Etablissement de l'équation cinétique du mouvement Brownien sur un modèle simple (suite).

Dans ce cours, nous allons appliquer la méthode de l'équation pilote, rappelée dans l'appendice du cours VIII, à l'hamiltonien de Caldeira-Leggett : $\mathcal{S}$ est la particule Brownienne, $\mathcal{R}$ le réservoir d'oscillateurs harmoniques auxquels cette particule est couplée.

③ Moyennes à 1 et 2 temps de la force de Langevin

- L'hamiltonien d'interaction H_{SR} de l'hamiltonien de Caldeira-Leggett (8.2) a la forme générale (8.37) avec :

$$S = X \qquad (9.1.a) \qquad\qquad R = \sum_\alpha C_\alpha X = \sum_\alpha C_\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2m_\alpha\omega_\alpha}}\,(a_\alpha + a_\alpha^+) \qquad (9.1.b)$$

(Le contre terme H_{CT}, qui ne dépend que de X, peut être regroupé avec H_S)

- L'observable du réservoir qui figure dans l'hamiltonien d'interaction est donc (9.1.b), qui s'écrit en représentation d'interaction

$$\tilde{R}(t) = \sum_\alpha C_\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2m_\alpha\omega_\alpha}}\left[a_\alpha e^{-i\omega_\alpha t} + a_\alpha^+ e^{i\omega_\alpha t}\right] \qquad (9.2)$$

puisque

$$\tilde{a}_\alpha^+(t) = e^{iH_R t/\hbar}\, a_\alpha^+\, e^{-iH_R t/\hbar} = a_\alpha^+ e^{i\omega_\alpha t} = [a_\alpha(t)]^+ \qquad (9.3)$$

On reconnait en (9.2) la force de Langevin (8.21) qui apparait dans l'équation de Heisenberg-Langevin (8.33) de $P(t)$.

Les moyennes à 2 temps qui figurent dans l'équation pilote (8.54) sont donc des moyennes à 2 temps de la force de Langevin. Pour les calculer et pour vérifier que R satisfait bien aux conditions (8.45) et (8.46) que nous avons supposées pour établir l'équation pilote, nous devons au préalable préciser les hypothèses faites sur l'état du réservoir.

a) Hypothèses sur l'état du réservoir

- Nous supposons qu'à $t=0$ l'état du système global $\mathcal{S}+\mathcal{R}$ est, comme dans (8.44), factorisé

$$\sigma(0) = \sigma_S(0)\,\sigma_R(0) \qquad (9.4)$$

- Nous supposons que $\sigma_R(0)$ est diagonal dans la base des états propres de H_R, repérés par les nombres de quanta n_α de chaque oscillateur harmonique ω_α

$$\sigma_R(0) = \prod_\alpha \sigma_R^\alpha(0) \qquad (9.5.a)$$

$$\langle n_\alpha | \sigma_R^\alpha(0) | n'_\alpha \rangle = P_{n_\alpha}\,\delta_{n_\alpha n'_\alpha} \qquad (9.5.b)$$

P_{n_α} étant la probabilité d'avoir n_α quanta dans l'oscillateur α. On a alors

$$\langle a_\alpha \rangle = \langle a_\alpha^+ \rangle = 0 \qquad (9.6.a)$$

$$\langle a_\alpha^+ a_\alpha \rangle = \sum_{n_\alpha=0}^{\infty} n_\alpha P_{n_\alpha} = \langle n_\alpha \rangle \qquad (9.6.b)$$

$$\langle a_\alpha a_\alpha^+ \rangle = \langle n_\alpha \rangle + 1 \qquad (9.6.c)$$

où n_α est le nombre moyen de quanta dans l'oscillateur α.

Il est clair que l'état (9.5) satisfait aux 2 conditions (8.45) et (8.46)

$$[\sigma_R(0), H_R] = 0 \qquad (9.7.a) \qquad\qquad \langle R \rangle = \mathrm{Tr}[R\,\sigma_R(0)] = 0 \qquad (9.7.b)$$

- Dans le cas de l'équilibre thermodynamique à la température T, on a

$$\langle n_\alpha \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega_\alpha / k_B T} - 1} \qquad (9.8)$$

- D'autres conditions initiales possibles sont étudiées dans les références (1, 2)

b) Parties réelle et imaginaire de $\langle R\tilde{R}(-\tau)\rangle_R$. Fonction de corrélation symétrique et susceptibilité linéaire.

- La moyenne à 2 temps

$$\langle R\tilde{R}(-\tau)\rangle_R = \langle \tilde{R}(0)\tilde{R}(-\tau)\rangle_R = \mathrm{Tr}\{\sigma_R(0)\,\tilde{R}(0)\tilde{R}(-\tau)\} = \langle \tilde{R}(-\tau) R\rangle_R^* \qquad (9.9)$$

qui figure dans l'équation pilote (8.54) peut être écrite

$$\langle R\,\tilde{R}(-\tau)\rangle = C(\tau) - \frac{i\hbar}{2}\chi(\tau) \qquad (9.10)$$

où $C(\tau)$ et $\chi(\tau)$ sont 2 fonctions réelles de τ

$$\begin{cases} C(\tau) = \frac{1}{2}\langle \tilde{R}(0)\tilde{R}(-\tau) + \tilde{R}(-\tau)\tilde{R}(0)\rangle_R & (9.11.a) \\ \chi(\tau) = \frac{i}{\hbar}\langle [\tilde{R}(0), \tilde{R}(-\tau)]\rangle_R \,\theta(\tau) & (9.11.b) \end{cases}$$

On a rajouté la fonction de Heaviside $\theta(\tau)$ à (9.11.b) car, dans l'équation pilote (8.54), l'intégrale sur τ est limitée aux valeurs positives de τ.

On reconnait en $C(\tau)$ la fonction de corrélation symétrique de R évoluant librement dans l'état d'équilibre $\sigma_R(0)$. Quant à $\chi(\tau)$, c'est la susceptibilité linéaire du réservoir dans l'état d'équilibre $\sigma_R(0)$. Plus précisément, on peut montrer (voir par exemple la référence 3) que si le réservoir $\mathcal{R}$ est soumis à la perturbation $-\lambda(t)R$, où $\lambda(t)$ est une fonction donnée de t, la valeur moyenne à l'instant t de R dans l'état ainsi perturbé du réservoir s'écrit, à l'ordre 1 en λ

$$\langle R(t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, \chi(\tau)\,\lambda(t-\tau) \qquad (9.12)$$

Calcul de $C(\tau)$

Compte tenu de (9.2), (9.5) et (9.6), on a

$$C(\tau) = \mathcal{R}e \sum_\alpha C_\alpha^2 \frac{\hbar}{2m_\alpha\omega_\alpha}\left[\langle n_\alpha\rangle e^{i\omega_\alpha\tau} + (\langle n_\alpha\rangle + 1)\, e^{-i\omega_\alpha\tau}\right] \qquad (9.13)$$

c'est à dire encore, en passant à la limite continue et en utilisant (8.23), (8.24) et .26)

$$C(\tau) = \frac{2M\gamma}{\pi}\int_0^{\omega_c} \hbar\omega\left(\langle n(\omega)\rangle + \frac{1}{2}\right)\cos\omega\tau\, d\omega$$

$$= \frac{2M\gamma}{\pi}\int_0^{\omega_c} \langle E(\omega)\rangle \cos\omega\tau\, d\omega \qquad (9.14)$$

où $\langle E(\omega)\rangle$ est l'énergie moyenne des oscillateurs de fréquence ω.

<u>Calcul de $\chi(\tau)$</u> De la même façon, on obtient, pour $\tau > 0$

$$\chi(\tau) = -\frac{2}{\hbar} \mathcal{I}m \sum_\alpha C_\alpha^2 \frac{\hbar}{2m_\alpha\omega_\alpha}\left[\langle n_\alpha\rangle e^{i\omega_\alpha\tau} + (\langle n_\alpha\rangle + 1)e^{-i\omega_\alpha\tau}\right]$$

$$= \frac{2M\gamma}{\pi}\int_0^{\omega_c} \omega \sin\omega\tau \; d\omega \qquad (9.15)$$

On constate bien que $\chi(\tau)$ ne dépend pas de l'état du réservoir (voir remarque (i), p. VIII-5) alors que $C(\tau)$ en dépend. On peut donc calculer tout de suite $\chi(\tau)$. Pour cela, partons de

$$\int_0^{\omega_c} \cos\omega\tau \; d\omega = \frac{1}{2}\int_{-\omega_c}^{+\omega_c} \cos\omega\tau \; d\omega = \frac{1}{4}\int_{-\omega_c}^{+\omega_c}\left[e^{i\omega\tau} + e^{-i\omega\tau}\right] d\omega = \pi\,\delta_c(\tau) \qquad (9.16)$$

où $\delta_c(\tau)$ est la fonction delta de largeur ω_c^{-1} introduite en (8.30). On a alors

$$\chi(\tau) = -\frac{2M\gamma}{\pi}\frac{d}{d\omega}\int_0^{\omega_c} \cos\omega\tau \; d\omega = -2M\gamma\,\delta_c'(\tau) \qquad (9.17)$$

c) <u>Calcul de $C(\tau)$ pour un réservoir en équilibre thermodynamique à la limite classique</u>

- Pour un réservoir en équilibre thermodynamique, on peut utiliser (9.8). La limite classique correspond à

$$k_B T \gg \hbar\omega_c \qquad (9.18)$$

Pour tous les oscillateurs du réservoir, on a alors

$$\langle n(\omega)\rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_BT} - 1} \simeq \frac{k_BT}{\hbar\omega} \gg 1 \qquad (9.19)$$

Rappelons que nous avons déja supposé $\omega_c \gg \gamma$ (voir (8.34)).

- Si l'on reporte (9.19) dans (9.14) et qu'on néglige 1/2 devant $\langle n(\omega)\rangle$, on obtient, compte tenu de (9.19) et (9.16)

$$C(\tau) = \frac{2M\gamma}{\pi} k_BT \int_0^{\omega_c} \cos\omega\tau \; d\omega = 2M\gamma\, k_BT\,\delta_c(\tau) = 2D\,\delta_c(\tau) \qquad (9.20)$$

On a utilisé la relation $D = M\gamma k_B T$ (voir (6.8))

On retrouve bien qu'à la limite classique, la fonction de corrélation de $\tilde{R}(t)$ ($\tilde{R}$ n'est autre que la force de Langevin) est une fonction de τ très étroite dont l'aire n'est autre que 2 fois le coefficient de diffusion de l'impulsion.

- Finalement, à la limite classique, on peut écrire, compte tenu de (9.10), (9.17) et (9.20)

$$\langle R\,\tilde{R}(-\tau)\rangle_R = 2D\,\delta_c(\tau) + i\hbar M\gamma\,\delta_c'(\tau) \qquad (9.21.a)$$

$$\langle \tilde{R}(-\tau)\,R\rangle_R = 2D\,\delta_c(\tau) - i\hbar M\gamma\,\delta_c'(\tau) \qquad (9.21.b)$$

Il apparait ainsi clairement qu'à la limite classique, toutes les moyennes à 2 temps qui figurent dans l'équation pilote (8.54), ont des largeurs en τ très petites de l'ordre de ω_c^{-1}. La petitesse de ce temps de corrélation $\tau_c \sim \omega_c^{-1}$ devant le temps γ^{-1} d'évolution caractéristique de la particule Brownienne est une condition essentielle pour que l'on puisse utiliser l'équation pilote (8.54)

4) Equation pilote

a) Calcul de $\tilde{X}(-\tau)$

Pour expliciter les différents termes de (8.54), avec $S = X$, il ne reste plus qu'à calculer

$$\tilde{X}(-\tau) = e^{-iH_S\tau/\hbar}\, X\, e^{iH_S\tau/\hbar} = e^{-iP^2t/2M\hbar}\, X\, e^{iP^2t/2M\hbar} \qquad (9.22)$$

En utilisant $[X, F(P)] = i\hbar\, dF/dP$, on obtient immédiatement

$$\tilde{X}(-\tau) = X - \frac{P\tau}{M} \qquad (9.23)$$

qui correspond bien à l'évolution libre d'une particule de vitesse P/M en X à $\tau = 0$.

b) Contribution des fluctuations du réservoir

– C'est la contribution de la partie réelle des moyennes à 2 temps $\langle R\tilde{R}(-\tau)\rangle$, proportionnelle à la fonction de corrélation symétrique $C(\tau)$ qui décrit la dynamique des fluctuations du réservoir. Physiquement, les termes correspondants de l'équation pilote décrivent l'effet des fluctuations du réservoir polarisant le petit système et interagissant avec la polarisation induite (voir réf. 4)

– Dans (8.54), remplaçons S par X, $\tilde{S}(-\tau)$ par (9.23) et $\langle R\tilde{R}(-\tau)\rangle$ et $\langle\tilde{R}(-\tau)R\rangle$ par $2D\,\delta_c(\tau)$. On obtient pour l'ensemble des 2 derniers termes et en écrivant pour simplifier $\sigma(t)$ au lieu de $\sigma_S(t)$

$$-\frac{1}{\hbar^2}\int_0^\infty d\tau\, 2D\,\delta_c(\tau)\left\{X\left(X-\frac{P\tau}{M}\right)\sigma(t) - \left(X-\frac{P\tau}{M}\right)\sigma(t)X + \sigma(t)\left(X-\frac{P\tau}{M}\right)X - X\sigma(t)\left(X-\frac{P\tau}{M}\right)\right\} \qquad (9.24)$$

– Les termes en $XP\tau/M$ font intervenir $\int_0^\infty \tau\,\delta_c(\tau)\,d\tau \sim \tau_c \sim \frac{1}{\omega_c}$ et ont une contribution négligeable devant celle des termes en X^2 qui ne contiennent pas de ω_c au dénominateur

Nous les négligerons donc ici (Si on les gardait, on obtiendrait dans l'équation d'évolution de la fonction de Wigner $w(x,p,t)$ des termes en $\partial^2 w/\partial x\,\partial p$, représentant des petites corrections non-markoviennes).

– Pour les termes en X^2, on obtient, en remplaçant $\int_0^\infty \delta_c(\tau)\,d\tau$ par $1/2$ ($\delta_c(\tau)$ est pair)

$$-\frac{D}{\hbar^2}\left[X^2\sigma(t) - 2X\sigma(t)X + \sigma(t)X^2\right] = -\frac{D}{\hbar^2}\left[X,[X,\sigma(t)]\right] \qquad (9.25)$$

c) Contribution de la susceptibilité du réservoir

– C'est la contribution de la partie imaginaire des moyennes à 2 temps du réservoir, proportionnelle d'après (2.10) à la susceptibilité du réservoir. Physiquement, ces termes de l'équation pilote décrivent le phénomène suivant : Le petit système $\mathcal{S}$ polarise le réservoir $\mathcal{R}$ qui réagit en retour sur $\mathcal{S}$.

– En utilisant les parties imaginaires des 2 équations (9.21), on obtient pour les 2 derniers termes de (8.54)

$$-\frac{i}{\hbar}M\gamma\int_0^\infty d\tau\, \delta_c'(\tau)\left\{X\left(X-\frac{P\tau}{M}\right)\sigma(t) - \left(X-\frac{P\tau}{M}\right)\sigma(t)X - \sigma(t)\left(X-\frac{P\tau}{M}\right)X + X\sigma(t)\left(X-\frac{P\tau}{M}\right)\right\} \qquad (9.26)$$

Termes en X^2

$$-\frac{i}{\hbar}M\gamma\underbrace{\left[\int_0^\infty d\tau\,\delta_c'(\tau)\right]}_{-\delta_c(0)}\underbrace{\left[X^2\sigma - X\sigma X - \sigma X^2 + X\sigma X\right]}_{[X^2,\sigma]} \quad (9.27)$$

Comme, d'après (8.30), $\delta_c(0) = \omega_c/\pi$, ce terme vaut

$$-\frac{1}{i\hbar}\left[\frac{M\gamma\omega_c}{\pi}X^2, \sigma(t)\right] \quad (9.28)$$

Termes en XP

$$-\frac{i}{\hbar}\gamma\left\{\int_0^\infty \tau\,\delta_c'(\tau)\,d\tau\right\}\left\{-XP\sigma(t) + P\sigma(t)X + \sigma(t)PX - X\sigma(t)P\right\} \quad (9.29)$$

Après une intégration par parties, on trouve que la 1ère accolade de (9.29) vaut $-1/2$. Quant à la 2ème accolade, elle vaut $-[X, P\sigma(t)+\sigma(t)P]$, de sorte que le terme en XP de (9.26) vaut

$$-\frac{i}{\hbar}\frac{\gamma}{2}\left[X, P\sigma(t)+\sigma(t)P\right] \quad (9.30)$$

Finalement, la contribution de la susceptibilité du réservoir vaut

$$-\frac{1}{i\hbar}\left[\frac{M\gamma\omega_c}{\pi}X^2, \sigma(t)\right] - \frac{i}{\hbar}\frac{\gamma}{2}\left[X, P\sigma(t)+\sigma(t)P\right] \quad (9.31)$$

d) Récapitulation – Forme opératorielle de l'équation pilote

– Il ne reste qu'à étudier le 1er terme de (8.54) qui, si l'on revient à (8.2), contient à la fois le terme $P^2/2M$ et le contre-terme H_{CT} qui ne dépend que d'opérateurs de $\mathcal{S}$. Si l'on utilise

$$\sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{2m_\alpha\omega_\alpha^2} = \frac{1}{\pi}\int_0^{\omega_c} d\omega\,\frac{J_c(\omega)}{\omega} = \frac{M\gamma\omega_c}{\pi} \quad (9.32)$$

La contribution du contre-terme à l'équation pilote

$$\frac{1}{i\hbar}\left[H_{CT}, \sigma(t)\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{M\gamma\omega_c}{\pi}X^2, \sigma(t)\right] \quad (9.33)$$

est exactement compensée par le 1er terme de (9.31), de sorte que le 1er terme de (8.54) se réduit à $\frac{1}{i\hbar}\left[\frac{P^2}{2M}, \sigma(t)\right]$

– Finalement, en récapitulant tous les résultats précédents, on obtient pour la forme opératorielle de l'équation pilote

$$\frac{d}{dt}\sigma(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{P^2}{2M}, \sigma(t)\right] - \frac{i}{\hbar}\frac{\gamma}{2}\left[X, P\sigma(t)+\sigma(t)P\right] - \frac{D}{\hbar^2}\left[X,[X,\sigma(t)]\right] \quad (9.34)$$

e) Equation correspondante pour $C(u,v,t)$

– D'après le cours V, si à l'opérateur densité σ est associée la fonction caractéristique $C(u,v,t)$, on connait les fonctions caractéristiques associées à $X\sigma$, σX, $P\sigma$, σP (voir (5.41))

$$\sigma X \to -\left(\frac{u}{2} + i\hbar\partial_v\right)C(u,v) \qquad X\sigma \to \left(\frac{u}{2} - i\hbar\partial_v\right)C(u,v)$$

$$\sigma P \to \left(\frac{v}{2} - i\hbar\partial_u\right)C(u,v) \qquad P\sigma \to -\left(\frac{v}{2} + i\hbar\partial_u\right)C(u,v) \quad (9.35)$$

On en déduit que

$$\frac{1}{i\hbar}\left[\frac{P^2}{2M}, \sigma\right] \to \frac{1}{2i\hbar M}\left[\left(\frac{v}{2}+i\hbar\partial_u\right)^2 - \left(\frac{v}{2}-i\hbar\partial_u\right)^2\right]C(u,v) = \frac{1}{M}v\frac{\partial}{\partial u}C(u,v) \quad (9.36)$$

$$-\frac{i}{\hbar}\frac{\gamma}{2}\left[X, P\sigma+\sigma P\right] = -\frac{i}{\hbar}\frac{\gamma}{2}\left[XP\sigma + X\sigma P - P\sigma X - \sigma P X\right]$$

$$\rightarrow -\frac{i}{\hbar}\frac{\gamma}{2}\Big\{-\left(\tfrac{u}{2}-i\hbar\partial_v\right)\left(\tfrac{v}{2}+i\hbar\partial_u\right) + \left(\tfrac{u}{2}-i\hbar\partial_v\right)\left(\tfrac{v}{2}-i\hbar\partial_u\right)$$
$$-\left(\tfrac{v}{2}+i\hbar\partial_u\right)\left(\tfrac{u}{2}+i\hbar\partial_v\right) + \left(\tfrac{u}{2}+i\hbar\partial_v\right)\left(\tfrac{v}{2}-i\hbar\partial_u\right)\Big\}\, C(u,v)$$

$$= -\gamma u \frac{\partial}{\partial u} C(u,v) \tag{9.37}$$

$$-\frac{D}{\hbar^2}\left[X,\left[X,\sigma\right]\right] = -\frac{D}{\hbar^2}\left[X^2\sigma - 2X\sigma X + \sigma X^2\right]$$

$$\rightarrow -\frac{D}{\hbar^2}\Big\{\left(\tfrac{u}{2}-i\hbar\partial_v\right)^2 + 2\left(\tfrac{u}{2}-i\hbar\partial_v\right)\left(\tfrac{u}{2}+i\hbar\partial_v\right) + \left(\tfrac{u}{2}+i\hbar\partial_v\right)^2\Big\} = -\frac{Du^2}{\hbar^2} C(u,v) \tag{9.38}$$

En regroupant tous ces résultats, on obtient

$$\frac{\partial}{\partial t} C(u,v,t) = \frac{1}{M} v \frac{\partial}{\partial u} C(u,v,t) - \gamma u \frac{\partial}{\partial u} C(u,v,t) - \frac{D}{\hbar^2} u^2 C(u,v,t) \tag{9.39}$$

qui coincide avec l'équation donnée sans démonstration dans le cours VI (voir (6.11))

Finalement, nous avons ainsi démontré que le modèle de Caldeira-Leggett redonne bien l'équation pilote et par suite l'équation de Fokker-Planck qui a servi de base à la discussion physique des cours VI et VII

(5) Généralisation au cas d'une particule Brownienne dans un potentiel harmonique (voir aussi ref. 7)

En vue d'applications ultérieures, nous généralisons maintenant le traitement qui précède au cas où la particule Brownienne est, en l'absence de couplage avec le réservoir, un oscillateur harmonique de masse M et de fréquence ω_0, auquel cas nous avons vu plus haut (voir (8.15)) qu'il faut remplacer H_S par

$$H_S = \frac{P^2}{2M} + V(X) \tag{9.40}$$

tous les autres termes de (8.2) restant inchangés.

a) Nouvelle expression de $\tilde{X}(-\tau)$

En représentation d'interaction par rapport à H_S, les équations du mouvement de $\tilde{X}$ et $\tilde{P}$ sont

$$\dot{\tilde{X}} = \frac{\tilde{P}}{M} \quad (9.41.a) \qquad\qquad \dot{\tilde{P}} = -M\omega_0^2 \tilde{X} \quad (9.41.b)$$

dont la solution à l'instant $-\tau$ pour $\tilde{X}$, correspondant à la condition initiale $\tilde{X}(0) = X$, $\tilde{P}(0) = P$ s'écrit

$$\tilde{X}(-\tau) = X\cos\omega_0\tau - \frac{P}{M\omega_0}\sin\omega_0\tau \tag{9.42}$$

On vérifie que (9.42) redonne bien (9.23) à la limite $\omega_0 \rightarrow 0$

b) Condition pour que les autres termes de l'équation pilote soient les mêmes que pour la particule libre

Les moyennes à 2 temps de l'observable R du réservoir sont les mêmes que plus haut et s'écrivent toujours sous la forme

(9.21). Leur largeur en τ est de l'ordre de τ_C. Pour que tous les calculs faits dans les §§ 4b et 4c précédents restent valables, il faut que, pour $\tau \lesssim \tau_C$, on puisse assimiler $\cos\omega_0\tau$ à 1 et $\sin\omega_0\tau$ à $\omega_0\tau$. Comme $\tau_C \sim \omega_C^{-1}$, il faut donc que

$$\omega_0 \ll \omega_C \tag{9.43}$$

Si donc la condition (9.43) est vérifiée, de même bien sur que (8.34) et (9.18), on en déduit que l'équation pilote de l'oscillateur harmonique couplé au réservoir $\mathcal{R}$ est

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{P^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega_0^2X^2, \sigma(t)\right] - \frac{i}{\hbar}\frac{\gamma}{2}\left[X, P\sigma(t)+\sigma(t)P\right] - \frac{D}{\hbar^2}\left[X,\left[X,\sigma(t)\right]\right] \tag{9.44}$$

Le nouveau terme $\frac{1}{i\hbar}\left[\frac{1}{2}M\omega_0^2X^2, \sigma(t)\right]$ fait apparaître, au $2^{\text{ème}}$ membre de l'équation donnant $\partial C(u,v,t)/\partial t$, un nouveau terme $-M\omega_0^2 u \frac{\partial}{\partial v} C(u,v,t)$, et de même au $2^{\text{ème}}$ membre de l'équation donnant $\partial w(x,p,t)/\partial t$ le nouveau terme $M\omega_0^2 x \frac{\partial}{\partial p} w(x,p,t)$.

c) Discussion physique

(i) Possibilité de décrire un oscillateur harmonique suramorti par une équation pilote

– La démonstration précédente permettant d'aboutir à (9.44) ne suppose rien sur les valeurs relatives de γ et ω_0. On peut très bien avoir

$$\gamma \gg \omega_0 \tag{9.45}$$

c'est à dire un oscillateur suramorti tout en conservant l'équation pilote (9.44), pourvu bien sur que γ reste très petit devant k_BT et $\hbar\omega_C$.

– Contrairement à ce que croient certains auteurs, la description d'un oscillateur suramorti par une équation pilote n'est pas incorrecte. Ce qui est important c'est que le temps de relaxation γ^{-1} soit très long devant le temps de corrélation ω_C^{-1}.

Dans un tout autre domaine, personne ne remettrait en cause les équations de Bloch de la RMN en champs magnétique très faible (quand la fréquence de Larmor ω_0 des spins devient petite devant $1/T_2$ et $1/T_1$).

(ii) La condition $k_BT \gg \hbar\omega_C$ est-elle essentielle ?

– Revenons à l'expression (9.14) de $C(\tau)$ (Rappelons que $\chi(\tau)$ ne dépend pas de l'état du réservoir et donc de sa température) L'énergie moyenne $\langle E(\omega)\rangle$ des oscillateurs du réservoir de fréquence ω reste constante et égale à k_BT tant que $\hbar\omega \ll k_BT$. Si k_BT était inférieur à $\hbar\omega_C$, on aurait pour $\langle E(\omega)\rangle$ une courbe restant constante et égale à k_BT tant que $\hbar\omega \ll k_BT$, puis variant avec une échelle de variation caractéristique $k_BT/\hbar$ pour ω variant entre k_BT et $\hbar\omega_C$, et enfin s'annulant pour $\omega > \omega_C$.

– La courbe $\langle E(\omega)\rangle$ a donc 2 échelles de variations en ω, $k_BT/\hbar$ et ω_c. Sa transformée de Fourier a par suite 2 échelles de variation en τ, $\hbar/k_BT$ et ω_c^{-1} dont le plus long est $\hbar/k_BT$. Pour qu'on puisse la considérer comme une fonction delta vis à vis des fonctions de τ variant à l'échelle γ^{-1}, il faut donc que

$$k_BT \gg \hbar\gamma \tag{9.46}$$

Il semble donc que l'équation pilote (9.44) reste valable même si $k_BT \ll \hbar\omega_c$, pourvu que l'on ait toujours $k_BT \gg \hbar\gamma$.

(iii) Limite des basses températures pour un oscillateur suramorti

– Si $k_BT \gg \hbar\gamma$, le traitement par équation pilote n'est plus valable car les effets non-markoviens sont alors non négligeables

– Parmi les traitements possibles d'un tel cas, on peut citer : les calculs exacts (réf. 1), car l'hamiltonien (8.2) avec $H_S = P^2/2M$ ou H_S donné par (9.40) est diagonalisable (réf. 5) ; les méthodes d'intégrales de chemin (réf. 6)

(iv) Simplifications pour un oscillateur sous-amorti ($\gamma \ll \omega_0$)

– Supposons

$$\gamma \ll \omega_0 \tag{9.47}$$

Si la transformée de Fourier $\hat{C}(\omega)$ de $C(\tau)$ varie très lentement sur un intervalle de largeur γ autour de ω_0, on peut considérer cette fonction comme plate et la remplacer par une constante égale à $\hat{C}(\omega_0)$. Concrètement, ceci revient à remplacer $\langle E(\omega)\rangle$ par $\langle E(\omega_0)\rangle$ dans (9.14). L'approximation markovienne est alors justifiée et la description par équation pilote valable.

– L'argument précédent explique pourquoi il est possible de décrire un oscillateur harmonique sous amorti même au zéro absolu ($T = 0°K$). En effet dans ce cas, tous les oscillateurs du reservoir sont dans leur état fondamental et l'échelle de variation de $\hat{C}(\omega)$ autour de $\omega = \omega_0$, qui est de l'ordre de ω_0, est très grande devant γ. Comme exemple d'une telle situation, on peut citer l'émission spontanée de photons par une charge élastiquement liée. Dans ce cas, le reservoir R est constitué par l'ensemble des modes du champ electromagnétique dans l'état vide, c'est à dire à $T = 0°K$. De plus, comme le couplage charge-rayonnement est faible (il est caractérisé par la constante de structure finie $\alpha = 1/137$), on a bien $\gamma \ll \omega_0$

– Pour conclure ce paragraphe, nous allons montrer qu'on peut déduire des calculs des §§ 4 et 5 ci dessus la forme de l'équation pilote d'un oscillateur harmonique sous-amorti à $T = 0°K$. Si, comme nous l'avons justifié plus haut, on remplace $\langle E(\omega)\rangle$ par $\langle E(\omega_0)\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ dans (9.14), on obtient

$$C(\tau) \simeq \frac{M\hbar\gamma\omega_0}{\pi}\int_0^{\omega_c} \cos\omega\tau \, d\omega = M\hbar\gamma\omega_0\,\delta_c(\tau) \tag{9.48}$$

On a utilisé (9.16). Il suffit donc, dans les parties réelles de

(9.21.a) et (9.21.b), de remplacer $2D$ par $M\hbar\gamma\omega_0$ (Rappelons que les parties imaginaires sont reliées à la susceptibilité du réservoir, qui ne dépend pas de l'état de ce dernier, et garde donc la même valeur à $T=0°K$). Comme tous les calculs qui suivent (9.21) sont les mêmes, il suffit de remplacer, dans (9.44) D par $M\hbar\gamma\omega_0/2$

Appelons b^+ et b les opérateurs de création et d'annihilation de l'oscillateur $\mathcal{S}$. On a

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0}}(b+b^+) \qquad P = i\sqrt{\frac{\hbar M\omega_0}{2}}(b^+-b) \tag{9.49}$$

En remplaçant X et P par (9.49) dans (9.44) et D par $M\hbar\gamma\omega_0/2$ on obtient

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = -i\omega_0\left[b^+b,\sigma\right] + \frac{\gamma}{4}\left[b+b^+,(b^+-b)\sigma+\sigma(b^+-b)\right] - \frac{\gamma}{4}\left[b+b^+,\left[b+b^+,\sigma\right]\right] \tag{9.50}$$

Les termes de relaxation (en γ), contiennent, soit $2b$, soit $2b^+$, soit $1\,b$ et $1\,b^+$. Comme $\gamma \ll \omega_0$, on peut faire l'approximation séculaire, qui consiste à négliger les termes de l'équation pilote couplant entre eux des éléments de matrice densité évoluant à des fréquences propres différentes (par exemple, couplage entre populations et cohérences). On peut alors se convaincre aisément que les termes séculaires sont ceux qui contiennent $1\,b$ et $1\,b^+$. En négligeant les autres, on obtient finalement à partir de 9.50

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = -i\omega_0\left[b^+b,\sigma(t)\right] - \frac{\gamma}{2}\left[b^+b\,\sigma(t)+\sigma(t)\,b^+b\right] + \gamma\, b\,\sigma(t)\,b^+ \tag{9.51}$$

qui coïncide avec le résultat de la référence (8) pour $T=0°K$

Des applications intéressantes de cette équation seront discutées dans le cours suivant.

Références

(1) F. Haake, R. Reibold, Phys. Rev. A 32, 2462 (1985)

(2) V. Hakim, V. Ambegaokar, Phys. Rev. A32, 423 (1985)

(3) C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, "Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique", Exercice 6 du Complément E_{IV} (Interéditions et Editions du CNRS, Paris 1987)

(4) J. Dalibard, J. Dupont-Roc, C. Cohen-Tannoudji, J. Physique 43, 1617 (1982) et 45, 637 (1984)

(5) P. Ullersma, Physica 32, 27 (1966); 32, 56 (1966); 32, 74 (1966); 32, 90 (1966)

(6) A. Caldeira, A. Leggett, Phys. Rev. A31, 1059 (1985)

(7) C.M. Savage, D.F. Walls, Phys. Rev. A32, 2316 (1985)

(8) C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, "Processus d'interaction entre photons et atomes", complément B_{IV} (Interéditions et éditions du CNRS, Paris 1988)