

Buts de ce chapitre

- Introduire un modèle simple de couplage dissipatif conduisant à une force de friction proportionnelle à la vitesse.

Modèle de Caldeira - Leggett.

- Appliquer un tel modèle à une particule Brownienne et montrer que l'équation pilote de la particule redonne bien l'équation de Fokker-Planck pour la fonction de Wigner.

① Présentation du modèle - Hamiltonien

a - Particule lourde couplée à un gaz de particules légères par des potentiels harmoniques.

- $X, P, M$  : Position, impulsion, masse de la particule lourde  
 $x_\alpha, p_\alpha, m_\alpha$  : " " " " " " " " légère  $\alpha$

- Hamiltonien 
$$H = \frac{P^2}{2M} + \sum_{\alpha} \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 (x_{\alpha} - X)^2 \quad (8.1)$$

$H$  = Energie cinétique des diverses particules + énergie potentielle d'interaction entre la particule lourde et les diverses particules du gaz. Potentiel toujours attractif, même à grande distance. Peu réaliste physiquement, mais très simple mathématiquement

La particule lourde se déplace avec des particules légères  $\alpha$  attachées à elle par des ressorts de coefficients de raideur  $m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2$ .

- Le terme d'interaction  $V = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 (x_{\alpha} - X)^2$  ne dépend que des distances relatives. Invariance de  $H$  par translation globale de toutes les particules.

↳ Conservation de l'impulsion globale  $P + \sum_{\alpha} p_{\alpha}$ .

- Autre écriture possible

$$H = \underbrace{\frac{P^2}{2M}}_{H_S} + \underbrace{\sum_{\alpha} \left( \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{1}{2} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2 \right)}_{H_R} - \underbrace{\sum_{\alpha} C_{\alpha} x_{\alpha} X}_{H_{RS}} + \underbrace{\sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{2m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2} X^2}_{H_{CT}} \quad (8.2)$$

avec  $C_{\alpha} = m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 \quad (8.3)$

$H_S$  : Energie de la particule Brownienne libre

$H_R$  : Hamiltonien d'un "réservoir" d'oscillateurs harmoniques  $\{\alpha\}$  de fréquences  $\omega_{\alpha}$

$H_{RS}$  : Couplage linéaire en  $X$  et  $x_{\alpha}$  entre la particule Brownienne et chacun des oscillateurs du réservoir.  $C_{\alpha}$  : constante de couplage

$H_{CT}$  : Hamiltonien dépendant des constantes de couplage et n'agissant que sur la particule Brownienne. Appelé "contre-terme" pour des raisons qui apparaîtront plus loin.

b - Hamiltonien de Caldeira - Leggett. Equivalence avec le problème précédent.

- $H$  est donné par la même expression qu'en (8.2), mais maintenant  $C_{\alpha}$  n'est plus forcément égal à  $m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2$  et peut être quelconque

$C_\alpha \neq m_\alpha \omega_\alpha^2$ , quelconque

(8.4)

- Montrons maintenant que, si  $C_\alpha$  n'est pas égal à  $m_\alpha \omega_\alpha^2$ , on peut toujours effectuer un changement de variables tel que, dans la nouvelle représentation, la relation (8.3) soit vérifiée.

Considérons en effet un oscillateur harmonique de fréquence  $\omega_\alpha$  et d'hamiltonien  $\hbar \omega_\alpha (a_\alpha^\dagger a_\alpha + \frac{1}{2})$  où  $a_\alpha^\dagger$  et  $a_\alpha$  sont les opérateurs de création et d'annihilation. Tout en gardant les mêmes niveaux d'énergie pour cet oscillateur, c'est à dire tout en gardant la même fréquence, on peut lui associer plusieurs particules de masses  $m_\alpha$  différentes. Une fois  $m_\alpha$  choisie, on a pour la position  $x_\alpha$  et l'impulsion  $p_\alpha$  de la particule les relations

$$x_\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_\alpha \omega_\alpha}} (a_\alpha + a_\alpha^\dagger) \quad p_\alpha = i \sqrt{\frac{\hbar m_\alpha \omega_\alpha}{2}} (a_\alpha^\dagger - a_\alpha) \quad (8.5)$$

Pour chacun des oscillateurs  $\alpha$  de (8.2), on peut donc effectuer le changement de variables suivant

$$x_\alpha \rightarrow x'_\alpha = \lambda_\alpha x_\alpha \quad p_\alpha \rightarrow p'_\alpha = \frac{p_\alpha}{\lambda_\alpha} \quad (8.6)$$

associé à un changement de masse

$$m_\alpha \rightarrow m'_\alpha = \frac{m_\alpha}{\lambda_\alpha^2} \quad (8.7)$$

$\lambda_\alpha$  étant une constante. L'hamiltonien  $H_R$  de (8.2) peut alors se réécrire

$$H_R = \sum_\alpha \left( \frac{p_\alpha^2}{2m_\alpha} + \frac{1}{2} m_\alpha \omega_\alpha^2 x_\alpha^2 \right) = \sum_\alpha \left( \frac{p'_\alpha{}^2}{2m'_\alpha} + \frac{1}{2} m'_\alpha \omega_\alpha^2 x'_\alpha{}^2 \right) \quad (8.8)$$

De même, on peut réécrire  $H_{RS}$  et  $H_{CT}$  sous la forme

$$H_{RS} = - \sum_\alpha C_\alpha x_\alpha X = - \sum_\alpha C'_\alpha x'_\alpha X \quad (8.9)$$

$$H_{CT} = \sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{2m_\alpha \omega_\alpha^2} X^2 = \sum_\alpha \frac{C'_\alpha{}^2}{2m'_\alpha \omega_\alpha^2} X^2 \quad (8.10)$$

avec  $C'_\alpha = \frac{C_\alpha}{\lambda_\alpha} \quad (8.11)$

Ainsi, on peut réécrire  $H$  sous la forme

$$H = \frac{P^2}{2M} + \sum_\alpha \left( \frac{p'_\alpha{}^2}{2m'_\alpha} + \frac{1}{2} m'_\alpha \omega_\alpha^2 x'_\alpha{}^2 \right) - \sum_\alpha C'_\alpha x'_\alpha X + \sum_\alpha \frac{C'_\alpha{}^2}{2m'_\alpha \omega_\alpha^2} X^2 \quad (8.12)$$

Formons alors la quantité  $\frac{C'_\alpha}{m'_\alpha \omega_\alpha^2}$ . Compte tenu de (8.7) et (8.11) on obtient

$$\frac{C'_\alpha}{m'_\alpha \omega_\alpha^2} = \lambda_\alpha \frac{C_\alpha}{m_\alpha \omega_\alpha^2} \quad (8.13)$$

On voit ainsi que, si  $C_\alpha \neq m_\alpha \omega_\alpha^2$ , il suffit de choisir  $\lambda_\alpha = \frac{m_\alpha \omega_\alpha^2}{C_\alpha}$  pour avoir  $C'_\alpha = m'_\alpha \omega_\alpha^2$

- Finalement, par un choix convenable des masses des particules associées aux divers oscillateurs harmoniques du réservoir, on peut toujours réinterpréter l'hamiltonien de Caldeira-Leggett comme l'hamiltonien d'une particule de masse  $M$  se déplaçant avec des particules légères attachées à elle par des ressorts.

Dans la suite, nous utiliserons l'hamiltonien (8.2) avec  $C_\alpha$  quelconque. Sous cette forme, les diverses quantités relatives au réservoir et apparaissant dans  $H_{RS}$  et  $H_{CT}$  sont indépendantes

du paramètre  $\lambda_\alpha$  associé à la transformation étudiée plus haut. En effet, d'après (8.6), (8.7) et (8.11), on a

$$C'_\alpha x'_\alpha = C_\alpha x_\alpha \quad \frac{C'^2_\alpha}{m'_\alpha \omega_\alpha^2} = \frac{C_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2} \quad (8.14)$$

### Remarque

Dans ce qui précède, nous avons considéré, qu'en l'absence de couplage avec le réservoir ( $C_\alpha = 0$ ), la particule de masse  $M$  est libre. On peut aussi considérer qu'elle se déplace dans un potentiel  $V(x)$ . Il suffit alors, dans (8.2), de remplacer  $H_S = P^2/2M$  par

$$H_S = \frac{P^2}{2M} + V(x) \quad (8.15)$$

Caldeira et Leggett<sup>[1]</sup> ont d'ailleurs introduit leur modèle pour comprendre comment la dissipation associée au couplage avec le réservoir d'oscillateurs modifie l'effet tunnel de la particule de masse  $M$  se déplaçant dans un potentiel  $V(x)$  ayant l'une des formes représentées sur la figure 1

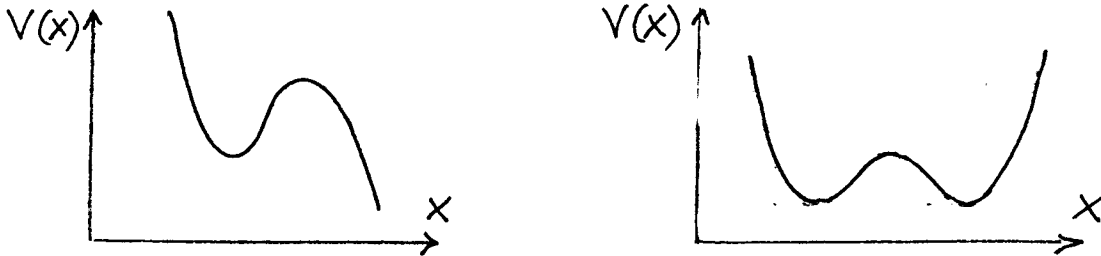


Fig. 1

## ② Choix des paramètres de couplage

### a. Equations de Heisenberg-Langevin pour la particule lourde

$$\frac{dX(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [X(t), H] = \frac{\partial H}{\partial P(t)} = \frac{P(t)}{M} \quad (8.16.a)$$

$$\frac{dP(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [P(t), H] = -\frac{\partial H}{\partial X(t)} = \sum_\alpha C_\alpha x_\alpha(t) - X(t) \sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2} \quad (8.16.b)$$

On voit apparaître au 2<sup>ème</sup> membre de l'équation d'évolution de  $P(t)$  l'observable du réservoir

$$R(t) = \sum_\alpha C_\alpha x_\alpha(t) = \sum_\alpha C_\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2m_\alpha \omega_\alpha}} [a_\alpha(t) + a_\alpha^\dagger(t)] \quad (8.17)$$

dont nous allons maintenant calculer l'évolution (on a utilisé la 1<sup>ère</sup> équation (8.5)).

$$\frac{d}{dt} a_\alpha(t) = \frac{1}{i\hbar} [a_\alpha(t), H] = \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial H}{\partial a_\alpha^\dagger(t)} = -i\omega_\alpha a_\alpha(t) + i \frac{C_\alpha}{\sqrt{2\hbar m_\alpha \omega_\alpha}} X(t) \quad (8.18)$$

La solution de (8.18) s'écrit

$$a_\alpha(t) = a_\alpha(t_0) e^{-i\omega_\alpha(t-t_0)} + \frac{i C_\alpha}{\sqrt{2\hbar m_\alpha \omega_\alpha}} \int_{t_0}^t dt' X(t') e^{-i\omega_\alpha(t-t')} \quad (8.19)$$

En reportant (8.19) et l'expression adjointe dans (8.17), et en posant  $\tau = t - t'$ , on obtient pour (8.16.b) :

$$\frac{d}{dt} P(t) = \sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{2m_\alpha \omega_\alpha} \left[ i \int_0^{t-t_0} d\tau X(t-\tau) e^{-i\omega_\alpha \tau} + h.c. \right] + F_L(t) - X(t) \sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2} \quad (8.20)$$

où

$$F_L(t) = \sum_\alpha C_\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2m_\alpha \omega_\alpha}} \left[ a_\alpha(t_0) e^{-i\omega_\alpha(t-t_0)} + a_\alpha^\dagger(t_0) e^{i\omega_\alpha(t-t_0)} \right] \quad (8.21)$$

- Le 1<sup>er</sup> terme du 2<sup>ème</sup> membre de (8.20) décrit une friction retardée : la particule lourde perturbe le réservoir qui réagit sur elle.
- Le 2<sup>ème</sup> terme est une force de Langevin ne dépendant que d'opérateurs du réservoir évoluant librement.
- Le 3<sup>ème</sup> terme provient de  $H_C T$

### b. Limite d'un réservoir continu - Fonction $J_c(\omega)$

- Le 1<sup>er</sup> terme du 2<sup>ème</sup> membre de (8.20) peut se réécrire

$$\frac{1}{\pi} \int d\omega J(\omega) \left[ i \int_0^{t-t_0} d\tau X(t-\tau) e^{-i\omega\tau} + \text{h.c.} \right] \quad (8.22)$$

$$\text{où } J(\omega) = \sum_{\alpha} \frac{\pi C_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \delta(\omega - \omega_{\alpha}) \quad (8.23)$$

- La fonction  $J(\omega)$  est une somme discrète de fonctions  $\delta$  centrées aux diverses fréquences  $\omega_{\alpha}$  des oscillateurs du réservoir. Supposons que ces fréquences  $\omega_{\alpha}$  forment un ensemble très serré avec un espacement moyen  $\epsilon$ , et supposons qu'on s'intéresse à l'évolution du système sur des temps beaucoup plus courts que  $1/\epsilon$ , ce qui permet d'ignorer toutes les récurrences de Poincaré liées au caractère discret de l'ensemble  $\{\omega_{\alpha}\}$ . On peut alors remplacer la somme de fonctions  $\delta$  par une fonction continue  $J_c(\omega)$ , telle que dans un intervalle  $d\omega$ , très grand devant  $\epsilon$  mais très petit devant l'échelle de variation caractéristique de  $J_c(\omega)$ , on ait

$$J_c(\omega) d\omega = \sum_{\omega_{\alpha} \in [\omega, \omega+d\omega]} \pi \frac{C_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \quad (8.24)$$

Nous ferons désormais une telle approximation et remplacerons  $J(\omega)$  par  $J_c(\omega)$  dans (8.22).

- Notons enfin que le dernier terme de (8.20) peut se réécrire, compte tenu de (8.23)

$$-X(t) \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} = -X(t) \frac{2}{\pi} \int d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \approx -X(t) \frac{2}{\pi} \int d\omega \frac{J_c(\omega)}{\omega} \quad (8.25)$$

### c. Fonction $J_c(\omega)$ conduisant à une force de friction linéaire en vitesse

- Caldeira et Leggett<sup>[1]</sup> prennent pour  $J_c(\omega)$  une fonction linéaire en  $\omega$  s'étendant de  $\omega = 0$  à  $\omega = \omega_c$  :

$$\begin{cases} J_c(\omega) = M\gamma\omega & \text{pour } 0 \leq \omega \leq \omega_c \\ J_c(\omega) = 0 & \text{pour } \omega > \omega_c \end{cases} \quad (8.26)$$

$\gamma$  est un coefficient qui sera interprété plus loin

- Avec ce choix de  $J_c(\omega)$ , le dernier terme de (8.20) devient, compte tenu de (8.25)

$$-X(t) \frac{2}{\pi} \int_0^{\omega_c} d\omega \frac{M\gamma\omega}{\omega} = -\frac{2M\gamma\omega_c}{\pi} X(t) \quad (8.27)$$

- Calculons maintenant (8.22) avec  $J(\omega)$  remplacé par (8.26)

On obtient

$$\begin{aligned} \frac{M\gamma}{\pi} \int_0^{\omega_c} d\omega i\omega \int_0^{t-t_0} d\tau X(t-\tau) e^{-i\omega\tau} + h.c. &= \\ &= -\frac{M\gamma}{\pi} \int_0^{t-t_0} d\tau X(t-\tau) \frac{d}{d\tau} \left[ \int_0^{\omega_c} d\omega e^{-i\omega\tau} + c.c. \right] \end{aligned} \quad (8.28)$$

$$\text{Or } \int_0^{\omega_c} d\omega e^{-i\omega\tau} + c.c. = \int_{-\omega_c}^{+\omega_c} d\omega e^{-i\omega\tau} = 2\pi \delta_c(\tau) \quad (8.29)$$

$$\text{où } \delta_c(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\omega_c}^{+\omega_c} d\omega e^{-i\omega\tau} \quad (8.30)$$

est une fonction delta de  $\tau$ , de largeur  $1/\omega_c$ . La force de friction s'écrit donc

$$\begin{aligned} -2M\gamma \int_0^{t-t_0} d\tau X(t-\tau) \delta_c'(\tau) &= \\ &= 2M\gamma \delta_c(0) X(t) - 2M\gamma \int_0^{t-t_0} d\tau \dot{X}(t-\tau) \delta_c(\tau) \end{aligned} \quad (8.31)$$

On a effectué une intégration par parties et supposé  $t-t_0 \gg \frac{1}{\omega_c}$ . Comme  $\delta_c(0) = \omega_c/\pi$  d'après (8.30), le 1<sup>er</sup> terme du 2<sup>ème</sup> membre de (8.31) vaut  $2M\gamma(\omega_c/\pi)X(t)$ . Quant au 2<sup>ème</sup>, il vaut  $-M\gamma\dot{X}(t)$ , compte tenu du caractère pair de  $\delta_c(\tau)$ , si  $\dot{X}(t)$  varie peu sur un intervalle de temps de l'ordre de  $\omega_c^{-1}$ .

Finalement, avec le choix (8.26) pour  $J_c(\omega)$ , la force de friction (8.22) s'écrit

$$\frac{2M\gamma\omega_c}{\pi} X(t) - \gamma P(t) \quad (8.32)$$

On a utilisé  $P(t) = M\dot{X}(t)$  (voir (8.16.2)).

- Dans (8.20), remplaçons le 1<sup>er</sup> terme par (8.32) et le dernier par (8.27). On constate que la contribution de  $H_{CT}$  (contre-terme) compense exactement le 1<sup>er</sup> terme de (8.32) et on obtient

$$\frac{d}{dt} P(t) = -\gamma P(t) + F_L(t) \quad (8.33)$$

Le choix (8.26) de  $J_c(\omega)$  conduit donc bien à une force de friction proportionnelle à la vitesse et à une équation de Heisenberg pour  $P(t)$  ayant tout à fait la forme d'une équation de Langevin. Le coefficient  $\gamma$ , qui est homogène à l'inverse d'un temps, est un coefficient de friction: Si  $\langle F_L(t) \rangle = 0$ ,  $\langle P(t) \rangle$  est amorti avec un temps  $\gamma$ . La condition utilisé plus haut pour transformer le dernier terme de (8.31), à savoir que  $\dot{X}(t) = P(t)/M$  varie peu sur un intervalle de temps  $\omega_c^{-1}$ , s'écrit donc

$$\gamma \ll \omega_c \quad (8.34)$$

### Remarques

(i) Nous avons établi l'expression (8.32) de la force de friction sans faire aucune hypothèse sur l'état du réservoir. La raison en est que le 1<sup>er</sup> terme de (8.20), qui se réduit à (8.32) à la limite continue et pour le choix (8.26), ne dépend

que de la susceptibilité du réservoir : la particule VIII-6  
de masse  $M$  "polarise" le réservoir qui réagit sur elle.  
Comme nous avons pris un réservoir d'oscillateurs harmoniques  
et que la susceptibilité d'un oscillateur harmonique est indé-  
pendante de l'état de cet oscillateur, il est normal que (8.32)  
ne dépende pas de l'état du réservoir. On peut d'ailleurs mon-  
trer que les 2 termes de (8.32) sont respectivement associés  
aux parties réactive et dissipative de la susceptibilité du  
réservoir.

(ii) D'autres choix que (8.26) sont possibles pour  $J_c(\omega)$ . On  
peut par exemple supposer que  $J_c(\omega)$  varie comme  $\omega^\delta$   
quand  $\omega \rightarrow 0$  avec  $\delta \neq 1$ . Voir la référence [2] pour l'étude  
de ce cas

(iii) Supposons que la particule de masse  $M$  se déplace dans un  
potentiel  $V(x)$ . Dans ce cas, il faut utiliser l'expression (8.15)  
de  $H_S$ , ce qui fait apparaître un nouveau terme,  $-dV(x)/dx$ ,  
au 2<sup>ème</sup> membre de (8.20). Par contre, tous les autres termes  
restent inchangés, de même que les calculs conduisant à  
(8.32). L'équation (8.33) devient donc maintenant

$$\frac{d}{dt} P(t) = - \frac{dV(x(t))}{dx(t)} - \gamma P(t) + F_L(t) \quad (8.35)$$

L'introduction du réservoir décrit par  $H_R$  et du terme  
d'interaction décrit par  $H_{SR}$  ainsi que du contre terme  $H_{CT}$ ,  
ajouté donc à la force dérivant de  $V(x)$  (1<sup>er</sup> terme de (8.35))  
la force de friction  $-\gamma P(t)$  et la force de Langevin  $F_L(t)$ . La  
méthode de Caldeira-Leggett permet ainsi d'introduire le  
phénomène de dissipation (et les fluctuations associées) dans  
les équations quantiques du mouvement de la particule.

On peut comprendre maintenant l'importance du contre-  
terme  $H_{CT}$ . Si l'on n'avait introduit que le terme d'inter-  
action  $H_{SR}$ , on aurait obtenu en (8.35) le terme  
 $2M\gamma(\omega_c/\pi)X(t)$  figurant dans (8.32). Ce terme décrit une  
"renormalisation" du potentiel  $V(x)$  due à  $H_{SR}$  puisqu'il faut  
ajouter à  $V(x)$  le potentiel  $-M\gamma(\omega_c/\pi)X^2$ . Il serait alors  
difficile de discerner, dans la modification de l'effet tunnel  
due à  $H_{SR}$ , la contribution du terme de friction  $-\gamma P(t)$   
et celle du changement du potentiel  $V(x)$ . L'utilisation de  
 $H_{CT}$  permet d'éviter tout changement de  $V(x)$  et d'étudier  
l'effet tunnel dans le même potentiel  $V(x)$  avec  $\gamma = 0$   
et  $\gamma \neq 0$  (voir la discussion du § 2 de la référence 1).

Dans l'approche développée ici (voir § 1 ci-dessus et référence  
3), le contre terme apparaît normalement quand  
on part d'un hamiltonien d'interaction particule-réservoir  
invariant par translation globale

Pour étudier plus complètement la dynamique de la particule lourde,  
nous allons maintenant revenir au point de vue de Schrödinger et  
étudier l'équation pilote qui décrit l'évolution de son opérateur densité  
réduit. Auparavant, nous rappelons, dans un appendice, les grandes lignes  
de la dérivation d'une telle équation (pour plus de détails, voir les références 4, 5, 6).

Appendice - Rappels sur l'équation pilote décrivant la relaxation d'un système  $S$  couplé à un réservoir  $R$

VIII-7

Hamiltonien

-  $H = H_S + H_R + H_{SR}$  (8.36)  
 = Hamiltonien de  $S$  + Hamiltonien de  $R$  + Interaction  $S$ - $R$

- Pour  $H_{SR}$  on prend un produit d'une observable  $S$  de  $S$  par une observable  $R$  de  $R$

$H_{SR} = S \cdot R$  (8.37)

Equation du mouvement de l'opérateur densité  $\sigma_{SR}$  du système global  $S+R$

-  $\frac{d}{dt} \sigma_{SR}(t) = \frac{1}{i\hbar} [H, \sigma_{SR}(t)]$  (8.38)

Il faudra ensuite déduire de (8.38) l'équation d'évolution de l'opérateur densité réduit de  $S$

$\sigma_S(t) = \text{Tr}_R \sigma_{SR}(t)$  (8.39)

- Représentation d'interaction

$\tilde{\sigma}_{SR}(t) = e^{i(H_S+H_R)t/\hbar} \sigma_{SR}(t) e^{-i(H_S+H_R)t/\hbar}$  (8.40)

$\tilde{H}_{SR}(t) = e^{i(H_S+H_R)t/\hbar} H_{SR} e^{-i(H_S+H_R)t/\hbar} = \tilde{S}(t) \tilde{R}(t)$  (8.41)

$\tilde{S}(t) = e^{iH_S t/\hbar} S e^{-iH_S t/\hbar}$        $\tilde{R}(t) = e^{iH_R t/\hbar} R e^{-iH_R t/\hbar}$  (8.42)

$\hookrightarrow \frac{d}{dt} \tilde{\sigma}_{SR}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\tilde{S}(t) \tilde{R}(t), \tilde{\sigma}_{SR}(t)]$  (8.43)

- Hypothèses sur l'état initial

(i) Factorisation  $\sigma_{SR}(0) = \sigma_S(0) \sigma_R(0)$  (8.44)

(ii) Réservoir dans un état stationnaire  $[\sigma_R(0), H_R] = 0$  (8.45)

(iii) Valeur moyenne nulle pour  $R$   $\langle R \rangle = \text{Tr} [R \sigma_R(0)] = 0$  (8.46)

- Solution itérative de l'équation du mouvement (8.43)

$\tilde{\sigma}_{SR}(t) = \tilde{\sigma}_{SR}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt [\tilde{S}(t-\tau) \tilde{R}(t-\tau), \tilde{\sigma}_{SR}(t-\tau)]$  (8.47)

En reportant (8.47) dans (8.43), on obtient, compte tenu de (8.44)

$\frac{d}{dt} \tilde{\sigma}_{SR}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\tilde{S}(t) \tilde{R}(t), \sigma_S(0) \sigma_R(0)]$   
 $- \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt [\tilde{S}(t) \tilde{R}(t), [\tilde{S}(t-\tau) \tilde{R}(t-\tau), \tilde{\sigma}_{SR}(t-\tau)]]$  (8.48)

Prendons la trace des 2 membres de (8.48) sur le réservoir. Compte tenu de (8.42), (8.45), (8.46), le 1<sup>er</sup> terme du 2<sup>ème</sup> membre de (8.48) donne une contribution nulle et on obtient

$\frac{d}{dt} \tilde{\sigma}_S(t) = - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt \text{Tr}_R \left\{ [\tilde{S}(t) \tilde{R}(t), [\tilde{S}(t-\tau) \tilde{R}(t-\tau), \tilde{\sigma}_{SR}(t-\tau)]] \right\}$  (8.49)

Jusqu'ici, aucune approximation n'a été faite

Approximations

(i) Dans le 2<sup>ème</sup> membre de (8.49), on pose

$\tilde{\sigma}_{SR}(t-\tau) \approx (\text{Tr}_R \tilde{\sigma}_{SR}(t-\tau)) (\text{Tr}_S \tilde{\sigma}_{SR}(t-\tau)) \approx \tilde{\sigma}_S(t-\tau) \sigma_R(0)$  (8.50)

- On néglige ainsi les corrélations entre  $S$  et  $R$  à l'instant  $t-\tau$  et on néglige la variation de l'état du grand réservoir entre 0 et  $t-\tau$  sous l'effet du couplage avec le petit système  $S$  [La vitesse de variation (8.49) est un effet déjà d'ordre 2 en couplage  $H_{SR}$ ].

Notons cependant qu'on tient compte des corrélations entre  $S$  et  $R$  qui apparaissent entre  $t-\tau$  et  $t$  et qui déterminent  $d\tilde{\sigma}_S(t)/dt$

- En reportant (8.50) dans (8.49), et en explicitant le double commutateur, on obtient

$$\frac{d}{dt} \tilde{\sigma}_S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \langle \tilde{R}(t) \tilde{R}(t-\tau) \rangle_R \left\{ \tilde{S}(t) \tilde{S}(t-\tau) \tilde{\sigma}_S(t-\tau) - \tilde{S}(t-\tau) \tilde{\sigma}_S(t-\tau) \tilde{S}(t) \right\} + h.c. \quad (8.51)$$

où 
$$\langle \tilde{R}(t) \tilde{R}(t-\tau) \rangle_R = T_{2R} \left\{ \sigma_R(0) \tilde{R}(t) \tilde{R}(t-\tau) \right\} \quad (8.52)$$

Le réservoir n'apparaît plus dans l'équation d'évolution opératorielle (8.51) de  $\tilde{\sigma}_S(t)$  que par l'intermédiaire des "moyennes à 2 temps" (8.52).

- Le spectre des fréquences de Bohr apparaissant dans l'évolution de  $\tilde{R}(t)$  est très large (puisque  $R$  est un réservoir). Il s'en suit que les fonctions (8.52), qui ne dépendent que de  $\tau$  (à cause de (8.45)), ont une largeur en  $\tau$  très petite.

Cette largeur  $\tau_c$  est par définition le temps de corrélation du réservoir

(ii) La présence des moyennes à 2 temps (8.52) dans (8.51) limite les valeurs de  $\tau$  dans l'intégrale à des valeurs de l'ordre de  $\tau_c$ . Si  $\tau_c$  est très court devant le temps d'évolution de  $\tilde{\sigma}_S$  (temps de relaxation  $T_R$ ), on peut poser dans (8.51) (approximation de Markov)

$$\tilde{\sigma}_S(t-\tau) \approx \tilde{\sigma}_S(t) \quad (8.53)$$

En repassant dans le point de vue de Schrödinger, on obtient alors pour l'équation d'évolution de  $\sigma_S(t)$  (équation pilote) On a remplacé  $t$

$$\frac{d}{dt} \sigma_S(t) = \frac{1}{i\hbar} [H_S, \sigma_S(t)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \langle R \tilde{R}(-\tau) \rangle_R \left\{ S \tilde{S}(-\tau) \sigma_S(t) - \tilde{S}(-\tau) \sigma_S(t) S \right\} - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \langle \tilde{R}(-\tau) R \rangle_R \left\{ \sigma_S(t) \tilde{S}(-\tau) S - S \sigma_S(t) \tilde{S}(-\tau) \right\} \quad (8.54)$$

par  $+\infty$   
car  $t \gg \tau_c$

- On peut montrer (voir références 4, 5, 6) que la condition de validité des 2 approximations précédentes est

$$v \tau_c / \hbar \ll 1 \quad (8.55)$$

où 
$$v^2 = T_{2R} \left\{ H_{SR}^2 \sigma_S(0) \sigma_R(0) \right\} \quad (8.56)$$

La condition (8.55) est appelé condition de "retrecissement par le mouvement".

Un exemple d'application très simple

- Supposons que l'observable  $S$  de  $S$  apparaissant dans le couplage  $H_{SR}$  commute avec  $H_S$

$$[S, H_S] = 0 \quad (8.57)$$

On en déduit que

$$\tilde{S}(-\tau) = e^{-iH_S \tau / \hbar} S e^{+iH_S \tau / \hbar} = S \quad (8.58)$$



- Compte tenu de (8.58), on peut alors écrire (8.54) sous la forme

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sigma_S(t) = & \frac{1}{i\hbar} [H_S, \sigma_S(t)] - \frac{(\alpha + i\beta)}{\hbar^2} \{ S^2 \sigma_S(t) - S \sigma_S(t) S \} \\ & - \frac{(\alpha - i\beta)}{\hbar^2} \{ \sigma_S(t) S^2 - S \sigma_S(t) S \} \end{aligned} \quad (8.59)$$

où le nombre complexe  $\alpha + i\beta$  est défini par (on suppose  $t \gg \tau_c$ )

$$\alpha + i\beta = \int_0^\infty d\tau \langle R \tilde{R}(-\tau) \rangle_R \quad (8.60)$$

- Par ailleurs, comme  $S$  et  $H_S$  commutent, il est possible de trouver une base  $\{ |\varphi_m\rangle \}$  de vecteurs propres communs à  $S$  et  $H_S$

$$\begin{cases} H_S |\varphi_m\rangle = E_m |\varphi_m\rangle & (8.61.2) \\ S |\varphi_m\rangle = s_m |\varphi_m\rangle & (8.61.6) \end{cases}$$

- Projetons alors l'équation maîtresse (8.59) sur la base  $\{ |\varphi_m\rangle \}$

Pour les populations  $\langle \varphi_m | \sigma_S(t) | \varphi_m \rangle$ , on obtient

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi_m | \sigma_S(t) | \varphi_m \rangle = 0 \quad (8.62)$$

Pour les cohérences  $\langle \varphi_m | \sigma_S(t) | \varphi_p \rangle$  avec  $m \neq p$ , on obtient

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \varphi_m | \sigma_S(t) | \varphi_p \rangle = & \left[ -i \frac{(E_m - E_p)}{\hbar} - i \frac{\beta}{\hbar^2} (s_m^2 - s_p^2) \right] \langle \varphi_m | \sigma_S(t) | \varphi_p \rangle \\ & - \frac{\alpha}{\hbar^2} \underbrace{[s_m^2 - s_m s_p + s_p^2 - s_m s_p]}_{(s_m - s_p)^2} \langle \varphi_m | \sigma_S(t) | \varphi_p \rangle \end{aligned} \quad (8.63)$$

- Interprétation

- les populations sont figées
- Chaque niveau  $|\varphi_m\rangle$  est déplacé d'une quantité  $\beta s_m^2 / \hbar$  (on aurait pu éviter ceci en ajoutant à  $H$  un contre terme proportionnel à  $S^2$ )
- la cohérence entre  $|\varphi_m\rangle$  et  $|\varphi_p\rangle$  est amortie avec un taux proportionnel au carre  $(s_m - s_p)^2$  de la différence entre les valeurs propres

- Application au mouvement Brownien décrit par l'hamiltonien (8.2)

Dans ce cas  $S = X$ . Si l'on prend la limite  $M \rightarrow \infty$ , on a  $H_S = P^2 / 2M \rightarrow 0$  et  $[X, H_S] = 0$ . On retrouve bien alors que, à l'ordre 0 en  $1/M$ , la cohérence entre les états propres  $|x'\rangle$  et  $|x''\rangle$  de  $X$  est détruite avec un taux proportionnel à  $(x' - x'')^2$ .

## Références

- 1 - A.O. Caldeira, A.J. Leggett, *Annals of Physics* 149, 374 (1983)
- 2 - C. Aslangul, N. Pottier, D. Saint-James, *J. Physique* 48, 1871 (1987)
- 3 - V. Hakim, V. Ambegaokar, *Phys. Rev. A* 32, 423 (1985)
- 4 - C. Cohen-Tannoudji, *Cours Collège de France* 1975-76
- 5 - C. Cohen-Tannoudji, in *Frontiers in Laser Spectroscopy*, Balian, Haroche, Liberman eds, Les Houches XXVII, 1975 North Holland 1977
- 6 - C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, *Processus d'Interaction entre Photons et Atomes*, chapitre IV Interéditions et Editions du CNRS, Paris 1988