Cohérence quantique et dissipation

Magistère de Physique

Septembre-novembre 2003

Table des matières

Introduction **5**

1 Cohérence quantique et interférences à deux ondes **7**

1 L'expérience des trous d'Young 7

2 Fonctions d'onde macroscopiques 10

3 Le brouillage de la cohérence dans une expérience d'Young 14

2 Champs quantiques et bains d'oscillateurs **17**

1 Comment caractériser un photon ? 17

2 Quantification du mouvement d'une corde vibrante 22

3 Interférences à plusieurs particules 25

3 L'opérateur densité **29**

1 Etats purs 31

2 Mélanges statistiques 33

3 Exemples d'opérateurs densité 35

4 Systèmes intriqués 38

5 Intrication non locale et paradoxe EPR 39

4 Le mouvement brownien classique **45**

1 Force de friction et force de Langevin 45

2 Propriétés statistiques de la force de Langevin 46

3 Evolution de la vitesse de la particule brownienne 48

4 Distribution de probabilité pour la vitesse 50

5 Le refroidissement d'atomes par laser 53

5 L'équation pilote **59**

1 Modèles de relaxation pour un spin 1/2 59

2 Couplages en jeu dans le problème général 62

3 Evolution de la matrice densité du petit système 64

4 Relaxation et thermalisation d'un spin 1/2 67

6 Le mouvement brownien quantique **71**

1 Couplage harmonique "particule brownienne-fluide" 71

2 L'équation pilote 73

3 Equation de Fokker-Planck-Kramers 76

4 La fragilité des états « chats de Schrödinger » 77

7 Fonctions d'onde Monte-Carlo **83**

1 La désexcitation d'un niveau instable 84

2 La méthode générale 87

3 Cohérente et dissipation pour un système à deux niveaux 89

8 Ondes de matières cohérentes **93**

1 La distribution de Bose-Einstein 93

2 Gaz de Bose à une dimension 95

3 Gaz de Bose à 3 dimensions et condensation 98

4 Interférences de condensats 100

Introduction générale

Un des principes les plus importants de la théorie quantique est sans conteste le principe de superposition. Si un système donné peut être préparé dans chacun des deux vecteurs d'états $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$, alors les vecteurs

$$\alpha_1|\Psi_1\rangle + \alpha_2|\Psi_2\rangle \tag{1}$$

sont également des états accessibles au système. Ce principe de superposition intervient dans de nombreuses expériences de physique quantique. L'interférence observée dans un dispositif de trous d'Young, par exemple, s'interprète en disant que la particule est dans un état qui est la superposition du passage par le trou 1 et du passage par le trou 2. On retrouve ces superpositions cohérentes d'états quantiques en résonance magnétique nucléaire, en physique de la matière condensée (jonctions Josephson, squids), ou encore dans les expériences de collisions.

Quand on s'intéresse à un objet microscopique isolé (atome, photon,...), ces superpositions cohérentes d'états n'ont *a priori* rien d'exceptionnel. Si un atome d'hydrogène peut être préparé dans l'état $|1s\rangle$ ou dans l'état $|2s\rangle$, pourquoi ne pourrait-il pas exister également dans l'état $(|1s\rangle + |2s\rangle)/\sqrt{2}$? Si l'objet microscopique qu'on considère n'est pas isolé, mais couplé à un environnement, la physique devient beaucoup plus compliquée. L'état du système global, objet+environnement, sera généralement intriqué et s'écrira sous la forme :

$$\sum_j \alpha_j |\Psi^{(j)}_{\text{objet}}\rangle \otimes |\Phi^{(j)}_{\text{envir.}}\rangle \ . \tag{2}$$

De cette intrication, naissent des corrélations entre l'objet et l'environnement, ainsi qu'une modification des propriétés de cohérence de l'objet, telles qu'elles se manifestent par exemple dans une expérience d'interférence. Le système physique composé par l'objet forme désormais un système ouvert, couplé à d'autres systèmes, et il ne peut donc pas être décrit par un vecteur d'état $|\Psi_{\text{objet}}\rangle$.

Le but de ce cours est d'abord de présenter les bases de l'étude de tels systèmes ouverts en mécanique quantique, c'est-à-dire définir les outils bien adaptés pour décrire l'évolution d'un objet quantique simple quand il est couplé à son environnement. Nous étudierons souvent des situations physiques qui peuvent avoir un équivalent classique, mais les conclusions seront radicalement différentes. Prenons l'exemple du mouvement d'une particule ponctuelle libre, et intéressons-nous à la modification entraînée par l'existence d'un environnement constitué par un fluide dilué. Classiquement, la première conséquence à laquelle on songe est l'apparition d'une force de friction $\boldsymbol{F} = -\gamma\ \boldsymbol{P}$, où $\boldsymbol{P}$ désigne

l'impulsion de la particule. Cette force ralentit la particule ($\boldsymbol{P}(t) = \boldsymbol{P}_0\ e^{-\gamma t}$) ; on pourrait naïvement penser que la version quantique de cet effet, via l'inégalité de Heisenberg $\Delta X\ \Delta P \geq \hbar/2$, est une augmentation de la « cohérence » de la particule, puisque son impulsion diminue. Nous verrons que la situation est plus complexe que cela ; d'ailleurs une simple évolution de l'opérateur impulsion $\hat{\boldsymbol{P}}$ en $e^{-\gamma t}$ ne préserverait pas les relations de commutation $[\hat{X}_j, \hat{P}_k] = i\hbar\ \delta_{jk}$. Nous verrons qu'au niveau quantique, la dissipation qu'amène le fluide va de pair avec des fluctuations, et ces fluctuations limitent le degré de cohérence accessible.

La « décohérence » qui apparaît lorsqu'un objet quantique est couplé à son environnement joue également un rôle essentiel dans les développements modernes de la théorie de la mesure. Le point dans ce domaine est d'expliquer pourquoi les appareils de mesure ne sont pas dans une superposition cohérente de tous les résultats possibles d'une expérience (un état de type « chat de Schrödinger »). Ici encore, c'est l'interaction avec l'environnement qui se charge de transformer une superposition cohérente du type (1) en un mélange incohérent dont nous préciserons la nature.

Dans la dernière partie de ce cours, nous nous intéresserons à une autre manifestation de la cohérence quantique et de son brouillage, de nature légèrement différente de ce qui précède. Nous reviendrons vers un système isolé, mais nous supposerons qu'il dispose d'un grand nombre de degrés de liberté, comme un gaz de particules. En prenant l'exemple des condensats de Bose-Einstein, nous montrerons que cette cohérence peut se manifester de manière spectaculaire, même entre des systèmes qui n'ont jamais été en contact. Nous verrons également que cette cohérence quantique dépend fortement de la dimensionalité du système. Selon que le système a une géométrie tri-dimensionnelle ou quasi uni-dimensionnelle, nous verrons que la phase macroscopique de l'assemblée atomique peut ou non exister.

Références

Nous donnerons à la fin des différents chapitres les références utiles. Signalons simplement ici les emprunts considérables que ce texte a fait aux cours donnés par C. Cohen-Tannoudji au Collège de France lors des années 1977-78, 1988-89 et 1989-90. Ces cours sont disponibles en version électronique depuis la page web du Département de Physique de l'ENS : `http ://www.phys.ens.fr/cours/`

Chapitre 1

Cohérence quantique et interférences à deux ondes

Ce premier chapitre est consacré à la description de quelques expériences pour lesquelles la cohérence quantique se manifeste de manière spectaculaire. Nous partons d'une situation expérimentale bien connue, les trous d'Young, et nous étudions sa mise en œuvre pratique pour des atomes ou des grosses molécules. Nous considérons également le cas de fonctions d'onde macroscopiques, décrivant une assemblée d'atomes tous condensés dans le même état. Nous étudions ensuite le brouillage possible de cette cohérence, soit par l'intrication de la particule à son environnement (ce qui fournit une information sur le chemin suivi dans l'interféromètre), soit par le désordre apporté par la température finie de l'échantillon considéré.

1 L'expérience des trous d'Young

1.1 Principe

Cette expérience est bien connue de toute personne ayant un jour étudié un phénomène ondulatoire. Le principe est rappelé sur la figure 1.1. Une onde plane arrive sur un écran percé de 2 trous A_+ et A_-. On mesure l'intensité de l'onde sur un deuxième écran situé à une distance D du premier. L'amplitude en un point M de cet écran est la somme des amplitude rayonnées par les deux trous, considérés comme des sources secondaires. En notant $k = 2\pi/\lambda$ le vecteur d'onde, on trouve :

$$A(M) \propto e^{ikd_+} + e^{ikd_-} \qquad \text{avec} \qquad d_\pm = \sqrt{D^2 + (x \pm (a/2))^2} \simeq D \pm \frac{xa}{2D} + \dots \tag{1.1}$$

ce qui conduit à une modulation de l'intensité $I(M) = |A(M)|^2$ en $\cos^2(kxa/(2D))$, soit un interfrange égal à $x_i = \lambda D/a$.

Le caractère paradoxal de cette expérience survient quand on associe une particule à l'onde. Dans un raisonnement classique, une particule passe par un trou ou par l'autre. On s'attend alors à ce que la figure obtenue sur le deuxième écran soit la somme des

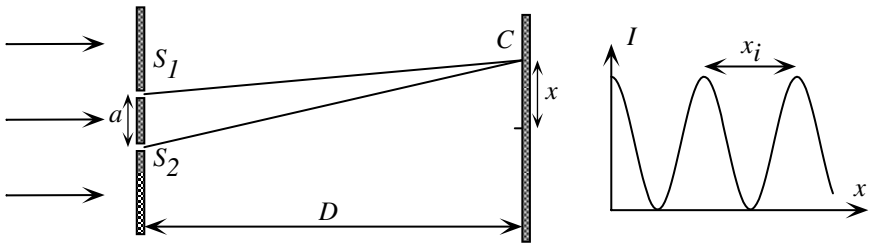

FIG. 1.1: Expérience des trous d'Young.

éclairements obtenus en bouchant un trou ou l'autre. Ce raisonnement classique ne rend pas compte du résultat obtenu expérimentalement avec des objets microscopiques, en particulier de la modulation avec période x_s. Dans cette situation, le fait de permettre à la particule de passer par les deux trous à la fois diminue la probabilité d'atteindre certains points de l'écran, ce qui est évidemment paradoxal d'un point de vue classique.

Plusieurs questions se posent alors naturellement :
- Jusqu'à quelle taille d'objet ce type d'expérience peut-il être mené ?
- Que se passe-t-il si on « enregistre », volontairement ou non, le chemin suivi dans cette expérience d'interférence ?
- Cette interférence entre chemins quantiques peut-elle se généraliser à des chemins plus abstraits, dans un espace de Hilbert à plusieurs particules par exemple ?

1.2 Expérience d'Young avec des atomes

Les premières manifestations du caractère ondulatoire de la matière ont été obtenues avec des particules légères, comme des électrons (expérience de diffraction par Davisson et Germer). Depuis, on cherche à étendre ce type d'expérience à des objets de plus en plus massifs : neutrons, atomes, ou molécules.

Le principe et le résultat d'une expérience d'interférences effectuée avec des atomes[1] dans un dispositif de fentes d'Young est représenté sur la figure 1.2. Un nuage de quelques millions d'atomes de néon est d'abord capturé et refroidi au milliKelvin dans un piège laser. Il est ensuite lâché, sans vitesse initiale, à 3,5 cm au-dessus d'un écran percé de deux fentes parallèles, de largeur 2 microns et séparées par 6 microns. Les atomes sont détectés lorsqu'ils frappent une plaque située 85 cm sous le plan des deux fentes. La plaque détectrice enregistre l'impact de chaque atome, un impact étant représenté par un point sur la figure 1.2.

On observe que ces impacts se distribuent suivant un système de franges parfaitement semblable à celui obtenu dans des interférences lumineuses ou acoustiques. Il y a des zones sombres (beaucoup d'impacts ; flux d'atome intense) parallèles à la direction des fentes, qui alternent avec des zones claires (peu ou pas d'impacts ; flux d'atomes faible).

L'expérience a été reproduite avec d'autres particules : électrons, neutrons, molécules. Dans tous les cas, la distribution des impacts sur l'écran révèle une figure d'interférences.

[1] F. Shimizu, K. Shimizu, H. Takuma, Phys. Rev. A **46**, R17 (1992) et communication privée.

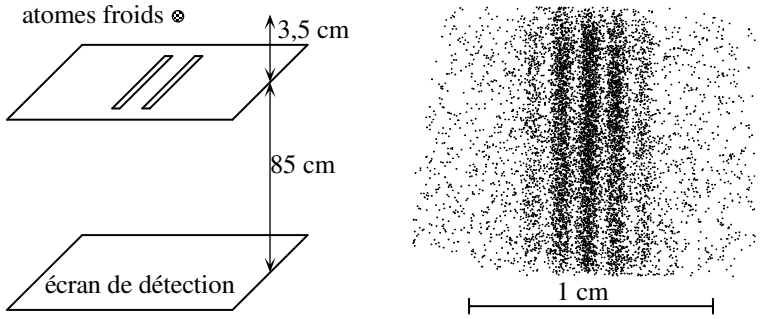

Fig. 1.2: A gauche : expérience de fentes d'Young réalisée avec des atomes de néon, préalablement refroidis par laser au milliKelvin. A droite : distribution observée expérimentalement ; chaque point de la figure correspond à l'impact d'un atome sur la plaque détectrice. Les franges d'interférences sont clairement visibles.

L'interfrange mesuré est $x_i = \lambda D/a$, où la longueur λ et l'impulsion $\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}$ des particules de vitesse $\boldsymbol{v}$, sont reliées par la relation de de Broglie :

$$p = h/\lambda \quad . \tag{1.2}$$

Le calcul précis des franges d'interférences dans l'expérience montrée en figure 1.2 doit prendre en compte la variation de la longueur d'onde de de Broglie $\lambda = h/p$ au fur et à mesure de l'accélération des atomes par le champ de pesanteur. La vitesse des atomes au niveau des fentes est de $0,8\ \mathrm{m\,s^{-1}}$; au niveau de la plaque détectrice, elle est de $4\ \mathrm{m\,s^{-1}}$.

1.3 Interférences quantiques avec de gros objets

Le groupe de A. Zeilinger[2] à Innsbruck, puis à Vienne, a récemment mis en évidence le comportement ondulatoire de grosses molécules comme les fullérènes (C_{60}, masse 720 amu) ou des molécules dérivées ($C_{60}F_{48}$, masse 1632 amu).

Le montage expérimental est un peu plus complexe qu'une simple expérience de trous d'Young (figure 1.3). Il est fondé sur l'effet Talbot. On part de 3 réseaux identiques de pas d de l'ordre du micron, régulièrement espacés (distance D entre 20 et 40 cm). Le premier réseau prépare la cohérence transverse du jet. Le deuxième réseau est responsable de la diffraction. Le troisième réseau est utilisé pour sonder le profil diffracté, dont on s'attend à ce qu'il présente une modulation de période d. Cette modulation liée au caractère ondulatoire du mouvement atomique se superpose à la modulation attendue en prenant simplement des trajectoires classiques rectilignes. On pourra montrer que l'effet ondulatoire est important si $\lambda D \sim d^2$.

L'enjeu de ces expériences est d'étudier s'il existe une éventuelle limite au champ d'application de la mécanique quantique. Dans le cadre de la physique quantique, le phénomène d'interférence en tant que tel reste le même quand on passe d'un électron à

[2]M. Arndt *et al.*, Nature (London) 401, 680 (1999) ; B. Brezger *et al.*, Phys. Rev. Lett. **88**, 100404 (2002) ; L. Hackermüller *et al.*, Phys. Rev. Lett. **91**, 090408 (2003).

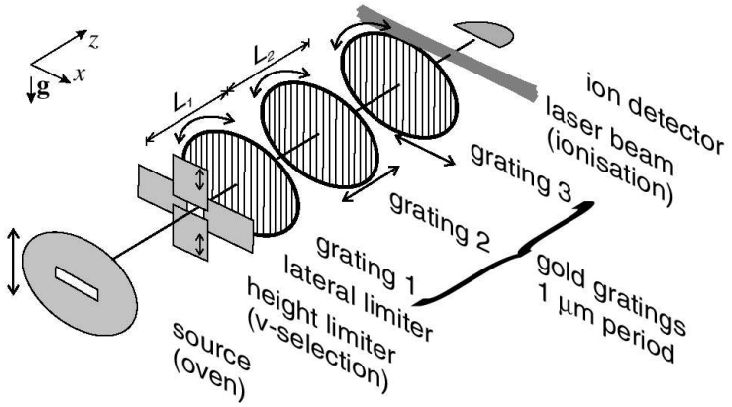

FIG. 1.3: Montage expérimental de B. Brezger *et al.*, utilisant l'effet Talbot pour mettre en évidence le comportement ondulatoire de grosses molécules.

une grosse molécule. C'est le degré de liberté du centre de masse de l'objet qui est en jeu et tous les degrés de liberté interne de la molécule (vibrations, rotations, spin) sont *a priori* spectateurs. En pratique, ces expériences sont rendues difficiles par le fait que ces degrés de liberté peuvent se coupler à l'environnement lors du temps de vol de la molécule dans le dispositif expérimental. Par exemple, la molécule peut émettre spontanément un photon correspondant à la transition entre deux niveaux de vibration. La détection de ce photon peut correspondre à une information sur le chemin suivi, ce qui doit en toute logique diminuer le contraste des interférences observées. Nous approfondirons cette question dans les chapitres qui suivent.

2 Fonctions d'onde macroscopiques

2.1 Condensation de Bose-Einstein

Considérons une assemblée de N particules bosoniques indépendantes, c'est-à-dire sans interaction. A basse température, une fraction macroscopique de l'assemblée s'accumule dans le même état quantique $|\psi_0\rangle$, qui est l'état fondamental de l'hamiltonien à une particule. Pour des particules confinées dans une boîte de volume L^3, le seuil de condensation se produit quand la longueur d'onde thermique $\lambda_T = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$ devient de l'ordre de la distance entre particules $d = n^{-1/3}$, où $n = N/L^3$ est la densité spatiale (plus précisément, il faut que $n\lambda_T^3 > \zeta(3/2) \simeq 2{,}612$).

Dans les expériences sur les gaz dilués, les particules sont en général confinées dans un potentiel harmonique. En supposant ce potentiel isotrope et en notant sa pulsation ω, la fonction d'onde de l'état fondamental est la gaussienne $\psi_0(\boldsymbol{r}) \propto \exp(-r^2/2a_0^2)$, de largeur $a_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$. Le seuil de condensation correspond alors à $N > 1{,}202\ (k_B T\ /\ \hbar\omega)^3$.

La fraction accumulée dans l'état fondamental est appelée *condensat de Bose-Einstein*, et l'état $\psi_0(\boldsymbol{r})$ est appelé fonction d'onde macroscopique du condensat. Plaçons-nous à température nulle pour simplifier. Dans ce cas, toutes les particules sont condensées et la

fonction d'onde de l'assemblée à N particules s'écrit :

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_N) = \psi_0(\boldsymbol{r}_1)\ \psi_0(\boldsymbol{r}_2) \ldots \psi_0(\boldsymbol{r}_N) \tag{1.3}$$

Si les particules interagissent entre elles (ce qui en général le cas dans des expériences), la théorie de la condensation de Bose-Einstein n'est plus exacte. On décrit souvent l'interaction entre deux particules i et j par un potentiel de contact, noté :

$$V(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\delta(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)$$

La quantité a est homogène à une longueur et est appelée longueur de diffusion ; elle caractérise la force du potentiel. On peut alors distinguer deux régimes limites : le cas des interactions faibles, correspondant à $na^3 \ll 1$, et le cas des interactions fortes ($na^3 \geq 1$). Dans le cas des interactions faibles, on peut montrer que la description de l'assemblée à N particules en termes de fonction d'onde à N particules du type (1.3) reste valable. Ce cas est celui qu'on rencontre dans les expériences de condensation des gaz atomiques dilués (alcalins, hydrogène, hélium métastable, etc.).

Pour les système denses, comme l'hélium liquide superfluide, les interactions sont importantes et le critère $na^3 \ll 1$ n'est plus satisfait. On continue néanmoins à décrire le système en terme de fonction d'onde macroscopique $\psi_0(\boldsymbol{r})$, mais cette fonction d'onde ne représente plus l'état de chacun des N atomes constituant le système. Il s'agit d'une quantité plus abstraite, qui joue le rôle pour de paramètre d'ordre pour la transition de phase en jeu (la transition superfluide par exemple). Cette fonction d'onde macroscopique peut néanmoins être utilisée pour décrire les propriétés macroscopiques du système, lors d'un écoulement ou d'une mise en rotation par exemple.

Nous allons maintenant voir comment cette description du système en terme de fonction d'onde macroscopique donne naissance à des phénomènes de cohérence remarquables dans une expérience de type « trous d'Young ». Pour cela, il nous faut d'abord regarder comment les atomes d'un condensat sont confinés dans un piège magnétique et comment on peut extraire des atomes de ce piège.

2.2 Piège magnétique et coupleur radio-fréquence

Pour des atomes alcalins, comme le sodium, le rubidium,..., le dipole magnétique $\boldsymbol{\mu}$ de l'atome dans son état fondamental est de l'ordre du magnéton de Bohr[3], $\mu_B = 9{,}27 \times 10^{-24}$ J/T. L'interaction de ces atomes avec un champ magnétique inhomogène s'écrit :

$$V(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$$

Le piégeage magnétique consiste à aligner au départ $\boldsymbol{\mu}$ et $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$, et à supposer que le moment magnétique garde ensuite son orientation vis-à-vis du champ magnétique local lorsque l'atome bouge. On a donc $V(\boldsymbol{r}) = \pm\mu\ B(\boldsymbol{r})$, où le signe $\pm$ dépend de l'orientation

[3]D'autres atomes, comme l'hélium, ont un moment magnétique beaucoup plus faible dans leur état fondamental, de l'ordre du magnéton nucléaire μ_n.

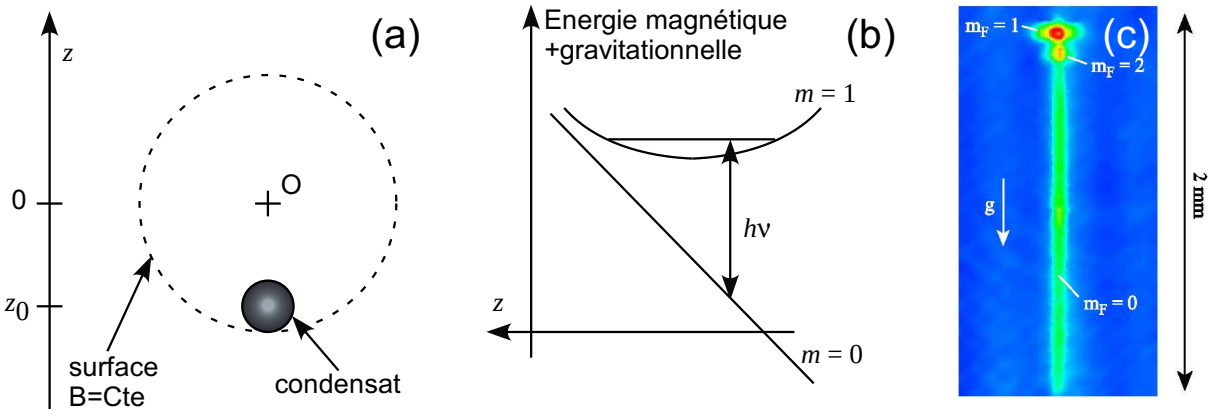

FIG. 1.4: a : Déplacement du centre du condensat dû à la gravitation. (b) Extraction des atomes du condensat en utilisant une onde radio-fréquence. (c) « Laser à atomes » extrait du condensat (figure tirée de l'article d'I. Bloch, T.W. Hänsch, et T. Esslinger, Phys. Rev. Lett. **82**, 3008 (1999)).

choisie au départ. Si le signe + est réalisé, les atomes vont s'accumuler au voisinage d'un minimum local du champ magnétique. Si le signe − est réalisé, les atomes sont attirés vers les zones de grand champ magnétique.

On peut montrer sans grande difficulté qu'il est impossible de réaliser dans le vide une configuration de champ magnétique statique telle que B admette un maximum local. Un atome préparé dans un état où $\boldsymbol{\mu}$ est de même sens que $\boldsymbol{B}$ (pour lequel $V(\boldsymbol{r}) = -\mu\, B(\boldsymbol{r})$) sera donc attiré vers les fils ou les aimants permanents créant le champ, et ne pourra pas être confiné de manière stable.

En revanche, il est possible de réaliser un minimum local de $B(\boldsymbol{r})$. Supposons que le module du champ magnétique s'écrive au voisinage de 0 : $|\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})| = B_0 + \kappa r^2$. Le potentiel magnétique de piégeage sera harmonique et isotrope : $V(\boldsymbol{r}) = V_0 + m\omega^2 r^2/2$. Du fait de la gravité, les atomes seront piégés légèrement en dessous de O, en un point O' d'altitude $z_0 = -g/\omega^2$ (figure 1.4a). Expérimentalement, on a $\omega/2\pi \sim 100$ Hz, soit $z_0 \sim 30$ μm. L'extension r_0 du condensat dans la fonction d'onde ψ_0 est de quelques microns ; comme $r_0 \ll z_0$, on peut considérer que les atomes voient un champ magnétique qui varie linéairement avec leur altitude sur toute l'extension du condensat.

Pour extraire des atomes de manière cohérente du piège magnétique, un moyen particulièrement commode consiste à utiliser une onde radio, qui peut faire basculer les spins des atomes quand ils se trouvent à une distance donnée du centre[4] (figure 1.4b). Notons ν la fréquence de l'onde radio-fréquence et considérons par exemple des atomes de moment cinétique $J = 1$. Ces atomes sont initialement préparés dans l'état $m = 1$, correspondant à $-\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = +|\boldsymbol{\mu}|\ |\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})|$. Les atomes entreront en résonance avec l'onde quand ils croiseront la surface $|\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})| = h\nu/\mu$. Ils basculeront alors vers l'état $m = 0$, dans lequel ils ne sont plus sensibles au champ magnétique et tombent simplement sous l'influence de la gravité. La surface où la bascule se produit est une sphère centrée en O, qui correspond

[4]Ce moyen est également utiliser pour mettre en œuvre le refroidissement par évaporation, qui permet d'atteindre la condensation.

approximativement une portion de plan horizontal sur l'extension du condensat. On peut donc extraire des atomes sélectivement à l'intérieur du condensat, en les faisant sortir à une altitude donnée.

On choisit l'intensité de l'onde radio-fréquence suffisamment faible, pour que la probabilité d'extraction d'un atome traversant cette surface soit petite devant 1. De la sorte, le processus d'extraction est une petite perturbation et il faut attendre une durée de l'ordre de la seconde pour vider complètement le condensat. On peut prendre une photo du filet d'atomes en train de s'écouler sous le condensat (figure 1.4c). Le faisceau atomique ainsi généré est *a priori* cohérent, tout comme le faisceau laser constitué de photons s'échappant d'une cavité électromagnétique à travers un miroir partiellement réfléchissant.

2.3 Interférences entre deux ondes macroscopiques

La cohérence du faisceau atomique ainsi généré a été démontrée de manière spectaculaire par le groupe de Munich. En envoyant deux ondes radio-fréquence de fréquences $\nu_1 = \omega_1/(2\pi)$ et $\nu_2 = \omega_2/(2\pi)$, extrayant donc les atomes à deux altitudes différentes z_1 et z_2, les chercheurs de ce groupe ont mesuré l'interférence entre les deux filets d'atomes extraits de ces deux plans. Les énergies de ces deux filets d'atomes sont $E_i = E_{\text{cond.}} - \hbar\omega_i = Mgz_i$. La fonction d'onde de l'atome dans l'état $m = 0$, qui tombe dans le potentiel de gravitation depuis un point d'altitude z_i, est solution de l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2\psi}{dz^2} + Mgz\,\psi(z) = Mgz_i\,\psi(z)$$

On introduit l'échelle de longueur $l = \left(\hbar^2/2M^2g\right)^{1/3}$ et on pose $Z = (z - z_i)/l$:

$$\psi''(Z) = Z\,\psi(Z)$$

dont la solution tendant vers 0 en $z = +\infty$ est une fonction d'Airy $Ai(Z)$. En utilisant le développement asymptotique de cette fonction quand $|Z|$ est grand et négatif :

$$Ai(Z) \propto \frac{1}{|Z|^{1/4}}\,\exp\left(i\,(2/3)\,|Z|^{3/2}\right)\ ,$$

on trouve que la distribution d'atomes en train de tomber est :

$$\begin{aligned} n(z) &= \left|Ai((z-z_1)/l)\,e^{-iE_1t/\hbar} + Ai((z-z_2)/l)\,e^{-iE_2t/\hbar}\right|^2 \\ &\propto \frac{1}{\sqrt{|z|}}\left\{2 + 2\cos\left[q\left(\sqrt{|z|} - \sqrt{gt^2/2}\right)\right]\right\} \end{aligned}$$

avec $q = M(z_1 - z_2)\sqrt{2g}/\hbar$. On pourra vérifier que cette prédiction reproduit la forme de la distribution observée expérimentalement (figure 1.5a). En particulier, le contraste élevé des franges d'interférences (voisin de 100 %) est une signature de la validité de la description de cette assemblée d'atomes sous forme d'une fonction d'onde macroscopique (1.3).

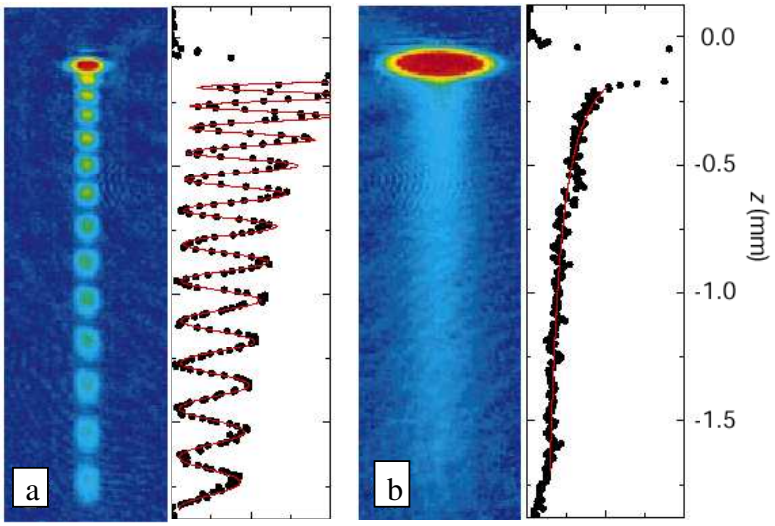

FIG. 1.5: Interférences entre deux ondes de matière issues d'une assemblée d'atomes confinée dans un piège magnétique (a) : condensat de Bose-Einstein ; (b) température plus élevée, au dessus du seuil de condensation. Images extraites de I. Bloch, T. W. Hänsch and T. Esslinger, Nature **403**, 166 (2000).

3 Le brouillage de la cohérence dans une expérience d'Young

3.1 Information sur le chemin suivi dans un interféromètre

Considérons l'expérience de pensée représentée sur la figure 1.6. On réalise l'expérience des fentes d'Young avec des atomes initialement dans un état interne excité $|e\rangle$. Une cavité électromagnétique résonnante avec les atomes est placée derrière chacun des trous d'Young. Chaque cavité est initialement vide, c'est-à-dire qu'elle ne contient aucun photon. En anticipant un peu sur la suite de ce cours, nous noterons cet état $|0_a\rangle$ ou $|0_b\rangle$, c'est-à-dire 0 photon dans la cavité. L'atome en passant dans la cavité peut y laisser un photon et tomber dans son état fondamental $|f\rangle$:

$$\text{Trou A :} \qquad |e, 0_a, 0_b\rangle \rightarrow |f, 1_a, 0_b\rangle \qquad \text{Trou B :} \qquad |e, 0_a, 0_b\rangle \rightarrow |f, 0_a, 1_b\rangle \tag{1.4}$$

L'état $|1_a\rangle$ représente la cavité a avec 1 photon à l'intérieur (et de même pour b). On note pour simplifier $|n_a, n_b\rangle$ l'état produit tensoriel $|n_a\rangle \otimes |n_b\rangle$.

Tout ce qu'il est nécessaire de savoir pour le moment est l'orthonormalité des états $|0_a\rangle$ et $|1_a\rangle$:

$$\langle 0_a|0_a\rangle = 1 \qquad \langle 1_a|1_a\rangle = 1 \qquad \langle 0_a|1_a\rangle = 0 \tag{1.5}$$

et idem pour $|0_b\rangle$ et $|1_b\rangle$.

En absence de couplage entre l'atome et les cavités électromagnétiques, l'état d'un atome après passage par les deux trous d'Young s'écrit

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_a(\boldsymbol{r}) + \psi_b(\boldsymbol{r})\right) |e\rangle \tag{1.6}$$

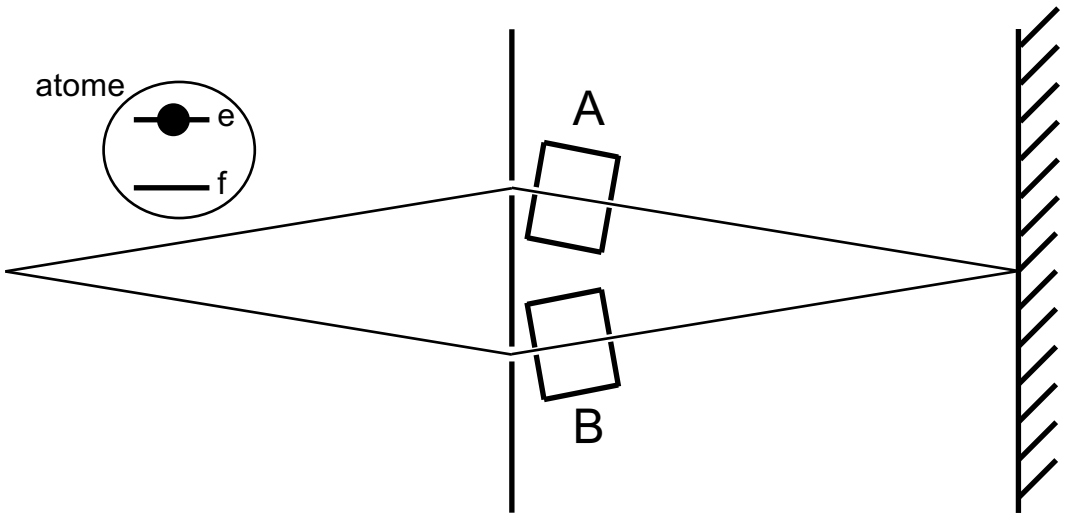

Fig. 1.6: Expérience des trous d'Young, dans laquelle on essaie de détecter le chemin suivi par l'atome, en regardant le photon qu'il laisse dans une des deux cavités électromagnétiques résonantes situés derrière les trous.

et la densité de probabilité pour détecter l'atome en un point $\boldsymbol{r}$ de l'écran vaut :

$$P(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2}\left(|\psi_a|^2 + |\psi_b|^2 + \psi_a^*\psi_b + \psi_a\psi_b^*\right)\ \langle e|e\rangle \tag{1.7}$$

C'est la fonction d'interférence habituelle, avec une modulation de période x_s provenant du terme $\psi_a^*\psi_b + \psi_a\psi_b^*$.

Supposons maintenant les deux cavités mises en place et résonnantes avec les atomes. Après passage de l'atome par les deux trous d'Young et les cavités, l'état du système atome+champ s'écrit :

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_a(\boldsymbol{r})|1_a, 0_b\rangle + \psi_b(\boldsymbol{r})|0_a, 1_b\rangle\right)|f\rangle \tag{1.8}$$

Notons qu'on néglige ici la modification de l'état externe de l'atome ($\psi_{a,b}(\boldsymbol{r})$) lors de l'émission du photon. En toute rigueur, il faudrait prendre en compte le recul de l'atome, c'est-à-dire le changement de l'impulsion atomique par une quantité $\hbar\boldsymbol{k}$, ce qui se traduirait par une multiplication de $\psi_{a,b}(\boldsymbol{r})$ par $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$.

La probabilité de trouver l'atome en un point r est désormais :

$$\begin{aligned} P(\boldsymbol{r}) \quad = \quad & \frac{1}{2}\{|\psi_a|^2\langle 1_a, 0_b|1_a, 0_b\rangle + |\psi_b|^2\langle 0_a, 1_b|0_a, 1_b\rangle & (1.9)\\ & +\psi_a^*\psi_b\langle 1_a, 0_b|0_a, 1_b\rangle + \psi_a\psi_b^*\langle 0_a, 1_b|1_a, 0_b\rangle\}\ \langle f|f\rangle & (1.10)\end{aligned}$$

A cause de l'orthogonalité des états $|0_a\rangle$ et $|1_a\rangle$ (et $|0_b\rangle$ et $|1_b\rangle$), le terme d'interférence disparaît et la probabilité de détection :

$$P(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2}\left(|\psi_a|^2 + |\psi_b|^2\right)\ \langle f|f\rangle \tag{1.11}$$

ne présente aucune modulation à l'échelle de x_s.

La leçon à retenir ici est simple : on a « écrit » le chemin suivi par l'atome sur un détecteur, en l'occurrence les cavités, et le signal d'interférence disparaît. Cette disparition du signal d'interférence n'est pas un brouillage de la fonction d'onde atomique, comme le ferait par exemple une phase aléatoire qui viendrait se mettre devant ψ_b. Le signal disparaît parce que l'état de l'atome s'est intriqué avec l'état de l'environnement, en l'occurrence les cavités. Comme le signal final ne porte que sur l'atome (la fonction $P(\boldsymbol{r})$), l'orthogonalité des états de l'environnement détruit toute interférence.

Gomme quantique ou décohérence. Quand l'information sur le chemin suivi est stockée de manière aussi précise que celle discutée ci-dessus, on peut chercher à l'effacer pour faire réapparaître un signal d'interférence. Cette interférence se manifeste alors sur une fonction de corrélation entre l'atome et les cavités, ce qui révèle la cohérence quantique (c'est-à-dire l'intrication) qui s'est établie entre les différents systèmes[5]. En revanche, bien souvent, l'état de l'environnement est extrêmement complexe à déterminer : ce sera le cas si l'expérience est fait dans un vide imparfait et que les collisions sur le gaz jouent un rôle important, ou encore si la température est assez élevée pour que le rayonnement du corps noir ne puisse pas être négligé. L'intrication du petit système avec l'environnement est alors un processus véritablement irréversible et la cohérence qu'on avait entre les deux points sources de l'expérience d'Young se « dilue » dans l'environnement. Les cours qui suivent seront consacrés à la mise en place du formalisme permettant de décrire l'évolution d'un petit système couplé à un gros réservoir. Notons qu'il existe une source de décohérence inévitable pour un interféromètre à particules matérielles, qui est constituée par le fond d'ondes gravitationnelles, générées par toutes les sources de l'univers, comme par exemple les systèmes binaires dans notre galaxie ou dans des galaxies proches. Cette source est heureusement négligeable pour les interféromètres atomiques actuellement réalisés ou en cours de réalisation[6].

3.2 Le désordre lié à la température

La cohérence quantique peut également disparaître pour un système isolé, si celui-ci comporte un grand nombre de liberté et qu'on augmente sa température. Un exemple est représenté sur la figure 1.5b, où on regarde la superposition de deux filets d'atomes extraits d'un gaz piégé quand la température du gaz est au dessus de la température de condensation. La figure d'interférence qu'on observait à basse température ne se produit plus. Le profil observé est la superposition incohérente des deux jets d'atomes, du moins dès que la distance entre les deux altitudes z_1 et z_2 dépasse la longueur d'onde thermique $\lambda_T = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$, qui est de l'ordre de 0,1 μm pour ces paramètres expérimentaux.

Nous reviendrons dans la dernière partie du cours sur cet aspect de la perte de cohérence d'un système quantique macroscopique, en nous attachant en particulier à discuter l'influence de la dimensionalité (1D ou 3D) du système considéré.

[5] voir par exemple M.O. Scully *et al.*, Nature **351**, 111 (1991).
[6] B. Lamine *et al*, Eur. Phys. J. D. **20**, 165 (2002).

Chapitre 2

Champs quantiques et bains d'oscillateurs

Nous introduisons ici le concept de photon de manière simple, en identifiant les équations de Maxwell dans l'espace libre aux équations du mouvement d'une collection d'oscillateurs harmoniques indépendants. Nous montrons ensuite que cette même identification peut être faite pour d'autres types de champs, comme celui décrivant le mouvement d'une corde vibrante. Ce modèle d'un bain d'oscillateurs harmoniques pouvant se coupler au système étudié sera ensuite fréquemment utilisé dans la suite de ce cours.

A la fin de ce chapitre, nous utilisons le concept de photon pour décrire des expériences d'interférences moins intuitives que celle des trous d'Young décrites au chapitre précédent. Ces expériences mettent simultanément en jeu plusieurs particules : dans ces conditions, le signal obtenu résulte toujours de l'interférence entre plusieurs chemins quantiques, mais ceux-ci sont alors des chemins dans un espace abstrait.

1 Comment caractériser un photon ?

Dans le chapitre précédent, nous avons été amenés à introduire la notion de photon. Dans la mesure où celle-ci sera nécessaire dans plusieurs parties de ce cours, nous allons présenter ici le bagage minimum pour manipuler cette notion dans le cadre de notre programme. Bien sûr, les quelques pages qui suivent ne sauraient en aucun cas se substituer à un véritable cours de théorie quantique des champs. Pour quantifier un champ « selon les règles », il faut déterminer la densité de lagrangien du système et identifier ses variables canoniques. Ici, nous nous contenterons de travailler par analogie, en montrant l'équivalence entre le mouvement du champ électromagnétique (ou celui d'une corde vibrante) et celui d'une assemblée d'oscillateurs harmoniques indépendants.

1.1 Les équations de Maxwell dans l'espace réciproque

Nous nous intéressons ici au champ électromagnétique libre, en absence de source. Les équations d'évolution des champs électriques et magnétiques sont :

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{E}=0 \qquad \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{B}=0 \qquad \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} \qquad \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{B}=\frac{1}{c^2}\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t} \tag{2.1}$$

En désignant par V le volume disponible, l'énergie du champ s'écrit :

$$H=\int_V\left(\frac{\epsilon_0\boldsymbol{E}^2}{2}+\frac{\boldsymbol{B}^2}{2\mu_0}\right)\,d^3r \tag{2.2}$$

Nous ferons le choix de jauge suivant (jauge de Coulomb) :

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A}=0 \quad , \quad V=0 \qquad\qquad \Rightarrow \qquad\qquad \boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t} \quad , \quad \boldsymbol{B}=\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A} \tag{2.3}$$

On se place dans une cavité cubique de volume L^3 et on prend des conditions aux limites périodiques. Les champs $\boldsymbol{E}$ et $\boldsymbol{B}$ peuvent donc se décomposer en séries de Fourier vis à vis de la variable $\boldsymbol{r}$, les vecteurs d'onde autorisés $\boldsymbol{k}$ étant discrétisés :

$$\boldsymbol{k}=\frac{2\pi}{L}\boldsymbol{n} \qquad \boldsymbol{n}\equiv(n_x,n_y,n_z) \qquad n_i \text{ entiers relatifs} \tag{2.4}$$

On pose :

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{L^3}}\sum_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \qquad \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{L^3}}\sum_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{\mathcal{B}}_{\boldsymbol{k}}\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \qquad \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{L^3}}\sum_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{k}}\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{2.5}$$

de sorte que les équations de Maxwell et le choix de jauge s'écrivent :

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}=0 \qquad \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\mathcal{B}}_{\boldsymbol{k}}=0 \qquad i\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}=-\frac{d\boldsymbol{\mathcal{B}}_{\boldsymbol{k}}}{dt} \qquad i\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\mathcal{B}}_{\boldsymbol{k}}=\frac{1}{c^2}\frac{d\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}}{dt} \tag{2.6}$$

$$\boldsymbol{\mathcal{B}}_{\boldsymbol{k}}=i\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{k}} \qquad \boldsymbol{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}=-\frac{d\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{k}}}{dt} \qquad \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{k}}=0 \tag{2.7}$$

On va travailler dans ce qui suit avec $\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}$ et $\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{k}}$, en éliminant le champ magnétique $\boldsymbol{\mathcal{B}}_{\boldsymbol{k}}$. Ceci donne les équations utilisées dans la suite :

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}=0 \qquad \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{k}}=0 \qquad \boldsymbol{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}=-\frac{d\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{k}}}{dt} \qquad c^2k^2\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{k}}=\frac{d\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}}{dt} \tag{2.8}$$

On voit que les champs $\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}$ et $\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{k}}$ sont parallèles entre eux et orthogonaux à $\boldsymbol{k}$. Pour chaque $\boldsymbol{k}$, on se donne alors deux vecteurs unitaires $\boldsymbol{\epsilon}_1$ et $\boldsymbol{\epsilon}_2$ orthogonaux à $\boldsymbol{k}$, qui représentent la base de polarisation. Une base des états du champ est donnée par l'ensemble des modes $\{(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\epsilon}_1)\ ,\ (\boldsymbol{k},\boldsymbol{\epsilon}_2)\}$. En dénotant par l'indice courant $\ell=(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\epsilon}_i)$ chaque mode du champ, on pose $\mathcal{E}_\ell=\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{\epsilon}_i$ et $\mathcal{A}_\ell=\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{\epsilon}_i$, soit

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}=\mathcal{E}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\epsilon}_1}\boldsymbol{\epsilon}_1+\mathcal{E}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\epsilon}_2}\boldsymbol{\epsilon}_2 \tag{2.9}$$

Les équations de Maxwell se résument alors aux deux équations couplées :

$$\mathcal{E}_\ell = -\frac{d\mathcal{A}_\ell}{dt} \qquad\qquad c^2k^2\mathcal{A}_\ell = \frac{d\mathcal{E}_\ell}{dt} \tag{2.10}$$

L'énergie du champ électromagnétique et le champ électrique en un point $\boldsymbol{r}$ s'écrivent avec ces notations :

$$H = \frac{\epsilon_0}{2}\sum_{\ell=(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\epsilon})}\left(|\mathcal{E}_\ell|^2 + c^2k^2|\mathcal{A}_\ell|^2\right) \qquad \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}}\sum_{\ell=(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\epsilon})}\mathcal{E}_\ell\,\boldsymbol{\epsilon}\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{2.11}$$

1.2 Analogie avec une collection d'oscillateurs harmoniques

Considérons un problème *a priori* non relié, constitué par une collection d'oscillateurs harmoniques à une dimension, repérés par un indice ℓ. Chaque oscillateur a une masse m_ℓ et une fréquence ω_ℓ. Les oscillateurs sont indépendants, c'est-à-dire qu'ils n'interagissent pas entre eux. L'énergie de cet ensemble d'oscillateurs et les équations du mouvement correspondantes s'écrivent :

$$H = \sum_\ell \frac{p_\ell^2}{2m_\ell} + \frac{1}{2}m_\ell\omega_\ell^2x_\ell^2 \qquad m_\ell\frac{dx_\ell}{dt} = p_\ell \qquad \frac{dp_\ell}{dt} = -m_\ell\omega_\ell^2x_\ell \tag{2.12}$$

L'analogie avec l'énergie du champ électromagnétique et les équations de Maxwell est complète. Si on pose :

$$\omega_\ell = ck \qquad \sqrt{m_\ell}\,x_\ell = \sqrt{\epsilon_0}\,\mathcal{A}_\ell \qquad \frac{p_\ell}{\sqrt{m_\ell}} = -\sqrt{\epsilon_0}\,\mathcal{E}_\ell \tag{2.13}$$

on voit que la dynamique du champ électromagnétique est complètement équivalente à celle des oscillateurs harmoniques indépendants. Dans la mesure où la quantification d'un oscillateur harmonique est une procédure bien identifiée, la quantification du champ va s'en déduire immédiatement.

1.3 Quantification d'un oscillateur harmonique

Pour un oscillateur harmonique, le passage de la mécanique classique à la mécanique quantique se fait en remplaçant les variables x et p par des opérateurs $\hat{x}$ et $\hat{p}$, en imposant la relation de commutation $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$. On en déduit immédiatement le spectre en $(n + 1/2)\hbar\omega$. Une manière très commode pour arriver au résultat consiste à introduire des opérateurs position et impulsion réduits :

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{x} \qquad\qquad \hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \qquad\qquad [\hat{X},\hat{P}] = i\hbar$$

et les opérateurs destruction et création :

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\hat{X} + i\hat{P}) \qquad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\hat{X} - i\hat{P}) \tag{2.14}$$

Ces opérateurs vérifient $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$, et ils permettent de construire tous les états propres à partir de l'état fondamental $|0\rangle$:

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \qquad \Rightarrow \qquad |n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\,|0\rangle \tag{2.15}$$

et

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \quad \text{si} \quad n>0 \qquad\qquad \text{et} \qquad\qquad \hat{a}|0\rangle = 0 \tag{2.16}$$

L'hamiltonien associé à l'oscillateur s'écrit :

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} \;+\; 1/2\right) \tag{2.17}$$

Remarque : nous allons maintenant procéder à l'identification $x \leftrightarrow \mathcal{A}_\ell$ et $p \leftrightarrow \mathcal{E}_\ell$ pour quantifier le champ. Une légère difficulté subsiste : habituellement, les variables de départ x et p sont réelles, alors qu'ici $\boldsymbol{\mathcal{A}_k}$ et $\boldsymbol{\mathcal{E}_k}$ sont complexes (avec $\boldsymbol{\mathcal{A}_{-k}}^* = \boldsymbol{\mathcal{A}_k}$ et $\boldsymbol{\mathcal{E}_{-k}}^* = \boldsymbol{\mathcal{E}_k}$). La procédure de quantification canonique pour un oscillateur X, P complexe est modifiée de la manière suivante : on associe à X, P des opérateurs $\hat{X}, \hat{P}$ tels que $[\hat{X}, \hat{P}] = 0$ et $[\hat{X}, \hat{P}^\dagger] = i$, les opérateurs $\hat{a} = (\hat{X} + i\hat{P})/\sqrt{2}$ et $\hat{a}^\dagger = (\hat{X}^\dagger - i\hat{P}^\dagger)/\sqrt{2}$ vérifiant toujours $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. On pourra se convaincre de la validité de cette procédure[1] en décomposant X, P en leur partie réelle et imaginaire ($X = (X_1 + iX_2)/\sqrt{2}$, $P = (P_1 + iP_2)/\sqrt{2}$), ce qui permet de se ramener à un couple de deux oscillateurs réels indépendants (X_1, P_1) et (X_2, P_2).

1.4 Quantification d'un mode du champ

On duplique la quantification d'un oscillateur matériel pour chaque mode du champ électromagnétique. On associe aux variables classiques $\mathcal{A}_\ell$ et $\mathcal{E}_\ell$ des opérateurs $\hat{\mathcal{A}}_\ell$ et $\hat{\mathcal{E}}_\ell$. Grâce à (2.13), la relation de commutation $[\hat{x}, \hat{p}^\dagger] = i\hbar$ se transpose immédiatement en $[\hat{\mathcal{A}}_\ell, -\hat{\mathcal{E}}_\ell{}^\dagger] = i\hbar/\epsilon_0$. On introduit ici encore *les opérateurs création et annihilation pour le mode* ℓ :

$$\hat{a}_\ell = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{2\hbar\omega_\ell}}\,\left(\omega_\ell\hat{\mathcal{A}}_\ell - i\hat{\mathcal{E}}_\ell\right) \qquad\qquad \hat{a}_\ell^\dagger = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{2\hbar\omega_\ell}}\,\left(\omega_\ell\hat{\mathcal{A}}_\ell + i\;\hat{\mathcal{E}}_\ell\right) \tag{2.18}$$

L'hamiltonien correspond à l'énergie du mode s'écrit

$$\hat{H}_\ell = \hbar\omega_\ell\left(\hat{a}_\ell^\dagger\hat{a}_\ell \;+\; 1/2\right) \tag{2.19}$$

et ses énergies propres sont les $(n + 1/2)\hbar\omega_\ell$. L'état fondamental $|0_\ell\rangle$ est appelé *le vide* pour le mode ℓ. Chaque excitation du mode ℓ est appelé *photon*. L'état $|n_\ell\rangle$ correspond ainsi à n_ℓ photons présents dans le mode ℓ. La différence en énergie entre l'état à n_ℓ

[1] On peut construire un deuxième oscillateur indépendant du premier en posant $\hat{b} = (\hat{X}^\dagger + i\hat{P}^\dagger)/\sqrt{2}$ et $\hat{b}^\dagger = (\hat{X} - i\hat{P})/\sqrt{2}$. On pourra se convaincre dans la suite que cet oscillateur « de deuxième type » pour le mode $\ell \equiv (\boldsymbol{k}, \boldsymbol{\epsilon})$ n'est autre que l'oscillateur « de premier type » pour le mode $\ell' \equiv (-\boldsymbol{k}, -\boldsymbol{\epsilon})$, du fait de la relation découlant de la réalité de $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{E}$: $\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{k}}^* = \boldsymbol{\mathcal{A}}_{-\boldsymbol{k}}$ et $\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}^* = \boldsymbol{\mathcal{E}}_{-\boldsymbol{k}}$. Il n'y a donc pas lieu de le considérer ici pour éviter les doubles comptages.

photons et le vide est $n_\ell \hbar\omega_\ell$, ce qui correspond bien à l'idée qu'un photon du mode ℓ a l'énergie $\hbar\omega_\ell$.

La construction explicite des états à $|n_\ell\rangle$ photons à partir du vide se fait comme pour un oscillateur matériel :

$$\hat{a}_\ell^\dagger |n_\ell\rangle = \sqrt{n_\ell + 1}\, |n_\ell + 1\rangle \qquad \Rightarrow |n_\ell\rangle = \frac{(\hat{a}_\ell^\dagger)^{n_\ell}}{\sqrt{n_\ell!}}\, |0\rangle \tag{2.20}$$

et

$$\hat{a}_\ell |n_\ell\rangle = \sqrt{n_\ell}\, |n_\ell - 1\rangle \quad \text{si} \quad n_\ell > 0 \qquad \text{et} \qquad \hat{a}_\ell |0_\ell\rangle = 0 \tag{2.21}$$

Dans cette dernière équation, attention de ne pas confondre l'état *vide* du mode ℓ, noté $|0_\ell\rangle$, qui est un état de norme 1, correspondant à un état physique parfaitement légitime, et le vecteur nul de l'espace de Hilbert noté 0.

1.5 Quantification du champ

Comme les différents modes du champ sont découplés les uns des autres (la théorie de Maxwell est linéaire), la quantification se fait de manière indépendante pour ces différents modes. Les couples d'opérateurs $(a_\ell, a_\ell^\dagger)$ et $(a_{\ell'}, a_{\ell'}^\dagger)$ correspondant à deux modes ℓ et ℓ' du champ commutent entre eux puisqu'ils se rapportent à des systèmes différents.

Une base de l'espace associé à la description de l'état du champ est composée des vecteurs :

$$|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \ldots \otimes |n_\ell\rangle \otimes \ldots |n_{\ell'}\rangle \otimes \ldots \equiv |n_1, n_2, \ldots, n_\ell, \ldots, n_{\ell'}, \ldots\rangle$$

c'est-à-dire n_1 photons dans le mode 1, n_2 photons dans le mode 2, ..., n_ℓ photons dans le mode ℓ, etc. Cette base est une base propre de l'hamiltonien[2] :

$$\hat{H} = \sum_\ell \hbar\omega_\ell\ \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \text{constante} \tag{2.22}$$

On peut également définir *l'opérateur champ électrique au point* $\boldsymbol{r}$ en utilisant le développement (2.5) et en regroupant les contributions des modes $(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{\epsilon})$ et $((-\boldsymbol{k}, -\boldsymbol{\epsilon})$:

$$\hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r}) = \hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r}) + \hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}(\boldsymbol{r}) \tag{2.23}$$

avec

$$\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r}) = i \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\epsilon}} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 L^3}}\ \boldsymbol{\epsilon}\ e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\ \hat{a}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\epsilon}} \qquad \hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}(\boldsymbol{r}) = \left(\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r})\right)^\dagger \tag{2.24}$$

[2]La constante cache pudiquement une somme de $\hbar\omega_\ell/2$ sur tous les modes, donc un infini. Cet infini n'est qu'un aperçu des problèmes qui surgissent en théorie des champs, c'est-à-dire les systèmes avec un nombre infini de degrés de liberté. Nous n'en dirons pas plus dans ce cours car ces infinis ne joueront pas de rôle, mais il est clair qu'il faut résoudre ce problème pour calculer précisément certaines quantités physiques (déplacement de Lamb des niveaux atomiques par exemple...).

1.6 Signaux de photo-détection

Nous utiliserons l'expression du signal donnant la probabilité $P(\boldsymbol{r})$ de détecter un photon de polarisation donnée $\boldsymbol{\epsilon}$ au point $\boldsymbol{r}$, pour un état donné $|\Psi\rangle$ du champ électromagnétique. On peut montrer que cette probabilité s'écrit :

$$\begin{aligned} P(\boldsymbol{r}) &\propto \langle\Psi| \left(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}(\boldsymbol{r})\right) \left(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r})\right)|\Psi\rangle \\ &\propto \left\|\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r})|\Psi\rangle\right\|^2 \end{aligned} \tag{2.25}$$

Le coefficient de proportionnalité, qui fait intervenir l'efficacité des détecteurs, est sans importance à ce stade. On vérifiera que si le champ électromagnétique est dans son état fondamental ($n_\ell = 0$ pour tout mode ℓ), la probabilité de détecter un photon en $\boldsymbol{r}$ est nulle.

On s'intéressera également à la probabilité de détecter un photon de polarisation $\boldsymbol{\epsilon}_1$ au point $\boldsymbol{r}_1$, et un autre photon de polarisation $\boldsymbol{\epsilon}_2$ au point $\boldsymbol{r}_2$. Cette probabilité s'écrit :

$$\begin{aligned} P(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) &\propto \langle\Psi| \left(\boldsymbol{\epsilon}_1\cdot\hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}(\boldsymbol{r}_1)\right) \left(\boldsymbol{\epsilon}_2\cdot\hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}(\boldsymbol{r}_2)\right) \left(\boldsymbol{\epsilon}_2\cdot\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r}_2)\right) \left(\boldsymbol{\epsilon}_1\cdot\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r}_1)\right)|\Psi\rangle \\ &\propto \left\|\left(\boldsymbol{\epsilon}_2\cdot\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r}_2)\right) \left(\boldsymbol{\epsilon}_1\cdot\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r}_1)\right)|\Psi\rangle\right\|^2 \end{aligned} \tag{2.26}$$

On vérifiera aisément que cette quantité ne peut être non nulle que si l'état du champ contient au moins deux photons, qui peuvent être dans le même mode ou dans deux modes différents.

2 Quantification du mouvement d'une corde vibrante

La procédure que nous venons de suivre n'est pas spécifique à la quantification du champ électromagnétique et elle peut être utilisée pour de nombreux autres champs. Prenons l'exemple des vibrations d'un solide, c'est-à-dire un modèle de corde vibrante.

Considérons une corde de longueur L, de tension τ et de masse linéique ρ. Cette corde, tendue le long de l'axe Oz, peut vibrer dans le plan xOz ; on se limite ici aux petits écarts par rapport à l'axe Oz (figure 2.1). L'état de la corde à un instant donné est caractérisé par la fonction $x(z,t)$, qui est un champ scalaire à une dimension. L'angle de la tangente à la corde avec l'axe Oz est :

$$\alpha(z,t) = \frac{\partial x}{\partial z} \tag{2.27}$$

et on suppose $\alpha(z,t) \ll 1$. La relation fondamentale de la dynamique appliquée à un élément centré en z et de longueur δz donne :

$$\rho\ \delta z\ \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} = \tau\left(\alpha\left(z+\frac{\delta z}{2}\right) - \alpha\left(z-\frac{\delta z}{2}\right)\right) = \tau\ \delta z\ \frac{\partial \alpha}{\partial z} \tag{2.28}$$

On en déduit l'équation d'onde :

$$\rho\ \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} = \tau\ \frac{\partial^2 x}{\partial z^2} \tag{2.29}$$

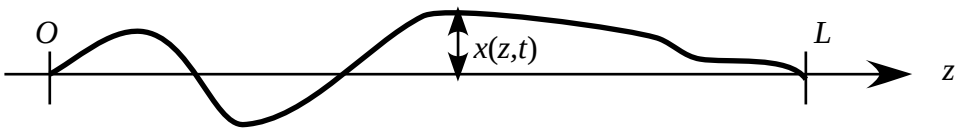

Fig. 2.1: Mouvement d'une corde vibrante.

correspondant à une vitesse de propagation $c = \sqrt{\tau/\rho}$.

On peut identifier l'énergie cinétique et l'énergie potentielle de la corde vibrante. L'énergie cinétique de l'élément δz considéré plus haut vaut $\frac{1}{2}\rho\,\delta z\,\left(\frac{\partial x}{\partial t}\right)^2$; l'énergie cinétique totale est donc :

$$E_c(t) = \frac{\rho}{2}\int_0^L \left(\frac{\partial x}{\partial t}\right)^2 dz \tag{2.30}$$

L'énergie potentielle se calcule à partir de l'allongement de la corde :

$$E_p(t) = \tau\Delta L = \tau\int_0^L \sqrt{1+\alpha^2(z,t)}\,dz \;\; - \;\; \tau L \simeq \frac{\tau}{2}\int_0^L \left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)^2 dz \tag{2.31}$$

Décomposons maintenant le mouvement de la corde selon ses modes propres :

$$x(z,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sum_k \sin(kz)\; X_k(t) \tag{2.32}$$

Les conditions aux limites $x(0,t) = x(L,t) = 0$ imposent kL/π entier positif. La vitesse de la corde au point z s'écrit :

$$v(z,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sum_k \sin(kz)\; V_k(t) \qquad \text{avec} \qquad V_k(t) = \dot{X}_k(t) \tag{2.33}$$

L'équation du mouvement de la corde est avec ces notations :

$$\rho\dot{V}_k(t) = -\tau k^2 X_k(t) \tag{2.34}$$

La dynamique de la corde se ramène donc au mouvement d'une assemblée infinie d'oscillateurs harmoniques indépendants ; à chaque mode k de vibration de la corde est associé un oscillateur de fréquence $\omega_k = ck$. Cette interprétation se confirme quand on exprime les énergies cinétique et potentielles en fonction des X_k et des V_k :

$$E_c \;=\; \frac{\rho}{2}\int_0^L \frac{2}{L}\sum_{k,k'} \sin kz\;\sin k'z\; V_k(t)\; V_{k'}(t) = \frac{\rho}{2}\sum_k V_k^2(t) \tag{2.35}$$

$$E_p \;=\; \frac{\tau}{2}\int_0^L \frac{2}{L}\sum_{k,k'} kk'\cos kz\cos k'z\; X_k(t)X_{k'}(t) = \frac{\tau}{2}\sum_k k^2 X_k^2(t) \tag{2.36}$$

soit

$$E = \sum_k \frac{1}{2}\rho V_k^2 + \frac{1}{2}k^2\tau X_k^2 \tag{2.37}$$

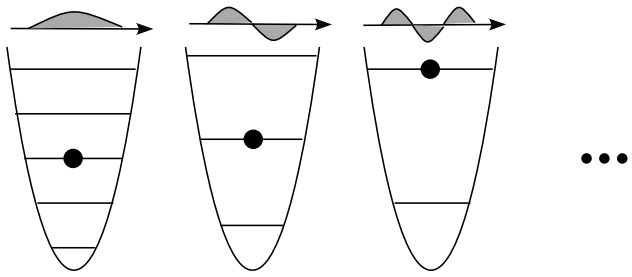

FIG. 2.2: Représentation de l'état quantique d'une corde vibrante. Les trois premiers modes de vibration, de pulsation $\omega = n\,c\pi/L$ avec $n = 1, 2, 3$ sont indiqués sur la ligne du haut. À chaque mode est associé un oscillateur harmonique quantifié, et le degré d'excitation de cet oscillateur pour l'état de la corde $|2, 1, 1, 0, \ldots\rangle$ est indiqué par une pastille noire.

On quantifie alors chaque oscillateur harmonique comme si c'était un oscillateur matériel. On associe au couple "position–impulsion" pour un mode donné (X_k, P_k) (avec $P_k = \rho V_k$) un couple d'opérateurs $(\hat{X}_k, \hat{P}_k)$ tels que $[\hat{X}_k, \hat{P}_{k'}] = i\hbar\delta_{k,k'}$. On introduit ensuite des opérateurs a_k et $a_k^\dagger$ tels que :

$$a_k = \sqrt{\frac{\rho\omega_k}{2\hbar}}\hat{X}_k + i\frac{\hat{P}_k}{\sqrt{2\hbar\rho\omega_k}} \qquad a_k^\dagger = \sqrt{\frac{\rho\omega_k}{2\hbar}}X_k - i\frac{\hat{P}_k}{\sqrt{2\hbar\rho\omega_k}} \tag{2.38}$$

avec $[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'}$. L'hamiltonien du système est

$$H = \sum \hbar\omega_k \left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2}\right) \tag{2.39}$$

Une base de l'espace des états de la corde s'obtient en considérant les vecteurs correspondant à une excitation donnée pour chaque mode k :

$$|n_{\pi/L}, n_{2\pi/L}, \ldots\rangle \tag{2.40}$$

L'état fondamental de la corde est donné par $|0, 0, \ldots\rangle$. Notons que cet état fondamental a une énergie infinie : $\sum_k \hbar\omega_k/2$; il faudrait renormaliser notre théorie pour éliminer cet infini non physique.

On a représenté sur la figure 2.2 l'état $|2, 1, 1, \ldots\rangle$. C'est un état à 4 « cordons » (ce qui remplace les photons pour notre corde), deux cordons dans l'état $k = \pi/L$, 1 cordon dans l'état $k = 2\pi/L$ et 1 cordon dans l'état $k = 3\pi/L$. Les opérateurs a_k et $a_k^\dagger$ s'interprètent comme les opérateurs annihilation et création d'un cordon dans le mode k. Enfin l'opérateur *déformation de la corde* (qui joue le rôle de l'opérateur champ électrique ou champ magnétique) s'obtient à partir de (2.32) :

$$\hat{x}(z, t) = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{\rho\omega_k L}}\ \sin kz\ (a_k + a_k^\dagger) \tag{2.41}$$

3 Interférences à plusieurs particules

Dans ce dernier paragraphe, nous allons mettre en œuvre le formalisme que nous venons de développer pour étudier des expériences d'interférence plus « subtiles » que l'expérience des fentes d'Young considérée au premier chapitre.

Supposons qu'une étoile double nous envoie de la lumière avec deux vecteurs d'onde $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$. Ces deux vecteurs sont proches l'un de l'autre et on cherche à déterminer leur angle φ. La première solution, proposée par Michelson, consiste à fabriquer un interféromètre. Le problème de cet interféromètre est sa très grande sensibilité aux fluctuations du chemin optique, liées par exemple aux turbulences de l'atmosphère. Une deuxième méthode, beaucoup plus robuste, a été proposée par Hanbury-Brown et Twiss[3], et est fondée sur des corrélations d'intensité. Nous allons examiner ces deux méthodes, d'abord en termes de champs classiques, puis en termes de photons. Ceci nous permettra d'utiliser le formalisme que nous venons de mettre au point et nous verrons ainsi un exemple concret d'interférences à plusieurs particules.

3.1 L'interféromètre stellaire de Michelson

Le principe de cet interféromètre est représenté sur la figure 2.3. Les points $\boldsymbol{r}_1$ et $\boldsymbol{r}_2$ sont conjugués optiquement au point P par la lentille. Les trajets optiques de $\boldsymbol{r}_{1,2}$ à P sont donc égaux et l'intensité détectée au point P s'écrit :

$$I(P) = \langle |E(P)|^2 \rangle \qquad \text{avec} \qquad E(P) = E(\boldsymbol{r}_1) + E(\boldsymbol{r}_2) \tag{2.42}$$

soit

$$I(P) = \langle |E(\boldsymbol{r}_1)|^2 \rangle + \langle |E(\boldsymbol{r}_2)|^2 \rangle \; + \; \langle E^*(\boldsymbol{r}_1)\, E(\boldsymbol{r}_2) \rangle \; + \; \langle E(\boldsymbol{r}_1)\, E^*(\boldsymbol{r}_2) \rangle \tag{2.43}$$

l'interférence provenant des deux derniers termes. Dans le cas d'une source double, on a :

$$E(\boldsymbol{r}_1) = E_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_1} + E_{\boldsymbol{k}'} e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}_1} \qquad\qquad E(\boldsymbol{r}_2) = E_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_2} + E_{\boldsymbol{k}'} e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}_2} \tag{2.44}$$

Les fluctuations des phases des champs électriques émis par les deux composantes de l'étoile double sont décorrélées. Quand on évalue l'intensité moyenne, on a donc :

$$\langle E_{\boldsymbol{k}} \rangle = \langle E_{\boldsymbol{k}'} \rangle = \langle E^*_{\boldsymbol{k}'} E_{\boldsymbol{k}} \rangle = 0 \tag{2.45}$$

En supposant pour simplifier que les deux composantes ont la même intensité moyenne :

$$\langle E^*_{\boldsymbol{k}} E_{\boldsymbol{k}} \rangle = \langle E^*_{\boldsymbol{k}'} E_{\boldsymbol{k}'} \rangle = I_0 \; , \tag{2.46}$$

on arrive à :

$$\begin{aligned} I(P)/I_0 &= 2 + \cos(\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)) + \cos(\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)) && (2.47)\\ &= 2 + 2\cos((\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}_0/2)\;\; \cos((\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)) && (2.48)\\ &\simeq 2 + 2\cos((\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}_0/2)\cos(kr_0\phi/2) && (2.49) \end{aligned}$$

[3] H. Hanbury-Brown and R.Q. Twiss, Nature **178**, 1046 (1956).

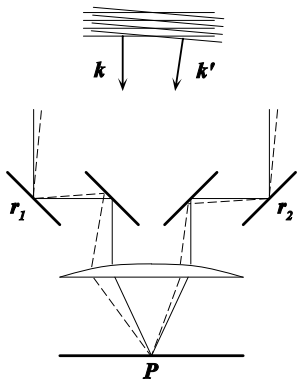

FIG. 2.3: Interféromètre stellaire de Michelson. Cet interféromètre permet la mesure de l'angle entre les vecteurs d'onde $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$, correspondant à la lumière émise par les composantes d'une étoile double.

où on a posé $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$. Le dernier terme en $\cos(kr_0\phi/2)$ contient l'information intéressante. En faisant varier r_0, on peut déterminer l'angle φ entre $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$. La difficulté principale de cette méthode provient du terme $\cos((\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}_0/2)$ qui est très sensible aux fluctuations atmosphériques qui changent légèrement $\boldsymbol{k}$ ou $\boldsymbol{k}'$.

3.2 L'effet Hanbury-Brown et Twiss

Supposons qu'on dispose deux détecteurs aux points $\boldsymbol{r}_1$ et $\boldsymbol{r}_2$ et qu'on mesure la corrélation entre les intensités des deux détecteurs (figure 2.4). Le signal détecté est alors :

$$C = \langle I(\boldsymbol{r}_1)\ I(\boldsymbol{r}_2)\rangle = \langle E^*(\boldsymbol{r}_1)\ E(\boldsymbol{r}_1)\ E^*(\boldsymbol{r}_2)\ E(\boldsymbol{r}_2)\rangle \tag{2.50}$$

On remplace $E(\boldsymbol{r}_1)$ et $E(\boldsymbol{r}_2)$ par leur valeur

$$E(\boldsymbol{r}_1) = E_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_1} + E_{\boldsymbol{k}'}e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}_1} \qquad\qquad E(\boldsymbol{r}_2) = E_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_2} + E_{\boldsymbol{k}'}e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}_2} \tag{2.51}$$

ce qui donne :

$$C = \langle\Big(|E_{\boldsymbol{k}}|^2 + |E_{\boldsymbol{k}'}|^2 + E^*_{\boldsymbol{k}}E_{\boldsymbol{k}'}\ e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_1} + E_{\boldsymbol{k}}E^*_{\boldsymbol{k}'}\ e^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_1}\Big)\ (\boldsymbol{r}_1 \leftrightarrow \boldsymbol{r}_2)\rangle \tag{2.52}$$

On développe le produit en utilisant la décorrélation entre les champs $E_{\boldsymbol{k}}$ et $E_{\boldsymbol{k}'}$:

$$C \propto \langle(|E_{\boldsymbol{k}}|^2 + |E_{\boldsymbol{k}'}|^2)^2\rangle + 2\langle|E_{\boldsymbol{k}}|^2|E_{\boldsymbol{k}'}|^2\rangle\cos((\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)) \tag{2.53}$$

On retrouve la modulation en $(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2) = kr_0\phi$, mais sans le préfacteur sensible aux fluctuations atmosphériques. Cette méthode rend donc la mesure de l'angle ϕ beaucoup plus simple.

3.3 Interprétation corpusculaire de l'effet H-B et T

Supposons que l'état du champ soit un état à deux photons, avec un photon dans le mode $\boldsymbol{k}$ et un photon dans le mode $\boldsymbol{k}'$:

$$|\Psi\rangle = |1_{\boldsymbol{k}}, 1_{\boldsymbol{k}'}\rangle \tag{2.54}$$

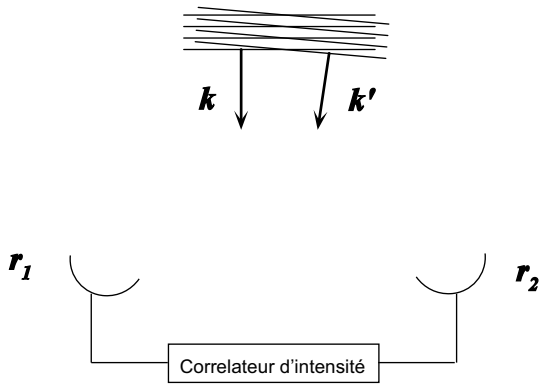

Fig. 2.4: Méthode mise au point par Hanbury-Brown et Twiss pour mesurer la différence $\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$, fondée sur la corrélation en intensité.

Le photon du mode $\boldsymbol{k}$ a été émis par la source S et le photon $\boldsymbol{k}'$ par la source S'. On veut calculer la probabilité de détecter un photon au point $\boldsymbol{r}_1$ et un autre au point $\boldsymbol{r}_2$ en utilisant (2.26). Dans le développement de $E^{(+)}$, seuls vont compter les deux modes initialement peuplés $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$. En supposant que ces deux modes ont la même fréquence ω et en oubliant la polarisation pour simplifier les notations, le calcul de la corrélation cherchée se ramène à :

$$P(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) \propto \left\| \left(a_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_1} + a_{\boldsymbol{k}'} e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}_1} \right) \left(a_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_2} + a_{\boldsymbol{k}'} e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}_2} \right) |1_{\boldsymbol{k}}, 1_{\boldsymbol{k}'}\rangle \right\|^2 \tag{2.55}$$

Quand on développe le produit, 4 termes apparaissent. Deux sont nuls ; ce sont ceux qui contiennent $a_{\boldsymbol{k}}^2$ ou $a_{\boldsymbol{k}'}^2$. On ne peut détruire deux photons $\boldsymbol{k}$ sur un état n'en contenant qu'un ! Il reste donc la contribution des deux termes $a_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}'}$:

$$P(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) \propto \left| e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}_2)} + e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_2+\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}_1)} \right|^2 = 2 + 2\cos((\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)) \tag{2.56}$$

On retrouve bien la modulation calculée ci-dessus pour des champs classiques.

L'intérêt de l'expression (2.56) est de bien montrer la relation entre l'effet HB-T et un effet d'interférence. Le signal détecté est relié à la superposition cohérente de deux amplitudes de probabilité :

$$\begin{pmatrix} A \to \boldsymbol{r}_1 \\ B \to \boldsymbol{r}_2 \end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad \begin{pmatrix} A \to \boldsymbol{r}_2 \\ B \to \boldsymbol{r}_1 \end{pmatrix} \tag{2.57}$$

avec en particulier une interférence constructive en $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_2$.

Conclusion

En résumé, les idées importantes de ces deux premiers cours sont les suivantes :

– Un système quantique avec quelques degrés de liberté seulement pert sa cohérence en s'intriquant avec son environnement. L'état de l'ensemble "système+environnement" reste décrit par un vecteur d'état, mais les interférences qui permettaient de caractériser la cohérence du système initial voient leur contraste diminuer, voire disparaître.

- Un système quantique avec beaucoup de degrés de liberté (un gaz de bosons par exemple) peut perdre sa cohérence même s'il est isolé, si sa température est assez élevée.
- La cohérence d'un système peut se manifester d'une manière plus subtile que *via* une figure d'interférence à une particule. Les effets de cohérence observables peuvent résulter de l'interférence entre chemins quantiques dans un espace abstrait. D'un point de vue mathématique, les interférences à un photon (ou plus généralement à une particule) font intervenir des quantités du type $\langle E^*(\boldsymbol{r}_1)\, E(\boldsymbol{r}_2)\rangle$ (souvent appelée fonction g_1) alors que les interférences à deux photons (corrélation d'intensité) sont sensibles à $\langle E^*(\boldsymbol{r}_1)\, E(\boldsymbol{r}_1)\, E^*(\boldsymbol{r}_2)\, E(\boldsymbol{r}_2)\rangle$ (souvent appelée fonction g_2).
- Nous avons développé un formalisme simple, mais efficace, pour décrire quantiquement un champ auquel peut se coupler le système que nous considérons. Ce champ quantifié peut être vu comme un bain d'oscillateurs harmoniques avec des fréquences ω_λ multiples d'un quantum de base $2\pi\, c/L$; chaque oscillateur correspond à un mode propre du champ et il est caractérisé par un opérateur de création et un opérateur d'annihilation a_λ et $a_\lambda^\dagger$.

Prolongements

1. A partir de l'état à deux photons (2.54), calculer à partir de (2.25) la probabilité $P(\boldsymbol{r})$ de détecter un photon au point $\boldsymbol{r}$. Cette probabilité présente-t-elle un signe d'interférence ? On pourra ensuite se poser la même question pour l'état à 1 photon :

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1_{\boldsymbol{k}}, 0_{\boldsymbol{k}'}\rangle + e^{i\phi}|0_{\boldsymbol{k}}, 1_{\boldsymbol{k}'}\rangle\right) \tag{2.58}$$

   Que se passe-t-il si on refait la même expérience un grand nombre de fois et qu'on moyenne les résultats, avec une phase ϕ fluctuant d'une réalisation de l'expérience à une autre ?

2. Nous avons traité ici l'effet HB-T pour des photons, et notre traitement s'étend sans modification à n'importe quelles particules bosoniques. Comment se transpose-t-il pour des fermions (en particulier l'interférence constructive en $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_2$) ?
3. Comment le traitement quantique de l'effet Hanbury-Brown et Twiss se généralise-t-il à des nombres plus élevés de particules ? On pourra considérer un état à $2N$ particules, $|\Psi\rangle = |N_{\boldsymbol{k}}, N_{\boldsymbol{k}'}\rangle$ et chercher comment ces $2N$ particules vont se disposer sur un écran de détection, c'est-à-dire chercher à calculer la fonction de corrélation $P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_{2N})$.

Références complémentaires

- C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc et G. Grynberg, *Photons et atomes, introduction à l'électrodynamique quantique*, InterEditions.
- A. Aspect, C. Fabre et G. Grynberg, *Introduction aux lasers et à l'optique quantique*, Ellipses.
- M. O. Scully and M. S. Zubairi, *Quantum optics*, Cambridge University Press.

Chapitre 3

L'opérateur densité

La formulation la plus simple de la mécanique quantique repose sur le principe que l'on peut préparer un système donné dans un état décrit par un vecteur $|\psi\rangle$ de l'espace de Hilbert. Connaissant $|\psi\rangle$, nous pouvons alors calculer les probabilités de tous les résultats possibles d'une mesure donnée. De tels états sont appelés *états purs*. Cependant, il existe de nombreuses situations physiques pour lesquelles on ne peut pas disposer d'une connaissance complète de l'état du système. Les deux exemples qui suivent illustrent ce point.

Le premier exemple concerne un faisceau lumineux dépolarisé, de vecteur d'onde $\boldsymbol{k} = k\,\boldsymbol{u}_z$ fixé. De manière générale, pour caractériser l'état de polarisation d'un faisceau lumineux, on peut utiliser des combinaisons de polariseurs à deux voies et de lames à retard (1/4 d'onde, 1/2 onde). Rappelons qu'un polariseur à deux voies a la propriété suivante : si on oriente son axe selon x et qu'on envoie un faisceau polarisé selon x, ce faisceau est complètement transmis par le polariseur. Si le faisceau est polarisé selon y, il est complètement défléchi lors de la traversée du polariseur. C'est l'équivalent d'une expérience de Stern et Gerlach.

Considérons donc un faisceau dépolarisé. Quand on place un polariseur à deux voies dans le plan xy, éventuellement précédé de lames à retard, quelle que soit l'orientation de ce polariseur, on trouve toujours que 50% des photons sont transmis et 50% sont défléchis. Comment décrire l'état d'un photon dans cette situation ? Introduisons les deux états à un photon correspondant à une polarisation linéaire selon x et selon y :

$$|\epsilon_x\rangle \equiv a^\dagger_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{u}_x}|0\rangle \qquad\qquad |\epsilon_y\rangle \equiv a^\dagger_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{u}_y}|0\rangle \tag{3.1}$$

qui forment une base de l'espace des états à un photon de vecteur d'onde $\boldsymbol{k} = k\,\boldsymbol{u}_z$. On peut alors chercher à décrire un « état dépolarisé » en prenant

$$|\psi_\theta\rangle = \cos\theta\;|\epsilon_x\rangle + \sin\theta\;|\epsilon_y\rangle\;. \tag{3.2}$$

Pour $\theta = \pi/4$, ceci fournit bien une probabilité 1/2 de transmission et de déflexion si l'axe du polariseur est aligné selon x ou y. Mais cela n'est plus vrai dès qu'on tourne le polariseur ; on se convainc facilement (par exemple en regardant le signal de photodétection à un photon (2.25)) que ceci correspond à un photon polarisé linéairement selon la direction $\cos\theta\,\boldsymbol{u}_x + \sin\theta\,\boldsymbol{u}_y$. Les états de type (3.2) ne correspondent donc pas à une

lumière dépolarisée. On peut augmenter la taille de la classe des vecteurs d'états considérés en utilisant des coefficients complexes et en introduisant par exemple les deux états :

$$|\sigma_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\epsilon_x\rangle + i|\epsilon_y\rangle\right) \qquad |\sigma_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\epsilon_x\rangle - i|\epsilon_y\rangle\right) \ . \tag{3.3}$$

Ces deux états ont effectivement la propriété de fournir une probabilité 1/2 de transmission et de déflexion pour toute orientation d'un polariseur. Mais ils ne correspondent pas à une lumière dépolarisée. Si on place devant le polariseur une lame 1/4 d'onde, qui introduit un déphasage de $\pi/2$ entre les composantes selon x et y du champ électrique, alors on retrouve derrière cette lame un photon polarisé linéairement, décrit par (3.2), avec $\theta = \pm\pi/4$. Plus généralement, n'importe quelle combinaison de $|\epsilon_x\rangle$ et $|\epsilon_y\rangle$ avec des coefficients complexes correspond à un photon complètement polarisé (avec une polarisation en général elliptique, la polarisation linéaire (3.2) ou circulaire (3.3) étant un cas limite). En d'autres termes, il n'y a pas de place pour le « désordre » correspondant à une lumière dépolarisée dans une description du système en termes de vecteur d'état.

Le deuxième exemple concerne une mesure incomplète. Considérons un oscillateur harmonique à deux dimensions de pulsation ω. Supposons qu'on mesure son énergie et qu'on trouve le résultat $2\,\hbar\omega$. Quel est l'état du système après cette mesure ? Il n'y a pas de réponse unique à cette question, puisque $|n_x = 1\ ,\ n_y = 0\rangle$, ou $|n_x = 0\ ,\ n_y = 1\rangle$, ou n'importe quelle combinaison linéaire de ces deux états sont des choix possibles.

Par conséquent, il n'est pas toujours possible de définir de manière non ambiguë le vecteur d'état d'un système quantique. Nous devons remplacer cette notion par une autre formulation, plus générale, qui nous permettra de décrire des systèmes *mal préparés*, c'est-à-dire des systèmes pour lesquels toutes les quantités physiques associées à un ECOC n'ont pas été mesurées. Pour cela nous devons reformuler les principes de la mécanique quantique habituels en termes de *l'opérateur densité*. Nous commencerons par les cas particuliers où le système est effectivement décrit par un vecteur d'état. Dans ce cas, on dit que le système est dans un *état pur*. Nous passerons ensuite au cas général, correspondant par exemple aux deux exemples présentés ci-dessus, pour lesquels la description en terme de vecteurs d'états est impossible. Nous montrerons que la description en terme d'opérateur densité est bien adaptée à ces situations, qu'on qualifie de *cas impurs* ou *mélanges statistiques*. Nous donnerons quelques exemples d'application de l'opérateur densité, tels que la distribution de Wigner et la description de mesures effectuées sur des systèmes constitués de deux sous-systèmes intriqués, et nous conclurons par une brève description de l'argument EPR[1].

[1]Une partie de ce chapitre reprend le chapitre 14 et l'appendice D du cours de *Mécanique Quantique* de l'Ecole polytechnique, par J.-L. Basdevant et J. Dalibard.

1 Etats purs

1.1 Un outil mathématique : la trace d'un opérateur

Considérons un espace de Hilbert avec une base orthonormée $\{|n\rangle\}$ et un opérateur $\hat{A}$ agissant dans cet espace. La trace de $\hat{A}$ est définie par :

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}) = \sum_n \langle n|\hat{A}|n\rangle \ . \tag{3.4}$$

La quantité $\mathrm{Tr}(\hat{A})$ ne dépend pas du choix de la base $\{|n\rangle\}$. Si on considère une autre base orthonormée $\{|\bar{n}\rangle\}$, on a :

$$\begin{aligned}\sum_n \langle n|\hat{A}|n\rangle &= \sum_{n,\bar{n},\bar{m}} \langle n|\bar{n}\rangle \ \langle \bar{n}|\hat{A}|\bar{m}\rangle \ \langle \bar{m}|n\rangle = \sum_{\bar{n},\bar{m}} \langle \bar{n}|\hat{A}|\bar{m}\rangle \ \left(\sum_n \langle n|\bar{n}\rangle \ \langle \bar{m}|n\rangle\right) \\ &= \sum_{\bar{n},\bar{m}} \langle \bar{n}|\hat{A}|\bar{m}\rangle \ \delta_{\bar{n},\bar{m}} = \sum_{\bar{n}} \langle \bar{n}|\hat{A}|\bar{n}\rangle \ ,\end{aligned}$$

où nous avons utilisé la relation de fermeture : $\sum_n |n\rangle\langle n| = \sum_{\bar{n}} |\bar{n}\rangle\langle\bar{n}| = \hat{1}$.

Une propriété importante de la trace est $\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{A})$ pour toute paire d'opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$, que ces opérateurs commutent ou non :

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}\,\hat{B}) = \sum_n \langle n|\hat{A}\,\hat{B}|n\rangle = \sum_{n,m} \langle n|\hat{A}|m\rangle \ \langle m|\hat{B}|n\rangle = \sum_m \langle m|\hat{B}\,\hat{A}|m\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{B}\,\hat{A}) \ , \tag{3.5}$$

où nous avons utilisé de nouveau le relation de fermeture.

Dans la suite, nous considérerons des opérateurs particuliers comme $\hat{A} = |\psi\rangle\langle\phi|$, où $|\psi\rangle$ and $|\phi\rangle$ sont deux états de l'espace de Hilbert. Dans ce cas, $\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B})$ est simplement l'élément de matrice de $\hat{B}$:

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}\,\hat{B}) = \sum_n \langle n| \ (|\psi\rangle\langle\phi|)\,\hat{B}\ |n\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle \ \langle\phi|\hat{B}|n\rangle = \langle\phi|\hat{B}|\psi\rangle \ . \tag{3.6}$$

En particulier, si nous considérons $\hat{B} = \hat{1}$ et $|\psi\rangle = |\phi\rangle$, où $|\psi\rangle$ est un vecteur de norme 1, nous trouvons $\mathrm{Tr}(|\psi\rangle\langle\psi|) = \langle\psi|\psi\rangle = 1$.

1.2 L'opérateur densité pour des états purs

Considérons un système dans l'état $|\psi\rangle$. Nous définissons *l'opérateur densité* $\hat{\rho}(t)$ de la manière suivante :

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \ . \tag{3.7}$$

L'opérateur $\hat{\rho}$ est hermitien et correspond au projecteur sur l'état $|\psi\rangle$. A partir des principes de la mécanique quantique, nous pouvons déduire les propriétés suivantes :

1) Si nous effectuons une mesure de la quantité physique A, correspondant à l'observable $\hat{A}$, la probabilité de trouver la valeur propre a_α est :

$$\mathcal{P}(a_\alpha) = ||\hat{P}_\alpha|\psi\rangle||^2 = \langle\psi|\hat{P}_\alpha|\psi\rangle \ ,$$

où $\hat{P}_\alpha$ est le projecteur sur le sous-espace propre de $\hat{A}$ correspondant à la valeur propre a_α. Cela peut aussi s'écrire :

$$\mathcal{P}(a_\alpha) = \mathrm{Tr}\left(\hat{P}_\alpha\hat{\rho}\right) \ . \tag{3.8}$$

En particulier, la valeur moyenne $\langle a\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ est égale à :

$$\langle a\rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{A}\,\hat{\rho}\right) \ . \tag{3.9}$$

2) Immédiatement après une mesure donnant le résultat a_α, l'état du système est $|\psi'\rangle = \hat{P}_\alpha|\psi\rangle/||\hat{P}_\alpha|\psi\rangle||$. L'opérateur densité correspondant est donc :

$$\hat{\rho}' = \frac{\hat{P}_\alpha\,\hat{\rho}\,\hat{P}_\alpha}{\mathcal{P}(a_\alpha)} \ . \tag{3.10}$$

3) Notons $\hat{H}(t)$ l'hamiltonien du système. Tant qu'aucune mesure n'est effectuée, l'évolution du système est donnée par l'équation de Schrödinger. L'opérateur densité vérifie donc :

$$i\hbar\frac{d\hat{\rho}}{dt} = i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}\langle\psi(t)| + i\hbar|\psi(t)\rangle\frac{d\langle\psi(t)|}{dt} = \hat{H}|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| - |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|\hat{H}$$

ce qui s'écrit aussi :

$$i\hbar\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \left[\hat{H}(t),\hat{\rho}(t)\right] \ . \tag{3.11}$$

1.3 Formulation équivalente de la mécanique quantique pour des états purs

Nous pouvons maintenant formuler les principes de la mécanique quantique en terme de l'opérateur densité au lieu du vecteur d'état :

Premier principe : description de l'état d'un système. A tout système physique est associé un espace de Hilbert approprié $\mathcal{E}_H$. A tout instant t, l'état du système est complètement déterminé par un opérateur densité $\hat{\rho}(t)$. Cet opérateur est hermitien et satisfait la condition de normalisation $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}(t)) = 1$.

Cas particulier : Si le système est dans un état pur, $\hat{\rho}(t)$ a une valeur propre égale à 1 et toutes les autres valeurs propres sont nulles.

Deuxième principe : mesure de grandeurs physiques. Le principe concernant la mesure de quantités physiques est donné par (3.8) et (3.10).

Troisième principe : évolution dans le temps. L'évolution de l'opérateur densité est donnée par (3.11).

Remarquons que l'hypothèse concernant les valeurs propres de $\hat{\rho}(t)$ est équivalente à la formulation en termes de vecteur d'état $|\psi\rangle$. En effet $\hat{\rho}$ peut être diagonalisé puisqu'il est hermitien. La condition $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}) = 1$ entraîne :

$$\sum_n \Pi_n = 1 \ ,$$

où les Π_n sont les valeurs propres de $\hat{\rho}$. Par hypothèse, toutes les valeurs propres de $\hat{\rho}$ sont nulles sauf une. Notons $\Pi_1 = 1$ la valeur propre non nulle et $|\psi\rangle$ le vecteur propre correspondant. Nous avons par construction $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$.

A ce stade, il semble que nous avons seulement compliqué la formulation des principes de la mécanique quantique, habituellement présentés en terme de vecteur d'état. Néanmoins, nous montrerons au paragraphe suivant que cette complication apparente permet de décrire des situations plus générales, correspondant aux états incomplètement préparés mentionnés dans l'introduction.

2 Mélanges statistiques

2.1 Le photon non polarisé

Une mesure de polarisation d'un photon impliquant des lames à retard suivies d'un polariseur à deux voies peut toujours s'interpréter comme la mesure de la projection de l'état de polarisation $|\psi\rangle$ (inconnu) du photon sur un état déterminé par les orientations des lames et du polariseur :

$$|\theta, \varphi\rangle = \cos\theta\, |\epsilon_x\rangle + e^{i\varphi} \sin\theta\, |\epsilon_y\rangle \ .$$

Avec la probabilité $P_+ = |\langle\theta, \varphi|\psi\rangle|^2$, le photon est transmis par le polariseur à deux voies. Avec la probabilité $P_- = 1 - P_+$, le photon est défléchi. Dans le premier cas, on dira que la mesure a donné le résultat $+1$, dans le second cas le résultat -1. On notera $\hat{P}_{\theta,\varphi}$ l'observable associée à cette mesure ; ses valeurs propres sont donc $+1$ et -1, les états propres correspondant étant $|\theta, \varphi\rangle$ et $|\theta + \pi/2, \varphi\rangle$.

Revenons sur le faisceau lumineux considéré dans l'introduction. Le fait que le faisceau soit non polarisé s'écrit en termes mathématiques $\langle\hat{P}_{\theta,\varphi}\rangle = 0$ pour tout couple (θ, φ). Nous avons indiqué en introduction qu'aucun vecteur d'état $|\psi\rangle$ ne permet de rendre compte de ce résultat. En revanche, il est facile de trouver l'opérateur densité correspondant, en supposant que (3.9) reste valable pour des mélanges statistiques :

$$\hat{\rho}_{\text{nonpol.}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\, \hat{1} \ , \tag{3.12}$$

qui garde la même forme dans toute base orthonormée. En effet, on trouve dans ce cas $\mathrm{Tr}(\hat{P}_{\theta,\varphi}\ \hat{\rho}_{\text{nonpol.}}) = (1/2)\ \mathrm{Tr}(\hat{P}_{\theta,\varphi}) = 0$.

La signification suivante de (3.12) est la suivante. Dans la base $|\epsilon_x\rangle$, $|\epsilon_y\rangle$, l'opérateur densité s'écrit :

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}|\epsilon_x\rangle\langle\epsilon_x| \ + \ \frac{1}{2}|\epsilon_y\rangle\langle\epsilon_y| \ . \tag{3.13}$$

Nous pouvons décrire le calcul de la valeur moyenne de n'importe quel opérateur $\hat{A}$ de la manière suivante.

1. Supposons que le photon est dans l'état $|\epsilon_x\rangle$ et calculons la valeur moyenne correspondante :
$$\langle a\rangle^{(x)} = \langle\epsilon_x|\hat{A}|\epsilon_x\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{A}\,|\epsilon_x\rangle\langle\epsilon_x|) \ .$$
2. De même, supposons que le photon est dans l'état $|\epsilon_y\rangle$ et calculons $\langle a\rangle^{(y)}$.
3. Moyennons les deux résultats avec des poids égaux :
$$\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}_{\mathrm{nonpol.}}) = \frac{1}{2}\langle a\rangle^{(x)} + \frac{1}{2}\langle a\rangle^{(y)} \ .$$

Cette procédure est très différente de celle qu'on suivrait si le photon était dans un état pur de polarisation, par exemple $(|\epsilon_x\rangle + |\epsilon_y\rangle)/\sqrt{2}$. Dans ce cas, on devrait travailler avec des amplitudes de probabilités, et des phénomènes d'interférence pourraient se produire, puisque on partirait d'une superposition cohérente des états $|\epsilon_x\rangle$ et $|\epsilon_y\rangle$. Au contraire, pour un photon non polarisé, nous moyennons simplement les deux résultats associés aux deux états possibles $|\epsilon_x\rangle$, $|\epsilon_y\rangle$, comme on le ferait dans une description probabiliste classique. La situation décrite par (3.12) est souvent appelée « mélange incohérent », par opposition avec la superposition cohérente $(|\epsilon_x\rangle + |\epsilon_y\rangle)/\sqrt{2}$, pour laquelle l'opérateur densité s'écrit dans la base $|\epsilon_x\rangle, |\epsilon_y\rangle$:

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \ . \tag{3.14}$$

Remarquons pour terminer que l'opérateur densité (3.13) peut également s'écrire :

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}|\sigma_+\rangle\langle\sigma_+| \ + \ \frac{1}{2}|\sigma_-\rangle\langle\sigma_-| \ . \tag{3.15}$$

Un mélange à poids égal de polarisations linéaires orthogonales peut donc également s'interpréter comme un mélange à poids égal de polarisations circulaire gauche et circulaire droite.

2.2 L'opérateur densité pour un mélange statistique

Généralisons maintenant à un système quantique quelconque ce que nous venons de voir pour un photon non polarisé. Nous supposons que l'opérateur densité le plus général obéit aux propriétés suivantes :

Premier principe (suite). Cas général : L'opérateur densité est hermitien et satisfait la condition de normalisation $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}(t)) = 1$. Toutes les valeurs propres Π_i de $\hat{\rho}$ vérifient :

$$0 \leq \Pi_i \leq 1 \ . \tag{3.16}$$

Les deuxième et troisième principes sont toujours décrits mathématiquement par (3.8), (3.9), (3.10) et (3.11).

L'interprétation physique de cette distribution est la suivante. Considérons une base propre $\{|\psi_i\rangle\}$ de $\hat{\rho}$; nous avons par définition :

$$\hat{\rho} = \sum_i \Pi_i \, |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \ .$$

L'ensemble des nombres positifs Π_i peut être interprété comme une distribution de probabilité puisque $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}) = \sum_i \Pi_i = 1$. Le calcul de la valeur moyenne d'une grandeur physique A s'écrit :

$$\langle a \rangle = \mathrm{Tr}(\hat{A}\,\hat{\rho}) = \sum_i \Pi_i \, \langle\psi_i|\hat{A}|\psi_i\rangle \ .$$

Cela signifie qu'on peut d'abord calculer les différentes valeurs moyennes $\langle a\rangle^{(i)}$ en supposant que le système est dans l'état pur $|\psi_i\rangle$, puis moyenner les différents résultats $\langle a\rangle^{(i)}$ avec les poids statistiques Π_i.

Supposons que l'on réalise une expérience avec un système (par exemple un photon dont on mesure la polarisation) dont l'état correspond au mélange statistique $\hat{\rho} = \sum_i \Pi_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$. Tout se passe comme si on disposait d'un état $|\psi_j\rangle$ choisit aléatoirement par un « acteur extérieur » parmi l'ensemble des états possibles $\{|\psi_i\rangle\}$. La probabilité pour que « l'acteur » choisisse $|\psi_j\rangle$ est Π_j. La séquence complète des mesures faites sur ce système particulier (par exemple grâce à une série de lames à retard et de polariseurs) doit être analysée comme si le système était initialement dans l'état $|\psi_j\rangle$ et rien d'autre. Ensuite, la même séquence expérimentale réalisée une deuxième fois (avec un autre photon) correspondra à un autre état $|\psi_k\rangle$, également tiré au sort dans l'ensemble $\{|\psi_i\rangle\}$ des états propres de $\hat{\rho}$, et ainsi de suite.

Un mélange statistique est donc complètement différent d'un cas pur, où le système se trouve dans une superposition cohérente, par exemple $|\psi\rangle = \sum_i \sqrt{\Pi_i}|\psi_i\rangle$. Dans ce dernier cas, en réalisant la même séquence expérimentale sur plusieurs systèmes tous préparés dans l'état $|\psi\rangle$, l'expérience permet de mettre en évidence les interférences entre les différentes amplitudes de probabilité $\sqrt{\Pi_i}$.

3 Exemples d'opérateurs densité

3.1 Les ensembles micro-canoniques et canoniques

Considérons un système pour lequel la seule information disponible est : *le système est avec certitude (i.e. une probabilité 1) dans un sous-espace $\mathcal{F}$ de l'espace de Hilbert $\mathcal{E}$.* Par exemple, l'état de l'oscillateur harmonique mentionné dans l'introduction est dans le sous-espace de dimension 2 engendré par $\{|n_x = 1, n_y = 0\rangle,\ |n_x = 0, n_y = 1\rangle\}$ si une mesure de son énergie a donné le résultat $2\,\hbar\omega$.

Si la dimension d de $\mathcal{F}$ est strictement plus grande que 1, le système n'est pas dans un état pur et il doit être décrit par un opérateur densité. Nous postulerons que cet opérateur

est :

$$\hat{\rho} = \frac{1}{d}\hat{P}_{\mathcal{F}} \ , \tag{3.17}$$

où $\hat{P}_{\mathcal{F}}$ est le projecteur sur ce sous-espace. Introduisons une base orthonormée $|\psi_i\rangle$ ($i = 1, \ldots, d$) de $\mathcal{F}$; l'opérateur densité s'écrit :

$$\hat{\rho} = \frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \ . \tag{3.18}$$

Ce choix, appelé opérateur densité micro-canonique, est intuitif. Puisqu'on ne dispose d'aucune information concernant l'état particulier qui est occupé à l'intérieur de $\mathcal{F}$, nous attribuons une même probabilité à chaque état possible à l'intérieur de ce sous-espace. C'est une généralisation directe de ce que nous avons fait en (3.12) pour un photon 1/2 non polarisé.

Ce principe est à la base de la physique statistique quantique. Il permet de construire l'ensemble canonique, qui décrit l'état d'équilibre d'un système $\mathcal{S}$ en interaction faible avec un grand réservoir d'énergie. L'opérateur densité de $\mathcal{S}$ est :

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{\mathrm{Tr}(e^{-\beta\hat{H}})} \ , \tag{3.19}$$

où β est relié à la température T du réservoir ($\beta = (k_{\mathrm{B}}T)^{-1}$) et où $\hat{H}$ est l'hamiltonien de $\mathcal{S}$, en l'absence de couplage avec le réservoir.

A partir de (3.19), on déduit en particulier la loi de Boltzmann. Considérons deux énergies E_n et E_m, qui sont deux valeurs propres non dégénérées de $\hat{H}$. Dans une mesure d'énergie, les probabilités respectives P_n et P_m de trouver les résultats E_n et E_m sont telles que $P_n/P_m = \exp(-(E_n - E_m)/k_{\mathrm{B}}T)$.

3.2 La distribution de Wigner d'une particule ponctuelle sans spin

Considérons une particule ponctuelle de masse m et de spin 0. L'opérateur densité $\hat{\rho}$ décrivant l'état de la particule peut être développé sur la base continue $|\boldsymbol{r}\rangle$ associée à l'opérateur position de la particule. Introduisons :

$$\rho(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \langle \boldsymbol{r}|\hat{\rho}|\boldsymbol{r}'\rangle \ , \tag{3.20}$$

qui est une fonction complexe de $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$. Les principes posés plus haut entraînent que la quantité $\rho(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})$ est positive, et qu'elle donne la probabilité de trouver la particule en $\boldsymbol{r}$ (à d^3r près) :

$$d^3P = \rho(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})\ d^3r \qquad \text{et} \qquad \int \rho(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})\ d^3r = 1 \ .$$

La distribution de Wigner $w(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ de l'opérateur densité $\hat{\rho}$ est définie par :

$$w(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \rho(\boldsymbol{r} - \frac{\boldsymbol{u}}{2}, \boldsymbol{r} + \frac{\boldsymbol{u}}{2})\ e^{i\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{p}/\hbar}\ d^3u \ , \tag{3.21}$$

où $\boldsymbol{p}$ a la dimension d'une impulsion. Puisque $\rho(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \rho^*(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})$, cette quantité vérifie :

$$w(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) \quad \text{réel} \qquad ; \qquad \iint w(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})\; d^3r\; d^3p = 1\;. \tag{3.22}$$

La valeur moyenne d'une quantité physique dépendant seulement de la position $A(\boldsymbol{r})$ ou de l'impulsion $B(\boldsymbol{p})$ a une expression très simple en terme de la distribution de Wigner :

$$\langle a\rangle \;=\; \mathrm{Tr}\,(A(\hat{\boldsymbol{r}})\,\hat\rho) = \iint A(\boldsymbol{r})\; w(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})\; d^3r\; d^3p\;, \tag{3.23}$$

$$\langle b\rangle \;=\; \mathrm{Tr}\,(B(\hat{\boldsymbol{p}})\,\hat\rho) = \iint B(\boldsymbol{p})\; w(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})\; d^3r\; d^3p\;. \tag{3.24}$$

A partir de (3.22), (3.23) et (3.24), on pourrait être tenté de déduire que $w(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ est la densité dans l'espace des phases pour la particule considérée, c'est-à-dire que $w(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})\; d^3r\; d^3p$ représente la probabilité de trouver la particule au point $\boldsymbol{r}$ (à d^3r près) avec l'impulsion $\boldsymbol{p}$ (à d^3p près). C'est bien sûr faux puisqu'une telle assertion n'a pas de sens dans le cadre de la mécanique quantique si $d^3r\, d^3p$ est plus petit que $\hbar^3$. Par ailleurs, rien ne garantit que $w(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ soit une quantité positive ; en fait, on peut aisément trouver des situations pour lesquelles $w(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ est négatif dans certaines régions de l'espace des phases.

Supposons que la particule soit soumise au potentiel $V(\boldsymbol{r})$, de sorte que l'hamiltonien est $\hat H = \hat p^2/2m + V(\hat{\boldsymbol{r}})$. Nous laissons au lecteur le soin de montrer en exercice que l'équation de mouvement de $w(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$, déduite de (3.11) peut se mettre sous la forme :

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\boldsymbol{p}}{m}\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} w = K[w]\;, \tag{3.25}$$

avec :

$$K[w] = \int \mathcal{N}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{q})\; w(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q},t)\; d^3q \tag{3.26}$$

et

$$\mathcal{N}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{q}) = \frac{1}{i\hbar}\;\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\;\int \Big(V(\boldsymbol{r}-\frac{\boldsymbol{u}}{2}) - V(\boldsymbol{r}+\frac{\boldsymbol{u}}{2})\Big)\; e^{i\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{q}/\hbar}\; d^3u\;. \tag{3.27}$$

L'équation intégro-différentielle (3.25)-(3.26) est plus compliquée que son équivalent classique donnant l'évolution de la densité dans l'espace des phases. Dans le cas classique, on trouve l'équation de Liouville, qui a la même structure que (3.25), mais où (3.26) est remplacée par :

$$K[w]\big|_{\text{class.}} = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} V\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{p}} w\;. \tag{3.28}$$

Le fait que l'équation classique, qui est locale en $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{p}$, soit remplacée dans le monde quantique par une équation intégro-différentielle est une manifestation directe des propriétés étudiées tout au long de ce livre. Par exemple, dans le problème du double puits, en raison de la non-localité de (3.27) vis à vis du potentiel $V(\boldsymbol{r})$, la particule localisée initialement dans le puits de gauche « ressent » l'existence du puits de droite et elle finit par l'atteindre après un certain temps.

Il y a deux cas où les évolutions classique et quantique coïncident, au moins de manière approchée :

1) Si le potentiel $V(\boldsymbol{r})$ varie linéairement ou quadratiquement avec la position, alors (3.26) et (3.28) sont égales. Considérons par exemple le potentiel harmonique isotrope $V(\boldsymbol{r}) = m\omega^2 r^2/2$. Le noyau $\mathcal{N}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{q})$ vaut dans ce cas :

$$\mathcal{N}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{q}) = m\omega^2 \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{q}} \delta(\boldsymbol{q})$$

où nous avons utilisé $\delta(\boldsymbol{q}) = (2\pi\hbar)^{-3} \int e^{i\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{q}/\hbar}\, d^3u$. Une intégration par parties dans (3.26) donne alors $K[w] = m\omega^2 \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{p}} w = K[w]|_{\text{class.}}$.

2) Supposons que $w(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}-\boldsymbol{q})$ varie doucement avec $\boldsymbol{q}$ dans l'intégrale (3.26). Nous pouvons alors faire l'approximation :

$$w(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p} - \boldsymbol{q}) \simeq w(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) - (\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{p}}) w \ .$$

En utilisant $\int \mathcal{N}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{q})\ d^3q = 0$ et $\int \boldsymbol{q}\ \mathcal{N}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{q})\ d^3q = -\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} V$, nous obtenons $K[w] \simeq K[w]|_{\text{class.}}$. Pour que cette approximation soit correcte, il faut que la largeur en $\boldsymbol{q}$ de $\mathcal{N}$ soit beaucoup plus petite que l'échelle d'impulsion Δp caractéristique de $w(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$. La variation en $\boldsymbol{q}$ de $\mathcal{N}$ est directement reliée à la transformée de Fourier du potentiel $V(\boldsymbol{r})$. Par conséquent, si on note r_0 l'échelle typique de variation de $V(\boldsymbol{r})$, cette approximation est valable si $r_0 \gg \hbar \,/\, \Delta p$.

4 Systèmes intriqués

4.1 Opérateur densité réduit

Considérons un système $\mathcal{S}$ formé de deux sous-systèmes $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$. L'espace de Hilbert associé à $\mathcal{S}$ est $\mathcal{E}_A \otimes \mathcal{E}_B$. Notons $\{|\psi_n\rangle\}$ une base de $\mathcal{E}_A$ et $\{|\phi_m\rangle\}$ une base de $\mathcal{E}_B$.

Considérons l'opérateur densité $\hat{\rho}$ du système complet, et définissons les opérateurs densité réduits $\hat{\rho}_A$ et $\hat{\rho}_B$ agissant dans $\mathcal{E}_A$ et $\mathcal{E}_B$ respectivement :

$$\langle\psi_n|\hat{\rho}_A|\psi_{n'}\rangle = \sum_m \langle\psi_n;\phi_m|\hat{\rho}|\psi_{n'};\phi_m\rangle \qquad \langle\phi_m|\hat{\rho}_B|\phi_{m'}\rangle = \sum_n \langle\psi_n;\phi_m|\hat{\rho}|\psi_n;\phi_{m'}\rangle \ . \quad (3.29)$$

Ces opérateurs densité réduits sont également appelés *traces partielles* de $\hat{\rho}$ sur $\mathcal{B}$ et sur $\mathcal{A}$ et ils sont notés $\hat{\rho}_A = \mathrm{Tr}_B(\hat{\rho})$ et $\hat{\rho}_B = \mathrm{Tr}_A(\hat{\rho})$.

On vérifie que $\hat{\rho}_A$ et $\hat{\rho}_B$ satisfont les propriétés d'un opérateur densité dans les espaces $\mathcal{E}_A$ et $\mathcal{E}_B$. Ils sont tous deux hermitiens, de trace 1 puisque $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}) = 1$. De plus, pour tout projecteur $\hat{P}_A$ sur un sous-espace $\mathcal{E}_A$, on trouve :

$$\mathrm{Tr}\left(\hat{P}_A\, \hat{\rho}_A\right) = \mathrm{Tr}\left((\hat{P}_A \otimes \hat{1}_B)\, \hat{\rho}\right) \geq 0 \ ,$$

où la dernière inégalité est la conséquence du fait que toutes les valeurs propres de $\hat{\rho}$ sont positives. On en déduit que toutes les valeurs propres de $\hat{\rho}_A$ sont également positives (et de même pour $\hat{\rho}_B$).

L'utilité de $\hat{\rho}_A$ et $\hat{\rho}_B$ apparaît quand on cherche à mesurer une grandeur physique associée à un des deux sous-systèmes seulement. Supposons par exemple qu'on s'intéresse à l'observable $\hat{A} \otimes \hat{1}_B$. La probabilité de trouver la valeur propre a_α de $\hat{A}$ est (cf. (3.8)) :

$$\mathcal{P}(a_\alpha) = \mathrm{Tr}\left((P_\alpha \otimes \hat{1}_B)\,\hat{\rho}\right) = \mathrm{Tr}\left(P_\alpha\,\hat{\rho}_A\right) \ .$$

En particulier, la valeur moyenne de A est $\langle a \rangle = \mathrm{Tr}(\hat{A}\,\hat{\rho}_A)$.

Pour résumer, quand une mesure est effectuée sur le sous-système $\mathcal{A}$ seulement, toutes les prédictions concernant cette mesure peuvent être faites à partir de l'opérateur densité réduit $\hat{\rho}_A$.

4.2 Evolution d'un opérateur densité réduit

Supposons que le système $\mathcal{S}$ soit isolé, et que les deux sous-systèmes $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$ n'interagissent pas entre eux. L'hamiltonien total a donc la structure suivante : $\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B$, où $\hat{H}_A = \hat{H}_A \otimes \hat{1}_B$ (resp. $\hat{H}_B = \hat{1}_A \otimes \hat{H}_B$) est l'hamiltonien du système $\mathcal{A}$ (resp. $\mathcal{B}$). En utilisant le résultat général (3.11), nous obtenons :

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}_A}{dt} = [\hat{H}_A, \hat{\rho}_A] \qquad\qquad i\hbar \frac{d\hat{\rho}_B}{dt} = [\hat{H}_B, \hat{\rho}_B] \ . \tag{3.30}$$

Si les deux sous-systèmes n'interagissent pas, chaque opérateur densité réduit $\hat{\rho}_A$ (resp. $\hat{\rho}_B$) évolue sous l'action de l'hamiltonien du sous-système $\hat{H}_A$ (resp. $\hat{H}_B$) uniquement.

Résumons les résultats de cette section : lorsqu'un système $\mathcal{A}$ est isolé pendant un intervalle de temps (t_i, t_f), nous pouvons calculer les propriétés physiques de ce système (probabilités des différents résultats de mesure) en utilisant uniquement l'opérateur densité réduit de ce système à l'instant initial t_i, et en déterminant l'évolution de cet opérateur $\hat{\rho}_A$ grâce à (3.30). Cela est valable même si $\mathcal{A}$ a interagi avec un autre système $\mathcal{B}$ (ou plusieurs autres) avant l'instant t_i et si le système total $\mathcal{A} + \mathcal{B}$ est dans un état intriqué[2] à l'instant t_i.

5 Intrication non locale et paradoxe EPR

5.1 Les corrélations EPR

Une illustration des concepts qui précèdent est fournie par l'analyse du paradoxe EPR. Rappelons brièvement la nature de ce paradoxe. Nous le présentons ici dans une version mise au point par David Bohm en 1952, qui est plus agréable à traiter mathématiquement que la version initiale, tout en étant équivalente quant à ses implications conceptuelles.

Considérons un atome à trois niveaux. Les niveaux supérieurs $|e\rangle$ et inférieurs $|f\rangle$ ont un moment cinétique nul, alors que le niveau intermédiaire $|r\rangle$ (niveau relais) a un

[2]En revanche, c'est uniquement à partir de l'opérateur densité total $\hat{\rho}$ (et pas $\hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B$) que les corrélations entre les mesures effectuées sur $\mathcal{A}$ et sur $\mathcal{B}$ peuvent être calculées de manière correcte.

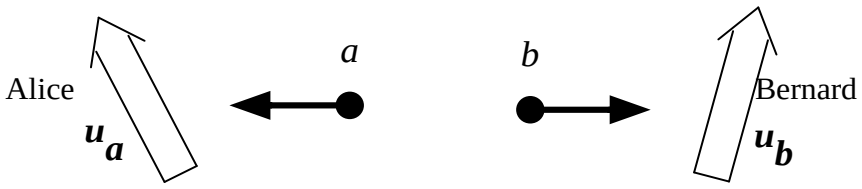

FIG. 3.1: Situation EPR : deux photons a et b sont préparés dans un état corrélé en polarisation. Le photon a se dirige vers Alice qui effectue une mesure de la composante de sa polarisation $\boldsymbol{u}_a$. Le photon b se dirige vers Bernard qui mesure la composante de la polarisation selon $\boldsymbol{u}_b$.

moment cinétique 1. Ce schéma correspond à la structure d'atomes alcalino-terreux, le calcium par exemple. Un atome initialement préparé dans l'état $|e\rangle$ va retomber sur le niveau $|f\rangle$, en émettant une paire (a, b) de photons. Le premier photon a a une énergie $\hbar\omega_a = E_e - E_r$ et le second une énergie $\hbar\omega_b = E_r - E_f$. Ces énergies sont différentes et la couleur des photons a et b est donc notablement différente (bleu et violet pour le calcium). On s'intéresse au cas où la paire de photons est émise selon l'axe z. Grâce à des filtres colorés, on peut sélectionner les événements tels que le photon a se dirige vers Alice et le photon b vers Bernard.

Le moment cinétique total est conservé lors du processus d'émission. Comme les états atomiques de départ et d'arrivée ont un moment cinétique nul, la paire de photons a également un moment cinétique nul. On peut montrer qu'un photon polarisé circulairement $|\sigma_\pm\rangle$ porte un moment cinétique $\pm\hbar$ selon sa direction de propagation. On en déduit que le vecteur d'état de la paire de photons émise s'écrit :

$$|\Psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|a : \sigma_+\rangle \otimes |b : \sigma_-\rangle + |a : \sigma_-\rangle \otimes |b : \sigma_+\rangle \right) \ . \tag{3.31}$$

ce qui peut encore s'écrire en revenant à la base de polarisation linéaire :

$$|\Psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|a : \epsilon_x\rangle \otimes |b : \epsilon_x\rangle + |a : \epsilon_y\rangle \otimes |b : \epsilon_y\rangle \right) \ . \tag{3.32}$$

Le photon a se dirige vers Alice, qui va effectuer une mesure de sa polarisation le long d'un axe de vecteur unitaire $\boldsymbol{u}_a$ (figure 3.1) ; de même le photon b se dirige vers Bernard, qui effectue une mesure de sa polarisation le long d'un axe de vecteur unitaire $\boldsymbol{u}_b$. On convient de noter $+1$ le résultat de la mesure si le photon est transmis par le polariseur et -1 si le photon est défléchi. Rappelons que si Alice oriente son polariseur selon x, un photon $|\epsilon_x\rangle$ sera transmis avec probabilité 1 (résultat $+1$) alors qu'un photon $|\epsilon_y\rangle$ sera défléchi avec probabilité 1 (résultat -1).

Les mesures d'Alice et de Bernard présentent de fortes corrélations. Supposons tout d'abord qu'Alice et Bernard choisissent tous les deux l'axe x pour effectuer leur mesure : $\boldsymbol{u}_a = \boldsymbol{u}_b = \boldsymbol{u}_x$. Avec une probabilité 1/2, Alice et Bernard trouveront chacun $+1$ (transmission) ; toujours avec une probabilité 1/2, ils trouveront chacun -1 (déflexion). En revanche, Alice et Bernard ne peuvent jamais obtenir des résultats différents. Il y donc corrélation parfaite.

Cette corrélation se généralise immédiatement à toute situation dans laquelle Alice et Bernard effectuent leur mesure selon un axe commun quelconque du plan xy. En effet le choix des axes xy permettant de passer de (3.31) à (3.32) est arbitraire.

5.2 Théories à variables cachées et inégalités de Bell

De telles corrélations ou anti-corrélations parfaites sont fréquentes dans la vie quotidienne. Supposons que l'on dispose de deux cartes, l'une rouge, l'autre jaune, et qu'on les place chacune dans une enveloppe scellée. Après mélange, on donne une enveloppe à Alice, l'autre à Bernard. Quand Alice ouvre son enveloppe, elle découvre la couleur de sa carte, jaune avec une probabilité 1/2 et rouge avec une probabilité 1/2. Il y a évidemment une anti-corrélation parfaite avec le résultat ultérieur de Bernard ; si la carte d'Alice est rouge, celle de Bernard est jaune et réciproquement. Il n'apparaît aucun paradoxe dans ces corrélations : la couleur de la carte d'Alice et de celle de Bernard sont tirées au sort au moment du mélange des enveloppes et ce n'est pas le fait qu'Alice prenne connaissance de la couleur de sa carte qui détermine la couleur de la carte de Bernard.

On pourrait chercher une interprétation similaire des corrélations EPR, ce qui revient à raisonner en termes de *théories à variables cachées*. Dans le cadre de ces théories, supposées donner une description plus complète de la « réalité » que la mécanique quantique, il existe un paramètre (variable cachée), différent pour chaque paire, qui prédétermine le résultat de l'analyse Stern et Gerlach qui va suivre. L'existence de telles théories a été écartée par les test expérimentaux (expériences d'Alain Aspect par exemple), au moins si on leur ajoute l'hypothèse de localité. On montre en effet que les prédictions de ces théories sont contraintes par certaines inégalités, appelées *inégalités de Bell*, alors que ces inégalités sont violées dans l'expérience (et par la théorie quantique).

5.3 Il n'y a pas de transmission supra-luminique !

Une fois convaincus que l'explication des corrélations EPR en termes de variables cachées n'est pas possible, nous pouvons revenir vers l'explication quantique. Supposons qu'Alice effectue sa mesure avant Bernard. Dans le formalisme quantique, on est amené à poser que lors de la mesure d'Alice de la polarisation de son photon selon l'axe x, l'état du système global est projeté de la manière suivante :

$$\text{Résultat d'Alice} = + \qquad |\Psi_s\rangle \longrightarrow |a : \epsilon_x\rangle \otimes |b : \epsilon_x\rangle \tag{3.33}$$

$$\text{Résultat d'Alice} = - \qquad |\Psi_s\rangle \longrightarrow |a : \epsilon_y\rangle \otimes |b : \epsilon_y\rangle \tag{3.34}$$

La mesure d'Alice affecte donc l'état du système global, en particulier sa composante sur l'espace des états de la polarisation du photon b. On peut donc se poser la question suivante : est-ce que la modification instantanée de l'état total du système induit une modification des propriétés que Bernard peut mesurer ? Si c'était le cas, cela correspondrait à une transmission d'une certaine information d'Alice vers Bernard, ce qui serait évidemment en contradiction avec le principe de relativité.

Heureusement, il n'en n'est rien, comme on peut le voir simplement. Tant que Bernard

ne fait que des mesures portant sur le photon b, les prédictions portant sur ces mesures peuvent être calculées à partir de l'opérateur densité réduit de la polarisation du photon b :

- Avant qu'Alice effectue sa mesure, le système total étant dans l'état (3.32), cet opérateur densité réduit se calcule aisément et on trouve $\rho_b = \hat{1}_B/2$. Pris séparément, le photon b apparaît donc complètement dépolarisé.
- Une fois qu'Alice a effectué sa mesure, l'opérateur densité de la polarisation du photon b est $|b : \epsilon_x\rangle\langle b : \epsilon_x|$ dans le cas (3.33) (probabilité 1/2) et $|b : \epsilon_y\rangle\langle b : \epsilon_y|$ dans le cas (3.34) (également probabilité 1/2). S'il pense qu'Alice a effectué sa mesure, Bernard, ne connaissant pas le résultat de cette mesure, va prendre un opérateur densité pondérant ces deux éventualités, c'est-à-dire :

$$\frac{1}{2}|b : \epsilon_x\rangle\langle b : \epsilon_x| + \frac{1}{2}|b : \epsilon_y\rangle\langle b : \epsilon_y|$$

  ce qui n'est autre que $\hat{1}_B/2$.

En résumé, qu'Alice ait fait ou non une mesure, les prédictions que Bernard est capable de faire sur son sous-système, le photon b, sont inchangées et elles se font en prenant $\rho_B = \hat{1}_B/2$. Cela reste valable tant que Bernard n'a pas été informé du résultat d'Alice. Une fois qu'il a reçu d'Alice le résultat obtenu sur a, il peut bien sûr comparer avec son propre résultat et constater la corrélation parfaite. Mais cette information transite *a priori* par un canal respectant la relativité. Il n'y a donc pas de violation du principe de relativité engendrée par le fait que la mesure d'Alice projette immédiatement l'ensemble du vecteur d'état. Ouf !

Prolongements

1. Trace de $\hat{\rho}^2$: montrer que $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1$ et $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$ uniquement pour un état pur.
2. Evolution d'un état pur : En utilisant le résultat de l'exercice précédent et l'équation d'évolution (3.11), montrer qu'un état pur reste un état pur lors d'une évolution hamiltonienne.
3. Inégalités vérifiées par $\hat{\rho}$: Montrer que $|\langle\psi|\hat{\rho}|\phi\rangle|^2 \leq \langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle\ \langle\phi|\hat{\rho}|\phi\rangle$ pour toute paire d'états $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ orthogonaux.
4. Opérateur densité d'un spin 1/2 : Montrer que l'opérateur densité d'un spin 1/2 peut toujours s'écrire $\hat{\rho} = \left(a_0\hat{1} + \boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)/2$,où les σ_i $(i = x, y, z)$ sont les matrices de Pauli matrices et les quatre nombres a_0, a_i $(i = x, y, z)$ sont réels. Déterminer les contraintes existant sur ces nombres. Calculer le spin moyen $\langle\boldsymbol{S}\rangle$ pour cet opérateur densité et retrouver les deux cas limites correspondant à un spin complètement polarisé et non polarisé.

Références complémentaires

- Propriétés générales de l'opérateur densité : U. Fano, Review of Modern Physics **29**, 74 (1957) ; D. Ter Haar, Report of Progress in Physics **24**, 304 (1961).
- La distribution de Wigner : E.P. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932) ; T. Takabayasi, Progress in Theoretical Physics **11**, 341 (1954) ; S.R. De Groot and L. G. Suttorp,

Foundations of Electrodynamics (Amsterdam, North-Holland, 1972).

Chapitre 4

Le mouvement brownien classique

Quand on observe le mouvement d'une grosse particule (un grain de pollen dans l'observation initiale de Brown) plongée dans un fluide, on constate qu'elle subit un mouvement aléatoire. Ce mouvement résulte de deux composantes antagonistes ; l'une est une force de friction, qui tend à amortir le mouvement de la particule ; l'autre est un terme de chauffage, qui résulte du caractère aléatoire des chocs des molécules du fluide sur la particule brownienne.

Nous présentons ici un modèle développé indépendamment par Einstein et Smoluchovski pour rendre compte de ces observations. Ce modèle va nous permettre de dégager, au niveau classique, les deux concepts essentiels caractérisant le couplage d'un système avec son environnement, fluctuations et dissipation. Nous montrons en particulier que dans l'état stationnaire, la distribution en vitesse de la particule brownienne est une distribution de Maxwell-Boltzmann. Pour terminer, nous examinons une application « moderne » de ce modèle de mouvement brownien : le refroidissement d'atomes par laser. Dans les cours suivants, nous reprendrons une démarche similaire, mais au niveau quantique cette fois-ci.

1 Force de friction et force de Langevin

Si la particule brownienne est lancée avec une vitesse $\boldsymbol{v}_0$ dans le fluide, on constate que sa vitesse moyenne décroît exponentiellement, avec une constante de temps $1/\gamma$. Pour être plus précis, en faisant un nombre $N \gg 1$ de fois le même lancer et en moyennant les différentes histoires $\boldsymbol{v}^{(n)}(t)$, $n = 1, \ldots, N$, on constate que la vitesse moyenne

$$\overline{\boldsymbol{v}(t)} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{v}^{(n)}(t) \tag{4.1}$$

décroît selon la loi :

$$\overline{\boldsymbol{v}(t)} = \boldsymbol{v}_0 \, e^{-\gamma t} \tag{4.2}$$

Pour modéliser cet amortissement, on pose que la particule brownienne est soumise à une *force de friction* de la part des particules du fluide et cette force s'écrit :

$$\boldsymbol{F}_{\text{frict.}} = -M\,\gamma\,\boldsymbol{v} \tag{4.3}$$

Cette force de friction permet de rendre compte de l'amortissement de la vitesse moyenne observé expérimentalement. Cependant, cette hypothèse ne peut à elle seule décrire l'ensemble des caractéristiques du mouvement brownien. Si la force de friction était la seule force présente, la particule serait complètement immobile après quelques τ, ce qui ne correspond pas à l'observation. Pour rendre compte de ce qui se passe dans l'expérience, on suppose que la particule est également soumise à une deuxième force, appelée force de Langevin et notée $\boldsymbol{\mathcal{F}}(t)$. Cette force est une variable aléatoire, dont nous allons préciser les caractéristiques (valeur moyenne, fonction de corrélation). Elle est sensée représenter l'effet des molécules du fluide sur la particule brownienne non inclus dans la force de friction $-M\,\gamma\,\boldsymbol{v}$. L'équation du mouvement de la particule brownienne est donc donnée par :

$$M\frac{d\boldsymbol{v}}{dt} = -M\gamma\,\boldsymbol{v}(t) + \boldsymbol{\mathcal{F}}(t) \tag{4.4}$$

Il est important de bien comprendre que cette séparation de l'effet des molécules du fluide en deux parties, friction d'une part et fluctuations de l'autre, est purement phénoménologique. Une particule brownienne, qu'elle bouge ou non, subit en permanence de très nombreux chocs avec les molécules du fluide. Si la particule brownienne est en mouvement, elle subit plus de chocs de molécules venant à sa rencontre que de molécules allant dans le même sens qu'elles. Le bilan net est donc une force qui s'oppose en moyenne au mouvement de la particule brownienne, tout en la relançant dans une direction aléatoire si elle vient à s'arrêter. Une théorie microscopique du mouvement brownien doit en principe permettre de déterminer le coefficient γ et toutes les caractéristiques de $\boldsymbol{\mathcal{F}}(t)$ en fonction des données de base du problème, potentiels d'interaction molécule-molécule et molécule-particule brownienne. Nous développerons plus loin un modèle quantique simple de mouvement brownien, pour lequel cette détermination *ab initio* sera possible. Toutefois, en pratique, on se limite souvent à une détermination expérimentale de ces coefficients.

2 Propriétés statistiques de la force de Langevin

Nous supposerons que le fluide est à l'équilibre thermodynamique. La force de Langevin est donc un processus aléatoire stationnaire. En termes de valeurs moyenne, ceci entraîne que $\overline{\boldsymbol{\mathcal{F}}(t)}$ indépendant de t et que $\overline{\boldsymbol{\mathcal{F}}(t_1)\cdot\boldsymbol{\mathcal{F}}(t_2)}$ ne dépend que de $t_1 - t_2$. Il importe de bien comprendre la notion de valeur moyenne dans ce contexte : on suppose qu'on réalise N fois la même expérience, avec la même particule brownienne lancée dans le fluide avec la même vitesse ; la moyenne d'une quantité quelconque se définit alors d'une manière analogue à ce qu'on a fait pour la vitesse en (4.1).

Valeur moyenne de $\boldsymbol{\mathcal{F}}$. Prenons la valeur moyenne de l'équation du mouvement (4.4). Pour assurer que la valeur moyenne de la vitesse relaxe bien vers 0 avec le taux γ, il faut

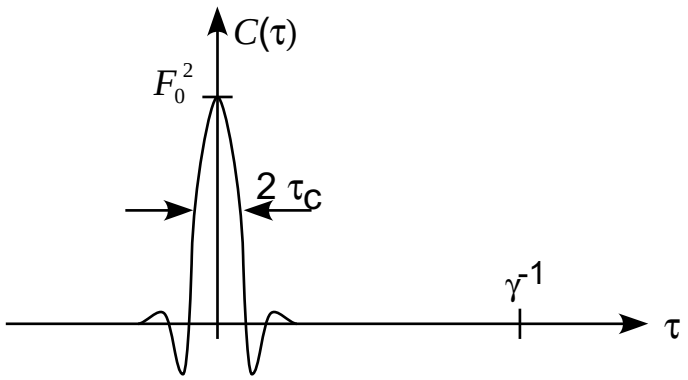

Fig. 4.1: Allure générale de la fonction de corrélation $C(\tau)$.

que nous posions :

$$\overline{\boldsymbol{\mathcal{F}}(t)} = 0 \ . \tag{4.5}$$

Fonction de corrélation de $\boldsymbol{\mathcal{F}}$. Si la force de Langevin est en moyenne nulle à n'importe quel instant t, il n'en va pas de même pour son carré (sinon la force serait rigoureusement nulle et le problème serait trivial). On a donc $\mathcal{F}_0^2 = \overline{\boldsymbol{\mathcal{F}}^2(t)} > 0$. Considérons maintenant deux instants t_1 et t_2 très éloignés l'un de l'autre (cette notion sera précisée dans un instant). On s'attend à ce que la force $\boldsymbol{\mathcal{F}}(t_1)$ agissant à l'instant t_1 n'ait *a priori* rien à voir avec celle agissant à l'instant t_2 et que les deux quantités soient décorrélées :

$$\text{Si } t_2 - t_1 \text{ « grand », alors :} \qquad \overline{\boldsymbol{\mathcal{F}}(t_1) \cdot \boldsymbol{\mathcal{F}}(t_2)} = 0 \tag{4.6}$$

Il nous faut donc préciser comment la fonction de corrélation $C(\tau) = \overline{\boldsymbol{\mathcal{F}}(t) \cdot \boldsymbol{\mathcal{F}}(t+\tau)}$ décroît avec l'écart τ. Pour cela, rappelons que la valeur instantanée de $\boldsymbol{\mathcal{F}}(t)$ est déterminée par les molécules du fluide en train d'agir avec la particule brownienne. La force $\boldsymbol{\mathcal{F}}(t)$ dépend du nombre de molécules en train de subir un choc avec la particule, ainsi que de leur vitesse. Le temps de corrélation τ_c recherché correspond au temps nécessaire pour qu'une certaine configuration de molécules du fluide en interaction avec la particule soit remplacée par une autre. Ce temps est donc de l'ordre du temps d'interaction entre une molécule et la particule brownienne, soit typiquement[1] 10^{-11} à 10^{-12} s. L'allure de la fonction de corrélation $C(\tau)$ est donnée sur la figure 4.1 : elle vaut $\mathcal{F}_0^2$ en $\tau = 0$ pour décroître à 0 sur l'échelle de τ_c.

Le point essentiel de cette fonction de corrélation est la petitesse de l'échelle de temps τ_c, comparée à l'autre échelle de temps du problème γ^{-1}. Nous supposerons dans tout ce qui suit que

$$\gamma\tau_c \ll 1 \ . \tag{4.7}$$

La signification physique de cette inégalité est claire : il faut que le changement moyen de vitesse de la particule brownienne pendant τ_c soit très petit. Autrement dit, il faut un nombre de collisions bien supérieur à celui se produisant pendant τ_c pour modifier de manière appréciable la vitesse de la particule brownienne[2].

[1] portée caractéristique d'interaction entre 0,1 et 1 nm, avec une vitesse relative moyenne de 100 m/s.

[2] Ceci ne serait pas vrai si la masse de la particule brownienne était comparable à la masse m d'une particule du fluide.

A partir du moment où on se place dans le cadre défini par (4.7), la forme générale de $C(\tau)$ n'a plus grande importance ; nous verrons dans la suite que le seul paramètre important pour la suite est l'intégrale de $C(\tau)$. On posera :

$$\int_0^\infty \overline{\boldsymbol{\mathcal{F}}(t)\cdot\boldsymbol{\mathcal{F}}(t+\tau)}\,d\tau = 3\,D_v\,M^2\ . \tag{4.8}$$

Le paramètre D_v est appelé coefficient de diffusion en vitesse[3]. Son ordre de grandeur est :

$$D_v \simeq \frac{\boldsymbol{\mathcal{F}}_0^2\tau_c}{M^2} = \frac{1}{\tau_c}\left(\frac{\boldsymbol{\mathcal{F}}_0\tau_c}{M}\right)^2 \tag{4.9}$$

Le coefficient $\boldsymbol{\mathcal{F}}_0\tau_c/M$ a la dimension d'une vitesse : c'est le module du changement de vitesse typique de la particule brownienne pendant le temps τ_c sous l'effet de la force de Langevin, c'est-à-dire le pas de la marche au hasard qu'effectue la vitesse de la particule brownienne. Le coefficient $1/\tau_c$ en facteur de cette expression est le taux avec lequel cette marche au hasard s'effectue.

Pour tirer parti de l'indépendance du modèle vis à vis de τ_c (pour une valeur de D_v fixée), on remplacera fréquemment dans ce qui suit la forme exacte (inconnue) de $C(\tau)$ par une distribution de Dirac :

$$\overline{\boldsymbol{\mathcal{F}}(t)\cdot\boldsymbol{\mathcal{F}}(t+\tau)} = 6\,D_v\,M^2\,\delta(\tau)\ , \tag{4.10}$$

dans laquelle la valeur exacte de τ_c n'intervient pas. Ceci revient à prendre la limite $\mathcal{F}_0 \to \infty$ et $\tau_c \to 0$, tout en gardant $\mathcal{F}_0^2\tau_c \propto D_v$ constant.

3 Evolution de la vitesse de la particule brownienne

3.1 Intégration de l'équation du mouvement

L'équation (4.4) peut être intégrée formellement pour donner :

$$\boldsymbol{v}(t) = \boldsymbol{v}(t_0)\,e^{-\gamma(t-t_0)} + \frac{1}{M}\int_{t_0}^{t} e^{-\gamma(t-t')}\,\boldsymbol{\mathcal{F}}(t')\,dt'\ . \tag{4.11}$$

De ce résultat apparemment anodin, ou de sa limite obtenue pour un instant initial t_0 éloigné de plus que quelques γ^{-1} dans le passé de t :

$$\boldsymbol{v}(t) = \frac{1}{M}\int_{-\infty}^{t} e^{-\gamma(t-t')}\,\boldsymbol{\mathcal{F}}(t')\,dt'\ , \tag{4.12}$$

nous allons pouvoir déduire toute une série de propriétés remarquables de ce modèle.

[3]Le facteur 3 introduit dans cette définition correspond à la dimension de l'espace. Si la particule était contrainte à se déplacer sur une droite ou sur un plan, ce coefficient serait remplacé par 1 ou 2.

3.2 Evolution de la vitesse quadratique moyenne

Prenons d'abord la moyenne de (4.11) pour une vitesse initiale $\boldsymbol{v}(t_0)$ fixée. Comme $\overline{\boldsymbol{\mathcal{F}}}(t') = 0$ pour tout t', on retrouve bien :

$$\overline{\boldsymbol{v}(t)} = \boldsymbol{v}(t_0)\; e^{-\gamma(t-t_0)} \tag{4.13}$$

qui a été notre point de départ.

Passons maintenant à la moyenne du carré de la vitesse $\overline{\boldsymbol{v}^2}(t)$. En dérivant cette quantité par rapport au temps et en utilisant l'équation du mouvement (4.4), on obtient :

$$\frac{d}{dt}\overline{\boldsymbol{v}^2(t)} = 2\;\overline{\boldsymbol{v}(t)\frac{d\boldsymbol{v}(t)}{dt}} = -2\gamma\;\overline{v^2(t)} + \frac{2}{M}\;\overline{\boldsymbol{v}(t)\cdot\boldsymbol{\mathcal{F}}(t)}\;. \tag{4.14}$$

Il s'agit maintenant d'évaluer la fonction de corrélation entre la vitesse de la particule brownienne et la force de Langevin au même instant. Pour cela, utilisons (4.12) :

$$\overline{\boldsymbol{v}(t)\cdot\boldsymbol{\mathcal{F}}(t)} = \frac{1}{M}\;\int_{-\infty}^{t} e^{-\gamma(t-t')}\;\overline{\boldsymbol{\mathcal{F}}(t')\cdot\boldsymbol{\mathcal{F}}(t)}\;dt'\;. \tag{4.15}$$

On utilise maintenant la fonction de corrélation (4.10) de la force de Langevin pour trouver :

$$\overline{\boldsymbol{v}(t)\cdot\boldsymbol{\mathcal{F}}(t)} = 3\,MD_v\;, \tag{4.16}$$

Notons que la forme précise de $C(\tau)$ en $\delta(\tau)$ n'est pas essentielle ici. Le seul point important est que le temps caractéristique τ_c soit très petit devant γ^{-1} de sorte qu'on peut négliger la variation du terme $e^{-\gamma(t-t')}$ dans l'intégrale figurant dans (4.15). On déduit en reportant dans (4.14) :

$$\frac{d}{dt}\overline{v^2(t)} = -2\gamma\;\overline{v^2(t)} + 6\,D_v \tag{4.17}$$

La signification physique de cette équation est très simple. La vitesse quadratique moyenne de la particule évolue sous l'effet de deux termes antagonistes. Le premier est le terme de friction qui tend à réduire sa valeur. Le second résulte de l'action de la force de Langevin qui tend au contraire à augmenter $\overline{v^2}$, donc à chauffer la particule. On comprend ainsi la dénomination de D_v comme *coefficient de diffusion en vitesse.*

On constate que (4.17) admet un état stationnaire (ce qui est rassurant) et qui correspond à :

$$\overline{\boldsymbol{v}^2}_{\text{stat.}} = 3\frac{D_v}{\gamma} \tag{4.18}$$

Dans notre calcul, les coefficients γ et D_p sont *a priori* indépendants et on pourrait conclure que la vitesse quadratique moyenne de la particule brownienne peut prendre n'importe quelle valeur, en ajustant l'un ou l'autre des coefficients. Ce n'est en fait pas le cas. La physique statistique doit être cohérente, ce qui entraîne que l'énergie cinétique de la particule dans son état stationnaire doit être égale à $(3/2)\;k_BT$, où T est la température du fluide moléculaire.

Pour assurer cette cohérence, il doit donc exister une relation entre les paramètres γ et D_v :

$$M\;D_v = \gamma\;k_BT \tag{4.19}$$

Cette *relation d'Einstein* relie les deux phénomènes caractéristiques du mouvement brownien, fluctuations et dissipation. Nous la trouvons ici comme une contrainte *a posteriori* de notre modèle. Dans une théorie microscopique du problème, cette relation apparaîtrait comme une conséquence naturelle des équations du mouvement des molécules du fluide et de la particule brownienne.

3.3 Simulation numérique du mouvement brownien.

Si on veut effectuer une simulation sur ordinateur donnant une idée d'un mouvement brownien de coefficient de diffusion D_v et de friction γ, il faut d'abord disposer d'un générateur de nombres pseudo-aléatoires fiable. On se donne ensuite un pas d'intégration temporel Δt aussi petit que possible. Le passage de $\boldsymbol{v}(t)$ à $\boldsymbol{v}(t+\Delta t)$ se fait :

- en tirant au sort la valeur de la force de Langevin $\boldsymbol{\mathcal{F}}$ (supposée constante) pendant l'intervalle Δt. Les valeurs des 3 composantes $\mathcal{F}_i$ de la force selon les 3 axes $i = x, y, z$ sont décorrélées les unes des autres et on peut prendre par exemple $\mathcal{F}_i = \pm M\sqrt{2\,D_v\,/\,\Delta t}$. Dans ce cas, l'élément aléatoire est le signe $\pm$ de chaque coefficient.
- en passant de t à $t+\Delta t$ selon la loi :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v}(t+\Delta t) &= \boldsymbol{v}(t)\, e^{-\gamma \Delta t} + \boldsymbol{\mathcal{F}}\,\Delta t\,/\,M \\ &\simeq \boldsymbol{v}(t) - \gamma\,\Delta t\,\boldsymbol{v}(t) + \boldsymbol{\epsilon}\sqrt{2\,D_v\,\Delta t} \end{aligned} \tag{4.20}$$

avec $\epsilon_i = \pm$.

On pourra vérifier directement que cette procédure (4.20) redonne bien, après moyenne sur les trois nombres aléatoires $\epsilon_i = \pm$, l'équation (4.17).

On notera que l'incrément lié à la force déterministe (force de friction) est proportionnel à Δt, comme toujours pour un schéma d'intégration numérique d'une équation différentielle. En revanche, l'incrément lié à la force fluctuante est proportionnel à $\sqrt{\Delta t}$. Ceci est nécessaire si on veut que la valeur moyenne de cet incrément soit nulle et que son carré donne naissance au chauffage à taux constant qui apparaît dans (4.17). La formulation mathématique de ce type d'équation que nous avons établi ici de manière heuristique porte le nom *d'équation différentielle stochastique.*

Cette procédure numérique donne une bonne image de ce qu'est le mouvement brownien, au moins sur des échelles de temps nettement supérieures à Δt. En revanche, pour les échelles de temps plus courtes que Δt, le mouvement apparaît régulier alors que ce n'est pas le cas d'un mouvement brownien réel (considéré dans la limite $\tau_c \to 0$).

4 Distribution de probabilité pour la vitesse

Nous allons nous intéresser maintenant à l'évolution de la fonction $\mathcal{P}(v,t)$ qui donne la distribution de probabilité de la vitesse à un instant t. Pour simplifier les notations, nous considérons ici un problème à une dimension, mais nos résultats se généraliseront sans difficulté à 3D.

4.1 Processus de Markov

Pour établir cette équation, nous allons tirer parti de l'hypothèse faite sur le temps de corrélation très court de la force de Langevin. Cette hypothèse revient à supposer que le processus de marche au hasard considéré ici est à mémoire courte : l'histoire future du système après l'instant t ne dépend que de la vitesse $v(t)$ à cet instant, mais pas de la manière avec laquelle on est arrivé à cette valeur. En termes mathématiques, on dit qu'on a affaire à un processus de Markov, dont la propriété principale est la suivante :

$$\mathcal{P}_n(v_1,t_1;v_2,t_2;\ldots;v_n,t_n|v_{n+1},t_{n+1}) = \mathcal{P}_1(v_n,t_n|v_{n+1},t_{n+1}) \tag{4.21}$$

où la quantité $\mathcal{P}_n(v_1,t_1;v_2,t_2;\ldots;v_n,t_n|v_{n+1},t_{n+1})$ représente la probabilité de trouver la vitesse v_{n+1} à l'instant t_{n+1}, sachant que la vitesse valait v_1 à l'instant t_1, v_2 à l'instant t_2 et v_n à l'instant t_n ($t_1 < t_2 < \ldots < t_n$).

Donnons-nous un intervalle de temps Δt. On déduit de l'hypothèse de mémoire courte la loi de passage de $\mathcal{P}(v,t)$ à $\mathcal{P}(v,t+\Delta t)$:

$$\mathcal{P}(v,t+\Delta t) = \int \mathcal{P}(v-\Delta v,t)\ \mathcal{P}_1(v-\Delta v,t|v,t+\Delta t)\ d\Delta v \tag{4.22}$$

Dans ce qui suit, nous prendrons la limite $\Delta t \to 0$, ce qui signifie en particulier que Δt est court devant le temps caractéristique γ^{-1} associé à la particule brownienne[4]. La stationnarité du processus entraîne que la fonction $\mathcal{P}_1(v-\Delta v,t|v,t+\Delta t)$ ne dépend pas de t, mais seulement de Δt ; nous la noterons donc $\mathcal{P}_1(v-\Delta v|v,\Delta t)$:

$$\mathcal{P}(v,t+\Delta t) = \int \mathcal{P}(v-\Delta v,t)\ \mathcal{P}_1(v-\Delta v|v,\Delta t)\ d\Delta v \tag{4.23}$$

Nous allons maintenant chercher à prendre la limite $\Delta t \to 0$ de cette équation pour en déduire une équation aux dérivées partielles donnant l'évolution de $\mathcal{P}(v,t)$.

4.2 Évolution en absence de fluctuations

Commençons par étudier le problème en absence de force de Langevin, ce qui revient à prendre $D_v = 0$ dans ce qui précède. Effectuons un développement de Taylor du produit $\mathcal{P}(v-\Delta v,t)\ \mathcal{P}_1(v-\Delta v|v,\Delta t)$ figurant dans l'intégrale (4.22). On obtient

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(v-\Delta v,t)\ \mathcal{P}_1(v-\Delta v|v,\Delta t) &= \mathcal{P}(v,t)\ \mathcal{P}_1(v|v+\Delta v,\Delta t) \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n(\Delta v)^n}{n!}\ \frac{\partial^n}{\partial v^n}\left[\mathcal{P}(v,t)\ \mathcal{P}_1(v|v+\Delta v,\Delta t)\right]\end{aligned} \tag{4.24}$$

Pour Δt petit, on a :

$$\mathcal{P}_1(v|v+\Delta v,\Delta t) = \delta\left(\Delta v - \frac{F(v)\,\Delta t}{M}\right) \tag{4.25}$$

[4]Si le temps de corrélation τ_c de la force de Langevin n'est pas infiniment court, l'approche de ce paragraphe n'a de sens que si $\Delta t \gg \tau_c$, ce qui complique la structure du résultat final.

avec $F(v) = -M\gamma v$. Notons que cette expression satisfait bien la condition de normalisation :

$$\int \mathcal{P}_1(v|v+\Delta v, \Delta t)\; d\Delta v = 1 \tag{4.26}$$

Nous allons prendre la limite $\Delta t \to 0$ de (4.23). Il faut donc évaluer les différents termes à l'ordre 1 en Δt. Puisque Δt et Δv sont proportionnels (cf. 4.25), on se limite aux termes $n = 0$ et $n = 1$ dans (4.24) et on trouve :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(v, t+\Delta t) &= \mathcal{P}(v,t) - \frac{\partial}{\partial v}\left[\int \Delta v\; \mathcal{P}(v,t)\; \delta\left(\Delta v - \frac{F(v)\,\Delta t}{M}\right)\; d\Delta v\right] \\ &= \mathcal{P}(v,t) - \frac{\Delta t}{M}\frac{\partial}{\partial v}\left[F(v)\; \mathcal{P}(v,t)\right] \end{aligned} \tag{4.27}$$

soit, en prenant la limite $\Delta t \to 0$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{P}(v,t) + \frac{1}{M}\frac{\partial}{\partial v}\left[F(v)\; \mathcal{P}(v,t)\right] = 0 \tag{4.28}$$

ou encore

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{P}(v,t) = \gamma\frac{\partial}{\partial v}\left[v\; \mathcal{P}(v,t)\right] \tag{4.29}$$

Cette équation du mouvement pour $\mathcal{P}(v,t)$ est équivalente à l'équation du mouvement de Newton $\dot{v} = -\gamma v$.

4.3 Equation de Fokker-Planck

Cherchons maintenant à prendre en compte la force de Langevin. Il s'agit toujours d'écrire (4.23) à l'ordre 1 inclus en Δt, pour faire ensuite tendre Δt vers 0. Toutefois, contrairement au cas $D_v = 0$, le premier ordre en Δt ne s'obtient pas complètement en prenant le premier ordre en Δv dans le développement de Taylor (4.24). Il nous faudra aller au deuxième ordre en Δv, la raison étant clairement visible sur (4.20) : l'accroissement de vitesse lié à la force de Langevin varie seulement comme $\sqrt{\Delta t}$.

Pour procéder d'une manière systématique, reportons le développement (4.24) dans (4.22), divisons par Δt et prenons la limite $\Delta t \to 0$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{P}(v,t) = \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\; \frac{\partial^n}{\partial v^n}\left[M_n(v)\; \mathcal{P}(v,t)\right] \tag{4.30}$$

où les coefficients $M_n(v)$ sont définis par :

$$M_n(v) = \frac{1}{n!}\; \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\int (\Delta v)^n\; \mathcal{P}_1(v|v+\Delta v, \Delta t)\; d\Delta v \tag{4.31}$$

Pour calculer chaque coefficient M_n, on utilise l'expression de $v(t+\Delta t)$ en fonction de $v(t)$:

$$v(t+\Delta t) = v(t)e^{-\gamma\,\Delta t} + \int_t^{t+\Delta t} \boldsymbol{\mathcal{F}}(t')\; dt' \tag{4.32}$$

Les valeurs de M_1 et M_2 sont donc :

$$M_1 = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\overline{v(t+\Delta t) - v(t)}}{\Delta t} = -\gamma\, v \qquad M_2 = \frac{1}{2} \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\overline{(v(t+\Delta t) - v(t))^2}}{\Delta t} = D_v \quad (4.33)$$

Notons que la valeurs de M_1 est inchangée par rapport au résultat trouvé en l'absence de force fluctuante.

On vérifie ensuite que les autres coefficients M_n sont nuls. Par exemple, le coefficient M_4 fait intervenir $\int \overline{\boldsymbol{\mathcal{F}}(t_1)\, \boldsymbol{\mathcal{F}}(t_2)\, \boldsymbol{\mathcal{F}}(t_3)\, \boldsymbol{\mathcal{F}}(t_4)}\; dt_1\, dt_2\, dt_3\, dt_4$ où chaque t_i varie dans l'intervalle $[0, \Delta t]$. Les seuls quadruplets (t_1, t_2, t_3, t_4) qui contribuent de manière significative à l'intégrale sont ceux tels que les 4 temps se regroupent en deux paires proches l'une de l'autre à l'échelle de τ_c. Par exemple $|t_1 - t_2| \leq \tau_c$ et $|t_3 - t_4| \leq \tau_c$. On en déduit que la contribution de l'intégrale est de l'ordre de $\mathcal{F}_0^4\, (\Delta t)^2 \tau_c^2$. Quand on divise par Δt et qu'on prend la limite $\Delta t \to 0$, cette contribution s'annule donc.

L'équation du mouvement de $\mathcal{P}(v,t)$ est donc finalement :

$$\frac{\partial \mathcal{P}(v,t)}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial v} \left[v\, \mathcal{P}(v,t) \right] + D_v\, \frac{\partial^2 \mathcal{P}(v,t)}{\partial v^2} \quad (4.34)$$

Cette équation est appelée *équation de Fokker-Planck*. Elle joue un rôle essentiel dans la détermination de l'évolution des propriétés de la particule brownienne.

4.4 Solution stationnaire.

Les solutions stationnaires de l'équation de Fokker-Planck sont telles que :

$$\gamma\, v\, \mathcal{P}(v,t) + D_v\, \frac{\partial \mathcal{P}(v,t)}{\partial v} = \text{constante} \quad (4.35)$$

On s'intéresse aux solutions qui s'annulent à l'infini ainsi que leur dérivées. La constante d'intégration est donc nulle et la solution stationnaire de l'équation de Fokker-Planck est une distribution de vitesse gaussienne donnée par :

$$\mathcal{P}_{\text{stat}}(v) = \exp(-v^2 \,/\, 2v_0^2) \qquad \text{avec} \qquad v_0^2 = D_v/\gamma \quad (4.36)$$

Comme on l'a dit plus haut, la cohérence de la physique statistique est assurée si et seulement si $M D_v/\gamma = k_B T$. La distribution d'équilibre de la particule brownienne est alors la distribution de Maxwell-Boltzmann, de température égale à la température T du fluide de molécules.

5 Le refroidissement d'atomes par laser

Un exemple récent dans lequel les concepts que nous venons de dégager ont joué un rôle important concerne le refroidissement d'atomes par laser. Nous nous limitons ici à la version la plus simple du refroidissement, fondée sur l'effet Doppler. Nous modélisons la dynamique interne des atomes par un système à deux niveaux, notés $|f\rangle$ (fondamental) et $|e\rangle$ (excité). L'énergie de la transition $f \leftrightarrow e$ est $\hbar\omega_0$. On note $\tau = 1/\Gamma$ la durée de vie du niveau excité e.

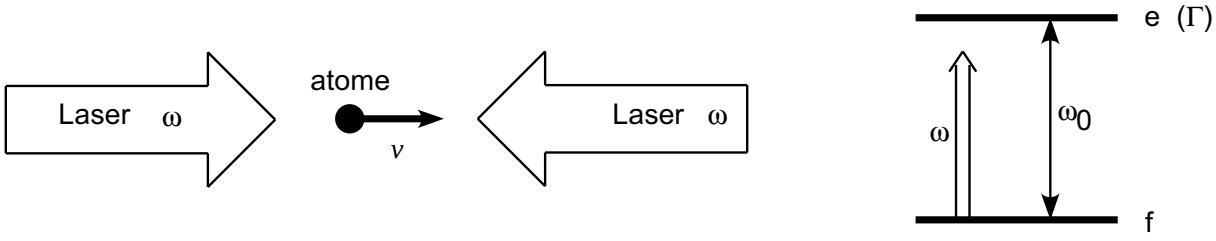

FIG. 4.2: Principe du refroidissement Doppler à une dimension.

5.1 Principe du refroidissement Doppler

Considérons pour simplifier un atome mobile selon une dimension et éclairons cet atome par deux ondes se propageant en sens contraire. Ces deux ondes ont des caractéristiques identiques : même intensité et même fréquence. De plus, on choisit cette fréquence inférieure à la fréquence de résonance atomique (figure 4.2).

Quelle est la conséquence de la présence de ces deux ondes sur le mouvement du centre de masse de l'atome ? Pour un atome au repos, les deux forces de pression de radiation (notion que nous préciserons quantitativement ci-dessous) s'équilibrent et l'atome ne ressent aucune force moyenne. Si l'atome est en mouvement, par exemple vers la droite, il va voir en raison de l'effet Doppler l'onde venant à sa rencontre avec une fréquence supérieure. Pour une vitesse suffisamment basse, cette onde est donc vue plus proche de résonance, et sa force de pression de radiation est augmentée. Au contraire, l'onde allant dans le même sens que l'atome est vue avec une fréquence plus basse et sa force de pression de radiation est diminuée. L'équilibre entre les deux forces est donc rompu : la force résultante a une direction opposée à la vitesse atomique. Cette force de friction crée un refroidissement des atomes, appelé refroidissement Doppler.

Le but de ce paragraphe est de décrire plus quantitativement ce refroidissement et d'étudier sa température limite, en utilisant les outils développés dans ce chapitre. Le mouvement de l'atome éclairé par ces ondes laser peut en effet être considéré comme un mouvement brownien, dans lequel les molécules du fluide sont remplacées par les photons des ondes laser, qui sont diffusés par l'atome.

5.2 Force de friction

Quand un atome « à deux niveaux » est éclairé par une onde laser monochromatique de pulsation ω et d'intensité I, cet atome effectue des cycles de fluorescence, constitué par l'absorption d'un photon laser et l'émission spontanée d'un autre photon, de direction aléatoire. Nous nous limitons ici au cas où l'intensité I est faible, ce qui permet de négliger le phénomène d'émission stimulée. Pour un atome au repos, le taux avec lequel ces cycles sont effectués s'écrit :

$$G = \frac{\Gamma}{2}\,\frac{I}{I_s}\,\frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + 4\Delta^2} \tag{4.37}$$

On a introduit ici l'intensité de saturation I_s, qui est une caractéristique de la transition atomique considérée (I_s est typiquement égale à quelques $\mathrm{mW/cm^2}$). On a posé par ailleurs

$\Delta = \omega - \omega_0$ (désaccord). Si l'atome bouge par rapport à l'onde laser, la fréquence apparente de l'onde est modifiée et il faut remplacer dans la formule précédente ω par $\omega - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}$, où $\boldsymbol{k}$ représente le vecteur d'onde du laser.

Comme les photons transportent une impulsion $\hbar\boldsymbol{k}$, une force s'exerce sur l'atome quand il subit ces cycles de fluorescence. Chaque processus élémentaire (absorption ou émission) change la vitesse de l'atome d'une quantité $\hbar k/M$, appelée *vitesse de recul*. Cette vitesse est de l'ordre du cm/s pour les atomes couramment utilisés (sodium, rubidium). Un bilan d'impulsion simple permet d'évaluer la force qui résulte de la répétition de ces processus. Dans le n-ième cycle, la variation d'impulsion de l'atome vaut $\hbar\boldsymbol{k} - \hbar\boldsymbol{k}_i$, où $\boldsymbol{k}_n$ est le vecteur du n-ième photon spontané. Les vecteurs d'onde des différents photons spontanés sont décorrélés et le transfert d'impulsion correspondant se moyenne à 0. La force moyenne provient donc des photons laser qui ont été absorbés, et elle vaut :

$$\boldsymbol{F} = \hbar\boldsymbol{k}\, G = \hbar\boldsymbol{k}\, \frac{\Gamma}{2}\, \frac{I}{I_s}\, \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + 4(\Delta - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v})^2} \tag{4.38}$$

Considérons maintenant un atome éclairé par 6 ondes laser, se propageant selon les directions $\pm x, \pm y, \pm z$. Dans la limite de faible saturation, la force moyenne agissant sur l'atome est égale à la somme des six forces de pression de radiation. Pour un atome au repos, cette force est nulle, puisque les 6 pressions de radiation se compensent deux à deux. Prenons maintenant un atome en mouvement et limitons-nous pour simplifier au cas des faibles vitesses ($kv \ll \Gamma$), ce qui permet de développer (4.38) au premier ordre en v. On trouve alors :

$$\boldsymbol{F} = \hbar\, \frac{\Gamma}{2}\, \frac{I}{I_s}\, \frac{8\Delta\Gamma^2}{(\Gamma^2 + 4\Delta^2)^2} \sum_{i=1,\ldots,6} \boldsymbol{k}_i\, (\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{v}) \tag{4.39}$$

La somme qui intervient dans cette expression vaut simplement $2k^2\,\boldsymbol{v}$. La force cherchée est donc proportionnelle à la vitesse atomique et s'écrit :

$$\boldsymbol{F} = -M\,\gamma\,\boldsymbol{v} \qquad \text{avec} \qquad \gamma = -\frac{\hbar k^2}{M}\, \frac{I}{I_s}\, \frac{8\Delta\Gamma^3}{(\Gamma^2 + 4\Delta^2)^2} \tag{4.40}$$

Pour un désaccord négatif ($\omega < \omega_0$), le coefficient de friction γ est positif et on a bien une force de friction isotrope qui agit sur la particule. Pour des intensités I de l'ordre d'une fraction de I_s et un désaccord $\Delta = -\Gamma/2$, le temps typique d'amortissement de la vitesse est de quelques $M/\hbar k^2$, ce qui correspond à une fraction de milliseconde.

5.3 Coefficient de diffusion

Si la force de friction que nous venons de calculer décrivait toute la physique du problème, la vitesse de l'atome tendrait vers 0 au bout d'un temps de l'ordre de γ^{-1}. Mais on sait que qu'il faut aussi prendre en compte la diffusion en vitesse pour décrire correctement la température limite d'un mouvement brownien. Pour évaluer le coefficient de diffusion D_v, le plus simple est de considérer un atome de vitesse nulle et d'évaluer

l'évolution de sa vitesse quadratique moyenne aux temps courts. En utilisant (4.17), on attend une croissance de $\overline{v^2}$ linéaire en temps, avec une pente $6\,D_v$.

En une durée T (qu'on choisit courte[5] devant γ^{-1} pour négliger l'effet Doppler), un atome initialement au repos et éclairé par les 6 ondes laser effectue $N \simeq 6\,GT$ cycles de fluorescence et son changement de vitesse s'écrit :

$$M\boldsymbol{v} = \sum_{i=x_+,x_-,\ldots,z_-} N_i\,\hbar\boldsymbol{k}_i - \sum_{n=1}^{N} \hbar\boldsymbol{k}_n \tag{4.41}$$

où N_i représente le nombre de photons absorbés dans l'onde i, et $\boldsymbol{k}_n$ l'impulsion du n-ième photon de fluorescence. Les variables aléatoires figurant dans cette expression sont les N_i et les $\boldsymbol{k}_n$. Prenons le carré de cette expression et moyennons le résultat obtenu. En utilisant le fait que les photons de fluorescence sont décorrélés entre eux, on arrive à :

$$M^2\overline{v^2} = \{\overline{(N_{x_+} - N_{x_-})^2} + \overline{(N_{y_+} - N_{y_-})^2} + \overline{(N_{z_+} - N_{z_-})^2} + N\}\hbar^2k^2 \tag{4.42}$$

Les trois premiers termes de l'accolade correspondent aux fluctuations de l'impulsion apportée par chacun des 6 faisceaux lasers ; le dernier terme correspond aux fluctuations de l'impulsion emportée par les photons de fluorescence.

En prenant une distribution de Poisson pour les N_i, on arrive à :

$$\overline{(N_{x_+} - N_{x_-})^2} = \overline{(N_{y_+} - N_{y_-})^2} = \overline{(N_{z_+} - N_{z_-})^2} = \frac{N}{3}$$

soit un coefficient de diffusion en vitesse :

$$D_v = \frac{\overline{v^2}}{6T} = \frac{2G\hbar^2k^2}{M^2} = \frac{\Gamma\hbar^2k^2}{M^2}\,\frac{I}{I_s}\,\frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + 4\Delta^2}$$

5.4 Température limite

On peut maintenant appliquer le formalisme qui précède. On sait que la distribution en vitesse stationnaire des atomes placés dans cette mélasse optique sera gaussienne, avec une « température » donnée par :

$$k_BT = \frac{MD_v}{\gamma} = \frac{\hbar\Gamma}{4}\left(\frac{\Gamma}{2|\Delta|} + \frac{2|\Delta|}{\Gamma}\right)\ . \tag{4.43}$$

Il est remarquable que ce résultat ne dépende pas de l'intensité des ondes laser, mais seulement du désaccord. Pour minimiser la température, on choisit $\Delta = -\Gamma/2$ et on obtient la température limite du refroidissement Doppler :

$$k_BT_{\min} = \frac{\hbar\Gamma}{2}\ . \tag{4.44}$$

[5]Il faut en parallèle choisir T suffisamment long pour avoir un nombre important de cycles de fluorescence ($N \gg 1$) ; ceci est possible car les transitions atomiques utilisées habituellement vérifient $M\Gamma \gg \hbar k^2$.

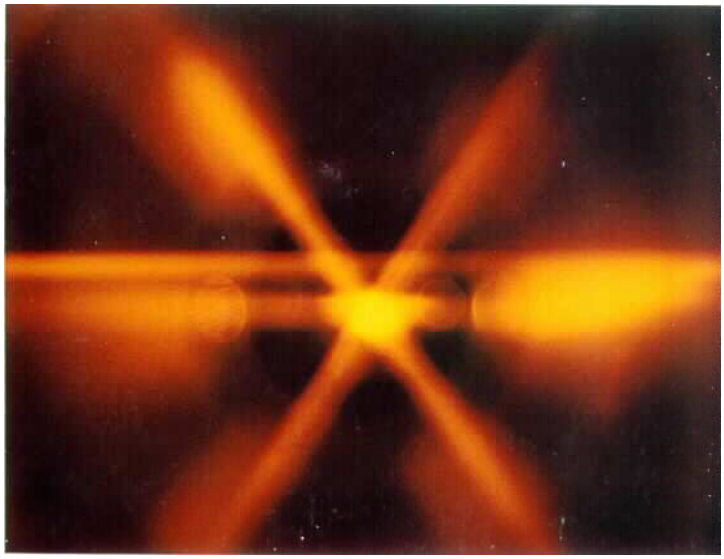

Fig. 4.3: Photographie d'une mélasse optique d'atomes de sodium, à l'intersection de trois paires d'onde laser se propageant respectivement selon x, y, z. Le nuage d'atome a une taille de l'ordre du cm^3 et contient environ 10^7 atomes (photo NIST). La température de ces atomes est voisine de celle prévue par la théorie du refroidissement Doppler (elle peut être notablement inférieure dans le régime où le refroidissement Sisyphe est significatif).

Il faut noter que cette température n'est pas celle du « fluide » dans lequel les atomes sont immergés, contrairement à ce qui se passe dans un mouvement brownien traditionnel. En effet, les photons laser n'ont pas de température à proprement parler.

Ce résultat a fait l'objet de nombreuses études expérimentales. Pour certains atomes simples, pour lesquels l'approximation à deux niveaux est valable, il décrit très bien les observations. Pour des atomes dont la structure interne est plus complexe, les températures mesurées sont notablement plus basses, car un autre mécanisme entre en jeu (refroidissement Sisyphe). La signature de cet effet de refroidissement est spectaculaire. Du fait de la force de friction importante, les atomes sont « englués » dans cette mélasse optique et peuvent y rester confinés pendant des temps très longs à l'échelle atomique (le coefficient de diffusion spatiale $D_r = D_v/\gamma^2$ est faible). Pour des faisceaux laser d'un diamètre de quelques centimètres, ce temps dépasse largement la seconde et on observe donc une fluorescence importante émanant du nuage atomique refroidi (figure 4.3).

Prolongements

1. Déterminer la fonction de corrélation de la vitesse de la particule brownienne $\overline{\boldsymbol{v}(t) \cdot \boldsymbol{v}(t+\tau)}$.
2. En utilisant l'équation de Fokker-Planck (4.34), retrouver l'évolution de la vitesse moyenne (4.13) et de son carré $\overline{v^2(t)}$ (4.17).
3. En suivant pour la position $\boldsymbol{r}(t)$ de la particule brownienne une procédure équivalente à celle donnée plus haut pour la vitesse $\boldsymbol{v}(t)$, montrer qu'on peut définir un coefficient de diffusion en position D_r. Montrer que $D_r = D_v/\gamma^2$.

Références complémentaires

- N.G. Van Kampen, *Stochastic processes in Physics and Chemistry*, North-Holland.
- C.W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods*, Springer.
- C. Cohen-Tannoudji, *Cours au Collège de France 1977-78*, Chaps. 2-4.

Chapitre 5

L'équation pilote

Nous abordons maintenant un point central de ce cours : comment peut-on décrire quantitativement l'évolution d'un système quantique $\mathcal{S}$ lorsqu'il est couplé à son environnement ? Ce problème est très général et il apparaît dans de nombreux domaines de la physique : interaction d'un atome isolé avec le champ électromagnétique, mouvement d'un électron dans un réseau cristallin imparfait et/ou à température non nulle, couplage d'un spin nucléaire aux champs magnétiques locaux dans une expérience de RMN. Ce couplage d'un système quantique avec son environnement est en particulier responsable de la *décohérence*, qui est joue un rôle central dans la théorie de la mesure en mécanique quantique. Cette décohérence est par ailleurs l'obstacle majeur que doivent affronter toutes les équipes cherchant à mettre en œuvre le traitement quantique de l'information, voire rélaiser un « ordinateur quantique ».

Nous modéliserons l'environnement comme un gros réservoir $\mathcal{R}$, que nous supposerons peu perturbé par le système $\mathcal{S}$. Nous ferons un traitement perturbatif de l'interaction $\mathcal{S}-\mathcal{R}$ (approximation de Born) et nous supposerons que la « mémoire » du réservoir est très courte (approximation de Markov). Notre approche apparaît ainsi comme la version quantique du traitement du chapitre précédent, qui nous a conduit à l'équation de Fokker-Planck pour le mouvement brownien d'une particule classique au sein d'un fluide.

1 Modèles de relaxation pour un spin 1/2

1.1 Les temps T_1 et T_2

Avant d'aborder le formalisme général de l'équation pilote, nous allons considérer la dynamique d'un spin 1/2 couplé à un réservoir. Ce modèle de spin 1/2 est très utilisé dans de nombreux domaines de la physique. En effet, il arrive souvent qu'on puisse ramener la dynamique d'un objet quantique (atome, molécule, point quantique dans un solide, squid) à l'évolution d'un système à deux niveaux, qu'on peut alors considérer comme un spin fictif. Par ailleurs, le champ de recherche lié au traitement de l'information quantique fait constamment appel à la notion de *q-bit*, qui n'est autre qu'un système quantique à deux

niveaux, représentant le "0" et le "1" de la logique booléenne. Les résultats qui suivent seront donc très utiles dans de nombreuses applications.

Nous supposons que le spin 1/2 est plongé dans un champ magnétique B_0. Ceci constitue le système $\mathcal{S}$, d'hamiltonien :

$$H_s = \frac{\hbar\omega}{2}\,\sigma_z\ , \tag{5.1}$$

On pose par convention $\omega > 0$, de sorte que le niveau $|+\rangle$ est au dessus du niveau $|-\rangle$. La forme la plus fréquente[1] de l'équation pilote régissant l'évolution de l'opérateur densité d'une assemblée de spins 1/2 couplés à un réservoir est la suivante :

$$\dot\rho_{++}|_{\rm relax.} = -\frac{1}{T_1}\left(\rho_{++} - \rho_{++}^{\rm stat}\right) \qquad\qquad \dot\rho_{+-}|_{\rm relax.} = -\frac{1}{T_2}\left(\rho_{+-} - \rho_{+-}^{\rm stat}\right)\ ,$$

les deux autres équations se déduisant de la conservation de la trace ($\rho_{++} + \rho_{--} = 1$) et de l'hermiticité ($\rho_{-+} = \rho_{+-}^*$). Les temps T_1 et T_2 correspondent aux temps de relaxation des populations et des cohérences. Selon les cas, ces deux temps peuvent être comparables ou au contraire très différents.

Nous allons étudier deux cas limites de relaxation, correspondant respectivement à une décroissance par émission spontanée et un déphasage aléatoire des niveaux $|\pm\rangle$.

1.2 Relaxation par émission spontanée

Considérons une assemblée de particules de spin 1/2 préparées à l'instant 0 dans l'état

$$|\psi(0)\rangle = \alpha_0|+\rangle + \beta_0|-\rangle$$

et supposons que l'état $|+\rangle$ soit instable : le spin préparé dans $|+\rangle$ peut tomber sur l'état $|-\rangle$ en émettant un photon. On note Γ^{-1} la durée de vie de l'état $|+\rangle$. A l'instant t, l'état du système global « particule + champ électromagnétique » peut s'écrire (cf. théorie de Wigner-Weisskopf) :

$$|\Psi(t)\rangle = \alpha_0\, e^{-(i\omega+\Gamma/2)t}\,|+\rangle\otimes|0\rangle + \mu\,\alpha_0\,|-\rangle\otimes|\chi\rangle + \beta_0\,|-\rangle\otimes|0\rangle$$

où $|\chi\rangle$ est un état normé du champ électromagnétique contenant un photon et où μ est égal à $(1-e^{-\Gamma t})^{1/2}$ (ce qui assure que la norme de $|\psi(t)\rangle$ vaut bien 1).

On en déduit immédiatement l'opérateur densité du spin, en prenant la trace sur l'état du champ électromagnétique :

$$\rho_{++}(t) = |\alpha_0|^2\, e^{-\Gamma t} \qquad \rho_{+-}(t) = \alpha_0\beta_0^*\, e^{-(i\omega+\Gamma/2)t} \tag{5.2}$$

ce qui correspond à $T_1 = \Gamma^{-1}$ et $T_2 = 2\,\Gamma^{-1}$. Dans ce cas, les temps de relaxation des populations et des cohérences sont du même ordre. Nous verrons en § 4 comment ce résultat se généralise au cas d'un réservoir à température finie. Ceci nous permettra de mettre également en place les phénomènes d'absorption et d'émission stimulée.

[1] En toute rigueur, l'équation la plus générale inclut aussi des couplages entre populations et cohérences. Toutefois, l'évolution libre des cohérences fait intervenir un terme $e^{\pm i\omega_0 t/2}$ alors que les populations n'évoluent pas. On peut donc la plupart du temps négliger les couplages entre ces différents termes ayant des évolutions libres aussi radicalement différentes ; c'est l'approximation séculaire, sur laquelle nous reviendrons un peu plus loin.

1.3 Relaxation par déphasage

Nous supposons désormais que le phénomène d'émission stimulée est négligeable et l'état $|+\rangle$ est stable. En revanche, nous considérons le cas où la particule portant le spin se déplace dans l'espace et nous nous intéressons à la situation dans laquelle le module B_0 du champ magnétique n'est pas uniforme. La pulsation de Larmor ω dépend également de l'espace et une trajectoire donnée de la particule correspond à une histoire donnée $\omega(t)$. Nous considérons ici encore le vecteur d'état initial :

$$|\psi(0)\rangle = \alpha_0|+\rangle + \beta_0|-\rangle \ ,$$

le vecteur d'état à l'instant t s'écrivant :

$$|\psi(t)\rangle = \alpha_t|+\rangle + \beta_t|-\rangle$$

avec :

$$i\dot{\alpha}_t = \frac{\omega(t)}{2}\ \alpha_t \qquad\qquad i\dot{\beta}_t = -\frac{\omega(t)}{2}\ \beta_t \ .$$

Ces équations s'intègrent pour donner :

$$\alpha_t = \alpha_0\ e^{-i\Phi_t/2} \qquad \beta_t = \beta_0\ e^{i\Phi_t/2} \qquad \Phi_t = \int_0^t \omega(t')\ dt' \ .$$

Supposons maintenant qu'on dispose d'un grand nombre de spins indépendants, suivants chacun des trajectoires différentes. On s'intéresse à l'opérateur densité correspondant à la moyenne sur les différentes trajectoires possibles. On trouve donc :

$$\rho_{++}(t) = |\alpha_t|^2 = |\alpha_0|^2 \qquad \rho_{--} = |\beta_t|^2 = |\beta_0|^2 \tag{5.3}$$

ce qui prouve que les deux populations des états $\pm$ restent constantes, c'est-à-dire $T_1 = \infty$. En revanche, les cohérences évoluent :

$$\rho_{+-} = \langle \alpha_t\, \beta_t^* \rangle = \alpha_0\, \beta_0^*\, \langle e^{-i\Phi_t} \rangle \tag{5.4}$$

la moyenne portant sur la variation de $\omega(t)$ sur les différentes trajectoires.

Pour aller plus loin, nous devons nous donner un modèle de variation de $\omega(t)$. Supposons que $\omega(t) = \omega_0 + \delta\omega$, où la variable aléatoire $\delta\omega$ a une distribution gaussienne, centrée en 0 et d'écart-type $\Delta\omega$. Nous supposons de plus que $\delta\omega$ garde une valeur constante pendant une durée τ pour sauter ensuite à une valeur différente, décorrélée de la précédente. En un temps t, on a $n = t/\tau$ sauts de $\delta\omega$ et on trouve :

$$\langle e^{-i\Phi_t} \rangle = e^{-i\omega_0 t} \langle e^{-i(\delta\omega_1 + \ldots + \delta\omega_n)\tau} \rangle = e^{-i\omega_0 t} \left(\langle e^{-i\delta\omega\,\tau} \rangle \right)^n$$

La moyenne restante se calcule alors en utilisant le caractère gaussien de la distribution de $\delta\omega$:

$$\langle e^{-i\delta\omega\,\tau} \rangle = \frac{1}{\Delta\omega\sqrt{2\pi}} \int e^{-(\delta\omega)^2\,/\,2(\Delta\omega)^2}\ e^{-i\delta\omega\,\tau}\ d(\delta\omega) = e^{-(\Delta\omega\,\tau)^2/2}$$

En utilisant $n = t/\tau$, on arrive finalement à :

$$\rho_{+-}(t) = \rho_{+-}(0)\ e^{-i\omega_0 t}\ e^{-t/T_2} \qquad \text{avec} \qquad \frac{1}{T_2} = \frac{(\Delta\omega)^2\tau}{2} \tag{5.5}$$

Dans ce modèle, on a donc T_1 infini, alors que la relaxation des cohérences se fait en un temps T_2 fini.

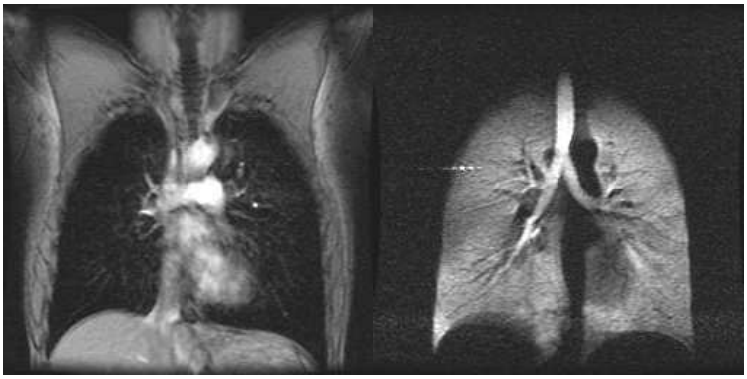

FIG. 5.1: Le temps de relaxation T_1 du spin des noyaux du gaz ^{3}He est extrêmement long, même dans un environnement à pression ordinaire. On peut donc utiliser ce gaz polarisé pour l'imagerie médicale des cavités pulmonaires, grâce à la résonance magnétique nucléaire (photo de droite). Par comparaison, la photo de gauche illustre une photo de RMN standard, utilisant la détection du proton de l'eau ; les cavités pulmonaires ne sont alors pratiquement pas visibles (photos extraites de l'article de G. Allan Johnson, Laurence Hedlund and James MacFall, dans Physics World, Novembre 1998).

Exemple d'application. Ce modèle s'applique bien au moment magnétique d'un atome quand ce spin est de nature nucléaire. C'est par exemple le cas de l'hélium 3 dans son état fondamental. Grâce à des techniques de pompage optique, on sait polariser le gaz ^{3}He et cette polarisation est très robuste (T_1 est très long). On peut alors utiliser ce gaz polarisé pour l'imagerie médicale. En faisant respirer le gaz aux patients et en utilisant une technique de résonance magnétique nucléaire, on peut obtenir une image des cavités pulmonaires avec une précision remarquable (voir la figure 5.1 et le site web de l'équipe du L.K.B. effectuant cette recherche : http ://www.lkb.ens.fr/recherche/flquant/hepol01fr.html)

2 Couplages en jeu dans le problème général

2.1 Caractérisation des systèmes en présence

Système $\mathcal{S}$. Dans la suite de ce chapitre, le système $\mathcal{S}$ est quelconque ; nous noterons son hamiltonien H_s. Plus tard nous préciserons sa nature : particule de masse M libre (mouvement brownien) ou système à deux niveaux (spin 1/2, degrés de liberté interne d'un atome).

Réservoir $\mathcal{R}$. Le réservoir sera modélisé par un bain d'oscillateurs harmoniques, chaque oscillateur étant repéré par un indice λ. Un oscillateur peut représenter par exemple un mode du champ électromagnétique ($\lambda = (\boldsymbol{k}, \boldsymbol{\epsilon})$), un mode du champ de phonons d'un solide, etc. L'hamiltonien du réservoir sera noté :

$$H_r = \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda \; a_\lambda^\dagger a_\lambda \; . \tag{5.6}$$

Les opérateurs $a_\lambda^\dagger$ et a_λ correspondent à la création et à la destruction d'un quantum dans le mode λ. Le point crucial pour que $\mathcal{R}$ soit « un bon réservoir » est que les fréquences ω_λ des modes forment un quasi-continuum et couvrent un très grand intervalle en fréquence, dans lequel toutes les fréquences de Bohr pertinentes de $\mathcal{S}$ sont incluses. Notons qu'on oublie ici l'énergie de point zéro égale à $\hbar\omega_\lambda/2$ par mode, qui ne joue pas de rôle dans la dynamique du problème.

Le réservoir sera supposé à l'équilibre thermodynamique à la température T. Son opérateur densité (en absence de couplage avec le petit système) sera donc :

$$\rho_r^{(\mathrm{stat})} = \frac{e^{-H_r\,/\,k_BT}}{\mathrm{Tr}(e^{-H_r\,/\,k_BT})}\ , \tag{5.7}$$

ce qui entraîne en particulier les valeurs moyennes suivantes :

$$\langle a_\lambda\rangle = \langle a_\lambda^\dagger\rangle = 0 \qquad \langle a_\mu^\dagger a_\lambda\rangle = \delta_{\mu,\lambda}\, n_\lambda \qquad \text{avec} \quad n_\lambda = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_\lambda\,/\,k_BT)-1}\ . \tag{5.8}$$

Couplage $\mathcal{S}-\mathcal{R}$. Le couplage entre le système $\mathcal{S}$ et le réservoir $\mathcal{R}$ sera supposé de la forme :

$$V = RS \qquad \text{avec} \qquad R = \sum_\lambda g_\lambda\, a_\lambda + g_\lambda^*\, a_\lambda^\dagger\ . \tag{5.9}$$

L'opérateur S est hermitien et il agit seulement sur le système $\mathcal{S}$. Les coefficients g_λ caractérisent la force du couplage entre $\mathcal{S}$ et $\mathcal{R}$. L'expression (5.9) représente la forme la plus simple de couplage entre $\mathcal{S}$ et $\mathcal{R}$; les résultats que nous obtiendrons ci-dessous peuvent ensuite se généraliser sans difficulté à un couplage plus général du type $\sum_i R_iS_i$.

2.2 Le point de vue interaction

Pour connaître la dynamique de l'ensemble $\mathcal{S}-\mathcal{R}$, il faut résoudre l'équation d'évolution de l'opérateur densité ρ du système global :

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\,[H,\rho(t)] \qquad \text{avec} \qquad H = H_s + H_r + V\ . \tag{5.10}$$

Comme souvent dans ce genre de problème, il est utile « d'enlever » de cette équation l'évolution libre de $\mathcal{S}$ et $\mathcal{R}$, se produisant sous l'effet de H_s et H_r. Pour cela, on pose :

$$\tilde\rho(t) = e^{i(H_s+H_r)t/\hbar}\ \rho(t)\ e^{-i(H_s+H_r)t/\hbar}\ . \tag{5.11}$$

Si $V=0$, $\tilde\rho(t)$ reste constant au cours du temps ; $\tilde\rho(t)$ n'évolue qu'en présence de couplage, ce qui se prête bien à un développement perturbatif en puissances de ce couplage.

L'équation d'évolution de $\tilde\rho(t)$ s'écrit :

$$\frac{d\tilde\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[V(t),\tilde\rho(t)] \qquad \text{avec} \qquad V(t) = R(t)S(t)\ , \tag{5.12}$$

où on a posé :

$$S(t) = e^{iH_st/\hbar}\ S\ e^{-iH_st/\hbar} \tag{5.13}$$

et

$$R(t) = e^{iH_rt/\hbar}\ R\ e^{-iH_rt/\hbar} = \sum_\lambda g_\lambda\ a_\lambda\ e^{-i\omega_\lambda t} + g_\lambda^*\ a_\lambda^\dagger\ e^{i\omega_\lambda t}\ . \tag{5.14}$$

2.3 Valeur moyenne impliquant l'opérateur $R(t)$

Dans ce qui suit, nous serons amenés à utiliser la valeur moyenne de l'opérateur $R(t)$ ainsi que celle du produit $R(t)R(t-\tau)$, valeur moyenne prise sur l'état stationnaire du réservoir (5.7). On constate que la valeur moyenne à un opérateur est nulle quel que soit t. La valeur moyenne à deux opérateurs vaut :

$$g(\tau) = \langle R(t)R(t-\tau)\rangle = \sum_\lambda |g_\lambda|^2 \ \left(n_\lambda \ e^{i\omega_\lambda \tau} + (n_\lambda + 1)\, e^{-i\omega_\lambda \tau}\right) \ . \tag{5.15}$$

L'hypothèse d'un « gros réservoir » se transcrit simplement sur cette fonction : elle ne prend des valeurs notablement différentes de 0 que sur un intervalle très étroit autour de $\tau = 0$. Nous noterons τ_c la largeur caractéristique de cet intervalle. Pour $|\tau| \gg \tau_c$, les oscillations des différentes exponentielles $e^{\pm i\omega_\lambda \tau}$ sont déphasées les unes par rapport aux autres et leur somme est négligeable. Ce temps τ_c est à rapprocher du temps de corrélation de la force de Langevin du mouvement brownien classique, étudié au chapitre précédent. Notons pour finir que si le réservoir est à température nulle, tous les n_λ sont nuls ; toutefois $g(\tau)$ garde une valeur non nulle.

3 Evolution de la matrice densité du petit système

3.1 Itération de l'équation du mouvement

L'opérateur densité $\rho_s(t)$ du système $\mathcal{S}$ est obtenu en prenant la trace partielle de $\rho(t)$ sur le réservoir. Le but de ce paragraphe est d'obtenir une équation fermée sur $\rho_s(t)$, en traitant l'effet du couplage V entre $\mathcal{S}$ et $\mathcal{R}$ à l'ordre le plus bas non nul.

Considérons l'équation d'évolution (5.12) pour l'opérateur densité total et intégrons la formellement :

$$\tilde\rho(t) = \tilde\rho(0) + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t [V(t-\tau), \tilde\rho(t-\tau)]\ d\tau \ . \tag{5.16}$$

Cette équation est un bon point de départ pour un traitement perturbatif en V, puisque la connaissance de $\tilde\rho$ à l'ordre n dans le membre de droite permet de déduire aussitôt la valeur de $\tilde\rho$ à l'ordre $n+1$ pour le membre de gauche.

Reportons cette valeur de $\tilde\rho(t)$ dans l'équation (5.12) :

$$\frac{d\tilde\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[V(t), \tilde\rho(0)] - \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t [V(t), [V(t-\tau), \tilde\rho(t-\tau)]]\ d\tau \ . \tag{5.17}$$

On prend maintenant la trace partielle sur le réservoir. On suppose que la matrice densité initiale à l'instant $t = 0$ est factorisée : $\rho(0) = \rho_s(0) \otimes \rho_r^{(\mathrm{stat})}$. La trace partielle du premier terme donne donc 0 et il reste :

$$\frac{d\tilde\rho_s}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^t \mathrm{Tr}_{\mathcal{R}}\left\{[V(t), [V(t-\tau), \tilde\rho(t-\tau)]]\right\}\ d\tau \ . \tag{5.18}$$

Á ce stade, aucune approximation n'a encore été faite.

3.2 Approximation de décorrélation

Pour progresser dans l'établissement d'une équation d'évolution simple pour ρ_s, nous allons maintenant procéder à une approximation essentielle. Nous allons supposer qu'à chaque instant $t' = t - \tau$ figurant dans le membre de gauche de (5.18), nous pouvons remplacer l'opérateur densité $\tilde{\rho}(t')$ par une valeur approchée :

$$\tilde{\rho}(t') \simeq \rho_s(t') \otimes \rho_r^{(\mathrm{stat})} \ . \tag{5.19}$$

Ceci revient à :
- négliger les corrélations qui s'établissent entre $\mathcal{S}$ et $\mathcal{R}$, au delà de l'ordre 2 en V,
- négliger la modification de l'état du réservoir du fait de son couplage avec le petit système : $\rho_r(t) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{S}}(\rho(t)) \simeq \rho_r^{(\mathrm{stat})}$.

Ces deux approximations s'appuient sur le fait que le réservoir est beaucoup plus gros que $\mathcal{S}$ et qu'il possède un grand nombre de degrés de liberté simultanément couplés à $\mathcal{S}$.

Cette approximation de décorrélation correspond à un développement en puissances de V. Il importe de bien caractériser le paramètre (sans dimension) du développement. A première vue, on pourrait songer qu'il s'agit de $vt/\hbar$, où v représente l'ordre de grandeur d'un élément de matrice de l'opérateur de couplage V. Si c'était le cas, notre développement serait voué à l'échec, au moins pour les longs temps de couplage, et n'aurait donc que peu d'intérêt. Heureusement, le véritable paramètre du développement ne dépend pas de t et vaut $v\tau_c/\hbar$. Or, nous supposerons dans tout ce qui suit :

$$\frac{v\tau_c}{\hbar} \ll 1 \ . \tag{5.20}$$

Nous ne ferons pas la démonstration ici du fait que $v\tau_c/\hbar$ est le seul infiniment petit du problème, car cette démonstration est techniquement assez lourde[2]. On peut toutefois comprendre intuitivement l'apparition de cet infiniment petit en rapprochant ce problème de celui du mouvement brownien classique : on avait alors pu écrire une équation simple (équation de Fokker-Planck) à la seule condition que $\gamma\tau_c$ soit petit devant 1 (et non pas $\gamma t \ll 1$).

3.3 Equation d'évolution de ρ_s : équation intégro-différentielle

Nous remplaçons maintenant $\tilde{\rho}(t-\tau)$ par sa valeur approchée (5.19) dans l'équation du mouvement (5.18) :

$$\frac{d\tilde{\rho}_s}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t g(\tau)\left\{S(t-\tau)\tilde{\rho}_s(t-\tau)S(t) - S(t)\,S(t-\tau)\tilde{\rho}_s(t-\tau)\right\}\,d\tau \ + \ \text{h.c.} \tag{5.21}$$

où h.c. représente l'hermitique conjugué. Cette équation ne porte plus que sur l'opérateur densité du système $\mathcal{S}$ et correspond donc presque à notre but final. Toutefois, elle reste compliquée à utiliser car il s'agit d'une équation intégro-différentielle et pas d'une équation différentielle ordinaire. Il reste donc une étape à franchir pour obtenir l'équation pilote que nous utiliserons finalement.

[2]Il faut écrire l'équation d'évolution de $\tilde{\rho}(t) - \rho_s(t) \otimes \rho_r^{(\mathrm{stat})}$ et majorer soigneusement le résultat.

3.4 Equation d'évolution de ρ_s : équation différentielle

Nous avons déjà mentionné que le formalisme utilisé est un traitement perturbatif en fonction du petit paramètre $v\tau_c/\hbar$. A cet ordre du calcul, on peut donc remplacer $\tilde{\rho}_s(t-\tau)$ par $\tilde{\rho}_s(t)$ dans (5.21). En effet, les temps τ contribuant à l'intégrale sont de l'ordre de τ_c, du fait de la décroissance rapide de la fonction $g(\tau)$. Comme $\tilde{\rho}_s(t)$ n'évolue que sous l'effet du couplage V, les termes correspondant à la différence entre $\tilde{\rho}_s(t-\tau)$ et $\tilde{\rho}_s(t)$ sont au moins d'ordre 1 en $(v\tau_c/\hbar)$; ils peuvent donc être négligés dans l'intégrale sur τ, qui est déjà d'ordre 2 en ce petit paramètre. On peut alors remplacer (5.21) par :

$$\frac{d\tilde{\rho}_s}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t g(\tau)\left\{S(t-\tau)\tilde{\rho}_s(t)S(t) - S(t)\,S(t-\tau)\tilde{\rho}_s(t)\right\}\,d\tau \;+\; \text{h.c.} \tag{5.22}$$

Choisissons maintenant un temps t suffisamment éloigné de 0 ($t \gg \tau_c$) pour pouvoir remplacer les bornes de l'intégrale par $+\infty$:

$$\frac{d\tilde{\rho}_s}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\int_0^{+\infty} g(\tau)\left\{S(t-\tau)\,\tilde{\rho}_s(t)\,S(t) - S(t)\,S(t-\tau)\,\tilde{\rho}_s(t)\right\}\,d\tau \;+\; \text{h.c.} \tag{5.23}$$

La dernière étape (facultative) de notre démarche consiste à quitter le point de vue interaction pour revenir au point de vue « standard » :

$$\frac{d\rho_s}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[H_s,\rho_s(t)] + \frac{1}{\hbar^2}\left\{U\,\rho_s(t)\,S + S\,\rho_s(t)\,U^\dagger - S\,U\,\rho_s(t) - \rho_s(t)U^\dagger\,S\right\}\;, \tag{5.24}$$

où on a posé :

$$U = \int_0^{+\infty} g(\tau)\;S(-\tau)\;d\tau\;. \tag{5.25}$$

Nous avons atteint le but que nous nous étions fixé : nous disposons d'une équation différentielle donnant l'évolution de l'opérateur densité réduit du système $\mathcal{S}$, à l'ordre le plus bas non nul vis à vis du couplage avec le réservoir $\mathcal{R}$.

On voit sur (5.24-5.25) que la fréquence typique qui apparaît dans l'évolution de $\mathcal{S}$ du fait du couplage est de l'ordre de $v^2\tau_c/\hbar^2$. Cette fréquence est beaucoup plus basse que τ_c^{-1}, ce qui justifie *a posteriori* l'approximation de mémoire courte faite plus haute. En fait, on remarque que cette fréquence est même plus basse que la fréquence « naturelle » $v/\hbar$. On a en effet la hiérarchie :

$$\frac{v^2\tau_c}{\hbar^2} \ll \frac{v}{\hbar} \ll \frac{1}{\tau_c} \tag{5.26}$$

qui apparaît dès que la condition $v\tau_c/\hbar \ll 1$ est vérifiée. Cette fréquence $v/\hbar$ est celle qu'on aurait pu attendre naïvement comme résultant du couplage $\mathcal{S}-\mathcal{R}$. En fait, c'est elle qui apparaîtrait si $\mathcal{S}$ n'était couplé qu'à un seul mode de $\mathcal{R}$, avec un couplage d'ordre v. Le fait que le couplage se fasse vers un grand nombre de modes indépendants introduit une réduction de l'effet de ce couplage, appelée *rétrécissement par le mouvement* et donnant naissance à cette fréquence basse $v^2\tau_c/\hbar^2$. On pourra rapprocher cette fréquence $v^2\tau_c/\hbar^2$ du taux de relaxation trouvé plus haut dans le modèle de relaxation par déphasage d'une

assemblée de spins 1/2 : $1/T_2 \sim \omega^2\tau$ (eq. (5.5)). La fréquence ω qui caractérisait les fluctuations de champ magnétique locale est remplacée ici par $v/\hbar$, et le temps τ pendant lequel une valeur donnée de ω intervenait est remplacé ici par le temps de corrélation τ_c du couplage atome-réservoir.

4 Relaxation et thermalisation d'un spin 1/2

Nous revenons maintenant au cas du spin 1/2 et nous allons chercher comment le traitement général que nous avons mis au point s'applique dans ce cas particulier.

4.1 Modèle considéré

Comme dans le premier paragraphe de ce chapitre, nous prenons un spin 1/2 plongé dans un champ magnétique B_0. Ceci constitue le système $\mathcal{S}$, d'hamiltonien :

$$H_s = \frac{\hbar\omega_0}{2}\,\sigma_z\ , \tag{5.27}$$

où les σ_i $(i = x, y, z)$ sont les matrices de Pauli et où $\omega_0 > 0$. On suppose que le spin est couplé à un champ de bosons et on cherche comment ce couplage provoque la relaxation de l'opérateur densité de ce spin. On prendra $S = \sigma_x = \sigma_+ + \sigma_-$, soit :

$$U = \int_0^{+\infty} g(\tau)\ S(-\tau)\ d\tau = G_+\sigma_+ + G_-\sigma_- \tag{5.28}$$

avec

$$G_+ = \int_0^{+\infty} g(\tau)\ e^{-i\omega_0\tau}\ d\tau \qquad G_- = \int_0^{+\infty} g(\tau)\ e^{+i\omega_0\tau}\ d\tau\ . \tag{5.29}$$

4.2 Equation pilote

Réécrivons l'équation pilote (5.24) en fonction des opérateurs $\sigma_\pm$:

$$\begin{aligned}
\frac{d\rho_s}{dt} &= -i\frac{\omega_0}{2}[\sigma_z, \rho_s(t)] \\
&+ (G_+ + G_+^*)\ \sigma_+\,\rho_s(t)\,\sigma_- \ -\ G_+\,\sigma_-\sigma_+\rho_s(t) \ -\ G_+^*\,\rho_s(t)\,\sigma_-\sigma_+ \\
&+ (G_- + G_-^*)\ \sigma_-\,\rho_s(t)\,\sigma_+ \ -\ G_-\,\sigma_+\sigma_-\rho_s(t) \ -\ G_-^*\,\rho_s(t)\,\sigma_+\sigma_- \\
&+ G_+\,\sigma_+\rho_s(t)\sigma_+ + G_-\,\sigma_-\rho_s(t)\sigma_-\ .
\end{aligned} \tag{5.30}$$

En écrivant cette équation, nous avons séparé sur chaque ligne des contributions dont la trace totale est nulle et qui, comme nous le verrons plus loin, correspondent à des processus physiques clairement identifiables. Notons que nous avons utilisé les propriétés $\sigma_+\sigma_+ = 0$ et $\sigma_-\sigma_- = 0$.

4.3 Evolution des populations

En prenant les éléments de matrice de (5.30) entre $\langle +|$ et $|+\rangle$, et entre $\langle -|$ et $|-\rangle$, on trouve :

$$\begin{aligned} \frac{d\Pi_+}{dt} &= (G_+ + G_+^*)\Pi_- - (G_- + G_-^*)\Pi_+ \ , \\ \frac{d\Pi_-}{dt} &= -\frac{d\Pi_+}{dt} \ . \end{aligned} \tag{5.31}$$

Le coefficient réel $\Gamma_{-\to+} = G_+ + G_+^*$ correspond donc au taux de transition de $|-\rangle$ vers $|+\rangle$, alors que $\Gamma_{+\to-} = G_- + G_-^*$ correspond donc au taux de transition de $|+\rangle$ vers $|-\rangle$. Ces coefficients se calculent en utilisant l'expression de $g(\tau)$:

$$\Gamma_{-\to+} = G_+ + G_+^* = \sum_\lambda |g_\lambda|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ n_\lambda \ e^{i(\omega_\lambda - \omega_0)\tau} + (n_\lambda \ + 1) \ e^{i(\omega_\lambda + \omega_0)\tau} \right\} \ d\tau \ , \tag{5.32}$$

$$\Gamma_{+\to-} = G_- + G_-^* = \sum_\lambda |g_\lambda|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ n_\lambda \ e^{i(\omega_\lambda + \omega_0)\tau} + (n_\lambda \ + 1) \ e^{i(\omega_\lambda - \omega_0)\tau} \right\} \ d\tau \ . \tag{5.33}$$

$$\tag{5.34}$$

On utilise maintenant $\int e^{\pm i(\omega_\lambda - \omega_0)\tau} \ d\tau = 2\pi \ \delta(\omega - \omega_0)$ alors que $\int e^{\pm i(\omega_\lambda + \omega_0)\tau} \ d\tau = 2\pi \ \delta(\omega + \omega_0)$ est nulle puisque ω_λ et ω_0 sont toutes deux positives. On trouve donc :

$$\begin{aligned} \Gamma_{-\to+} &= 2\pi \sum_\lambda |g_\lambda|^2 \ n_\lambda \ \delta(\omega_\lambda - \omega_0) \ , \\ \Gamma_{+\to-} &= 2\pi \sum_\lambda |g_\lambda|^2 \ (n_\lambda + 1) \ \delta(\omega_\lambda - \omega_0) \ . \end{aligned} \tag{5.35}$$

La signification physique de ces deux taux est claire : il y a n_λ photons (ou phonons, ...) par mode dans l'état stationnaire. Seuls comptent les photons résonnants avec la transition $|-\rangle \leftrightarrow |+\rangle$ d'où la présence de la distribution de Dirac. Le taux $\Gamma_{-\to+}$ (deuxième ligne de (5.30)) correspond à un processus d'absorption, directement proportionnel au nombre de photons dans les modes résonnants. Le taux $\Gamma_{+\to-}$ (troisième ligne de (5.30)) correspond à un processus d'émission et fait intervenir $n_\lambda + 1$, ce qui peut se décomposer de la manière suivante :

- Le terme proportionnel à n_λ représente l'émission stimulée, et le taux correspondant est égal au taux d'absorption.
- Le terme indépendant de n_λ correspond à l'émission spontanée. Ce terme ne dépend pas de l'état du réservoir et il est présent même si le réservoir est à température nulle.

On note que la troisième ligne de (5.30) ne contribue pas à l'évolution des populations.

4.4 État stationnaire pour les populations ; règle d'or de Fermi

L'état stationnaire des équations (5.31) est :

$$\Pi_+^{(\mathrm{stat})} = \frac{\Gamma_{-\to+}}{\Gamma} \qquad \Pi_-^{(\mathrm{stat})} = \frac{\Gamma_{+\to-}}{\Gamma} \qquad \Gamma = \Gamma_{+\to-} + \Gamma_{-\to+} \tag{5.36}$$

On suppose pour simplifier que les coefficients g_λ ne dépendent que de la fréquence du mode λ. On déduit alors de (5.35) le résultat :

$$\Pi_+^{(\mathrm{stat})} = \frac{n_0}{2n_0+1} \qquad \Pi_-^{(\mathrm{stat})} = \frac{n_0+1}{2n_0+1} \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\Pi_+^{(\mathrm{stat})}}{\Pi_-^{(\mathrm{stat})}} = \exp(-\hbar\omega_0 \,/\, k_B T) \tag{5.37}$$

où n_0 désigne le nombre de photons (ou phonons, ...) dans un mode du réservoir de fréquence ω_0. Le résultat final est très satisfaisant : sous l'effet du couplage avec un réservoir à température T, le spin « prend » également la température T, et cela quelles que soient la force et la nature du couplage spin-réservoir. La valeur du taux Γ peut s'écrire :

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_\lambda |g_\lambda|^2 \; (2n_\lambda + 1) \; \delta(\hbar\omega_\lambda - \hbar\omega_0) = \frac{2\pi}{\hbar} \; |g_0|^2 \; (2n_0+1) \; \rho(E_0) \tag{5.38}$$

où $\rho(E)$ représente la densité d'états[3] du réservoir au voisinage de l'énergie $E_0 = \hbar\omega_0$ de la transition du spin. Ce résultat est connu sous le nom de *règle d'or de Fermi*.

4.5 Évolution des cohérences

En prenant maintenant l'élément de matrice de (5.30) entre $\langle +|$ et $|-\rangle$, on en déduit l'évolution de ρ_{s+-} :

$$\frac{d\rho_{s+-}}{dt} = -\left(i\omega_0 + G_+^* + G_-\right) \; \rho_{s+-} \; + \; G_+ \; \rho_{s-+} \; . \tag{5.39}$$

Le dernier terme de cette équation ($G_+ \; \rho_{s-+}$) provient de la dernière ligne de (5.30). Il représente un couplage entre la cohérence ρ_{s+-}, qui évolue essentiellement en $\sim e^{-i\omega_0 t}$, et la cohérence ρ_{s-+}, qui évolue en $\sim e^{i\omega_0 t}$. A l'ordre le plus bas en $v\tau_c/\hbar$, l'effet de ce couplage est négligeable car le déplacement $\Delta\omega_0$ (voir ci-dessous) de la fréquence propre et les taux d'amortissement $\Gamma_{\pm\to\mp}$ sont très petits devant l'écart ω_0 : nous omettrons donc ce terme dans la suite, ce qui constitue *l'approximation séculaire*. Le terme $G_+^* + G_-$ vaut quant à lui :

$$\begin{aligned} G_+^* + G_- &= \int_0^{+\infty} \left(g(\tau) + g^*(\tau)\right) \, e^{i\omega_0\tau} \; d\tau \\ &= \sum_\lambda |g_\lambda|^2 \; (2n_\lambda+1) \; \int_0^{+\infty} \cos(\omega_\lambda\tau) \; e^{i\omega_0\tau} \; d\tau = -i\Delta\omega_0 + \frac{\Gamma}{2} \; , \end{aligned} \tag{5.40}$$

où on a introduit[4] le coefficient réel $\Delta\omega_0$:

$$\Delta\omega_0 = \sum_\lambda |g_\lambda|^2 \; (2n_\lambda+1) \; \mathcal{P}\left(\frac{1}{\omega_0-\omega_\lambda} + \frac{1}{\omega_0+\omega_\lambda}\right) \; . \tag{5.41}$$

Cette quantité représente le déplacement de la fréquence de la transition $|+\rangle \leftrightarrow |-\rangle$ sous l'effet du couplage avec le réservoir. Le coefficient Γ donne l'amortissement de la cohérence entre les deux états $|\pm\rangle$. Dans l'état stationnaire, l'opérateur densité est donc diagonal dans cette base $|\pm\rangle$, avec des populations données par (5.37).

[3] La densité d'états est définie de sorte que $\sum_\lambda F(\hbar\omega_\lambda) = \int \rho(E) \; F(E) \; dE$.

[4] On utilise ici l'égalité $\int_0^\infty e^{i\omega\tau} \; d\tau = i\mathcal{P}(1/\omega) + \pi \, \delta(\omega)$, où $\mathcal{P}$ désigne l'intégrale en partie principale.

4.6 Bilan : forme de l'équation pilote pour un spin 1/2

On peut récapituler les résultats obtenus dans ce paragraphe de la manière suivante :

$$\frac{d\Pi_+}{dt} = -\Gamma\left(\Pi_+(t) - \Pi_+^{(\mathrm{stat})}\right) \qquad \frac{d\Pi_-}{dt} = -\Gamma\left(\Pi_-(t) - \Pi_-^{(\mathrm{stat})}\right) , \quad (5.42)$$

$$\frac{d\rho_{s+-}}{dt} = -\left(i\bar{\omega}_0 + \frac{\Gamma}{2}\right)\rho_{s+-}(t) \qquad \rho_{s-+}(t) = \rho^*_{s+-}(t) , \quad (5.43)$$

où on a posé $\bar{\omega}_0 = \omega_0 + \Delta\omega_0$. C'est cette forme qui est utilisée en pratique pour décrire la relaxation d'un système à deux niveaux. Le temps nécessaire pour atteindre l'équilibre est $1/\Gamma$. Si les deux états $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont en plus couplés par un champ cohérent (onde radio-fréquence dans le cas d'une expérience de RMN, onde laser dans le cas de deux niveaux atomiques ou moléculaires), on ajoute le terme de couplage à ces équations de relaxation. Les équations obtenues sont alors appelées *équations de Bloch* (ou *équations de Bloch optiques*).

Prolongements

1. On se place dans le cas particulier où l'opérateur S commute avec l'hamiltonien H_s et on introduit la base $\{|s\rangle\}$ commune aux deux opérateurs, avec $S|s\rangle = \alpha_s|s\rangle$. Comment évolue les populations des états $|s\rangle$? Même question pour les cohérences $\langle s_1|\rho_s|s_2\rangle$.
2. Intégrer numériquement les deux équations différentielles couplées :

$$\dot{x} = -ix + \epsilon y \qquad \dot{y} = iy + \epsilon x \quad (5.44)$$

où ϵ est un paramètre sans dimension, pour vérifier la validité de l'approximation séculaire.

Références complémentaires

- C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, *Processus d'interaction entre photons et atomes*, InterEditions/Editions du CNRS.
- C.W. Gardiner, *Quantum noise*, Springer-Verlag.
- M. Sargent, M. Scully and W. Lamb, *Laser Physics*, Addison-Wesley.

Chapitre 6

Le mouvement brownien quantique

Dans ce chapitre, nous revenons sur le mouvement brownien, mais considéré cette fois-ci d'un point de vue quantique. Notre but est double. Nous souhaitons d'abord retrouver pour certaines observables, comme l'impulsion moyenne, un comportement similaire à celui attendu classiquement. Nous obtiendrons ici ce résultat à partir d'un modèle microscopique du fluide moléculaire, ce qui nous permettra de vérifier *ab initio* la relation d'Einstein assurant la cohérence de l'aspect thermodynamique du problème. L'autre intérêt de ce traitement quantique, au moins aussi important que le précédent, est de proposer un mécanisme de décohérence explicite pour un système continu, en l'occurrence une particule libre. Plus précisément, nous montrerons que la décroissance des éléments non diagonaux de l'opérateur densité de la particule, $\langle \boldsymbol{r}|\rho_s|\boldsymbol{r}'\rangle$, est d'autant plus rapide que la distance $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ est grande. Ceci explique pourquoi des objets macroscopiques ne peuvent pas être maintenus pendant une durée raisonnable dans un état de type « chat de Schrödinger », avec une fonction d'onde du type :

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)+\phi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}_0)\right)$$

qui est l'analogue de l'état obtenu pour des objets microscopiques dans une expérience de fentes d'Young.

1 Couplage harmonique "particule brownienne-fluide"

1.1 Les systèmes en présence

Considérons une particule lourde, de masse M, couplée harmoniquement à un ensemble de N molécules légères. La masse de la molécule j est m_j, et le potentiel harmonique entre la molécule j et la particule brownienne a une pulsation ω_j. L'hamiltonien du système s'écrit donc :

$$H = \frac{P^2}{2M} + \sum_j \frac{p_j^2}{2m_j} + \sum_j \frac{1}{2} m_j \omega_j^2 (X - x_j)^2 \tag{6.1}$$

En développant le terme d'interaction, cet hamiltonien peut aussi s'écrire :

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{\kappa}{2}X^2 + \sum_j \left(\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2} m_j \omega_j^2 x_j^2 \right) - X \sum_j m_j \omega_j^2 x_j \tag{6.2}$$

où on a posé $\kappa = \sum_j m_j \omega_j^2$. Nous utiliserons dans la suite cette forme développée. Notons toutefois un petit piège contenu dans cette écriture. Il pourrait sembler que le point 0 joue un rôle particulier puisque la partie de l'hamiltonien ne contenant que les variables X et P (les deux premiers termes de (6.2) correspond à l'énergie d'un oscillateur harmonique centré en O. Ce rôle privilégié de O est factice comme on s'en convainc immédiatement sur (6.1), qui est invariant par translation globale de toutes les particules.

1.2 La solution classique

Si on traite ce problème par la mécanique classique, il faut écrire les équations du mouvement des variables X et P d'une part, et des variables x_j et p_j d'autre part :

$$\dot{X} = \frac{P}{M} \qquad \dot{P} = -\kappa X + \sum_j m_j \omega_j^2 x_j \qquad\qquad \dot{x}_j = \frac{p_j}{m_j} \qquad \dot{p}_j = -m_j \omega_j^2 x_j + m_j \omega_j^2 X \tag{6.3}$$

Pour résoudre formellement l'équation sur (x_j, p_j), on introduit la variable $z_j = x_j + i p_j/(m\omega_j)$ dont l'équation du mouvement (du premier ordre) s'intègre immédiatement :

$$\dot{z}_j = -i\omega_j z_j + i\omega_j X \quad \Rightarrow \quad z_j(t) = z_j(0) e^{-i\omega_j t} + i\omega_j \int_0^t e^{-i\omega_j \tau} X(t-\tau)\, d\tau \tag{6.4}$$

avec en particulier pour la partie réelle x_j :

$$x_j(t) = \mathcal{R}e\left(z_j(0)\, e^{-i\omega_j t} \right) + \omega_j \int_0^t \sin(\omega_j \tau) X(t-\tau)\, d\tau \tag{6.5}$$

On reporte alors ce résultat dans l'équation du mouvement de (X, P) pour obtenir :

$$\dot{X} = \frac{P}{M} \qquad\qquad \dot{P} = -\kappa X - \int_0^t \frac{d\mathcal{N}(\tau)}{d\tau} X(t-\tau)\, d\tau + \boldsymbol{\mathcal{F}}(t)$$

où on a posé :

$$\mathcal{N}(\tau) = \sum_j m_j \omega_j^2 \cos(\omega_j \tau) \qquad\qquad \boldsymbol{\mathcal{F}}(t) = -\sum_j m_j \omega_j^2 \mathcal{R}e\left(z_j(0)\, e^{-i\omega_j t} \right) \tag{6.6}$$

La force $\boldsymbol{\mathcal{F}}(t)$ va jouer le rôle d'une force de Langevin. En effet, pourvu que le spectre des fréquences ω_j soit très large, sa fonction de corrélation est extrêmement étroite. Par ailleurs, si on répète la même expérience un grand nombre de fois, la moyenne à un instant donné de $\boldsymbol{\mathcal{F}}$ sera nulle puisque les conditions initiales $x_j(0)$ et $p_j(0)$ sont des variables aléatoires.

Il reste à intégrer par parties le terme faisant intervenir la fonction $\mathcal{N}(\tau)$. On remarque d'abord que cette fonction est paire et que $\mathcal{N}(0) = \kappa$. On trouve donc :

$$\dot{X}(t) = \frac{P(t)}{M} \qquad \dot{P}(t) = -\mathcal{N}(t)\, X(0) - \int_0^t \mathcal{N}(\tau)\, \dot{X}(t-\tau)\, d\tau + \boldsymbol{\mathcal{F}}(t) \tag{6.7}$$

On suppose par ailleurs que la fonction $\mathcal{N}(t)$ est piquée au voisinage de 0 et s'annule ensuite du fait du brouillage des différentes fonctions oscillantes $\cos(\omega_j \tau)$. Plus quantitativement, on pose souvent :

$$\mathcal{N}(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega)\, e^{i\omega\tau}\, d\omega \qquad \text{avec} \qquad J(\omega) = \pi\, m\omega^2 \sum_j \{\delta(\omega - \omega_j) + \delta(\omega + \omega_j)\}$$

et on choisit une fonction spectrale $J(\omega)$ telle que :

$$J(\omega) = 2M\gamma \qquad \text{pour} \qquad |\omega| \leq \omega_c \tag{6.8}$$

$$= 0 \qquad \text{pour} \qquad |\omega| > \omega_c \tag{6.9}$$

où γ a la dimension d'un coefficient de friction, soit

$$\mathcal{N}(\tau) = \frac{2}{\pi}\, M\gamma\, \frac{\sin(\omega_c \tau)}{\tau} = 2M\gamma\, \delta_c(\tau) \qquad \text{et} \qquad \mathcal{N}(0) = \kappa = \frac{2}{\pi}\, M\gamma\omega_c$$

Dans cette expression, la fonction $\delta_c(\tau) = \sin(\omega_c\tau)/(\pi\tau)$ tend vers la distribution de Dirac quand la fréquence de coupure ω_c tend vers l'infini.

On suppose que t est suffisamment éloigné de 0 pour que $\mathcal{N}(t)$ soit négligeable. (6.7) devient donc :

$$\dot{X} = \frac{P}{M} \qquad \dot{P} = -\int_0^t \mathcal{N}(\tau)\, \dot{X}(t-\tau)\, d\tau + \boldsymbol{\mathcal{F}}(t)$$

En remarquant que $\mathcal{N}(\tau)$ est très proche de $2\, M\gamma\, \delta(\tau)$ si on la fait agir sur des fonctions variant lentement à l'échelle de ω_c^{-1}, on arrive finalement à :

$$\dot{X} = \frac{P}{M} \qquad \dot{P} = -M\gamma\, \dot{X}(t) + \boldsymbol{\mathcal{F}}(t)$$

ce qui est l'équation de Langevin caractéristique du mouvement brownien. La condition pour que ce modèle soit auto-cohérent est que l'échelle de temps γ^{-1} pour la variation de $\dot{X}$ soit effectivement beaucoup plus longue que ω_c^{-1}, soit $\gamma \ll \omega_c$.

2 L'équation pilote

Nous abordons désormais le traitement quantique du problème. Nous allons utiliser les résultats du chapitre 5 pour écrire une équation pilote décrivant l'évolution de l'opérateur

densité réduit pour la particule brownienne. Nous remarquons d'abord que l'hamiltonien dont nous partons (eq. 6.2) a bien la forme générale $H = H_s + H_r + V$ avec :

$$\begin{aligned} H_s &= \frac{P^2}{2M} + \frac{\kappa}{2} X^2 \\ H_r &= \sum_j \left(\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2} m_j \omega_j^2 x_j^2 \right) = \sum_j \hbar\omega_j \; a_j^\dagger a_j + \text{Cte} \qquad (6.10) \\ V &= RS \qquad \text{et} \qquad S = X \qquad R = -\sum_j m_j \omega_j^2 x_j = -\sum_j \sqrt{\frac{\hbar m \omega_j^3}{2}} \left(a_j + a_j^\dagger \right) \end{aligned}$$

Nous pouvons donc appliquer les résultats généraux obtenus au chapitre 5. L'équation pilote donnant l'évolution de ρ_s s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_s}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{P^2}{2M}, \rho_s \right] + \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{\kappa X^2}{2}, \rho_s \right] \\ &\quad + \frac{1}{\hbar^2} \left\{ U \, \rho_s(t) \, X + X \, \rho_s(t) \, U^\dagger - X \, U \, \rho_s(t) - \rho_s(t) U^\dagger \, X \right\} \; , \qquad (6.11) \end{aligned}$$

avec

$$U = \int_0^{+\infty} g(\tau) \; X(-\tau) \; d\tau \; . \qquad (6.12)$$

2.1 Opérateurs et fonctions de corrélation

Nous aurons besoin de l'opérateur X en point de vue interaction : $X(t) = e^{iH_s t/\hbar} X e^{-iH_s t/\hbar}$. Dans cette expression, on peut négliger le terme en κ de H_s, car il correspondrait à des termes d'ordre supérieur dans l'équation pilote. Nous prendrons donc :

$$X(t) = e^{iP^2 t/(2M\hbar)} \; X \; e^{-iP^2 t/(2M\hbar)} = X + \frac{Pt}{M}$$

Le réservoir intervient par l'intermédiaire de la fonction $g(\tau)$ définie par :

$$\begin{aligned} g(\tau) &= \langle R(t) R(t-\tau) \rangle = \sum_j \frac{\hbar m_j \omega_j^3}{2} \left(n_j \; e^{i\omega_j \tau} + (n_j + 1) \; e^{-i\omega_j \tau} \right) \\ &= \sum_j \hbar m_j \omega_j^3 \, (n_j \; + \; 1/2) \; \cos(\omega_j \tau) \; - \; \frac{i}{2} \sum_j \hbar m_j \omega_j^3 \; \sin(\omega_j \tau) \; . \end{aligned}$$

Comme nous l'avons supposé dans le modèle classique de § 1.2, nous poserons que les fréquences des oscillateurs j sont comprises entre 0 et une fréquence de coupure ω_c. Nous supposerons de plus que ce réservoir est à haute température, soit $k_B T \gg \hbar\omega_c$. Ceci permet de simplifier les populations n_j des différents modes :

$$n_j = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_j/(k_B T) - 1} \simeq \frac{k_B T}{\hbar\omega_j} \gg 1$$

En prenant $n_j + 1/2 \simeq n_j$, il vient donc :

$$g(\tau) = k_B T \, \mathcal{N}(\tau) + \frac{i\hbar}{2} \frac{d\mathcal{N}(\tau)}{d\tau} \tag{6.13}$$

$$= 2D \, \delta_c(\tau) + i\hbar M\gamma \delta_c{}'(\tau) \tag{6.14}$$

où on a posé comme pour le mouvement brownien classique $D = M\gamma k_B T$. A ce stade, il ne s'agit que d'une notation, mais nous verrons plus loin que D correspond effectivement au coefficient caractérisant la diffusion en impulsion[1] de la particule brownienne. Nous allons maintenant calculer successivement l'effet des termes en D et en γ.

2.2 Terme proportionnel à D

Ce terme fait intervenir :

$$\frac{2D}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} \delta_c(\tau) \left\{ \quad \left(X - \frac{P\tau}{M}\right) \rho_s(t) \, X + X \, \rho_s(t) \left(X - \frac{P\tau}{M}\right) \right.$$
$$\left. -X \left(X - \frac{P\tau}{M}\right) \rho_s(t) - \rho_s(t) \left(X - \frac{P\tau}{M}\right) X \right\} d\tau$$

Les termes en $P\tau/M$ ont une contribution négligeable du fait de la faible largeur de la fonction $\delta_c(\tau)$. Il reste donc simplement :

$$-\frac{D}{\hbar^2}[X, [X, \rho_s(t)]] \; . \tag{6.15}$$

2.3 Terme proportionnel à γ

Ce terme fait intervenir :

$$\frac{iM\gamma}{\hbar} \int_0^{\infty} \delta_c{}'(\tau) \left\{ \quad \left(X - \frac{P\tau}{M}\right) \rho_s(t) \, X - X \, \rho_s(t) \left(X - \frac{P\tau}{M}\right) \right.$$
$$\left. -X \left(X - \frac{P\tau}{M}\right) \rho_s(t) + \rho_s(t) \left(X - \frac{P\tau}{M}\right) X \right\} d\tau$$

Les deux intégrales sur le temps valent respectivement :

$$\int_0^{\infty} \delta_c{}'(\tau) \, d\tau = -\delta_c(0) = -\frac{\omega_c}{\pi} \tag{6.16}$$

$$\int_0^{\infty} \delta_c{}'(\tau) \, \tau \, d\tau = -\frac{1}{2} \tag{6.17}$$

Deux termes contribuent alors. Le premier est :

$$\frac{iM\gamma\omega_c}{\pi\hbar}[X^2, \rho_s(t)] = -\frac{1}{i\hbar}[\frac{\kappa}{2}X^2, \rho_s]$$

[1]Le coefficient de diffusion en impulsion D et le coefficient de diffusion en vitesse D_v diffèrent d'un facteur M^2 : $D = M^2 D_v$.

et vient exactement compenser la contribution du « potentiel harmonique fictif » $\kappa X^2/2$ qui apparaît dans (6.11). Le second terme s'écrit :

$$\frac{\gamma}{2i\hbar}[X, P\rho_s + \rho_s P]$$

2.4 Bilan

En regroupant les différents termes, on trouve l'équation pilote pour le mouvement brownien quantique :

$$\frac{d\rho_s}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{P^2}{2M}, \rho_s\right] + \frac{\gamma}{2i\hbar}[X, P\rho_s(t) + \rho_s(t)P] - \frac{D}{\hbar^2}[X, [X, \rho_s(t)]] \tag{6.18}$$

Nous allons maintenant discuter physiquement l'action des deux termes issus du couplage de la particule brownienne avec le fluide, respectivement proportionnels à γ et D.

3 Equation de Fokker-Planck-Kramers

L'équation 6.18 constitue un des résultats centraux de ce chapitre. Pour explorer le contenu physique de cette équation, il est commode d'utiliser la représentation de Wigner $w(x,p,t)$ de l'opérateur densité ρ_s. Rappelons sa définition pour un système unidimensionnel (la généralisation à 3 dimensions est immédiate) :

$$w(x,p,t) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipu/\hbar}\,\langle x + \frac{u}{2}|\rho_s|x - \frac{u}{2}\rangle\,du \tag{6.19}$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ixv/\hbar}\,\langle p + \frac{v}{2}|\rho_s|p - \frac{v}{2}\rangle\,dv \tag{6.20}$$

Selon le terme à évaluer dans l'équation pilote (6.18), on utilise l'une ou l'autre des définitions (6.19) ou (6.20). Considérons par exemple le terme proportionnel à D et utilisons la forme (6.19) :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\langle x + \frac{u}{2}|\rho_s|x - \frac{u}{2}\rangle &= \ldots - \frac{D}{\hbar^2}\left\{\left(x + \frac{u}{2}\right)^2 + \left(x - \frac{u}{2}\right)^2 - 2\left(x + \frac{u}{2}\right)\left(x - \frac{u}{2}\right)\right\}\langle x + \frac{u}{2}|\rho_s|x - \frac{u}{2}\rangle \\ &= \ldots - \frac{D}{\hbar^2}\,u^2\,\langle x + \frac{u}{2}|\rho_s|x - \frac{u}{2}\rangle \end{aligned} \tag{6.21}$$

ce qui après transformée de Fourier par rapport à la variable u donne simplement :

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \cdots + D\frac{\partial^2 w}{\partial p^2}$$

On traite de même les deux autres termes de l'équation pilote (6.18) et on arrive à l'équation de Fokker-Planck-Kramers :

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{p}{M}\frac{\partial w}{\partial x} = \gamma\frac{\partial}{\partial p}\,[p\,w] + D\frac{\partial^2 w}{\partial p^2} \tag{6.22}$$

Cette équation est identique à celle obtenue pour le mouvement brownien classique. En l'absence de couplage avec le réservoir, on a $\gamma = 0$ et $D = 0$, et l'équation se ramène à l'équation de Liouville pour une particule libre.

On peut intégrer cette équation sur la position x pour obtenir l'évolution de la distribution en impulsion $\mathcal{P}(p,t)$, qui est donnée par une équation de Fokker-Planck :

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial p}\left[p\,\mathcal{P}\right] + D\frac{\partial^2 \mathcal{P}}{\partial p^2} \tag{6.23}$$

dont la solution stationnaire s'annulant en $p = \pm\infty$ est la gaussienne $\mathcal{P}(p) \propto \exp(-p^2/2p_0^2)$, avec $p_0^2/M = D/(M\gamma) = k_B T$.

L'intérêt de ce résultat est double :
- D'une part, nous avons montré qu'un traitement quantique donnait (dans la limite haute température) un résultat identique à celui du traitement classique du chapitre 4.
- D'autre part, nous avons proposé ici un modèle microscopique de couplage entre la particule brownienne et le réservoir. L'équation de Fokker-Planck n'a pas été obtenue à partir d'une description phénoménologique en termes de force de Langevin, mais à partir de l'équation fondamentale de la dynamique[2] et une élimination systématique des variables du réservoir à un ordre donné du couplage.

4 La fragilité des états « chats de Schrödinger »

Le problème que nous nous posons maintenant va nous conduire à un résultat essentiel de ce cours. Puisque nous disposons d'un modèle explicite de couplage entre un système quantique (la particule brownienne) et un réservoir, nous allons chercher comment la cohérence d'un état initial du système est affecté par le réservoir. En d'autres termes, nous cherchons comment les fluctuations (coefficient de diffusion D) et la dissipation (coefficient de friction γ) affecte une superposition initialement cohérente d'états de la particule brownienne.

4.1 Etat initial de la particule

Nous supposerons que la particule brownienne est dans un état superposition de deux fonctions d'onde bien localisées :

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi(x-a) - \phi(x+a)) \tag{6.24}$$

La fonction $\phi(x)$ correspond à un paquet d'onde centré en 0 et de largeur σ. Typiquement, on pourra prendre $\psi(x) \propto \exp(-x^2/(2\sigma^2))$. On suppose que

$$\sigma \ll a$$

[2]ici l'équation de Schrödinger pour notre traitement quantique, mais on aurait pu utiliser aussi les équations de Newton pour un traitement classique.

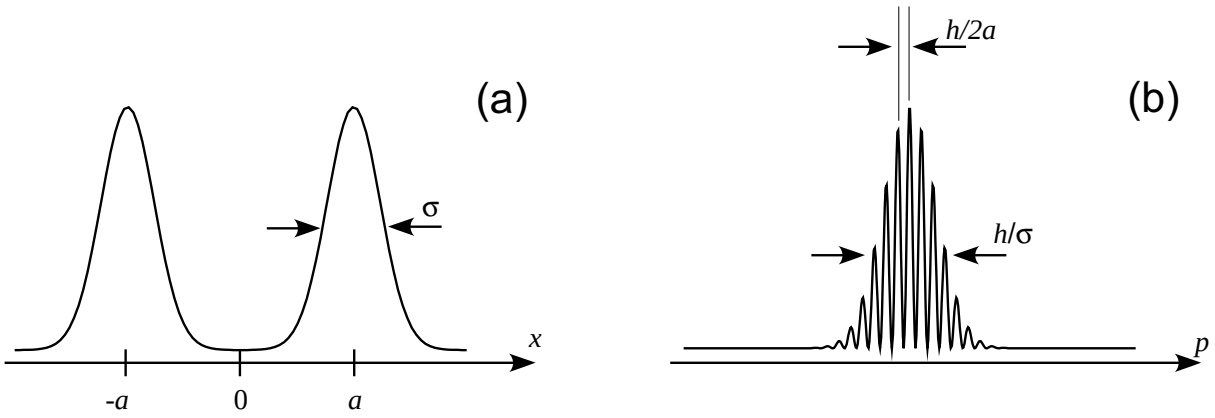

FIG. 6.1: Superposition cohérente de deux paquets d'ondes ; (a) distribution en position. (b) distribution en impulsion.

pour que les deux paquets d'ondes correspondant à $\phi(x-a)$ et à $\phi(x+a)$ ne se recouvrent pas. La distribution en position associée à cet état $\mathcal{P}(x)$ est tracé sur la figure 6.1a. L'état (6.24) correspond par exemple à celui d'une particule de masse M dans un interféromètre de type trous d'Young, juste après que la particule a traversé ces trous. L'état $\phi(x-a)$ correspond au passage par un des trous, et l'état $\phi(x+a)$ correspond au passage par l'autre trou.

Il sera utile de considérer la distribution en impulsion associée à cette fonction d'onde. En prenant le module carré de la transformée de Fourier de $\psi(x)$, on trouve :

$$\mathcal{P}(p,0) = 2\ \sin^2(pa/\hbar)\ |\bar{\phi}(p)|^2$$

où $\bar{\phi}(p)$ est la transformé de Fourier de $\phi(x)$; c'est une fonction centrée en $p=0$ de largeur $\hbar/\sigma$. L'allure de $\mathcal{P}(p,0)$ est tracée sur la figure 6.1b. La superposition cohérente se manifeste par une modulation de période $\pi\hbar/a$, l'enveloppe de la courbe étant simplement $|\bar{\phi}(p)|^2$, c'est-à-dire ce qu'on aurait pour un seul paquet d'ondes.

4.2 L'état « mélange incohérent »

L'état (6.24) correspond à une cohérence totale entre les deux paquets d'ondes. Du fait du couplage avec le réservoir constitué par les molécules du fluide, on s'attend à ce que cette cohérence soit diminuée. On peut donc s'intéresser au cas extrême où la superposition des deux paquets d'onde $|\phi_\pm\rangle$, associés aux fonctions d'onde $\phi(x\pm a)$, est complètement incohérente, c'est-à-dire au cas d'un opérateur densité :

$$\rho_s = \frac{1}{2}\left(|\phi_+\rangle\langle\phi_+| \ +\ |\phi_-\rangle\langle\phi_-|\right) \tag{6.25}$$

et se demander quelles sont les distributions de position $\mathcal{P}(x)$ et d'impulsion $\mathcal{P}(p)$ associées.

On constate immédiatement que la distribution en position est inchangée par rapport à celle représentée sur la figure 6.1a. En revanche la distribution en impulsion est modifiée

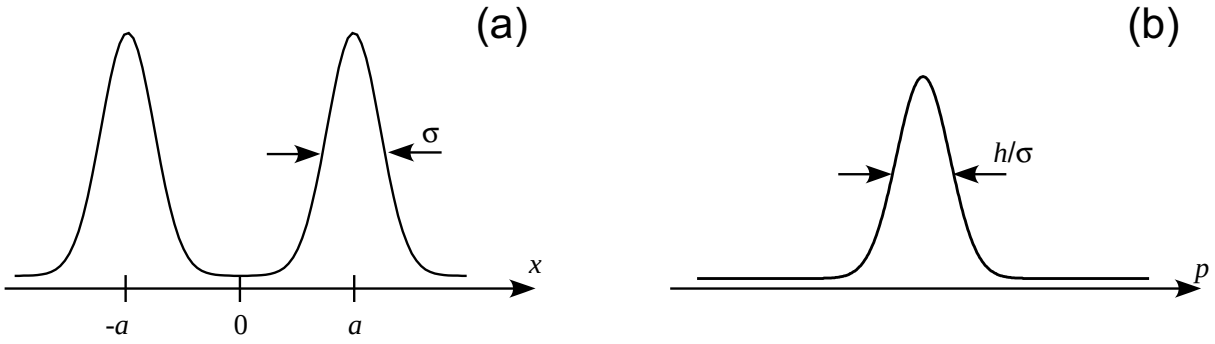

Fig. 6.2: Superposition incohérente de deux paquets d'ondes ; (a) distribution en position. (b) distribution en impulsion.

(figure 6.2b). Elle ne présente pas de modulation à l'échelle de $\hbar/a$ et elle correspond simplement à une fonction en cloche de largeur $\hbar/\sigma$ (une gaussienne si $\phi(x)$ est elle-même une gaussienne).

4.3 Evolution aux temps courts : de la superposition cohérente vers un mélange statistique

Dans ce paragraphe, nous allons nous limiter à l'évolution de l'état initial aux temps courts, pendant lesquels le mouvement de la particule brownienne peut être négligé. Ceci revient à prendre la limite $M \to \infty$ dans l'équation pilote (6.18), en se rappelant que $\gamma = D/(Mk_BT)$. Il ne reste donc que le terme de diffusion en impulsion, proportionnel à D. On s'intéresse à l'évolution des termes non diagonaux de l'opérateur densité $\langle x|\rho_s|x'\rangle$ et on trouve donc :

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle x|\rho_s(t)|x'\rangle = -\frac{D}{\hbar^2}\,(x-x')^2\,\langle x|\rho_s|x'\rangle \tag{6.26}$$

La signification physique de cette équation est claire : ces termes non diagonaux décroissent exponentiellement vers 0, et cela d'autant plus rapidement que les points x et x' sont éloignés l'un de l'autre.

On trouve alors aisément le temps nécessaire pour passer de l'état cohérent (6.24) au mélange statistique (6.25). Il faut que les cohérences entre deux points x et x' distants de $2a$ aient le temps de disparaître, ce qui correspond à :

$$t_{\rm coh} \simeq \frac{\hbar^2}{4Da^2} \tag{6.27}$$

Ce résultat essentiel peut s'écrire de plusieurs façons différentes. Une formulation suggestive consiste à remplacer D par $M\gamma k_BT$ et à introduire la longueur d'onde thermique de la particule brownienne $\lambda_T = h/\sqrt{2\pi Mk_BT}$. On trouve alors :

$$t_{\rm coh} \simeq \gamma^{-1}\,\left(\frac{\lambda_T}{a}\right)^2 \tag{6.28}$$

Pour une particule macroscopique ($M = 1$ gramme) et une séparation macroscopique ($a =$ 1 cm), on trouve à 300 K une longueur d'onde thermique $\lambda_T = 1.3\times10^{-20}$ cm, soit $\gamma t_{\rm coh} \sim$

10^{-40}. Même si la constante de temps d'amortissement de la particule brownienne est de l'ordre de l'age de l'univers[3] ($\gamma^{-1} \sim 3 \times 10^{17}$ s), la cohérence entre les deux composantes de la fonction d'onde est amortie en 10^{-23} s !

4.4 Evolution aux temps longs

Considérons maintenant les temps plus longs pendant lesquels on ne peut pas négliger le terme de friction, ni le terme de vol libre dans l'équation de Fokker-Planck-Kramers. Nous n'allons pas résoudre complètement cette équation, ce qui serait un peu long dans le cadre de ce cours, mais nous allons nous intéresser simplement à une fonction caractérisant ces termes non diagonaux qui nous intéressent ici :

$$\mathcal{G}(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x + \frac{u}{2} | \rho_s | x - \frac{u}{2} \rangle \, dx \ ,$$

dont on vérifiera simplement que c'est la transformée de Fourier de la distribution en impulsion :

$$\mathcal{G}(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}(p) \, e^{ipu/\hbar} \, dp \ .$$

Pour l'état « chat de Schrödinger » de départ, cette fonction $\mathcal{G}(u)$ a l'allure représentée sur la figure 6.3a.

On vérifiera sans difficulté que l'évolution de cette fonction $\mathcal{G}(u,t)$ à partir d'une distribution initiale $\mathcal{G}_0(u)$ est donnée par :

$$\mathcal{G}(u,t) = \mathcal{G}_0\left(u \, e^{-\gamma t}\right) \, \exp\left(-\frac{Du^2}{\hbar^2}\left(\frac{1-e^{-2\gamma t}}{2\gamma}\right)\right) \tag{6.29}$$

On peut distinguer sur cette équation les deux régimes de temps intéressants :

– Le régime de temps courts ($\gamma t \ll 1$) déjà étudié ci-dessus pour lequel on obtient :

$$\mathcal{G}(u,t) = \mathcal{G}_0\left(u\right) \, \exp\left(-\frac{Du^2 t}{\hbar^2}\right) \ . \tag{6.30}$$

  On retrouve l'amortissement exponentiel des cohérences entre points séparés par une distance u. Au bout de cette période, on voit en prenant $t \sim \gamma^{-1}$ dans (6.30) que le couplage à l'environnement a détruit toutes les cohérences portant sur une échelle de longueur supérieure à la longueur d'onde thermique $\lambda_T = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$ (figure 6.3b).

– Le régime de temps longs, pour lesquels $\gamma t \gg 1$, pour lequel la fonction $\mathcal{G}(u)$ tend vers un état stationnaire gaussien (6.3c) :

$$\mathcal{G}_{\rm stat}(u) \propto \exp\left(-\frac{Du^2}{2\hbar^2\gamma}\right) = \exp(-\pi \, u^2/\lambda_T^2) \tag{6.31}$$

[3] On pourra chercher à évaluer la qualité du vide requise pour atteindre une dissipation aussi faible...

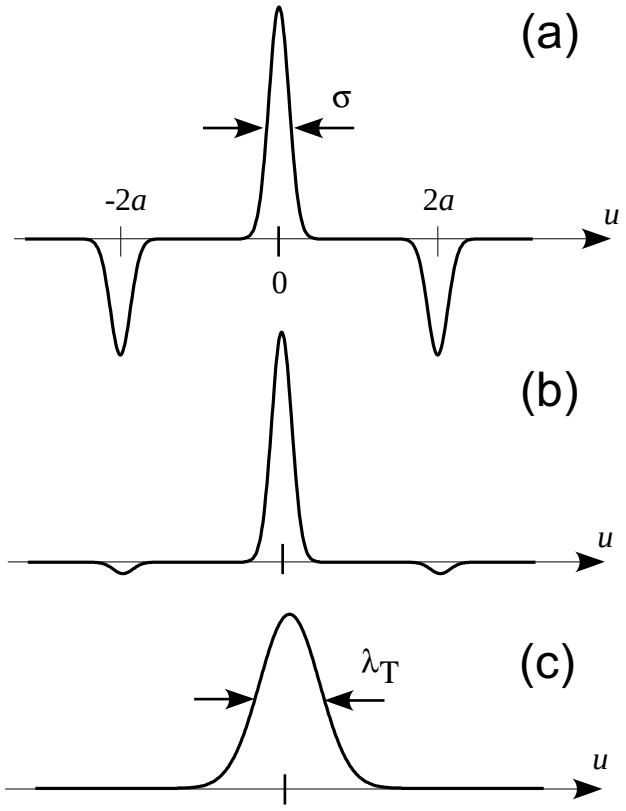

Fig. 6.3: Allure de la fonction $\mathcal{G}(u)$ (a) pour la superposition cohérente initiale des états $|\phi_{\pm}\rangle$; (b) Au bout d'un temps égal à une fraction de γ^{-1} ; (c) Après relaxation vers l'équilibre thermique.

En combinant ces deux résultats, on voit clairement les effets antagonistes de la diffusion, qui tend à contracter la fonction $\mathcal{G}(u)$ en amortissant les valeurs de la fonction pour des grandes valeur de u, et de la friction, qui tend au contraire à dilater la fonction initiale en remplaçant $\mathcal{G}_0(u)$ par $\mathcal{G}_0(\lambda u)$ où le paramètre λ est plus petit que 1. La diffusion est en effet un processus de chauffage qui va diminuer la cohérence de l'état initial, alors que la friction est un processus de refroidissement, qui tend à augmenter la cohérence de l'état de la particule brownienne.

L'état stationnaire atteint est une gaussienne de largeur $\sim \lambda_T$, ce qui était prévisible. On sait en effet que la distribution en impulsion $\mathcal{P}(p)$ stationnaire est une gaussienne de largeur $\sqrt{Mk_BT}$, et la fonction $\mathcal{G}(u)$ est la transformée de Fourier de $\mathcal{P}(p)$.

Conclusion

Le résultat que nous avons trouvé dans cette section illustre bien un principe général des études de décohérence : pour un couplage donné d'un système à un environnement, la fragilité d'une cohérence entre deux états différents du système augmente avec la « distance » entre ces deux états. Dans le cas particulier du mouvement brownien, cette « distance » a une signification physique bien claire, puisqu'elle correspond à l'écart $2a$ entre les centres des deux paquets d'ondes.

Références complémentaires

– C. Cohen-Tannoudji, Cours au Collège de France 1988-89.
– S. Haroche, Cours au Collège de France 2001-02 et 2002-03.
– C.W. Gardiner, *Quantum Noise*, Springer-Verlag.
– A.O. Caldeira and A.J. Leggett, Ann. Phys. **149**, 374 (1983).
– E. Joos and H.D. Zeh, Z. Phys. B **59**, 223 (1985).
– W.G. Unruh and W.H. Zurek, Phys. Rev. D **40**, 1071 (1989).

Chapitre 7

Fonctions d'onde Monte-Carlo

Nous avons vu dans les chapitres précédents la méthode standard pour traiter le couplage dissipatif entre un petit système et un réservoir. Cette méthode consiste à écrire une équation pilote pour l'opérateur densité du petit système, qui décrit l'évolution irréversible de celui-ci du fait de son couplage avec le réservoir. Dans ce chapitre, nous présentons une approche différente à ce problème ; elle consiste à décrire l'état du système par un vecteur d'état (et non un opérateur densité), l'irréversibilité étant introduite par un élément stochastique dans l'évolution du vecteur d'état. Nous verrons que ce traitement donne des résultats identiques à ceux de l'équation pilote, si on moyenne l'évolution du système sur un grand nombre de réalisations partant d'un même état initial.

Les éléments stochastiques que nous introduisons dans l'évolution du vecteur d'état sont constitués par des *sauts quantiques*, qui peuvent s'interpréter physiquement comme des mesures faites sur le système via son couplage avec le réservoir. Ceci permettra de donner un éclairage nouveau sur le couplage dissipatif entre le système et son environnement, éclairage qui sera bien adapté à l'étude expérimental d'un système unique (un ion piégé par exemple). Au contraire l'opérateur densité est plutôt adapté à l'étude d'une collection d'un grand nombre de systèmes quantiques identiques indépendants.

Cette méthode des fonctions d'onde Monte-Carlo présente également un avantage pratique. Les objets qu'on manipule sont des vecteurs d'états, donc des ensembles de $\mathcal{N}$ objets, où $\mathcal{N}$ est la dimension de l'espace de Hilbert considéré. L'opérateur densité a quant à lui une taille $\mathcal{N}^2$, ce qui rend sa manipulation problématique pour certaines applications.

D'un point de vue formel, on peut considérer que cette approche est pour le problème quantique l'équivalent de l'équation de Langevin pour le mouvement brownien, alors que l'équation pilote quantique est la contrepartie de l'équation de Fokker-Planck classique. Comme pour le cas classique, il est bon de garder les deux approches en mémoire, pour utiliser celle qui est la mieux adaptée à un problème donné.

1 La désexcitation d'un niveau instable

1.1 Décroissance depuis un état purement excité

Commençons cette étude par un problème simple. On considère une assemblée de particules (atomes, molécules, noyaux) préparées dans un état excité instable $|e\rangle$ d'énergie E_e, et on cherche à décrire la désexcitation de ce système quand il retombe dans son état fondamental $|g\rangle$ d'énergie $E_g = E_e - \omega_0$ ($\hbar = 1$ et $\omega_0 > 0$). Nous ne voulons pas rentrer ici dans le détail du processus de désexcitation ; nous supposons simplement connu le taux de décroissance Γ.

Nous poserons dans ce qui suit $S_+ = |e\rangle\langle g|$ et $S_- = |g\rangle\langle e|$, et nous utiliserons les projecteurs sur les états excité et fondamental :

$$\begin{aligned} P_e &= |e\rangle\langle e| = (|e\rangle\langle g|)\ (|g\rangle\langle e|) = S_+ S_- \ , \\ P_g &= |g\rangle\langle g| = (|g\rangle\langle e|)\ (|e\rangle\langle g|) = S_- S_+ \ . \end{aligned}$$

Dans le point de vue de l'opérateur densité, on a une équation pilote qui s'écrit (cf. chapitre 5) :

$$\frac{d\rho}{dt} = i[\rho(t), H_0] - \frac{\Gamma}{2}\left(P_e\,\rho(t) + \rho(t)\,P_e\right) + \Gamma\, S_-\rho(t)S_+ \tag{7.1}$$

avec $H_0 = \omega_0 P_e$. L'évolution des 4 éléments de matrice est donc :

$$\dot\rho_{ee} = -\Gamma\rho_{ee} \qquad \dot\rho_{gg} = \Gamma\rho_{ee} \qquad \dot\rho_{eg} = -\left(i\omega_0 + \frac{\Gamma}{2}\right)\rho_{eg} \qquad \dot\rho_{ge} = \left(i\omega_0 - \frac{\Gamma}{2}\right)\rho_{ge} \tag{7.2}$$

et sa solution s'écrit :

$$\rho_{ee}(t) = e^{-\Gamma t} \qquad\qquad \rho_{gg}(t) = 1 - e^{-\gamma t} \tag{7.3}$$

Les coefficients non diagonaux ρ_{eg} et ρ_{ge} sont nuls à l'instant 0 si tous les atomes sont dans l'état $|e\rangle$. Ils restent donc nuls à tout instant.

On peut simuler très simplement cette évolution par une évolution stochastique. On peut considérer qu'un système part dans l'état $|\psi(0)\rangle = |e\rangle$ de l'instant 0 et que, s'il est encore dans l'état $|e\rangle$ à l'instant t, son évolution entre t et $t + dt$ est aléatoire, avec les deux éventualités :

$$\text{avec une probabilité } dp = \Gamma\, dt \qquad |\psi(t+dt)\rangle = |g\rangle \tag{7.4}$$

$$\text{avec une probabilité } 1 - dp = 1 - \Gamma\, dt \qquad |\psi(t+dt)\rangle = |e\rangle \tag{7.5}$$

Une fois le système dans l'état $|g\rangle$, on suppose qu'il n'évolue plus. Il est immédiat de prouver que les probabilités respectives pour trouver un système dans l'état e ou g sont données par (7.3).

On peut simuler numériquement cette évolution stochastique en prenant un générateur de nombres quasi-aléatoires distribués uniformément entre 0 et 1. Quand le nombre ainsi tiré au sort est inférieur à $dp = \Gamma\, dt$, on suit la voie (7.4), sinon on suit la voie (7.5). Cette

simulation correspond à l'évolution quantique qu'on prédit lors d'une observation continue du système : tant qu'on ne détecte pas de photon émis, le système est encore dans l'état e ; quand on détecte un photon, ceci projette le vecteur d'état de l'atome dans l'état g. Le saut quantique qu'on introduit dans (7.4) correspond simplement à cette évolution lors d'une mesure « positive » sur le système, c'est-à-dire la « réduction du paquet d'ondes » lors de la détection d'un photon.

1.2 Evolution dans une mesure « négative »

Compliquons un peu le problème et supposons que nos atomes partent dans l'état initial

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|e\rangle + |g\rangle\right) \tag{7.6}$$

La solution de l'équation pilote est alors :

$$\rho_{ee}(t) = \frac{1}{2}e^{-\Gamma t} \qquad \rho_{gg}(t) = 1 - \frac{1}{2}e^{-\gamma t} \qquad \rho_{eg} = \frac{1}{2}e^{-(i\omega_0+\Gamma/2)t} \tag{7.7}$$

Si on dispose de $N \gg 1$ systèmes identiques au départ, on s'attend à ce que $\sim N/2$ photons soient émis, et les N systèmes se retrouvent dans l'état g au bout d'un temps long devant Γ^{-1}.

Cherchons à reproduire cette loi de décroissance par une évolution stochastique. La probabilité que le système tombe de e vers g entre 0 et dt est $dp = \Gamma\, dt\, \pi_e$ où π_e désigne la probabilité que le système soit dans l'état e ($\pi_e = 1/2$). Si l'atome tombe sur g, l'évolution s'arrête comme précédemment. Cette évolution avec saut quantique correspond à la détection d'un photon émis lors de la transition $e \to g$.

Mais que faire dans le cas où il n'y a pas de saut quantique, ce qui se produit avec une probabilité $1 - dp = 1 - \Gamma\, dt/2$? Si, pour trouver l'évolution entre dt et $2\,dt$, on se contente de repartir du même état (7.6) (et ainsi de suite entre $n\,dt$ et $(n+1)\,dt$), on ne va pas reproduire l'évolution (7.7). On va plutôt trouver une décroissance avec un taux $\Gamma/2$ (donc réduit par rapport au taux réel Γ), et une émission de N photons au lieu de $N/2$.

Où est la faute ? Pour la trouver, le plus simple est d'écrire formellement le vecteur d'état total (système+champ) à l'instant dt :

$$|\Psi(dt)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle \otimes |0\rangle + \frac{e^{-\Gamma dt/2}}{\sqrt{2}}|e\rangle \otimes |0\rangle + |g\rangle \otimes |\chi_{\text{champ}}\rangle \tag{7.8}$$

où $|\chi_{\text{champ}}\rangle$ est un vecteur de norme $\Gamma dt/2$ contenant 1 photon. Le tirage au sort correspond à la mesure d'un éventuel photon émis :

- Si la mesure donne un résultat positif (un photon est détecté), l'état du système est projeté sur l'état $|g\rangle \otimes |\chi_{\text{champ}}\rangle$; en particulier, l'atome est projeté dans l'état $|g\rangle$, comme attendu.
- La démarche à suivre dans le cas d'une mesure négative (aucun photon n'est détecté)

est un peu plus subtile. L'état du système est projeté dans ce cas sur

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle \otimes |0\rangle + \frac{e^{-\Gamma dt/2}}{\sqrt{2}}|e\rangle \otimes |0\rangle$$

qu'il s'agit de normaliser. En utilisant le fait que $\Gamma\, dt \ll 1$, on trouve que l'état de l'atome après normalisation est à l'ordre 1 en dt :

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 + \frac{\Gamma\, dt}{4}\right)|g\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \frac{\Gamma\, dt}{4}\right)|e\rangle \tag{7.9}$$

L'état de l'atome change donc après la mesure, que le résultat soit positif ou négatif. En particulier, le fait de ne rien mesurer fait effectuer une légère rotation au vecteur d'état atomique, d'un angle proportionnel à dt. Dans le cas particulier considéré au paragraphe précédent (1.1), cet angle était nul car l'état initial était purement excité. En revanche, dans le cas général où l'état atomique est une combinaison de e et g, cet angle est non nul.

1.3 Schéma Monte-Carlo pour ce problème

Une fois identifiés les deux types d'évolution possibles, saut quantique vers $|g\rangle$ dans le cas d'une mesure positive, ou rotation infinitésimale dans le cas d'une mesure négative, nous pouvons proposer le principe d'une simulation Monte-Carlo qui reproduira, après moyenne sur un grand nombre de « trajectoires quantiques », l'évolution de l'opérateur densité donnée par l'équation pilote (7.2). Notons

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(t)|e\rangle + \beta(t)|g\rangle$$

un vecteur d'état obtenu dans une simulation donnée après une durée d'évolution t.

Pour passer de t à $t + dt$, on tire au sort entre deux évolutions possibles. Avec une probabilité $dp = \Gamma\ dt\ |\alpha(t)|^2 = \Gamma\, dt\, \langle\psi(t)|P_e|\psi(t)\rangle$, on effectue un saut quantique qui amène l'atome dans l'état $|g\rangle$, duquel il ne bougera plus :

$$\text{Probabilité } dp = \Gamma\ dt\ |\alpha(t)|^2 \qquad |\psi(t+dt)\rangle = |g\rangle\ .$$

Avec une probabilité $1 - dp$, on fait évoluer le vecteur d'état de l'atome sous l'effet de l'hamiltonien non hermitien

$$H = \left(\omega_0 - i\frac{\Gamma}{2}\right)|e\rangle\langle e|$$

et on normalise le résultat final, ce qui donne :

$$\text{Probabilité } 1 - dp = 1 - \Gamma\ dt\ |\alpha(t)|^2 \qquad |\psi(t+dt)\rangle = \mu\ (1 - iH\, dt)|\psi(t)\rangle\ .$$

Le terme non hermitien $i(\Gamma/2)\,|e\rangle\langle e|$ assure que la rotation du vecteur d'état dans une mesure négative se produit correctement. Le coefficient de normalisation μ vaut

$$\mu = (1 - dp)^{-1/2}\ .$$

L'équivalence entre cette évolution stochastique et l'évolution donnée par l'équation pilote (7.2) se démontre simplement. Considérons une réalisation stochastique donnée, qui a conduit au résultat $|\psi(t)\rangle$. On pose $\sigma(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ et on s'intéresse à l'opérateur $\sigma(t+dt) = |\psi(t+dt)\rangle\langle\psi(t+dt)|$. Cet opérateur peut prendre deux valeurs, selon les deux éventualités données ci-dessus. Pour $|\psi(t)\rangle$ donné, la valeur moyenne de $\sigma(t+dt)$ vaut :

$$\begin{aligned}\overline{\sigma(t+dt)} &= (1-dp)\,\mu^2(1-iH\,dt)|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|(1+iH^\dagger\,dt) \;+\; dp|g\rangle\langle g| \\ &\simeq \sigma(t) - i\,dt\left(H\,\sigma(t) - \sigma(t)\,H^\dagger\right) + \Gamma\,dt\,S_-\sigma(t)S_+ \end{aligned} \tag{7.10}$$

On moyenne maintenant (7.10) sur les différents vecteurs d'état $|\psi(t)\rangle$ obtenus en faisant l'évolution stochastique entre 0 et t, et on note $\tilde{\sigma}(t)$ la moyenne de tous les $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$. En prenant la limite $dt \to 0$ dans (7.10), on trouve :

$$\frac{d\tilde{\sigma}}{dt} = i[\tilde{\sigma}, H_0] - \frac{\Gamma}{2}\,(P_e\,\tilde{\sigma} + \tilde{\sigma}\,P_e) + \Gamma S_-\,\tilde{}\sigma S_+$$

L'évolution de la quantité $\sigma(t)$, après moyenne sur différentes réalisations Monte-Carlo, est donc identique à celle de l'opérateur densité. Comme les états initiaux $\rho(0)$ et $\sigma(0)$ coïncident (ils sont égaux à $|\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|$), on en déduit que cette évolution stochastique est bien équivalente à celle donnée par l'équation pilote[1].

2 La méthode générale

2.1 Traitement d'une équation de Lindbladt

Le traitement que nous venons de présenter se généralise sans difficulté à une classe très générale[2] d'équations pilotes appelées *équations de Lindbladt* :

$$\frac{d\rho_s}{dt} = i[\rho_s(t), H_0] + \sum_m \left\{ C_m\,\rho_s(t)\,C_m^\dagger - \frac{1}{2}\left(C_m^\dagger\,C_m\,\rho_s(t) + \rho_s(t)\,C_m^\dagger\,C_m\right)\right\}\,. \tag{7.11}$$

On peut suppose qu'à chaque instant, le système est décrit par un vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$, le passage de t à $t+dt$ se faisant de la manière suivante :

– Avec une probabilité $\delta p_m = \delta t\,\langle\psi(t)|C_m^\dagger C_m|\psi(t)\rangle$, le système effectue un saut quantique associé à l'opérateur C_m :

$$\text{Probabilité } \delta p_m = \delta t\,\langle\psi(t)|C_m^\dagger C_m|\psi(t)\rangle \qquad |\psi(t+dt)\rangle \propto C_m|\psi(t+dt)\rangle \tag{7.12}$$

– Avec une probabilité $1-\delta p$, où $\delta p = \sum_m \delta p_m$, le système évolue sous l'effet d'un hamiltonien non hermitien :

$$\text{Probabilité } 1-\delta p \qquad |\psi(t+dt)\rangle \propto (1-iH\,dt)\,|\psi(t)\rangle \tag{7.13}$$

[1] Le cas où l'opérateur densité initial correspond à un mélange statistique se traite en choisissant l'état $|\psi(0)\rangle$ parmi les différents états de la décomposition diagonale de $\rho(0)$.

[2] Notons toutefois que l'équation pilote obtenue pour le mouvement brownien au chapitre 6 n'est pas de la forme de Lindbladt, et qu'il n'est donc pas simple de la décrire dans le cadre de cette méthode des fonctions d'onde Monte-Carlo.

avec

$$H = H_0 - \frac{i}{2}\sum_m C_m^\dagger C_m \tag{7.14}$$

Dans les deux cas, il faut ensuite normer le résultat obtenu pour $|\psi(t+dt)\rangle$. Nous ne ferons pas ici la démonstration de l'équivalence de cette approche avec l'équation pilote. Cette preuve est une extension directe de celle donnée plus haut pour l'émission spontanée d'un atome à deux niveaux

Une fois obtenu un ensemble de N vecteurs d'état $|\psi^{(i)}(t)\rangle$ correspondant chacun à une évolution stochastique, on peut calculer la valeur moyenne de n'importe quelle observable A grâce à :

$$\langle A\rangle = \frac{1}{N}\sum_n \langle\psi^{(n)}(t)|A|\psi^{(n)}(t)\rangle = \mathrm{Tr}\,(\tilde\sigma(t)A) \qquad \tilde\sigma(t) = \frac{1}{N}\sum_n |\psi^{(n)}(t)\rangle\langle\psi^{(n)}(t)| \tag{7.15}$$

Pour que le bruit relatif sur cette détermination de $\langle A\rangle$ soit petit, il suffit en général[3] que le nombre de réalisations soit grand devant 1.

2.2 Avantages et inconvénients de la méthode stochastique.

Les considérations ci-dessus nous permettent de voir l'avantage pratique de la méthode Monte-Carlo par rapport à l'utilisation de l'équation pilote. Supposons que la dimension de l'espace de Hilbert du système considéré soit $\mathcal{N}$. Quand on travaille avec l'équation pilote, on doit manipuler un opérateur densité de taille $\mathcal{N}^2$, que l'on fait évoluer entre 0 et t. Quand on utilise la méthode des fonctions d'onde Monte-Carlo, on travaille avec des objets de taille $\mathcal{N}$, donc beaucoup plus petits que l'opérateur densité pour un système complexe. En revanche, il faut effectuer un nombre de simulations $N \gg 1$ pour obtenir une précision suffisante, donc calculer N évolutions entre 0 et t. L'avantage pratique de cette méthode se fera donc sentir seulement si $\mathcal{N}$ est vraiment très grand devant 1. Sinon, l'effort nécessaire pour acquérir une précision suffisante sur le résultat n'est pas justifié par le passage d'objets de taille $\mathcal{N}^2$ à des objets de taille $\mathcal{N}$.

Un exemple typique d'utilisation de cette méthode est l'étude du refroidissement laser, dans le régime vraiment très froid pour lequel on doit traiter quantiquement le mouvement 3D du centre de masse de l'atome. On est alors amené à discrétiser l'impulsion atomique sur une grille comportant typiquement $50 \times 50 \times 50$ points, soit $\mathcal{N} \sim 10^5$. Le point de vue de l'opérateur densité oblige alors à manipuler un objet à 10^{10} composantes, ce qui est énorme pour un calculateur standard. Le point de vue des fonctions d'onde Monte-Carlo utilise des objets à 10^5 composantes, et une centaine d'évolutions est suffisante pour déterminer précisément les caractéristiques de l'état stationnaire (température, distribution en position).

Au delà de cet avantage pratique, cette méthode fournit également une image physique originale du système. Elle correspond souvent à ce qu'on observe sur un objet quantique individuel, les sauts quantiques étant la conséquence du couplage avec l'environnement

[3]Pour plus de détails, voir par exemple K. Mølmer *et al*, JOSA B **10**, 524 (1993).

(comme l'émission spontanée d'un photon par exemple). Au contraire, l'équation pilote donne une évolution moyenne, qui représente ce qu'on observe quand on regarde simultanément un grand nombre de systèmes quantiques identiques et indépendants. Il est donc important de garder à l'esprit ces deux approches, pour choisir celle qui est la plus proche de l'expérience qu'on cherche à modéliser.

3 Cohérente et dissipation pour un système à deux niveaux

3.1 Excitation cohérente d'un système à deux niveaux

Pour illustrer cette méthode sur une exemple simple, nous revenons au cas d'un système à deux niveaux, et nous supposons maintenant qu'un couplage cohérent de pulsation ω est présent entre $|e\rangle$ et $|g\rangle$. L'hamiltonien du système à deux niveaux s'écrit alors :

$$H_0(t) \;=\; \omega_0 P_e \;+\; \Omega(S_+ + S_-)\cos(\omega t) \tag{7.16}$$

Le terme Ω caractérise la force du couplage ; il est appelé *fréquence de Rabi*. La fréquence ω est choisie proche de la fréquence de résonance ω_0. Plus précisément, nous supposerons dans ce qui suit que la fréquence de Rabi Ω et le désaccord $\Delta = \omega - \omega_0$ vérifient :

$$|\Omega| \ll \omega_0 \qquad\qquad |\Delta| \ll \omega_0 \ .$$

3.2 Passage dans le référentiel tournant

Nous allons chercher à tirer parti de l'hypothèse $|\Delta| \ll \omega_0$ pour transformer l'hamiltonien dépendant du temps en un problème indépendant du temps. Dans le cas simple qui nous intéresse ici, portant sur un système à deux niveaux, on pourrait faire cette manipulation directement sur les quatre coefficients de l'opérateur densité. Toutefois, il est instructif d'adopter un point de vue plus général, fondé sur la notion de transformation unitaire, qui se généralise à beaucoup d'autres problèmes.

Transformation unitaire. Supposons qu'un vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ soit solution de l'équation de Schrödinger $i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H_0(t)|\psi\rangle$. On pose $|\tilde{\psi}(t)\rangle = U(t)|\psi(t)\rangle$. On vérifie immédiatement que le nouveau vecteur d'état $|\tilde{\psi}\rangle$ vérifie la nouvelle équation de Schrödinger :

$$i\frac{d}{dt}|\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{H}_0(t)|\tilde{\psi}\rangle \quad \text{avec} \quad \tilde{H}_0(t) = U(t)H_0(t)U^\dagger(t) + i\frac{dU}{dt}U^\dagger \ .$$

Dans le problème qui nous intéresse, posons

$$U(t) = e^{iP_e\omega t} \qquad\qquad U^\dagger = e^{-iP_e\omega t} \ .$$

L'intérêt de cette transformation est d'obtenir des coefficients du vecteur d'état sur la base $\{|e\rangle, |g\rangle\}$ qui évoluent lentement avec le temps. En effet, partant du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle = \alpha(t)|e\rangle + \beta(t)|g\rangle$, pour lequel $\alpha(t)$ évolue rapidement (comme $e^{-i\omega_0 t}$ en absence

de couplage Ω) alors que $\beta(t)$ évolue lentement (il est constant en absence de couplage), on aboutit à

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = U(t)|\psi(t)\rangle = \tilde{\alpha}(t)\,|e\rangle + \tilde{\beta}(t)|g\rangle \qquad \text{avec} \qquad \tilde{\alpha}(t) = e^{i\omega t}\alpha(t)\ , \quad \tilde{\beta}(t) = \beta(t)\ ,$$

et les deux coefficients $\tilde{\alpha}$ et $\tilde{\beta}$ évoluent effectivement lentement (c'est-à-dire avec une fréquence typique Δ et/ou Ω).

Le nouvel hamiltonien est

$$\begin{aligned}
\tilde{H}_0(t) &= \omega_0\, e^{iP_e\omega t} P_e e^{-iP_e\omega t} \;+\; \Omega\,\cos(\omega t)\, e^{iP_e\omega t}(S_+ + S_-)e^{-iP_e\omega t} \;+ i\frac{dU}{dt}U^\dagger\ , \\
&= \omega_0 P_e + \;\Omega\,\cos(\omega t)\,(S_+ e^{i\omega t} + S_- e^{-i\omega t}) \;-\; \omega P_e\ , \\
&= -\Delta P_e + \;\frac{\Omega}{2}\,(S_+ + S_-) \;+\; \frac{\Omega}{2}\,(S_+ e^{2i\omega t} + S_- e^{-2i\omega t})\ .
\end{aligned}$$

Les deux premiers termes de la dernière ligne décrivent la dynamique d'un système à deux niveaux, d'énergies respectives 0 et $-\Delta$, couplés par un potentiel statique d'intensité $\Omega/2$. Le troisième terme est un couplage haute fréquence (2ω), dont l'effet est négligeable dans la limite $\Omega, \Delta \ll \omega$. On peut donc négliger ce terme pour prendre simplement :

$$\tilde{H}_0 = -\Delta P_e + \;\frac{\Omega}{2}\,(S_+ + S_-)\ .$$

Cette approximation est appelée *approximation du champ tournant*, terminologie héritée de la résonance magnétique nucléaire. Une fois cette approximation faite, on est ramené à un problème indépendant du temps.

3.3 Les équations de Bloch optiques

Supposons maintenant, comme en § 1.1, que l'état e est instable et peut retomber par émission spontanée sur g en émettant un photon. L'évolution de l'opérateur densité atomique est obtenue en insérant l'expression de $\tilde{H}_0$ dans l'équation pilote (7.1).

La transformation unitaire $\rho \to \tilde{\rho}(t) = U(t)\,\rho(t)\,U^\dagger(t)$, avec $U = e^{iP_e\omega t}$, ne change pas les éléments de matrice diagonaux (populations) ρ_{ee} et ρ_{gg}. Les éléments non diagonaux sont changés en :

$$\rho_{eg}(t) \to \tilde{\rho}_{eg} = e^{i\omega t}\rho_{eg}(t) \qquad\qquad \rho_{ge}(t) \to \tilde{\rho}_{ge} = e^{-i\omega t}\rho_{ge}(t)$$

On vérifie immédiatement que les termes de relaxation ne sont pas modifiés lors de cette transformation unitaire :

$$\frac{d\tilde{\rho}}{dt} = i[\tilde{\rho}(t), \tilde{H}_0] - \frac{\Gamma}{2}\,(P_e\,\tilde{\rho}(t) + \tilde{\rho}(t)\,P_e) + \Gamma\,S_-\tilde{\rho}(t)S_+\ . \tag{7.17}$$

L'évolution des 4 composantes de l'opérateur densité est donnée par :

$$\dot{\rho}_{ee} = i\frac{\Omega}{2}(\tilde{\rho}_{eg} - \tilde{\rho}_{ge}) - \Gamma\rho_{ee} \tag{7.18}$$

$$\dot{\rho}_{gg} = -\dot{\rho}_{ee} \tag{7.19}$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{eg} = \left(i\Delta - \frac{\Gamma}{2}\right)\tilde{\rho}_{eg} + i\frac{\Omega}{2}(\rho_{ee} - \rho_{gg}) \tag{7.20}$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ge} = \dot{\tilde{\rho}}^*_{eg} \tag{7.21}$$

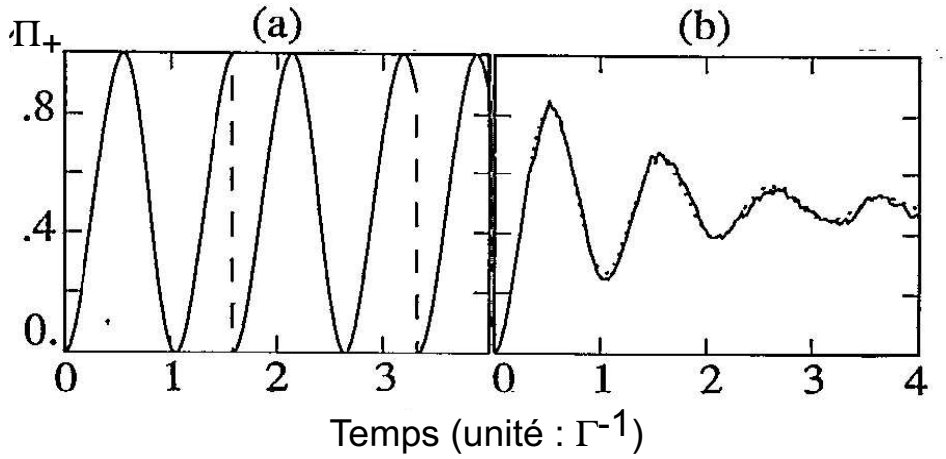

Fig. 7.1: (a) Evolution temporelle de la population de l'état excité $|+\rangle$ d'un système à deux niveaux ; Π_+ est calculée en suivant une « trajectoire » donnée par une fonction d'onde Monte-Carlo ($\Omega = 3\Gamma$, $\Delta = 0$). Les lignes tiretées correspondent aux sauts quantiques projetant l'état de l'atome sur $|-\rangle$. (b) Moyenne de Π_+ obtenue à partir de 100 fonctions d'onde Monte-Carlo, partant toutes de l'état $|-\rangle$ à l'instant $t = 0$. La ligne pointillée représente la prédiction des équations de Bloch optiques.

Ces équations sont appelées *équations de Bloch* et elles ont été introduites pour étudier le comportement d'un spin dans une expérience de résonance magnétique. On les nomme également *équations de Bloch optiques* quand on s'intéresse à la dynamique d'un atome modélisé par un système à deux niveaux, et excité de manière cohérente par une onde laser.

On vérifiera que ces équations de Bloch admettent un état stationnaire correspondant à :

$$\rho_{ee}^{\text{stat}} = \frac{2\Omega^2}{2\Omega^2 + \Gamma^2 + 4\Delta^2} \tag{7.22}$$

Cet état stationnaire est atteint au bout d'un temps caractéristique de l'ordre de Γ^{-1}. On voit sur (7.22) que la population de l'état excité varie de manière résonnante avec la fréquence de l'excitation, avec une dépendance lorentzienne vis à vis de Δ. Pour un désaccord Δ fixé, la population stationnaire de l'état excité croît avec la force de l'excitation, caractérisée par la fréquence de Rabi Ω. Pour des excitations intenses ($\Omega \gg \Gamma, \Delta$ – mais toujours $\Omega \ll \omega$), les populations de e et de g sont égales à 1/2 : l'atome passe la moitié du temps dans chacun des deux niveaux. On pourra s'entraîner à retrouver avec ces équations les résultats utilisés pour traiter le refroidissement d'atomes par laser au chapitre 4.

3.4 Le point de vue des fonctions d'onde Monte-Carlo

On peut retrouver cette évolution vers l'état stationnaire grâce à la méthode des fonctions d'onde Monte-Carlo. La figure 7.1 représente l'évolution de la population de e obtenue dans une simulation menée selon la procédure décrite plus haut pour un désaccord

nul ($\Delta = 0$). On voit que cette population oscille de manière cohérente entre 0 et 1, jusqu'à ce qu'un saut quantique interrompe cette oscillation. Ce saut quantique correspond à l'émission spontanée d'un photon, et l'atome est alors projeté dans l'état g. L'atome repart alors pour une autre oscillation, identique à la première et déphasée d'une quantité qui dépend de l'instant du premier saut quantique ; ce déphasage est donc aléatoire.

Quand on moyenne un grand nombre (une centaine) de « trajectoires quantiques » ayant toutes la même condition initiale, on trouve une oscillation amortie pour la population de e. Cette oscillation coïncide (au bruit près) avec le résultat trouvé lors de l'intégration des équations de Bloch. Pour cet exemple, il est clair que la méthode des fonctions d'onde Monte-Carlo n'apporte aucun gain de calcul, bien au contraire. Il est plus rapide de faire évoluer une fois les 4 composantes de l'opérateur densité que 100 fois les deux composantes du vecteur d'état. En revanche, cette méthode apporte un éclairage original sur la nature de l'amortissement qui conduit à l'atteinte de l'état stationnaire (7.22).

Références complémentaires

- J. Dalibard, Y. Castin and K. Mølmer, Phys. Rev. Lett. **68**, 580 (1992) ; K. Mølmer, Y. Castin and J. Dalibard, J. Opt. Soc. Am. B **10**, 524 (1993).
- H.J. Charmichael, *An Open Systems Approach to Quantum Optics*, Springer-Verlag.
- M. Scully and M. Zubairy, *Quantum Optics*, Cambridge University Press.

Chapitre 8

Ondes de matières cohérentes

Quand nous avons considéré une particule ponctuelle de masse M couplée à un réservoir à température T, nous avons vu que la longueur de cohérence associée à son état stationnaire est voisine de sa longueur d'onde thermique (cf. equation 6.31) :

$$\ell_{\rm coh} \sim \lambda_T \equiv \frac{h}{\sqrt{2\pi M k_B T}} \ .$$

A basse température, ce résultat est considérablement modifié dans le cas où un grand nombre de particules identiques sont simultanément présentes. En se limitant au cas de particules bosoniques, on trouve que la longueur de cohérence $\ell_{\rm coh}$ est fortement augmentée par la prise en compte de l'indiscernabilité des particules. Pour un gaz homogène et sans interaction à une dimension, on trouve que :

$$\text{Gaz de Bose 1D :} \qquad \ell_{\rm coh} \sim \lambda_T \ (\rho^{(1D)} \lambda_T) \qquad \text{pour} \quad \rho^{(1D)} \lambda_T \gg 1 \ .$$

La quantité $\rho^{(1D)}$ représente la densité linéique de particules. Pour un gaz tri-dimensionnel, la modification du résultat à une particule est encore plus dramatique puisque le phénomène de condensation de Bose-Einstein conduit à :

$$\text{Gaz de Bose 3D :} \qquad \ell_{\rm coh} = +\infty \qquad \text{pour} \quad \rho^{(3D)} \lambda_T^3 > \zeta(3/2) \simeq 2.612 \ ,$$

Dans ce chapitre, nous allons présenter l'analyse de ces deux situations, 1D et 3D, pour un gaz sans interaction. Nous terminerons par l'étude de la phase relative de deux condensats indépendants, en cherchant à répondre à la question suivante : est-ce que deux condensats « qui ne se sont jamais rencontrés » ont une phase relative définie ?

1 La distribution de Bose-Einstein

Considérons une assemblée de N particules identiques de spin nul sans interaction, à température T. Chaque particule i évolue sous l'effet de l'hamiltonien $\hat{h}(i)$ $(i = 1, \ldots, N)$, de sorte que l'hamiltonien total s'écrit :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{h}(i) \ .$$

On note $|\alpha\rangle$ et $\{\epsilon_\alpha\}$ les états propres et les niveaux d'énergie de l'hamiltonien à une particule $\hat{h}$. Puisque les particules n'interagissent pas, les niveaux d'énergie de $\hat{H}$ sont les $\sum n_\alpha \epsilon_\alpha$, avec $\sum n_\alpha = N$. Les états propres correspondants sont $|\{n_\alpha\}\rangle$, caractérisés par les nombres d'occupation n_α. On cherche à connaître le nombre moyen de particules occupant un état donné $|\alpha\rangle$. Le résultat est donné par la distribution de Bose-Einstein :

$$n_\alpha = \frac{1}{\exp((\epsilon_\alpha - \mu)\,/\,k_B T) - 1} \tag{8.1}$$

La quantité μ est appelée *potentiel chimique* et se détermine en imposant que le nombre total de particules soit égal à N :

$$\text{Détermination de } \mu \ : \qquad N = \sum_\alpha n_\alpha = \sum_\alpha \frac{1}{\exp((\epsilon_\alpha - \mu)\,/\,k_B T) - 1} \ . \tag{8.2}$$

On remarque immédiatement une contrainte sur le potentiel chimique. Comme le nombre moyen de particules sur chaque niveau α est forcément positif et fini, il faut qu'on ait pour tout α : $\exp((\epsilon_\alpha - \mu)\,/\,k_B T) > 1$, ce qui impose $\epsilon_\alpha > \mu$ pour tout α. Le potentiel chimique doit donc être inférieur à toutes les énergies propres ϵ_α, c'est-à-dire :

$$\mu < \epsilon_0 \tag{8.3}$$

où ϵ_0 est l'énergie de l'état fondamental de $\hat{h}$.

Plaçons-nous à température fixée. La relation (8.2) entre le nombre total de particules N et le potentiel chimique μ est bijective et monotone :

- Quand le potentiel chimique μ tend vers $-\infty$, chaque terme de la somme tend vers 0 et on a[1] :

$$\mu \to -\infty \ : \qquad n_\alpha \simeq e^{\mu\,/\,k_B T}\, e^{-\epsilon_\alpha\,/\,k_B T} \to 0 \qquad N \simeq e^{\mu\,/\,k_B T} \sum_\alpha e^{-\epsilon_\alpha\,/\,k_B T} \to 0 \tag{8.4}$$

  Le nombre total d'atomes N tend vers 0 et on retrouve dans cette limite la statistique de Boltzmann.
- Quand le potentiel chimique μ se rapproche de sa borne supérieure ϵ_0, la population d'un niveau voisin du fondamental de $\hat{h}$ s'écrit :

$$\epsilon_\alpha - \mu \ll k_B T \ : \qquad n_\alpha \simeq \frac{k_B T}{\epsilon_\alpha - \mu} \tag{8.5}$$

  En particulier, quand μ tend vers ϵ_0, on trouve :

$$\mu \to \epsilon_0 \ : \qquad n_0 \simeq \frac{k_B T}{\epsilon_0 - \mu} \to \infty \qquad N = \sum_\alpha n_\alpha \to \infty \tag{8.6}$$

On peut donc obtenir n'importe quel nombre de particule N dans le système en faisant varier μ entre $-\infty$ et ϵ_0. Dans la suite, on posera $z = e^{\mu/(k_B T)}$, paramètre sans dimension appelé *fugacité*, qui varie donc entre 0 (pour $\mu = -\infty$) et $e^{\epsilon_0/(k_B T)}$.

[1] On admettra bien sûr que toutes les sommes écrites ici convergent. Si ce n'était pas le cas, cela signifierait que la description du système par les méthodes usuelles de la physique statistique n'est pas possible.

2 Gaz de Bose à une dimension

2.1 Densité linéique et potentiel chimique

Considérons un gaz de N bosons uni-dimensionnel, confiné dans une boîte de longueur L. L'hamiltonien à une particule $\hat{h}$ est simplement : $\hat{h} = \hat{P}^2/2M$ et ses états propres sont les ondes planes :

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ipx/\hbar} \qquad \epsilon_p = \frac{p^2}{2M} \qquad p = \frac{2\pi\hbar}{L} j \tag{8.7}$$

où j est un entier relatif. On a choisit ici des conditions aux limites périodiques, ce qui revient à se placer sur un cercle de périmètre L, plutôt que sur un segment. On utilisera la densité linéique de ce système :

$$\rho^{(1D)} = N/L \ . \tag{8.8}$$

Nous allons être amenés à calculer des sommes du type :

$$\mathcal{F} = \sum_p F(p)$$

Rappelons que si $F(p)$ varie peu quand p passe de $j\ 2\pi\hbar/L$ à $(j+1)\ 2\pi\hbar/L$, ce qui est en général le cas quand la taille L tend vers l'infini (limite thermodynamique), on peut passer d'une somme discrète à une intégrale :

$$\mathcal{F} = \frac{L}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} F(p)\ dp$$

Écrivons la relation donnant le nombre total d'atomes N en fonction de la température et du potentiel chimique :

$$N = \sum_p n(p) = \frac{L}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} n(p)\ dp = \frac{L}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{z^{-1} e^{p^2/(2Mk_BT)} - 1} \tag{8.9}$$

Dans l'intégrale, on regroupe p et $-p$, on introduit la variable sans dimension $u = p\lambda_T/h$ et on trouve :

$$\rho^{(1D)} \lambda_T = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{z^{-1} e^{\pi u^2} - 1} \ . \tag{8.10}$$

La physique de ce système est donc entièrement déterminée par le paramètre sans dimension $\rho^{(1D)}\lambda_T$, qui caractérise la dégénérescence du système. Quand ce paramètre est petit, la distance moyenne entre particules est beaucoup plus grande que la longueur d'onde thermique ; les corrections liées à la statistique quantique sont négligeables et on s'attend à retrouver la statistique de Boltzmann classique. En revanche, dans le cas $\rho^{(1D)}\lambda_T \gg 1$, on s'attend à ce que le gaz soit dégénéré et que les corrections quantiques jouent un rôle essentiel. C'est à cette limite haute densité (à température donnée) – ou basse température (à densité donnée) – que nous allons maintenant nous intéresser.

2.2 La limite $\rho^{(1D)}\lambda_T \gg 1$

Plaçons-nous à température donnée. Cette limite haute densité (donc N grand) s'obtient en faisant tendre le potentiel chimique vers l'énergie du fondamental de $\hat{h}$, en l'occurrence 0. Faisons maintenant l'hypothèse que l'approximation (8.5) :

$$n(p) \simeq \frac{k_B T}{\frac{p^2}{2M} - \mu} \tag{8.11}$$

s'applique à tous les niveaux p peuplés de manière appréciable. Il faudra bien sûr vérifier à la fin de notre analyse la cohérence de cette approximation, c'est-à-dire montrer que $p_{\text{car.}}^2 \ll M k_B T$, où $p_{\text{car.}}$ est la largeur caractéristique de la distribution en impulsion. Posons $p_c^2 = -2M\mu$ (on rappelle que μ est négatif) pour récrire cette distribution en impulsion sous la forme :

$$n(p) = \frac{h^2}{\pi\lambda_T^2} \frac{1}{p^2 + p_c^2} \tag{8.12}$$

Le nombre total d'atomes s'obtient en sommant sur tous les p, soit :

$$N = \sum_p n(p) = \frac{L}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} n(p)\, dp \simeq \frac{L}{h} \frac{h^2}{\pi\lambda_T^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{p^2 + p_c^2} = \frac{L}{h} \frac{h^2}{\pi\lambda_T^2} \frac{\pi}{p_c} \tag{8.13}$$

soit

$$p_c = \frac{h}{\lambda_T} \frac{1}{\rho^{(1D)}\lambda_T}\ . \tag{8.14}$$

Cette relation détermine le potentiel chimique en fonction de la densité linéique et de la température.

Avant d'aller plus loin, il faut vérifier la cohérence de notre analyse. La condition de validité du traitement est que l'approximation (8.11) soit valable pour toutes les classes d'impulsion peuplées. Or, on vient de trouver une distribution lorentzienne de largeur p_c. Il faut donc que pour $p \sim p_c$, l'approximation (8.11) soit valable. Ceci entraîne :

$$\frac{p_c^2}{2Mk_BT} \ll 1 \qquad \Leftrightarrow \qquad p_c^2 \ll \frac{h^2}{\lambda_T^2} \qquad \Leftrightarrow \qquad \rho^{(1D)}\lambda_T \gg 1$$

Il suffit donc d'être dans le régime dégénéré pour que cette description du gaz soit valable. Notons que cette approximation lorentzienne pour la distribution en impulsion permet de calculer le potentiel chimique μ, mais ne peut pas être utilisée pour calculer certaines autres quantités, comme l'énergie cinétique moyenne par exemple. En effet, l'intégrale qu'on est alors amené à calculer fait intervenir $\int p^2\, n(p)\, dp$, qui diverge si on fait l'approximation d'une décroissance de $n(p)$ comme p^{-2} à l'infini.

On a tracé sur la figure 8.1 la distribution en impulsion calculée à partir de la formule de Bose-Einstein exacte pour une boîte de taille $L = 1000\,\lambda_T$. Les différentes courbes correspondent à un nombre de particules de 10^2, 10^3, 10^4 et 10^5. Pour les petits nombres de particules (10^2 et 10^3), la distribution est gaussienne (parabole en coordonnées semi-logarithmiques). On passe de la courbe correspondant à 100 particules à celle correspondant à 1000 particules par une simple loi d'échelle (multiplication de $n(p)$ par un facteur

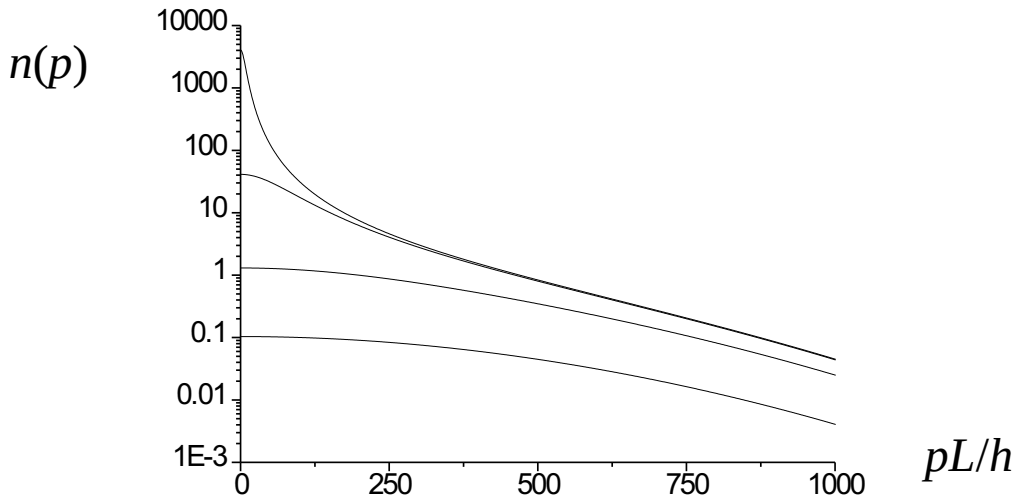

Fig. 8.1: Distribution en impulsion d'un gaz 1D confiné dans une boîte de longueur $L = 1000\,\lambda_T$. Le nombre N de particules vaut (de bas en haut) 10^2, 10^3, 10^4 et 10^5.

10, soit une translation en semi-log). Au dessus de 1000 particules, on rentre dans le domaine dégénéré. Les ailes de la distribution saturent alors, et la majorité des particules s'accumulent dans le pic central, correspondant à la distribution lorentzienne trouvée ci-dessus.

Cette prédiction d'une distribution en impulsion lorentzienne a récemment été vérifiée expérimentalement dans le groupe d'Optique Atomique, à l'Institut d'Optique d'Orsay. Les expériences ont été menées sur un nuage d'atomes de rubidium piégés dans un piège harmonique très fortement anisotrope (fréquence selon z 200 fois plus faible que la fréquence dans le plan xy). Le nombre d'atomes d'impulsion p_z donnée a été mesuré en envoyant sur le gaz atomique une paire d'ondes laser ayant des différences de vecteurs d'onde Δk_z et de fréquences $\Delta\omega$ bien contrôlées. Par un processus d'absorption dans une onde et d'émission stimulée dans l'autre onde, on extrait des atomes du nuage froid. Cette extraction devant satisfaire la condition de conservation de l'énergie et de l'impulsion, elle ne se produit que pour une classe d'impulsion p bien définie et on détermine ainsi $n(p)$.

2.3 Cohérence spatiale dans le cas dégénéré

Nous avons vu au chapitre 6 que la fonction caractérisant la cohérence spatiale

$$\mathcal{G}(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x + \frac{u}{2}|\rho_s|x - \frac{u}{2}\rangle \, dx \ ,$$

est simplement la transformée de Fourier de la distribution en impulsion :

$$\mathcal{G}(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} n(p) \, e^{ipu/\hbar} \, dp \ .$$

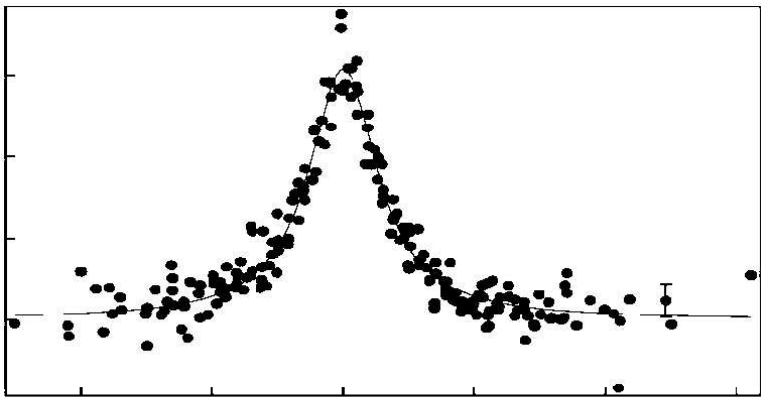

FIG. 8.2: Distribution en impulsion d'un gaz d'atomes de rubidium quasi-unidimensionnel. Figure extraite de S. Richard *et al*, Phys. Rev. Lett. **91**, 010405 (2003).

Pour un distribution en impulsion lorentzienne, on trouve donc une fonction de cohérence exponentielle :

$$\mathcal{G}(u) = \exp(-|u|/\ell_{\rm coh}) \qquad \text{avec} \qquad \ell_{\rm coh} = \frac{\hbar}{p_c} = \lambda_T \, \frac{n^{(1D)}\lambda_T}{2\pi} \tag{8.15}$$

C'est bien le résultat annoncé dans l'introduction. L'entrée dans le régime de dégénérescence quantique correspond à une augmentation spectaculaire de la longueur de cohérence, par rapport à la valeur $\ell_{\rm coh} \sim \lambda_T$ attendue dans le cadre de la statistique de Maxwell-Boltzmann (cf. (6.31)).

3 Gaz de Bose à 3 dimensions et condensation

3.1 Le phénomène de condensation

A trois dimensions, nous ne pouvons pas transposer la méthode que nous avons utilisée pour le gaz uni-dimensionnel. En effet, l'approximation (8.12) conduit immédiatement à un nombre d'atomes infini après intégration à 3 dimensions :

$$N = \sum_{p_x,p_y,p_z} n(\boldsymbol{p}) \stackrel{?}{=} \frac{L^3}{8\pi^3\hbar^3} \int n(\boldsymbol{p}) \, d^3p \stackrel{?}{\simeq} \frac{2}{\pi} \frac{L^3}{\hbar\lambda_T^2} \int_0^\infty \frac{p^2 \, dp}{p^2+p_c^2} = +\infty \tag{8.16}$$

Les deux égalités marquées par un point d'interrogation sont fausses. La seconde conduit à un infini clairement non physique : l'élément de volume à trois dimensions $p^2\,dp$ nous interdit de procéder à la même approximation lorentzienne qu'à 1D. La première égalité conduit également à une absurdité : même quand on prend pour le potentiel chimique la valeur maximale $\mu = 0$, on trouve en gardant la distribution de Bose-Einstein exacte (et pas son approximation lorentzienne) une valeur finie pour le nombre d'atomes :

$$\begin{aligned} N_{\rm max} &= \frac{L^3}{8\pi^3\hbar^3} \int n(\boldsymbol{p}) \, d^3p = \frac{L^3}{2\pi^2\hbar^3} \int \frac{p^2 \, dp}{\exp(p^2/(2Mk_BT)) - 1} \\ &= \frac{L^3}{\lambda_T^3} \, \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{u^2 \, du}{e^{u^2}-1} = \frac{L^3}{\lambda_T^3} \, \zeta(3/2) \end{aligned} \tag{8.17}$$

avec $\zeta(3/2) \simeq 2{,}612$. Ceci est en contradiction avec le résultat exact (8.6) et semble interdire de pouvoir mettre un nombre d'atomes arbitrairement élevé dans le système, la densité spatiale ne pouvant pas dépasser :

$$\rho^{(3D)}_{\max} = \frac{N_{\max}}{L^3} = \frac{\zeta(3/2)}{\lambda_T^3} \ .$$

La solution de ce problème est bien connue et elle figure dans tous les cours de base de physique statistique. A basse température, plus précisément pour

$$T < T_c \qquad \text{avec} \qquad \rho^{(3D)} \lambda^3_{T_c} = \zeta(3/2) \ , \tag{8.18}$$

il faut isoler dans la somme $\sum n(\boldsymbol{p})$ la contribution de l'état fondamental $\boldsymbol{p} = 0$. Cette contribution absorbe un nombre $N - N_{\max}$ de particules. La population des autres niveaux peut être traitée de manière continue comme en (8.17) en prenant $\mu = 0$. Pour ces autres niveaux, la largeur de la distribution en impulsion correspond à $p^2/(2Mk_BT) \sim 1$, c'est-à-dire $p \sim \hbar/\lambda_T$. On trouve donc, pour une densité dans l'espace des phases $\rho^{(3D)}\lambda_T^3$ supérieure au seuil de condensation :

$$N = n(0) + \frac{L^3}{8\pi^3\hbar^3} \int n(\boldsymbol{p}) \, d^3p = n(0) + \frac{L^3}{\lambda_T^3} \, \zeta(3/2) \ . \tag{8.19}$$

On peut réécrire ce résultat pour exprimer la fraction d'atomes condensés $n(0)/N$ sous la forme :

$$T < T_c \ : \qquad \frac{n(0)}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \ . \tag{8.20}$$

3.2 Cohérence spatiale d'un gaz condensé

Pour calculer la fonction de cohérence spatiale $\mathcal{G}(u)$, on doit prendre la transformée de Fourier de $n(p)$. A la limite continue, la distribution $n(\boldsymbol{p})$ est une somme de deux composantes : la contribution de la population de l'état $\boldsymbol{p} = 0$ correspond à une distribution de Dirac $\delta(\boldsymbol{p})$, la population des autres niveaux formant une fonction régulière de largeur $\hbar/\lambda_T$.

La transformée de Fourier $\mathcal{G}(u)$ va donc avoir elle aussi deux composantes (cf. figure 8.3) :

- Un fond constant correspondant à la transformée de Fourier de la distribution de Dirac. Ce fond constant correspond à une longueur de cohérence infinie pour le système.
- Une composante maximale en $u = 0$ et tombant à 0 quand u devient de l'ordre de λ_T.

Pour un condensat à température nulle, toute la population se concentre dans l'état $\boldsymbol{p} = 0$ et seul subsiste le fond constant pour $\mathcal{G}(u)$. Ceci est important pour les applications pratiques car on peut ainsi former des sources d'onde de matière complètement cohérentes, dont les propriétés sont similaires à celles d'un faisceau laser. Toutefois, d'un point de vue plus fondamental, ceci n'est pas l'aspect le plus spectaculaire de la condensation de

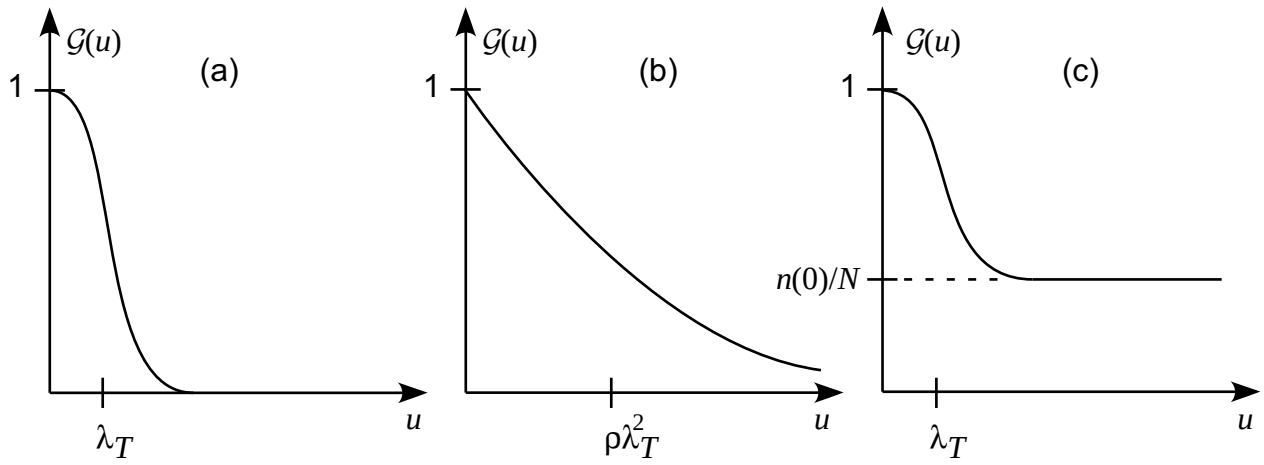

FIG. 8.3: Fonction de corrélation spatiale $\mathcal{G}(u)$: (a) pour une particule en contact avec un thermostat à température T ; (b) pour un gaz parfait de bosons 1D ; (c) pour un gaz parfait de bosons 3D. Dans ce dernier cas, le plateau s'étendant jusqu'à $u = \infty$ est la signature de la présence du condensat.

Bose-Einstein. En effet, à température nulle, même la distribution de Maxwell-Boltzmann conduit à une longueur de cohérence infinie puisque $\lambda_T \to \infty$. Sur le plan fondamental, le point vraiment remarquable est d'avoir une longueur de cohérence infinie dès que la température est dessous du seuil de condensation. Sur ce point, la comparaison avec le gaz 1D traité dans le paragraphe précédent est particulièrement instructive.

3.3 Densité d'états

Pour expliquer la différence de comportements entre un système 1D et un système 3D, il est utile de considérer la répartition typique des premiers niveaux d'énergie de l'hamiltonien à un corps. Cette distribution est représentée sur la figure 8.4. Dans le cas 1D, on voit que les niveaux sont très nombreux au voisinage de l'énergie nulle (la densité d'états varie comme $E^{-1/2}$). On peut donc répartir les N particules du gaz de manière régulière sur ces premiers niveaux, avec la distribution lorentzienne trouvée plus haut. Dans le cas 3D, la densité d'état varie comme $E^{1/2}$ et s'annule donc en 0. On voit clairement sur la figure 8.4b que l'écart entre les premiers niveaux est relativement grand, puis se réduit au fur et à mesure où on monte en énergie. On comprend donc l'origine de la singularité en $\boldsymbol{p} = 0$ dans la répartition entre populations $n(\boldsymbol{p})$.

4 Interférences de condensats

Considérons maintenant deux condensats de Bose-Einstein purs, notés a et b, contenant chacun N atomes, et posons-nous la question suivante : y a-t-il cohérence entre les deux condensats ?

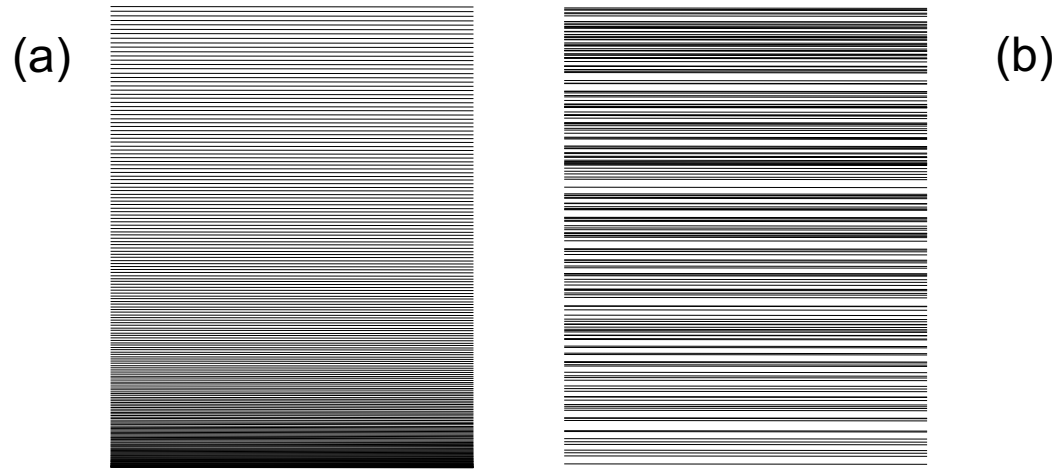

Fig. 8.4: Les 200 premiers niveaux d'énergie (a) dans un piège 1D (b) dans une boîte 3D parallélipédique dont les côtés sont dans les rapports $1 : 2^{1/4} : 3^{1/4}$ (on prend des rapports non rationnels pour éviter les dégénérescences).

4.1 L'expérience du MIT

La première réponse expérimentale à cette question a été apportée par une expérience menée au MIT[2]. En éclairant le centre du piège magnétique confinant le condensat par une nappe de lumière (figure 8.5a), on peut réaliser un double puits de potentiel. La nappe lumineuse joue le rôle d'une barrière répulsive, qui empêche en pratique tout passage d'atomes condensés entre la partie gauche et la partie droite. On prépare par évaporation un condensat dans chacune de ces deux régions, puis on coupe le potentiel magnétique, ainsi que la barrière lumineuse. Les deux condensats s'étalent, se recouvrent, et on prend une photo de la distribution spatiale des atomes (fig. 8.5b). Cette distribution présente des franges d'interférence avec un fort contraste (70 %), ce qui prouve la cohérence relative des sources atomiques constituées par chacun des deux condensats.

Nous ne mènerons pas ici la modélisation quantitative de cette expérience, qui est un peu lourde à mettre en place. Indiquons simplement les grandes lignes : on décrit chacun des deux condensats par un champ d'onde de matière classique, comme on le fait en optique pour un faisceau lumineux monochromatique. L'évolution de ces deux ondes de matière lors de l'étalement qui suit la coupure du piège est donnée par l'équation de Schrödinger, qui remplace ici les équations de Maxwell décrivant la propagation des faisceaux lumineux. La répartition spatiale des atomes à l'instant de la photo 8.5b s'obtient en additionnant les amplitudes des deux ondes, ce qui permet d'expliquer la figure d'interférence obtenue. Notons toutefois qu'on ne peut pas prévoir *a priori* la position de la frange brillante centrale. Celle-ci dépend de la phase relative initiale entre les deux condensats, qui fluctue d'une réalisation de l'expérience à une autre : si l'on refait plusieurs fois cette expérience, on obtiendra pour chaque réalisation un profil d'interférence semblable à celui de la figure 8.5b, mais son système de franges sera décalé aléatoirement ; la moyenne de toutes ces figures d'interférence conduira ainsi à une distribution atomique uniforme.

[2]M.R. Andrews *et al.*, Science **275**, 637 (1997).

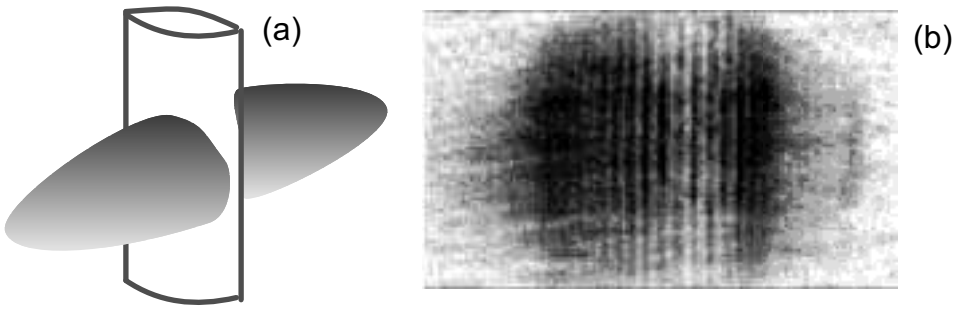

FIG. 8.5: (a) On réalise un double puits de potentiel en disposant au centre du piège magnétique un faisceau lumineux, de fréquence supérieure à la fréquence de résonance atomique. Ce faisceau crée une barrière de potentiel, qui permet d'obtenir après évaporation deux condensats indépendants. (b) Lorsqu'on coupe le piège magnétique et la barrière lumineuse, chaque condensat s'étale. Dans la zone de recouvrement entre les deux condensats, on observe une figure d'interférence d'ondes de matière, avec un contraste élevé.

4.2 Interférence entre deux lasers (à atomes ou à photons)

Une expérience plus simple à modéliser que la précédente consiste à extraire de chaque condensat un petit filet d'atomes, similaire au laser à atomes présenté au chapitre 1 de ce cours. On peut mélanger les deux jets atomiques sur une lame séparatrice et tester ainsi leur cohérence, en mesurant si leur phase relative est bien définie (figure 8.6). Le même problème peut se transposer à des photons, contenus dans deux cavités identiques. Si nous supposons que chaque cavité contient initialement N photons dans un mode donné, quel signal d'interférence s'attend-on à trouver quand on fait battre les deux faisceaux sortant des cavités ? Nous travaillerons dans ce qui suit avec des photons, pour lesquels nous disposons d'outils mathématiques commodes, les opérateurs création et destruction[3].

Si le champ de chaque cavité est dans un état cohérent, les faisceaux sont décrits par les deux champs classiques $|\psi_0|e^{i\phi_g}$ and $|\psi_0|e^{i\phi_d}$. Les intensités dans les deux voies de sortie du séparateur sont alors :

$$I_+ = 2|\psi_0|^2 \cos^2\phi \qquad\qquad I_- = 2|\psi_0|^2 \sin^2\phi \ , \tag{8.21}$$

où $\phi = (\phi_g - \phi_d)/2$. Du rapport I_+/I_-, on déduit la valeur de la phase relative $2|\phi|$. Notons que ϕ est une variable aléatoire, qui prend une valeur différente pour chaque réalisation de l'expérience.

Supposons que $k \ll N$ photons sont détectés sur $D_\pm$, et intéressons nous pour simplifier au cas où toutes les détections se font sur le canal (+). La probabilité pour une telle séquence est $(\cos^2\phi)^k$, ce qui donne après moyenne sur la phase inconnue ϕ :

$$W_k = \frac{1}{\pi}\int_0^\pi \cos^{2k}(\phi)\ d\phi = \frac{(2k-1)(2k-3)\ldots}{(2k)(2k-2)\ldots} \sim_{k\gg 1} \frac{1}{\sqrt{\pi k}} \ . \tag{8.22}$$

Pour $k = 100$, cette probabilité est $\sim 6\%$.

[3]Des opérateurs création et annihilation peuvent également être introduits pour décrire un système de particules matérielles identiques. C'est le formalisme de la *seconde quantification*.

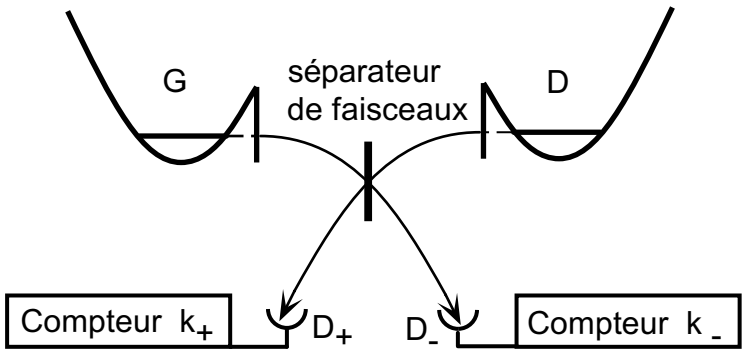

Fig. 8.6: Expérience de pensée pour étudier l'interférence entre deux lasers (à photons ou à atomes).

Tournons-nous maintenant vers la description du système en termes d'états de Fock. Supposons que le système est initialement dans l'état $|N_g, N_d\rangle$ avec $N_g = N_d = N$. On pourrait s'attendre intuitivement à ce que la phase relative soit « brouillée », puisque les quantités *nombre de particules* et *phase* sont souvent décrites comme complémentaires. Deux systèmes à nombres de particules bien déterminés devraient alors apparaître comme non cohérents vis à vis l'un de l'autre. Ce raisonnement intuitif (mais faux !) pourrait de plus être complété par l'argument naïf suivant : puisque $k \ll N$, la probabilité de détecter le $n^{\text{ième}}$ photon ($n \leq k$) dans le canal (+) est pratiquement indépendante des $n-1$ résultats précédents. La probabilité pour k détections dans le canal (+) devrait donc être 2^{-k}. Ceci est clairement très différent du W_k obtenu pour un état cohérent ($2^{-k} < 10^{-30}$ pour $k = 100$).

Comme nous l'avons dit, ce raisonnement « intuitif » est faux. Plus précisément, on peut montrer que les prédictions pour l'état $|N, N\rangle$ sont identiques à (8.21) si $N \gg 1$. Le principe du raisonnement correct est le suivant. La première détection d'un photon dans le canal (+) projette l'état du champ dans un état proportionnel à

$$(\hat{g} + \hat{d})|N, N\rangle \propto |\Psi\rangle = |N, N-1\rangle + |N-1, N\rangle \ ,$$

où $\hat{g}$ and $\hat{d}$ annihilent un photon dans les cavités de gauche et de droite respectivement. Pour calculer la probabilité de détecter un deuxième photon dans le canal (+), on doit comparer le carré de la norme des deux vecteurs correspondant à une détection dans les canaux ($\pm$) :

$$\begin{aligned}(+) : (\hat{g} + \hat{d})|\Psi\rangle &= \sqrt{N-1}(|N-2, N\rangle + |N, N-2\rangle) + 2\sqrt{N}|N-1, N-1\rangle \\ (-) : (\hat{g} - \hat{d})|\Psi\rangle &= \sqrt{N-1}(|N-2, N\rangle - |N, N-2\rangle)\end{aligned}$$

Pour $N \gg 1$, les carrés des normes de ces deux vecteurs sont dans un rapport 3 :1. Ceci indique qu'une fois qu'un premier photon a été détecté dans le canal (+), la probabilité pour que le deuxième photon soit détecté également dans ce canal est 3/4, alors que la probabilité pour que le deuxième photon soit détecté dans le canal ($-$) est seulement 1/4. Ce résultat contre-intuitif montre que les détections successives sont fortement corrélées dans le cas d'un état de Fock, même si le nombre de photons détectés sont très petits par

rapport au nombre des photons présents dans les cavités. Le raisonnement peut s'étendre à k détections et on trouve que la probabilité pour détecter respectivement $k_+ = k$ et $k_- = 0$ atomes dans les deux canaux est :

$$\mathcal{P}(k,0) = \frac{1}{2}\frac{3}{4}\cdots\frac{2k-1}{2k} \tag{8.23}$$

ce qui est égal à W_k pour tout k. Les prédictions pour un état initial de Fock et pour un état cohérent sont donc identiques, mais le résultat pour un état cohérent s'obtient de manière beaucoup plus intuitive et directe que pour un état de Fock. Cette identité des prédictions des deux points de vue s'étend[4] à tout résultat de mesure $\mathcal{P}(k_+, k_-)$.

Il y a donc « cohérence totale » entre deux condensats (ou deux lasers parfaitement monochromatiques), même s'ils n'ont jamais été au contact l'un de l'autre. Toutefois, la valeur de la phase relative est aléatoire et fluctue d'une réalisation à l'autre de l'expérience. On dispose de deux points de vue équivalents sur ces systèmes de photons ou de condensats de Bose-Einstein. Dans le cadre d'une description en terme d'états cohérents, la mesure révèle la phase pré-existante via la relation $\tan^2\phi = k_-/k_+$. Dans le cadre d'une description en termes d'états de Fock, la séquence de détection « construit » la valeur de la phase.

Prolongements

1. Pour un système de taille finie, montrer qu'à température fixée et pour un nombre suffisant de particules, il y a toujours accumulation des particules dans le niveau d'énergie fondamental de la boîte confinant les particules. On pourra introduire

$$N' = \sum_{\alpha}{}' (e^{(\epsilon_\alpha - \epsilon_0)/k_B T} - 1)^{-1}$$

   où le ' indique que la somme porte sur tous les niveaux excepté le niveau fondamental d'énergie ϵ_0. On supposera que cette somme converge.

2. En utilisant le résultat de l'exercice précédent, montrer que la condensation dans un piège harmonique isotrope de pulsation ω se produit quand le nombre de particules N est de l'ordre de $(k_B T / \hbar\omega)^d$, où $d \geq 2$ est la dimension du problème. Comment ce résultat est-il modifié pour un oscillateur uni-dimensionnel ?

3. On se donne une boîte 1D de longueur L et on augmente N à température fixée. A partir de quelle valeur de N la population du niveau fondamental devient-elle significativement différente de celle du premier niveau excité ? On fera une application numérique pour les paramètres de la figure (8.1). Comment ce résultat se concilie-t-il avec l'absence de condensat de Bose-Einstein à 1D dans la limite thermodynamique ?

[4] voir par exemple Y. Castin and J. Dalibard, Phys. Rev. A **55**, 4330 (1997).