale est conservée au cours de la collision, l'impulsion de la particule lourde change de

$$\delta \vec{p} = \hbar(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \tag{4.28}$$

- Calculons l'accroissement moyen de $\delta \vec{p}^2$ dû à toutes les

collisions se produisant entre t et $t + \delta t$. On ajoute indépendamment les $\delta \vec{p}^2$ des axes différentes collisions

$$\overline{\delta \vec{p}^2} = \sum_{\vec{k}_i} v_i n(\vec{k}_i) \sum_{\vec{k}_f} \sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f) \hbar^2 (\vec{k}_i - \vec{k}_f)^2 \delta t \quad (4.29)$$

$v_i, n(\vec{k}_i), \sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f)$ ont la même signification que dans le § 2.

- On voit que $\overline{\delta \vec{p}^2}$ croît linéairement avec δt . le coefficient de proportionnalité est $2D$ où D est le coefficient de diffusion de l'impulsion

$$\overline{\delta \vec{p}^2} = 2D \delta t \quad (4.30)$$

$$D = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_i} v_i n(\vec{k}_i) \sum_{\vec{k}_f} \sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f) \hbar^2 (\vec{k}_i - \vec{k}_f)^2 \quad (4.31)$$

- Supposons $n(\vec{k}_i)$ isotrope, c'est à dire ne dépendant que de $|\vec{k}_i|$. Même si $\sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f)$ dépend de l'orientation de \vec{k}_f vis à vis de \vec{k}_i , le problème est globalement invariant par rotations, et $\overline{\delta \vec{p}^2}$ croît linéairement avec δt avec un coefficient de proportionnalité $2D/3$.

$$\frac{D}{3} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_i} v_i n(\vec{k}_i) \sum_{\vec{k}_f} \sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f) \hbar^2 [(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot \vec{e}_3]^2 \quad (4.32)$$

où \vec{e}_3 est le vecteur unitaire le long de Oz .

Coefficient de friction

- Dans le référentiel du labo, où la distribution des particules légères est toujours supposée isotrope et décrite par $n(\vec{k}_i)$, la particule lourde est maintenant supposée avoir une impulsion \vec{p} non nulle, et donc une vitesse $\vec{v} = \vec{p}/M$ non nulle

- Pour pouvoir utiliser la propriété de symétrie (4.25), il faut se placer dans le référentiel du centre de masse du système particule lourde + particule légère entrant en collision. Ce référentiel coïncide pratiquement avec le référentiel au repos de la particule lourde puisque $M \gg m$. La collision $\hbar \vec{k}_i \rightarrow \hbar \vec{k}_f$ dans le référentiel du centre de masse apparaît comme une collision $\hbar \vec{k}_i + \frac{m}{M} \vec{p} \rightarrow \hbar \vec{k}_f + \frac{m}{M} \vec{p}$ dans le référentiel du labo. le nombre de particules incidentes par unité de volume est alors dans le référentiel du labo $n(\vec{k}_i + \frac{m}{M\hbar} \vec{p})$. C'est ce même nombre de particules incidentes par unité de volume, $n(\vec{k}_i + \frac{m}{M\hbar} \vec{p})$, qu'il faut utiliser dans le système du centre de masse pour décrire la collision $\hbar \vec{k}_i \rightarrow \hbar \vec{k}_f$.

- Calculons alors la variation moyenne d'impulsion de la particule lourde dans le système du centre de masse, due à toutes les collisions se produisant entre t et $t + \delta t$. Cette variation moyenne $\overline{\delta \vec{p}}$ garde d'ailleurs la même valeur dans le référentiel du labo

$$\overline{\delta \vec{p}} = \sum_{\vec{k}_i} v_i n(\vec{k}_i + \frac{m}{M\hbar} \vec{p}) \sum_{\vec{k}_f} \sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f) \hbar (\vec{k}_i - \vec{k}_f) \delta t \quad (4.33)$$

Développons $n(\vec{k}_i + \frac{m}{M\hbar} \vec{p})$ en puissances de m/M

$$n(\vec{k}_i + \frac{m}{M\hbar} \vec{p}) = n(\vec{k}_i) + \frac{m}{M\hbar} \vec{p} \cdot \vec{\nabla} n(\vec{k}_i) + \dots \quad (4.34)$$

Comme nous sommes dans le système du centre de masse, on peut utiliser (4.25). Par ailleurs $n(\vec{k}_i) = n(-\vec{k}_i)$. On en déduit que la

contributions du terme d'ordre 0 en m/M de (4.34) à (4.33) est nulle. Il reste celle du terme d'ordre 1 qui vaut

$$\overline{\delta \vec{p}} = \sum_{\vec{k}_i} v_i \frac{m}{M\hbar} \vec{p} \cdot \vec{\nabla} n(\vec{k}_i) \sum_{\vec{k}_f} \sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f) \hbar(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \delta t \quad (4.35)$$

Ainsi, c'est parce que la particule lourde est en mouvement dans un gaz isotrope de particules légères qu'elle "voit" dans son référentiel au repos une distribution anisotrope qui exerce sur elle une force non nulle $\overline{\delta \vec{p}} / \delta t$

- Supposons enfin que les particules légères soient en équilibre thermodynamique à la température T (dans le référentiel du labo)

$$n(\vec{k}_i) = N \exp[-\hbar^2 \vec{k}_i^2 / 2m k_B T] \quad (4.36)$$

où N est un coefficient de normalisation. On a alors

$$\vec{\nabla} n(\vec{k}_i) = - \frac{\hbar^2 \vec{k}_i}{m k_B T} n(\vec{k}_i) \quad (4.37)$$

ce qui donne, après report dans (4.35)

$$\overline{\delta \vec{p}} = - \frac{1}{k_B T} \sum_{\vec{k}_i} v_i n(\vec{k}_i) \sum_{\vec{k}_f} \hbar \vec{k}_i \cdot \frac{\vec{p}}{M} \hbar(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f) \delta t \quad (4.38)$$

L'isotropie de $n(\vec{k}_i)$ entraîne que la moyenne angulaire de $\hbar \vec{k}_i \cdot \frac{\vec{p}}{M} \hbar(\vec{k}_i - \vec{k}_f)$ est la même que celle de $\frac{\vec{p}}{3M} \hbar \vec{k}_i \cdot \hbar(\vec{k}_i - \vec{k}_f)$, de sorte qu'on peut écrire

$$\frac{\overline{\delta \vec{p}}}{\delta t} = - \gamma \vec{p} \quad (4.39)$$

où le coefficient de friction γ est donné par

$$\gamma = \frac{1}{3M k_B T} \sum_{\vec{k}_i} v_i n(\vec{k}_i) \sum_{\vec{k}_f} \sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f) \hbar^2 \vec{k}_i \cdot (\vec{k}_i - \vec{k}_f) \quad (4.40)$$

- Par ailleurs, comme la diffusion est élastique dans le système du centre de masse, $\vec{k}_i^2 = \vec{k}_f^2$, de sorte que

$$(\vec{k}_i - \vec{k}_f)^2 = \vec{k}_i^2 + \vec{k}_f^2 - 2\vec{k}_i \cdot \vec{k}_f = 2\vec{k}_i^2 - 2\vec{k}_i \cdot \vec{k}_f = 2\vec{k}_i \cdot (\vec{k}_i - \vec{k}_f) \quad (4.41)$$

On peut donc remplacer dans (4.40) $\vec{k}_i \cdot (\vec{k}_i - \vec{k}_f)$ par $\frac{1}{2}(\vec{k}_i - \vec{k}_f)^2$, ce qui donne finalement, par comparaison de (4.31) et (4.40)

$$\gamma = \frac{D}{3M k_B T} \quad (4.42)$$

L'équation (4.42) exprime le lien qui existe entre fluctuations (caractérisés par D) et dissipation (caractérisé par γ). Elle est valable quelles que soient les variations angulaires et énergétiques de $\sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f)$. Elle montre clairement que la friction est un effet d'ordre supérieur en $1/M$ par rapport à la diffusion et justifie le fait de l'avoir négligé dans les §§ 1 et 2.

④ Réécriture du temps de destruction des cohérences spatiales sous plusieurs formes équivalentes

- Revenons à l'équation (4.27) et prenons l'axe des z le long de $\vec{r}' - \vec{r}''$. On a alors $\vec{r}' - \vec{r}'' = |\vec{r}' - \vec{r}''| \vec{e}_z$. le coefficient de

$\langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle$ peut être réexprimé, grâce à (4.32), en fonction du coefficient de diffusion D , et l'équation (4.27) réécrite sous la forme

$$\frac{\delta \langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle}{\delta t} = - \frac{D}{3\hbar^2} (\vec{r}' - \vec{r}'')^2 \langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle \quad (4.43)$$

qui montre que $\langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle$ s'amortit avec un temps d'amortissement proportionnel au carré de la distance entre \vec{r}' et \vec{r}'' et au coefficient de diffusion de l'impulsion D .

La démonstration très générale qui vient d'être présentée a l'intérêt de dégager le lien étroit qui existe entre amortissement des cohérences spatiales et diffusion de l'impulsion. Nous reviendrons sur ce résultat et sur son interprétation physique dans des chapitres ultérieurs.

- Supposons enfin le gaz de particules légères en équilibre thermodynamique à la température T . On peut alors utiliser (4.42) et réexprimer D en fonction de γ dans (4.43).

Introduisons auparavant la longueur d'onde de de Broglie thermique, ou encore la longueur de cohérence thermique de la particule lourde à la température T

$$\lambda_T = \frac{\hbar}{\sqrt{M k_B T}} \quad (4.44)$$

Si la particule lourde est en équilibre thermodynamique, son opérateur densité est un mélange statistique d'états \vec{p} avec une largeur Δp de l'ordre de $\sqrt{M k_B T}$ (puisque $\vec{p}^2/2M \sim 3k_B T/2$). Sa longueur de cohérence, $\hbar/\Delta p$, est alors donnée par (4.44)

On peut alors, compte tenu de (4.42) et (4.44), réécrire (4.43) sous la forme

$$\frac{\delta \langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle}{\delta t} = - \gamma \frac{(\vec{r}' - \vec{r}'')^2}{\lambda_T^2} \langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle \quad (4.45)$$

qui montre que le temps d'amortissement des cohérences spatiales entre \vec{r}' et \vec{r}'' est plus rapide que le temps d'amortissement de l'impulsion moyenne par un facteur égal au carré de la distance entre \vec{r}' et \vec{r}'' exprimé en unités de la longueur d'onde de de Broglie thermique de la particule.

Référence E. Joos and H.D. Zeh, Z. Phys. B 59, 223-243 (1985)

Cette référence ne démontre pas les équations (4.43) et (4.45) mais on peut y trouver des évaluations numériques du temps de destruction des cohérences spatiales correspondant à diverses situations expérimentales.

07.02.89

Autre exemple de destruction des cohérences spatiales
Diffusion de photons ou de particules légères (suite).

⑤ Discussion physique

a - But de ce paragraphe

- Dans le paragraphe 4 précédent a été établie une formule importante (4.43) reliant la vitesse de destruction des cohérences spatiales d'une particule lourde à un coefficient D décrivant la diffusion de l'impulsion de cette particule lourde sous l'effet des collisions qu'elle subit avec des particules beaucoup plus légères qu'elle.
- Si pour simplifier nous nous limitons à un problème à 1 dimension, la formule (4.43) se réécrit

$$\frac{\delta}{\delta t} \langle x' | \rho | x'' \rangle = - \frac{D}{\hbar^2} (x' - x'')^2 \langle x' | \rho | x'' \rangle \quad (5.1)$$

où le coefficient de diffusion D caractérise la vitesse d'accroissement de $\langle \delta p^2 \rangle$

$$\langle \delta p^2 \rangle = 2D \delta t \quad (5.2)$$

avec

$$\delta p = p(t + \delta t) - p(t) \quad (5.3)$$

δp est l'accroissement de p pendant un temps δt grand le temps associé à une collision

- Le but de ce paragraphe 5 est d'interpréter physiquement le lien qui existe entre destruction des cohérences spatiales et diffusion de l'impulsion.

b - Lien entre la cohérence spatiale globale et la fonction de distribution de l'impulsion

- Pour la discussion qui suit, il est commode d'introduire une fonction $F(u)$ qui caractérise l'ensemble des cohérences quantiques entre tous les couples de points x', x'' tels que $x' - x'' = u$. Pour cela, définissons les nouvelles variables x, u à partir de x', x''

$$x = \frac{1}{2}(x' + x'') \quad u = x' - x'' \quad (5.4)$$

ce qui entraîne

$$x' = x + \frac{u}{2} \quad x'' = x - \frac{u}{2} \quad (5.5)$$

et donc

$$\rho(x', x'') = \langle x' | \rho | x'' \rangle = \langle x + \frac{u}{2} | \rho | x - \frac{u}{2} \rangle \quad (5.6)$$

Par définition, nous posons

$$F(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x + \frac{u}{2} | \rho | x - \frac{u}{2} \rangle \quad (5.7)$$

$F(u)$ est la somme de toutes les cohérences quantiques entre couples de points séparés par une distance donnée u , que nous pouvons encore appeler "cohérence spatiale globale à une distance u ".

- Les kets $|x\rangle$ sont les kets propres de l'opérateur position X
 $X|x\rangle = x|x\rangle$ (5.8)

Considérons aussi les kets propres $|p\rangle$ de l'opérateur impulsion P
 $P|p\rangle = p|p\rangle$ (5.9)

reliés aux précédents par la relation
 $\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ (5.10)

Dans (5.7) insérons 2 fois, entre $\langle x + \frac{u}{2}|$ et p et entre p et $|x - \frac{u}{2}\rangle$, la relation de fermeture
 $\int_{-\infty}^{+\infty} dp |p\rangle\langle p| = \mathbb{1}$ (5.11)

relative à la base orthonormée $\{|p\rangle\}$. Il vient
 $\mathcal{F}(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \int_{-\infty}^{+\infty} dp' \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x + \frac{u}{2}|p\rangle \langle p|p'\rangle \langle p'|x - \frac{u}{2}\rangle$ (5.12)

L'équation (5.10) donne alors
 $\mathcal{F}(u) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \int_{-\infty}^{+\infty} dp' \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i(p-p')\frac{x}{\hbar}} e^{i(p+p')\frac{u}{2\hbar}} \langle p|p'\rangle$ (5.13)

L'intégrale sur x fait apparaître $\delta(p-p')$
 $\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i(p-p')\frac{x}{\hbar}} = \delta(p-p')$ (5.14)

de sorte qu'on obtient finalement, après intégration sur p'
 $\mathcal{F}(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \mathcal{P}(p) e^{ipu/\hbar}$ (5.15)

où
 $\mathcal{P}(p) = \langle p|p|p\rangle$ (5.16)

est la fonction de distribution de l'impulsion. Il apparaît ainsi que la cohérence spatiale globale à la distance u est la transformée de Fourier, à la valeur u , de la fonction de distribution de l'impulsion.

c - Allure de $\mathcal{F}(u)$ et $\mathcal{P}(p)$ pour une particule se trouvant dans une superposition linéaire ou un mélange statistique de 2 paquets d'ondes bien séparés spatialement

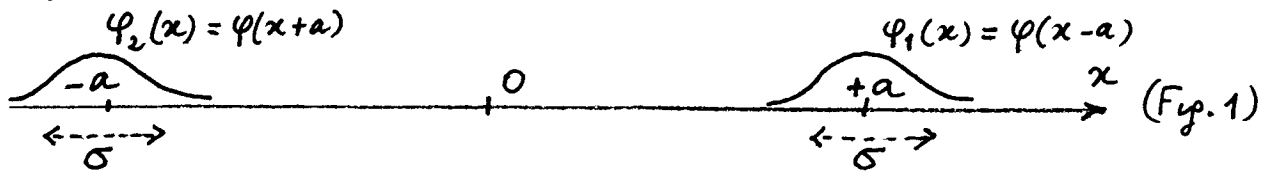
Fonction d'onde en représentation x

- Considérons tout d'abord un paquet d'ondes décrit par la fonction d'onde réelle $\varphi(x)$, centrée en $x=0$, de largeur $\Delta x = \sigma$
 La fonction
 $\varphi_1(x) = \varphi(x-a)$ (5.17)

est obtenue par translation de $\varphi(x)$ d'une quantité a le long de Ox (la valeur de φ_1 en x est égale à la valeur de φ au point $x-a$ qui vient en x après une telle translation). De même, la fonction

$\varphi_2(x) = \varphi(x+a)$ (5.18)

est la fonction obtenue à partir de $\varphi(x)$ après une translation $-a$



Les 2 paquets d'ondes sont bien séparés spatialement si $a \gg \sigma$ V-3
(5.19)

- Dans ce qui suit, nous considérons soit la superposition linéaire $\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_1(x) - \varphi_2(x)] = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi(x-a) - \varphi(x+a)]$ (5.20)

soit le mélange statistique des états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ avec des poids $1/2$

$$\rho = \frac{1}{2} |\varphi_1\rangle\langle\varphi_1| + \frac{1}{2} |\varphi_2\rangle\langle\varphi_2| \quad (5.21)$$

Fonctions d'onde en représentation p

- Soit $\bar{\varphi}(p)$ la transformée de Fourier de $\varphi(x)$

$$\bar{\varphi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \varphi(x) \quad (5.22)$$

C'est une fonction de largeur $\Delta p \sim \hbar/\Delta x \sim \hbar/\sigma$

- La transformée de Fourier $\bar{\varphi}_1(p)$ de $\varphi_1(x) = \varphi(x-a)$ s'écrit

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}_1(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \varphi(x-a) = \frac{e^{-ipa/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-ipx'/\hbar} \varphi(x') \\ &= e^{-ipa/\hbar} \bar{\varphi}(p) \end{aligned} \quad (5.23)$$

On a posé $x' = x - a$ et utilisé (5.22). Un calcul analogue donne pour la transformée de Fourier $\bar{\varphi}_2(p)$ de $\varphi_2(x) = \varphi(x+a)$

$$\bar{\varphi}_2(p) = e^{ipa/\hbar} \bar{\varphi}(p) \quad (5.24)$$

- On en déduit que la fonction d'onde $\bar{\Psi}(p)$ en représentation p associée à (5.20) s'écrit

$$\bar{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-ipa/\hbar} - e^{ipa/\hbar}] \bar{\varphi}(p) = -i\sqrt{2} \sin \frac{pa}{\hbar} \bar{\varphi}(p) \quad (5.25)$$

Allure de la distribution d'impulsions $\mathcal{P}(p)$

- Pour la superposition linéaire d'états (5.20), c'est le carré du module de (5.25)

$$\mathcal{P}(p) = 2 \sin^2 \frac{pa}{\hbar} |\bar{\varphi}(p)|^2 \quad (5.26)$$

$|\bar{\varphi}(p)|^2$ est une fonction de largeur de l'ordre de \hbar/σ . Les oscillations de $\sin^2 \frac{pa}{\hbar}$, de période $\pi\hbar/a$, sont beaucoup plus rapides compte tenu de (5.19). Nous obtenons ainsi pour $\mathcal{P}(p)$ une figure analogue à une figure d'interférence avec des franges resserrées, dont l'enveloppe, plus large, a l'allure d'une courbe de diffraction (voir Fig 2.2)

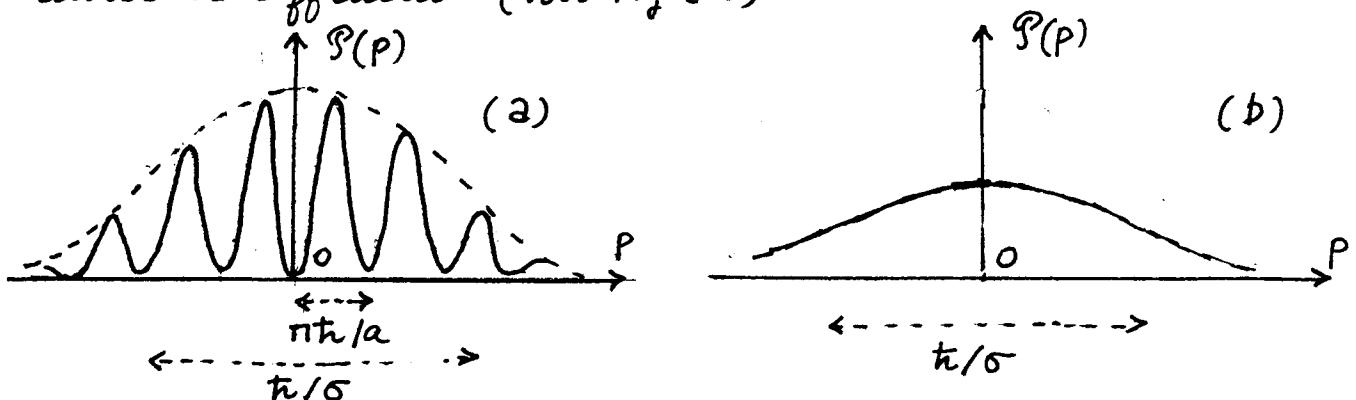


Fig. 2 : Allure de $\mathcal{P}(p)$ pour la superposition linéaire d'états (5.20) [Fig. a] et pour le mélange statistique (5.21) [Fig. b]

- Pour le mélange statistique d'états (5.21), $\mathcal{P}(p)$ est donné V-4
 par la somme de $|\bar{\varphi}_1(p)|^2$ et $|\bar{\varphi}_2(p)|^2$ avec des poids $1/2$. On a
 donc dans ce cas

$$\mathcal{P}(p) = |\bar{\varphi}(p)|^2 \quad (5.27)$$

L'allure correspondante de $\mathcal{P}(p)$ est représentée sur la figure 2.6
 Les ondulations présentes sur la figure (2.2) et absentes sur la
 figure (2.6) traduisent donc l'existence d'une cohérence spatiale
 entre les 2 paquets d'ondes.

Allure de la fonction $\mathcal{F}(u)$

- D'après (5.7), on a pour la superposition linéaire d'états (5.20)

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(u) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x + \frac{u}{2}) \psi^*(x - \frac{u}{2}) \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\varphi_1(x + \frac{u}{2}) \varphi_1(x - \frac{u}{2}) + \varphi_2(x + \frac{u}{2}) \varphi_2(x - \frac{u}{2}) - \right. \\ &\quad \left. - \varphi_1(x + \frac{u}{2}) \varphi_2(x - \frac{u}{2}) - \varphi_2(x + \frac{u}{2}) \varphi_1(x - \frac{u}{2}) \right] \end{aligned} \quad (5.28)$$

On en déduit pour $\mathcal{F}(u)$ l'allure représentée sur la figure (3.2)
 Notons que $\mathcal{F}(0) = 1$ (normalisation de ψ) et que $\mathcal{F}(\pm 2a) \simeq -1/2$
 (orthonormalisation de φ_1 et φ_2). On voit sur $\mathcal{F}(u)$ 3 structures de
 largeur de l'ordre de σ : l'une centrée en $u = 0$, correspondant à
 la longueur d'onde de cohérence de chaque paquet d'ondes, les
 2 autres, centrées en $u = +2a$ et $u = -2a$, correspondant à la
 cohérence entre les 2 paquets d'ondes

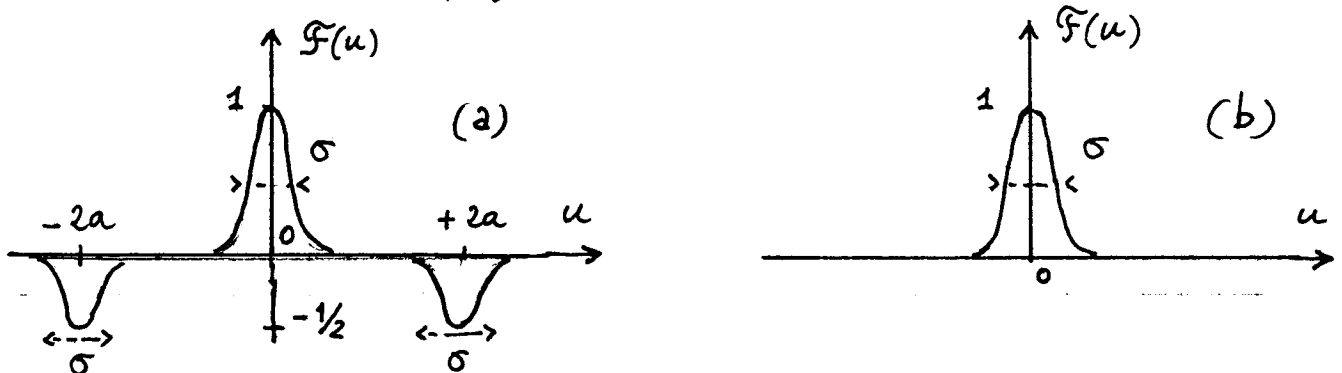


Fig. 3 : Allure de $\mathcal{F}(u)$ pour la superposition linéaire d'états
 (5.20) [Fig. 2] et pour le mélange statistique (5.21) [Fig. b]

- Pour le mélange statistique (5.21), on a

$$\mathcal{F}(u) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\varphi_1(x + \frac{u}{2}) \varphi_1(x - \frac{u}{2}) + \varphi_2(x + \frac{u}{2}) \varphi_2(x - \frac{u}{2}) \right] \quad (5.29)$$

On n'a plus qu'une seule structure, centrée en $u = 0$, et de
 largeur σ [Fig. 3.b].

d. Interprétation physique de la vitesse de destruction des cohérences spatiales.

- D'après (5.1), la cohérence spatiale entre 2 paquets d'ondes
 distants de $2a$ est détruite avec un temps

$$\frac{1}{T_{rel}(2a)} = \frac{4D a^2}{\hbar^2} \quad (5.30)$$

$T_{rel}(2a)$ est le temps de relaxation de la cohérence spatiale

entre 2 points distants de $2a$.

- Pour interpréter physiquement (5.30), il suffit de comprendre comment les collisions de la particule lourde avec les particules légères qui l'environnent font passer la distribution de la particule lourde de la forme représentée sur la figure (2.2) à celle représentée sur la figure (2.6).

Chacune de ces collisions change l'impulsion de la particule lourde d'une quantité qui change aléatoirement d'une collision à l'autre. Dans l'espace des impulsions, l'impulsion de la particule lourde effectue une marche au hasard caractérisé par le coefficient de diffusion D défini en (5.2) et (5.3). Si à $t=0$, la fonction de distribution de l'impulsion est une fonction delta $\delta(p-p_0)$, on s'attend à ce qu'elle devienne, un instant Δt après, une fonction de largeur non nulle Δp , donnée par $(\Delta p)^2 = 2D \Delta t$.

Or, la fonction $\mathcal{P}(p)$ de la figure (2.2) peut être considérée comme le produit de convolution de $\delta(p-p_0)$ et $\mathcal{P}(p_0)$

$$\mathcal{P}(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp_0 \mathcal{P}(p_0) \delta(p-p_0) \quad (5.31)$$

Nous verrons plus loin que l'équation d'évolution de $\mathcal{P}(p)$ est linéaire. Si on part à $t=0$ de (5.31), comme chaque fonction $\delta(p-p_0)$ a acquis une certaine largeur Δp après un temps Δt , on s'attend à ce que l'effet des collisions soit de remplacer le produit de convolution (5.31) par un autre

$$\mathcal{P}(p, \Delta t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp_0 \mathcal{P}(p_0) g(p-p_0, \Delta t) \quad (5.32)$$

où $g(p-p_0, \Delta t)$ est une fonction centrée en p_0 , de largeur Δp telle que $(\Delta p)^2 = 2D \Delta t$.

Les oscillations de période $\pi \hbar / a$ présentes dans $\mathcal{P}(p, t=0)$ auront donc disparu quand la largeur de la fonction $g(p-p_0, \Delta t)$ figurant dans (5.32) deviennent de l'ordre de cette période $\pi \hbar / a$. Les "creux" de la figure (2.2) sont alors "remplis" le temps de relaxation $T_{rel}(2a)$ de la cohérence spatiale entre les 2 paquets d'ondes est donc défini par $(\Delta p)^2 = 2D \Delta t$ avec $\Delta p = \pi \hbar / a$ et $\Delta t = T_{rel}(2a)$, ce qui donne

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{a^2} \sim 2D T_{rel}(2a) \quad (5.33)$$

soit encore

$$\frac{1}{T_{rel}(2a)} \sim \frac{2D a^2}{\pi^2 \hbar^2} \quad (5.34)$$

On retrouve bien à un coefficient près (5.30). Le raisonnement précédent permet ainsi de comprendre polynomiquement pourquoi $1/T_{rel}(2a)$ est proportionnel au carré a^2 de la distance entre les 2 paquets d'ondes et au coefficient de diffusion D de l'impulsion de la particule.

La formule (5.1) laisse penser que $T_{el}(2a)$ devient infiniment court quand $|x' - x''| \rightarrow \infty$. Il ne faut pas oublier cependant les approximations sur lesquelles repose la démonstration de (5.1).

Nous avons en effet supposé que $|x' - x''| \ll \lambda_0$ où λ_0 est la longueur d'onde de de Broglie des particules légères entrant en collision avec la particule lourde (voir formule (4.14)). Si $|x' - x''| \gtrsim \lambda_0$, il suffit d'une seule collision pour détruire la cohérence spatiale entre x' et x'' . Le temps de relaxation de $\langle x' | \rho | x'' \rangle$ est alors le temps moyen séparant 2 collisions successives subies par la particule lourde.

e - les phénomènes négligés dans la discussion précédente

- Nous nous sommes limités dans ce qui précède aux effets d'ordre le plus bas en $1/M$. Nous avons donc négligé
 - (i) le vol libre de la particule lourde. Ce phénomène provoque, en l'absence de collisions, un étalement du paquet d'ondes. Ce phénomène change-t-il la portée des cohérences spatiales?
 - (ii) la friction associée au changement de la vitesse de la particule lourde lors des collisions. Ce phénomène tend à réduire la largeur Δp de $P(p)$ et augmente donc ~~aussi~~ la portée des cohérences spatiales.
- Pour compléter l'étude de ce chapitre, il faut donc résoudre un certain nombre de problèmes
 - (i) Etablir l'équation cinétique quantique décrivant l'évolution de l'opérateur densité de la particule lourde et tenant compte de l'effet des divers processus : vol libre, friction, diffusion.
Etudier en particulier les diverses formes de cette équation cinétique suivant la représentation choisie pour l'opérateur densité
 - (ii) Résoudre cette équation cinétique et comprendre l'évolution temporelle des cohérences spatiales sous l'effet combiné des divers processus.
- Nous allons laisser de côté pour le moment le problème (i) et admettre le résultat suivant qui sera démontré dans un chapitre ultérieur sur un modèle simple de mouvement Brownien (modèle de Caldeira-Leggett) : l'équation du mouvement de la représentation de Wigner de l'opérateur densité est une équation de Fokker-Planck.
Après quelques rappels sur la représentation de Wigner (voir appendice ci-joint), nous montrons dans le chapitre suivant comment il est possible de résoudre l'équation cinétique, et de comprendre les modifications introduites par le vol libre et la friction sur l'évolution des cohérences.

① - Fonction caractéristique $C(u, v)$ associée à l'opérateur densité ρ

Définition A ρ on associe une fonction de 2 variables réelles

$$\rho \rightarrow C(u, v) = \text{Tr} \left\{ e^{i(uP + vX)/\hbar} \rho \right\} \quad (5.35)$$

X et P : opérateurs positions et impulsions de la particule (à 1 dimension)
 u a les dimensions d'une position, v celles d'une impulsion

Coefficients du développement de $C(u, v)$ en puissances de u et v

- Développons en série l'exponentielle de (5.35). Le coefficient de $u^2 v$ s'écrit

$$C(u, v) = \dots + u^2 v \left(\frac{i}{\hbar}\right)^3 \frac{1}{3!} \text{Tr} \left\{ (P^2 X + P X P + X P^2) \rho \right\} + \dots \quad (5.36)$$

- On en déduit

$$\frac{\partial^2}{\partial u^2} \frac{\partial}{\partial v} C(u, v) \Big|_{u=v=0} = \frac{1}{3} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \langle P^2 X + P X P + X P^2 \rangle + \dots \quad (5.37)$$

$C(u, v)$ est donc bien adaptée au calcul des valeurs moyennes des fonctions symétrisées de X et P

Fonctions caractéristiques associées à $X\rho, \rho X, P\rho, \rho P$

- Comme uP et vX commutent avec $[uP, vX] = -i\hbar uv$, on peut utiliser l'identité de Glauber $\exp(A+B) = \exp(A) \exp(B) \exp(-\frac{1}{2}[A, B])$

$$e^{i(uP + vX)/\hbar} = e^{-iuv/2\hbar} e^{iuP/\hbar} e^{ivX/\hbar} = e^{iuv/2\hbar} e^{ivX/\hbar} e^{iuP/\hbar} \quad (5.38)$$

- On en déduit par dérivation (en posant $\partial_u = \partial/\partial u$)

$$\partial_u e^{i(uP + vX)/\hbar} = \frac{i}{\hbar} \left(P - \frac{v}{2}\right) e^{i(uP + vX)/\hbar} = \frac{i}{\hbar} e^{i(uP + vX)/\hbar} \left(P + \frac{v}{2}\right) \quad (5.39)$$

En multipliant par ρ à droite, en prenant la trace, et en utilisant l'invariance d'une trace dans une permutation circulaire, on montre que, si $C(u, v)$ est la fonction caractéristique de ρ , $\partial_u C(u, v)$ est celle de $(i/\hbar) \rho (P - \frac{v}{2})$ ou de $(i/\hbar) (P + \frac{v}{2}) \rho$.

$$\rho \rightarrow C(u, v) \quad \frac{i}{\hbar} \rho \left(P - \frac{v}{2}\right) \rightarrow \partial_u C(u, v) \quad \frac{i}{\hbar} \left(P + \frac{v}{2}\right) \rho \rightarrow \partial_u C(u, v) \quad (5.40)$$

$$\text{Si } \rho \rightarrow C(u, v) \quad \left\{ \begin{array}{l} \rho P \rightarrow \left(\frac{v}{2} - i\hbar \partial_u\right) C(u, v) \\ P \rho \rightarrow -\left(\frac{v}{2} + i\hbar \partial_u\right) C(u, v) \end{array} \right. \quad (5.41.a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho P \rightarrow \left(\frac{v}{2} - i\hbar \partial_u\right) C(u, v) \\ P \rho \rightarrow -\left(\frac{v}{2} + i\hbar \partial_u\right) C(u, v) \end{array} \right. \quad (5.41.b)$$

Des calculs analogues donnent, après dérivation de (5.38) par rapport à v

$$\text{Si } \rho \rightarrow C(u, v) \quad \left\{ \begin{array}{l} \rho X \rightarrow -\left(\frac{u}{2} + i\hbar \partial_v\right) C(u, v) \\ X \rho \rightarrow \left(\frac{u}{2} - i\hbar \partial_v\right) C(u, v) \end{array} \right. \quad (5.41.c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho X \rightarrow -\left(\frac{u}{2} + i\hbar \partial_v\right) C(u, v) \\ X \rho \rightarrow \left(\frac{u}{2} - i\hbar \partial_v\right) C(u, v) \end{array} \right. \quad (5.41.d)$$

② Représentation de Wigner $w(x, p)$ associée à ρ

Définition $w(x, p)$ est la transformée de Fourier de $C(u, v)$

$$\left\{ \begin{array}{l} w(x, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \iint du dv e^{-i(up + vx)/\hbar} C(u, v) \\ C(u, v) = \iint dx dp e^{i(up + vx)/\hbar} w(x, p) \end{array} \right. \quad (5.42.a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} w(x, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \iint du dv e^{-i(up + vx)/\hbar} C(u, v) \\ C(u, v) = \iint dx dp e^{i(up + vx)/\hbar} w(x, p) \end{array} \right. \quad (5.42.b)$$

D'après (5.35), $C(u=0, v=0) = \text{Tr} \rho = 1$. On déduit alors de (5.42.b)

$$C(u, v) \Big|_{u=v=0} = \iint dx dp w(x, p) = 1 \quad (5.43)$$

Par dérivation de (5.42.a) par rapport à x, p , ou de (5.42.b) par

rapport à u, v , on obtient

$$\text{Si } C(u, v) \leftrightarrow w(x, p) \rightarrow \begin{cases} u C(u, v) \leftrightarrow i\hbar \partial_p w(x, p) & (5.44.a) \\ v C(u, v) \leftrightarrow i\hbar \partial_x w(x, p) & (5.44.b) \\ \partial_u C(u, v) \leftrightarrow (ip/\hbar) w(x, p) & (5.44.c) \\ \partial_v C(u, v) \leftrightarrow (ix/\hbar) w(x, p) & (5.44.d) \end{cases}$$

Expression des valeurs moyennes des produits symétrisés de X et P

- D'après (5.43) et (5.44)

$$\frac{\partial^2}{\partial u^2} \frac{\partial}{\partial v} C(u, v) \Big|_{u=v=0} = \iint dx dp \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^2 \left(\frac{ix}{\hbar}\right) e^{i(uv+vx)/\hbar} w(x, p) \Big|_{u=v=0} \quad (5.45)$$

On en déduit, par comparaison avec (5.37)

$$\frac{1}{3} \langle P^2 X + P X P + X P^2 \rangle = \iint dx dp p^2 x w(x, p) \quad (5.46)$$

- D'après (5.43) et (5.46), $w(x, p)$ se comporte comme une densité de probabilité normée permettant de calculer les valeurs moyennes de produits symétrisés de puissances de X et P

En fait, $w(x, p)$ peut prendre des valeurs négatives et des formules aussi simples que (5.46) n'existent pas pour des produits non symétrisés de puissances de X et P. $w(x, p)$ est en fait une densité de quasi-probabilité.

Représentations de Wigner associées à $X\rho, \rho X, P\rho, \rho P$

En combinant (5.41) et (5.44), on obtient

$$\text{Si } \rho \rightarrow w(x, p), \quad \begin{cases} \rho P \rightarrow (i\frac{\hbar}{2} \partial_x + p) w(x, p) & (5.47.a) \\ P\rho \rightarrow (-i\frac{\hbar}{2} \partial_x + p) w(x, p) & (5.47.b) \\ \rho X \rightarrow (-i\frac{\hbar}{2} \partial_p + x) w(x, p) & (5.47.c) \\ X\rho \rightarrow (i\frac{\hbar}{2} \partial_p + x) w(x, p) & (5.47.d) \end{cases}$$

③ Lien avec la représentation $\{|x\rangle\}$

Définition de $F(x, u)$

C'est la transformée de Fourier de $w(x, p)$ par rapport à p , ou encore celle de $C(u, v)$ par rapport à v

$$F(x, u) = \int dp e^{ipu/\hbar} w(x, p) \quad (5.48)$$

En utilisant (5.42.a), on obtient

$$\begin{aligned} F(x, u) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \iiint dp du' dv e^{ip(u-u')/\hbar} e^{-ivx/\hbar} C(u', v) \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dv e^{-ivx/\hbar} C(u, v) \end{aligned} \quad (5.49)$$

Lien avec les éléments de matrice de ρ en représentation $\{|x\rangle\}$

En reportant (5.35) et (5.38) dans (5.49), on obtient

$$\begin{aligned} F(x, u) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dv e^{-ivx/\hbar} e^{iuv/2\hbar} \text{Tr} \left\{ e^{ivX/\hbar} e^{iuP/\hbar} \rho \right\} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \iint dv dx' e^{i\frac{v}{\hbar}(\frac{u}{2}-x)} \langle x' | e^{ivX/\hbar} e^{iuP/\hbar} \rho | x' \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \iint dv dx' e^{i\frac{v}{\hbar}(\frac{u}{2}-x+x')} \langle x' | e^{iuP/\hbar} \rho | x' \rangle \end{aligned} \quad (5.50)$$

En utilisant $\frac{1}{2\pi\hbar} \int dv e^{\frac{iv}{\hbar}(x'-x+\frac{u}{2})} = \delta(x'-(x-\frac{u}{2}))$ (V-9)
(5.51)

et $e^{-iuP/\hbar} |x'\rangle = |x'+u\rangle$ $\langle x'|e^{iuP/\hbar} = \langle x'+u|$ (5.52)

on obtient

$$F(x, u) = \langle x + \frac{u}{2} | \rho | x - \frac{u}{2} \rangle \quad (5.53)$$

ce qui entraîne, par inversion de (5.48), une autre forme très utilisée de la représentation de Wigner

$$W(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int du e^{-ipu/\hbar} \langle x + \frac{u}{2} | \rho | x - \frac{u}{2} \rangle \quad (5.54)$$

Cohérence globale en position à une distance u

Compte tenu de (5.49), on obtient

$$\mathcal{F}(u) = \int dx F(x, u) = C(u, v=0) \quad (5.55)$$

Distribution de probabilité pour la position

Toujours compte tenu de (5.49) on obtient

$$\mathcal{R}(x) = \langle x | \rho | x \rangle = F(x, u=0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dv e^{-ivx/\hbar} C(u=0, v) \quad (5.56)$$

④ Lien avec la représentation $\{|p\rangle\}$

Calculs très analogues à ceux du § 3. On donne juste les résultats

Fonction $G(p, v)$

$$G(p, v) = \int dx e^{ixv/\hbar} w(x, p) \quad (5.57)$$

$$G(p, v) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int du e^{-ipu/\hbar} C(u, v) \quad (5.58)$$

Lien avec les éléments de matrice de ρ en représentation $\{|p\rangle\}$

$$G(p, v) = \langle p + \frac{v}{2} | \rho | p - \frac{v}{2} \rangle \quad (5.59)$$

$$W(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dv e^{-ixv/\hbar} \langle p + \frac{v}{2} | \rho | p - \frac{v}{2} \rangle \quad (5.60)$$

Cohérence globale en impulsion à une distance v

$$\mathcal{G}(v) = \int dp G(p, v) = C(u=0, v) \quad (5.61)$$

Distribution de probabilité pour l'impulsion

$$\mathcal{P}(p) = \langle p | \rho | p \rangle = G(p, v=0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int du e^{-ipu/\hbar} C(u, v=0) \quad (5.62)$$

Références pour cet appendice

Voir cours VII du cours 83-84

① Equation cinétique pour l'opérateur densité de la particule.a) Equation de Fokker-Planck pour la fonction de Wigner $w(x,p)$ Forme de l'équation

Nous démontrerons dans un chapitre ultérieur que la fonction de Wigner $w(x,p)$ (à 1 dimension) d'une particule P , de masse M , subissant des collisions avec des particules beaucoup plus légères qu'elle, satisfait à l'équation aux dérivées partielles linéaire du 2^{im} ordre

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p}{M} \frac{\partial}{\partial x} - \gamma \frac{\partial}{\partial p} p \right] w(x,p,t) = D \frac{\partial^2}{\partial p^2} w(x,p,t) \quad (6.1)$$

L'équation (6.1) est une équation de Fokker-Planck

Interprétation des coefficients γ et D

- Pour interpréter les coefficients γ et D apparaissant dans (6.1), il est utile de calculer à partir de (6.1) la vitesse de variation de quelques valeurs moyennes. Par exemple, multiplions les 2 membres de (6.1) par p et intégrons sur x et p . Le terme en $\partial/\partial t$ donne $\partial \langle p \rangle / \partial t$ où

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dp p w(x,p,t) \quad (6.2)$$

est la valeur moyenne de p . Le terme en $\partial/\partial x$ donne une contribution nulle lors de l'intégrale sur x si l'on suppose que $w(x,p,t) \rightarrow 0$ si $|x| \rightarrow \infty$. Le terme en $\partial/\partial p$ donne $-\gamma \langle p \rangle$ après une intégration par parties sur p et compte tenu du fait que $p w(x,p,t) \rightarrow 0$ si $|p| \rightarrow \infty$. Enfin le terme en $\partial^2/\partial p^2$ donne 0 après une intégration par parties sur p et compte tenu du fait que $\partial w/\partial p \rightarrow 0$ si $|p| \rightarrow \infty$. Finalement, on obtient

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\gamma \langle p \rangle \quad (6.3)$$

ce qui montre que γ est un coefficient de friction, décrivant la vitesse d'amortissement de l'impulsion.

- Des calculs analogues faits après multiplication des 2 membres de (6.1) par p^2 et intégration sur x et p donnent

$$\frac{d}{dt} \langle p^2 \rangle = -2\gamma \langle p^2 \rangle + 2D \quad (6.4)$$

où

$$\langle p^2 \rangle = \iint dx dp p^2 w(x,p,t) \quad (6.5)$$

Le 1^{er} terme de (6.4), $2\gamma \langle p^2 \rangle$, décrit l'amortissement de $\langle p^2 \rangle$ dû à la friction. Le second, $2D$, décrit un accroissement à vitesse constante de $\langle p^2 \rangle$ et fait apparaître le coefficient D comme un coefficient de diffusion de l'impulsion.

Théorème fluctuation-dissipation.

L'équation (6.4) montre que $\langle p^2 \rangle$ tend avec une constante de temps $(2\gamma)^{-1}$ vers la valeur d'équilibre :

$$\langle p^2 \rangle_{eq} = \frac{D}{\gamma}$$

Si le "réservoir" de particules légères avec lesquelles la particule étudiée P subit des collisions est en équilibre thermodynamique à la température T , on s'attend à ce que la particule P atteigne elle-même un équilibre à la même température, de sorte que

$$\frac{\langle p^2 \rangle_{eq}}{2M} = \frac{1}{2} k_B T \quad (6.7)$$

En éliminant $\langle p^2 \rangle_{eq}$ entre (6.6) et (6.7), on obtient une relation entre D et γ

$$D = M \gamma k_B T \quad (6.8)$$

(Une telle relation a été établie directement sur un modèle simple à 3 dimensions dans le cours IV - voir (4.42)).

Equations de Fokker-Planck pour la distribution de probabilité $\mathcal{P}(p)$ de l'impulsion.

Intégrons sur x les 2 membres de (6.1). Le terme en $\partial/\partial x$ disparaît. On obtient alors pour la distribution de probabilité de l'impulsion

$$\mathcal{P}(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx w(x, p, t) \quad (6.9)$$

l'équation d'évolution

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \gamma \frac{\partial}{\partial p} p \right) \mathcal{P}(p, t) = D \frac{\partial^2}{\partial p^2} \mathcal{P}(p, t) \quad (6.10)$$

qui est également une équation de Fokker-Planck.

Notons qu'il n'est pas possible d'obtenir de la même manière une équation du mouvement pour la distribution de probabilité $R(x)$ de la position.

b) Equation du mouvement de la fonction caractéristique $C(u, v)$

- En utilisant les formules (5.44) du cours V, on déduit immédiatement de (6.1) l'équation du mouvement suivante pour la fonction caractéristique $C(u, v)$:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{M} v \frac{\partial}{\partial u} + \gamma u \frac{\partial}{\partial u} \right] C(u, v, t) = - \frac{D}{\hbar^2} u^2 C(u, v, t) \quad (6.11)$$

On obtient ici une équation aux dérivées partielles linéaire, du 1^{er} ordre, et non pas du 2^{ème} ordre comme (6.1) (Il n'apparaît pas de termes en $\partial^2/\partial u^2$, $\partial^2/\partial v^2$, $\partial^2/\partial u \partial v$)

Il est facile de vérifier que toutes les autres représentations de l'opérateur densité $F(x, u)$, $G(p, v)$ introduites dans le cours V obéissent, comme $w(x, p)$, à des équations aux dérivées partielles du 2^{ème} ordre. La représentation $C(u, v)$ est donc la plus commode si l'on veut résoudre l'équation du mouvement

- Faisons $v=0$ dans (6.11). On obtient l'équation du mouvement

de la cohérence spatiale globale à une distance u ,
 $F(u) = C(u, v=0)$ (voir formule (5.55) du cours V)

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \gamma u \frac{\partial}{\partial u} \right] F(u, t) = - \frac{D}{\hbar^2} u^2 F(u, t) \quad (6.12)$$

L'équation (6.12) n'est autre que la transformée de Fourier par rapport à p de l'équation (6.10).

Notons enfin que la présence de la dérivée $\partial/\partial u$ dans (6.11) interdit d'obtenir de manière aussi simple une équation du mouvement pour $G(v) = C(u=0, v)$.

② Résolution d'une équation aux dérivées partielles linéaire du 1^{er} ordre par la méthode des caractéristiques

a) Equation homogène

Problème : Trouver la fonction $C(u, t)$ de 2 variables réelles t et u , solution de l'équation

$$\frac{\partial}{\partial t} C(u, t) + a(u, t) \frac{\partial}{\partial u} C(u, t) = 0 \quad (6.13)$$

où $a(u, t)$ est une fonction donnée de u et t

Courbes caractéristiques

- En chaque point (t, u) , considérons le vecteur \vec{V} de composantes 1 sur l'axe t , $a(u, t)$ sur l'axe u . Si l'on introduit $\vec{\nabla} = (\partial/\partial t, \partial/\partial u)$, l'équation (6.13) s'écrit

$$\vec{V} \cdot \vec{\nabla} C(u, t) = 0 \quad (6.14)$$

et exprime que $C(u, t)$ ne varie pas quand on se déplace dans la direction \vec{V} autour du point (t, u)

- Considérons alors le réseau de courbes tangentes en chaque point $\left\{ \begin{matrix} t \\ u \end{matrix} \right\}$ au vecteur $\vec{V} \left\{ \begin{matrix} 1 \\ a(u, t) \end{matrix} \right\}$ défini en ce point. Ces courbes sont appelées "courbes caractéristiques". Les fonctions $C(u, t)$, solutions de (6.13), gardent la même valeur sur tous les points d'une même courbe caractéristique

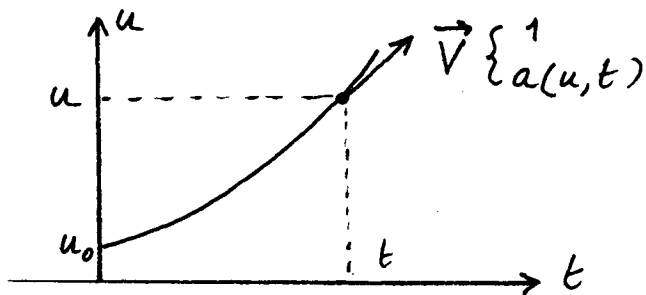


Fig. 1

- Les courbes caractéristiques sont décrites par des fonctions $u(t)$ de t , solutions de l'équation différentielle

$$\frac{d}{dt} u(t) = a(t, u(t)) \quad (6.15)$$

Elles forment une famille de courbes à 1 paramètre u_0

$$u(t) = f(t, u_0) \tag{6.16}$$

Ce paramètre u_0 peut être par exemple l'ordonnée du point d'intersection de la courbe caractéristique considéré avec l'axe des u ($t=0$) - voir la figure 1 - La fonction $f(t, u_0)$ introduite en (6.16) est donc la solution de l'équation différentielle (6.15) correspondant à la condition initiale $u(0) = u_0$.

L'équation (6.16) peut d'ailleurs être inversé et u_0 exprimé en fonction de u et t

$$u_0 = g(u, t) \tag{6.17}$$

L'équation (6.17) donne l'ordonnée de l'intersection avec l'axe des u ($t=0$), de la courbe caractéristique qui passe par le point t, u du plan.

Solution de l'équation aux dérivées partielles

- L'équation (6.14), équivalente à (6.13), exprime que $C(u, t)$ ne varie pas quand on se déplace le long d'une courbe caractéristique et garde donc la même valeur que celle prise au point u_0 où la courbe caractéristique coupe l'axe $t=0$.

- Soit alors $C_0(u_0)$ la fonction de u_0 donnant la valeur initiale de $C(u, t)$ en $t=0$. La solution de (6.13) correspondant à cette condition initiale s'écrit

$$C(u, t) = C_0(g(u, t)) \tag{6.18}$$

Considérons en effet un point quelconque de coordonnées t, u . Ce point est sur une courbe caractéristique coupant l'axe des t en un point d'ordonnée u_0 donnée par (6.17). Comme $C(u, t)$ a la même valeur en tous les points d'une courbe caractéristique, on doit avoir $C(u, t) = C_0(u_0)$ où u_0 est relié à u et t par (6.17), d'où l'équation (6.18)

Généralisation à des fonctions de plus de 2 variable

- Considérons par exemple l'équation

$$\frac{\partial}{\partial t} C(u, v, t) + a_1(u, v, t) \frac{\partial}{\partial u} C(u, v, t) + a_2(u, v, t) \frac{\partial}{\partial v} C(u, v, t) = 0 \tag{6.19}$$

- Les courbes caractéristiques sont les courbes tangentes en chaque point $\{t, u, v\}$ au vecteur de coordonnées $\{1, a_1(u, v, t), a_2(u, v, t)\}$. Elles sont définies par des fonctions $u(t), v(t)$, solutions d'équations différentielles couplées

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d}{dt} u(t) &= a_1(t, u(t), v(t)) \end{aligned} \right. \tag{6.20.a}$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d}{dt} v(t) &= a_2(t, u(t), v(t)) \end{aligned} \right. \tag{6.20.b}$$

Elles forment une famille de courbes à 2 paramètres u_0, v_0

$$\left\{ \begin{aligned} u(t) &= f_1(t, u_0, v_0) \end{aligned} \right. \tag{6.21.a}$$

$$\left\{ \begin{aligned} v(t) &= f_2(t, u_0, v_0) \end{aligned} \right. \tag{6.21.b}$$

u_0 et v_0 étant par exemple les valeurs de $u(t)$ et $v(t)$ en $t=0$.
L'inversion de (6.21) fournit les équations

$$\begin{cases} u_0 = g_1(t, u, v) \\ v_0 = g_2(t, u, v) \end{cases} \quad \begin{matrix} (6.22.a) \\ (6.22.b) \end{matrix}$$

donnant les coordonnées u_0, v_0 de l'intersection avec le plan $t=0$ de la courbe caractéristique passant par le point de coordonnées $\{t, u, v\}$.

- L'équation (6.19) exprime que $C(u, v, t)$ garde la même valeur en tous les points d'une courbe caractéristique. Soit $C_0(u_0, v_0)$ la valeur initiale de $C(u, v, t)$ pour $t=0$. Le même raisonnement que celui fait après (6.18) montre que la solution de (6.19) correspondant à cette condition initiale s'écrit

$$C(u, v, t) = C_0(g_1(u, v, t), g_2(u, v, t)) \quad (6.23)$$

b) Equation inhomogène

- On ajoute maintenant à (6.13) un second membre, linéaire en $C(u, t)$

$$\frac{\partial}{\partial t} C(u, t) + a(u, t) \frac{\partial}{\partial u} C(u, t) = b(u, t) C(u, t) \quad (6.24)$$

où $b(u, t)$ est, comme $a(u, t)$, une fonction donnée de u et t

- Considérons l'une des courbes caractéristiques $u(t) = f(t, u_0)$ introduites dans le paragraphe précédent pour l'équation homogène, et déplaçons nous le long de cette courbe.

Le membre de gauche de (6.24) donne la vitesse de variation de $C(f(t, u_0), t)$ quand on passe de t à $t+dt$. A cause du membre de droite de (6.24), cette vitesse de variation n'est plus nulle, comme dans le paragraphe précédent, mais égale à $b(f(t, u_0), t) C(f(t, u_0), t)$:

$$\frac{d}{dt} C(f(t, u_0), t) = b(f(t, u_0), t) C(f(t, u_0), t) \quad (6.25)$$

C varie donc maintenant le long d'une courbe caractéristique, d'une manière décrite par l'équation différentielle (6.25). Cette équation s'intègre sans difficulté

$$C(f(t, u_0), t) = C_0(u_0) \exp \left\{ \int_0^t dt' b(f(t', u_0), t') \right\} \quad (6.26)$$

où $C_0(u_0)$ est la valeur de C au point d'ordonnée u_0 où la courbe caractéristique coupe l'axe $t=0$. Nous poserons

$$E(t, u_0) = \exp \left\{ \int_0^t dt' b(f(t', u_0), t') \right\} \quad (6.27)$$

Connaissant la fonction $b(u, t)$ et la solution (6.16) de l'équation différentielle (6.15) donnant les courbes caractéristiques, $E(t, u_0)$ s'obtient par une simple intégration

Ainsi, la présence d'un second membre dans (6.24) entraîne que

sur la courbe caractéristique passant en u_0 pour $t=0$, la fonction C au point $\{t, u\}$ n'est plus égale à $C_0(u_0)$, mais à $C_0(u_0)$ que multiplié un nombre $E(t, u_0)$ dépendant de t et u_0 .

- On en déduit la solution de l'équation (6.24) correspondant à la condition initiale $C_0(u_0)$ en $t=0$

Plaçons nous en un point $\{t, u\}$. La caractéristique passant par ce point coupe l'axe $t=0$ en $u_0 = g(u, t)$ (voir (6.17)). D'après (6.26) et (6.27), la valeur de C en $\{t, u\}$ est égale à $C_0(u_0) E(t, u_0)$ où $u_0 = g(u, t)$. On a donc

$$C(u, t) = C_0(g(u, t)) E(t, g(u, t)) \quad (6.28)$$

- La généralisation à plus de 2 variables ne présente pas de difficulté.

Il faut remplacer, au 2^{ème} membre de (6.19), 0 par $b(u, v, t)C(u, v, t)$. L'équation différentielle (6.25) devient

$$\frac{d}{dt} C(f_1(t, u_0, v_0), f_2(t, u_0, v_0), t) = \quad (6.29)$$

$$= b(f_1(t, u_0, v_0), f_2(t, u_0, v_0), t) C(f_1(t, u_0, v_0), f_2(t, u_0, v_0), t)$$

et sa solution s'écrit

$$C(f_1(t, u_0, v_0), f_2(t, u_0, v_0), t) = C_0(u_0, v_0) E(t, u_0, v_0) \quad (6.30)$$

où $C_0(u_0, v_0)$ est la valeur initiale de C en $t=0$ et où

$$E(t, u_0, v_0) = \exp \left\{ \int_0^t dt' b(f_1(t', u_0, v_0), f_2(t', u_0, v_0), t') \right\} \quad (6.31)$$

Finalement, la solution de l'équation aux dérivées partielles avec 2^{ème} membre, correspondant à la condition initiale $C_0(u_0, v_0)$ en $t=0$, s'écrit

$$C(u, v, t) = C_0(g_1(u, v, t), g_2(u, v, t)) E(t, g_1(u, v, t), g_2(u, v, t)) \quad (6.32)$$

③ Première application : évolution temporelle de la cohérence spatiale globale à une distance u , $F(u, t)$

a) Solution de l'équation du mouvement de $F(u, t)$

- L'équation (6.12) est une équation aux dérivées partielles linéaire, inhomogène, à 2 variables u et t , du 1^{er} ordre.

- L'équation différentielle (6.15) définissant les courbes caractéristiques s'écrit ici

$$\frac{d}{dt} u(t) = \gamma u(t) \quad (6.33)$$

et a pour solution

$$u(t) = u_0 e^{\gamma t} \quad (6.34)$$

u_0 étant la valeur de $u(t)$ en $t=0$. L'inversion de (6.34) donne

$$u_0 = u e^{-\gamma t} \quad (6.35)$$

c'est à dire la valeur de u_0 pour la courbe caractéristique passant par le point $\{t, u\}$

- La fonction multipliant $\mathcal{F}(u, t)$ au 2^{ème} membre de (6.12) est $\frac{|V|-7}{(6.36)}$

$$b(u, t) = -\frac{D}{\hbar^2} u^2 \quad (6.36)$$

On a donc le long d'une courbe caractéristique (6.34)

$$b(u(t), t) = -\frac{D}{\hbar^2} u^2(t) = -\frac{D u_0^2}{\hbar^2} e^{2\gamma t} \quad (6.37)$$

On en déduit pour la fonction $E(t, u_0)$ définie en (6.27)

$$E(t, u_0) = \exp\left\{-\frac{D u_0^2}{\hbar^2} \int_0^t dt' e^{2\gamma t'}\right\} = \exp\left\{-\frac{D u_0^2}{\hbar^2} \left(\frac{e^{2\gamma t} - 1}{2\gamma}\right)\right\} \quad (6.38)$$

- D'après (6.28), la solution de l'équation (6.12) correspondant à la valeur initiale $\mathcal{F}_0(u_0)$ s'écrit, compte tenu de (6.35) et (6.38)

$$\mathcal{F}(u, t) = \mathcal{F}_0(u e^{-\gamma t}) \exp\left\{-\frac{D u^2}{\hbar^2} \left(\frac{1 - e^{-2\gamma t}}{2\gamma}\right)\right\} \quad (6.39)$$

b) Discussion physique

Comportement aux temps courts ($\gamma t \ll 1$)

- Pour $\gamma t \ll 1$, on peut remplacer $\mathcal{F}_0(u e^{-\gamma t})$ par $\mathcal{F}_0(u)$ et $(1 - e^{-2\gamma t})/2\gamma$ par $(1 - 1 + 2\gamma t)/2\gamma = t$, de sorte que

$$\mathcal{F}(u, t) = \mathcal{F}_0(u) \exp\left(-\frac{D u^2}{\hbar^2} t\right) \quad (6.40)$$

On retrouve exactement le résultat du cours IV. Comme la friction n'a pas eu encore le temps d'agir ($\gamma t \ll 1$), l'effet de l'interaction avec l'environnement est simplement d'amortir la cohérence spatiale globale à une distance u avec un taux d'amortissement $D u^2/\hbar^2$, proportionnel à u^2 et à D .

- Supposons par exemple que la particule soit initialement dans une superposition linéaire de 2 paquets d'ondes identiques de largeur σ centrés en $x = -a$ et $x = +a$ (formule (5.20)). L'allure de $\mathcal{F}(u)$ est alors donnée par la figure 3a du cours V.

Supposons que a soit suffisamment grand pour que

$$\frac{D a^2}{\hbar^2} t \gg 1 \quad (6.41)$$

t étant par ailleurs suffisamment petit pour que

$$\gamma t \ll 1 \quad \frac{D \sigma^2}{\hbar^2} t \ll 1 \quad (6.42)$$

Pour de tels temps, on a le droit d'utiliser (6.40) puisque $\gamma t \ll 1$. Les 2 structures latérales de la figure 3.2 de V sont complètement amorties par l'exponentielle de (6.40) à cause de (6.41). Par contre la structure centrale est très peu affectée à cause de (6.42). Finalement l'effet de l'interaction avec l'environnement est de faire passer $\mathcal{F}(u)$ de la forme représentée sur la figure 3.2 de V à celle représentée sur la figure 3.b : la superposition linéaire des 2 paquets d'ondes a été transformée en un mélange statistique.

Comportement aux temps longs ($\gamma t \gg 1$)

- On peut alors remplacer $\mathcal{F}_0(u e^{-\gamma t})$ par $\mathcal{F}_0(0) = 1$ et $1 - e^{-2\gamma t}$ par 1, ce qui donne

$$\mathcal{F}(u) = \exp\left(-\frac{D u^2}{2\hbar^2 \gamma}\right) \quad (6.43)$$

$\mathcal{F}(u)$ tend, pour $t \gg 1/\gamma$, vers une distribution d'équilibre gaussienne.

- La transformée de Fourier de $F(u)$, qui n'est autre que la fonction de distribution $P(p)$ de l'impulsion, est donc également une gaussienne. Compte tenu de la formule

$$\int dx e^{-ipx/\hbar} e^{-x^2/a^2} = a\sqrt{\pi} e^{-p^2 a^2/4\hbar^2} \quad (6.44)$$

on a
$$P(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int du e^{-ipu/\hbar} e^{-Du^2/2\hbar^2\gamma} = \frac{1}{\sqrt{2\pi D/\gamma}} e^{-p^2\gamma/2D} \quad (6.45)$$

- Si l'environnement est en équilibre thermodynamique à la température, on a d'après (6.8), $D = M\gamma k_B T$ et par suite

$$F(u) = e^{-\frac{u^2}{2\lambda_T^2}} \quad P(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi M k_B T}} e^{-\frac{p^2}{2M k_B T}} \quad (6.46)$$

où
$$\lambda_T = \frac{\hbar}{\sqrt{M k_B T}} \quad (6.47)$$

est la longueur d'onde de de Broglie thermique à la température T .

On en déduit que la particule lourde est elle aussi en équilibre à la température T et que la longueur de cohérence spatiale de cette particule est la longueur d'onde de de Broglie λ_T .

Cas général

- Revenons à la formule générale (6.39) et montrons comment on peut construire graphiquement $F(u, t)$ à partir de $F_0(u)$

- Ne tenons pas compte tout d'abord du dernier terme de (6.40), $\exp\{-\gamma t\}$. $F(u, t) = F_0(u e^{-\gamma t})$ s'obtient alors à partir de $F_0(u)$ par une dilatation le long de l'axe u de facteur $e^{\gamma t}$ (puisque la valeur de F en u est égale à la valeur de F_0 au point $u e^{-\gamma t}$ qui se transforme en u après une telle dilatation).

- Sur la fonction ainsi dilatée, l'effet de l'exponentielle de (6.39) est de réduire F par un facteur de réduction qui croît exponentiellement avec u^2

- La 1^{ère} transformation (dilatation) correspond à un allongement des cohérences spatiales dû à la friction qui diminue la dispersion sur p . La seconde transformation (réduction de F en $\exp\{-\gamma t\}$) correspond à la destruction des cohérences spatiales par la diffusion d'impulsion.

④ 2^{ème} Application : solution de l'équation du mouvement de $C(u, v, t)$

- Pour étudier d'autres problèmes, comme l'évolution de la distribution de probabilité de la position, il faut au préalable résoudre l'équation aux dérivées partielles (6.11) qui est du 1^{er} ordre, linéaire, inhomogène, à 3 variables u, v, t

- Courbes caractéristiques : solutions des 2 équations différentielles :

$$\frac{d}{dt} v(t) = 0 \quad \frac{d}{dt} u(t) = \gamma u(t) - \frac{v(t)}{m} \quad (6.48)$$

$$\hookrightarrow v(t) = v_0 \quad u(t) = \left(u_0 - \frac{v_0}{m\gamma}\right) e^{\gamma t} + \frac{v_0}{m\gamma} \quad (6.49)$$

où u_0 et v_0 sont les valeurs de $u(t)$ et $v(t)$ en $t = 0$

- Inversion de (6.49)

$$v_0 = v \quad u_0 = \frac{v}{m\gamma} + \left(u - \frac{v}{m\gamma}\right) e^{-\gamma t} = u e^{-\gamma t} + \frac{v}{m\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) \quad (6.50)$$

On en déduit

$$u_0 - \frac{v_0}{M\gamma} = \left(u - \frac{v}{M\gamma}\right) e^{-\gamma t} \quad (6.51) \quad \text{VI-9}$$

- Fonction $b(u, v, t)$ multipliant $C(u, v, t)$ au second membre de (6.11)

$$b(u, v, t) = -\frac{D}{\hbar^2} u^2 \quad (6.52)$$

Le long d'une courbe caractéristique, on a d'après (6.52) et (6.49)

$$\begin{aligned} b(u(t), v(t), t) &= -\frac{D}{\hbar^2} \left[\left(u_0 - \frac{v_0}{M\gamma}\right) e^{\gamma t} + \frac{v_0}{M\gamma} \right]^2 \\ &= -\frac{D}{\hbar^2} \left[\left(u_0 - \frac{v_0}{M\gamma}\right)^2 e^{2\gamma t} + 2\frac{v_0}{M\gamma} \left(u_0 - \frac{v_0}{M\gamma}\right) e^{\gamma t} + \frac{v_0^2}{M^2\gamma^2} \right] \end{aligned} \quad (6.53)$$

On en déduit pour la fonction $E(t, u_0, v_0)$ définie en (6.31)

$$\begin{aligned} E(t, u_0, v_0) &= \exp \left\{ \int_0^t dt' b(u(t'), v(t'), t') \right\} = \\ &= \exp \left\{ -\frac{D}{\hbar^2} \left[\left(u_0 - \frac{v_0}{M\gamma}\right)^2 \left(\frac{e^{2\gamma t} - 1}{2\gamma}\right) + 2\frac{v_0}{M\gamma} \left(u_0 - \frac{v_0}{M\gamma}\right) \left(\frac{e^{\gamma t} - 1}{\gamma}\right) + \frac{v_0^2}{M^2\gamma^2} t \right] \right\} \end{aligned} \quad (6.54)$$

- Finalement, d'après (6.32), la solution de (6.11) correspondant à la condition initiale $C_0(u_0, v_0)$ en $t=0$, s'écrit

$$C(u, v, t) = C_0(u_0, v_0) E(t, u_0, v_0) \quad (6.55)$$

où, au 2^{ème} membre de (6.55), u_0 et v_0 sont remplacés par leur expression (6.50) et (6.51) en fonction de u, v, t . On obtient ainsi

$$\begin{aligned} C(u, v, t) &= C_0 \left(u e^{-\gamma t} + \frac{v}{M\gamma} (1 - e^{-\gamma t}), v \right) \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{D}{\hbar^2} \left[\left(u - \frac{v}{M\gamma}\right)^2 \left(\frac{1 - e^{-2\gamma t}}{2\gamma}\right) + 2\frac{v}{M\gamma} \left(u - \frac{v}{M\gamma}\right) \left(\frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma}\right) + \frac{v^2}{M^2\gamma^2} t \right] \right\} \end{aligned} \quad (6.56)$$

c'est à dire encore

$$C(u, v, t) = C_0 \left(u e^{-\gamma t} + \frac{v}{M\gamma} (1 - e^{-\gamma t}), v \right) \exp \left\{ -\lambda(t) u^2 - 2\mu(t) u v - \nu(t) v^2 \right\} \quad (6.57)$$

$$\text{avec} \quad \lambda(t) = \frac{D}{\hbar^2} \frac{1 - e^{-2\gamma t}}{2\gamma} \quad (6.58.a)$$

$$\mu(t) = \frac{D}{\hbar^2} \frac{1}{M\gamma} \left[\frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma} - \frac{1 - e^{-2\gamma t}}{2\gamma} \right] \quad (6.58.b)$$

$$\nu(t) = \frac{D}{\hbar^2} \frac{1}{M^2\gamma^2} \left[\frac{1 - e^{-2\gamma t}}{2\gamma} - 2 \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma} + t \right] \quad (6.58.c)$$

Le contenu physique de ces résultats sera analysé dans un paragraphe ultérieur.

Référence

La présentation de la méthode des caractéristiques a été mise au point en collaboration avec Jean-Michel Courty à partir du livre:

V. Arnold, chapitres supplémentaires de la théorie des équations différentielles ordinaires, chapitre 2
Editions Mir, Moscou (1980) - Réimpression 1984.

⑤ Etude complète de l'évolution temporelle d'une particule Brownienne partant d'un état initial gaussien.

But de ce paragraphe

Après avoir indiqué dans les paragraphes précédents comment il était possible de résoudre l'équation du mouvement d'une particule Brownienne décrite par divers types de fonctions caractéristiques, nous discutons maintenant en détail le contenu physique de la solution de ces équations dans un cas où elle peut être écrite explicitement (état initial de la particule correspondant à un paquet d'ondes gaussien)

Le but poursuivi est de montrer que, lorsque le couplage avec l'environnement croît (par exemple, lorsque la densité des particules légères entrant en collision avec la particule Brownienne croît),

- (i) les cohérences spatiales sont détruites de plus en plus vite
- (ii) la distribution de probabilité de la position est de plus en plus "gelée".

a) Etat initial gaussien

- Fonction d'onde

$$\psi(x) = \left(\frac{2}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/\sigma^2} e^{i p_0 x/\hbar} \quad (7.1)$$

Fonction d'onde normée, centrée en $x=0$, de largeur σ , avec une impulsion moyenne p_0 .

- Matrice densité en représentation x . D'après (5.53),

$$\begin{aligned} F_0(x, u) &= \langle x + \frac{u}{2} | \rho_0 | x - \frac{u}{2} \rangle = \psi(x + \frac{u}{2}) \psi^*(x - \frac{u}{2}) \\ &= \left(\frac{2}{\pi\sigma^2}\right)^{1/2} e^{-2x^2/\sigma^2} e^{-u^2/2\sigma^2} e^{i p_0 u/\hbar} \end{aligned} \quad (7.2)$$

- Fonction caractéristique $C_0(u, v)$. D'après l'inverse de (5.49),

$$\begin{aligned} C_0(u, v) &= \int dx e^{i v x/\hbar} F_0(x, u) \\ &= e^{-v^2\sigma^2/8\hbar^2} e^{-u^2/2\sigma^2} e^{i p_0 u/\hbar} \end{aligned} \quad (7.3)$$

- Fonction de Wigner $w_0(x, p)$. D'après (5.54) et (5.53),

$$\begin{aligned} w_0(x, p) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int du e^{-i p u/\hbar} F(x, u) \\ &= \frac{1}{\hbar\pi} e^{-2x^2/\sigma^2} e^{-(p-p_0)^2\sigma^2/2\hbar^2} \end{aligned} \quad (7.4)$$

b) Etat de la particule à l'instant t

Fonction caractéristique $C(u, v, t)$

- Le problème a déjà été résolu dans le § 4. Voir (6.57) et (6.58). Comme on connaît l'expression (7.3) de C_0 , on a

$$C_0\left(ue^{-\delta t} + \frac{v}{M\gamma}(1-e^{-\delta t}), v\right) = e^{-\left[ue^{-\delta t} + \frac{v}{M\gamma}(1-e^{-\delta t})\right]^2/2\sigma^2} \times \quad \text{VII-2}$$

$$\times e^{-v^2\sigma^2/8\hbar^2} e^{iP_0\left[ue^{-\delta t} + \frac{v}{M\gamma}(1-e^{-\delta t})\right]/\hbar} \quad (7.5)$$

c'est à dire encore

$$C_0\left(ue^{-\delta t} + \frac{v}{M\gamma}(1-e^{-\delta t}), v\right) = \exp\left\{-L(t)u^2 - 2M(t)uv - N(t)v^2 + iJ(t)u + iK(t)v\right\} \quad (7.6)$$

avec

$$L(t) = \frac{e^{-2\delta t}}{2\sigma^2} \quad (7.7.a)$$

$$M(t) = \frac{e^{-\delta t}(1-e^{-\delta t})}{2M\gamma\sigma^2} \quad (7.7.b)$$

$$N(t) = \frac{(1-e^{-\delta t})^2}{2M^2\gamma^2\sigma^2} + \frac{\sigma^2}{8\hbar^2} \quad (7.7.c)$$

$$J(t) = P_0 e^{-\delta t}/\hbar \quad (7.7.d)$$

$$K(t) = \frac{P_0}{\hbar M\gamma} (1-e^{-\delta t}) \quad (7.7.e)$$

- En reportant (7.6) dans (6.57), on obtient, compte tenu de (7.7) et (6.58)

$$C(u, v, t) = \exp\left\{-A(t)u^2 - 2B(t)uv - C(t)v^2 + iJ(t)u + iK(t)v\right\} \quad (7.8)$$

$$A(t) = \frac{D}{\hbar^2} \frac{1-e^{-2\delta t}}{2\gamma} + \frac{e^{-2\delta t}}{2\sigma^2} \quad (7.9.a)$$

$$B(t) = \frac{D}{\hbar^2} \frac{1}{M\gamma} \left[\frac{1-e^{-\delta t}}{\gamma} - \frac{1-e^{-2\delta t}}{2\gamma} \right] + \frac{e^{-\delta t}(1-e^{-\delta t})}{2M\gamma\sigma^2} \quad (7.9.b)$$

$$C(t) = \frac{D}{\hbar^2} \frac{1}{M^2\gamma^2} \left[\frac{1-e^{-2\delta t}}{2\gamma} - 2\frac{1-e^{-\delta t}}{\gamma} + t \right] + \frac{(1-e^{-\delta t})^2}{2M^2\gamma^2\sigma^2} + \frac{\sigma^2}{8\hbar^2} \quad (7.9.c)$$

J(t) et K(t) étant déjà donnés en (7.7.d) et (7.7.e).

Comme C(u, v, t) est l'exponentielle d'une fonction quadratique de u et v, on peut calculer exactement la transformée de Fourier de C(u, v, t) et en déduire F(x, u, t) et w(x, p, t)

Représentation x $F(x, u, t) = \langle x + \frac{u}{2} | \rho(t) | x - \frac{u}{2} \rangle$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dv e^{-i v x/\hbar} C(u, v, t)$$

$$\hookrightarrow F(x, u, t) = \frac{1}{2\hbar\sqrt{\pi C}} e^{-\frac{(x-\hbar K)^2}{4\hbar^2 C}} \exp\left\{-\left(A - \frac{B^2}{C}\right)u^2 + \frac{iBu}{\hbar C}(x-\hbar K) + iJu\right\} \quad (7.10)$$

On en déduit immédiatement la distribution de probabilité de x

$$\langle x | \rho(t) | x \rangle = R(x, t) = F(x, 0, t) \quad (7.11)$$

$$R(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi 4\hbar^2 C(t)}} e^{-\frac{[x-\hbar K(t)]^2}{4\hbar^2 C(t)}} \quad (7.12)$$

On obtient pour R(x, t) une gaussienne centrée en $\hbar K(t)$ et de largeur Δx telle que $\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 2\hbar^2 C(t)$

Fonction de Wigner $w(x, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int du e^{-i p u/\hbar} F(x, u, t)$

On obtient, à partir de (7.10)

$$w(x, p, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\hbar^2 C(t)}} \frac{1}{\sqrt{4\pi\hbar^2 \left(A(t) - \frac{B^2(t)}{C(t)}\right)}} \exp\left\{-\frac{[x-\hbar K(t)]^2}{4\hbar^2 C(t)}\right\} \exp\left\{-\frac{[p-\pi(x, t)]^2}{4\hbar^2 \left[A(t) - \frac{B^2(t)}{C(t)}\right]}\right\} \quad (7.13)$$

où l'on a posé

$$\pi(x, t) = \hbar J(t) + \frac{B(t)}{C(t)} [x - \hbar K(t)] \quad (7.14)$$

Les 2 équations décrivent une situation où x est distribué suivant une gaussienne centrée en $\hbar K(t)$ et de largeur $\hbar \sqrt{2C(t)}$, et où, pour chaque valeur de x , p est distribué suivant une gaussienne centrée en $\pi(x, t)$ et de largeur $\sqrt{2\hbar} [A(t) - \frac{B^2(t)}{C(t)}]^{1/2}$. La quantité $\pi(x, t)$ apparaît donc comme une "impulsion moyenne au point x ".

Il convient de bien se souvenir que $w(x, p, t)$ n'est pas une vraie densité de probabilité mais plutôt une densité de quasi-probabilité. La 2^{ème} exponentielle de (7.13) n'est donc pas une vraie distribution de p pour une particule en x (une telle notion est incompatible avec les relations d'incertitude). C'est plutôt une quasi-distribution de p pour une particule en x .

Cohérence spatiale globale à une distance u

D'après (5.55) et (7.8)

$$\mathcal{F}(u) = \exp \left\{ -A(t)u^2 + iJ(t)u \right\} \quad (7.15)$$

Le module de $\mathcal{F}(u)$ est donné par une gaussienne, centrée en $u=0$ et de largeur $1/\sqrt{2A(t)}$. On en déduit pour la longueur de cohérence, l_{coh} , de la particule l'expression

$$l_{coh} = \frac{1}{\sqrt{2A(t)}} \quad (7.16)$$

On en déduit, par transformation de Fourier de (7.15), l'expression de la distribution de probabilité de p (voir (5.62)).

$$\mathcal{P}(p, t) = \langle p | \rho(t) | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi\hbar^2 A(t)}} \exp \left\{ -\frac{[p - \hbar J(t)]^2}{4\hbar^2 A(t)} \right\} \quad (7.17)$$

C'est une gaussienne, centrée en $\hbar J(t)$ et de largeur $\hbar \sqrt{2A(t)}$.

c) Evolution temporelle de la longueur de cohérence spatiale

- D'après (7.16) et (7.9.a)

$$\left[\frac{1}{l_{coh}(t)} \right]^2 = 2A(t) = \frac{D}{\hbar^2} \frac{1 - e^{-2\gamma t}}{\gamma} + \frac{e^{-2\gamma t}}{\sigma^2} \quad (7.18)$$

En utilisant la longueur d'onde de de Broglie thermique λ_T (voir (6.8) et (6.47)), on peut réécrire (7.18) sous la forme

$$\left[\frac{1}{l_{coh}(t)} \right]^2 = \frac{1}{\lambda_T^2} (1 - e^{-2\gamma t}) + \frac{1}{\sigma^2} e^{-2\gamma t} \quad (7.19)$$

- Aux temps courts ($t \ll \gamma^{-1}$), on a

$$\left[\frac{1}{l_{coh}(t)} \right]^2 = \frac{1}{\sigma^2} + 2\gamma t \left[\frac{1}{\lambda_T^2} - \frac{1}{\sigma^2} \right] \quad (7.20)$$

Pour $t=0$, $l_{coh} = \sigma$. Puis l_{coh} commence par décroître

si $\sigma > \lambda_T$ ou par contre si $\sigma < \lambda_T$

- Aux temps longs ($t \gg \gamma^{-1}$), on a

$$l_{\text{coh}} = \lambda_T \quad (7.21)$$

La portée des cohérences spatiales est donc réduite à une valeur de l'ordre de λ_T au bout d'un temps γ^{-1} d'autant plus court que le couplage avec l'environnement est plus grand

d) Evolution temporelle de la distribution de probabilité de la position

Centre de la distribution

- D'après (7.17) et (7.7.d), $\hbar J(t) = p_0 e^{-\gamma t}$ est l'impulsion moyenne de la particule, qui est amortie exponentiellement de sa valeur initiale p_0 à 0 avec une constante de temps γ^{-1} (Fig. 1a)

- On vérifie aisément, à partir de (7.7.d) et (7.7.e) que

$$\hbar K(t) = \frac{1}{M} \int_0^t dt' \hbar J(t') \quad (7.22)$$

Le centre $\hbar K(t)$ de la distribution atomique (voir (7.12)) est donc la position d'une particule dont la vitesse varierait au cours du temps comme $\frac{p_0}{M} e^{-\gamma t}$ (Fig. 1b)

- Aux temps courts ($\gamma t \ll 1$)

$$\hbar K(t) = \frac{p_0}{M} t \quad (7.23)$$

Le centre de la distribution se déplace à la vitesse p_0/M

- Aux temps longs ($\gamma t \gg 1$)

$$\hbar K(t) = \frac{p_0}{M\gamma} \quad (7.24)$$

Le centre de la distribution s'immobilise à une distance $p_0/M\gamma$ de sa position initiale

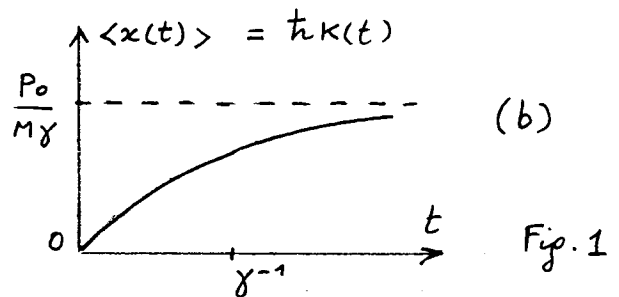
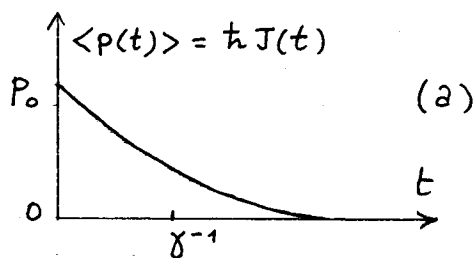


Fig. 1

Largeur de la distribution Δx

- D'après (7.12) et (7.9.c), la largeur Δx de la distribution de probabilité de la position est donnée par

$$\begin{aligned} \Delta x^2 &= \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 = 2\hbar^2 C(t) \\ &= \frac{2D}{M^2\gamma^2} \left[\frac{1-e^{-2\gamma t}}{2\gamma} - 2\frac{1-e^{-\gamma t}}{\gamma} + t \right] + \frac{\sigma^2}{4} + \frac{\hbar^2}{M^2\gamma^2\sigma^2} (1-e^{-\gamma t})^2 \end{aligned} \quad (7.25)$$

- Comportement aux temps courts ($t \ll \gamma^{-1}$)

Un développement limité des exponentielles donne

$$\Delta x^2 = \frac{\sigma^2}{4} + \frac{\hbar^2}{M^2 \sigma^2} t^2 + \frac{2}{3} \frac{D}{M^2} t^3 \quad (7.26)$$

- Le 1^{er} terme, $\sigma^2/4$, est associé à la largeur initiale du paquet d'ondes
- Le 2^{ème} terme, $\hbar^2 t^2 / M^2 \sigma^2$, est associé à l'étalement du paquet d'ondes qui, pour $t \ll \gamma^{-1}$, n'est pas perturbé par la friction. A la largeur σ initiale est associée une dispersion $\hbar/M\sigma$ de vitesses, conduisant à une dispersion en position Δx variant en $\hbar t / M\sigma$
- Le 3^{ème} terme, $2Dt^3/3M^2$, est associé à un début de diffusion de la position (voir paragraphe suivant)

- Comportement aux temps longs ($t \gg \gamma^{-1}$) (et négliger γ^{-1} devant t)

On peut alors remplacer les exponentielles par 0, ce qui donne

$$\Delta x^2 = \frac{\sigma^2}{4} + \frac{\hbar^2}{M^2 \sigma^2} \frac{1}{\gamma^2} + 2 \frac{D}{M^2 \gamma^2} t \quad (7.27)$$

- Le 1^{er} terme, $\sigma^2/4$, a la même interprétation que plus haut
- Le 2^{ème} terme, $\hbar^2 / M^2 \sigma^2 \gamma^2$, est associé à l'étalement du paquet d'ondes initial, limité par la friction. Comme la dispersion initiale de vitesses, $\hbar/M\sigma$, s'amortit avec une constante de temps γ^{-1} , le déplacement correspondant est au maximum de l'ordre de cette dispersion de vitesse multipliée par γ^{-1} (comparer (7.23) et (7.24) et voir la figure 1.6)

- Le 3^{ème} terme décrit un accroissement linéaire en t de Δx^2

$$\Delta x^2 = 2 \mathcal{D} t \quad (7.28)$$

avec

$$\mathcal{D} = \frac{D}{M^2 \gamma^2} \quad (7.29)$$

Le coefficient \mathcal{D} donné par (7.29) est donc un coefficient de diffusion de la position.

Interprétation du coefficient de diffusion spatiale

- A l'équilibre ($t \gg \gamma^{-1}$), la vitesse p/M de la particule fluctue avec un temps de corrélation τ_c de l'ordre de γ^{-1} , et une valeur quadratique moyenne $\langle p^2 \rangle / M^2$ de l'ordre de $D/M^2 \gamma$ puisque $\langle p^2 \rangle_{eq} = D/\gamma$ (voir (6.6)).

- Pendant le temps de corrélation $\tau_c \sim \gamma^{-1}$, la vitesse garde à peu près la même valeur et la particule se déplace de $(p/M)\gamma^{-1}$. Puis la vitesse change et la particule va dans une autre direction. Dans l'espace des x , on a donc une marche au hasard, de pas de l'ordre de $p/M\gamma$, changeant tous les γ^{-1} . Pendant un temps Δt , le nombre de pas est de l'ordre de $\Delta t / \gamma^{-1} = \gamma \Delta t$. Comme les x^2 s'ajoutent dans une marche au hasard, on a

$$\Delta x^2 \sim (\gamma \Delta t) \times (p/M\gamma)^2 \simeq \frac{\langle p^2 \rangle_{eq}}{M^2 \gamma} \Delta t = \frac{D}{M^2 \gamma^2} \Delta t \quad (7.30)$$

On a utilisé $\langle p^2 \rangle_{eq} = D/\gamma$. On retrouve bien que Δx^2 croît linéairement avec Δt , avec un coefficient de proportionnalité $D/M^2 \gamma^2$.

e) Vitesse moyenne au point x à l'instant t

VII-6

- Dans ce paragraphe, nous supposons $p_0 = 0$, de sorte que, dans (7.14), $K(t) = J(t) = 0$. Si p_0 est non nul, il suffit de rajouter $\hbar J(t)/M$ aux résultats qui suivent et de repérer x par rapport au centre $\hbar K(t)$ de la distribution $R(x, t)$, c'est à dire de remplacer x par $x - \hbar K(t)$. On obtient ainsi à partir de (7.14) pour la vitesse moyenne au point x la valeur

$$\frac{\pi(x, t)}{M} = \frac{B(t)}{M C(t)} x \quad (7.31)$$

Cas d'une particule libre

- Faisons un développement limité des exponentielles de (7.9.b) et (7.9.c) puis faisons $\gamma = D = 0$. On obtient

$$B(t) = \frac{t}{2M\sigma^2} \quad C(t) = \frac{\sigma^2}{8\hbar^2} + \frac{t^2}{2M^2\sigma^2} \quad (7.32)$$

Supposons t suffisamment grand pour que

$$t \gg \frac{M}{\hbar} \sigma^2 \quad (7.33)$$

On peut alors dans l'expression de $C(t)$ négliger le 1^{er} terme et écrire

$$C(t) \approx \frac{t^2}{2M^2\sigma^2} \quad (7.34)$$

La condition (7.33) signifie que l'étalement du paquet d'ondes pendant le temps t , $\Delta x \approx (\hbar/M\sigma)t$, est plus grand que la largeur initiale σ . On obtient alors à partir de (7.31)

$$\frac{\pi(x, t)}{M} = \frac{x}{t} \quad (7.35)$$

- L'interprétation de (7.35) est très simple. A cause de la largeur initiale σ du paquet d'ondes, la vitesse initiale de la particule a une certaine dispersion $\hbar/M\sigma$. On peut se représenter la distribution initiale $R(x, 0)$ comme une distribution de particules libres ayant des vitesses différentes. Au bout d'un temps suffisamment long, ces particules seront séparées à cause de leurs vitesses différentes. Celles qui passent au point x à l'instant t sont celles qui avaient une vitesse initiale x/t , vitesse qui reste constante au cours du temps puisque les particules sont libres.

Cas d'une particule Brownienne pour $t \gg \gamma^{-1}$

- On a alors d'après (7.9.b)

$$B(t) = \frac{D}{2\hbar^2 M \gamma^2} \quad (7.36)$$

ce qui donne, après report dans (7.31) et utilisation de (7.29)

$$\frac{\pi(x, t)}{M} = \frac{B(t)}{M C(t)} x = \frac{D}{2\hbar^2 M^2 \gamma^2 C(t)} x = \frac{D}{2\hbar^2 C(t)} x \quad (7.37)$$

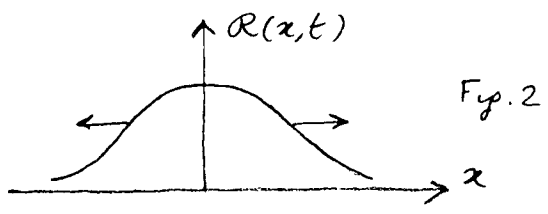
- Pour interpréter (7.37), considérons la distribution $R(x, t)$ qui est une gaussienne (voir (7.12) avec $K(t) = 0$):

$$R(x, t) = N e^{-x^2/4\hbar^2 C(t)} \quad (7.38)$$

où N est un coefficient de normalisation. A cause de la

diffusion spatiale, il y a, en chaque point x , un courant de diffusion $J(x,t)$ [voir Fig. 2]

$$J(x,t) = -D \frac{\partial R(x,t)}{\partial x} = D \frac{2x}{4k^2c(t)} N e^{-\frac{x^2}{4k^2c(t)}} = R(x,t) \frac{Dx}{2k^2c(t)} \quad (7.39)$$



L'expansion de la distribution s'accompagne d'un courant dans le sens des densités décroissantes. Le courant $J(x,t)$ peut s'écrire en fonction de la densité $R(x,t)$ et

d'une vitesse locale $v(x,t)$

$$J(x,t) = R(x,t) v(x,t) \quad (7.40)$$

En éliminant $J(x,t)$ entre (7.39) et (7.40), on trouve que $v(x,t)$ n'est autre que $\pi(x,t)/M$ écrit en (7.37)

f- Conclusion. Evolutions des phénomènes quand le couplage avec l'environnement croît

- En utilisant la relation $D = M \gamma k_B T$, valable pour un environnement en équilibre à T (voir (6.8)), on peut écrire (7.29) sous la forme

$$D D = (k_B T)^2 \quad (7.41)$$

A température constante, si le nombre n_0 de particules légères par unité de volume croît, D croît (voir (4.31)) et par suite D décroît

$$n_0 \uparrow \quad D \uparrow \quad D \downarrow \quad (7.42)$$

- On peut alors trouver des temps t suffisamment longs pour que $t \gg \gamma^{-1}$, et suffisamment courts pour que le dernier terme de (7.27), qui s'écrit aussi $2Dt$, soit négligeable devant le 1^{er}

$$\gamma^{-1} \ll t \ll \frac{\sigma^2}{D} \quad (7.43)$$

Par ailleurs, si $n_0 \uparrow$, γ aussi croît et le 2^{em} terme de (7.27) devient lui aussi négligeable devant le 1^{er}. On a alors d'après (7.27)

$$\Delta x^2 \approx \frac{\sigma^2}{4} \quad (7.44)$$

- Finalement, en augmentant le couplage avec l'environnement, on peut atteindre un régime où il est possible de trouver des temps t satisfaisant l'inégalité (7.43), qui est de plus en plus facile à satisfaire puisque $\gamma^{-1} \downarrow$ et $\sigma^2/D \uparrow$, tels que

(i) Les cohérences spatiales ont été complètement détruites (plus exactement ramenées à une portée λ_T)

(ii) La distribution de position de la particule est complètement figée puisque Δx n'a pas changé

Pour l'observable position de la particule, le temps de relaxation T_2 devient de plus en plus court, alors que T_1 devient de plus en plus long.

Référence. Les problèmes analysés dans ce chapitre sont également étudiés dans C.M. Savage, D.F. Walls, Phys. Rev. A32, 3487 (1985)

Buts de ce chapitre

- Introduire un modèle simple de couplage dissipatif conduisant à une force de friction proportionnelle à la vitesse.

Modèle de Caldeira-Leggett.

- Appliquer un tel modèle à une particule Brownienne et montrer que l'équation pilote de la particule redonne bien l'équation de Fokker-Planck pour la fonction de Wigner.

① Présentation du modèle - Hamiltonien

a - Particule lourde couplée à un gaz de particules légères par des potentiels harmoniques.

- X, P, M : Position, impulsion, masse de la particule lourde
 $x_\alpha, p_\alpha, m_\alpha$: " " " " " " " " légère α

- Hamiltonien
$$H = \frac{P^2}{2M} + \sum_{\alpha} \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 (x_{\alpha} - X)^2 \quad (8.1)$$

H = Energie cinétique des diverses particules + énergie potentielle d'interaction entre la particule lourde et les diverses particules du gaz. Potentiel toujours attractif, même à grande distance. Peu réaliste physiquement, mais très simple mathématiquement.

La particule lourde se déplace avec des particules légères α attachées à elle par des ressorts de coefficients de raideur $m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2$.

- Le terme d'interaction $V = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 (x_{\alpha} - X)^2$ ne dépend que des distances relatives. Invariance de H par translation globale de toutes les particules.

↳ Conservation de l'impulsion globale $P + \sum_{\alpha} p_{\alpha}$.

- Autre écriture possible

$$H = \underbrace{\frac{P^2}{2M}}_{H_S} + \underbrace{\sum_{\alpha} \left(\frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{1}{2} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2 \right)}_{H_R} - \underbrace{\sum_{\alpha} C_{\alpha} x_{\alpha} X}_{H_{RS}} + \underbrace{\sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{2m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2} X^2}_{H_{CT}} \quad (8.2)$$

avec
$$C_{\alpha} = m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 \quad (8.3)$$

H_S : Energie de la particule Brownienne libre

H_R : Hamiltonien d'un "réservoir" d'oscillateurs harmoniques $\{\alpha\}$ de fréquences ω_{α}

H_{RS} : Couplage linéaire en X et x_{α} entre la particule Brownienne et chacun des oscillateurs du réservoir. C_{α} : constante de couplage

H_{CT} : Hamiltonien dépendant des constantes de couplage et n'agissant que sur la particule Brownienne. Appelé "contre-terme" pour des raisons qui apparaîtront plus loin.

b - Hamiltonien de Caldeira-Leggett. Equivalence avec le problème précédent.

- H est donné par la même expression qu'en (8.2), mais maintenant C_{α} n'est plus forcément égal à $m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2$ et peut être quelconque

$$C_\alpha \neq m_\alpha \omega_\alpha^2, \text{ quelconque}$$

(8.4)

- Montrons maintenant que, si C_α n'est pas égal à $m_\alpha \omega_\alpha^2$, on peut toujours effectuer un changement de variables tel que, dans la nouvelle représentation, la relation (8.3) soit vérifiée.

Considérons en effet un oscillateur harmonique de fréquence ω_α et d'hamiltonien $\hbar \omega_\alpha (a_\alpha^\dagger a_\alpha + \frac{1}{2})$ où a_α^\dagger et a_α sont les opérateurs de création et d'annihilation. Tout en gardant les mêmes niveaux d'énergie pour cet oscillateur, c'est à dire tout en gardant la même fréquence, on peut lui associer plusieurs particules de masses m_α différentes. Une fois m_α choisie, on a pour la position x_α et l'impulsion p_α de la particule les relations

$$x_\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_\alpha \omega_\alpha}} (a_\alpha + a_\alpha^\dagger) \quad p_\alpha = i \sqrt{\frac{\hbar m_\alpha \omega_\alpha}{2}} (a_\alpha^\dagger - a_\alpha) \quad (8.5)$$

Pour chacun des oscillateurs α de (8.2), on peut donc effectuer le changement de variables suivant

$$x_\alpha \rightarrow x'_\alpha = \lambda_\alpha x_\alpha \quad p_\alpha \rightarrow p'_\alpha = \frac{p_\alpha}{\lambda_\alpha} \quad (8.6)$$

associé à un changement de masse

$$m_\alpha \rightarrow m'_\alpha = \frac{m_\alpha}{\lambda_\alpha^2} \quad (8.7)$$

λ_α étant une constante. L'hamiltonien H_R de (8.2) peut alors se réécrire

$$H_R = \sum_\alpha \left(\frac{p_\alpha^2}{2m_\alpha} + \frac{1}{2} m_\alpha \omega_\alpha^2 x_\alpha^2 \right) = \sum_\alpha \left(\frac{p'_\alpha{}^2}{2m'_\alpha} + \frac{1}{2} m'_\alpha \omega_\alpha^2 x'^2_\alpha \right) \quad (8.8)$$

De même, on peut réécrire H_{RS} et H_{CT} sous la forme

$$H_{RS} = - \sum_\alpha C_\alpha x_\alpha X = - \sum_\alpha C'_\alpha x'_\alpha X \quad (8.9)$$

$$H_{CT} = \sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{2m_\alpha \omega_\alpha^2} X^2 = \sum_\alpha \frac{C'^2_\alpha}{2m'_\alpha \omega_\alpha^2} X^2 \quad (8.10)$$

avec $C'_\alpha = \frac{C_\alpha}{\lambda_\alpha} \quad (8.11)$

Ainsi, on peut réécrire H sous la forme

$$H = \frac{P^2}{2M} + \sum_\alpha \left(\frac{p'^2_\alpha}{2m'_\alpha} + \frac{1}{2} m'_\alpha \omega_\alpha^2 x'^2_\alpha \right) - \sum_\alpha C'_\alpha x'_\alpha X + \sum_\alpha \frac{C'^2_\alpha}{2m'_\alpha \omega_\alpha^2} X^2 \quad (8.12)$$

Formons alors la quantité $\frac{C'_\alpha}{m'_\alpha \omega_\alpha^2}$. Compte tenu de (8.7) et (8.11) on obtient

$$\frac{C'_\alpha}{m'_\alpha \omega_\alpha^2} = \lambda_\alpha \frac{C_\alpha}{m_\alpha \omega_\alpha^2} \quad (8.13)$$

On voit ainsi que, si $C_\alpha \neq m_\alpha \omega_\alpha^2$, il suffit de choisir $\lambda_\alpha = \frac{m_\alpha \omega_\alpha^2}{C_\alpha}$ pour avoir $C'_\alpha = m'_\alpha \omega_\alpha^2$

- Finalement, par un choix convenable des masses des particules associées aux divers oscillateurs harmoniques du réservoir, on peut toujours réinterpréter l'hamiltonien de Caldeira-Leggett comme l'hamiltonien d'une particule de masse M se déplaçant avec des particules légères attachées à elle par des ressorts.

Dans la suite, nous utiliserons l'hamiltonien (8.2) avec C_α quelconque. Sous cette forme, les diverses quantités relatives au réservoir et apparaissant dans H_{RS} et H_{CT} sont indépendantes

du paramètre λ_α associé à la transformation étudiée plus haut. En effet, d'après (8.6), (8.7) et (8.11), on a

$$C'_\alpha x'_\alpha = C_\alpha x_\alpha \quad \frac{C'^2_\alpha}{m'_\alpha \omega_\alpha^2} = \frac{C_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2} \quad (8.14)$$

Remarque

Dans ce qui précède, nous avons considéré, qu'en l'absence de couplage avec le réservoir ($C_\alpha = 0$), la particule de masse M est libre. On peut aussi considérer qu'elle se déplace dans un potentiel $V(x)$. Il suffit alors, dans (8.2), de remplacer $H_S = P^2/2M$ par

$$H_S = \frac{P^2}{2M} + V(x) \quad (8.15)$$

Caldeira et Leggett^[1] ont d'ailleurs introduit leur modèle pour comprendre comment la dissipation associée au couplage avec le réservoir d'oscillateurs modifie l'effet tunnel de la particule de masse M se déplaçant dans un potentiel $V(x)$ ayant l'une des formes représentées sur la figure 1

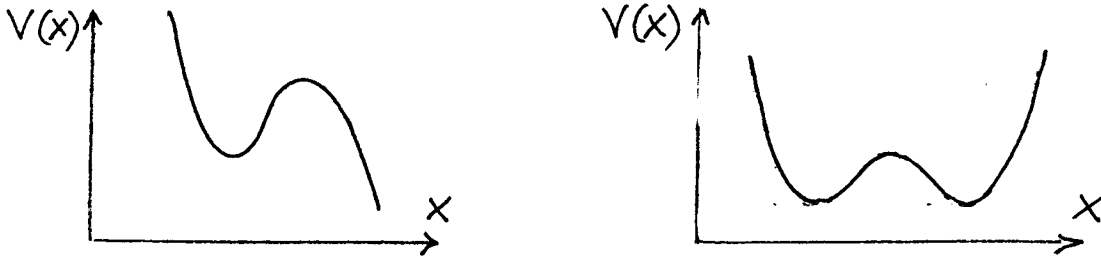


Fig. 1

② Choix des paramètres de couplage

a. Equations de Heisenberg-Langevin pour la particule lourde

$$\frac{dX(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [X(t), H] = \frac{\partial H}{\partial P(t)} = \frac{P(t)}{M} \quad (8.16.a)$$

$$\frac{dP(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [P(t), H] = -\frac{\partial H}{\partial X(t)} = \sum_\alpha C_\alpha x_\alpha(t) - X(t) \sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2} \quad (8.16.b)$$

On voit apparaître au 2^{ème} membre de l'équation d'évolution de $P(t)$ l'observable du réservoir

$$R(t) = \sum_\alpha C_\alpha x_\alpha(t) = \sum_\alpha C_\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2m_\alpha \omega_\alpha}} [a_\alpha(t) + a_\alpha^\dagger(t)] \quad (8.17)$$

dont nous allons maintenant calculer l'évolution (on a utilisé la 1^{ère} équation (8.5)).

$$\frac{d}{dt} a_\alpha(t) = \frac{1}{i\hbar} [a_\alpha(t), H] = \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial H}{\partial a_\alpha^\dagger(t)} = -i\omega_\alpha a_\alpha(t) + i \frac{C_\alpha}{\sqrt{2\hbar m_\alpha \omega_\alpha}} X(t) \quad (8.18)$$

La solution de (8.18) s'écrit

$$a_\alpha(t) = a_\alpha(t_0) e^{-i\omega_\alpha(t-t_0)} + \frac{i C_\alpha}{\sqrt{2\hbar m_\alpha \omega_\alpha}} \int_{t_0}^t dt' X(t') e^{-i\omega_\alpha(t-t')} \quad (8.19)$$

En reportant (8.19) et l'expression adjointe dans (8.17), et en posant $\tau = t - t'$, on obtient pour (8.16.b) :

$$\frac{d}{dt} P(t) = \sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{2m_\alpha \omega_\alpha} \left[i \int_0^{t-t_0} d\tau X(t-\tau) e^{-i\omega_\alpha \tau} + h.c. \right] + F_L(t) - X(t) \sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2} \quad (8.20)$$

où

$$F_L(t) = \sum_\alpha C_\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2m_\alpha \omega_\alpha}} \left[a_\alpha(t_0) e^{-i\omega_\alpha(t-t_0)} + a_\alpha^\dagger(t_0) e^{i\omega_\alpha(t-t_0)} \right] \quad (8.21)$$

- Le 1^{er} terme du 2^{ème} membre de (8.20) décrit une friction retardée : la particule lourde perturbe le réservoir qui réagit sur elle.
- Le 2^{ème} terme est une force de Langevin ne dépendant que d'opérateurs du réservoir évoluant librement.
- Le 3^{ème} terme provient de $H_C T$

b. Limite d'un réservoir continu - Fonction $J_c(\omega)$

- Le 1^{er} terme du 2^{ème} membre de (8.20) peut se réécrire

$$\frac{1}{\pi} \int d\omega J(\omega) \left[i \int_0^{t-t_0} d\tau X(t-\tau) e^{-i\omega\tau} + \text{h.c.} \right] \quad (8.22)$$

$$\text{où } J(\omega) = \sum_{\alpha} \frac{\pi C_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \delta(\omega - \omega_{\alpha}) \quad (8.23)$$

- La fonction $J(\omega)$ est une somme discrète de fonctions δ centrées aux diverses fréquences ω_{α} des oscillateurs du réservoir. Supposons que ces fréquences ω_{α} forment un ensemble très serré avec un espacement moyen ϵ , et supposons qu'on s'intéresse à l'évolution du système sur des temps beaucoup plus courts que $1/\epsilon$, ce qui permet d'ignorer toutes les récurrences de Poincaré liées au caractère discret de l'ensemble $\{\omega_{\alpha}\}$. On peut alors remplacer la somme de fonctions δ par une fonction continue $J_c(\omega)$, telle que dans un intervalle $d\omega$, très grand devant ϵ mais très petit devant l'échelle de variation caractéristique de $J_c(\omega)$, on ait

$$J_c(\omega) d\omega = \sum_{\omega_{\alpha} \in [\omega, \omega+d\omega]} \pi \frac{C_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \quad (8.24)$$

Nous ferons désormais une telle approximation et remplacerons $J(\omega)$ par $J_c(\omega)$ dans (8.22).

- Notons enfin que le dernier terme de (8.20) peut se réécrire, compte tenu de (8.23)

$$-X(t) \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} = -X(t) \frac{2}{\pi} \int d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \approx -X(t) \frac{2}{\pi} \int d\omega \frac{J_c(\omega)}{\omega} \quad (8.25)$$

c. Fonction $J_c(\omega)$ conduisant à une force de friction linéaire en vitesse

- Caldeira et Leggett^[1] prennent pour $J_c(\omega)$ une fonction linéaire en ω s'étendant de $\omega = 0$ à $\omega = \omega_c$:

$$\begin{cases} J_c(\omega) = M\gamma\omega & \text{pour } 0 \leq \omega \leq \omega_c \\ J_c(\omega) = 0 & \text{pour } \omega > \omega_c \end{cases} \quad (8.26)$$

γ est un coefficient qui sera interprété plus loin

- Avec ce choix de $J_c(\omega)$, le dernier terme de (8.20) devient, compte tenu de (8.25)

$$-X(t) \frac{2}{\pi} \int_0^{\omega_c} d\omega \frac{M\gamma\omega}{\omega} = -\frac{2M\gamma\omega_c}{\pi} X(t) \quad (8.27)$$

- Calculons maintenant (8.22) avec $J(\omega)$ remplacé par (8.26)

On obtient

$$\begin{aligned} \frac{M\gamma}{\pi} \int_0^{\omega_c} d\omega i\omega \int_0^{t-t_0} d\tau X(t-\tau) e^{-i\omega\tau} + h.c. &= \\ &= -\frac{M\gamma}{\pi} \int_0^{t-t_0} d\tau X(t-\tau) \frac{d}{d\tau} \left[\int_0^{\omega_c} d\omega e^{-i\omega\tau} + c.c. \right] \end{aligned} \quad (8.28)$$

$$\text{Or } \int_0^{\omega_c} d\omega e^{-i\omega\tau} + c.c. = \int_{-\omega_c}^{+\omega_c} d\omega e^{-i\omega\tau} = 2\pi \delta_c(\tau) \quad (8.29)$$

$$\text{où } \delta_c(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\omega_c}^{+\omega_c} d\omega e^{-i\omega\tau} \quad (8.30)$$

est une fonction delta de τ , de largeur $1/\omega_c$. La force de friction s'écrit donc

$$\begin{aligned} -2M\gamma \int_0^{t-t_0} d\tau X(t-\tau) \delta_c'(\tau) &= \\ &= 2M\gamma \delta_c(0) X(t) - 2M\gamma \int_0^{t-t_0} d\tau \dot{X}(t-\tau) \delta_c(\tau) \end{aligned} \quad (8.31)$$

On a effectué une intégration par parties et supposé $t-t_0 \gg \frac{1}{\omega_c}$. Comme $\delta_c(0) = \omega_c/\pi$ d'après (8.30), le 1^{er} terme du 2^{ème} membre de (8.31) vaut $2M\gamma(\omega_c/\pi)X(t)$. Quant au 2^{ème}, il vaut $-M\gamma\dot{X}(t)$, compte tenu du caractère pair de $\delta_c(\tau)$, si $\dot{X}(t)$ varie peu sur un intervalle de temps de l'ordre de ω_c^{-1} .

Finalement, avec le choix (8.26) pour $J_c(\omega)$, la force de friction (8.22) s'écrit

$$\frac{2M\gamma\omega_c}{\pi} X(t) - \gamma P(t) \quad (8.32)$$

On a utilisé $P(t) = M\dot{X}(t)$ (voir (8.16.2)).

- Dans (8.20), remplaçons le 1^{er} terme par (8.32) et le dernier par (8.27). On constate que la contribution de H_{CT} (contre-terme) compense exactement le 1^{er} terme de (8.32) et on obtient

$$\frac{d}{dt} P(t) = -\gamma P(t) + F_L(t) \quad (8.33)$$

Le choix (8.26) de $J_c(\omega)$ conduit donc bien à une force de friction proportionnelle à la vitesse et à une équation de Heisenberg pour $P(t)$ ayant tout à fait la forme d'une équation de Langevin. Le coefficient γ , qui est homogène à l'inverse d'un temps, est un coefficient de friction: Si $\langle F_L(t) \rangle = 0$, $\langle P(t) \rangle$ est amorti avec un temps γ . La condition utilisé plus haut pour transformer le dernier terme de (8.31), à savoir que $\dot{X}(t) = P(t)/M$ varie peu sur un intervalle de temps ω_c^{-1} , s'écrit donc

$$\gamma \ll \omega_c \quad (8.34)$$

Remarques

(i) Nous avons établi l'expression (8.32) de la force de friction sans faire aucune hypothèse sur l'état du réservoir. La raison en est que le 1^{er} terme de (8.20), qui se réduit à (8.32) à la limite continue et pour le choix (8.26), ne dépend

que de la susceptibilité du réservoir : la particule VIII-6
de masse M "polarise" le réservoir qui réagit sur elle.
Comme nous avons pris un réservoir d'oscillateurs harmoniques
et que la susceptibilité d'un oscillateur harmonique est indé-
pendante de l'état de cet oscillateur, il est normal que (8.32)
ne dépende pas de l'état du réservoir. On peut d'ailleurs mon-
trer que les 2 termes de (8.32) sont respectivement associés
aux parties réactive et dissipative de la susceptibilité du
réservoir.

(ii) D'autres choix que (8.26) sont possibles pour $J_c(\omega)$. On
peut par exemple supposer que $J_c(\omega)$ varie comme ω^δ
quand $\omega \rightarrow 0$ avec $\delta \neq 1$. Voir la référence [2] pour l'étude
de ce cas

(iii) Supposons que la particule de masse M se déplace dans un
potentiel $V(x)$. Dans ce cas, il faut utiliser l'expression (8.15)
de H_S , ce qui fait apparaître un nouveau terme, $-dV(x)/dx$,
au 2^{ème} membre de (8.20). Par contre, tous les autres termes
restent inchangés, de même que les calculs conduisant à
(8.32). L'équation (8.33) devient donc maintenant

$$\frac{d}{dt} P(t) = - \frac{dV(x(t))}{dx(t)} - \gamma P(t) + F_L(t) \quad (8.35)$$

L'introduction du réservoir décrit par H_R et du terme
d'interaction décrit par H_{SR} ainsi que du contre terme H_{CT} ,
ajouté donc à la force dérivant de $V(x)$ (1^{er} terme de (8.35))
la force de friction $-\gamma P(t)$ et la force de Langevin $F_L(t)$. La
méthode de Caldeira-Leggett permet ainsi d'introduire le
phénomène de dissipation (et les fluctuations associées) dans
les équations quantiques du mouvement de la particule.

On peut comprendre maintenant l'importance du contre-
terme H_{CT} . Si l'on n'avait introduit que le terme d'inter-
action H_{SR} , on aurait obtenu en (8.35) le terme
 $2M\gamma(\omega_c/\pi)X(t)$ figurant dans (8.32). Ce terme décrit une
"renormalisation" du potentiel $V(x)$ due à H_{SR} puisqu'il faut
ajouter à $V(x)$ le potentiel $-M\gamma(\omega_c/\pi)X^2$. Il serait alors
difficile de discerner, dans la modification de l'effet tunnel
due à H_{SR} , la contribution du terme de friction $-\gamma P(t)$
et celle du changement du potentiel $V(x)$. L'utilisation de
 H_{CT} permet d'éviter tout changement de $V(x)$ et d'étudier
l'effet tunnel dans le même potentiel $V(x)$ avec $\gamma = 0$
et $\gamma \neq 0$ (voir la discussion du § 2 de la référence 1).

Dans l'approche développée ici (voir § 1 ci-dessus et référence
3), le contre terme apparaît normalement quand
on part d'un hamiltonien d'interaction particule-réservoir
invariant par translation globale

Pour étudier plus complètement la dynamique de la particule lourde,
nous allons maintenant revenir au point de vue de Schrödinger et
étudier l'équation pilote qui décrit l'évolution de son opérateur densité
réduit. Auparavant, nous rappelons, dans un appendice, les grandes lignes
de la dérivation d'une telle équation (pour plus de détails, voir les références 4, 5, 6).

Appendice - Rappels sur l'équation pilote décrivant la relaxation d'un système S couplé à un réservoir R

VIII-7

Hamiltonien

$$- H = H_S + H_R + H_{SR} \quad (8.36)$$

= Hamiltonien de S + Hamiltonien de R + Interaction S - R

- Pour H_{SR} on prend un produit d'une observable S de S par une observable R de R

$$H_{SR} = S \cdot R \quad (8.37)$$

Equation du mouvement de l'opérateur densité σ_{SR} du système global $S+R$

$$- \frac{d}{dt} \sigma_{SR}(t) = \frac{1}{i\hbar} [H, \sigma_{SR}(t)] \quad (8.38)$$

Il faudra ensuite déduire de (8.38) l'équation d'évolution de l'opérateur densité réduit de S

$$\sigma_S(t) = \text{Tr}_R \sigma_{SR}(t) \quad (8.39)$$

- Représentation d'interaction

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\sigma}_{SR}(t) = e^{i(H_S+H_R)t/\hbar} \sigma_{SR}(t) e^{-i(H_S+H_R)t/\hbar} \\ \tilde{H}_{SR}(t) = e^{i(H_S+H_R)t/\hbar} H_{SR} e^{-i(H_S+H_R)t/\hbar} = \tilde{S}(t) \tilde{R}(t) \\ \tilde{S}(t) = e^{iH_S t/\hbar} S e^{-iH_S t/\hbar} \quad \tilde{R}(t) = e^{iH_R t/\hbar} R e^{-iH_R t/\hbar} \end{array} \right. \quad (8.40)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{H}_{SR}(t) = e^{i(H_S+H_R)t/\hbar} H_{SR} e^{-i(H_S+H_R)t/\hbar} = \tilde{S}(t) \tilde{R}(t) \\ \tilde{S}(t) = e^{iH_S t/\hbar} S e^{-iH_S t/\hbar} \quad \tilde{R}(t) = e^{iH_R t/\hbar} R e^{-iH_R t/\hbar} \end{array} \right. \quad (8.41)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{S}(t) = e^{iH_S t/\hbar} S e^{-iH_S t/\hbar} \quad \tilde{R}(t) = e^{iH_R t/\hbar} R e^{-iH_R t/\hbar} \end{array} \right. \quad (8.42)$$

$$\hookrightarrow \frac{d}{dt} \tilde{\sigma}_{SR}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\tilde{S}(t) \tilde{R}(t), \tilde{\sigma}_{SR}(t)] \quad (8.43)$$

- Hypothèses sur l'état initial

$$(i) \text{ Factorisation} \quad \sigma_{SR}(0) = \sigma_S(0) \sigma_R(0) \quad (8.44)$$

$$(ii) \text{ Réservoir dans un état stationnaire} \quad [\sigma_R(0), H_R] = 0 \quad (8.45)$$

$$(iii) \text{ Valeur moyenne nulle pour } R \quad \langle R \rangle = \text{Tr} [R \sigma_R(0)] = 0 \quad (8.46)$$

- Solution itérative de l'équation du mouvement (8.43)

$$\tilde{\sigma}_{SR}(t) = \tilde{\sigma}_{SR}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt [\tilde{S}(t-\tau) \tilde{R}(t-\tau), \tilde{\sigma}_{SR}(t-\tau)] \quad (8.47)$$

En reportant (8.47) dans (8.43), on obtient, compte tenu de (8.44)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\sigma}_{SR}(t) &= \frac{1}{i\hbar} [\tilde{S}(t) \tilde{R}(t), \sigma_S(0) \sigma_R(0)] \\ &\quad - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt [\tilde{S}(t) \tilde{R}(t), [\tilde{S}(t-\tau) \tilde{R}(t-\tau), \tilde{\sigma}_{SR}(t-\tau)]] \end{aligned} \quad (8.48)$$

Prendons la trace des 2 membres de (8.48) sur le réservoir. Compte tenu de (8.42), (8.45), (8.46), le 1^{er} terme du 2^{ème} membre de (8.48) donne une contribution nulle et on obtient

$$\frac{d}{dt} \tilde{\sigma}_S(t) = - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt \text{Tr}_R \left\{ [\tilde{S}(t) \tilde{R}(t), [\tilde{S}(t-\tau) \tilde{R}(t-\tau), \tilde{\sigma}_{SR}(t-\tau)]] \right\} \quad (8.49)$$

Jusqu'ici, aucune approximation n'a été faite

Approximations

(i) Dans le 2^{ème} membre de (8.49), on pose

$$\tilde{\sigma}_{SR}(t-\tau) \approx (\text{Tr}_R \tilde{\sigma}_{SR}(t-\tau)) (\text{Tr}_S \tilde{\sigma}_{SR}(t-\tau)) \approx \tilde{\sigma}_S(t-\tau) \sigma_R(0) \quad (8.50)$$

- On néglige ainsi les corrélations entre S et R à l'instant $t-\tau$ et on néglige la variation de l'état du grand réservoir entre 0 et $t-\tau$ sous l'effet du couplage avec le petit système S [La vitesse de variation (8.49) est un effet déjà d'ordre 2 en couplage H_{SR}].

Notons cependant qu'on tient compte des corrélations entre S et R qui apparaissent entre $t-\tau$ et t et qui déterminent $d\tilde{\sigma}_S(t)/dt$

- En reportant (8.50) dans (8.49), et en explicitant le double commutateur, on obtient

$$\frac{d}{dt} \tilde{\sigma}_S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \langle \tilde{R}(t) \tilde{R}(t-\tau) \rangle_R \left\{ \tilde{S}(t) \tilde{S}(t-\tau) \tilde{\sigma}_S(t-\tau) - \tilde{S}(t-\tau) \tilde{\sigma}_S(t-\tau) \tilde{S}(t) \right\} + h.c. \quad (8.51)$$

où

$$\langle \tilde{R}(t) \tilde{R}(t-\tau) \rangle_R = T_{2R} \left\{ \sigma_R(0) \tilde{R}(t) \tilde{R}(t-\tau) \right\} \quad (8.52)$$

Le réservoir n'apparaît plus dans l'équation d'évolution opératorielle (8.51) de $\tilde{\sigma}_S(t)$ que par l'intermédiaire des "moyennes à 2 temps" (8.52).

- Le spectre des fréquences de Bohr apparaissant dans l'évolution de $\tilde{R}(t)$ est très large (puisque R est un réservoir). Il s'en suit que les fonctions (8.52), qui ne dépendent que de τ (à cause de (8.45)), ont une largeur en τ très petite.

Cette largeur τ_c est par définition le temps de corrélation du réservoir

(ii) La présence des moyennes à 2 temps (8.52) dans (8.51) limite les valeurs de τ dans l'intégrale à des valeurs de l'ordre de τ_c . Si τ_c est très court devant le temps d'évolution de $\tilde{\sigma}_S$ (temps de relaxation T_R), on peut poser dans (8.51) (approximation de Markov)

$$\tilde{\sigma}_S(t-\tau) \approx \tilde{\sigma}_S(t) \quad (8.53)$$

En repassant dans le point de vue de Schrödinger, on obtient alors pour l'équation d'évolution de $\sigma_S(t)$ (équation pilote) On a remplacé t par $t+\infty$ car $t \gg \tau_c$

$$\frac{d}{dt} \sigma_S(t) = \frac{1}{i\hbar} [H_S, \sigma_S(t)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \langle R \tilde{R}(-\tau) \rangle_R \left\{ S \tilde{S}(-\tau) \sigma_S(t) - \tilde{S}(-\tau) \sigma_S(t) S \right\} - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \langle \tilde{R}(-\tau) R \rangle_R \left\{ \sigma_S(t) \tilde{S}(-\tau) S - S \sigma_S(t) \tilde{S}(-\tau) \right\} \quad (8.54)$$

- On peut montrer (voir références 4, 5, 6) que la condition de validité des 2 approximations précédentes est

$$v \tau_c / \hbar \ll 1 \quad (8.55)$$

où

$$v^2 = T_{2R} \left\{ H_{SR}^2 \sigma_S(0) \sigma_R(0) \right\} \quad (8.56)$$

La condition (8.55) est appelé condition de "retrecissement par le mouvement".

Un exemple d'application très simple

- Supposons que l'observable S de S apparaissant dans le couplage H_{SR} commute avec H_S

$$[S, H_S] = 0 \quad (8.57)$$

On en déduit que

$$\tilde{S}(-\tau) = e^{-iH_S \tau / \hbar} S e^{iH_S \tau / \hbar} = S \quad (8.58)$$

- Compte tenu de (8.58), on peut alors écrire (8.54) sous la forme

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sigma_S(t) = & \frac{1}{i\hbar} [H_S, \sigma_S(t)] - \frac{(\alpha + i\beta)}{\hbar^2} \{ S^2 \sigma_S(t) - S \sigma_S(t) S \} \\ & - \frac{(\alpha - i\beta)}{\hbar^2} \{ \sigma_S(t) S^2 - S \sigma_S(t) S \} \end{aligned} \quad (8.59)$$

où le nombre complexe $\alpha + i\beta$ est défini par (on suppose $t \gg \tau_c$)

$$\alpha + i\beta = \int_0^{\infty} d\tau \langle R \tilde{R}(-\tau) \rangle_R \quad (8.60)$$

- Par ailleurs, comme S et H_S commutent, il est possible de trouver une base $\{ |\varphi_m\rangle \}$ de vecteurs propres communs à S et H_S

$$\begin{cases} H_S |\varphi_m\rangle = E_m |\varphi_m\rangle & (8.61.2) \\ S |\varphi_m\rangle = s_m |\varphi_m\rangle & (8.61.6) \end{cases}$$

- Projetons alors l'équation pilote (8.59) sur la base $\{ |\varphi_m\rangle \}$

Pour les populations $\langle \varphi_m | \sigma_S(t) | \varphi_m \rangle$, on obtient

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi_m | \sigma_S(t) | \varphi_m \rangle = 0 \quad (8.62)$$

Pour les cohérences $\langle \varphi_m | \sigma_S(t) | \varphi_p \rangle$ avec $m \neq p$, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \varphi_m | \sigma_S(t) | \varphi_p \rangle = & \left[-i \frac{(E_m - E_p)}{\hbar} - i \frac{\beta}{\hbar^2} (s_m^2 - s_p^2) \right] \langle \varphi_m | \sigma_S(t) | \varphi_p \rangle \\ & - \frac{\alpha}{\hbar^2} \underbrace{[s_m^2 - s_m s_p + s_p^2 - s_m s_p]}_{(s_m - s_p)^2} \langle \varphi_m | \sigma_S(t) | \varphi_p \rangle \end{aligned} \quad (8.63)$$

- Interprétation

- les populations sont figées
- Chaque niveau $|\varphi_m\rangle$ est déplacé d'une quantité $\beta s_m^2 / \hbar$ (on aurait pu éviter ceci en ajoutant à H un contre terme proportionnel à S^2)
- la cohérence entre $|\varphi_m\rangle$ et $|\varphi_p\rangle$ est amortie avec un taux proportionnel au carre $(s_m - s_p)^2$ de la différence entre les valeurs propres

- Application au mouvement Brownien décrit par l'hamiltonien (8.2)

Dans ce cas $S = X$. Si l'on prend la limite $M \rightarrow \infty$, on a $H_S = P^2 / 2M \rightarrow 0$ et $[X, H_S] = 0$. On retrouve bien alors que, à l'ordre 0 en $1/M$, la cohérence entre les états propres $|x'\rangle$ et $|x''\rangle$ de X est détruite avec un taux proportionnel à $(x' - x'')^2$.

Références

- 1 - A.O. Caldeira, A.J. Leggett, *Annals of Physics* 149, 374 (1983)
- 2 - C. Aslangul, N. Pottier, D. Saint-James, *J. Physique* 48, 1871 (1987)
- 3 - V. Hakim, V. Ambegaokar, *Phys. Rev. A* 32, 423 (1985)
- 4 - C. Cohen-Tannoudji, *Cours Collège de France* 1975-76
- 5 - C. Cohen-Tannoudji, in *Frontiers in Laser Spectroscopy*, Balian, Haroche, Liberman eds, les Horribles XXVII, 1975 North Holland 1977
- 6 - C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, *Processus d'Interaction entre Photons et Atomes*, chapitre IV Interéditions et Editions du CNRS, Paris 1988

Dans ce cours, nous allons appliquer la méthode de l'équation pilote, rappelée dans l'appendice du cours VIII, à l'hamiltonien de Caldeira-Leggett : B est la particule Brownienne, R le réservoir d'oscillateurs harmoniques auxquels cette particule est couplée.

③ Moyennes à 1 et 2 temps de la force de Langevin

- L'hamiltonien d'interaction H_{SR} de l'hamiltonien de Caldeira-Leggett (8.2) a la forme générale (8.37) avec :

$$S = X \quad (9.1.a) \quad R = \sum_{\alpha} C_{\alpha} X = \sum_{\alpha} C_{\alpha} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}}} (a_{\alpha} + a_{\alpha}^{\dagger}) \quad (9.1.b)$$

(Le contre terme H_{CT} , qui ne dépend que de X , peut être regroupé avec H_S)

- L'observable du réservoir qui figure dans l'hamiltonien d'interaction est donc (9.1.b), qui s'écrit en représentation d'interaction

$$\tilde{R}(t) = \sum_{\alpha} C_{\alpha} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}}} [a_{\alpha} e^{-i\omega_{\alpha}t} + a_{\alpha}^{\dagger} e^{i\omega_{\alpha}t}] \quad (9.2)$$

puisque

$$\tilde{a}_{\alpha}^{\dagger}(t) = e^{iH_R t/\hbar} a_{\alpha}^{\dagger} e^{-iH_R t/\hbar} = a_{\alpha}^{\dagger} e^{i\omega_{\alpha}t} = [a_{\alpha}(t)]^{\dagger} \quad (9.3)$$

On reconnaît en (9.2) la force de Langevin (8.21) qui apparaît dans l'équation de Heisenberg-Langevin (8.33) de $P(t)$.

Les moyennes à 2 temps qui figurent dans l'équation pilote (8.54) sont donc des moyennes à 2 temps de la force de Langevin. Pour les calculer et pour vérifier que R satisfait bien aux conditions (8.45) et (8.46) que nous avons supposées pour établir l'équation pilote, nous devons au préalable préciser les hypothèses faites sur l'état du réservoir.

a) Hypothèses sur l'état du réservoir

- Nous supposons qu'à $t=0$ l'état du système global $S+R$ est, comme dans (8.44), factorisé

$$\sigma(0) = \sigma_S(0) \sigma_R(0) \quad (9.4)$$

- Nous supposons que $\sigma_R(0)$ est diagonal dans la base des états propres de H_R , repérés par les nombres de quanta n_{α} de chaque oscillateur harmonique ω_{α}

$$\sigma_R(0) = \prod_{\alpha} \sigma_R^{\alpha}(0) \quad (9.5.2)$$

$$\langle n_{\alpha} | \sigma_R^{\alpha}(0) | n'_{\alpha} \rangle = P_{n_{\alpha}} \delta_{n_{\alpha} n'_{\alpha}} \quad (9.5.6)$$

$P_{n_{\alpha}}$ étant la probabilité d'avoir n_{α} quanta dans l'oscillateur α .

On a alors

$$\langle a_{\alpha} \rangle = \langle a_{\alpha}^{\dagger} \rangle = 0 \quad (9.6.2)$$

$$\langle a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \rangle = \sum_{n_{\alpha}=0}^{\infty} n_{\alpha} P_{n_{\alpha}} = \langle n_{\alpha} \rangle \quad (9.6.b)$$

$$\langle a_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} \rangle = \langle n_{\alpha} \rangle + 1 \quad (9.6.c)$$

où n_{α} est le nombre moyen de quanta dans l'oscillateur α .

Il est clair que l'état (9.5) satisfait aux 2 conditions (8.45) et (8.46)

$$[\sigma_R(0), H_R] = 0 \quad (9.7.2)$$

$$\langle R \rangle = \text{Tr}[R \sigma_R(0)] = 0 \quad (9.7.b)$$

- Dans le cas de l'équilibre thermodynamique à la température T , on a

$$\langle n_\alpha \rangle = \frac{1}{e^{\hbar \omega_\alpha / k_B T} - 1} \quad (9.8)$$

- D'autres conditions initiales possibles sont étudiées dans les références (1, 2)

b) Parties réelle et imaginaire de $\langle R \tilde{R}(-\tau) \rangle_R$. Fonction de corrélation symétrique et susceptibilité linéaire.

- La moyenne à 2 temps

$$\langle R \tilde{R}(-\tau) \rangle_R = \langle \tilde{R}(0) \tilde{R}(-\tau) \rangle_R = \text{Tr} \{ \sigma_R(0) \tilde{R}(0) \tilde{R}(-\tau) \} = \langle \tilde{R}(-\tau) R \rangle_R^* \quad (9.9)$$

qui figure dans l'équation pilote (8.54) peut être écrite

$$\langle R \tilde{R}(-\tau) \rangle = C(\tau) - \frac{i\hbar}{2} \chi(\tau) \quad (9.10)$$

où $C(\tau)$ et $\chi(\tau)$ sont 2 fonctions réelles de τ

$$\begin{cases} C(\tau) = \frac{1}{2} \langle \tilde{R}(0) \tilde{R}(-\tau) + \tilde{R}(-\tau) \tilde{R}(0) \rangle_R & (9.11.a) \\ \chi(\tau) = \frac{i}{\hbar} \langle [\tilde{R}(0), \tilde{R}(-\tau)] \rangle_R \theta(\tau) & (9.11.b) \end{cases}$$

On a rajouté la fonction de Heaviside $\theta(\tau)$ à (9.11.b) car, dans l'équation pilote (8.54), l'intégrale sur τ est limitée aux valeurs positives de τ .

On reconnaît en $C(\tau)$ la fonction de corrélation symétrique de R évoluant librement dans l'état d'équilibre $\sigma_R(0)$. Quant à $\chi(\tau)$, c'est la susceptibilité linéaire du réservoir dans l'état d'équilibre $\sigma_R(0)$. Plus précisément, on peut montrer (voir par exemple la référence 3) que si le réservoir R est soumis à la perturbation $-\lambda(t)R$, où $\lambda(t)$ est une fonction donnée de t , la valeur moyenne à l'instant t de R dans l'état ainsi perturbé du réservoir s'écrit, à l'ordre 1 en λ

$$\langle R(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \chi(\tau) \lambda(t-\tau) \quad (9.12)$$

Calcul de $C(\tau)$

Compte tenu de (9.2), (9.5) et (9.6), on a

$$C(\tau) = \text{Re} \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \frac{\hbar}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \left[\langle n_{\alpha} \rangle e^{i\omega_{\alpha}\tau} + (\langle n_{\alpha} \rangle + 1) e^{-i\omega_{\alpha}\tau} \right] \quad (9.13)$$

c'est à dire encore, en passant à la limite continue et en utilisant (8.23), (8.24) et (8.26)

$$\begin{aligned} C(\tau) &= \frac{2M\gamma}{\pi} \int_0^{\omega_c} \hbar \omega \left(\langle n(\omega) \rangle + \frac{1}{2} \right) \cos \omega \tau d\omega \\ &= \frac{2M\gamma}{\pi} \int_0^{\omega_c} \langle E(\omega) \rangle \cos \omega \tau d\omega \end{aligned} \quad (9.14)$$

où $\langle E(\omega) \rangle$ est l'énergie moyenne des oscillateurs de fréquence ω .

Calcul de $\chi(\tau)$ De la même façon, on obtient, pour $\tau > 0$

$$\begin{aligned}\chi(\tau) &= -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \frac{\hbar}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \left[\langle n_{\alpha} \rangle e^{i\omega_{\alpha}\tau} + (\langle n_{\alpha} \rangle + 1) e^{-i\omega_{\alpha}\tau} \right] \\ &= \frac{2M\gamma}{\pi} \int_0^{\omega_c} \omega \sin \omega\tau \, d\omega\end{aligned}\quad (9.15)$$

On constate bien que $\chi(\tau)$ ne dépend pas de l'état du réservoir (voir remarque (i), p. VIII-5) alors que $C(\tau)$ en dépend. On peut donc calculer tout de suite $\chi(\tau)$. Pour cela, partons de

$$\int_0^{\omega_c} \cos \omega\tau \, d\omega = \frac{1}{2} \int_{-\omega_c}^{+\omega_c} \cos \omega\tau \, d\omega = \frac{1}{4} \int_{-\omega_c}^{+\omega_c} [e^{i\omega\tau} + e^{-i\omega\tau}] \, d\omega = \pi \delta_c(\tau) \quad (9.16)$$

où $\delta_c(\tau)$ est la fonction delta de largeur ω_c^{-1} introduite en (8.30). On a alors

$$\chi(\tau) = -\frac{2M\gamma}{\pi} \frac{d}{d\omega} \int_0^{\omega_c} \cos \omega\tau \, d\omega = -2M\gamma \delta_c'(\tau) \quad (9.17)$$

c) Calcul de $C(\tau)$ pour un réservoir en équilibre thermodynamique à la limite classique

- Pour un réservoir en équilibre thermodynamique, on peut utiliser (9.8). La limite classique correspond à

$$k_B T \gg \hbar \omega_c \quad (9.18)$$

Pour tous les oscillateurs du réservoir, on a alors

$$\langle n(\omega) \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \approx \frac{k_B T}{\hbar\omega} \gg 1 \quad (9.19)$$

Rappelons que nous avons déjà supposé $\omega_c \gg \gamma$ (voir (8.34)).

- Si l'on reporte (9.19) dans (9.14) et qu'on néglige $1/2$ devant $\langle n(\omega) \rangle$, on obtient, compte tenu de (9.19) et (9.16)

$$C(\tau) = \frac{2M\gamma}{\pi} k_B T \int_0^{\omega_c} \cos \omega\tau \, d\omega = 2M\gamma k_B T \delta_c(\tau) = 2D \delta_c(\tau) \quad (9.20)$$

On a utilisé la relation $D = M\gamma k_B T$ (voir (6.8))

On retrouve bien qu'à la limite classique, la fonction de corrélation de $\tilde{R}(t)$ (\tilde{R} n'est autre que la force de Langevin) est une fonction de τ très étroite dont l'aire n'est autre que 2 fois le coefficient de diffusion de l'impulsion.

- Finalement, à la limite classique, on peut écrire, compte tenu de (9.10), (9.17) et (9.20)

$$\langle R \tilde{R}(-\tau) \rangle_R = 2D \delta_c(\tau) + i\hbar M\gamma \delta_c'(\tau) \quad (9.21.a)$$

$$\langle \tilde{R}(-\tau) R \rangle_R = 2D \delta_c(\tau) - i\hbar M\gamma \delta_c'(\tau) \quad (9.21.b)$$

Il apparaît ainsi clairement qu'à la limite classique, toutes les moyennes à 2 temps qui figurent dans l'équation pilote (8.54), ont des largeurs en τ très petites de l'ordre de ω_c^{-1} . La petitesse de ce temps de corrélation $\tau_c \sim \omega_c^{-1}$ devant le temps γ^{-1} d'évolution caractéristique de la particule Brownienne est une condition essentielle pour que l'on puisse utiliser l'équation pilote (8.54)

4) Equation pilote

a) Calcul de $\tilde{X}(-\tau)$

Pour expliciter les différents termes de (8.54), avec $S = X$, il ne reste plus qu'à calculer

$$\tilde{X}(-\tau) = e^{-iH_S\tau/\hbar} X e^{iH_S\tau/\hbar} = e^{-iP^2\tau/2M\hbar} X e^{iP^2\tau/2M\hbar} \quad (9.22)$$

En utilisant $[X, F(P)] = i\hbar dF/dP$, on obtient immédiatement

$$\tilde{X}(-\tau) = X - \frac{P\tau}{M} \quad (9.23)$$

qui correspond bien à l'évolution libre d'une particule de vitesse P/M en X à $\tau = 0$.

b) Contributions des fluctuations du réservoir

- C'est la contribution de la partie réelle des moyennes à 2 temps $\langle R \tilde{R}(-\tau) \rangle$, proportionnelle à la fonction de corrélation symétrique $C(\tau)$ qui décrit la dynamique des fluctuations du réservoir. Physiquement, les termes correspondants de l'équation pilote décrivent l'effet des fluctuations du réservoir polarisant le petit système et interagissant avec la polarisation induite (voir réf. 4)

- Dans (8.54), remplaçons S par X , $\tilde{S}(-\tau)$ par (9.23) et $\langle R \tilde{R}(-\tau) \rangle$ et $\langle \tilde{R}(-\tau) R \rangle$ par $2D \delta_c(\tau)$. On obtient pour l'ensemble des 2 derniers termes et en écrivant pour simplifier $\sigma(t)$ au lieu de $\sigma_S(t)$

$$-\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau 2D \delta_c(\tau) \left\{ X \left(X - \frac{P\tau}{M} \right) \sigma(t) - \left(X - \frac{P\tau}{M} \right) \sigma(t) X + \sigma(t) \left(X - \frac{P\tau}{M} \right) X - X \sigma(t) \left(X - \frac{P\tau}{M} \right) \right\} \quad (9.24)$$

- Les termes en $X P \tau / M$ font intervenir $\int_0^\infty \tau \delta_c(\tau) d\tau \sim \tau_c \sim \frac{1}{\omega_c}$ et ont une contribution négligeable devant celle des termes en X^2 qui ne contiennent pas de ω_c au dénominateur

Nous les négligerons donc ici (Si on les gardait, on obtiendrait dans l'équation d'évolution de la fonction de Wigner $w(x, p, t)$ des termes en $\partial^2 w / \partial x \partial p$, représentant des petites corrections non-markoviennes).

- Pour les termes en X^2 , on obtient, en remplaçant $\int_0^\infty \delta_c(\tau) d\tau$ par $1/2$ ($\delta_c(\tau)$ est pair)

$$-\frac{D}{\hbar^2} [X^2 \sigma(t) - 2X \sigma(t) X + \sigma(t) X^2] = -\frac{D}{\hbar^2} [X, [X, \sigma(t)]] \quad (9.25)$$

c) Contribution de la susceptibilité du réservoir

- C'est la contribution de la partie imaginaire des moyennes à 2 temps du réservoir, proportionnelle d'après (2.10) à la susceptibilité du réservoir. Physiquement, ces termes de l'équation pilote décrivent le phénomène suivant : Le petit système S polarise le réservoir R qui réagit en retour sur S .

- En utilisant les parties imaginaires des 2 équations (9.21), on obtient pour les 2 derniers termes de (8.54)

$$-\frac{i}{\hbar} M \gamma \int_0^\infty d\tau \delta'_c(\tau) \left\{ X \left(X - \frac{P\tau}{M} \right) \sigma(t) - \left(X - \frac{P\tau}{M} \right) \sigma(t) X - \sigma(t) \left(X - \frac{P\tau}{M} \right) X + X \sigma(t) \left(X - \frac{P\tau}{M} \right) \right\} \quad (9.26)$$

Termes en X^2

$$-\frac{i}{\hbar} M \gamma \left[\int_0^\infty d\tau \delta_c'(\tau) \right] \underbrace{\left[X^2 \sigma - X \sigma X - \sigma X^2 + X \sigma X \right]}_{[X^2, \sigma]} \quad (9.27)$$

Comme, d'après (8.30), $\delta_c(0) = \omega_c / \pi$, ce terme vaut

$$-\frac{1}{i\hbar} \left[\frac{M \gamma \omega_c}{\pi} X^2, \sigma(t) \right] \quad (9.28)$$

Termes en XP

$$-\frac{i}{\hbar} \gamma \left\{ \int_0^\infty \tau \delta_c'(\tau) d\tau \right\} \left\{ -XP\sigma(t) + P\sigma(t)X + \sigma(t)PX - X\sigma(t)P \right\} \quad (9.29)$$

Après une intégration par parties, on trouve que la 1^{ère} accolade de (9.29) vaut $-1/2$. Quant à la 2^{ème} accolade, elle vaut $-[X, P\sigma(t) + \sigma(t)P]$, de sorte que le terme en XP de (9.26) vaut

$$-\frac{i}{\hbar} \frac{\gamma}{2} [X, P\sigma(t) + \sigma(t)P] \quad (9.30)$$

Finalement, la contribution de la susceptibilité du réservoir vaut

$$-\frac{1}{i\hbar} \left[\frac{M \gamma \omega_c}{\pi} X^2, \sigma(t) \right] - \frac{i}{\hbar} \frac{\gamma}{2} [X, P\sigma(t) + \sigma(t)P] \quad (9.31)$$

d) Récapitulation - Forme opératorielle de l'équation pilote

- Il ne reste qu'à étudier le 1^{er} terme de (8.54) qui, si l'on revient à (8.2), contient à la fois le terme $P^2/2M$ et le contre-terme H_{CT} qui ne dépend que d'opérateurs de \mathcal{B} . Si l'on utilise

$$\sum \frac{C_k^2}{2m_k \omega_k^2} = \frac{1}{\pi} \int_0^{\omega_c} d\omega \frac{J_c(\omega)}{\omega} = \frac{M \gamma \omega_c}{\pi} \quad (9.32)$$

La contribution du contre-terme à l'équation pilote

$$\frac{1}{i\hbar} [H_{CT}, \sigma(t)] = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{M \gamma \omega_c}{\pi} X^2, \sigma(t) \right] \quad (9.33)$$

est exactement compensé par le 1^{er} terme de (9.31), de sorte que le 1^{er} terme de (8.54) se réduit à $\frac{1}{i\hbar} \left[\frac{P^2}{2M}, \sigma(t) \right]$

- Finalement, en récapitulant tous les résultats précédents, on obtient pour la forme opératorielle de l'équation pilote

$$\frac{d}{dt} \sigma(t) = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{P^2}{2M}, \sigma(t) \right] - \frac{i}{\hbar} \frac{\gamma}{2} [X, P\sigma(t) + \sigma(t)P] - \frac{D}{\hbar^2} [X, [X, \sigma(t)]] \quad (9.34)$$

e) Equation correspondante pour $C(u, v, t)$

- D'après le cours V, si à l'opérateur densité σ est associée la fonction caractéristique $C(u, v, t)$, on connaît les fonctions caractéristiques associées à $X\sigma$, σX , $P\sigma$, σP (voir (5.41))

$$\begin{aligned} \sigma X &\rightarrow -\left(\frac{u}{2} + i\hbar \partial_v\right) C(u, v) & X\sigma &\rightarrow \left(\frac{u}{2} - i\hbar \partial_v\right) C(u, v) \\ \sigma P &\rightarrow \left(\frac{v}{2} - i\hbar \partial_u\right) C(u, v) & P\sigma &\rightarrow -\left(\frac{v}{2} + i\hbar \partial_u\right) C(u, v) \end{aligned} \quad (9.35)$$

On en déduit que

$$\frac{1}{i\hbar} \left[\frac{P^2}{2M}, \sigma \right] \rightarrow \frac{1}{2i\hbar M} \left[\left(\frac{v}{2} + i\hbar \partial_u\right)^2 - \left(\frac{v}{2} - i\hbar \partial_u\right)^2 \right] C(u, v) = \frac{1}{M} v \frac{\partial}{\partial u} C(u, v) \quad (9.36)$$

$$-\frac{i}{\hbar} \frac{\delta}{\delta} [X, P\sigma + \sigma P] = -\frac{i}{\hbar} \frac{\delta}{\delta} [X P \sigma + X \sigma P - P \sigma X - \sigma P X]$$

$$\begin{aligned} \rightarrow -\frac{i}{\hbar} \frac{\delta}{\delta} \left\{ -\left(\frac{u}{2} - i\hbar \partial_v\right)\left(\frac{v}{2} + i\hbar \partial_u\right) + \left(\frac{u}{2} - i\hbar \partial_v\right)\left(\frac{v}{2} - i\hbar \partial_u\right) \right. \\ \left. - \left(\frac{v}{2} + i\hbar \partial_u\right)\left(\frac{u}{2} + i\hbar \partial_v\right) + \left(\frac{u}{2} + i\hbar \partial_v\right)\left(\frac{v}{2} - i\hbar \partial_u\right) \right\} C(u, v) \\ = -\gamma u \frac{\partial}{\partial u} C(u, v) \end{aligned} \quad (9.37)$$

$$-\frac{D}{\hbar^2} [X, [X, \sigma]] = -\frac{D}{\hbar^2} [X^2 \sigma - 2X \sigma X + \sigma X^2]$$

$$\rightarrow -\frac{D}{\hbar^2} \left\{ \left(\frac{u}{2} - i\hbar \partial_v\right)^2 + 2\left(\frac{u}{2} - i\hbar \partial_v\right)\left(\frac{u}{2} + i\hbar \partial_v\right) + \left(\frac{u}{2} + i\hbar \partial_v\right)^2 \right\} = -\frac{D u^2}{\hbar^2} C(u, v) \quad (9.38)$$

En regroupant tous ces résultats, on obtient

$$\frac{\partial}{\partial t} C(u, v, t) = \frac{1}{M} v \frac{\partial}{\partial u} C(u, v, t) - \gamma u \frac{\partial}{\partial u} C(u, v, t) - \frac{D}{\hbar^2} u^2 C(u, v, t) \quad (9.39)$$

qui coïncide avec l'équation donnée sans démonstration dans le cours VI (voir (6.11))

Finalement, nous avons ainsi démontré que le modèle de Caldeira-Leggett redonne bien l'équation pilote et par suite l'équation de Fokker-Planck qui a servi de base à la discussion physique des cours VI et VII

⑤ Généralisation au cas d'une particule Brownienne dans un potentiel harmonique (voir aussi ref. 7)

En vue d'applications ultérieures, nous généralisons maintenant le traitement qui précède au cas où la particule Brownienne est, en l'absence de couplage avec le réservoir, un oscillateur harmonique de masse M et de fréquence ω_0 , auquel cas nous avons vu plus haut (voir (8.15)) qu'il faut remplacer H_S par

$$H_S = \frac{P^2}{2M} + V(X) \quad (9.40)$$

tous les autres termes de (8.2) restant inchangés.

a) Nouvelle expression de $\tilde{X}(-\tau)$

En représentation d'interaction par rapport à H_S , les équations du mouvement de \tilde{X} et \tilde{P} sont

$$\dot{\tilde{X}} = \frac{\tilde{P}}{M} \quad (9.41.a) \quad \dot{\tilde{P}} = -M\omega_0^2 \tilde{X} \quad (9.41.b)$$

dont la solution à l'instant $-\tau$ pour \tilde{X} , correspondant à la condition initiale $\tilde{X}(0) = X$, $\tilde{P}(0) = P$ s'écrit

$$\tilde{X}(-\tau) = X \cos \omega_0 \tau - \frac{P}{M\omega_0} \sin \omega_0 \tau \quad (9.42)$$

On vérifie que (9.42) redonne bien (9.23) à la limite $\omega_0 \rightarrow 0$

b) Condition pour que les autres termes de l'équation pilote soient les mêmes que pour la particule libre

Les moyennes à 2 temps de l'observable R du réservoir sont les mêmes que plus haut et s'écrivent toujours sous la forme

(9.21). Leur largeur en τ est de l'ordre de τ_c . Pour que tous les calculs faits dans les §§ 4b et 4c précédents restent valables, il faut que, pour $\tau \leq \tau_c$, on puisse assimiler $\cos \omega_0 \tau$ à 1 et $\sin \omega_0 \tau$ à $\omega_0 \tau$. Comme $\tau_c \sim \omega_c^{-1}$, il faut donc que

$$\omega_0 \ll \omega_c \tag{9.43}$$

Si donc la condition (9.43) est vérifiée, de même bien sûr que (8.34) et (9.18), on en déduit que l'équation pilote de l'oscillateur harmonique couplé au réservoir R est

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{P^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega_0^2 X^2, \sigma(t) \right] - \frac{i}{\hbar} \frac{\gamma}{2} [X, P\sigma(t) + \sigma(t)P] - \frac{D}{\hbar^2} [X, [X, \sigma(t)]] \tag{9.44}$$

Le nouveau terme $\frac{1}{i\hbar} \left[\frac{1}{2} M \omega_0^2 X^2, \sigma(t) \right]$ fait apparaître, au 2^{ème} membre de l'équation donnant $\partial C(u, v, t) / \partial t$, un nouveau terme $- M \omega_0^2 u \frac{\partial}{\partial v} C(u, v, t)$, et de même au 2^{ème} membre de l'équation donnant $\partial w(x, p, t) / \partial t$ le nouveau terme $M \omega_0^2 x \frac{\partial}{\partial p} w(x, p, t)$.

ε) Discussion physique

(i) Possibilité de décrire un oscillateur harmonique suramorti par une équation pilote

- La démonstration précédente permettant d'aboutir à (9.44) ne suppose rien sur les valeurs relatives de γ et ω_0 . On peut très bien avoir

$$\gamma \gg \omega_0 \tag{9.45}$$

c'est à dire un oscillateur suramorti tout en conservant l'équation pilote (9.44), pourvu bien sûr que γ reste très petit devant $k_B T$ et $\hbar \omega_c$.

- Contrairement à ce que croient certains auteurs, la description d'un oscillateur suramorti par une équation pilote n'est pas incorrecte. Ce qui est important c'est que le temps de relaxation γ^{-1} soit très long devant le temps de corrélation ω_c^{-1} .

Dans un tout autre domaine, personne ne remettrait en cause les équations de Bloch de la RMN en champ magnétique très faible (quand la fréquence de Larmor ω_0 des spins devient petite devant $1/T_2$ et $1/T_1$).

(ii) La condition $k_B T \gg \hbar \omega_c$ est-elle essentielle ?

- Revenons à l'expression (9.14) de $C(\tau)$ (Rappelons que $\chi(\tau)$ ne dépend pas de l'état du réservoir et donc de sa température). L'énergie moyenne $\langle E(\omega) \rangle$ des oscillateurs du réservoir de fréquence ω reste constante et égale à $k_B T$ tant que $\hbar \omega \ll k_B T$. Si $k_B T$ était inférieur à $\hbar \omega_c$, on aurait pour $\langle E(\omega) \rangle$ une courbe restant constante et égale à $k_B T$ tant que $\hbar \omega \ll k_B T$, puis variant avec une échelle de variations caractéristique $k_B T / \hbar$ pour ω variant entre $k_B T / \hbar$ et ω_c , et enfin s'annulant pour $\omega > \omega_c$.

- La courbe $\langle E(\omega) \rangle$ a donc 2 échelles de variations en ω , $k_B T / \hbar$ et ω_c . Sa transformée de Fourier a par suite 2 échelles de variation en τ , $\hbar / k_B T$ et ω_c^{-1} dont le plus long est $\hbar / k_B T$. Pour qu'on puisse la considérer comme une fonction delta vis à vis des fonctions de τ variant à l'échelle γ^{-1} , il faut donc que

$$k_B T \gg \hbar \gamma \tag{9.46}$$

Il semble donc que l'équation pilote (9.44) reste valable même si $k_B T \ll \hbar \omega_c$, pourvu que l'on ait toujours $k_B T \gg \hbar \gamma$.

(iii) Limite des basses températures pour un oscillateur suramorti

- Si $k_B T \gg \hbar \gamma$, le traitement par équation pilote n'est plus valable car les effets non-markoviens sont alors non négligeables
- Parmi les traitements possibles d'un tel cas, on peut citer : les calculs exacts (réf. 1), car l'hamiltonien (8.2) avec $H_S = P^2/2M$ ou H_S donné par (9.40) est diagonalisable (ref. 5); les méthodes d'intégrales de chemin (réf. 6)

(iv) Simplifications pour un oscillateur sous-amorti ($\gamma \ll \omega_0$)

- Supposons $\gamma \ll \omega_0$ (9.47)

Si la transformée de Fourier $\hat{C}(\omega)$ de $C(\tau)$ varie très lentement sur un intervalle de largeur γ autour de ω_0 , on peut considérer cette fonction comme plate et la remplacer par une constante égale à $\hat{C}(\omega_0)$. Concrètement, ceci revient à remplacer $\langle E(\omega) \rangle$ par $\langle E(\omega_0) \rangle$ dans (9.14). L'approximation markovienne est alors justifiée et la description par équation pilote valable.

- L'argument précédent explique pourquoi il est possible de décrire un oscillateur harmonique sous-amorti même au zéro absolu ($T = 0^\circ K$). En effet dans ce cas, tous les oscillateurs du réservoir sont dans leur état fondamental et l'échelle de variation de $\hat{C}(\omega)$ autour de $\omega = \omega_0$, qui est de l'ordre de ω_0 , est très grande devant γ . Comme exemple d'une telle situation, on peut citer l'émission spontanée de photons par une charge élastiquement liée. Dans ce cas, le réservoir R est constitué par l'ensemble des modes du champ électromagnétique dans l'état vide, c'est à dire à $T = 0^\circ K$. De plus, comme le couplage charge-rayonnement est faible (il est caractérisé par la constante de structure fine $\alpha = 1/137$), on a bien $\gamma \ll \omega_0$.

- Pour conclure ce paragraphe, nous allons montrer qu'on peut déduire des calculs des §§ 4 et 5 ci dessus la forme de l'équation pilote d'un oscillateur harmonique sous-amorti à $T = 0^\circ K$. Si, comme nous l'avons justifié plus haut, on remplace $\langle E(\omega) \rangle$ par $\langle E(\omega_0) \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega_0$ dans (9.14), on obtient

$$C(\tau) \approx \frac{M \hbar \gamma \omega_0}{\pi} \int_0^{\omega_c} \cos \omega \tau d\omega = M \hbar \gamma \omega_0 S_c(\tau) \tag{9.48}$$

On a utilisé (9.16). Il suffit donc, dans les parties réelles de

(9.21.a) et (9.21.b), de remplacer $2D$ par $M\hbar\gamma\omega_0$. (Rappelons que les parties imaginaires sont reliées à la susceptibilité du réservoir, qui ne dépend pas de l'état de ce dernier, et garde donc la même valeur à $T=0^\circ\text{K}$). Comme tous les calculs qui suivent (9.21) sont les mêmes, il suffit de remplacer, dans (9.44), D par $M\hbar\gamma\omega_0/2$.

Appelons b^+ et b les opérateurs de création et d'annihilation de l'oscillateur \mathcal{S} . On a

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0}} (b+b^+) \quad P = i\sqrt{\frac{\hbar M\omega_0}{2}} (b^+ - b) \quad (9.49)$$

En remplaçant X et P par (9.49) dans (9.44) et D par $M\hbar\gamma\omega_0/2$ on obtient

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = -i\omega_0 [b^+b, \sigma] + \frac{\gamma}{4} [b+b^+, (b^+-b)\sigma + \sigma(b^+-b)] - \frac{\gamma}{4} [b+b^+, [b+b^+, \sigma]] \quad (9.50)$$

Les termes de relaxation (en γ), contiennent, soit $2b$, soit $2b^+$, soit $1b$ et $1b^+$. Comme $\gamma \ll \omega_0$, on peut faire l'approximation séculaire, qui consiste à négliger les termes de l'équation pilote couplant entre eux des éléments de matrice densité évoluant à des fréquences propres différentes (par exemple, couplage entre populations et cohérences). On peut alors se convaincre aisément que les termes séculaires sont ceux qui contiennent $1b$ et $1b^+$. En négligeant les autres, on obtient finalement à partir de 9.50

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = -i\omega_0 [b^+b, \sigma(t)] - \frac{\gamma}{2} [b^+b\sigma(t) + \sigma(t)b^+b] + \gamma b\sigma(t)b^+ \quad (9.51)$$

qui coïncide avec le résultat de la référence (8) pour $T=0^\circ\text{K}$.

Des applications intéressantes de cette équation seront discutées dans le cours suivant.

Références

- (1) F. Haake, R. Reibold, Phys. Rev. A32, 2462 (1985)
- (2) V. Hakim, V. Ambegaokar, Phys. Rev. A32, 423 (1985)
- (3) C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, "Photons et Atomes - Introduction à l'Électrodynamique Quantique", Exercice 6 du Complément E, V (InterEditions et Éditions du CNRS, Paris 1987)
- (4) J. Dalibard, J. Dupont-Roc, C. Cohen-Tannoudji, J. Physique 43, 1617 (1982) et 45, 637 (1984)
- (5) P. Ullersma, Physica 32, 27 (1966); 32, 56 (1966); 32, 74 (1966); 32, 90 (1966)
- (6) A. Caldeira, A. Leggett, Phys. Rev. A31, 1059 (1985)
- (7) C.M. Savage, D.F. Walls, Phys. Rev. A32, 2316 (1985)
- (8) C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, "Processus d'interaction entre photons et atomes", complément B, IV (InterEditions et Éditions du CNRS, Paris 1988)

But de ce cours

- Certaines propositions expérimentales [1] envisagent la possibilité de préparer un oscillateur harmonique (associé à un mode du champ électromagnétique) dans une superposition cohérente de 2 états cohérents. En l'absence de dissipation, les paquets d'ondes associés à ces 2 états cohérents oscilleraient sans se déformer, et on pourrait essayer d'observer les phénomènes d'interférence associés à la cohérence qui existe entre eux.
- Problème étudié dans ce cours : comme une dissipation très faible va-t-elle perturber ces phénomènes d'interférence ? Pourquoi la cohérence entre les 2 paquets d'ondes est-elle amortie beaucoup plus rapidement que le mouvement de chaque paquet d'ondes ?

① Comment préparer un oscillateur harmonique dans une superposition linéaire de 2 états cohérents ?

a) Problème physique considéré [réf. (1)]

- Champ monomode de fréquence ω_0 . b^+ et b : opérateurs de création et d'annihilation d'un photon $\hbar\omega_0$ de ce mode
- Hamiltonien modèle pris pour ce mode

$$H = \hbar\omega_0 b^+ b + \hbar\Omega (b^+ b)^2 \quad (10.1)$$

1^{er} terme : énergie propre du mode (états propres $|N\rangle$, avec $N=0,1,2,\dots$)

2^{ème} terme : terme phénoménologique décrivant l'effet d'une interaction avec un milieu non-linéaire. Par exemple, H décrit schématiquement un champ monomode dans une ligne de transmission (fibre optique) avec une susceptibilité non-linéaire.

- A $t=0$, le mode est dans un état cohérent $|\beta\rangle$

$$|\psi(0)\rangle = e^{-|\beta|^2/2} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\beta^N}{\sqrt{N!}} |N\rangle \quad (10.2)$$

Nous allons montrer que, sous l'effet de H , le mode va évoluer et se retrouver, après un certain temps d'interaction, dans une superposition linéaire de 2 états cohérents.

b) Evolution de l'oscillateur en l'absence de dissipation

- Les états propres de H sont les états $|N\rangle$

$$H|N\rangle = (N\hbar\omega_0 + N^2\hbar\Omega) |N\rangle \quad (10.3)$$

Après un temps T , l'état (10.2) est devenu, en représentation d'interaction par rapport à $H_0 = \hbar\omega_0 b^+ b$

$$|\tilde{\psi}(T)\rangle = e^{-|\beta|^2/2} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\beta^N}{\sqrt{N!}} e^{-iN^2\Omega T} |N\rangle \quad (10.4)$$

- Prenons $T = \frac{\pi}{2\Omega}$ et calculons $e^{-iN^2\Omega T} = e^{-iN^2\pi/2}$

$$\bullet \text{ Si } N=2n \text{ pair, } N^2=4n^2 \text{ et } e^{-iN^2\pi/2} = e^{-2i\pi n^2} = 1 \quad (10.5a)$$

$$\bullet \text{ Si } N=2n+1 \text{ impair, } N^2=4n^2+4n+1 = 4n(n+1)+1 \text{ et } e^{-iN^2\pi/2} = e^{-2i\pi n(n+1)} e^{-i\pi/2} = -i \quad (10.5b)$$

- Par ailleurs, on a

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\beta^N e^{-i\pi/4} + (-\beta)^N e^{i\pi/4} \right] = \begin{cases} \beta^N \frac{2 \cos \frac{\pi}{4}}{\sqrt{2}} = \beta^N & \text{si } N \text{ pair} \\ \beta^N \frac{(-i) 2 \sin \frac{\pi}{4}}{\sqrt{2}} = -i \beta^N & \text{si } N \text{ impair} \end{cases} \quad (10.6.a)$$

$$(10.6.b)$$

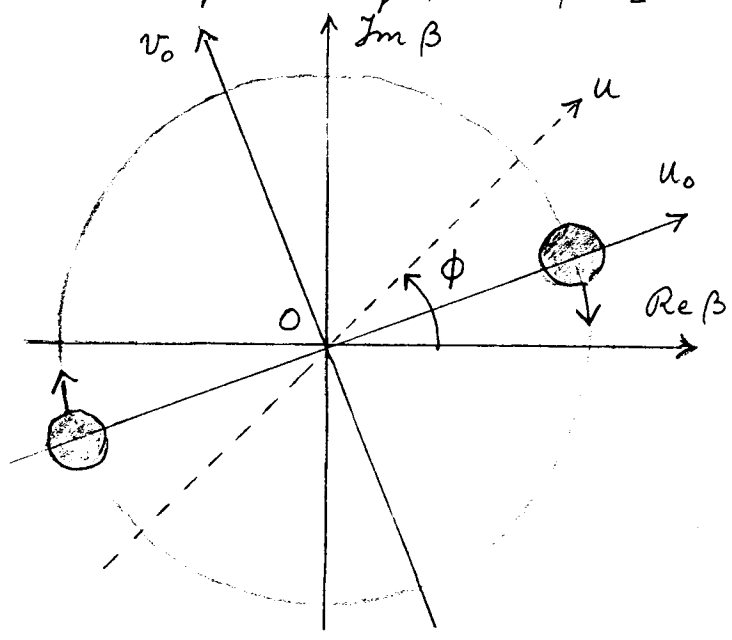
- En utilisant (10.5) et (10.6), on peut finalement réécrire $|\tilde{\Psi}(\frac{\pi}{2\Omega})\rangle$ sous la forme

$$|\tilde{\Psi}(\frac{\pi}{2\Omega})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\beta\rangle e^{-i\pi/4} + |-\beta\rangle e^{i\pi/4} \right] \quad (10.7)$$

Ainsi, après un temps $T = \pi/2\Omega$, l'état de l'oscillateur est devenu une superposition linéaire de 2 états cohérents $|\beta\rangle$ et $|-\beta\rangle$ oscillant en opposition de phase. Si l'interaction responsable du 2^{ème} terme de (10.1) est coupée à partir de cet instant, l'état du champ évolue librement à partir de (10.7).

c) Que pourrait-on mesurer sur le champ préparé dans un tel état?

- Représentation graphique de l'état du mode par des petites surfaces dans le plan complexe de β [voir référence (2)]



- La projection des 2 paquets d'ondes associés aux 2 états cohérents (tournant en opposition de phase) sur un axe Ou faisant l'angle ϕ avec l'axe réel (et tournant lui aussi) donne l'amplitude de probabilité pour que la composante du champ en phase avec un champ de référence de phase ϕ ait une amplitude donnée

- Si l'axe Ou coïncide avec l'axe Ou_0 passant par les centres des 2 paquets d'ondes, les projections des 2 paquets d'ondes seront bien séparées, et la distribution de probabilité de l'amplitude du champ aura 2 pics bien séparés. Si par contre, l'axe Ou coïncide avec l'axe Ov_0 perpendiculaire à Ou_0 , les projections des 2 paquets d'ondes se recouvriront. Comme ils sont cohérents l'un avec l'autre et qu'ils ont des vitesses moyennes opposées, la distribution de probabilité de l'amplitude du champ présentera des franges d'interférence très resserrées sur une petite plage centrée autour de 0.

plitude du champ aura 2 pics bien séparés. Si par contre, l'axe Ou coïncide avec l'axe Ov_0 perpendiculaire à Ou_0 , les projections des 2 paquets d'ondes se recouvriront. Comme ils sont cohérents l'un avec l'autre et qu'ils ont des vitesses moyennes opposées, la distribution de probabilité de l'amplitude du champ présentera des franges d'interférence très resserrées sur une petite plage centrée autour de 0.

- Possibilité donc, suivant la phase du champ de référence, d'observer des distributions de probabilité avec des pics très espacés ou des franges d'interférence très resserrées. Interférences quantiques entre 2 états macroscopiquement différents

Concrètement, une telle mesure pourrait être faite en faisant interférer le champ dans l'état (10.7) avec un champ local intense de référence sur un détecteur homodyne (voir référence (1) et références in)

② Etude de la dissipation dans la base des états propres de l'oscillateur (voir référence (3))

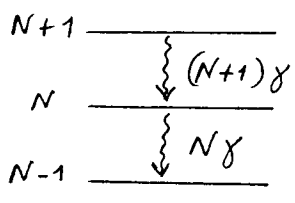
L'oscillateur précédent est faiblement amorti par couplage avec un réservoir R que nous supposons pour simplifier au zéro absolu. L'équation pilote décrivant l'évolution de l'opérateur densité σ de l'oscillateur a été établie dans le cours IX (voir (9.51)) Nous allons tout d'abord projeter cette équation sur la base $\{|N\rangle\}$ des états propres de $H_0 = \hbar\omega_0 b^\dagger b$.

Pour interpréter les résultats, il peut être utile de considérer l'oscillateur ω_0 comme une charge élastiquement liée et le réservoir R comme l'ensemble des modes du champ de rayonnement dans l'état vide. La dissipation de l'oscillateur est alors due à l'émission spontanée de photons par la charge oscillante

a) Evolution des populations $\sigma_{NN}(t) = \langle N | \sigma(t) | N \rangle$

En projetant (9.51) sur $|N\rangle$ et $\langle N|$ et en utilisant les éléments de matrice de b et b^\dagger , on obtient

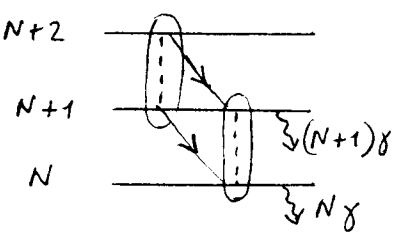
$$\dot{\sigma}_{NN} = -N\gamma \sigma_{NN} + (N+1)\gamma \sigma_{N+1 N+1} \tag{10.8}$$



L'oscillateur quitte le niveau N vers le niveau $N-1$ avec un taux $N\gamma$ et est alimenté à partir de $N+1$ avec un taux $(N+1)\gamma$
 γ est le taux de transition de $|1\rangle$ vers $|0\rangle$ (taux d'émission spontanée d'un photon à partir de $|1\rangle$)
 Plus N est grand, plus la probabilité de quitter $|N\rangle$ est grande

b) Evolution des cohérences $\sigma_{N+1 N}(t) = \langle N+1 | \sigma(t) | N \rangle$

$$\dot{\sigma}_{N+1 N} = -i\omega_0 \sigma_{N+1 N} - \frac{1}{2} [(N+1) + N] \gamma \sigma_{N+1 N} + \sqrt{(N+2)(N+1)} \gamma \sigma_{N+2 N+1} \tag{10.9}$$



1^{er} terme : évolution propre
 2^{ème} terme : Taux d'amortissement de $\sigma_{N+1 N}$ égal à la 1/2 somme des taux de départ $(N+1)\gamma$ et $N\gamma$ à partir de $|N+1\rangle$ et $|N\rangle$
 3^{ème} terme : Transfert de cohérence de $\sigma_{N+2 N+1}$ vers $\sigma_{N+1 N}$

c) Evolution de quelques valeurs moyennes

- En multipliant b par l'expression (9.51) de $d\sigma/dt$, en prenant la trace et en utilisant la propriété d'invariance de la trace dans une permutation circulaire, on obtient

$$\frac{d}{dt} \langle b \rangle = - (i\omega_0 + \frac{\gamma}{2}) \langle b \rangle \tag{10.10}$$

$\langle b \rangle$ "tourne" à la fréquence $-\omega_0$ et est amorti avec un taux $\frac{\gamma}{2}$

- On trouve de même que

$$\frac{d}{dt} \langle b^\dagger b \rangle = -\gamma \langle b^\dagger b \rangle \tag{10.11}$$

$\langle b^\dagger b \rangle$ tend vers 0 avec un taux γ .

③ Autre écriture possible de l'équation pilote

a) Fonction caractéristique adaptée à l'ordre normal

Définition et propriétés

A l'opérateur densité de l'oscillateur σ , on associe une fonction $C_N(\lambda, \lambda^*)$

$$C_N(\lambda, \lambda^*) = \text{Tr}[\sigma e^{\lambda b^+} e^{-\lambda^* b}] \quad (10.12)$$

où λ est un nombre complexe. Dans (10.12), les opérateurs b et b^+ sont rangés dans l'ordre normal. $C_N(\lambda, \lambda^*)$ est appelé fonction caractéristique adaptée à l'ordre normal car les valeurs moyennes de produits de b^+ et b rangés dans l'ordre normal s'expriment simplement en fonction des dérivées partielles de C_N évaluées en $\lambda = \lambda^* = 0$

$$\langle (b^+)^m b^p \rangle = (-1)^p \frac{\partial^{m+p}}{\partial \lambda^m \partial \lambda^{*p}} C_N(\lambda, \lambda^*) \Big|_{\lambda = \lambda^* = 0} \quad (10.13)$$

Fonctions caractéristiques associées à σb^+ , $b\sigma$, $b^+\sigma$, σb

$$\frac{\partial C_N}{\partial \lambda} = \text{Tr}[\sigma b^+ e^{\lambda b^+} e^{-\lambda^* b}]$$

$$\frac{\partial C_N}{\partial \lambda^*} = -\text{Tr}[\sigma e^{\lambda b^+} e^{-\lambda^* b} b] = -\text{Tr}[b\sigma e^{\lambda b^+} e^{-\lambda^* b}]$$

On en déduit que

$$\text{si } \sigma \rightarrow C_N(\lambda, \lambda^*) \quad \left\{ \begin{array}{l} \sigma b^+ \rightarrow \frac{\partial C_N(\lambda, \lambda^*)}{\partial \lambda} \end{array} \right. \quad (10.14.a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} b\sigma \rightarrow -\frac{\partial C_N(\lambda, \lambda^*)}{\partial \lambda^*} \end{array} \right. \quad (10.14.b)$$

D'après l'identité de Glauber

$$e^{\lambda b^+} e^{-\lambda^* b} = e^{\lambda b^+ - \lambda^* b} e^{|\lambda|^2/2} = e^{-\lambda^* b} e^{\lambda b^+} e^{|\lambda|^2/2}$$

On en déduit

$$C_N(\lambda, \lambda^*) = e^{\lambda \lambda^*} \text{Tr}[\sigma e^{-\lambda^* b} e^{\lambda b^+}]$$

$$\frac{\partial C_N(\lambda, \lambda^*)}{\partial \lambda} = \lambda^* C_N(\lambda, \lambda^*) + e^{\lambda \lambda^*} \text{Tr}[b^+ \sigma e^{-\lambda^* b} e^{\lambda b^+}]$$

$$= \lambda^* C_N(\lambda, \lambda^*) + \text{Tr}[b^+ \sigma e^{\lambda b^+} e^{-\lambda^* b}]$$

$$\frac{\partial C_N(\lambda, \lambda^*)}{\partial \lambda^*} = \lambda C_N(\lambda, \lambda^*) - \text{Tr}[\sigma b e^{\lambda b^+} e^{-\lambda^* b}]$$

Donc

$$\text{si } \sigma \rightarrow C_N(\lambda, \lambda^*) \quad \left\{ \begin{array}{l} b^+\sigma \rightarrow \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} - \lambda^*\right) C_N(\lambda, \lambda^*) \end{array} \right. \quad (10.15.a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma b \rightarrow \left(\lambda - \frac{\partial}{\partial \lambda^*}\right) C_N(\lambda, \lambda^*) \end{array} \right. \quad (10.15.b)$$

b) Fonctions $C_N(\lambda, \lambda^*)$ associées à quelques états de l'oscillateur

Etat cohérent $|\psi\rangle = |\beta\rangle$

$$C_N(\lambda, \lambda^*) = \text{Tr}[|\beta\rangle\langle\beta| e^{\lambda b^+} e^{-\lambda^* b}] = \langle\beta| e^{\lambda b^+} e^{-\lambda^* b} |\beta\rangle = e^{\lambda\beta^* - \lambda^*\beta} \quad (10.16)$$

On a utilisé $b|\beta\rangle = \beta|b\rangle$ et $\langle\beta|b^+ = \beta^*\langle\beta|$

Superposition linéaire de 2 états cohérents

$$|\psi\rangle = c_1 |\beta_1\rangle + c_2 |\beta_2\rangle \quad (10.17)$$

$$\sigma = |\psi\rangle\langle\psi| = |c_1|^2 |\beta_1\rangle\langle\beta_1| + |c_2|^2 |\beta_2\rangle\langle\beta_2| + c_1 c_2^* |\beta_1\rangle\langle\beta_2| + c_2 c_1^* |\beta_2\rangle\langle\beta_1| \quad (10.18)$$

- Les 2 premiers termes donnent des contributions analogues à (10.16) avec β remplacé par β_1 ou β_2 , $|c_1|^2 e^{\lambda \beta_1^* - \lambda^* \beta_1}$ et $|c_2|^2 e^{\lambda \beta_2^* - \lambda^* \beta_2}$. Le 3ème terme donne

$$\begin{aligned} c_1 c_2^* \text{Tr} [|\beta_1\rangle\langle\beta_2| e^{\lambda b^+} e^{-\lambda^* b}] &= c_1 c_2^* \langle\beta_2| e^{\lambda b^+} e^{-\lambda^* b} |\beta_1\rangle \\ &= c_1 c_2^* e^{(\lambda \beta_2^* - \lambda^* \beta_1)} \langle\beta_2|\beta_1\rangle \end{aligned} \quad (10.19)$$

Le dernier terme est obtenu à partir de (10.19) en permutant 1 et 2. Finalement, la fonction C_N associée à (10.17) s'écrit

$$\begin{aligned} C_N(\lambda, \lambda^*) &= |c_1|^2 e^{\lambda \beta_1^* - \lambda^* \beta_1} + |c_2|^2 e^{\lambda \beta_2^* - \lambda^* \beta_2} \\ &\quad + c_1 c_2^* \langle\beta_2|\beta_1\rangle e^{\lambda \beta_2^* - \lambda^* \beta_1} + c_2 c_1^* \langle\beta_1|\beta_2\rangle e^{\lambda \beta_1^* - \lambda^* \beta_2} \end{aligned} \quad (10.20)$$

- Calculons enfin $\langle\beta_2|\beta_1\rangle$. A partir du développement (10.2) écrit pour β_1 et β_2 , on obtient

$$\begin{aligned} \langle\beta_2|\beta_1\rangle &= e^{-\beta_1 \beta_1^* / 2} e^{-\beta_2 \beta_2^* / 2} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(\beta_1 \beta_2^*)^N}{N!} = \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\beta_1 \beta_1^* + \beta_2 \beta_2^* + 2\beta_1 \beta_2^*] \right\} \\ &= e^{-\frac{1}{2} |\beta_1 - \beta_2|^2} e^{i\varphi_{12}} = \langle\beta_1|\beta_2\rangle \end{aligned} \quad (10.21)$$

$$\text{ou} \quad \varphi_{12} = \frac{\beta_1 \beta_2^* - \beta_2 \beta_1^*}{2i} = \text{Im} \beta_1 \beta_2^* \quad (10.22)$$

Superposition linéaire de 2 états cohérents avec réduction de la cohérence entre les 2 états cohérents

- L'opérateur densité σ est analogue à (10.18), mais les 2 derniers termes sont multipliés par des facteurs η et η^* avec $|\eta| < 1$

$$\sigma = |c_1|^2 |\beta_1\rangle\langle\beta_1| + |c_2|^2 |\beta_2\rangle\langle\beta_2| + \eta c_1 c_2^* |\beta_1\rangle\langle\beta_2| + \eta^* c_2 c_1^* |\beta_2\rangle\langle\beta_1| \quad (10.23)$$

A la limite $\eta \rightarrow 0$, on obtient un mélange statistique de $|\beta_1\rangle$ et $|\beta_2\rangle$ avec des poids $|c_1|^2$ et $|c_2|^2$

- Le calcul de la fonction C_N associée à (10.23) est très analogue au précédent. Il suffit de multiplier les 2 derniers termes par η et η^*

$$\begin{aligned} C_N(\lambda, \lambda^*) &= |c_1|^2 e^{\lambda \beta_1^* - \lambda^* \beta_1} + |c_2|^2 e^{\lambda \beta_2^* - \lambda^* \beta_2} \\ &\quad + \eta c_1 c_2^* \langle\beta_2|\beta_1\rangle e^{\lambda \beta_2^* - \lambda^* \beta_1} + \eta^* c_2 c_1^* \langle\beta_1|\beta_2\rangle e^{\lambda \beta_1^* - \lambda^* \beta_2} \end{aligned} \quad (10.24)$$

c) Equation d'évolution de $C_N(\lambda, \lambda^*)$

Terme $-i\omega_0 [b^+ b, \sigma] = -i\omega_0 [b^+ b \sigma - \sigma b^+ b]$ de l'équation pilote (9.51)

En utilisant (10.14) et (10.15), on obtient pour la fonction C_N associée à ce terme

$$-i\omega_0 \left[\left(\frac{\partial}{\partial \lambda} - \lambda^* \right) \left(-\frac{\partial}{\partial \lambda^*} \right) - \left(\lambda - \frac{\partial}{\partial \lambda^*} \right) \frac{\partial}{\partial \lambda} \right] C_N = -i\omega_0 \left[\lambda^* \frac{\partial}{\partial \lambda^*} - \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \right] C_N \quad (10.25)$$

Terme $-\frac{\gamma}{2} [b^+ b \sigma + \sigma b^+ b]$ de (9.51). Un calcul analogue donne

$$-\frac{\gamma}{2} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \lambda} - \lambda^* \right) \left(-\frac{\partial}{\partial \lambda^*} \right) + \left(\lambda - \frac{\partial}{\partial \lambda^*} \right) \frac{\partial}{\partial \lambda} \right] C_N = \gamma \left[\frac{\partial^2}{\partial \lambda \partial \lambda^*} - \frac{1}{2} \left(\lambda^* \frac{\partial}{\partial \lambda^*} + \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \right) \right] C_N \quad (10.26)$$

Terme $\gamma b \sigma b^\dagger$ de (9.51). Un calcul analogue donne

X-6

$$\gamma \left(-\frac{\partial}{\partial \lambda^*}\right) \left(\frac{\partial}{\partial \lambda}\right) C_N = -\gamma \frac{\partial^2}{\partial \lambda \partial \lambda^*} C_N \quad (10.27)$$

Finalement, d'après (9.51), $\partial C_N / \partial t$ est égal à la somme des 3 termes (10.25), (10.26) et (10.27). L'équation d'évolution de C_N est donc

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \left(\frac{\gamma}{2} - i\omega_0\right) \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} + \left(\frac{\gamma}{2} + i\omega_0\right) \lambda^* \frac{\partial}{\partial \lambda^*} \right] C_N(\lambda, \lambda^*, t) = 0 \quad (10.28)$$

C'est une équation aux dérivées partielles linéaire, homogène, du 1^{er} ordre, rigoureusement équivalente à (9.51). (voir aussi (4))

④ Solution de l'équation d'évolution de C_N

a) Forme générale de la solution

Nous utilisons la méthode des caractéristiques (voir cours VI)

Courbes caractéristiques

Solutions des équations différentielles

$$\frac{dt}{1} = \frac{d\lambda}{\left(\frac{\gamma}{2} - i\omega_0\right)\lambda} = \frac{d\lambda^*}{\left(\frac{\gamma}{2} + i\omega_0\right)\lambda^*} \quad (10.29)$$

$$\begin{cases} \frac{d\lambda}{dt} = \left(\frac{\gamma}{2} - i\omega_0\right)\lambda \\ \frac{d\lambda^*}{dt} = \left(\frac{\gamma}{2} + i\omega_0\right)\lambda^* \end{cases} \quad (10.30)$$

Solution de (10.30) $\begin{cases} \lambda = \lambda_0 e^{\left(\frac{\gamma}{2} - i\omega_0\right)t} \\ \lambda^* = \lambda_0^* e^{\left(\frac{\gamma}{2} + i\omega_0\right)t} \end{cases} \quad (10.31)$

Inversion de (10.31) : donne les coordonnées λ_0 et λ_0^* de l'intersection avec le plan $t=0$ de la caractéristique passant par le point λ, λ^* en t

$$\begin{cases} \lambda_0 = \lambda e^{-\left(\frac{\gamma}{2} - i\omega_0\right)t} \\ \lambda_0^* = \lambda^* e^{-\left(\frac{\gamma}{2} + i\omega_0\right)t} \end{cases} \quad (10.32)$$

Solution de (10.28) correspondant à $C_N = C_0$ pour $t=0$

L'équation (10.28) exprime que C_N ne varie pas le long d'une courbe caractéristique. On a donc

$$C_N(\lambda, \lambda^*, t) = C_0(\lambda_0, \lambda_0^*) \quad (10.33)$$

où les points $t=0, \lambda_0, \lambda_0^*$ et t, λ, λ^* sont sur la même courbe caractéristique et satisfont donc à (10.32). Par suite,

$$C_N(\lambda, \lambda^*, t) = C_0\left(\lambda e^{-\left(\frac{\gamma}{2} - i\omega_0\right)t}, \lambda^* e^{-\left(\frac{\gamma}{2} + i\omega_0\right)t}\right) \quad (10.34)$$

b) Solution correspondant à un état initial cohérent $|\beta\rangle$

- Dans ce cas, d'après (10.16), $C_0(\lambda, \lambda^*) = e^{\lambda\beta^* - \lambda^*\beta}$. En reportant cette expression de C_0 dans (10.34), on obtient

$$C_N(\lambda, \lambda^*, t) = \exp\left\{\lambda e^{-\left(\frac{\gamma}{2} - i\omega_0\right)t}\beta^* - \lambda^* e^{-\left(\frac{\gamma}{2} + i\omega_0\right)t}\beta\right\} \quad (10.35)$$

qui peut être réécrit

$$C_N(\lambda, \lambda^*, t) = \exp\left\{\lambda\beta^*(t) - \lambda^*\beta(t)\right\} \quad (10.36)$$

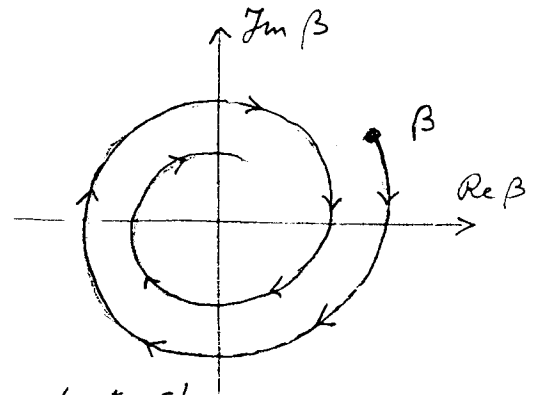
avec

$$\beta(t) = \beta e^{-\left(\frac{\gamma}{2} + i\omega_0\right)t}$$

X-7
(10.37)

La solution de (10.28) à l'instant t a donc toujours la forme (10.16) avec β remplacé par (10.37)

- On en déduit que, même en présence de dissipation, l'oscillateur reste dans un état cohérent. Mais le point représentatif de cet état cohérent dans le plan complexe de β décrit, à la fréquence ω , une spirale dont le rayon est amorti avec un taux $\gamma/2$



Comme $\omega_0 \gg \gamma$, il y a plusieurs tours pendant γ^{-1} . Un tel résultat confirme les résultats obtenus plus haut pour l'évolution de certaines valeurs moyennes (voir (10.10) et (10.11)).

c) Cas où l'état initial est une superposition linéaire de 2 états cohérents (voir aussi (4), (5))

- Dans ce cas, il faut remplacer $C_0(\lambda, \lambda^*)$ par l'expression (10.20). D'après (10.34), il faut alors remplacer dans (10.20), λ et λ^* par $\lambda e^{-\left(\frac{\gamma}{2} - i\omega_0\right)t}$ et $\lambda^* e^{-\left(\frac{\gamma}{2} + i\omega_0\right)t}$

Comme dans le paragraphe 4b ci-dessus, une telle opération revient à remplacer, dans les exponentielles de (10.20), β_1 et β_2

par

$$\beta_1(t) = \beta_1 e^{-\left(\frac{\gamma}{2} + i\omega_0\right)t} \quad \beta_2(t) = \beta_2 e^{-\left(\frac{\gamma}{2} + i\omega_0\right)t} \quad (10.38)$$

On obtient ainsi pour $C_N(\lambda, \lambda^*, t)$

$$C_N(\lambda, \lambda^*, t) = |c_1|^2 e^{\lambda \beta_1^*(t) - \lambda^* \beta_1(t)} + |c_2|^2 e^{\lambda \beta_2^*(t) - \lambda^* \beta_2(t)} + c_1 c_2^* \langle \beta_2 | \beta_1 \rangle e^{\lambda \beta_2^*(t) - \lambda^* \beta_1(t)} + c_2 c_1^* \langle \beta_1 | \beta_2 \rangle e^{\lambda \beta_1^*(t) - \lambda^* \beta_2(t)} \quad (10.39)$$

- On constate alors que, dans les 2 derniers termes de (10.39), ce ne sont $\beta_1(t)$ et $\beta_2(t)$ qui figurent dans les produits scalaires $\langle \beta_2 | \beta_1 \rangle$ et $\langle \beta_1 | \beta_2 \rangle$. Si nous posons

$$\eta = \frac{\langle \beta_2 | \beta_1 \rangle}{\langle \beta_2(t) | \beta_1(t) \rangle} \quad (10.40)$$

on voit alors qu'on peut réécrire (10.39) sous la forme

$$C_N(\lambda, \lambda^*, t) = |c_1|^2 e^{\lambda \beta_1^*(t) - \lambda^* \beta_1(t)} + |c_2|^2 e^{\lambda \beta_2^*(t) - \lambda^* \beta_2(t)} + \eta c_1 c_2^* \langle \beta_2(t) | \beta_1(t) \rangle e^{\lambda \beta_2^*(t) - \lambda^* \beta_1(t)} + \eta^* c_2 c_1^* \langle \beta_1(t) | \beta_2(t) \rangle e^{\lambda \beta_1^*(t) - \lambda^* \beta_2(t)} \quad (10.41)$$

En comparant (10.41) avec (10.24), on voit qu'on peut maintenant décrire l'effet de la dissipation sur une superposition linéaire de 2 états cohérents : l'état à l'instant t est toujours

une superposition linéaire de 2 états cohérents $|\beta_1(t)\rangle$ et $|\beta_2(t)\rangle$ dont les points représentatifs décrivent, dans le plan complexe, des spirales amorties. Mais, en plus, la cohérence entre ces 2 états cohérents est réduite par un facteur $|\eta|$.

- Calculons $|\eta|$. A partir de (10.40) et (10.21), on obtient

$$|\eta| = \frac{e^{-\frac{1}{2}|\beta_1 - \beta_2|^2}}{e^{-\frac{1}{2}|\beta_1 - \beta_2|^2 e^{-\gamma t}}} = \exp\left\{-\frac{1}{2}|\beta_1 - \beta_2|^2(1 - e^{-\gamma t})\right\} \quad (10.42)$$

Pour $\gamma t \ll 1$, $1 - e^{-\gamma t} \sim \gamma t$, et on obtient

$$|\eta| \simeq \exp\left\{-\frac{\gamma}{2}|\beta_1 - \beta_2|^2 t\right\} \quad (10.43)$$

La cohérence entre les 2 états cohérents s'amortit donc avec un temps $|\beta_1 - \beta_2|^{-2}$ fois plus grand que chaque état cohérent pris séparément.

Là encore, on retrouve que la cohérence entre 2 états macroscopiquement différents s'amortit avec un temps plus grand par un facteur proportionnel au carré de la "distance" entre ces 2 états.

- Dans l'exemple concret du § 1 ci-dessus, $\beta_1 = -\beta_2 = \beta$. Le facteur d'augmentation $|\beta_1 - \beta_2|^2 = 4|\beta|^2$ est alors propor- à $|\beta|^2$, c'est à dire au nombre moyen de photons dans l'état initial du mode.

5) Interprétation physique (voir aussi (6)).

- Dans ce dernier paragraphe, l'oscillateur sous-amorti S sera une charge élastiquement liée et le réservoir R sera l'ensemble des modes du rayonnement dans l'état initial vide. Comme état initial de l'oscillateur S , nous prendrons une superposition linéaire de l'état $|N=0\rangle$, qui est un état cohérent $|\beta=0\rangle$ et d'un état cohérent $|\beta\rangle$

$$|\Psi_S(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\beta=0\rangle + |\beta\rangle] \quad (10.44)$$

D'après (10.2), l'état $|\beta\rangle$ est une superposition linéaire d'états $|N\rangle$ avec des valeurs de N distribuées sur un intervalle de largeur $|\beta|$ autour de $\langle N \rangle = |\beta|^2$. Nous supposons ici $|\beta| = 1$. Dans l'état initial, l'état du réservoir est le vide de photons $|\Psi_R\rangle = |0\rangle$, et l'état du système global $S+R$ est

$$|\Psi(t=0)\rangle = |\Psi_S\rangle \otimes |\Psi_R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\beta=0\rangle \otimes |0\rangle + |\beta\rangle \otimes |0\rangle] \quad (10.45)$$

- Comment vont évoluer les 2 composantes de l'état initial (10.45)?

La première, $|\beta=0\rangle \otimes |0\rangle$, va rester inchangée. En effet, l'oscillateur S est dans son état fondamental et ne peut émettre spontanément aucun photon.

Par contre, le 2^{ème} terme de (10.45) va évoluer, car l'oscillateur, dans l'un des états $|N\rangle$ figurant dans le développement (10.2), de $|\beta\rangle$ va se désexciter par émission spontanée d'un photon vers l'état $|N-1\rangle$ avec un taux $N\gamma$ (voir (10.8)).

Au bout d'un temps de l'ordre de $(\langle N \rangle \gamma)^{-1} = 1/|\beta|^2 \gamma$, va donc apparaître ^(état à 1) un photon $|\vec{k}\vec{E}\rangle$ dans l'état qui évolue à partir du 2^{ème} terme de (10.45). Comme le 1^{er} terme de (10.45) reste toujours dans l'état vide du rayonnement, les 2 composantes de (10.45) vont très vite devenir orthogonales en ce qui concerne le rayonnement. La trace sur le rayonnement, qu'il faut prendre si l'on veut suivre l'évolution de la cohérence entre les 2 états cohérents, va alors donner 0.

— Dès qu'un photon est émis par l'oscillateur, la cohérence entre les 2 états cohérents est donc détruite. Comme le taux d'émission d'un photon à partir de $|\beta\rangle$ est de l'ordre de $|\beta|^2 \gamma$, on comprend donc pourquoi la cohérence entre les 2 états cohérents est détruite avec un temps $|\beta|^2 \gamma$, $|\beta|^2$ fois plus grand que γ .

Par contre, pour l'état cohérent $|\beta\rangle$ tout seul, les cohérences sont détruites beaucoup plus lentement, avec un temps de l'ordre de γ (voir (10.10)). En effet, si le système $S+R$ est à $t=0$ dans une superposition linéaire de $|N\rangle \otimes |0\rangle$ et $|N-1\rangle \otimes |0\rangle$, il peut se retrouver ensuite, après émission d'un photon $\vec{k}\vec{E}$ dans une superposition de $|N-1\rangle \otimes |\vec{k}\vec{E}\rangle$ et $|N-2\rangle \otimes |\vec{k}\vec{E}\rangle$. La cohérence entre les 2 états $|N\rangle$ et $|N-1\rangle$ de S n'est donc pas détruite après l'émission spontanée d'un photon. Elle est en grande partie transformée en une cohérence entre $|N-1\rangle$ et $|N-2\rangle$ (voir (10.9)).

Références

- (1) B. Yurke, D. Stoler, Phys. Rev. Lett. 57, 13 (1986)
- (2) C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, "Photons et Atomes. Introduction à l'Électrodynamique Quantique", Exercice 6 du Complément D_{III} (Interéditions et Éditions du CNRS, Paris 1987)
- (3) Mêmes auteurs et mêmes éditeurs que (2), "Processus d'Interaction entre Photons et Atomes, Complément B_{IV}
- (4) C. Savage, D. Walls, Phys. Rev. A32, 2316 (1985)
- (5) D. Walls, G. Milburn, Phys. Rev. A31, 2403 (1985)
- (6) A. Caldeira, A. Leggett, Phys. Rev. A31, 1059 (1985)