Exemples d'application des relations d'Einstein généralisées

Buts de ce chapitre

- Montrer sur des exemples concrets (système à 2 niveaux, oscillateur harmonique amorti) comment on peut calculer des coefficients de diffusion à partir des relations d'Einstein généralisées. Discuter la signification physique de quelques uns des résultats obtenus.
- Etablir des résultats qui seront utiles pour la suite (Fluctuations dans les lasers).
- Dans le cas de l'oscillateur harmonique, confronter les résultats obtenus avec ceux d'un modèle soluble exactement.

① Système à 2 niveaux "fermé"

a) Définition - Equations de relaxation phénoménologiques

- Le système à 2 niveaux de la figure 1 est dit fermé si les processus de relaxation n'induisent de transitions qu'entre les 2 niveaux 1 et 2.

  Par contre, dans un système à 2 niveaux ouvert, du type de celui étudié dans le § 2 ci-dessous, les niveaux 1 et 2 peuvent être "alimentés" à partir d'autres niveaux du système et se "vider" vers d'autres niveaux.

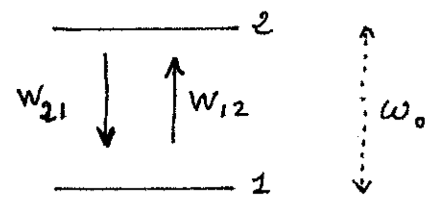

Fig. 1

- Les opérateurs A_α des chapitres précédents correspondent dans cet exemple aux 4 opérateurs :

$$n_2 = |2\rangle\langle 2| \qquad n_1 = |1\rangle\langle 1| \qquad \sigma_- = |1\rangle\langle 2|\, e^{-i\omega_0 t} \qquad \sigma_+ = |2\rangle\langle 1|\, e^{i\omega_0 t} \tag{V-1}$$

  n_2 et n_1 sont les populations des niveaux 1 et 2, $\sigma_\pm$ le dipole entre les 2 niveaux (le terme d'évolution propre, $e^{\pm i\omega_0 t}$, où ω_0 est la fréquence de la transition 1-2, est réintégré dans $\sigma_\pm$).

- Phénoménologiquement, la relaxation induit des transitions entre 1 et 2 avec un taux W_{12}, entre 2 et 1 avec un taux W_{21}. De plus, elle amortit le dipole avec un taux γ (en toute rigueur, il y a également un déplacement δ de la fréquence ω_0, mais nous ne nous en préoccuperons pas ici car il ne contribue pas aux coefficients de diffusion - voir remarque iii page IV-8). On en déduit les équations de Langevin-Mori suivantes :

$$\left\{\begin{aligned}
\frac{d}{dt} n_2 &= W_{12}\, n_1 - W_{21}\, n_2 + F_{n_2} \\
\frac{d}{dt} n_1 &= -W_{12}\, n_1 + W_{21}\, n_2 + F_{n_1} \\
\frac{d}{dt} \sigma_- &= -\gamma\, \sigma_- + F_{\sigma_-} \\
\frac{d}{dt} \sigma_+ &= -\gamma\, \sigma_+ + F_{\sigma_+}
\end{aligned}\right. \tag{V-2}$$

où $F_{n_2}, F_{n_1}, F_{\sigma_-}, F_{\sigma_+}$ sont les forces de Langevin associées à $n_2, n_1, \sigma_+, \sigma_-$ (et dont les moyennes sur R sont nulles).

b) Exemples physiques de tels systèmes

(i) Spin 1/2 - Equations de Bloch

Dans ce cas, les 2 niveaux 1 et 2 sont les 2 états $|-\rangle$ et $|+\rangle$ du spin 1/2, ω_0 la fréquence de Larmor, $\langle n_2 - n_1 \rangle$ (à un facteur près) l'aimantation longitudinale, $\langle \sigma_\pm \rangle$ l'aimantation transversale, $T_2 = \gamma^{-1}$ est le temps de relaxation transversale. En prenant les moyennes sur le réservoir des 2 premières équations (V-2), on obtient aisément

$$\frac{d}{dt}\langle n_2 - n_1 \rangle = (w_{12} - w_{21}) - (w_{12}+w_{21})\langle n_2 - n_1\rangle = (w_{12}+w_{21})\left[\frac{w_{12}-w_{21}}{w_{12}+w_{21}} - \langle n_2 - n_1 \rangle\right] \qquad (V\text{-}3)$$

On reconnait dans $w_{12}+w_{21}$ l'inverse, $\frac{1}{T_1}$, du temps de relaxation longitudinal, dans $\frac{w_{12}-w_{21}}{w_{12}+w_{21}}$ la différence de population $\langle n_2^0 - n_1^0 \rangle$ à l'équilibre.

En résumé, si l'on veut appliquer les résultats de ce § aux équations de Bloch il suffit d'utiliser la correspondance

$$\gamma = \frac{1}{T_2} \qquad w_{12}+w_{21} = \frac{1}{T_1} \qquad \frac{w_{12}-w_{21}}{w_{12}+w_{21}} = \langle n_2^0 - n_1^0 \rangle \qquad (V\text{-}4)$$

(ii) Emission spontanée.

Dans ce cas, 1 est le niveau fondamental, 2 le niveau de résonance optique. w_{21} est la probabilité Γ d'émission spontanée par unité de temps (Γ est la largeur naturelle de 2). $w_{12} = 0$ (l'émission spontanée ne se produit pas à partir du niveau fondamental). Enfin le dipole optique $\sigma_\pm$ s'amortit avec un taux $\gamma = \frac{\Gamma}{2}$ (demi-somme des largeurs Γ de 2 et 0 de 1). En résumé, il faut pour l'étude de l'émission spontanée, utiliser la correspondance :

$$w_{12} = 0 \qquad w_{21} = \Gamma \qquad \gamma = \frac{\Gamma}{2} \qquad (V\text{-}5)$$

c) Calcul des coefficients de diffusion.

- Il suffit d'utiliser les relations d'Einstein généralisées (IV-38):

$$2 D_{\alpha\beta} = \langle V_{\alpha\beta} \rangle_R - \langle A_\alpha V_\beta \rangle_R - \langle V_\alpha A_\beta \rangle_R \qquad (V\text{-}6)$$

avec les définitions suivantes des vitesses d'entrainement tirées de (V-2):

$$\begin{cases} V_{n_2} = w_{12}\, n_1 - w_{21}\, n_2 & V_{n_1} = -w_{12}\, n_1 + w_{21}\, n_2 \\ V_{\sigma_-} = -\gamma \sigma_- & V_{\sigma_+} = -\gamma\sigma_+ \end{cases} \qquad (V\text{-}7)$$

et les relations d'algèbre suivantes satisfaites par les A_α et qui découlent immédiatement des relations de définition V-1

$$\begin{cases} n_2^2 = n_2 & n_1^2 = n_1 & n_1 n_2 = n_2 n_1 = 0 & \\ \sigma_+\sigma_- = n_2 & \sigma_-\sigma_+ = n_1 & \sigma_+^2 = \sigma_-^2 = 0 & \\ n_2\sigma_+ = \sigma_+ & \sigma_+ n_2 = 0 & n_1\sigma_+ = 0 & \sigma_+ n_1 = \sigma_+ \\ n_2 \sigma_- = 0 & \sigma_- n_2 = \sigma_- & n_1 \sigma_- = \sigma_- & \sigma_- n_1 = 0 \end{cases} \qquad (V\text{-}8)$$

- Premier exemple de calcul : $D_{\sigma_+\sigma_-}$

Comme $\sigma_+\sigma_- = n_2$, la relation (V-6) s'écrit

$$2D_{\sigma_+\sigma_-} = \langle V_{n_2}\rangle - \langle \sigma_+ V_{\sigma_-}\rangle - \langle V_{\sigma_+}\sigma_-\rangle$$
$$= w_{12}\langle n_1\rangle - w_{21}\langle n_2\rangle + \gamma\langle\sigma_+\sigma_-\rangle + \gamma\langle\sigma_+\sigma_-\rangle$$
$$= w_{12}\langle n_1\rangle + (2\gamma - w_{21})\langle n_2\rangle \qquad (V-9)$$

- Deuxième exemple de calcul : $D_{n_2\sigma_-}$
Comme $n_2\sigma_- = 0$, il vient

$$2D_{n_2\sigma_-} = 0 - \langle n_2 V_{\sigma_-}\rangle - \langle V_{n_2}\sigma_-\rangle$$
$$= \gamma\underbrace{\langle n_2\sigma_-\rangle}_{=0} - w_{12}\underbrace{\langle n_1\sigma_-\rangle}_{=\langle\sigma_-\rangle} + w_{21}\underbrace{\langle n_2\sigma_-\rangle}_{=0} = -w_{12}\langle\sigma_-\rangle \qquad (V-10)$$

- On obtient ainsi de proche en proche l'ensemble de résultats suivants regroupés sous forme d'une matrice $2D_{\alpha\beta}$ (matrice des coefficients de diffusion)

$2D_{\alpha\beta} =$

$\alpha \backslash \beta$	n_1	n_2	σ_-	σ_+
n_1	$w_{12}\langle n_1\rangle + w_{21}\langle n_2\rangle$	$-w_{12}\langle n_1\rangle - w_{21}\langle n_2\rangle$	$w_{12}\langle\sigma_-\rangle$	$-w_{21}\langle\sigma_+\rangle$
n_2	$-w_{12}\langle n_1\rangle - w_{21}\langle n_2\rangle$	$w_{12}\langle n_1\rangle + w_{21}\langle n_2\rangle$	$-w_{12}\langle\sigma_-\rangle$	$w_{21}\langle\sigma_+\rangle$
σ_-	$-w_{21}\langle\sigma_-\rangle$	$w_{21}\langle\sigma_-\rangle$	0	$(2\gamma - w_{12})\langle n_1\rangle + w_{21}\langle n_2\rangle$
σ_+	$w_{12}\langle\sigma_+\rangle$	$-w_{12}\langle\sigma_+\rangle$	$w_{12}\langle n_1\rangle + (2\gamma - w_{21})\langle n_2\rangle$	0

(V-11)

- Dans le cas de l'émission spontanée, cette matrice se simplifie et devient, compte tenu de (V-5) :

$2D_{\alpha\beta} =$

$\alpha \backslash \beta$	n_1	n_2	σ_-	σ_+
n_1	$\Gamma\langle n_2\rangle$	$-\Gamma\langle n_2\rangle$	0	$-\Gamma\langle\sigma_+\rangle$
n_2	$-\Gamma\langle n_2\rangle$	$\Gamma\langle n_2\rangle$	0	$\Gamma\langle\sigma_+\rangle$
σ_-	$-\Gamma\langle\sigma_-\rangle$	$\Gamma\langle\sigma_-\rangle$	0	Γ
σ_+	0	0	0	0

(V-12)

Pour $D_{\sigma_-\sigma_+}$ on a utilisé dans (V-12) la relation $\langle n_1\rangle + \langle n_2\rangle = 1$ qui se déduit aisément de (V-1) et (V-2) et qui est caractéristique du fait que le système soit fermé.

- C'est pour la même raison ($n_1 + n_2 = 1$ ne varie pas) que la somme des 2 premières lignes ou des 2 premières colonnes de (V-11) ou (V-12) est nulle $D_{\alpha, n_1+n_2} = D_{n_1+n_2, \beta} = 0$

- On notera enfin que $D_{\alpha\beta}$ est en général différent de $D_{\beta\alpha}$ ce qui montre bien le caractère quantique de ces coefficients de diffusion.

d) Discussion physique

L'interprétation physique des coefficients $D_{\alpha\beta}$ repose sur la relation (IV-28)

$$\langle \Delta A_\alpha(t)\, \Delta A_\beta(t) \rangle_R = 2 D_{\alpha\beta}(t)\, \Delta t \qquad (V\text{-}13)$$

[avec $\Delta A_\alpha(t) = A_\alpha(t+\Delta t) - A_\alpha(t)$] qui permet de les interpréter comme des coefficients de diffusion décrivant la manière dont A_α et A_β diffusent sous l'effet des forces fluctuantes qu'ils subissent de la part du réservoir.

1er exemple _ Comme premier exemple, nous allons considérer l'émission spontanée et étudier comment, dans l'état fondamental, c-à-d dans un état où les valeurs moyennes n'évoluent plus (état d'équilibre), le bruit apparaît sur "l'aimantation transversale" ou encore le "dipole".

De manière plus précise nous allons calculer $\langle [\Delta\sigma_x(t)]^2 + [\Delta\sigma_y(t)]^2 \rangle_R$ où σ_x et σ_y sont définis par

$$\sigma_\pm = \sigma_x \pm i\,\sigma_y \qquad (V\text{-}14)$$

– Auparavant, rappelons "l'image classique" que l'on peut se faire d'un spin 1/2 dans l'état $|-\rangle$.
σ_z a une valeur bien définie $(-\frac{1}{2})$
De même $\vec{\sigma}^2$ $(\frac{3}{4})$

On peut donc se représenter un vecteur $\overrightarrow{OM}$ (fig. 2), de longueur $\sqrt{\frac{3}{4}}$, dont la projection sur Oz vaut $OH = -\frac{1}{2}$. Le carré de la composante transversale vaut donc $MH^2 = \frac{3}{4} - \frac{1}{4} = \frac{1}{2}$.

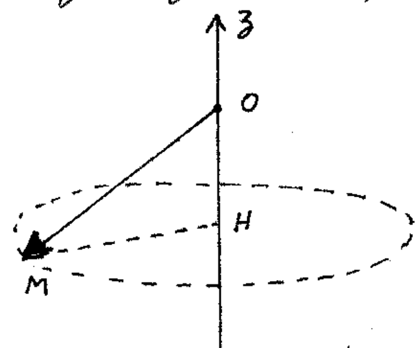

Fig 2

Comme $\langle\sigma_x\rangle$ et $\langle\sigma_y\rangle$ sont nuls dans l'état $|-\rangle$, l'extrémité du vecteur $\overrightarrow{OM}$ de la figure 2 n'est pas connue avec certitude et est équipartie sur le cercle de cette figure. Un tel résultat est bien en accord avec le résultat que donne le calcul de la valeur moyenne de $\sigma_x^2 + \sigma_y^2$ dans l'état –

$$\langle -|\sigma_x^2 + \sigma_y^2|-\rangle = \frac{1}{2}\langle -|\sigma_+\sigma_- + \sigma_-\sigma_+|-\rangle = \frac{1}{2} \qquad (V\text{-}15)$$

– Revenons maintenant au problème quantique. On a, d'après (V-12):

$$\langle [\Delta\sigma_x(t)]^2 + [\Delta\sigma_y(t)]^2 \rangle_R = \frac{1}{2}\langle \Delta\sigma_+(t)\,\Delta\sigma_-(t) + \Delta\sigma_-(t)\,\Delta\sigma_+(t)\rangle_R$$

$$= \frac{1}{2}\left[2D_{\sigma_+\sigma_-} + 2D_{\sigma_-\sigma_+}\right]\Delta t = \Gamma\,\Delta t \qquad (V\text{-}16)$$

On peut interpréter ce résultat en considérant, qu'à partir d'une position de départ bien définie sur le cercle de la fig 2, le vecteur classique associé au spin 1/2 diffuse sur le cercle avec un coefficient de diffusion Γ. Au bout d'un temps long devant Γ^{-1} il va se retrouver de nouveau équiparti sur le cercle en ayant perdu toute mémoire de sa position de départ.

Ainsi dans l'état $|-\rangle$, bien que les valeurs moyennes n'évoluent plus (état d'équilibre), le couplage avec le champ électromagnétique du vide (responsable de l'émission spontanée) fait fluctuer le système en permanence.

– Remarquons enfin que l'équation (V-16) est valable quel que soit l'état initial du spin puisque, d'après les tableaux (V-12) (ou (V-11)), $2(D_{\sigma_+\sigma_-} + D_{\sigma_-\sigma_+}) = 2\Gamma$ (ou 2γ) ne dépend pas de l'écart à l'équilibre.

2ème exemple

Considérons toujours l'émission spontanée, mais calculons maintenant le bruit sur l'aimantation longitudinale

$$\sigma_3 = \frac{1}{2}(n_2 - n_1) \qquad \text{(V-17)}$$

le coefficient de diffusion $D_{\sigma_3\sigma_3}$ s'écrit donc, compte tenu de (V-12) :

$$2D_{\sigma_3\sigma_3} = \frac{1}{4}\, 2\left[D_{n_2n_2} + D_{n_1n_1} - D_{n_1n_2} - D_{n_2n_1}\right] = \Gamma \langle n_2 \rangle \qquad \text{(V-18)}$$

de sorte que

$$\langle [\Delta\sigma_3(t)]^2 \rangle = \Gamma \langle n_2(t) \rangle \, \Delta t \qquad \text{(V-19)}$$

A la différence du cas précédent, on a ici une grandeur physique qui diffuse d'une manière d'autant plus importante que le système est plus loin de l'équilibre. Lorsque l'atome est dans l'état excité ($\langle n_2 \rangle = 1$), le coefficient de diffusion a la plus grande valeur possible, Γ. Puis ce coefficient décroît exponentiellement en même temps que $\langle n_2(t) \rangle$ pour s'annuler dans l'état fondamental où σ_3 ne fluctue plus ($\langle n_2 \rangle = 0$).

2) Système à 2 niveaux ouvert

a) Définition - Equations de relaxation phénoménologiques

- Nous considérons maintenant un système qui jouera un rôle important dans l'étude du bruit dans les lasers qui sera abordé dans les chapitres suivants.

- Il s'agit d'atomes actifs d'un milieu laser dont les états 1 et 2 (de la transition laser) sont peuplés par divers processus (collisions, pompage optique ...) à partir d'autres niveaux i, j ... de l'atome avec des taux $w_{j2}\, n_j$, $w_{i1}\, n_i$ ...

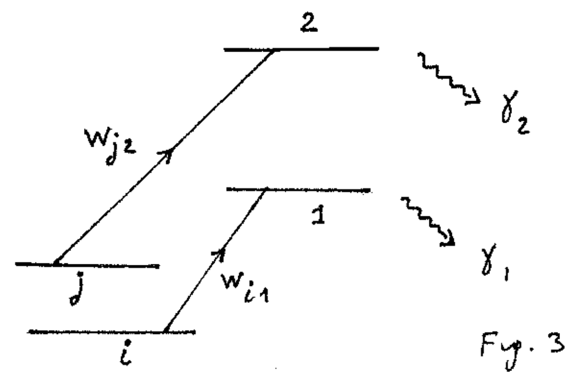

Fig. 3

Les états 1 et 2 se désexcitent (radiativement ou non) vers les autres niveaux atomiques avec des taux γ_1 et γ_2 (fig. 3). Pour simplifier un petit peu l'écriture dans les formules qui suivront, nous avons négligé les transferts entre 1 et 2 décrits par w_{12} et w_{21} (il serait tout à fait possible d'en tenir compte).

Enfin, comme plus haut, le dipôle entre 1 et 2 s'amortit avec un taux γ (qui n'est pas forcément la demi-somme de γ_1 et γ_2, à cause par exemple de collisions déphasantes ...)

- Dans un tel système la somme $n_1 + n_2$ des populations de 1 et 2 n'est évidemment pas constante puisque les niveaux 1 et 2 sont en communication avec les autres niveaux atomiques (c'est la somme de toutes les populations $\sum_k n_k$ qui est égale à 1). C'est la raison pour laquelle le système à 2 niveaux 1, 2 est dit "ouvert".

– Si l'on introduit les taux de pompage λ_2 et λ_1 de 2 et 1

$$\lambda_2 = \sum_{j\neq 1,2} w_{j2}\, n_j \qquad\qquad \lambda_1 = \sum_{i\neq 1,2} w_{i1}\, n_i \qquad (V-20)$$

les équations de Langevin - Mori du système s'écrivent (avec les mêmes notations qu'en (V-1)] :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} n_2 = \lambda_2 - \gamma_2 n_2 + F_{n_2} \\ \frac{d}{dt} n_1 = \lambda_1 - \gamma_1 n_1 + F_{n_1} \\ \frac{d}{dt} \sigma_- = -\gamma\, \sigma_- + F_{\sigma_-} \\ \frac{d}{dt} \sigma_+ = -\gamma\, \sigma_+ + F_{\sigma_+} \end{cases} \qquad (V-21)$$

Remarque Il ne faut pas perdre de vue que λ_2 et λ_1 ne sont pas des nombres mais des opérateurs proportionnels aux populations de niveaux autre que 1 et 2 [voir (V-20)]. En particulier

$$\lambda_2 n_2 = \sum_{j\neq 1,2} w_{j2}\, n_j\, n_2 = \sum_{j\neq 1,2} w_{j2}\, |j\rangle\langle j|2\rangle\langle 2| = 0 \qquad (V-22)$$

et de même $\lambda_1 n_1 = \lambda_2 n_1 = \lambda_1 n_2 = n_1 \lambda_1 = \dots = 0$ (V-23)

Par contre il arrive très fréquemment que $\langle\lambda_2\rangle$ et $\langle\lambda_1\rangle$ puissent être considérés comme indépendants du temps si les niveaux i et j qui alimentent 1 et 2 sont très peuplés (niveaux fondamentaux ou métastables) et très peu affectés par les variations de populations de 1 et 2. C'est ce que nous supposerons désormais.

b) Matrice des coefficients de diffusion

Les calculs sont tout à fait analogues à ceux du § 1 et conduisent aux résultats suivants

$2D_{\alpha\beta} =$

$\alpha \backslash \beta$	n_1	n_2	σ_-	σ_+
n_1	$\langle\lambda_1\rangle + \gamma_1\langle n_1\rangle$	0	$\gamma_1 \langle\sigma_-\rangle$	0
n_2	0	$\langle\lambda_2\rangle + \gamma_2\langle n_2\rangle$	0	$\gamma_2\langle\sigma_+\rangle$
σ_-	0	$\gamma_2\langle\sigma_-\rangle$	0	$\langle\lambda_1\rangle + (2\gamma-\gamma_1)\langle n_1\rangle$
σ_+	$\gamma_1\langle\sigma_+\rangle$	0	$\langle\lambda_2\rangle + (2\gamma-\gamma_2)\langle n_2\rangle$	0

(V-24)

3) Oscillateur harmonique amorti.

a) Définition - Equations de relaxation phénoménologiques

– L'une des motivations d'étude d'un tel système est qu'un mode d'une cavité laser est, en l'absence d'atomes, un oscillateur harmonique amorti (par suite de la diffraction et des pertes sur les parois de la cavité). Nous aurons donc besoin dans les chapitres suivants des résultats obtenus ci-dessous.

Une autre motivation est qu'il existe un modèle simple de réservoir (réservoir constitué lui même d'un grand nombre d'oscillateurs harmoniques indépendants et en équilibre) pour lequel il est possible de mener les calculs jusqu'au bout et sans approximations. On peut ainsi avoir une idée des moments d'ordre plus élevé (> 2) des forces de Langevin.

- Commençons dans ce § par une approche basée sur des équations phénoménologiques (comme dans les § 1 et 2 ci-dessus)

Sous l'effet de la relaxation, la position et la vitesse d'un oscillateur harmonique s'amortissent avec un taux κ. Il en est donc de même des opérateurs de création et d'annihilation a^+ et a. Les équations de Langevin-Mori de a et a^+ s'écrivent donc :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} a^+ = -\kappa a^+ + F_{a^+} \\ \frac{d}{dt} a = -\kappa a + F_a \end{cases} \qquad (V\text{-}25)$$

(les termes d'évolution propre $e^{\pm i\omega_0 t}$, où ω_0 est la fréquence propre de l'oscillateur, ont été réintégrés dans a et a^+ - Le déplacement éventuel de la fréquence ω_0 dû à la relaxation a été omis car il ne contribue pas aux coefficients de diffusion).

Les termes quadratiques en a et a^+, a^2, a^{+2}, a^+a, aa^+ s'amortissent avec un taux 2κ et tendent vers leurs valeurs d'équilibre qui sont 0 pour a^2 et a^{+2}, $\langle n_0\rangle$ et $\langle n_0\rangle+1$ pour a^+a et aa^+, où $\langle n_0\rangle$ est la valeur moyenne de a^+a à l'équilibre thermodynamique à la température T

$$\langle n_0 \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega_0/kT} - 1} \qquad (V\text{-}26)$$

Les équations de Langevin-Mori de a^2, a^{+2}, a^+a, aa^+ s'écrivent donc :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} a^2 = -2\kappa a^2 + F_{a^2} \qquad \frac{d}{dt} a^{+2} = -2\kappa a^{+2} + F_{a^{+2}} \\ \frac{d}{dt} a^+a = 2\kappa(\langle n_0\rangle - a^+a) + F_{a^+a} \\ \frac{d}{dt} aa^+ = 2\kappa(\langle n_0\rangle + 1 - aa^+) + F_{aa^+} \end{cases} \qquad (V\text{-}27)$$

b) <u>Calcul de quelques coefficients de diffusion</u>.

- Nous aurons besoin dans les chapitres suivants des coefficients de diffusion D_{a^+a} D_{aa^+} D_{aa} $D_{a^+a^+}$
- De (V-25) et (V-27), on déduit les valeurs suivantes pour les vitesses d'entraînement V

$$V_a = -\kappa a \qquad V_{a^+} = -\kappa a^+ \qquad V_{aa} = -2\kappa a^2 \qquad V_{a^+a^+} = -2\kappa a^{+2}$$

$$V_{a^+a} = 2\kappa(\langle n_0\rangle - a^+a) \qquad V_{aa^+} = 2\kappa(\langle n_0\rangle + 1 - aa^+) \qquad (V\text{-}28)$$

En appliquant la formule fondamentale (V-6), on obtient alors aisément :

$2D_{\alpha\beta} =$ (V-29)

$\alpha \backslash \beta$	a	a^+
a	0	$2\kappa(\langle n_0\rangle+1)$
a^+	$2\kappa\langle n_0\rangle$	0

Les moments d'ordre 2 des forces de Langevin F_a et F_{a^+} ne dépendent donc pas de l'écart à l'équilibre.

④ <u>Etude d'un modèle entièrement soluble</u>

a) <u>Hamiltonien</u>

- Le système S est l'oscillateur harmonique précédent (a, a^+, ω_0) d'hamiltonien (on prend $\hbar = 1$) :

$$H_S = \omega_0(a^+a + 1/2) \qquad (V\text{-}30)$$

– Le réservoir R est constitué par un très grand nombre d'oscillateurs i (b_i, b_i^+, ω_i) indépendants. Son hamiltonien H_R est donc

$$H_R = \sum_i \omega_i (b_i^+ b_i + 1/2) \qquad (V-31)$$

Le réservoir est en équilibre thermodynamique à la température T :

$$\sigma_R(0) = \prod_i \sigma_i^{eq} \qquad \sigma_i^{eq} = \left(Tr\, e^{-\omega_i b_i^+ b_i/kT}\right)^{-1} e^{-\omega_i b_i^+ b_i/kT} \qquad (V-32)$$

– L'hamiltonien d'interaction V entre S et R s'écrit

$$V = \sum_i g_i (a\, b_i^+ + a^+ b_i) \qquad (V-33)$$

et décrit des processus où S gagne un quantum au profit de l'oscillateur i et réciproquement (g_i est une constante de couplage entre S et l'oscillateur i).

b) <u>Equations de Heisenberg.</u>

– L'équation de Heisenberg de a s'écrit

$$i \frac{d}{dt} a = [a, H_R + H_S + V] \qquad (V-34)$$

En utilisant $[a, a^+] = 1$ $\quad [a, a^+ a] = a$, on obtient aisément :

$$i \dot{a} = \omega_0 a + \sum_i g_i b_i \qquad (V-35)$$

– Comme b_i apparait dans (V-35), il est intéressant de considérer également l'équation de Heisenberg de b_i que l'on trouve aisément être :

$$i \dot{b}_i = [b_i, H_R + H_S + V] = \omega_i b_i + g_i a \qquad (V-36)$$

– On peut aisément éliminer les termes d'évolution propre de (V-35) et (V-36) en posant

$$a = \tilde{a}\, e^{-i\omega_0 t} \qquad b_i = \tilde{b}_i\, e^{-i\omega_i t} \qquad (V-37)$$

ce qui donne

$$\begin{cases} i \dot{\tilde{a}} = \sum_i g_i \tilde{b}_i\, e^{i(\omega_0 - \omega_i)t} & (V-38) \\ i \dot{\tilde{b}}_i = g_i \tilde{a}\, e^{i(\omega_i - \omega_0)t} & (V-39) \end{cases}$$

(Nous ne mettrons plus désormais les ~ sur a et b_i pour simplifier les notations)

c) <u>Equations de Langevin – Mori.</u>

– Si l'on intègre (V-39) entre 0 et t et que l'on reporte le résultat ainsi obtenu dans (V-38), on obtient

$$\frac{d}{dt} a(t) = -\sum_i g_i^2 \int_0^t dt'\, a(t')\, e^{i(\omega_0 - \omega_i)(t-t')} - i \sum_i g_i\, b_i(0)\, e^{i(\omega_0 - \omega_i)t} \qquad (V-40)$$

équation que l'on peut écrire (en posant $\tau = t - t'$) :

$$\frac{d}{dt} a(t) = -\int_0^t d\tau\, \gamma(\tau)\, a(t-\tau) + F(t) \qquad (V-41)$$

avec

$$\begin{cases} \gamma(\tau) = \sum_i g_i^2\, e^{i(\omega_0 - \omega_i)\tau} & (V-42) \\ F(t) = -i \sum_i g_i\, e^{i(\omega_0 - \omega_i)t}\, b_i(0) & (V-43) \end{cases}$$

– On vérifie bien ainsi sur cet exemple que l'on peut mettre les équations d'évolution des opérateurs de S sous forme d'équations de Langevin – Mori avec un terme de friction retardée et une force de Langevin.

De plus, on obtient des expressions explicites des coefficients de friction et des forces de Langevin qui vont nous permettre d'une part de vérifier les valeurs obtenues plus haut (§ 3) pour les coefficients de diffusion, d'autre part de calculer les moments d'ordre plus élevé des forces de Langevin.

Remarque On peut se demander si l'approche très simple utilisée ici (écriture des équations de Heisenberg pour les observables de S et R, puis élimination des observables de R) ne serait pas généralisable à tous les autres problèmes. En fait, c'est la très grande simplicité du modèle discuté ici et qui ne fait intervenir que des oscillateurs harmoniques (systèmes très linéaires), qui permet de mener les calculs si simplement. Il suffirait de remplacer les oscillateurs de R par des systèmes à 2 niveaux pour tomber sur des équations (correspondant à V-38 et V-39) ne se prêtant pas bien à une élimination des opérateurs de R (des produits d'opérateurs de S et R apparaissent alors au second membre de V-39). Il faut alors nécessairement avoir recours à des méthodes plus élaborées, comme celle des opérateurs de projection.

d) Expression du taux d'amortissement

- Si l'on fait l'approximation de mémoire courte, ou mieux si l'on effectue un "lissage" de l'équation (V-41) [voir page IV-3], on fait apparaître le taux d'amortissement $\int_0^\infty d\tau\, \gamma(\tau)$ que l'on peut calculer explicitement à partir de l'expression (V-42) de $\gamma(\tau)$
- Si le réservoir R est très grand, il contient un nombre très grand d'oscillateurs, et on peut, à la limite, remplacer la somme discrète $\sum_i$ par une intégrale

$$\sum_i \longrightarrow \int d\omega\, \rho(\omega) \qquad \text{(V-44)}$$

où $\rho(\omega)$ est la densité d'oscillateurs de R de fréquence ω [et de constante de couplage $g(\omega)$]. On peut alors écrire (V-42) sous la forme

$$\gamma(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, [g(\omega)]^2 \rho(\omega)\, e^{i(\omega_0-\omega)\tau} \qquad \text{(V-45)}$$

ce qui donne par suite

$$\int_0^\infty \gamma(\tau)\, d\tau = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \int_0^\infty d\tau\, [g(\omega)]^2 \rho(\omega)\, e^{i(\omega_0-\omega)\tau}$$

$$= \lim_{\varepsilon\to 0_+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \int_0^\infty d\tau\, [g(\omega)]^2 \rho(\omega)\, e^{i(\omega_0-\omega+i\varepsilon)\tau} = K + i\delta \qquad \text{(V-46)}$$

avec

$$K = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left(\lim_{\varepsilon\to 0_+} \frac{\varepsilon}{(\omega_0-\omega)^2+\varepsilon^2}\right) \rho(\omega)[g(\omega)]^2 = \pi\, \rho(\omega_0)\, [g(\omega_0)]^2 \qquad \text{(V-47)}$$

$$\delta = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left(\lim_{\varepsilon\to 0_+} \frac{\omega_0-\omega}{(\omega_0-\omega)^2+\varepsilon^2}\right) \rho(\omega)\, [g(\omega)]^2 = \mathcal{P}\int \frac{\rho(\omega)\,[g(\omega)]^2\, d\omega}{\omega_0-\omega} \qquad \text{(V-48)}$$

[δ est le déplacement de fréquence de S dû au couplage et que nous avons omis au § 3 car il ne contribue pas au bruit].

e) Calcul des moments d'ordre 1 et 2 des forces de Langevin

- Comme les divers oscillateurs i sont indépendants, et chacun en équilibre thermodynamique, on a

$$\langle b_i\rangle_R = \langle b_i^+\rangle_R = \langle b_i b_j\rangle_R = \langle b_i^+ b_j^+\rangle_R = 0$$

$$\langle b_i^+ b_j\rangle_R = \langle n_i\rangle \delta_{ij} \qquad \langle b_i b_j^+\rangle = (\langle n_i\rangle + 1)\,\delta_{ij} \qquad \text{(V-49)}$$

où $\langle n_i\rangle$ est donné par une expression du type V-26 (ω_i remplaçant ω_0)
- On déduit alors de (V-43) que

$$\langle F(t)\rangle_R = \langle F^+(t)\rangle_R = \langle F(t)\,F(t')\rangle_R = \langle F^+(t)\,F^+(t')\rangle_R = 0 \qquad \text{(V-50)}$$

- Calculons par contre $\langle F^+(t)\,F(t')\rangle$. On déduit de (V-43), (V-49) et (V-44) que

$$\langle F^+(t)F(t')\rangle_R = \sum_i\sum_j g_i g_j \langle b_i^+ b_j\rangle_R\, e^{-i(\omega_0-\omega_i)t}\, e^{i(\omega_0-\omega_j)t'}$$

$$= \int d\omega\,[g(\omega)]^2 \rho(\omega)\langle n(\omega)\rangle\, e^{-i(\omega_0-\omega)(t-t')} \qquad \text{(V-51)}$$

Pour obtenir le coefficient de diffusion $2D_{a^+a}$, il faut intégrer (V-51) sur $\tau = t-t'$ de $-\infty$ à $+\infty$

$$2D_{a^+a} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\,[g(\omega)]^2 \rho(\omega)\langle n(\omega)\rangle\, e^{-i(\omega_0-\omega)\tau} = 2\pi[g(\omega_0)]^2\rho(\omega_0)\langle n_0\rangle = 2\kappa\langle n_0\rangle \qquad \text{(V-52)}$$

(On a utilisé $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(\omega_0-\omega)\tau}\,d\tau = 2\pi\,\delta(\omega_0-\omega)$ et la relation V-47). Un calcul très analogue donnerait $2D_{aa^+} = 2\kappa(\langle n_0\rangle+1)$, ce qui confirme ainsi tous les résultats du tableau (V-29).

f) <u>Calcul des moments d'ordre supérieur à 2 des forces de Langevin</u>.

- Comme la valeur moyenne à l'équilibre d'un produit d'un nombre impair de b ou b^+ est nulle, tous les moments impairs des forces F et F^+ sont nuls.
- Calculons un moment d'ordre pair supérieur à 2, par exemple

$$\langle F^+(t_1)F(t_2)F(t_3)F^+(t_4)\rangle_R = \sum_i\sum_j\sum_k\sum_l g_ig_jg_kg_l\,\langle b_i^+ b_j b_k b_l^+\rangle_R\, e^{-i(\omega_0-\omega_i)t_1}\, e^{i(\omega_0-\omega_j)t_2}\, e^{i(\omega_0-\omega_k)t_3}\, e^{-i(\omega_0-\omega_l)t_4} \qquad \text{(V-53)}$$

On est donc ramené au calcul de $\langle b_i^+ b_j b_k b_l^+\rangle_R$. Comme les divers oscillateurs sont <u>indépendants</u>, on voit, compte tenu de (V-49), que les seuls termes non nuls sont

$$\langle b_i^+ b_j b_k b_l^+\rangle_R = \underset{i\neq k}{\delta_{ij}\delta_{kl}}\langle b_i^+b_i\rangle_R\langle b_kb_k^+\rangle_R + \underset{i\neq j}{\delta_{ik}\delta_{jl}}\langle b_i^+b_i\rangle_R\langle b_j^+b_j\rangle_R + \delta_{ij}\delta_{ik}\delta_{il}\langle b_i^+b_ib_ib_i^+\rangle_R \qquad \text{(V-54)}$$

Lors de la sommation sur i, j, k, l, on peut négliger la contribution du dernier terme de (V-54) (terme "carré") devant celle des 2 autres (termes "rectangles" beaucoup plus nombreux), et simultanément laisser tomber les restrictions $i\neq k$ et $i\neq j$ dans les 2 premiers termes. On obtient alors, en reportant (V-54) dans (V-53) :

$$\langle F^+(t_1)F(t_2)F(t_3)F^+(t_4)\rangle_R = \langle F^+(t_1)F(t_2)\rangle_R\langle F(t_3)F^+(t_4)\rangle_R + \langle F^+(t_1)F(t_3)\rangle_R\langle F(t_2)F^+(t_4)\rangle_R \qquad \text{(V-55)}$$

relation qui permet de calculer un moment d'ordre 4 en fonction des moments d'ordre 2, et tout à fait analogue à la relation correspondante pour une fonction aléatoire gaussienne [Voir cours 77-78 page IV-6]

- Des calculs analogues peuvent être faits pour les moments pairs supérieurs et montrent que F et F^+ ont des moments gaussiens.

<u>Remarques</u>

(i) On peut écrire le 2° membre de (V-54) sous la forme (V-56)

$$\delta_{ij}\delta_{kl}\langle b_i^+b_i\rangle_R\langle b_kb_k^+\rangle_R + \delta_{ik}\delta_{jl}\langle b_i^+b_i\rangle_R\langle b_jb_j^+\rangle_R + \delta_{ij}\delta_{ik}\delta_{il}\left(\langle b_i^+b_ib_ib_i^+\rangle_R - 2\langle b_i^+b_i\rangle_R\langle b_ib_i^+\rangle_R\right)$$

sans aucune restriction sur i et k, ou sur i et j dans les 2 premiers termes. On peut alors montrer que, comme l'oscillateur i est en équilibre thermodynamique, le dernier terme de (V-56) est nul, ce qui entraîne que V-55 est exact et ne repose sur aucune approximation concernant les termes "carrés" et "rectangles".

(ii) On peut montrer que le caractère gaussien de F a son origine profonde dans 2 raisons : 1) F ne dépend pas des observables de S (ceci est dû au fait que S est un oscillateur harmonique) 2) S est couplé à un très grand nombre de systèmes (i) indépendants (qui pourraient être autre choses que des oscillateurs)

Lorsque S n'est plus un oscillateur harmonique, mais un système à 2 niveaux comme dans les §§ 1 et 2 ci-dessus, on peut montrer que les forces de Langevin F, qui dépendent alors des observables de S (à cause des non-linéarités de S), sont nécessairement non-gaussiennes, quel que soit R. Voir I.R. SENITZKY Phys. Rev. <u>161</u>, 165 (1967)