Equation pilote décrivant l'évolution d'un petit système S couplé à un grand réservoir R (suite)

H - Discussion des approximations.

① Temps de corrélation τ_c de la force exercée par R sur A.

- Explicitons la fonction de corrélation $g(\tau)$ donnée en X-36 :

$$g(\tau) = Tr\left\{\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\, p(\alpha)\, R\, e^{-iH_R\tau/\hbar} R\, e^{iH_R\tau/\hbar}\right\}$$
$$= \sum_{\alpha,\beta} p(\alpha)\, |\langle\alpha|R|\beta\rangle|^2\, e^{i\omega_{\alpha\beta}\tau} \qquad (XI-1)$$

- On peut écrire (XI-1) sous la forme :

$$g(\tau) = \int d\omega\, \tilde{g}(\omega)\, e^{i\omega\tau} \qquad (XI-2)$$

où
$$\tilde{g}(\omega) = \sum_{\alpha\beta} p(\alpha)\, |\langle\alpha|R|\beta\rangle|^2\, \delta(\omega-\omega_{\alpha\beta}) \qquad (XI-3)$$

$\tilde{g}(\omega)$ est la densité spectrale des fréquences de Bohr de la grandeur physique R du réservoir qui agit sur **A**. $\tilde{g}(\omega)$ est la T.F. de $g(\tau)$

- $g(\tau)$ tend vers 0 si $\tau \gg \tau_c$ où τ_c est l'inverse de la largeur de $g(\omega)$. Plus la densité spectrale $\tilde{g}(\omega)$ est large, plus τ_c est court.

② Ordre de grandeur des coefficients de l'équation pilote.

- D'après (X-38), cet ordre de grandeur est (ω_0 est une fréquence atomique):

$$\Gamma = \frac{1}{\hbar^2} A^2 \int_0^\infty d\tau\, e^{i\omega_0\tau} g(\tau) \lesssim \frac{1}{\hbar^2} A^2 g(0)\, \tau_c \qquad (XI-4)$$

- Or, d'après (XI-2) et (XI-3) :

$$g(0) = \int d\omega\, \tilde{g}(\omega) = \sum_{\alpha\beta} p(\alpha)\, |\langle\alpha|R|\beta\rangle|^2 = \sum_\alpha p(\alpha) \langle\alpha|R^2|\alpha\rangle = \langle R^2\rangle \qquad (XI-5)$$

de sorte que
$$\boxed{\Gamma \simeq \frac{1}{\hbar^2}\langle A^2R^2\rangle \tau_c \simeq \frac{v^2\tau_c}{\hbar^2}} \qquad (XI-6)$$

où v (défini par $v^2 = \langle A^2R^2\rangle = \langle V_{AR}^2\rangle$) caractérise l'intensité du couplage entre A et R.

③ Allure de la variation avec ω de $R_A(\omega+i\varepsilon)$

- L'allure du noyau $R_A(\tau)$ apparaissant dans (IX-3) est, d'après (X-38):

$$R_A(\tau) \simeq \frac{1}{\hbar} A^2\, g(\tau)\, e^{i\omega_0\tau} \qquad (XI-7)$$

- $R_A(\omega+i\varepsilon)$ est la T.F de $R_A(\tau)$. C'est une courbe de largeur $1/\tau_c$. La hauteur de $R_A(\omega+i\varepsilon)$, H, est telle que $H\frac{1}{\tau_c} = \int d\omega R_A(\omega)$ $= R_A(\tau=0) = \frac{1}{\hbar}A^2R^2 = \frac{v^2}{\hbar}$. On en déduit $H = v^2\tau_c/\hbar$

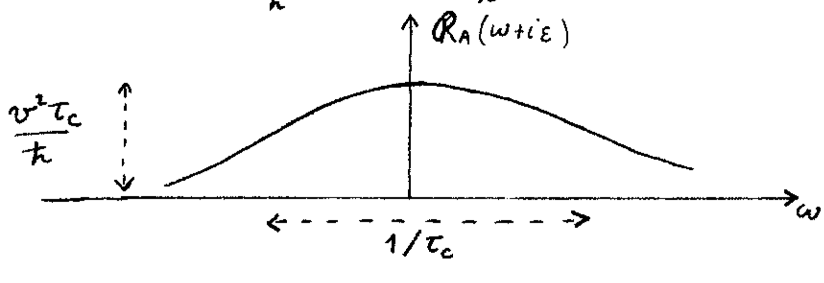


Fig 1

– Comparons la courbe de la figure 1 avec l'expression (IX-37) de $R_A(\omega+i\varepsilon)$ à l'ordre le plus bas en L_{AR}.

Comme L_{AR} est de l'ordre de v, on en déduit que :

$$\boxed{\frac{L_{AR}}{\hbar\omega+i\varepsilon-L_0} \sim \frac{v\tau_c}{\hbar}} \qquad (XI-8)$$

relation d'ordre de grandeur qui sera très utile par la suite.

④ Condition de validité du développement perturbatif de $R_A(\omega+i\varepsilon)$

La relation (XI-8) montre que le développement de $R_A(\omega+i\varepsilon)$ en puissances de L_{AR} est un développement en puissances de $v\tau_c/\hbar$. La condition de validité de ce développement est donc

$$\boxed{\frac{v\tau_c}{\hbar} \ll 1} \qquad (XI-9)$$

La condition (XI-9) exprime que le temps de corrélation τ_c de la force exercée par R sur A est si court qu'on peut se limiter à considérer une seule interaction entre A et R durant ce temps τ_c.

⑤ Condition de validité de l'approximation séculaire

Les coefficients Γ de l'équation pilote doivent être petits devant les différences entre fréquences de Bohr distinctes de A.

Si ω_0 est une fréquence atomique caractéristique, on doit donc avoir :

$$\boxed{\Gamma \simeq \frac{v^2\tau_c}{\hbar^2} \ll \omega_0} \qquad (XI-10)$$

⑥ Condition de validité de l'approximation de mémoire courte

– Point de vue temporel : le système A doit, en représentation d'interaction, évoluer très peu pendant le temps de corrélation τ_c. Comme le temps caractéristique d'évolution de A est $1/\Gamma$, on en déduit

$$\frac{1}{\Gamma} \gg \tau_c \qquad (XI-11)$$

c-à-d compte tenu de (XI-6) :

$$\frac{v^2\tau_c^2}{\hbar^2} \ll 1 \qquad (XI-12)$$

On retrouve la même condition de validité que (XI-9)

– Point de vue espace des fréquences : $R_A(\omega+i\varepsilon)$, de largeur $1/\tau_c$, doit varier peu sur l'intervalle Γ, où $\frac{1}{\hbar\omega+i\varepsilon-L_A-R_A(\omega+i\varepsilon)}$ varie beaucoup.
On retombe sur (XI-11)

Remarques

(i) Quand le terme d'ordre le plus bas de R_A, $R_A^{(2)}$, est non nul, il n'y a pas grand sens à inclure des termes d'ordre supérieur du développement (IX-34) de R_A en puissances de L_{AR} tout en continuant simultanément à négliger la variation avec ω de $R_A^{(2)}$. Les 2 approximations sont caractérisées par le même infiniment petit et il faut les améliorer simultanément.

Il peut se faire cependant que $R_A^{(2)} = 0$. On peut alors pousser le calcul de R_A plus loin en gardant l'approximation de mémoire courte

(ii) $\Gamma \simeq \frac{v}{\hbar}\,\frac{v\tau_c}{\hbar} \ll \frac{v}{\hbar}$ " Rétrécissement par le mouvement "

(iii). Il est également très important de préciser la manière dont on prépare et observe système A, en particulier l'échelle de temps qui caractérise l'observation (cf discussion du cours V sur les difficultés qu'il y a à observer une décroissance non exponentielle après une excitation non percussionnelle)

I - Peut-on considérer l'opérateur densité factorisé à tout instant ? —

① Position du problème.

- On peut toujours supposer qu'à un certain instant $t=0$ A et R sont mis en contact. L'opérateur densité est alors factorisé :

$$|\rho(0)\rangle\rangle = |\sigma_A(0)\rangle\rangle \otimes |\sigma_R(0)\rangle\rangle \qquad (XI-13)$$

- A un instant ultérieur t', $|\rho(t')\rangle\rangle$ n'est plus factorisé. Négliger les corrélations apparues entre A et R reviendrait à remplacer $|\rho(t')\rangle\rangle$ par

$$|\rho(t')\rangle\rangle \longrightarrow |\mathrm{Tr}_R\,\rho(t')\rangle\rangle \otimes |\mathrm{Tr}_A\,\rho(t')\rangle\rangle \qquad (XI-14)$$

Si R est beaucoup plus gros que A, on peut négliger les modifications induites sur R par A et écrire :

$$|\mathrm{Tr}_A\,\rho(t')\rangle\rangle \simeq |\sigma_R(0)\rangle\rangle \qquad (XI-15)$$

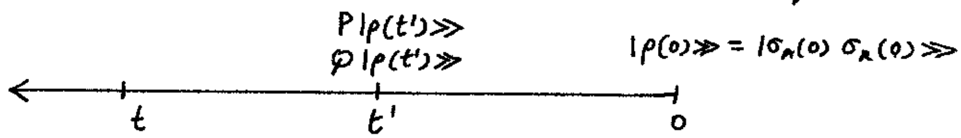
Donc, négliger les corrélations apparues entre A et R reviendrait à remplacer $|\rho(t')\rangle\rangle$ par

$$|\rho(t')\rangle\rangle \longrightarrow |\mathrm{Tr}_R\,\rho(t')\rangle\rangle\,|\sigma_R(0)\rangle\rangle = P\,|\rho(t')\rangle\rangle \qquad (XI-16)$$

On en déduit que les corrélations apparues entre A et R sont contenues dans

$$(1-P)\,|\rho(t')\rangle\rangle = \mathcal{Q}\,|\rho(t')\rangle\rangle \qquad (XI-17)$$

- Considérons alors l'évolution du système à partir de t'



Quelle est l'influence de $\mathcal{Q}|\rho(t')\rangle\rangle$ sur l'évolution ultérieure du système à partir de l'instant t' ?

Commettrait-on une grande erreur si, pour calculer $P|\rho(t)\rangle\rangle$, on négligeait purement et simplement $\mathcal{Q}|\rho(t')\rangle\rangle$?

② Etude dans l'espace des temps.

- L'équation intégrodifférentielle (VIII-64), réécrite en remplaçant 0 par t' permet de calculer la vitesse de variation $\frac{d}{dt}P|\rho(t)\rangle\rangle$ en fonction de la condition initiale $\mathcal{Q}|\rho(t')\rangle\rangle$ (terme inhomogène) et de toute l'histoire de $P|\rho(t)\rangle\rangle$ entre t' et t. Un calcul simple donne à partir de (VIII-64) en représentation d'interaction :

$$i\hbar\frac{d}{dt}P|\tilde\rho(t)\rangle\rangle = e^{iL_0t/\hbar}\,P L\, e^{-i\mathcal{Q}L(t-t')/\hbar}\,\mathcal{Q}|\rho(t')\rangle\rangle$$
$$+\frac{1}{i\hbar}\int_0^{t-t'}d\tau\; e^{iL_0t/\hbar}\,P L\, e^{-i\mathcal{Q}L\tau/\hbar}\,\mathcal{Q}L\, e^{-iL_0(t-\tau)/\hbar}\,P|\tilde\rho(t-\tau)\rangle\rangle \qquad (XI-18)$$

- La $1^{\text{ère}}$ ligne de (XI-18) représente l'influence de $\mathcal{Q}|\rho(t')\gg$ sur $\frac{d}{dt}P|\rho(t)\gg$
- La $2^{\text{ème}}$ ligne de (XI-18) donne une contribution à cette vitesse de variation qui est nulle pour $t=t'$ et qui, pour $t-t' \gg \tau_c$, se stabilise et redonne la forme habituelle de l'équation pilote (produit de $P|\rho(t)\gg$ par un coefficient Γ de l'ordre de $v^2\tau_c/\hbar^2$). Voir courbe en trait tiretés de la figure 2

— Précisons davantage la $1^{\text{ère}}$ ligne de (XI-18). L'équation (VIII-63) (où l'on remplace t par t') permet de calculer $\mathcal{Q}|\rho(t')\gg$ en fonction de toute l'histoire de $P|\rho(t)\gg$ entre 0 et t' :

$$\mathcal{Q}|\rho(t')\gg \;=\; \frac{1}{i\hbar}\int_0^{t'} d\tau \; e^{-i\mathcal{Q}L\tau/\hbar}\,\mathcal{Q}LP\, e^{-iL_0(t'-\tau)/\hbar}\,|\tilde{\rho}(t'-\tau)\gg \qquad \text{(XI-19)}$$

Reportons (XI-19) dans (XI-18). On obtient pour la $1^{\text{ère}}$ ligne de (XI-18) :

$$\frac{1}{i\hbar}\int_0^{t'} d\tau\; e^{iL_0t/\hbar}\,PL\,e^{-i\mathcal{Q}L(t-t')/\hbar}\,e^{-i\mathcal{Q}L\tau/\hbar}\,\mathcal{Q}LP\,e^{-iL_0(t'-\tau)/\hbar}\,|\tilde{\rho}(t'-\tau)\gg \qquad \text{(XI-20)}$$

— Si l'on calcule (XI-20) à l'ordre le plus bas en L_{AR} et si l'on repasse de l'espace de Liouville à l'espace des états on obtient :

$$\frac{1}{i\hbar}\int_0^{t'} d\tau \;\; Tr_R\left[\tilde{V}(t),\left[\tilde{V}(t'-\tau)\,,\,\sigma_R(0)\,\tilde{\sigma}_A(t'-\tau)\right]\right] \qquad \text{(XI-21)}$$

La partie dépendant de R dans (XI-21) se factorise et fait intervenir la fonction de corrélation :

$$Tr\;\sigma_R(0)\;\tilde{R}(t)\;\tilde{R}(t'-\tau) = g(t-t'+\tau) \qquad \text{(XI-22)}$$

— $t-t'+\tau$ est au moins égal à $t-t'$. On en déduit que

(i) si $t-t' \gg \tau_c$, $g(t-t'+\tau) \simeq 0$ et la contribution de $\mathcal{Q}|\rho(t')\gg$ à la vitesse de variation $\frac{d}{dt}P|\tilde{\rho}(t)\gg$ est nulle.

(ii) si $t-t' \lesssim \tau_c$, cette contribution n'est pas nulle. On trouve alors aisément à partir de (XI-21) que la contribution de $\mathcal{Q}|\rho(t')\gg$ à $\frac{d}{dt}P|\rho(t)\gg$ est de l'ordre de $\frac{v^2}{\hbar^2}\tau_c$ (cf courbe en traits pleins de la figure 2

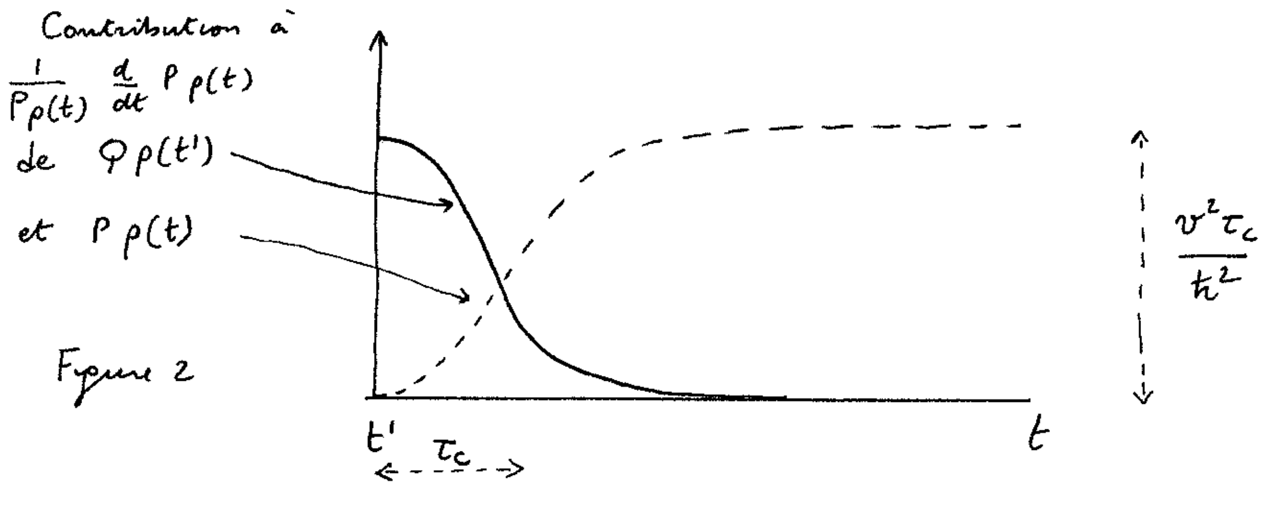


Figure 2

En conclusion :

L'existence de $\mathcal{Q}\rho(t')$ n'influe plus sur $\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho(t)$ dès que $t-t' \gg \tau_c$. Par contre, pour $t-t' \lesssim \tau_c$, le comportement de $\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho(t)$ est entièrement déterminé par $\mathcal{Q}\rho(t')$ [l'intervalle d'intégration de l'intégrale de la 2$^{\text{ème}}$ ligne de XI-18 tend vers 0].

L'erreur commise (sur $\mathcal{P}\rho(t)$) en négligeant $\mathcal{Q}\rho(t')$ est donc au maximum de l'ordre de l'intégrale de la courbe en traits pleins de la figure 2, c-a-d $\frac{v^2\tau_c}{\hbar^2}\cdot\tau_c = \frac{v^2\tau_c^2}{\hbar^2} \ll 1$

Tant qu'on s'intéresse à une échelle de temps grande devant τ_c, on peut donc à une excellente approximation négliger toute corrélation entre A et R et remplacer $\rho(t')$ par $\sigma_A(t')\,\sigma_R(0)$.

L'étude précédente montre cependant que l'évolution de $\mathcal{P}\rho(t)$ à l'instant t' est entièrement déterminée par les corrélations qui sont apparues (à t') entre A et R du fait de leur interaction. En d'autres termes, l'équation pilote étudiée plus haut tient compte des corrélations apparaissant entre A et R pendant un temps de l'ordre de τ_c. Mais A et R ne peuvent rester corrélés pendant un temps supérieur à τ_c.

③ Etude dans l'espace des fréquences

– Au lieu de calculer $\frac{d}{dt}\mathcal{P}|\rho(t)\rangle\rangle$, calculons directement $\mathcal{P}|\rho(t)\rangle\rangle$ en écrivant :

$$\mathcal{P}|\rho(t)\rangle\rangle = \mathcal{P}\,\mathcal{U}(t)\,\mathcal{P}|\rho(0)\rangle\rangle = \mathcal{P}\,\mathcal{U}(t-t')\,\mathcal{U}(t')\,\mathcal{P}|\rho(0)\rangle\rangle =$$

$$\mathcal{P}\,\mathcal{U}(t-t')\,\mathcal{P}\,\mathcal{P}\,\mathcal{U}(t')\,\mathcal{P}|\rho(0)\rangle\rangle + \mathcal{P}\,\mathcal{U}(t-t')\,\mathcal{Q}\,\mathcal{Q}\,\mathcal{U}(t')\,\mathcal{P}|\rho(0)\rangle\rangle \qquad \text{(XI-23)}$$

Le dernier terme de la 2$^{\text{ème}}$ ligne de (XI-23) donne directement l'effet des corrélations apparues à l'instant t'.

– Utilisons alors la relation (IX-5) entre $\mathcal{U}(t)$ et $\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon)$ [on suppose ici $t'>0$, $t-t'>0$] :

$$\mathcal{P}|\rho(t)\rangle\rangle = \left(\frac{i\hbar}{2\pi}\right)^2 \iint d\omega\, d\omega'\, e^{-i\omega(t-t')}\, e^{-i\omega' t'} \;\times$$

$$\left\{ \mathcal{P}\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon)\mathcal{P}\,\mathcal{P}\mathcal{G}(\omega'+i\varepsilon)\mathcal{P}|\rho(0)\rangle\rangle + \mathcal{P}\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon)\,\mathcal{Q}\,\mathcal{Q}\,\mathcal{G}(\omega'+i\varepsilon)\mathcal{P}|\rho(0)\rangle\rangle \right\} \qquad \text{(XI-24)}$$

– Il suffit alors d'utiliser les résultats du cours VI sur les restrictions $\mathcal{P}\mathcal{G}\mathcal{P}$, $\mathcal{P}\mathcal{G}\mathcal{Q}$, $\mathcal{Q}\mathcal{G}\mathcal{P}$ pour obtenir finalement :

$$\mathcal{P}|\rho(t)\rangle\rangle = \left(\frac{i\hbar}{2\pi}\right)^2 \iint d\omega\, d\omega'\, e^{-i\omega(t-t')}\, e^{-i\omega' t'} \;\times$$

$$\left\{ \frac{\mathcal{P}}{\hbar\omega+i\varepsilon - \mathcal{L}_A - \mathcal{P}\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)\mathcal{P}}\;\frac{\mathcal{P}}{\hbar\omega'+i\varepsilon - \mathcal{L}_A - \mathcal{P}\mathcal{R}(\omega'+i\varepsilon)\mathcal{P}} \;+ \right. \qquad \text{(XI-25)}$$

$$\left. \frac{\mathcal{P}}{\hbar\omega+i\varepsilon - \mathcal{L}_A - \mathcal{P}\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)\mathcal{P}}\,\mathcal{L}_{AR}\,\frac{\mathcal{Q}}{(\hbar\omega+i\varepsilon - \mathcal{Q}\mathcal{L}_0\mathcal{Q} - \mathcal{Q}\mathcal{L}_{AR}\mathcal{Q})}\;\frac{\mathcal{Q}}{(\hbar\omega'+i\varepsilon - \mathcal{Q}\mathcal{L}_0\mathcal{Q} - \mathcal{Q}\mathcal{L}_{AR}\mathcal{Q})}\,\mathcal{L}_{AR}\,\frac{\mathcal{P}}{\hbar\omega'+i\varepsilon - \mathcal{L}_A - \mathcal{P}\mathcal{R}(\omega'+i\varepsilon)\mathcal{P}} \right\}$$

Le 1$^{\text{er}}$ terme de (XI-25) (2$^{\text{ème}}$ ligne) est plus petit que le second (3$^{\text{ème}}$ ligne) par un facteur de l'ordre de :

$$L_{AR}\ \frac{\mathcal{Q}}{\hbar\omega+i\varepsilon-\mathcal{Q}L_0\mathcal{Q}-\mathcal{Q}L_{AR}\mathcal{Q}}\ \frac{\mathcal{Q}}{\hbar\omega'+i\varepsilon-\mathcal{Q}L_0\mathcal{Q}-\mathcal{Q}L_{AR}\mathcal{Q}}\ L_{AR} \qquad (XI\text{-}26)$$

Comme ce terme est déjà au moins d'ordre 2 en L_{AR}, on peut négliger dans les dénominateurs $\mathcal{Q}L_{AR}\mathcal{Q}$, ce qui montre, d'après (XI-8), que l'effet des corrélations apparues entre A et R à l'instant t' est de l'ordre de

$$\left(\frac{L_{AR}}{\hbar\omega+i\varepsilon-L_0}\right)^2 \simeq \frac{v^2\tau_c^2}{\hbar^2} \qquad (XI\text{-}27)$$

On retrouve bien l'ordre de grandeur obtenu au § précédent (intégrale de la courbe en traits pleins de la figure 2)

J- Calcul des fonctions de corrélation. Théorème de regression quantique.

① Importance des fonctions de corrélation.

– Dans de nombreux cas, des signaux expérimentaux relatifs à A sont exprimables en fonction des quantités :

$$\langle D(t)\,C(t')\rangle \qquad (XI\text{-}28)$$

qu'on appelle "fonctions de corrélations". C et D sont 2 opérateurs de A. On utilise le point de vue de Heisenberg de sorte que

$$D(t) = e^{iHt/\hbar}\,D\,e^{-iHt/\hbar} \qquad (XI\text{-}29)$$

$$C(t') = e^{iHt'/\hbar}\,C\,e^{-iHt'/\hbar} \qquad (XI\text{-}30)$$

où H est l'hamiltonien total de A+R. Dans (XI-28) la valeur moyenne est prise dans l'état du système global A+R, état qui est indépendant du temps dans le point de vue de Heisenberg et que l'on peut donc prendre égal à $\rho(0) = \sigma_A(0)\,\sigma_R(0)$

– Souvent, le signal fait intervenir la T.F. de la fonction de corrélation

$$\mathcal{I}(\omega) = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{t_1}^{t_2} dt'\ e^{-i\omega(t-t')}\,\langle D(t)\,C(t')\rangle \qquad (XI\text{-}31)$$

Par exemple la répartition spectrale de la lumière émise ou absorbée par un atome est donnée par la T.F des fonctions de corrélations du dipôle atomique.

$T = t_2 - t_1$ est la durée de l'observation.

– Peut on calculer simplement les fonctions de corrélations (XI-28) avec le formalisme développé dans ce chapitre ?

② Passage dans l'espace de Liouville.

– En utilisant (XI-29) et (XI-30), on obtient pour (XI-28) :

$$\langle D(t)C(t')\rangle = \mathrm{Tr}\left\{\rho(0)\,e^{iHt/\hbar}D\,e^{-iHt/\hbar}e^{iHt'/\hbar}C\,e^{-iHt'/\hbar}\right\} \qquad (XI\text{-}32)$$

En écrivant le 1er opérateur $e^{iHt/\hbar}$ sous la forme $e^{iHt'/\hbar}e^{+iH(t-t')/\hbar}$, et en utilisant l'invariance d'une trace par permutation circulaire, on obtient :

$$\langle D(t)C(t')\rangle = \mathrm{Tr}\left\{D\,e^{-iH(t-t')/\hbar}\,C\,e^{-iHt'/\hbar}\,\rho(0)\,e^{iHt'/\hbar}\,e^{iH(t-t')/\hbar}\right\} \qquad (XI\text{-}33)$$

– Or, d'après (VIII-35) :

$$e^{-iHt'/\hbar}\,\rho(0)\,e^{iHt'/\hbar} \quad\longrightarrow\quad e^{-iLt'/\hbar}\,|\rho(0)\rangle\rangle \qquad (XI-34)$$

– A partir de l'opérateur C de l'espace des états $\mathcal{E}_A$ introduisons l'opérateur $\mathcal{C}$ de l'espace de Liouville $\mathcal{L}$ défini par son action sur n'importe quel ket produit de $\mathcal{L}$

$$\mathcal{C}.|\rho_A\otimes\rho_R\rangle\rangle = |C\rho_A\otimes\rho_R\rangle\rangle \qquad (XI-35)$$

On peut alors écrire :

$$C\,e^{-iHt'/\hbar}\,\rho(0)\,e^{iHt'/\hbar} \quad\longrightarrow\quad \mathcal{C}\,e^{-iLt'/\hbar}\,|\rho(0)\rangle\rangle \qquad (XI-36)$$

– La multiplication du 1er membre de (XI-36), à gauche par $e^{-iH(t-t')/\hbar}$, à droite par $e^{iH(t-t')/\hbar}$ revient à multiplier le 2ème membre de (XI-36) à gauche par $e^{-iL(t-t')/\hbar}$.

Enfin, multiplier le tout par D et prendre la trace revient à prendre dans $\mathcal{L}$ le produit scalaire par $\langle\langle D^+|$, de sorte que finalement :

$$\boxed{\langle D(t)\,C(t')\rangle = \langle\langle D^+|\,e^{-iL(t-t')/\hbar}\,\mathcal{C}\,e^{-iLt'/\hbar}\,|\rho(0)\rangle\rangle} \qquad (XI-37)$$

– Comme $\mathcal{Q}|\rho(0)\rangle\rangle = 0$, on peut écrire $P|\rho(0)\rangle\rangle$ à la place de $|\rho(0)\rangle\rangle$ dans (XI-37).

– Insérons $P+\mathcal{Q}=1$ à droite de $\mathcal{C}$

En réalité $\mathcal{C}$ est un opérateur de $\mathcal{L}_A$. P un opérateur de $\mathcal{L}_R$ (rappelons que $P = P_R\,\mathbb{1}_A$. Il faudrait écrire de même $\mathcal{C} = \mathcal{C}_A\,\mathbb{1}_R$). $\mathcal{C}$ commute donc avec P et $\mathcal{Q}$ et on peut écrire

$$\mathcal{C} = \mathcal{C}(P+\mathcal{Q}) = P\mathcal{C}P + \mathcal{Q}\mathcal{C}\mathcal{Q} \qquad (XI-38)$$

– Enfin $\langle\langle D^+|$ est un bra de $\mathcal{L}_A$ (il faudrait écrire en réalité $\langle\langle D_A^+\,1_R|$, de sorte qu'on peut écrire

$$\langle\langle D^+| = \langle\langle D^+|P \qquad (XI-39)$$

Finalement, on peut transformer (XI-37) en l'expression suivante.

$$\begin{aligned}\langle D(t)\,C(t')\rangle = {} & \langle\langle D^+|P\,e^{-iL(t-t')/\hbar}\,P\,\mathcal{C}\,P\,e^{-iLt'/\hbar}\,P|\rho(0)\rangle\rangle \\ & + \langle\langle D^+|P\,e^{-iL(t-t')/\hbar}\,\mathcal{Q}\,\mathcal{C}\,\mathcal{Q}\,e^{-iLt'/\hbar}\,P|\rho(0)\rangle\rangle\end{aligned} \qquad (XI-40)$$

– Comme au § précédent, introduisons les TF de $e^{-iL(t-t')/\hbar}$ et $e^{-iLt'/\hbar}$.

Nous supposerons ici $t'>0$ et $t>t'$ de sorte que nous utiliserons $\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon)$ et $\mathcal{G}(\omega'+i\varepsilon)$. Si t était inférieur à t', il faudrait utiliser $\mathcal{G}(\omega-i\varepsilon)$ [Avec le contour $C_+ + C_-$ et $\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon)-\mathcal{G}(\omega-i\varepsilon)$, on pourrait d'ailleurs utiliser une formule valable quel que soit le signe de $t-t'$]

On obtient ainsi l'expression :

$$\langle D(t)\, C(t')\rangle = \left(\frac{i\hbar}{2\pi}\right)^2 \iint d\omega\, d\omega'\, e^{-i\omega(t-t')}\, e^{-i\omega' t'}$$

$$\Big\{ \langle\langle D^+ | \frac{P}{\hbar\omega + i\varepsilon - L_A - P\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)P}\, \mathcal{C}\, \frac{P}{\hbar\omega' + i\varepsilon - L_A - P\mathcal{R}(\omega'+i\varepsilon)P} | \rho(0)\rangle\rangle \; +$$

$$\langle\langle D^+ | \frac{P}{\hbar\omega + i\varepsilon - L_A - P\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)P}\, L_{AR}\, \frac{Q}{\hbar\omega + i\varepsilon - QL_0Q - QL_{AR}Q}\, \mathcal{C}\, \frac{Q}{\hbar\omega' + i\varepsilon - QL_0Q - QL_{AR}Q}\, L_{AR}\, \frac{P}{\hbar\omega' + i\varepsilon - L_A - P\mathcal{R}(\omega'+i\varepsilon)P} |\rho(0)\rangle\rangle \Big\}$$

(XI-41)

③ Théorème de régression quantique

- L'expression (XI-41) est exacte.

  On voit cependant, par un raisonnement identique à celui du § I précédent, que le dernier terme ($3^{\text{ème}}$ ligne de (XI-41)) est plus petit que le premier (2^e ligne de (XI-41)) par un facteur de l'ordre de

$$\left(\frac{L_{AR}}{\hbar\omega + i\varepsilon - L_0}\right)^2 \sim \frac{v^2\tau_c^2}{\hbar^2} \ll 1$$

- Nous ne garderons donc que le 1^{er} terme de (XI-41). On voit d'ailleurs que

$$\frac{i\hbar}{2\pi}\int d\omega'\, e^{-i\omega' t'}\, \frac{P}{\hbar\omega' + i\varepsilon - L_A - P\mathcal{R}(\omega'+i\varepsilon)P} |\rho(0)\rangle\rangle = |\sigma_A(t')\, \sigma_R(0)\rangle\rangle \qquad (XI\text{-}42)$$

  de sorte que le 1^{er} terme de (XI-41) peut se réécrire

$$\langle D(t)\,C(t')\rangle = \frac{i\hbar}{2\pi}\int d\omega\, e^{-i\omega(t-t')}$$
$$\langle\langle D^+ | \frac{P}{\hbar\omega + i\varepsilon - L_A - P\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)}\, \mathcal{C}\, |\sigma_A(t')\,\sigma_R(0)\rangle\rangle \qquad (XI\text{-}43)$$

Or d'après la définition de $\mathcal{C}$

$$\mathcal{C}\, |\sigma_A(t')\, \sigma_R(0)\rangle\rangle = |C\, \sigma_A(t') \otimes \sigma_R(0)\rangle\rangle \qquad (XI\text{-}44)$$

D'autre part, comme au § D-4, on peut se débarrasser de P et $\sigma_R(0)$ en introduisant l'opérateur $\mathcal{R}_A(\omega+i\varepsilon)$. Il vient ainsi finalement :

$$\boxed{\langle D(t)\, C(t')\rangle \simeq \frac{i\hbar}{2\pi}\int d\omega\, e^{-i\omega(t-t')}\, \langle\langle D^+ | \frac{1}{\hbar\omega + i\varepsilon - L_A - \mathcal{R}_A(\omega+i\varepsilon)} | C\,\sigma_A(t')\rangle\rangle}$$

(XI-45)

Dans (XI-45) toutes les quantités sont définies dans $\mathcal{L}_A$.

- En conclusion, on voit que si $\frac{v\tau_c}{\hbar} \ll 1$, on peut calculer la fonction de corrélation $\langle D(t)\, C(t')\rangle$ de la manière suivante ;
  - (i) On calcule $\sigma_A(t')$ à partir de $\sigma_A(0)$ grâce à l'équation pilote.
  - (ii) On prend pour nouvel état initial $|C\,\sigma_A(t')\rangle\rangle$
  - (iii) On laisse évoluer le système à partir de cet état initial pendant un intervalle de temps $t-t'$. L'évolution est toujours calculée par l'équation pilote.
  - (iv) On calcule enfin la valeur moyenne de D dans l'opérateur densité ainsi obtenu

– Cette possibilité de calculer une moyenne à 2 temps (ce qui est une fonction de corrélation) à partir de l'équation pilote qui détermine l'évolution des moyennes à 1 temps constitue le théorème de régression quantique. On voit qu'il n'est valable que si $v\tau_c/\hbar \ll 1$

④ Calcul direct d'un signal.

– En fait si le signal observé est la T.F. d'une fonction de corrélation, on voit que l'expression (XI-45) donne directement le signal.

– Supposons que les limites d'intégration t_1 et t_2 du signal (XI-31) soient toutes 2 suffisamment éloignées de 0 de sorte qu'on puisse remplacer $\sigma_A(t')$ par la solution stationnaire $\tilde{\sigma}_A$ de l'équation pilote. (Une telle situation est réalisée si $t_1 \gg \frac{1}{\Gamma}$)

L'intégrand de (XI-45) ne dépend plus alors de t' et l'intégrale sur t' de (XI-31) donne directement $t_2 - t_1 = T$ qui est le temps d'observation.

Reste à faire dans (XI-31) l'intégrale sur t, ce qui revient au même sur $t-t'$. A la limite $T \to \infty$ et en retranchant $g(\omega - i\varepsilon)$ de manière à inclure la possibilité $t' > t$, on obtient

$$\frac{\text{Signal}}{T} \sim \ll D^+ \left| \left[\frac{1}{\hbar\omega + i\varepsilon - L_A - \mathcal{R}_A(\omega + i\varepsilon)} - \frac{1}{\hbar\omega - i\varepsilon - L_A - \mathcal{R}_A(\omega - i\varepsilon)} \right] \right| C\, \tilde{\sigma}_A \gg \tag{XI-46}$$

On voit ainsi toute l'importance de l'opérateur R_A.

Remarque

Comme on a négligé un terme en $\frac{v^2\tau_c^2}{\hbar^2}$ en laissant tomber la 3ème ligne de (XI-41), on voit qu'il n'y aurait pas grand sens à vouloir calculer dans (XI-46) $\mathcal{R}_A(\omega + i\varepsilon)$ à un ordre trop élevé, ou à vouloir tenir compte de manière précise de la variation de $\mathcal{R}_A(\omega + i\varepsilon)$ avec ω. Il vaut mieux évidemment s'en tenir aux 3 approximations du § F. Si on veut aller plus loin, il faut également tenir compte du dernier terme de XI-41