La distribution P de Glauber à l'équilibre thermique

M2 de physique quantique 2005-2006

Examen de mécanique quantique I

Y. Castin et A. Sinatra

Au dix-neuvième siècle, la physique statistique des champs classiques était confrontée à la catastrophe du rayonnement du corps noir, l'énergie moyenne du champ électromagnétique classique à l'équilibre thermique dans une enceinte étant infinie selon la théorie, en désaccord avec l'expérience. Dans la théorie quantique du rayonnement, cette catastrophe disparaît mais l'on renonce habituellement à une description en termes de champ classique.

Le but de ce sujet est de tenter de réintroduire, dans le cadre quantique, une distribution de probabilité d'un champ classique reproduisant rigoureusement les prédictions quantiques, comme l'ont fait Glauber et Sudarshan en 1963.

Tous les champs considérés ici sont bosoniques. On rappelle que la distribution de probabilité sur la droite réelle, $f(x) = e^{-x^2/2\sigma^2}/\sqrt{2\pi\sigma^2}$, correctement normalisée, est de variance σ^2. Il est conseillé de traiter les questions et les parties dans leur ordre d'apparition.

1 Cas d'un champ sans interaction

1.1 Rappel sur la thermodynamique d'un champ classique

On considère un champ électromagnétique classique dans une enceinte cubique vide de matière, avec des conditions aux limites périodiques pour simplifier, si bien que les modes propres du champ sont des ondes planes. Le champ est à l'équilibre thermique à la température T avec les parois de l'enceinte. On rappelle que le champ électrique transverse et le champ magnétique s'expriment en fonction des variables normales du champ $\alpha_{\mathbf{k},\mathbf{e}}$, qui sont des nombres complexes de valeurs quelconques fonctions du vecteur d'onde $\mathbf{k}$ et de la polarisation $\mathbf{e}$ des modes propres du champ. L'énergie d'une configuration du champ vaut

$$E = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{e}\perp\mathbf{k}} \epsilon_k \, \alpha^*_{\mathbf{k},\mathbf{e}} \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{e}}, \tag{1}$$

où $\epsilon_k = \hbar c k$ est l'énergie d'un mode du champ. $\hbar$ a été introduit ici (ce qui revient à renormaliser les $\alpha_{\mathbf{k},\mathbf{e}}$) afin de faciliter la comparaison au cas quantique.

a) Montrer que les variables normales sont statistiquement indépendantes.

b) On se ramène donc à l'étude d'un mode particulier, dont on note la variable normale α et l'énergie ϵ. Donner la distribution de probabilité du nombre complexe α, à un facteur de normalisation près, et calculer l'énergie moyenne du champ dans le mode considéré.

c) Retrouver la catastrophe du rayonnement du corps noir.

1.2 Rappel sur la thermodynamique d'un champ quantique

Dans le cas quantique, on peut raisonner dans la base de Fock, chaque vecteur de base $|\{n_{\mathbf{k},\mathbf{e}}\}\rangle$ correpondant à des nombres de photons bien définis $n_{\mathbf{k},\mathbf{e}}$ dans les modes du champ. Comme précédemment, le champ est supposé être à l'équilibre thermique à la température T.

a) Rappeler l'expression de l'énergie de l'état de Fock $|\{n_{\mathbf{k},\mathbf{e}}\}\rangle$. On supposera que le vide a une énergie nulle.

b) Montrer que les nombres $n_{\mathbf{k},\mathbf{e}}$ peuvent être considérés comme des variables aléatoires statistiquement indépendantes.

c) On se ramène à l'étude d'un mode particulier, dont on note le nombre de photons n et l'énergie ϵ. Donner la distribution de probabilité de n, correctement normalisée, et calculer l'énergie moyenne du champ dans le mode considéré.

d) Comparer les énergies moyennes du champ dans le mode considéré dans le cas classique et le cas quantique. Y a-t-il une catastrophe dans le cas quantique ?

1.3 Une formulation 'classique' du cas quantique

On se place dans le cas quantique, mais l'on aimerait en avoir une représentation en termes d'un champ classique aléatoire ayant une certaine distribution de probabilité. On considère un mode fixé du champ, et l'on omet les indices $\mathbf{k}, \mathbf{e}$ par simplicité.

a) Soit a l'opérateur d'annihilation d'un photon dans le mode. On définit les états quasi-classiques du champ comme les états dans lesquels l'indétermination quantique de a est minimale. Montrer que ces états sont des états propres de a, avec une valeur propre α complexe quelconque.

b) Montrer que l'état propre de a pour la valeur propre α, correctement normalisé, peut s'écrire

$$|\alpha\rangle = e^{-\alpha^*\alpha/2} e^{\alpha a^\dagger}|0\rangle \tag{2}$$

où α^* est le complexe conjugué de α, $a^\dagger$ crée un photon dans le mode et $|0\rangle$ est le vide du champ.

On rappelle, pour la suite, la relation de fermeture satisfaite par la famille non orthogonale des $|\alpha\rangle$:

$$\int \frac{d^2\alpha}{\pi} |\alpha\rangle\langle\alpha| = \mathrm{Id}, \tag{3}$$

où $d^2\alpha \equiv dX\, dY$, avec X et Y les parties réelle et imaginaire de α :

$$\alpha = X + iY. \tag{4}$$

c) On cherche une distribution de probabilité de α, $P(\alpha) \geq 0$ telle que

$$\rho = \int \frac{d^2\alpha}{\pi} P(\alpha)|\alpha\rangle\langle\alpha| \tag{5}$$

où ρ est l'opérateur densité du champ dans le mode considéré. On montre d'abord que ce n'est pas possible pour un opérateur ρ quelconque. On considère pour cela le cas particulier où le champ dans le mode considéré est dans un état de Fock avec $n > 0$ photons. Vérifier que, si P existe, la valeur moyenne de $\alpha^*\alpha$ doit être égale à n. Montrer ensuite que

$$\mathrm{Var}\ n = \mathrm{Var}_P(\alpha^*\alpha) + n \tag{6}$$

où Var n est la variance du nombre de photons dans l'état quantique et $\mathrm{Var}_P(\alpha^*\alpha)$ est la variance de $\alpha^*\alpha$ suivant la loi de probabilité P. Conclure.

d) On s'intéresse désormais au cas particulier où le champ est à l'équilibre thermique à la température T, et l'on pose $\beta = 1/k_B T$. Montrer que l'opérateur densité du champ dans le mode considéré est donné, à un facteur de normalisation près, par la solution à l''instant' $\tau = \beta$ de l'équation

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\rho(\tau) = -\frac{\epsilon}{2}\{a^\dagger a, \rho(\tau)\} \tag{7}$$

avec la condition initiale $\rho(0) = \mathrm{Id}$. La notation $\{,\}$ représente l'anticommutateur de deux opérateurs.

e) On suppose l'existence à tout τ de $P(\alpha, \tau) \geq 0$ telle que

$$\rho(\tau) = \int \frac{d^2\alpha}{\pi} P(\alpha, \tau)|\alpha\rangle\langle\alpha|. \tag{8}$$

Montrer que cette relation est vraie à $\tau = 0$, pour une valeur de la fonction $P(\alpha, 0)$ que l'on précisera. On ne s'inquiétera pas du fait que la fonction obtenue ne soit pas normalisable. Dans la suite, on va obtenir une équation du mouvement pour $P(\alpha, \tau)$.

f) On introduit les dérivations par rapport à α et α^* :

$$\partial_\alpha \equiv \frac{1}{2}\left[\partial_X - i\partial_Y\right] \tag{9}$$

$$\partial_{\alpha^*} \equiv \frac{1}{2}\left[\partial_X + i\partial_Y\right]. \tag{10}$$

Vérifier que

$$\begin{array}{ll} \partial_\alpha \alpha = 1 & \partial_\alpha \alpha^* = 0, \\ \partial_{\alpha^*}\alpha = 0 & \partial_{\alpha^*}\alpha^* = 1. \end{array} \tag{11}$$

En déduire que, pour ces opérateurs de dérivation, on peut considérer formellement les variables α et α^* comme indépendantes.

g) Utiliser cette propriété pour vérifier les identités

$$\begin{aligned} a^\dagger a|\alpha\rangle\langle\alpha| &= \alpha(\alpha^* + \partial_\alpha)|\alpha\rangle\langle\alpha| \qquad (12)\\ |\alpha\rangle\langle\alpha|a^\dagger a &= \alpha^*(\alpha + \partial_{\alpha^*})|\alpha\rangle\langle\alpha|. \qquad (13) \end{aligned}$$

h) Injecter la décomposition Eq.(8) dans l'équation du mouvement Eq.(7). En utilisant les relations précédentes, puis en intégrant par parties en admettant que $P(\alpha, \tau > 0)$ est à décroissance rapide lorsque $|\alpha| \to +\infty$, obtenir l'équation du mouvement

$$\partial_\tau P(\alpha,\tau) = -\epsilon\,\alpha^*\alpha P + \frac{\epsilon}{2}\left[\partial_\alpha(\alpha P) + \partial_{\alpha^*}(\alpha^* P)\right]. \qquad (14)$$

i) Interpréter physiquement cette équation du mouvement. On passera en variables X, Y à l'aide des Eqs.(9,10) et l'on fera le lien avec le mouvement brownien classique et l'équation de Fokker-Planck. En particulier, dire ce qui doit se passer à la limite $\tau \to +\infty$.

j) Dans un premier temps, on néglige les termes en ∂_α et ∂_{α^*} au second membre de l'équation Eq.(14). Montrer alors qu'à l''instant' $\tau = \beta$, P reproduit la distribution de probabilité du champ classique obtenue à la question 1.1b.

k) On intègre maintenant exactement l'équation Eq.(14) avec l'ansatz gaussien

$$P(\alpha,\tau) = C(\tau)\, e^{-\lambda(\tau)\,\alpha^*\alpha}. \qquad (15)$$

Préciser les valeurs de C et de λ à $\tau = 0$. Donner les équations du mouvement satisfaites par les fonctions $\lambda(\tau)$ et $C(\tau)$, puis les intégrer. On ne cherchera pas à normaliser P.

l) Conclure : peut-on représenter l'état thermique du champ quantique par une distribution de probabilité d'un champ classique ?

2 Cas d'un champ interagissant avec lui-même

On veut savoir si les conclusions de la section précédente restent vraies dans le cas d'un champ avec interaction. Comme précédemment, on se limite pour simplifier au cas d'un seul mode du champ et l'on considère le Hamiltonien quadratique général :

$$H = A\,a^\dagger a + \frac{B}{2}\left[a^2 + a^{\dagger 2}\right], \qquad (16)$$

où $A > 0$ et $B > 0$.

2.1 Étude du Hamiltonien et de l'équilibre thermique quantique

a) Citer des situations physiques conduisant à ce type de Hamiltonien.

b) Dans cette question et dans cette question seule, on se place en point de vue de Heisenberg. Montrer que les équations du mouvement de a et de $a^\dagger$ sont de la forme

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{L} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} \tag{17}$$

où $\mathcal{L}$ est une matrice deux par deux que l'on précisera.

c) Calculer les valeurs propres de $\mathcal{L}$. Donner une condition sur A et sur B pour que le système soit stable dynamiquement. On suppose cette condition satisfaite dans la suite. On appelle alors ϵ la valeur propre positive de $\mathcal{L}$ et (U, V) le vecteur propre correspondant.

d) À quelle condition la matrice $\eta\mathcal{L}$ est-elle strictement positive ? Comme vu en cours, $\eta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. On suppose cette condition de stricte positivité satisfaite dans la suite. Comment le vecteur (U, V) doit-il alors être normalisé ? Par la suite, on aura besoin des relations suivantes :

$$A = \epsilon(U^2 + V^2) \tag{18}$$
$$B = -2\epsilon UV. \tag{19}$$

e) En utilisant les résultats du cours, donner la forme réduite (ou canonique) du Hamiltonien, et préciser l'énergie du fondamental en fonction de ϵ et V. On utilisera comme en cours la notation $b^\dagger$ pour désigner l'opérateur créant une excitation élémentaire du système. Que vaut l'énergie moyenne du système à la température T ? Donner le résultat en fonction de $\beta = 1/k_B T$, ϵ et V.

f) En utilisant la décomposition de a et $a^\dagger$ en termes de b et $b^\dagger$ vue en cours, calculer les valeurs moyennes $\langle a^\dagger a\rangle$ et $\langle a^2\rangle$ pour le système à la température T. On donnera les résultats en fonction de U, V et $\bar{n} \equiv \langle b^\dagger b\rangle$.

2.2 Recherche de la distribution de probabilité $P(\alpha)$

On se place encore et toujours dans le cas où le système est à l'équilibre thermique à la température T, avec $\beta = 1/k_B T$. On reprend la démarche du §1.3 pour obtenir une équation du mouvement sur $P(\alpha, \tau)$.

a) Montrer que l'opérateur densité du champ dans le mode considéré est donné, à un facteur de normalisation près, par la solution à l'instant $\tau = \beta$ de l'équation

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\rho(\tau) = -\frac{1}{2}\{A\, a^\dagger a + \frac{B}{2}(a^2 + a^{\dagger 2}), \rho(\tau)\} \tag{20}$$

avec la condition initiale $\rho(0) = \mathrm{Id}$.

b) Vérifier les identités suivantes :

$$a^2|\alpha\rangle\langle\alpha| = \alpha^2|\alpha\rangle\langle\alpha| \tag{21}$$
$$a^{\dagger 2}|\alpha\rangle\langle\alpha| = (\alpha^* + \partial_\alpha)^2|\alpha\rangle\langle\alpha|. \tag{22}$$

c) On suppose qu'il existe une fonction $P(\alpha, \tau) \geq 0$ telle que

$$\rho(\tau) = \int \frac{d^2\alpha}{\pi} P(\alpha, \tau) |\alpha\rangle\langle\alpha|. \tag{23}$$

À partir des deux questions précédentes, et en pensant toujours à l'intégration par parties, montrer que $P(\alpha, \tau)$ doit satisfaire l'équation :

$$\begin{aligned} \partial_\tau P(\alpha, \tau) &= -\left[A\alpha^*\alpha + \frac{B}{2}(\alpha^2 + \alpha^{*2})\right] P \\ &+ \frac{1}{2}\left\{\partial_\alpha\left[(A\alpha + B\alpha^*)P\right] + \text{c.c.}\right\} - \frac{B}{4}\left[\partial_\alpha^2 P + \text{c.c.}\right] \end{aligned} \tag{24}$$

avec une condition initiale (à $\tau = 0$) que l'on rappellera.

d) Récrire l'équation précédente en passant aux variables X et Y, c'est-à-dire en remplaçant ∂_α et ∂_α^* par leurs expressions Eqs.(9,10). Y a-t-il un terme couplant les 'directions' X et Y ? Peut-on utiliser pour $P(\alpha, \tau)$ un ansatz factorisé en le produit d'une fonction de X et d'une fonction de Y ?

e) On considère d'abord la direction Y. Par analogie avec l'équation de Fokker-Planck du mouvement brownien, et sans chercher à faire un calcul explicite, expliquer pourquoi aucune pathologie n'est attendue, même dans la limite $\tau \to +\infty$.

f) On considère ensuite la direction X. En comparant à l'équation de Fokker-Planck (ou même à l'équation de la chaleur), mettre en évidence dans l'équation du mouvement une propriété inquiétante, susceptible de faire apparaître une pathologie dans $P(\alpha, \tau)$ au bout d'un 'temps' τ fini.

g) Pour en avoir le cœur net, on utilise l'ansatz gaussien

$$P(\alpha, \tau) = C(\tau)\, e^{-\mu(\tau)X^2 - \nu(\tau)Y^2}. \tag{25}$$

Obtenir une équation non linéaire du premier ordre en τ sur $\mu(\tau)$, sans chercher à l'intégrer explicitement. On n'aura pas besoin des équations sur C et ν.

h) On donne l'intégrale suivante :

$$\int_0^{+\infty} \frac{\mathrm{d}\mu}{(A+B)(\mu+1) + B\mu^2/2} = \frac{1}{2\epsilon} \ln(1 + V^{-2}). \tag{26}$$

En déduire la température critique $T_{\min}$ au-dessus de laquelle la distribution de probabilité $P(\alpha)$ est bien définie. On exprimera $k_B T_{\min}$ en fonction de ϵ et V.

i) On se place dans cette question à $T > T_{\min}$. En utilisant directement l'équation Eq.(23), établir les identités :

$$\langle X^2\rangle_P = \frac{1}{2}\left[\langle a^\dagger a\rangle + \langle a^2\rangle\right] \tag{27}$$

$$\langle Y^2\rangle_P = \frac{1}{2}\left[\langle a^\dagger a\rangle - \langle a^2\rangle\right], \tag{28}$$

où $\langle \ldots \rangle_P$ représente la moyenne selon la distribution $P(\alpha)$ et $\langle \ldots \rangle$ est la moyenne dans l'état quantique. À partir des résultats du §2.1, en déduire les valeurs de $\mu(\beta)$ et $\nu(\beta)$ sans intégrer les équations différentielles sur μ et ν.

j) Bien que le Hamiltonien de Bogoliubov pour un gaz condensé de Bose soit multimode, on admet que la valeur de $T_{\min}$ obtenue précédemment assurant la positivité de P reste correcte. On rappelle les comportements de ϵ et de V^2 dans la théorie de Bogoliubov, dans la limite des faibles vecteurs d'onde $k \to 0$:

$$\epsilon \sim (2\mu E_k)^{1/2} \tag{29}$$

$$V^2 \sim \frac{1}{4}\left(\frac{2\mu}{E_k}\right)^{1/2} \tag{30}$$

où μ est le potentiel chimique du gaz et $E_k = \hbar^2 k^2/2m$. Calculer la valeur de $T_{\min}$ pour les modes de basse énergie. Dire ensuite si $T_{\min}$ a une limite finie lorsque l'on considère au contraire les grands vecteurs d'onde $k \to +\infty$.

2.3 Approximations classique et semi-classique

On revient à l'équation du mouvement Eq.(24), non pas pour l'intégrer exactement mais pour effectuer des approximations physiquement éclairantes.

a) On effectue d'abord ce que l'on appelle l'approximation de champ classique, consistant à négliger dans Eq.(24) les termes en $\partial_\alpha, \partial_{\alpha^*}, \partial_\alpha^2, \partial_{\alpha^*}^2$. Résoudre alors l'équation sur P ainsi approximée, pour obtenir P_{class} à $\tau = \beta$.

b) Calculer l'énergie moyenne du champ dans le mode considéré pour la distribution classique P_{class}. Lorsqu'on prend en compte l'ensemble des modes du champ, retombe-t-on sur une catastrophe de type corps noir ?

c) On effectue ensuite ce que l'on appelle l'approximation semi-classique, consistant à négliger dans Eq.(24) seulement les termes de dérivée seconde $\partial_\alpha^2, \partial_{\alpha^*}^2$. Résoudre l'équation sur P ainsi approximée, pour obtenir P_{semic} à $\tau = \beta$.

d) Calculer l'énergie moyenne $\langle H \rangle_{\text{semic}}$ du champ dans le mode considéré pour la distribution semi-classique P_{semic}. Y a-t-il encore risque de catastrophe de type corps noir ?

e) On se place à une température assez élevée pour que $k_B T \gg A + B$. Effectuer un développement à haute température de $\langle H \rangle_{\text{semic}} - \langle H \rangle$, où $\langle H \rangle$ est la moyenne quantique exacte, et montrer que cette différence tend vers zéro lorsque $T \to +\infty$.

3 Cas d'un champ en interaction multimode

Pour terminer, on considère le cas d'un Hamiltonien quadratique multimode général, dans lequel les N différents modes interagissent entre eux :

$$H = \frac{1}{2}(\vec{a}^{\,\dagger}, \vec{a}) \cdot \mathcal{H} \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{a}^{\,\dagger} \end{pmatrix}, \tag{31}$$

où l'on a rangé les N opérateurs d'annihilation a_α, $\alpha = 1, \ldots, N$, en un vecteur $\vec{a}$ et où l'on a fait de même avec les opérateurs de création. $\mathcal{H}$ est une matrice N par N.

a) Le système est à l'équilibre thermique. Quelle condition est-il souhaitable que la matrice $\mathcal{H}$ satisfasse ? Cette condition sera supposée vérifiée.

b) On suppose pour simplifier que la matrice $\mathcal{H}$ est réelle. En déduire que toutes les valeurs moyennes $\langle a_\alpha^\dagger a_\beta \rangle, \langle a_\alpha a_\beta \rangle, \langle a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger \rangle$ sont réelles, et que $\langle a_\alpha a_\beta \rangle = \langle a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger \rangle$, $\langle a_\alpha^\dagger a_\beta \rangle = \langle a_\beta^\dagger a_\alpha \rangle$.

c) On introduit la fonction dite caractéristique :

$$\chi(\vec{\lambda}) = \langle e^{\vec{\lambda}\cdot\vec{a}^{\,\dagger}} e^{-\vec{\lambda}^*\cdot\vec{a}} \rangle \tag{32}$$

où $\langle \ldots \rangle$ représente la moyenne quantique dans l'opérateur densité thermique, $\vec{\lambda}$ est un vecteur quelconque à N composantes complexes, que l'on décomposera en partie réelle et partie imaginaire, $\vec{\lambda} = \vec{\lambda}_R + i\vec{\lambda}_I$. On suppose que l'opérateur densité thermique peut s'écrire comme un mélange statistique d'états $|\vec{\alpha}\rangle$, avec un poids $P(\vec{\alpha})$, où $\vec{\alpha} = \vec{X} + i\vec{Y}$, ce qui est la généralisation multimode des parties précédentes. Montrer alors que χ et P sont reliées par une transformation célèbre.

d) On pose $c = \vec{\lambda}\cdot\vec{a}^{\,\dagger} - \vec{\lambda}^*\cdot\vec{a}$. À l'aide du théorème de Wick, après avoir justifié son utilisation, montrer que

$$\langle e^c \rangle = e^{\langle c^2 \rangle/2}. \tag{33}$$

On introduira le développement en série de e^c.

e) On rappelle l'identité

$$e^{\vec{\lambda}\cdot\vec{a}^{\,\dagger} - \vec{\lambda}^*\cdot\vec{a}} = e^{\vec{\lambda}\cdot\vec{a}^{\,\dagger}} e^{-\vec{\lambda}^*\cdot\vec{a}} e^{-\vec{\lambda}\cdot\vec{\lambda}^*/2}. \tag{34}$$

En déduire l'expression explicite la fonction caractéristique :

$$\chi(\vec{\lambda}) = e^{-\vec{\lambda}_R\cdot\mathcal{M}\vec{\lambda}_R} e^{-\vec{\lambda}_I\cdot\mathcal{N}\vec{\lambda}_I} \tag{35}$$

où $\mathcal{M}$ et $\mathcal{N}$ sont des matrices symétriques réelles N par N dont on exprimera les éléments de matrice en fonction des $\langle a_\alpha^\dagger a_\beta \rangle$ et $\langle a_\alpha a_\beta \rangle$.

f) Donner une condition sur les matrices $\mathcal{M}$ et $\mathcal{N}$ assurant la positivité de P. Dans le cas à un mode, $N = 1$, retrouve-t-on ainsi la valeur de $T_{\min}$ de la partie précédente ?