

## ⑤ Etude complète de l'évolution temporelle d'une particule Brownienne partant d'un état initial gaussien.

### But de ce paragraphe

Après avoir indiqué dans les paragraphes précédents comment il était possible de résoudre l'équation du mouvement d'une particule Brownienne décrite par divers types de fonctions caractéristiques, nous discutons maintenant en détail le contenu physique de la solution de ces équations dans un cas où elle peut être écrite explicitement (état initial de la particule correspondant à un paquet d'ondes gaussien)

Le but poursuivi est de montrer que, lorsque le couplage avec l'environnement croît (par exemple, lorsque la densité des particules légères entrant en collision avec la particule Brownienne croît),

- (i) les cohérences spatiales sont détruites de plus en plus vite
- (ii) la distribution de probabilité de la position est de plus en plus "gelée".

### a) Etat initial gaussien

- Fonction d'onde

$$\psi(x) = \left(\frac{2}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/\sigma^2} e^{i p_0 x/\hbar} \quad (7.1)$$

Fonction d'onde normée, centrée en  $x=0$ , de largeur  $\sigma$ , avec une impulsion moyenne  $p_0$ .

- Matrice densité en représentation  $x$ . D'après (5.53),

$$\begin{aligned} F_0(x, u) &= \langle x + \frac{u}{2} | \rho_0 | x - \frac{u}{2} \rangle = \psi(x + \frac{u}{2}) \psi^*(x - \frac{u}{2}) \\ &= \left(\frac{2}{\pi\sigma^2}\right)^{1/2} e^{-2x^2/\sigma^2} e^{-u^2/2\sigma^2} e^{i p_0 u/\hbar} \end{aligned} \quad (7.2)$$

- Fonction caractéristique  $C_0(u, v)$ . D'après l'inverse de (5.49),

$$\begin{aligned} C_0(u, v) &= \int dx e^{i v x/\hbar} F_0(x, u) \\ &= e^{-v^2\sigma^2/8\hbar^2} e^{-u^2/2\sigma^2} e^{i p_0 u/\hbar} \end{aligned} \quad (7.3)$$

- Fonction de Wigner  $w_0(x, p)$ . D'après (5.54) et (5.53),

$$\begin{aligned} w_0(x, p) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int du e^{-i p u/\hbar} F(x, u) \\ &= \frac{1}{\hbar\pi} e^{-2x^2/\sigma^2} e^{-(p-p_0)^2\sigma^2/2\hbar^2} \end{aligned} \quad (7.4)$$

### b) Etat de la particule à l'instant $t$

#### Fonction caractéristique $C(u, v, t)$

- Le problème a déjà été résolu dans le § 4. Voir (6.57) et (6.58). Comme on connaît l'expression (7.3) de  $C_0$ , on a

$$C_0\left(ue^{-\delta t} + \frac{v}{M\gamma}(1-e^{-\delta t}), v\right) = e^{-\left[ue^{-\delta t} + \frac{v}{M\gamma}(1-e^{-\delta t})\right]^2/2\sigma^2} \times \quad \text{VII-2}$$

$$\times e^{-v^2\sigma^2/8\hbar^2} e^{iP_0\left[ue^{-\delta t} + \frac{v}{M\gamma}(1-e^{-\delta t})\right]/\hbar} \quad (7.5)$$

c'est à dire encore

$$C_0\left(ue^{-\delta t} + \frac{v}{M\gamma}(1-e^{-\delta t}), v\right) = \exp\left\{-L(t)u^2 - 2M(t)uv - N(t)v^2 + iJ(t)u + iK(t)v\right\} \quad (7.6)$$

avec

$$L(t) = \frac{e^{-2\delta t}}{2\sigma^2} \quad (7.7.a)$$

$$M(t) = \frac{e^{-\delta t}(1-e^{-\delta t})}{2M\gamma\sigma^2} \quad (7.7.b)$$

$$N(t) = \frac{(1-e^{-\delta t})^2}{2M^2\gamma^2\sigma^2} + \frac{\sigma^2}{8\hbar^2} \quad (7.7.c)$$

$$J(t) = P_0 e^{-\delta t}/\hbar \quad (7.7.d)$$

$$K(t) = \frac{P_0}{\hbar M\gamma} (1-e^{-\delta t}) \quad (7.7.e)$$

- En reportant (7.6) dans (6.57), on obtient, compte tenu de (7.7) et (6.58)

$$C(u, v, t) = \exp\left\{-A(t)u^2 - 2B(t)uv - C(t)v^2 + iJ(t)u + iK(t)v\right\} \quad (7.8)$$

$$A(t) = \frac{D}{\hbar^2} \frac{1-e^{-2\delta t}}{2\gamma} + \frac{e^{-2\delta t}}{2\sigma^2} \quad (7.9.a)$$

$$B(t) = \frac{D}{\hbar^2} \frac{1}{M\gamma} \left[ \frac{1-e^{-\delta t}}{\gamma} - \frac{1-e^{-2\delta t}}{2\gamma} \right] + \frac{e^{-\delta t}(1-e^{-\delta t})}{2M\gamma\sigma^2} \quad (7.9.b)$$

$$C(t) = \frac{D}{\hbar^2} \frac{1}{M^2\gamma^2} \left[ \frac{1-e^{-2\delta t}}{2\gamma} - 2\frac{1-e^{-\delta t}}{\gamma} + t \right] + \frac{(1-e^{-\delta t})^2}{2M^2\gamma^2\sigma^2} + \frac{\sigma^2}{8\hbar^2} \quad (7.9.c)$$

$J(t)$  et  $K(t)$  étant déjà donnés en (7.7.d) et (7.7.e).

Comme  $C(u, v, t)$  est l'exponentielle d'une fonction quadratique de  $u$  et  $v$ , on peut calculer exactement la transformée de Fourier de  $C(u, v, t)$  et en déduire  $F(x, u, t)$  et  $w(x, p, t)$

Représentation  $x$   $F(x, u, t) = \langle x + \frac{u}{2} | \rho(t) | x - \frac{u}{2} \rangle$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dv e^{-ivx/\hbar} C(u, v, t)$$

$$\hookrightarrow F(x, u, t) = \frac{1}{2\hbar\sqrt{\pi C}} e^{-\frac{(x-\hbar K)^2}{4\hbar^2 C}} \exp\left\{-\left(A - \frac{B^2}{C}\right)u^2 + \frac{iBu}{\hbar C}(x-\hbar K) + iJu\right\} \quad (7.10)$$

On en déduit immédiatement la distribution de probabilité de  $x$

$$\langle x | \rho(t) | x \rangle = R(x, t) = F(x, 0, t) \quad (7.11)$$

$$R(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi 4\hbar^2 C(t)}} e^{-\frac{[x-\hbar K(t)]^2}{4\hbar^2 C(t)}} \quad (7.12)$$

On obtient pour  $R(x, t)$  une gaussienne centrée en  $\hbar K(t)$  et de largeur  $\Delta x$  telle que  $\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 2\hbar^2 C(t)$

Fonction de Wigner  $w(x, p, t)$   $= \frac{1}{2\pi\hbar} \int du e^{-ipu/\hbar} F(x, u, t)$

On obtient, à partir de (7.10)

$$w(x, p, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\hbar^2 C(t)}} \frac{1}{\sqrt{4\pi\hbar^2 (A(t) - \frac{B^2(t)}{C(t)})}} \exp\left\{-\frac{[x-\hbar K(t)]^2}{4\hbar^2 C(t)}\right\} \exp\left\{-\frac{[p-\pi(x, t)]^2}{4\hbar^2 [A(t) - \frac{B^2(t)}{C(t)})}\right\} \quad (7.13)$$

où l'on a posé

$$\pi(x, t) = \hbar J(t) + \frac{B(t)}{C(t)} [x - \hbar K(t)] \quad (7.14)$$

Les 2 équations décrivent une situation où  $x$  est distribué suivant une gaussienne centrée en  $\hbar K(t)$  et de largeur  $\hbar \sqrt{2C(t)}$ , et où, pour chaque valeur de  $x$ ,  $p$  est distribué suivant une gaussienne centrée en  $\pi(x, t)$  et de largeur  $\sqrt{2\hbar} [A(t) - \frac{B^2(t)}{C(t)}]^{1/2}$ . La quantité  $\pi(x, t)$  apparaît donc comme une "impulsion moyenne au point  $x$ ".

Il convient de bien se souvenir que  $w(x, p, t)$  n'est pas une vraie densité de probabilité mais plutôt une densité de quasi-probabilité. La 2<sup>ème</sup> exponentielle de (7.13) n'est donc pas une vraie distribution de  $p$  pour une particule en  $x$  (une telle notion est incompatible avec les relations d'incertitude). C'est plutôt une quasi-distribution de  $p$  pour une particule en  $x$ .

### Cohérence spatiale globale à une distance $u$

D'après (5.55) et (7.8)

$$\mathcal{F}(u) = \exp \left\{ -A(t)u^2 + iJ(t)u \right\} \quad (7.15)$$

Le module de  $\mathcal{F}(u)$  est donné par une gaussienne, centrée en  $u=0$  et de largeur  $1/\sqrt{2A(t)}$ . On en déduit pour la longueur de cohérence,  $l_{coh}$ , de la particule l'expression

$$l_{coh} = \frac{1}{\sqrt{2A(t)}} \quad (7.16)$$

On en déduit, par transformation de Fourier de (7.15), l'expression de la distribution de probabilité de  $p$  (voir (5.62)).

$$\mathcal{P}(p, t) = \langle p | \rho(t) | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi\hbar^2 A(t)}} \exp \left\{ -\frac{[p - \hbar J(t)]^2}{4\hbar^2 A(t)} \right\} \quad (7.17)$$

C'est une gaussienne, centrée en  $\hbar J(t)$  et de largeur  $\hbar \sqrt{2A(t)}$ .

### c) Evolution temporelle de la longueur de cohérence spatiale

- D'après (7.16) et (7.9.a)

$$\left[ \frac{1}{l_{coh}(t)} \right]^2 = 2A(t) = \frac{D}{\hbar^2} \frac{1 - e^{-2\gamma t}}{\gamma} + \frac{e^{-2\gamma t}}{\sigma^2} \quad (7.18)$$

En utilisant la longueur d'onde de de Broglie thermique  $\lambda_T$  (voir (6.8) et (6.47)), on peut réécrire (7.18) sous la forme

$$\left[ \frac{1}{l_{coh}(t)} \right]^2 = \frac{1}{\lambda_T^2} (1 - e^{-2\gamma t}) + \frac{1}{\sigma^2} e^{-2\gamma t} \quad (7.19)$$

- Aux temps courts ( $t \ll \gamma^{-1}$ ), on a

$$\left[ \frac{1}{l_{coh}(t)} \right]^2 = \frac{1}{\sigma^2} + 2\gamma t \left[ \frac{1}{\lambda_T^2} - \frac{1}{\sigma^2} \right] \quad (7.20)$$

Pour  $t=0$ ,  $l_{coh} = \sigma$ . Puis  $l_{coh}$  commence par décroître

si  $\sigma > \lambda_T$  ou par contre si  $\sigma < \lambda_T$

- Aux temps longs ( $t \gg \gamma^{-1}$ ), on a

$$l_{\text{coh}} = \lambda_T \quad (7.21)$$

La portée des cohérences spatiales est donc réduite à une valeur de l'ordre de  $\lambda_T$  au bout d'un temps  $\gamma^{-1}$  d'autant plus court que le couplage avec l'environnement est plus grand

#### d) Evolution temporelle de la distribution de probabilité de la position

##### Centre de la distribution

- D'après (7.17) et (7.7.d),  $\hbar J(t) = p_0 e^{-\gamma t}$  est l'impulsion moyenne de la particule, qui est amortie exponentiellement de sa valeur initiale  $p_0$  à 0 avec une constante de temps  $\gamma^{-1}$  (Fig. 1a)

- On vérifie aisément, à partir de (7.7.d) et (7.7.e) que

$$\hbar K(t) = \frac{1}{M} \int_0^t dt' \hbar J(t') \quad (7.22)$$

Le centre  $\hbar K(t)$  de la distribution atomique (voir (7.12)) est donc la position d'une particule dont la vitesse varierait au cours du temps comme  $\frac{p_0}{M} e^{-\gamma t}$  (Fig. 1b)

- Aux temps courts ( $\gamma t \ll 1$ )

$$\hbar K(t) = \frac{p_0}{M} t \quad (7.23)$$

Le centre de la distribution se déplace à la vitesse  $p_0/M$

- Aux temps longs ( $\gamma t \gg 1$ )

$$\hbar K(t) = \frac{p_0}{M\gamma} \quad (7.24)$$

Le centre de la distribution s'immobilise à une distance  $p_0/M\gamma$  de sa position initiale

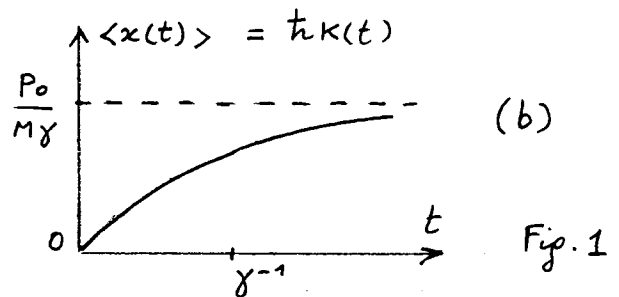
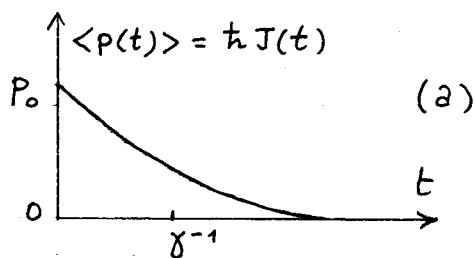


Fig. 1

##### Largeur de la distribution $\Delta x$

- D'après (7.12) et (7.9.c), la largeur  $\Delta x$  de la distribution de probabilité de la position est donnée par

$$\begin{aligned} \Delta x^2 &= \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 = 2\hbar^2 C(t) \\ &= \frac{2D}{M^2\gamma^2} \left[ \frac{1-e^{-2\gamma t}}{2\gamma} - 2\frac{1-e^{-\gamma t}}{\gamma} + t \right] + \frac{\sigma^2}{4} + \frac{\hbar^2}{M^2\gamma^2\sigma^2} (1-e^{-\gamma t})^2 \end{aligned} \quad (7.25)$$

- Comportement aux temps courts ( $t \ll \gamma^{-1}$ )

Un développement limité des exponentielles donne

$$\Delta x^2 = \frac{\sigma^2}{4} + \frac{\hbar^2}{M^2 \sigma^2} t^2 + \frac{2}{3} \frac{D}{M^2} t^3 \quad (7.26)$$

- Le 1<sup>er</sup> terme,  $\sigma^2/4$ , est associé à la largeur initiale du paquet d'ondes
- Le 2<sup>ème</sup> terme,  $\hbar^2 t^2 / M^2 \sigma^2$ , est associé à l'étalement du paquet d'ondes qui, pour  $t \ll \gamma^{-1}$ , n'est pas perturbé par la friction. A la largeur  $\sigma$  initiale est associée une dispersion  $\hbar/M\sigma$  de vitesses, conduisant à une dispersion en position  $\Delta x$  variant en  $\hbar t / M\sigma$
- Le 3<sup>ème</sup> terme,  $2Dt^3/3M^2$ , est associé à un début de diffusion de la position (voir paragraphe suivant)

- Comportement aux temps longs ( $t \gg \gamma^{-1}$ ) (et négliger  $\gamma^{-1}$  devant  $t$ )

On peut alors remplacer les exponentielles par 0, ce qui donne

$$\Delta x^2 = \frac{\sigma^2}{4} + \frac{\hbar^2}{M^2 \sigma^2} \frac{1}{\gamma^2} + 2 \frac{D}{M^2 \gamma^2} t \quad (7.27)$$

- Le 1<sup>er</sup> terme,  $\sigma^2/4$ , a la même interprétation que plus haut
- Le 2<sup>ème</sup> terme,  $\hbar^2 / M^2 \sigma^2 \gamma^2$ , est associé à l'étalement du paquet d'ondes initial, limité par la friction. Comme la dispersion initiale de vitesses,  $\hbar/M\sigma$ , s'amortit avec une constante de temps  $\gamma^{-1}$ , le déplacement correspondant est au maximum de l'ordre de cette dispersion de vitesse multipliée par  $\gamma^{-1}$  (comparer (7.23) et (7.24) et voir la figure 1.6)

- Le 3<sup>ème</sup> terme décrit un accroissement linéaire en  $t$  de  $\Delta x^2$

$$\Delta x^2 = 2 \mathcal{D} t \quad (7.28)$$

avec

$$\mathcal{D} = \frac{D}{M^2 \gamma^2} \quad (7.29)$$

Le coefficient  $\mathcal{D}$  donné par (7.29) est donc un coefficient de diffusion de la position.

### Interprétation du coefficient de diffusion spatiale

- A l'équilibre ( $t \gg \gamma^{-1}$ ), la vitesse  $p/M$  de la particule fluctue avec un temps de corrélation  $\tau_c$  de l'ordre de  $\gamma^{-1}$ , et une valeur quadratique moyenne  $\langle p^2 \rangle / M^2$  de l'ordre de  $D/M^2 \gamma$  puisque  $\langle p^2 \rangle_{eq} = D/\gamma$  (voir (6.6)).

- Pendant le temps de corrélation  $\tau_c \sim \gamma^{-1}$ , la vitesse garde à peu près la même valeur et la particule se déplace de  $(p/M)\gamma^{-1}$ . Puis la vitesse change et la particule va dans une autre direction. Dans l'espace des  $x$ , on a donc une marche au hasard, de pas de l'ordre de  $p/M\gamma$ , changeant tous les  $\gamma^{-1}$ . Pendant un temps  $\Delta t$ , le nombre de pas est de l'ordre de  $\Delta t / \gamma^{-1} = \gamma \Delta t$ . Comme les  $x^2$  s'ajoutent dans une marche au hasard, on a

$$\Delta x^2 \sim (\gamma \Delta t) \times (p/M\gamma)^2 \simeq \frac{\langle p^2 \rangle_{eq}}{M^2 \gamma} \Delta t = \frac{D}{M^2 \gamma^2} \Delta t \quad (7.30)$$

On a utilisé  $\langle p^2 \rangle_{eq} = D/\gamma$ . On retrouve bien que  $\Delta x^2$  croît linéairement avec  $\Delta t$ , avec un coefficient de proportionnalité  $D/M^2 \gamma^2$ .

e) Vitesse moyenne au point  $x$  à l'instant  $t$

VII-6

- Dans ce paragraphe, nous supposons  $p_0 = 0$ , de sorte que, dans (7.14),  $K(t) = J(t) = 0$ . Si  $p_0$  est non nul, il suffit de rajouter  $\hbar J(t)/M$  aux résultats qui suivent et de repérer  $x$  par rapport au centre  $\hbar K(t)$  de la distribution  $R(x, t)$ , c'est à dire de remplacer  $x$  par  $x - \hbar K(t)$ . On obtient ainsi à partir de (7.14) pour la vitesse moyenne au point  $x$  la valeur

$$\frac{\pi(x, t)}{M} = \frac{B(t)}{M C(t)} x \quad (7.31)$$

Cas d'une particule libre

- Faisons un développement limité des exponentielles de (7.9.b) et (7.9.c) puis faisons  $\gamma = D = 0$ . On obtient

$$B(t) = \frac{t}{2M\sigma^2} \quad C(t) = \frac{\sigma^2}{8\hbar^2} + \frac{t^2}{2M^2\sigma^2} \quad (7.32)$$

Supposons  $t$  suffisamment grand pour que

$$t \gg \frac{M}{\hbar} \sigma^2 \quad (7.33)$$

On peut alors dans l'expression de  $C(t)$  négliger le 1<sup>er</sup> terme et écrire

$$C(t) \approx \frac{t^2}{2M^2\sigma^2} \quad (7.34)$$

La condition (7.33) signifie que l'étalement du paquet d'ondes pendant le temps  $t$ ,  $\Delta x \approx (\hbar/M\sigma)t$ , est plus grand que la largeur initiale  $\sigma$ . On obtient alors à partir de (7.31)

$$\frac{\pi(x, t)}{M} = \frac{x}{t} \quad (7.35)$$

- L'interprétation de (7.35) est très simple. A cause de la largeur initiale  $\sigma$  du paquet d'ondes, la vitesse initiale de la particule a une certaine dispersion  $\hbar/M\sigma$ . On peut se représenter la distribution initiale  $R(x, 0)$  comme une distribution de particules libres ayant des vitesses différentes. Au bout d'un temps suffisamment long, ces particules seront séparées à cause de leurs vitesses différentes. Celles qui passent au point  $x$  à l'instant  $t$  sont celles qui avaient une vitesse initiale  $x/t$ , vitesse qui reste constante au cours du temps puisque les particules sont libres.

Cas d'une particule Brownienne pour  $t \gg \gamma^{-1}$

- On a alors d'après (7.9.b)

$$B(t) = \frac{D}{2\hbar^2 M \gamma^2} \quad (7.36)$$

ce qui donne, après report dans (7.31) et utilisation de (7.29)

$$\frac{\pi(x, t)}{M} = \frac{B(t)}{M C(t)} x = \frac{D}{2\hbar^2 M^2 \gamma^2 C(t)} x = \frac{D}{2\hbar^2 C(t)} x \quad (7.37)$$

- Pour interpréter (7.37), considérons la distribution  $R(x, t)$  qui est une gaussienne (voir (7.12) avec  $K(t) = 0$ ):

$$R(x, t) = N e^{-x^2/4\hbar^2 C(t)} \quad (7.38)$$

où  $N$  est un coefficient de normalisation. A cause de la

diffusion spatiale, il y a, en chaque point  $x$ , un courant de diffusion  $J(x, t)$  [voir Fig. 2]

$$J(x, t) = -D \frac{\partial R(x, t)}{\partial x} = D \frac{2x}{4t^2 c(t)} N e^{-\frac{x^2}{4t^2 c(t)}} = R(x, t) \frac{D x}{2t^2 c(t)} \quad (7.39)$$

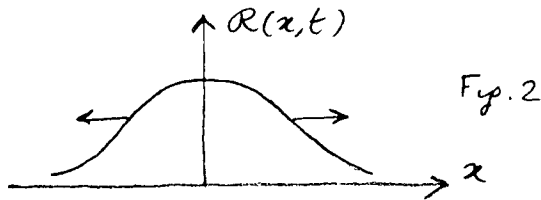


Fig. 2

L'expansion de la distribution s'accompagne d'un courant dans le sens des densités décroissantes. Le courant  $J(x, t)$  peut s'écrire en fonction de la densité  $R(x, t)$  et

d'une vitesse locale  $V(x, t)$

$$J(x, t) = R(x, t) V(x, t) \quad (7.40)$$

En éliminant  $J(x, t)$  entre (7.39) et (7.40), on trouve que  $V(x, t)$  n'est autre que  $\pi(x, t)/M$  écrit en (7.37)

### f- Conclusion. Evolutions des phénomènes quand le couplage avec l'environnement croît

- En utilisant la relation  $D = M \gamma k_B T$ , valable pour un environnement en équilibre à  $T$  (voir (6.8)), on peut écrire (7.29) sous la forme

$$D D = (k_B T)^2 \quad (7.41)$$

A température constante, si le nombre  $n_0$  de particules légères par unité de volume croît,  $D$  croît (voir (4.31)) et par suite  $D$  décroît

$$n_0 \uparrow \quad D \uparrow \quad D \downarrow \quad (7.42)$$

- On peut alors trouver des temps  $t$  suffisamment longs pour que  $t \gg \gamma^{-1}$ , et suffisamment courts pour que le dernier terme de (7.27), qui s'écrit aussi  $2 D t$ , soit négligeable devant le 1<sup>er</sup>

$$\gamma^{-1} \ll t \ll \frac{\sigma^2}{D} \quad (7.43)$$

Par ailleurs, si  $n_0 \uparrow$ ,  $\gamma$  aussi croît et le 2<sup>em</sup> terme de (7.27) devient lui aussi négligeable devant le 1<sup>er</sup>. On a alors d'après (7.27)

$$\Delta x^2 \simeq \frac{\sigma^2}{4} \quad (7.44)$$

- Finalement, en augmentant le couplage avec l'environnement, on peut atteindre un régime où il est possible de trouver des temps  $t$  satisfaisant l'inégalité (7.43), qui est de plus en plus facile à satisfaire puisque  $\gamma^{-1} \downarrow$  et  $\sigma^2/D \uparrow$ , tels que

- (i) Les cohérences spatiales ont été complètement détruites (plus exactement ramenées à une portée  $\lambda_T$ )
- (ii) La distribution de position de la particule est complètement figée puisque  $\Delta x$  n'a pas changé

Pour l'observable position de la particule, le temps de relaxation  $T_2$  devient de plus en plus court, alors que  $T_1$  devient de plus en plus long.

Référence. Les problèmes analysés dans ce chapitre sont également étudiés dans C.M. Savage, D.F. Walls, Phys. Rev. A 32, 3487 (1985)