Théorème de regression quantique
Relations d'Einstein généralisées.

① - Introduction. Buts de ce chapitre.

- Dans le chapitre II, on a établi un certain nombre de résultats exacts concernant les équations de Langevin - Mori d'un petit système S couplé à un grand réservoir R : structure des équations, équivalence avec l'équation pilote en ce qui concerne les moyennes à un temps, nullité des moyennes sur les réservoir des forces de Langevin

- Dans le chapitre III, des informations supplémentaires ont été obtenues dans le cadre d'un traitement perturbatif : existence, pour un couplage suffisamment faible entre S et R, de l'échelle de temps dans le problème, temps de corrélation τ_C et temps de relaxation $T_R \gg \tau_C$; structure des fonctions de corrélation $\langle F_\alpha(t) F_\beta(t') \rangle_R$ des forces de Langevin qui varient très vite en fonction de $t-t'$ (échelle de temps τ_C), beaucoup plus lentement en fonction de t (échelle de temps T_R).
  Les résultats que nous venons d'énoncer semblent généralisables à d'autres situations où un traitement perturbatif ne peut être appliqué aux interactions élémentaires faisant évoluer S. Prenons un exemple concret. Considérons N atomes à 2 niveaux (atomes actifs d'un milieu laser) subissant des collisions avec $\mathcal{N}$ perturbateurs ($\mathcal{N} \gg N$). Le réservoir R est formé par les $\mathcal{N}$ perturbateurs, le système S par les N atomes. Les collisions peuvent être "fortes", de sorte que chaque collision atome - perturbateur ne peut être traitée perturbativement. Cependant, si le temps moyen entre 2 collisions successives subies par le même atome est long devant le temps de collision τ_c, les observables collectives de S (dipôle global, différences de population ...) s'amortissent avec une constante de temps longue devant τ_c.

- Dans ce chapitre IV, moyennant des hypothèses très générales suggérées par l'approche perturbative, nous établirons directement à partir des équations de Langevin - Mori elles mêmes, c.à.d sans passer par l'expression explicite des forces de Langevin en fonction de ρ, $\mathcal{L}$ ..., un certain nombre de résultats importants concernant les fonctions de corrélation des observables de S (théorème de régression quantique), le calcul des coefficients de diffusion (relations d'Einstein généralisées) ...
  Evidemment, comme nous ne précisons pas la dynamique des interactions à l'échelle microscopique (τ_c), nous ne pouvons établir que des résultats portant sur une évolution moyennée sur un intervalle de temps, long devant τ_c, mais petit devant T_R ("coarse - grained average"). Un tel "lissage" partiel du bruit intervient d'ailleurs très concrètement dans l'étude expérimentale du phénomène lorsque la bande passante des instruments d'observation est petite devant τ_c^{-1} (Notons en passant que le fait de lisser le bruit n'empêche pas d'avoir accès expérimentalement à τ_c, en étudiant par exemple la variation d'un temps de relaxation avec un champ magnétique qui fait varier une fréquence atomique).

② Hypothèses de départ

– Nous partons des équations exactes de Langevin-Mori (III-19-a) :

$$\boxed{\frac{d}{dt} A_\alpha(t) = -\sum_\beta e^{i(\omega_\beta-\omega_\alpha)t} \int_0^t d\tau \; A_\beta(t-\tau)\, \gamma_{\beta\alpha}(\tau) + F_\alpha(t)} \qquad (IV-1)$$

où, pour simplifier au maximum les notations, nous ne mettrons plus désormais le tilda ($\sim$) associé à la transformation (III-19) permettant d'éliminer le terme d'évolution propre $-i\omega_\alpha A_\alpha(t)$ [nous avons également supprimé les kets $|\;\rangle$ (qui porte sur les $A_\alpha(t)$ et non sur les $\langle A_\alpha(t)\rangle_R$ comme à la fin de III)].

Notons que nous ne faisons en IV-1, ni l'approximation de mémoire courte [remplacement de $\int_0^t d\tau\, A_\beta(t-\tau)\,\gamma_{\beta\alpha}(\tau)$ par $A_\beta(t)\int_0^\infty \gamma_{\beta\alpha}(\tau)\,d\tau$], ni l'approximation séculaire [restriction de $\sum_\beta$ à $\omega_\beta=\omega_\alpha$]. Ces approximations seront introduites plus naturellement lors de l'opération de lissage étudiée au § 3 ci-dessous.

– Hypothèses sur les échelles de temps

Soit τ_c l'échelle de temps caractérisant la variation des $\gamma(\tau)$.

Soit T_R l'échelle de temps définie par Γ^{-1} où

$$\Gamma \simeq \int_0^\infty \gamma(\tau)\, d\tau \qquad (IV-2)$$

On suppose
$$\boxed{T_R \gg \tau_c} \qquad (IV-3)$$

– Hypothèses sur les forces de Langevin $F_\alpha(t)$

En plus du résultat exact (voir II-45) pour les moyennes sur R,

$$\boxed{\langle F_\alpha(t)\rangle_R = 0} \qquad (IV-4)$$

on suppose la structure suivante (suggérée par l'approche perturbative de III) pour les fonctions de corrélation

$$\boxed{\langle F_\alpha(t)\, F_\beta(t')\rangle_R = 2\, D_{\alpha\beta}(t)\; g_{\alpha\beta}(t-t')} \qquad (IV-5)$$

avec

(i) Dépendance très rapide en $t-t'$: la largeur de la fonction $g_{\alpha\beta}(t-t')$ [qui n'est pas forcément paire, ni réelle] est de l'ordre de τ_c. Cette fonction est normalisée de façon que

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} g_{\alpha\beta}(\tau)\, d\tau = 1} \qquad (IV-6)$$

(au prix éventuellement d'une redéfinition de $D_{\alpha\beta}(t)$)

(ii) Dépendance en t. $D_{\alpha\beta}(t)$ est un <u>opérateur de S</u> évoluant à l'échelle de T_R.

En toute rigueur, $D_{\alpha\beta}(t)$ peut aussi évoluer aux fréquences propres de S, ou à des différences ou sommes de telles fréquences propres [voir le terme $e^{i(\omega_\mu+\omega_\nu)t}$ de III-32]. Là encore, l'opération de lissage discutée ci-dessous, permet d'éliminer toutes les fréquences autres que la fréquence nulle de S.

③ Lissage partiel du bruit par une moyenne temporelle ("coarse-grained" average).

a) Définition de la moyenne temporelle.

– Soit $h(\tau)$ une fonction réelle de τ, centrée autour de 0, d'intégrale égale à 1

$$\int_{-\infty}^{+\infty} h(\tau)\, d\tau = 1 \qquad (IV-7)$$

et dont la largeur θ satisfait

$$\tau_c \ll \theta \ll T_R \qquad (IV-8)$$

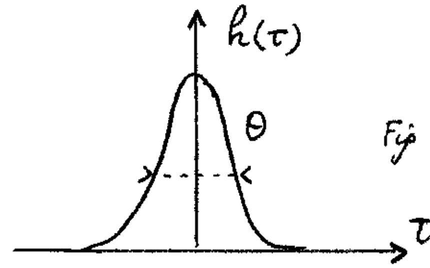


Fig 1

– Les opérateurs moyennés $\overline{A_\alpha(t)}$, les forces moyennées $\overline{F_\alpha(t)}$ sont définis par

$$\overline{A_\alpha(t)} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\; A_\alpha(t-\tau)\, h(\tau) \qquad \overline{F_\alpha(t)} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\; F_\alpha(t-\tau)\, h(\tau) \qquad (IV-9)$$

Il ne faut évidemment pas confondre la moyenne temporelle définie ici et la moyenne sur le réservoir introduite plus haut.

– Par T.F. les produits de convolution IV-9 deviennent des produits ordinaires :

$$\overline{A_\alpha(\omega)} = A_\alpha(\omega)\, h(\omega) \qquad \overline{F_\alpha(\omega)} = F_\alpha(\omega)\, h(\omega) \qquad (IV-10)$$

La réalité de $h(\tau)$ et la normalisation (IV-7) impliquent :

$$h(-\omega) = h(\omega)^* \qquad h(\omega = 0) = 1 \qquad (IV-11)$$

b) Transformation des équations de L.M. en équations différentielles.

– Dans (IV-1), $A_\alpha(t)$ et $\gamma_{\beta\alpha}(\tau)$ ne sont en réalité définis que pour $\tau, t > 0$ et doivent être remplacés par $A_\alpha(t)\theta(t)$ et $\gamma_{\beta\alpha}(\tau)\,\theta(\tau)$ dans l'intégrale sur τ. Soit $\gamma_{\beta\alpha}(\omega)$ la T.F. de $\gamma_{\beta\alpha}(\tau)\,\theta(\tau)$ [θ : fonction de Heaviside], c-à-d encore la transformée de Fourier-Laplace de $\gamma_{\beta\alpha}(\tau)$. La largeur de $\gamma_{\beta\alpha}(\omega)$ en ω est de l'ordre de $1/\tau_c$. Quant à $\gamma_{\beta\alpha}(\omega=0)$, on obtient d'après (IV-2) (voir aussi III.35) :

$$\gamma_{\beta\alpha}(\omega = 0) = \int_0^\infty \gamma_{\beta\alpha}(\tau)\, d\tau = \Gamma_{\beta\alpha} \qquad (IV-12)$$

– Par transformation de Fourier-Laplace, les équations de Langevin-Mori deviennent (si l'on omet, pour simplifier l'écriture, les indices α et β et qu'on oublie pour le moment les termes non séculaires) :

$$A(\omega)\left[-i\omega + \gamma(\omega)\right] = F(\omega) + A(t=0) \qquad (IV-13)$$

Multiplions les 2 membres de cette équation par $h(\omega)$. Comme la largeur (θ^{-1}) de $h(\omega)$ est très petite devant celle (τ_c^{-1}) de $\gamma(\omega)$ [voir IV-8], on peut remplacer $\gamma(\omega)\, h(\omega)$ par $\gamma(\omega=0)\, h(\omega) = \Gamma\, h(\omega)$ et obtenir ainsi

$$h(\omega)\, A(\omega)\left[-i\omega + \Gamma\right] = h(\omega) F(\omega) + h(\omega)\, A(t=0) \qquad (IV-14)$$

Si l'on prend la T.F.L. inverse de (IV-14), on obtient pour $t \gg \theta$ [et en remettant les indices α et β]

$$\boxed{\frac{d}{dt}\overline{A_\alpha(t)} = -\sum_\beta \overline{A_\beta(t)}\,\Gamma_{\beta\alpha} + \overline{F_\alpha(t)}} \qquad (IV-15)$$

Le lissage permet donc de remplacer l'équation intégrodifférentielle (IV-1) par une équation différentielle

– Quant à l'effet des termes non séculaires, on se convainc aisément qu'il est considérablement réduit par le lissage. En effet, les modulations aux fréquences $\Omega = \omega_\alpha - \omega_\beta$ de S que les couplages non séculaires font apparaître dans les $A(t)$, et qui sont déjà seulement de l'ordre de $\Gamma/\Omega \ll 1$, sont encore réduites par un facteur $1/\Omega\theta$ supplémentaire dans les moyennes IV-9 [nous supposons en effet $\theta \gg \frac{1}{\Omega}$].

c) Propriétés des forces de Langevin moyennées.

– On a toujours $\boxed{\langle \overline{F_\alpha(t)} \rangle_R = 0}$ (IV-16)

– Calculons la fonction de corrélation des forces moyennées. En utilisant (IV-5) et en introduisant la T.F. $g_{\alpha\beta}(\omega)$ de $g_{\alpha\beta}(\tau)$, on obtient après des calculs simples :

$$\langle \overline{F_\alpha(t)}\, \overline{F_\beta(t')} \rangle_R = \int d\tau\, d\tau' \langle F_\alpha(t-\tau) F_\beta(t'-\tau') \rangle_R\, h(\tau) h(\tau')$$

$$= \frac{2}{2\pi} D_{\alpha\beta}(t) \int d\omega\, e^{-i\omega(t-t')}\, g_{\alpha\beta}(\omega)\, h(\omega)\, h(-\omega) \qquad \text{(IV-17)}$$

Comme la largeur (θ^{-1}) de $h(\omega)$ est beaucoup plus faible que celle (τ_c^{-1}) de $g_{\alpha\beta}(\omega)$, on peut remplacer $g_{\alpha\beta}(\omega) h(\omega) h(-\omega)$ par $g_{\alpha\beta}(\omega=0) h(\omega) h(-\omega)$, c-à-d encore par $h(\omega) h(-\omega)$ puisque, d'après (IV-6) $g_{\alpha\beta}(\omega=0) = 1$. Mais $h(\omega) h(-\omega)$ est visiblement une fonction paire de ω et qui de plus d'après IV-11 est réelle et vaut 1 pour $\omega = 0$. On peut donc finalement écrire

$$\boxed{\langle \overline{F_\alpha(t)}\, \overline{F_\beta(t')} \rangle_R = 2 D_{\alpha\beta}(t)\, \bar{g}(t-t')} \qquad \text{(IV-18)}$$

où $\bar{g}(t-t')$, qui est la T.F. de $h(\omega) h(-\omega)$ est une fonction paire et réelle de $t-t'$, de largeur θ et d'intégrale égale à 1, que l'on peut assimiler à une "fonction δ" de largeur θ.

– Nous n'avons pas tenu compte implicitement des modulations éventuelles de $D_{\alpha\beta}(t)$ aux fréquences Ω de S. Lorsqu'on en tient compte on montre aisément qu'on tombe sur $\int d\omega\, e^{-i\omega(t-t')} g_{\alpha\beta}(\omega) h(\omega+\Omega) h(-\omega)$. Si $\theta \gg 1/\Omega$, $h(\omega+\Omega)$ et $h(-\omega)$ ne peuvent jamais être simultanément importants, ce qui montre que seules les composantes séculaires de $D_{\alpha\beta}(t)$ $(\Omega = 0)$ subsistent après l'opération de lissage.

d) Une opération de lissage particulièrement simple.

– Elle consiste à intégrer de t à $t+\Delta t$ (avec $\tau_c \ll \Delta t \ll T_R$) et à diviser par Δt [ce qui revient à prendre $h(\tau) = \theta(-\tau)\,\theta(-\Delta t+\tau)/\Delta t$]. On obtient alors pour (IV-15) :

$$\frac{A_\alpha(t+\Delta t) - A_\alpha(t)}{\Delta t} = -\sum_\beta \frac{1}{\Delta t}\int_t^{t+\Delta t} dt'\, A_\beta(t')\,\Gamma_{\beta\alpha} + \frac{1}{\Delta t}\int_t^{t+\Delta t} F_\alpha(t')\,dt' \qquad \text{(IV-19)}$$

– Si l'on remplace dans (IV-19) $A_\beta(t')$ par $A_\beta(t) + \int_t^{t'} \dot{A}_\beta(t'')\,dt''$ et qu'on ne conserve que les termes d'ordre le plus bas en $\Gamma\Delta t$ (ce qui revient à remplacer $A_\beta(t')$ par $A_\beta(t)$), on obtient la formule suivante qui nous sera très utile pour la suite :

$$\boxed{A_\alpha(t+\Delta t) - A_\alpha(t) = -\sum_\beta A_\beta(t)\,\Gamma_{\beta\alpha}\,\Delta t + \int_t^{t+\Delta t} F_\alpha(t')\,dt' \quad \text{avec} \quad \tau_c \ll \Delta t \ll \Gamma^{-1}} \qquad \text{(IV-20)}$$

④ Calcul des corrélations entre opérateurs de S et forces de Langevin

– Pour caractériser les fluctuations des opérateurs $A_\alpha(t)$ [qui, à $t=0$ coïncident avec les opérateurs A_α de S] induites par les forces de Langevin F_β, il est intéressant de calculer les fonctions de corrélation :

$$\langle A_\alpha(t)\, F_\beta(t') \rangle_R \qquad \text{(IV-21)}$$

– Pour $t'-t \gg \tau_c$, ces fonctions de corrélation sont certainement nulles. En effet $A_\alpha(t)$, à l'instant t, est déterminé par les forces de Langevin aux instants t'' situés dans le passé de t, instants qui sont séparés de t' par $t'-t'' \geq t'-t \gg \tau_c$. D'après les hypothèses sur les forces de Langevin faites au § 2 il ne peut alors y avoir aucune corrélation entre $F(t'')$ et $F(t')$.

– Nous allons nous borner à étudier les variations avec t' de (IV-21) dans un intervalle autour de t, de largeur 2δ petite devant T_R (trait renforcé de la figure 2).

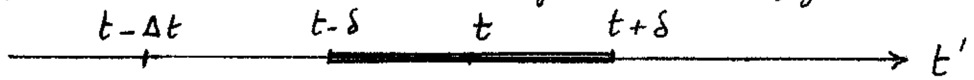


Fig 2

Pour cela, considérons l'instant $t-\Delta t$ avec $\tau_c \ll \Delta t \ll T_R$ et supposons de plus que $\Delta t - \delta \gg \tau_c$, de sorte que dans l'intervalle de variation de t'

$$t'-t+\Delta t \gg \tau_c \qquad \text{(IV-22)}$$

D'après (IV-20), on a

$$A_\alpha(t) = A_\alpha(t-\Delta t) - \sum_\gamma A_\gamma(t-\Delta t)\,\Gamma_{\gamma\alpha}\,\Delta t + \int_{t-\Delta t}^{t} F_\alpha(t'')\,dt'' \qquad \text{(IV-23)}$$

Multiplions les 2 membres de (IV-23) à droite par $F_\beta(t')$ et prenons la moyenne sur R. D'après (IV-22), $\langle A_\alpha(t-\Delta t)\,F_\beta(t')\rangle_R \simeq 0 \simeq \langle A_\gamma(t-\Delta t)\,F_\beta(t')\rangle_R$
On a donc, d'après (IV-5) :

$$\langle A_\alpha(t)\,F_\beta(t')\rangle_R \simeq \int_{t-\Delta t}^{t} \langle F_\alpha(t'')\,F_\beta(t')\rangle_R\, dt'' = 2\,D_{\alpha\beta}(t)\int_{t-\Delta t-t'}^{t-t'} g_{\alpha\beta}(\tau)\,d\tau \qquad \text{(IV-24)}$$

D'après (IV-22), on peut remplacer la borne inférieure de la dernière intégrale de (IV-24) par $-\infty$. Pour $t-t' \gg \tau_c$, on peut remplacer également la borne supérieure à $+\infty$, ce qui donne (voir IV-6) pour $\langle A_\alpha(t)\,F_\beta(t')\rangle_R$ une valeur égale à $2\,D_{\alpha\beta}(t)$. Puis $\langle A_\alpha(t)\,F_\beta(t')\rangle_R$ décroît lorsque t' croît et se rapproche de t, et tend vers 0 lorsque $t'-t \gg \tau_c$, la largeur du domaine de variation de la fonction de corrélation étant de l'ordre de τ_c (figure 3)

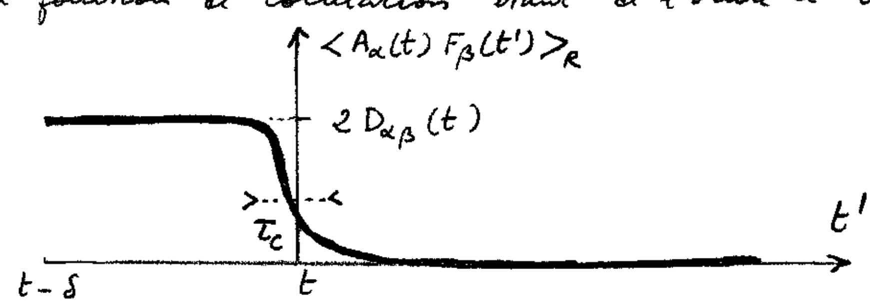


Fig. 3

– Remarque : si l'on étudie la fonction de corrélation $\langle \overline{A_\alpha(t)}\;\overline{F_\beta(t')}\rangle_R$ entre grandeurs "lissées", on se convainc aisément que $\langle \overline{A_\alpha(t)}\;\overline{F_\beta(t)}\rangle = D_{\alpha\beta}(t)$ et que la courbe de la figure 3 est remplacée par une courbe plus symétrique variant sur un intervalle de largeur θ autour de $t'=t$

(5) Interprétation de $D_{\alpha\beta}(t)$ comme un coefficient de diffusion

- Soient

$$\Delta A_\alpha(t) = A_\alpha(t+\Delta t) - A_\alpha(t) \qquad \Delta A_\beta(t) = A_\beta(t+\Delta t) - A_\beta(t) \tag{IV-25}$$

les accroissements de A_α et A_β dans un intervalle de temps Δt long devant τ_c mais court devant T_R

Nous allons calculer la quantité $\langle \Delta A_\alpha(t)\, \Delta A_\beta(t)\rangle_R$ et montrer, qu'à l'ordre le plus bas en $\Gamma \Delta t$, elle est égale à $2 D_{\alpha\beta}(t)\, \Delta t$, ce qui permet d'interpréter $D_{\alpha\beta}(t)$ comme un coefficient de diffusion.

- D'après (IV-20), on a :

$$\langle \Delta A_\alpha(t)\, \Delta A_\beta(t)\rangle_R = \sum_\mu \sum_\nu \langle A_\mu(t) A_\nu(t)\rangle_R\, \Gamma_{\mu\alpha}\Gamma_{\nu\beta}\, (\Delta t)^2$$

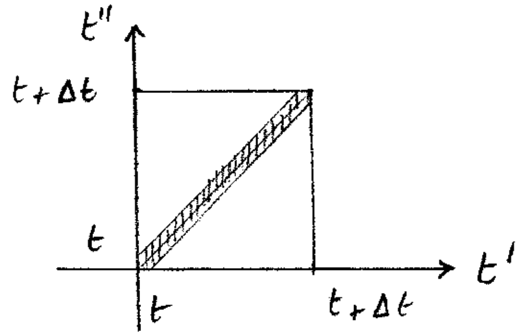
$$- \Delta t \int_t^{t+\Delta t} dt' \left[\sum_\mu \Gamma_{\mu\alpha} \langle A_\mu(t) F_\beta(t')\rangle_R + \sum_\nu \Gamma_{\nu\beta} \langle F_\alpha(t') A_\nu(t)\rangle_R \right]$$

$$+ \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t+\Delta t} dt'' \; \langle F_\alpha(t') F_\beta(t'')\rangle_R \tag{IV-26}$$

La 1ère ligne de (IV-26) est proportionnelle à $(\Delta t)^2$

Comme $t' \geq t$, l'ordre de grandeur de la 2ème ligne de (IV-26) est, d'après les résultats du § 4 précédent, de l'ordre de $\Delta t\, D(t)\, \Gamma \tau_c$ (il fait intervenir en effet l'intégrale de t à $t+\Delta t$, c-à-d de t à $+\infty$, de la courbe de la figure 3, ce qui donne un résultat de l'ordre de $D(t)\,\tau_c$].

Quant à la 3ème ligne elle se calcule immédiatement grâce au changement de variables $t'=t'$ $\tau = t'-t''$, et aux relations (IV-5) et (IV-6) [voir aussi la figure 4 : seule une bande de largeur τ_c autour de la 1ère bissectrice contribue à l'intégrale]. On trouve :



$$2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t+\Delta t} dt''\; D_{\alpha\beta}(t')\, g_{\alpha\beta}(t'-t'') \simeq 2 D_{\alpha\beta}(t) \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_{-\infty}^{+\infty} g_{\alpha\beta}(\tau)\, d\tau = 2\,\Delta t\; D_{\alpha\beta}(t) \tag{IV-27}$$

(notons en passant que seules les composantes séculaires de $D_{\alpha\beta}(t')$, égales d'ailleurs aux composantes séculaires de $D_{\alpha\beta}(t)$, subsistent après l'intégration sur t').

Finalement, seules les 2ème et 3ème lignes de (IV-26) sont d'ordre 1 en Δt et la 2ème est $\Gamma \tau_c \simeq \tau_c / T_R$ fois plus petite que la 3ème

On a donc démontré le résultat important

$$\boxed{\frac{\langle \Delta A_\alpha(t)\, \Delta A_\beta(t)\rangle_R}{2\,\Delta t} = D_{\alpha\beta}(t)} \tag{IV-28}$$

Remarque : Le caractère quantique du problème étudié se traduit par le fait qu'en général $D_{\alpha\beta}(t) \neq D_{\beta\alpha}(t)$

⑥ Lien entre fluctuation et dissipation. Relations d'Einstein généralisées

a) Vitesse d'entraînement (Drift)

- On peut réécrire la relation fondamentale (IV-20) sous la forme

$$\frac{\Delta A_\alpha(t)}{\Delta t} = \sum_\beta A_\beta(t)\,\Gamma_{\beta\alpha} + \frac{1}{\Delta t}\int_t^{t+\Delta t} F_\alpha(t')\,dt' \qquad (IV\text{-}29)$$

- Nous appellerons vitesse d'entraînement $V_\alpha(t)$ le 1er terme de IV-29

$$\boxed{V_\alpha(t) = \sum_\beta A_\beta(t)\,\Gamma_{\beta\alpha}} \qquad (IV\text{-}30)$$

Comme $A_\beta(t)$ n'est pas en général un opérateur pur de S pour $t \neq 0$, il en est de même pour $V_\alpha(t)$

- On note parfois
$$V_\alpha(t) = \left\{\frac{d}{dt}A_\alpha(t)\right\} \qquad (IV\text{-}31)$$
pour rappeler que $V_\alpha(t)$ est une vitesse de variation de $A_\alpha(t)$, d'une part lissée (on utilise IV-20), d'autre part ne tenant pas compte de la force de Langevin (1er terme du 2ème membre de IV-29 seulement)

b) Etablissement des relations d'Einstein généralisées.

Calculons de 2 manières différentes $\left\langle \frac{\Delta\left(A_\alpha(t)A_\beta(t)\right)}{\Delta t}\right\rangle_R$

i) $A_\alpha = A_\alpha(0)$ et $A_\beta = A_\beta(0)$ étant 2 opérateurs de S, il en est de même de $A_\alpha A_\beta$ que nous noterons $A_{\alpha\beta}$

$$A_{\alpha\beta} = A_\alpha A_\beta \qquad (IV\text{-}32)$$

L'évolution au cours du temps conserve la relation (IV-32). Il suffit de multiplier les 2 membres de (IV-32) à gauche par e^{iHt}, à droite par e^{-iHt} (où H est l'hamiltonien total), et de mettre $e^{-iHt}e^{iHt} = 1$ entre A_α et A_β pour montrer que

$$A_{\alpha\beta}(t) = A_\alpha(t)\,A_\beta(t) \qquad (IV\text{-}33)$$

Notons en passant qu'on montrerait aisément de cette manière que les relations de commutation se conservent au cours du temps puisque:

$$[A_\alpha, A_\beta](t) = [A_\alpha(t), A_\beta(t)] \qquad (IV\text{-}34)$$

De (IV-33) on déduit $\langle A_{\alpha\beta}(t)\rangle_R = \langle A_\alpha(t)A_\beta(t)\rangle_R$. Par contre on a en général $\langle A_\alpha(t)A_\beta(t)\rangle_R \neq \langle A_\alpha(t)\rangle_R\langle A_\beta(t)\rangle_R$. Les relations de commutation ne sont pas en général conservées pour les moyennes sur R

Ecrivant alors la formule IV-29 pour $A_{\alpha\beta}(t)$ et prenant la moyenne des 2 membres sur R (ce qui fait disparaître les force de Langevin), on obtient :

$$\left\langle \frac{\Delta\left(A_\alpha(t)A_\beta(t)\right)}{\Delta t}\right\rangle_R = \langle V_{\alpha\beta}(t)\rangle_R = \left\langle\left\{\frac{d}{dt}\left(A_\alpha(t)A_\beta(t)\right)\right\}\right\rangle_R \qquad (IV\text{-}35)$$

ii) On a par ailleurs

$$\begin{aligned}\Delta\left(A_\alpha(t)A_\beta(t)\right) &= A_\alpha(t+\Delta t)A_\beta(t+\Delta t) - A_\alpha(t)A_\beta(t) \\ &= A_\alpha(t).\Delta A_\beta(t) + \Delta A_\alpha(t).A_\beta(t) + \Delta A_\alpha(t)\,\Delta A_\beta(t)\end{aligned} \qquad (IV\text{-}36)$$

On déduit alors aisément de (IV-36), compte tenu de (IV-28), (IV-29) et (IV-30):

$$\left\langle \frac{\Delta\big(A_\alpha(t)\,A_\beta(t)\big)}{\Delta t} \right\rangle_R = \langle A_\alpha(t)\,V_\beta(t)\rangle_R + \langle V_\alpha(t)\,A_\beta(t)\rangle_R + 2\,D_{\alpha\beta}(t)$$
$$+ \frac{1}{\Delta t}\int_t^{t+\Delta t} dt' \Big(\langle A_\alpha(t)\,F_\beta(t')\rangle_R + \langle F_\alpha(t')\,A_\beta(t)\rangle_R \Big) \qquad \text{(IV-37)}$$

Or, d'après les résultats du § 4 (voir notamment la figure 3), l'ordre de grandeur de la 2ème ligne de (IV-37) est $D(t)\,\frac{\tau_c}{\Delta t}$, c-à-d complètement négligeable devant celui de la 1ère.

En égalant (IV-35) à la 1ère ligne de (IV-37), on obtient alors la relation d'Einstein généralisée :

$$\boxed{\begin{aligned} 2\,D_{\alpha\beta}(t) &= \langle V_{\alpha\beta}(t)\rangle_R - \langle A_\alpha(t)\,V_\beta(t)\rangle_R - \langle V_\alpha(t)\,A_\beta(t)\rangle_R \\ &= \Big\langle \Big\{ \frac{d}{dt}\big(A_\alpha(t)\,A_\beta(t)\big)\Big\}\Big\rangle_R - \Big\langle A_\alpha(t)\Big\{\frac{d}{dt}A_\beta(t)\Big\}\Big\rangle_R - \Big\langle \Big\{\frac{d}{dt}A_\alpha(t)\Big\}A_\beta(t)\Big\rangle_R \end{aligned}}$$

(IV-38)

c) Discussion physique

(i) Explicitons davantage (IV-38). Appelons A_γ l'opérateur $A_\alpha A_\beta$ (qui est un membre de l'ensemble $\{A\}$). On a alors d'après (IV-30)

$$2\,D_{\alpha\beta}(t) = \sum_\mu \langle A_\mu(t)\rangle_R\,\Gamma_{\mu\gamma} - \sum_\gamma \Big(\langle A_\alpha(t)\,A_\gamma(t)\rangle_R\,\Gamma_{\gamma\beta} + \langle A_\gamma(t)\,A_\beta(t)\rangle_R\,\Gamma_{\gamma\alpha}\Big) \qquad \text{(IV-39)}$$

On voit clairement sur (IV-39) que le coefficient de diffusion $D_{\alpha\beta}$ peut être entièrement exprimé en fonction de taux de relaxation Γ et de moyennes à un temps, toutes quantités qui peuvent être calculées à partir de l'équation pilote.

Une telle relation établit un lien quantitatif entre fluctuation de S (caractérisée par D) et dissipation de S (caractérisée par les Γ)

(ii) Sans entrer dans une description microscopique détaillée des phénomènes, on dispose souvent d'une description phénoménologique satisfaisante de la relaxation de S (au moyen de temps de relaxation, taux de transfert, temps de pompage ...). On peut alors introduire des Γ une équation pilote (voir III-37) qui permet de calculer l'évolution des moyennes à 1 temps. Les relations d'Einstein généralisées sont alors très utiles dans la mesure où elles permettent de calculer en fonctions des constantes phénoménologiques Γ les coefficients de diffusion D qui, comme nous le verrons sur les exemples concrets étudiés dans les chapitres ultérieurs, permettent d'étudier le "bruit" du système.

(iii) On voit sur la 2ème ligne que le coefficient de diffusion $D_{\alpha\beta}$ caractérise dans quelle mesure l'opération $\{\frac{d}{dt}\}$ viole la règle habituelle de dérivation d'un produit, ou si l'on veut encore dans quelle mesure l'évolution sans force de Langevin (et lissée) n'est pas hamiltonienne. En effet s'il y avait un hamiltonien effectif $\mathcal{H}_{eff}$ tel que $V_\alpha(t) = i\,[\mathcal{H}_{eff}, A_\alpha(t)]$ pour tout A_α, on aurait $D_{\alpha\beta} = 0$ (car on a la relation bien connue $[\mathcal{H}_{eff}, A\,B] = A\,[\mathcal{H}_{eff}, B] + [\mathcal{H}_{eff}, A]\,B$). En particulier les déplacements de niveaux de S sous l'effet du couplage $S-R$ ne contribuent pas au bruit.

7) Fonctions de corrélation des observables de S - Théorème de régression quantique.

- Le problème est de calculer les fonctions de corrélation $\langle A_\alpha(t)\, A_\gamma(t')\rangle_R$ (moyennes à 2 temps sur R d'opérateurs de S)
- Comme plus haut, nous renonçons à une analyse très fine de la dynamique (à l'échelle de τ_C) et nous nous contentons d'une évolution lissée

Plus précisément, nous supposons $t \geq t'$ (si $t' \geq t$, on prend l'adjoint du produit des 2 opérateurs) et nous calculons la vitesse d'évolution lissée, par rapport à t, de la fonction de corrélation en posant par exemple

$$\frac{\Delta}{\Delta t}\langle A_\alpha(t)\, A_\gamma(t')\rangle_R = \frac{1}{\Delta t}\Big[\langle A_\alpha(t+\Delta t)\, A_\gamma(t')\rangle_R - \langle A_\alpha(t)\, A_\gamma(t')\rangle_R\Big] \qquad (IV-40)$$

En utilisant (IV-20), on obtient alors

$$\frac{\Delta}{\Delta t}\langle A_\alpha(t)\, A_\gamma(t')\rangle_R = -\sum_\beta \langle A_\beta(t)\, A_\gamma(t')\rangle_R\, \Gamma_{\beta\alpha} + \frac{1}{\Delta t}\int_t^{t+\Delta t} \langle F_\alpha(t'')\, A_\gamma(t')\rangle_R\, dt'' \qquad (IV-41)$$

comme nous l'avons fait précédemment à plusieurs reprises, on vérifie aisément à partir de la figure 3 que la 2^{me} ligne de IV-41 a un ordre de grandeur très faible devant celui de la 1ère [$D\frac{\tau_c}{\Delta t}$ car $t'' > t'$] et peut donc être négligée.

Regroupons alors la 1ère ligne de (IV-41) avec l'équation obtenue en prenant la moyenne par rapport à R des 2 membres de IV-29

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\Delta}{\Delta t}\langle A_\alpha(t)\, A_\gamma(t')\rangle_R &= -\sum_\beta \langle A_\beta(t)\, A_\gamma(t')\rangle_R\, \Gamma_{\beta\alpha} \\ \frac{\Delta}{\Delta t}\langle A_\alpha(t)\rangle_R &= -\sum_\beta \langle A_\beta(t)\rangle_R\, \Gamma_{\beta\alpha} \end{aligned}} \qquad (IV-42)$$

Pour $t > t'$ et γ fixé, les fonctions de corrélation $\langle A_\alpha(t)\, A_\gamma(t')\rangle_R$ (α variable) satisfont en ce qui concerne la dépendance en t aux mêmes équations d'évolution couplées (~~...~~ et lissées) que les moyennes à 1 temps $\langle A_\alpha(t)\rangle_R$.

C'est le théorème de régression quantique qui permet de calculer les fonctions de corrélation à partir des Γ, c-à-d de l'équation pilote.

Remarque Si l'on part de l'équation exacte (IV-1), qu'on multiplie les 2 membres à droite par $A_\gamma = A_\gamma(0)$ (qui est un opérateur pur de S, non affecté par la moyenne sur R) et qu'on prend la moyenne des 2 membres sur R, on obtient (puisque $Tr_R\big(\sigma_R(0)\ F_\alpha(t)\, A_\gamma\big) = \big(Tr_R\, \sigma_R(0)\, F_\alpha(t)\big) A_\gamma = 0$)

$$\frac{d}{dt}\langle A_\alpha(t)\, A_\gamma(0)\rangle = -\sum_\beta e^{i(\omega_\beta-\omega_\alpha)t}\int_0^t d\tau\, \langle A_\beta(t-\tau)\, A_\gamma(0)\rangle\, \gamma_{\beta\alpha}(\tau) \qquad (IV-43)$$

équation qui a l'avantage d'être exacte mais l'inconvénient d'avoir l'un des 2 temps fixé à 0, alors que (IV-42) s'applique pour tout $t' \leq t$

(N'oublions pas que les fonctions de corrélation étudiées ici ne sont pas stationnaires comme dans le cours 77-78 puisqu'il s'agit d'une situation hors d'équilibre)