

Étude du couplage de petits systèmes quantiques avec leur environnement: fluctuations et décohérence à basse température

Alexandre Ratchov

► **To cite this version:**

Alexandre Ratchov. Étude du couplage de petits systèmes quantiques avec leur environnement: fluctuations et décohérence à basse température. Matière Condensée [cond-mat]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2005. Français. tel-00010840

HAL Id: tel-00010840

<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00010840>

Submitted on 31 Oct 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

pour obtenir le titre de docteur de
l'Université Joseph Fourier - Grenoble I

SPÉCIALITÉ : PHYSIQUE

Étude du couplage de petits systèmes quantiques avec leur environnement :
fluctuations et décohérence à basse température.

Composition du jury :

| | |
|------------------|-----------------------|
| A. Joye | président |
| M. Büttiker | rapporteur |
| T. Martin | rapporteur |
| F. W. J. Hekking | directeur de thèse |
| F. Faure | co-directeur de thèse |

Alexandre Ratchov

20 juillet 2005

À mes parents. . .

Je remercie F. Faure et F. Hekking de m'avoir encadré pendant ces trois années de thèse, de ce qu'ils m'ont appris et de toutes les discussions intéressantes et enrichissantes que l'on a eues. J'ai vraiment apprécié leurs qualités relationnelles et pédagogiques. J'ai eu beaucoup de plaisir à discuter avec M. Büttiker, je lui suis reconnaissant d'avoir accepté de relire ce document, pour les suggestions qu'il m'a faites et pour les questions intéressantes qu'il m'a posés. Je remercie Thierry Martin d'avoir relu et commenté mon manuscrit de thèse et d'avoir accepté de faire partie de mon jury. Je remercie Alain Joye d'avoir présidé le jury mais aussi pour son regard "mathématique" sur ce travail et pour la relecture (très) minutieuse du présent document. Je suis très reconnaissant à tous les membres du laboratoire pour leur accueil et plus particulièrement Guillaume et Raffaello pour leur soutien quotidien. Je remercie également tous les enseignants qui m'ont donné goût pour la physique et plus spécialement J.-P. Munch, C. Gignoux, F. Faure.

Je remercie du fond du cœur tous mes amis et toutes celles et ceux qui m'ont quotidiennement soutenu tout au long de ma thèse.

Table des matières

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Dissipation et fluctuations dans un système classique | 5 |
| 1.1 | Modèle de Lamb | 6 |
| 1.1.1 | Couplage et contraintes | 7 |
| 1.1.2 | Équation du mouvement classique | 7 |
| 1.1.3 | Interprétation | 9 |
| 1.1.4 | Translation en position | 9 |
| 1.2 | Modèle des oscillateurs indépendants [24, 22] | 10 |
| 1.2.1 | Équation du mouvement | 10 |
| 1.2.2 | Passage à la limite continue | 11 |
| 1.2.3 | Remarques diverses | 13 |
| 1.3 | Fluctuations statistiques | 14 |
| 2 | Généralités sur la décohérence | 17 |
| 2.1 | Discussion physique | 17 |
| 2.2 | Description des systèmes quantiques | 17 |
| 3 | Décohérence à l'équilibre thermique | 21 |
| 3.1 | Introduction | 21 |
| 3.1.1 | Modèle | 22 |
| 3.1.2 | Quantification | 22 |
| 3.1.3 | État d'équilibre | 23 |
| 3.2 | Méthode de la résolvante | 23 |
| 3.2.1 | Décomposition en modes normaux | 23 |
| 3.2.2 | Résolvante réduite [9] | 25 |
| 3.2.3 | Passage à la limite continue | 27 |
| 3.2.4 | Fluctuation de la position et de l'impulsion de la particule | 27 |
| 3.3 | Opérateur densité réduit | 29 |
| 3.3.1 | Interprétation physique – exemple | 30 |
| 3.3.2 | Entropie partielle | 32 |
| 3.4 | Conclusion | 34 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 4 | Décohérence dans l'évolution en temps | 35 |
| 4.1 | Introduction | 35 |
| 4.1.1 | Représentation de Heisenberg | 35 |
| 4.1.2 | Évolution dans le temps | 36 |
| 4.2 | Résolvante réduite | 37 |
| 4.2.1 | Définition, notations | 37 |
| 4.2.2 | Exemple (cas ohmique) | 38 |
| 4.2.3 | Prolongement analytique de la résolvante réduite | 39 |
| 4.2.4 | Pôles de la résolvante réduite | 40 |
| 4.3 | Application à la trajectoire $\hat{q}(t)$ | 40 |
| 4.3.1 | Exemple (cas ohmique) | 41 |
| 4.3.2 | Allure de $k(t)$ dans la limite continue | 41 |
| 4.4 | Application à $\langle q^2 \rangle(t)$, $\langle p^2 \rangle(t)$ et $\langle qp + pq \rangle(t)$ | 42 |
| 4.4.1 | Hypothèses – état initial | 42 |
| 4.4.2 | Calcul de $\langle q^2 \rangle(t)$ | 44 |
| 4.4.3 | Limite continue | 45 |
| 4.4.4 | Limite $t \rightarrow \infty$ | 45 |
| 4.4.5 | Exemple (environnement ohmique) | 46 |
| 4.5 | Évolution de l'état de la particule | 46 |
| 4.5.1 | Opérateur de Weyl | 46 |
| 4.5.2 | Évolution de l'opérateur densité réduit | 47 |
| 4.5.3 | Évolution de l'entropie de la particule | 48 |
| 4.6 | Conclusion | 50 |
| 5 | Application à l'électricité | 51 |
| 5.1 | Introduction | 51 |
| 5.2 | Coordonnées — variables flux | 51 |
| 5.2.1 | Lagrangien d'un condensateur | 52 |
| 5.2.2 | Lagrangien d'une bobine | 52 |
| 5.2.3 | Rôle des fils | 53 |
| 5.2.4 | Recherche des variables indépendantes | 54 |
| 5.3 | Hamiltonien d'un circuit | 55 |
| 5.3.1 | Variables tension–courant | 55 |
| 5.4 | Circuit contenant une résistance | 56 |
| 5.4.1 | Loi d'Ohm | 57 |
| 5.4.2 | Bruit dans une résistance | 58 |
| 5.5 | Circuits quantiques | 59 |
| 5.5.1 | Remarque sur le bruit dans une résistance [15] | 59 |
| 5.6 | Conclusion | 60 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 6 | Particule chargée dans un circuit RC | 61 |
| 6.1 | Introduction | 61 |
| 6.1.1 | Le modèle | 61 |
| 6.1.2 | Objectif | 63 |
| 6.2 | Diagonalisation de $H_{\text{circ}} + H_{\text{int}}$ | 64 |
| 6.2.1 | Mise en forme de $H_{\text{circ}} + H_{\text{int}}$ | 65 |
| 6.2.2 | Discussion | 66 |
| 6.2.3 | Conclusion | 67 |
| 7 | Proposition d'un dispositif pour observer la décohérence | 69 |
| 7.1 | Description du dispositif | 70 |
| 7.2 | Couplage transversal avec l'environnement | 71 |
| 7.3 | Figures d'interférences | 73 |
| 8 | Dynamique quantique d'un SQUID-DC | 77 |
| 8.1 | Le modèle | 77 |
| 8.2 | Étude numérique | 79 |
| 8.2.1 | Spectre de H_0 | 79 |
| 8.2.2 | Balayage en fréquence | 80 |
| 8.2.3 | Balayage en amplitude à la résonance "plasma" | 83 |
| 8.2.4 | Conclusion de l'étude numérique | 83 |
| 8.3 | Étude classique | 85 |
| 8.3.1 | Prise en compte de l'excitation | 88 |
| 8.3.2 | Étude du point d'équilibre | 89 |
| 8.3.3 | Petits écarts à l'équilibre | 89 |
| 8.3.4 | Discussion | 90 |
| 8.4 | Étude quantique dans la limite $a \rightarrow 0$ | 90 |
| 8.5 | Discussion | 92 |
| A | Remarque sur le théorème fluctuation–dissipation | 97 |
| A.1 | Énoncé du théorème fluctuation–dissipation | 97 |
| A.1.1 | Notations et situation physique | 97 |
| A.1.2 | Définition de la réponse impulsionnelle | 97 |
| A.1.3 | Définition de la fonction de transfert | 98 |
| A.1.4 | Énoncé de la formule de Kubo | 98 |
| A.1.5 | Énoncé du théorème fluctuation–dissipation | 98 |
| A.2 | L'oscillateur amorti avec le théorème fluctuation–dissipation | 99 |
| A.2.1 | Discussion | 100 |
| B | Couplage entre z et q | 101 |
| B.1 | Hamiltonien | 101 |
| B.2 | Équations du mouvement | 101 |

| | | |
|----------|--|------------|
| B.3 | Discussion physique | 102 |
| B.4 | Diffusion | 102 |
| B.5 | Condition pour ne pas avoir de réflexion | 103 |
| C | Transmission entre le guide d'ondes et les sondes | 105 |
| C.1 | Coefficients de diffusion | 105 |
| C.2 | Franges d'interférence | 107 |

Introduction

L'interaction entre un petit système quantique et son environnement a été étudiée depuis les débuts de la mécanique quantique. En théorie de la mesure [11, 12] le rôle de l'environnement permet de comprendre le passage du quantique au classique et apporte des éléments de réponse à la question "*Pourquoi n'observe-t-on pas de chats de Schrödinger dans la nature ?*". Un autre exemple important d'interaction entre un système quantique et son environnement est donné par l'électrodynamique quantique : un atome seul dans le vide est en interaction avec le champ électromagnétique. Même lorsque ce dernier tend à être dans son état fondamental ("le vide quantique"), l'atome subit son influence : on peut citer le Lamb-shift [2, 29], découvert les années quarante. Celui-ci est la conséquence directe des fluctuations de point zéro de l'ensemble atome plus champ. Les dix dernières années, en particulier depuis les travaux de P. Shor sur les algorithmes quantiques de décomposition des nombres entiers en facteurs premiers [43], la recherche dans le domaine de l'information quantique eu regain d'intérêt. Mais, en pratique, l'interaction des dispositifs quantiques avec l'environnement induit de la décohérence ; celle-ci est un obstacle majeur à la faisabilité d'ordinateurs quantiques [42]. Depuis la découverte des phénomènes mésoscopiques dans les solides [50] nous savons que les propriétés de transport dans les métaux sont influencés par les effets d'interférences que produisent les électrons. Citons les phénomènes de localisation faible et la fluctuation de conductance universelle dans les milieux désordonnés. Cependant, le comportement quantique d'un électron peut être fortement influencé par son environnement (par exemple les autres électrons et les phonons). Les effets d'interférences sont atténués par l'interaction entre la particule et l'environnement [23], on parle dans ce cas de décohérence.

Dans ce contexte, la question de ce qu'il se passe à basse température a été discutée et débattue récemment : initialement, des mesures expérimentales réalisés par P. Mohanty *et al.* ont suggéré l'existence d'une décohérence résiduelle à basse température dans les métaux [51], en contradiction avec des résultats théoriques de B. Altshuler *et al* [45] ; des développements théoriques discutant de la décohérence induite par les interactions coulombiennes dans les milieux désordonnés ont suivi [46, 47]. Mais ce débat a mené à la question plus générale : "*Est-ce qu'un environnement à température nulle peut induire de la décohérence*". Récemment ce problème a été discuté par Büttiker *et al.* [17, 19] dans le cadre du modèle d'un oscillateur harmonique ("la particule") couplé à une chaîne d'oscillateurs harmoniques ("l'environnement"). Il a été montré que la particule échange de l'énergie avec l'environnement même à température nulle. Cet effet ne peut pas être pris en compte par

une renormalisation des paramètres de la particule ; il traduit l'intrication entre celle-ci et l'environnement dans l'état fondamental de l'ensemble. Ce phénomène a des conséquences mesurables, par exemple citons la suppression des courants permanents dans les anneaux mésoscopiques supra-conducteurs [49, 20].

Dans la continuation de ces recherches, on s'intéresse dans cette thèse, à l'influence de l'environnement sur un petit système mésoscopique à basse température. En particulier, on étudie les effets de l'environnement sur les phénomènes d'interférence dans la limite où l'énergie de couplage environnement-particule est grande devant l'énergie thermique. Tout au long de ce document, nous allons considérer la particule comme sous-partie de l'ensemble particule-environnement. Nous allons calculer son opérateur densité réduit en prenant la trace sur les degrés de liberté de l'environnement. Ensuite, nous proposerons l'esquisse d'un dispositif expérimental montrant la saturation de la longueur de cohérence de la particule à la limite où la température tend vers zéro. La longueur de cohérence est mesurée dans un interféromètre de type Aharonov-Bohm.

Ce travail est organisé comme suit. Tout d'abord dans le chapitre 1, nous allons introduire, dans le cadre de la mécanique classique, le modèle bien connu [24, 15, 22] pour l'environnement que nous allons utiliser dans la suite : un oscillateur harmonique couplé à un bain d'oscillateurs harmoniques. Nous allons justifier le choix du modèle dans la mesure où, d'une part, il reproduit les effets classiques attendus d'un "bon" environnement (dissipation, fluctuations) et d'autre part il donne à l'environnement un cadre hamiltonien, nécessaire au passage à la mécanique quantique.

Ensuite, après une brève discussion qualitative sur la décohérence (chapitre 2), nous allons étudier, dans le chapitre 3, l'état d'équilibre à température T de l'ensemble particule et environnement, en particulier dans la limite $T \rightarrow 0$ (état fondamental de l'ensemble). Cette étude nous permettra d'introduire la méthode de la résolvante réduite qui nous servira dans la suite ; elle nous permettra de calculer et de discuter sous un nouvel angle l'opérateur densité réduit de la particule, déjà obtenu par d'autres méthodes [25, 24, 17]. À température nulle, dans l'état fondamental de l'ensemble, la particule est intriquée avec l'environnement ; il en résulte une entropie non-nulle de l'opérateur densité réduit de cette dernière ; elle s'interprète en termes d'effets thermiques effectifs induits par l'environnement. Ensuite dans le chapitre 4, nous allons réutiliser la méthode de la résolvante réduite pour discuter la convergence vers l'équilibre au cours du temps.

Dans le chapitre 5 nous allons transposer les résultats précédents aux circuits électriques quantiques, puis (chapitre 6) nous allons voir comment coupler capacitivement un système mécanique (un oscillateur harmonique) à un environnement électrique (une résistance). Enfin, sur base des discussions qui l'ont précédés, dans le chapitre 7 nous allons proposer l'esquisse d'un dispositif expérimental illustrant les discussions générales des chapitres précédents et mettant en évidence la saturation de la longueur de cohérence de la particule à basse température.

En parallèle à ce travail théorique sur la décohérence, dans le cadre de notre collaboration avec l'équipe expérimentale d'Olivier Buisson du CRTBT, nous avons étudié la dynamique d'un SQUID-DC, potentiel candidat à la réalisation d'un bit quantique. Dans le chapitre 8 nous avons dégagé une "signature quantique" permettant de mieux situer le

régime du circuit étudié expérimentalement et de discuter le comportement du SQUID en termes d'oscillations de Rabi.

Chapitre 1

Dissipation et fluctuations dans un système classique

Souvent, en mécanique, pour tenir compte de l'interaction d'une particule avec son environnement, on utilise l'équation de Langevin, ci-dessous. Par exemple, on peut penser à un pendule qui oscille dans un fluide visqueux subissant une force de friction de la part de celui-ci ; ou bien à une particule "brownienne" dans un fluide subissant en plus de la force de friction une force aléatoire liée à l'agitation thermique de ce dernier. Dans les deux cas il s'agit d'un système ayant peu de degrés de liberté (pendule, particule brownienne) couplé à un environnement ayant un très grand nombre de degrés de liberté (le fluide). C'est l'idée d'environnement que nous allons adopter dans la suite de ce document. Concrètement, pour une particule de masse m , de position et impulsion q et p , soumise à un potentiel $V(q)$, on écrit :

$$\begin{aligned}\dot{q} &= \frac{p}{m} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial V}{\partial q} \underbrace{-\eta\dot{q} + F(t)}_{\text{environnement}}\end{aligned}\tag{1.1}$$

Par rapport à l'équation d'une particule libre, l'équation de Langevin comporte deux termes supplémentaires traduisant l'effet de l'environnement sur la particule. Le premier est une force de friction visqueuse $-\eta\dot{q}$, η constante. Le second terme $F(t)$ est une force stochastique qui traduit l'effet de l'agitation thermique de l'environnement sur la particule. Il n'existe pas d'hamiltonien $H(q, p)$, agissant uniquement sur la particule, duquel on puisse dériver les forces modélisant l'effet de l'environnement. En effet la dynamique d'un système hamiltonien conserve le volume dans l'espace de phase alors qu'une équation dissipative ne le conserve pas. Dans la suite, nous allons chercher à écrire l'hamiltonien pour l'ensemble environnement et particule en choisissant un modèle qui puisse reproduire l'équation de Langevin.

L'équation ci-dessus est dite *sans mémoire* parce que l'évolution à un instant est définie par l'état dynamique à ce même instant. On rencontre aussi l'équation de Langevin avec

mémoire :

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{p}{m} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial V}{\partial q} - \underbrace{\int_0^t \Gamma(\tau) \dot{q}(t-\tau) d\tau}_{\text{environnement}} + F(t) \end{aligned} \quad (1.2)$$

Elle est plus générale, l'équation sans mémoire correspond au cas particulier où $\Gamma(\tau) = \eta\delta(\tau)$ où $\delta(\tau)$ est la distribution de Dirac dans \mathcal{D}'^+ (c'est à dire ayant comme support \mathbf{R}^+ , cf. par exemple le livre de R. Petit [1]).

Dans ce chapitre introductif, nous allons étudier dans le cadre d'une approche classique deux modèles équivalents : le modèle de Lamb et le modèle des oscillateurs indépendants (modèle de Caldeira–Leggett [22]). Dans les deux cas, nous allons considérer l'ensemble particule plus environnement comme un système hamiltonien fermé et nous allons déterminer l'équation d'évolution réduite *exacte* de la particule seulement. Nous allons voir que ces modèles reproduisent l'équation de Langevin ci-dessus. Notre exposé est basé sur l'approche dans les travaux de G. Ford, [15].

1.1 Modèle de Lamb

Le modèle de Lamb (introduit par Lamb en 1900) permet de retrouver l'équation de Langevin de façon très intuitive. Il nous permettra aussi d'illustrer de façon visuelle les phénomènes de dissipation et de fluctuations. Le modèle de Lamb a été discuté par G. Ford [15], ici, nous allons suivre une approche similaire pour l'obtention de l'équation de Langevin.

Dans ce modèle, on considère une particule à un degré de liberté accrochée à une chaîne d'oscillateurs harmoniques couplés entre plus proches voisins (un corde vibrante). On s'intéresse à l'effet de la corde sur la particule, plus particulièrement on cherche à identifier un comportement dissipatif. En effet, on imagine que si initialement la particule est en mouvement, elle va communiquer progressivement son énergie à la corde vibrante, cette dernière va l'évacuer à l'infini. L'énergie de la particule ne lui sera jamais restituée : ainsi elle semble subir de la dissipation.

On considère un point (la particule) de position et impulsion q et p réelles, de masse m et soumis à un potentiel extérieur $V(q)$. Son hamiltonien est :

$$H_{\text{part}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (1.3)$$

Elle est couplée à une corde vibrante infinie tendue selon un axe et paramétrée par la variable réelle x (cf. fig. 1.1). Elle est de masse linéique μ et de vitesse de propagation naturelle c . Elle est décrite par son élongation $\varphi(x, t)$ et sa densité d'impulsion $\pi(x, t)$. Sa fonction (fonctionnelle) de Hamilton est :

$$H_{\text{corde}} \stackrel{\text{def}}{=} \int \left[\frac{\pi^2}{2\mu} + \frac{\mu c^2}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 \right] dx \quad (1.4)$$

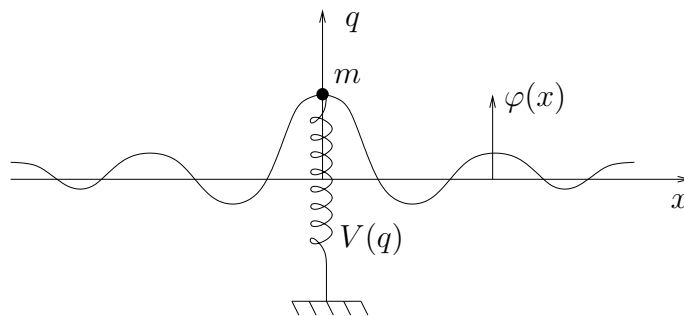


FIG. 1.1 – Une particule couplée à une corde vibrante.

L'intégrale porte sur toute la corde, c'est à dire $x \in]-\infty, +\infty[$. Dans la suite lors des sommes sur x (et plus loin sur k) les bornes d'intégration seront sous-entendues, comme ci-dessus. Nous allons montrer que ce modèle reproduit l'équation du mouvement suivante :

$$m\ddot{q} = -\frac{\partial V}{\partial q} - \eta\dot{q} + F(t) \quad (1.5)$$

où $\eta = 2\mu c$ ne dépend que des paramètres statiques μ et c de la corde et $F(t)$ est liée à son état initial aux points $x = \pm ct$.

1.1.1 Couplage et contraintes

Dans ce modèle, on n'introduit pas de terme de couplage dans l'hamiltonien de l'ensemble. Ce dernier est simplement la somme des hamiltoniens de la particule et de la corde. L'interaction sera traduite par la contrainte [40, 39] que la particule soit solidaire à l'origine de la corde (point $x = 0$). Formellement, on écrit cette contrainte :

$$f(q, \varphi) \stackrel{\text{def}}{=} q - \varphi(0) = 0 \quad (1.6)$$

Pour un usage ultérieur, on met la contrainte sous la forme :

$$f(q, \varphi) = q - \int \delta(x)\varphi(x) dx \quad (1.7)$$

1.1.2 Équation du mouvement classique

Le mouvement classique de l'ensemble est donné par les équations de Hamilton, en prenant soin de bien tenir compte de la contrainte ; pour cela on introduit le multiplicateur de Lagrange $\lambda(t)$ associé à f , et il vient :

$$m\ddot{q} + \frac{\partial V}{\partial q} = -\lambda \frac{\partial f}{\partial q} = -\lambda \quad (1.8)$$

$$\mu\ddot{\varphi} + \mu c^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -\lambda \frac{\delta f}{\delta \varphi} = \lambda \delta(x) \quad (1.9)$$

Résolvons d'abord l'équation sur φ ; pour ce faire on fait une transformation de Fourier :

$$\xi(k, t) \stackrel{\text{def}}{=} \int \varphi(x, t) e^{-ikx} dx \quad (1.10)$$

alors l'équation du mouvement, éq. 1.9 devient :

$$\mu \ddot{\xi} + \mu c^2 k^2 \xi = \lambda(t) \quad (1.11)$$

il s'agit de l'équation du mouvement d'un oscillateur harmonique forcé de masse μ et de pulsation propre ck . Sa solution générale (causale) s'écrit :

$$\xi(k, t) = \underbrace{\xi(k, 0) \cos kct + \frac{\dot{\xi}(k, 0)}{kc} \sin kct}_{\xi_h(k, t)} + \underbrace{\int_0^t \frac{\sin kc\tau}{kc} \frac{\lambda}{\mu}(t - \tau) d\tau}_{\xi_p(k, t)} \quad (1.12)$$

On y reconnaît la somme de la solution homogène ξ_h dépendant des conditions initiales et la solution particulière ξ_p qui résulte de la présence du multiplicateur $\lambda(t)$ dans l'équation. Il ne reste plus qu'à faire la transformations de Fourier inverse $\xi(k, t) \rightarrow \varphi(x, t)$. Considérons d'abord la solution particulière, si on se rappelle que le sinus cardinal se transforme en fonction porte il vient :

$$\frac{1}{2\pi} \int \frac{\sin kc\tau}{kc} e^{ikx} dk = \frac{1}{2c} \Pi\left(\frac{x}{2c\tau}\right) \quad (1.13)$$

On en déduit que la solution particulière (transformée de Fourier inverse de ξ_p) est :

$$\varphi_p(x, t) = \begin{cases} \frac{1}{2\mu c} \int_0^{t-|x|/c} \lambda(\tau) d\tau & \text{si } t > |x|/c \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.14)$$

C'est une onde émise par la particule qui se propage a vitesse c . De la formule ci-dessus on peut tirer l'expression du multiplicateur $\lambda(t)$ en fonction de $\varphi(x=0, t)$:

$$\lambda(t) = 2\mu c \dot{\varphi}_p(0, t) = 2\mu c \dot{\varphi}(0, t) - 2\mu c \dot{\varphi}_h(0, t) \quad (1.15)$$

or, rappelons-nous que la contrainte imposée au système est que $\varphi(x=0, t) = q(t)$, alors on peut injecter l'expression de $\lambda(t)$ dans l'équation de la particule et on trouve :

$$m\ddot{q} = \frac{\partial V}{\partial q} - 2\mu c \dot{q} + 2\mu c \dot{\varphi}_h(0, t) \quad (1.16)$$

Exprimons le terme correspondant à la solution homogène. Pour cela, dérivons dans l'expression de ξ_h , équation (1.12), par rapport au temps :

$$\dot{\xi}_h(k, t) = -ck \xi(k, 0) \sin kct + \dot{\xi}(k, 0) \cos kct \quad (1.17)$$

Pour obtenir la transformée de Fourier inverse de l'équation ci-dessus, on peut remplacer les fonctions sinus et cosinus par des sommes d'exponentielles, on obtient :

$$\dot{\varphi}_h(x, t) = \frac{c}{2} \left[\frac{\partial \varphi}{\partial x}(x + ct, 0) - \frac{\partial \varphi}{\partial x}(x - ct, 0) \right] + \frac{1}{2} [\dot{\varphi}(x + ct, 0) + \dot{\varphi}(x - ct)] \quad (1.18)$$

Finalement, on peut poser :

$$\eta = 2\mu c \quad (1.19)$$

$$F(t) = 2\mu c \dot{\varphi}_h(0, t) \quad (1.20)$$

et l'équation de la particule prend la forme de l'équation de Langevin sans mémoire :

$$m\ddot{q} = -\frac{\partial V}{\partial q} - \eta\dot{q} + F(t) \quad (1.21)$$

1.1.3 Interprétation

L'équation ci-dessus correspond au mouvement d'une particule soumise à un potentiel V et qui subit une force de frottement $-\eta\dot{q}$ on voit que son travail $-\eta\dot{q}^2$ est négatif. Ce dernier correspond au fait que la particule exerce une force sur la corde pour l'entraîner dans son mouvement (la contrainte oblige), mais comme la déformation induite se propage le long de la corde, cette énergie est évacuée à l'infini et ne sera jamais restituée à la particule.

En plus de la friction, la particule subit une force dépendante du temps $F(t)$. À l'instant t , elle dépend uniquement de l'état de la corde à l'instant initial à une distance $x = \pm ct$ de la particule ; il s'agit de la déformation de la corde qui se propage à la vitesse c et qui vient perturber la particule. Grossièrement on peut dire que cette dernière voit "défiler" l'état initial de la corde.

Une interprétation plus visuelle a été proposée par M. Büttiker [18] : la dissipation correspond à des ondes émises par la particule vers l'infini (éq. 1.14), l'énergie est perdue irréversiblement pour la particule. Dans cette image, les fluctuations se traduisent par des ondes incidentes venant de l'infini (éq. 1.18).

1.1.4 Translation en position

Dans le cas particulier où $V(q)$ est constant, le système total est invariant par translation dans l'espace ; en effet une translation de la forme :

$$q \longrightarrow q - a \quad (1.22)$$

$$\forall x, \varphi(x) \longrightarrow \varphi(x) - a \quad (1.23)$$

laisse invariante les équations du mouvement. Cependant, la particule seule n'est pas invariante par translation. En effet comme la contrainte impose que $\forall t, q(t) = \varphi(0, t)$, il n'est pas possible de faire une translation $q \rightarrow q - a$ sans traduire $\varphi(x) \rightarrow \varphi(x) - a$. Il existe des modèles plus compliqués où la particule est invariante par translation, par exemple le modèle de L. Bruneau *et al.* [10].

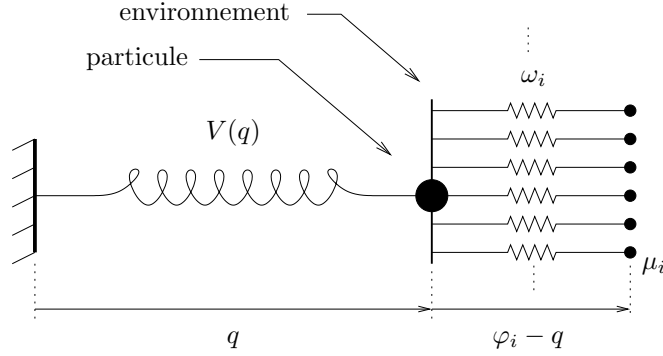


FIG. 1.2 – Modèle de Caldeira–Leggett : une particule couplée à un bain d’oscillateurs indépendants.

1.2 Modèle des oscillateurs indépendants [24, 22]

Dans cette section on va considérer le modèle des oscillateurs indépendants ou modèle de Caldeira–Leggett. Ils est plus général que le modèle de Lamb, en effet, nous allons voir qu’il permet de retrouver l’équation de Langevin avec mémoire.

Pour modéliser l’environnement de la particule, nous allons considérer qu’elle est couplée linéairement à N oscillateurs harmoniques indépendants (fig. 1.2). L’hamiltonien du système total (environnement et particule) s’écrit comme :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q) + \sum_{i=1}^N \frac{\pi_i^2}{2\mu_i} + \frac{\mu_i \omega_i^2}{2} (\varphi_i - q)^2 \quad (1.24)$$

où ω_i est la pulsation du i -ème oscillateur, μ_i sa masse, et φ_i et π_i sont respectivement sa position et son impulsion. La distribution des ω_i et des μ_i détermine complètement les caractéristiques de l’environnement. Plus loin nous serons intéressés au cas où le nombre d’oscillateurs du bain est “grand”. Dans cette limite, nous allons le voir, l’ensemble d’oscillateurs constitue un “bon” modèle pour l’environnement. Nous allons voir qu’il permet de reproduire l’équation de Langevin avec mémoire :

$$m\ddot{q} = -\frac{\partial V}{\partial q} - \int_0^t \Gamma(\tau) \dot{q}(t - \tau) d\tau + F(t) \quad (1.25)$$

où $\Gamma(\tau)$ ne dépend que des paramètres statiques de l’environnement : les μ_i et les ω_i . La fonction $F(t)$ quant à elle ne dépend que de l’état initial de l’environnement : les $\varphi_i(0)$ et les $\pi_i(0)$.

1.2.1 Équation du mouvement

Les équations de Hamilton pour l’ensemble particule et bain sont :

$$\dot{q} = \frac{p}{m} \quad \dot{p} = -\frac{\partial V}{\partial q} + \sum_{i=1}^N \mu_i \omega_i^2 (\varphi_i - q) \quad (1.26)$$

$$\dot{\varphi}_i = \frac{\pi_i}{\mu_i} \quad \dot{\pi}_i = -\mu_i \omega_i^2 (\varphi_i - q) \quad (1.27)$$

L'équation sur les oscillateurs du bain est du second ordre, avec second membre et s'écrit :

$$\ddot{\varphi}_i + \omega_i^2 \varphi_i = \omega_i^2 q \quad (1.28)$$

La solution de cette équation est la somme d'une solution particulière et de la solution générale vérifiant les conditions initiales. Alors :

$$\varphi_i(t) = \varphi_i(0) \cos \omega_i t + \frac{\pi_i(0)}{\mu_i \omega_i} \sin \omega_i t + \int_0^t \omega_i \sin \omega_i \tau q(t - \tau) d\tau \quad (1.29)$$

où $\varphi_i(0)$ et $\pi_i(0)$ désignent les conditions initiales, à l'instant $t = 0$. Après une intégration par parties, on met l'expression de φ_i sous une forme plus utile pour la suite :

$$\begin{aligned} \varphi_i(t) - q(t) &= - \int_0^t \cos \omega_i \tau \dot{q}(t - \tau) d\tau \\ &+ (\varphi_i(0) - q(0)) \cos \omega_i t + \frac{\pi_i(0)}{\mu_i \omega_i} \sin \omega_i t \end{aligned} \quad (1.30)$$

Ainsi, on peut injecter l'expression de φ_i dans l'équation du mouvement de la particule (éq. 1.26). On trouve :

$$m\ddot{q} = -\frac{\partial V}{\partial q} - \int_0^t \Gamma(\tau) \dot{q}(t - \tau) d\tau + F(t) \quad (1.31)$$

où l'on a posé :

$$\Gamma(t) = \sum_{i=1}^N \mu_i \omega_i^2 \cos \omega_i t \quad (1.32)$$

$$F(t) = \sum_{i=1}^N \left[(\varphi_i(0) - q(0)) \cos \omega_i t + \frac{\pi_i(0)}{\mu_i \omega_i} \sin \omega_i t \right] \mu_i \omega_i^2 \quad (1.33)$$

1.2.2 Passage à la limite continue

En pratique l'expression de $\Gamma(t)$ et de $F(t)$ sont compliquées et leurs définitions (éq. 1.32 et éq. 1.33) ne sont pas d'une grande utilité. En effet, la structure fine résidant dans la distribution des μ_i et des ω_i représente beaucoup d'information. D'un point de vue physique, nous sommes intéressés au cas où le nombre d'oscillateurs de l'environnement est grand, dans ce cas la complexité de la distribution des μ_i et des ω_i peut généralement être grande aussi. Dans cette limite qui nous intéresse, on s'intéresse plutôt aux effets "collectifs" induits par l'environnement et pas à la dynamique individuelle de chaque oscillateur qui le constitue.

Définitions

Prenons la limite $N \rightarrow \infty$; nous supposons que l'ensemble des oscillateurs de l'environnement est distribué continûment en fréquence. Dans ce cas, la distribution des masses μ_i devient une densité $\mu(\omega)$ telle que $\mu(\omega) d\omega$ soit la masse totale des oscillateurs de pulsations dans l'intervalle $[\omega, \omega + d\omega]$. La fonction $\mu(\omega)$ caractérise complètement les effets de l'environnement sur la particule. Les variables dynamiques $\varphi_i(t)$ se transforment en une fonction $\varphi(\omega, t)$ représentant la position de l'oscillateur de pulsation ω à l'instant t . De même, $\pi_i(t)$ devient la fonction $\pi(\omega, t)$, donnant la densité d'impulsion au point ω et à l'instant t . Formellement le passage du discret au continu se fait en opérant les changements suivant :

$$\omega_i \rightarrow \omega \quad (1.34)$$

$$\mu_i \rightarrow \mu(\omega) d\omega \quad (1.35)$$

$$\varphi_i \rightarrow \varphi(\omega) \quad (1.36)$$

$$\pi_i \rightarrow \pi(\omega) d\omega \quad (1.37)$$

$$\sum_{i=0}^N f(\omega_i) \mu_i \rightarrow \int_0^\infty f(\omega) \mu(\omega) d\omega \quad (1.38)$$

Remarquons que $\varphi(\omega, t)$ n'est pas une densité et qu'elle a les mêmes unités que sa version discrète, alors que $\pi(\omega, t)$ est une densité : $\pi(\omega, t) d\omega$ a les mêmes dimensions que π_i . Ainsi cela a un sens de parler de “l'impulsion totale comprise entre ω_1 et ω_2 ”, alors que “la position totale entre ω_1 et ω_2 ” n'a pas de sens. Pour souligner l'analogie avec la thermodynamique, dans une certaine mesure on peut dire que la position est *intensive* parce qu'elle ne croît pas avec la masse, alors que l'impulsion est *extensive* parce qu'elle, au contraire, croît avec la masse.

Exemple d'un environnement continu

Dans le cas de fonctions $\mu(\omega)$ simples, on peut explicitement déterminer $\Gamma(t)$ en calculant explicitement la somme dans l'éq. 1.32. L'environnement dit ohmique est défini par la fonction $\mu(\omega)$ suivante :

$$\mu_{\text{ohm}}(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\eta}{\pi\omega^2} \quad (1.39)$$

Dans ce cas, la fonction Γ prend la forme très simple :

$$\Gamma_{\text{ohm}}(t) = \eta\delta(t) \quad (1.40)$$

où $\delta(t)$ est la distribution de Dirac dans \mathcal{D}'^+ (c'est à dire ayant comme support \mathbf{R}^+ , cf. réf. [1]). Finalement l'équation du mouvement prend la forme :

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{p}{m} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial V}{\partial q} - \eta\dot{q} + F_{\text{ohm}}(t) \end{aligned} \quad (1.41)$$

On retrouve bien l'équation de Langevin sans mémoire, que reproduit le modèle de Lamb.

1.2.3 Remarques diverses

Fonction spectrale

Dans la littérature [24, 25, 22], on rencontre souvent la fonction *spectrale* de l'environnement, elle est définie ainsi :

$$J(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \pi \mu(\omega) \omega^3, \text{ alors } \Gamma(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{J(\omega)}{\omega} \cos \omega t \, d\omega \quad (1.42)$$

Tout comme $\mu(\omega)$, elle caractérise complètement l'environnement. Cependant, pour la suite, on va préférer l'usage de $\mu(\omega)$.

À propos du contre–terme

L'hamiltonien éq. 1.24 qu'on a choisi pour modéliser une particule couplée à son environnement donne les résultats voulus. On peut développer l'expression au carré dans l'intégrant, on trouve :

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + V(q)}_{\text{particule}} - \underbrace{q \sum_{i=1}^N \varphi_i \mu_i \omega_i^2 + \frac{q^2}{2} \sum_{i=1}^N \mu_i \omega_i^2}_{\text{couplage}} + \underbrace{\sum_{i=1}^N \frac{\pi_i^2}{2\mu_i} + \frac{\mu_i \omega_i^2}{2} \varphi_i^2}_{\text{bain}} \quad (1.43)$$

De ce point de vue on a un terme propre à la particule, un terme propre au bain et un terme de couplage. Le couplage contient deux termes dont l'un est proportionnel à q^2 . Il dépend de la distribution des $\omega_i \mu_i$ (et peut donc diverger lorsque $N \rightarrow \infty$, c'est le cas de l'environnement ohmique, par exemple), on l'appelle contre–terme. Il est artificiel et ne doit pas être interprété comme une “renormalisation” du potentiel $V(q)$. Sa présence est nécessaire pour l'obtention d'une équation de Langevin ; il garantit que l'hamiltonien soit défini positif.

Flèche du temps

Remarquons que l'équation de Langevin introduit en apparence une “flèche du temps”. En effet un renversement du temps (changement $t \rightarrow -t$) change la forme de la force de friction $-\eta \dot{q} \rightarrow +\eta \dot{q}$ et donc ne laisse pas invariante l'équation du mouvement. Ceci paraît paradoxal dans la mesure où l'équation du mouvement est déduite des équations générées par l'hamiltonien éq. 1.24, visiblement invariants par renversement du temps.

Cependant un renversement du temps “correct” demanderait à renverser les conditions initiales du bain (changer $\pi_i \rightarrow -\pi_i$). On montre que ceci a pour effet de changer $F(t)$ de façon à retrouver une évolution réversible ; il n'y a pas de paradoxe.

Physiquement, d'un point de vue expérimental, on n'a aucun contrôle sur les conditions initiales de l'environnement et lorsqu'on parle de renversement, on ne considère que la partie “particule”. De ce point de vue la dynamique “réduite” de la particule est irréversible.

1.3 Fluctuations statistiques

Dans ce qui précède, la force $F(t)$ dans l'équation de Langevin (éq. 1.31) est induite par l'environnement et entièrement déterminée par les conditions initiales. Nous avons jusqu'à présent laissé de côté son interprétation. Pour illustrer son effet, nous allons considérer le cas où les conditions initiales sont des variables aléatoires. Plus particulièrement on va supposer que l'environnement est dans un état de Gibbs à température $1/\beta$.

Notons les élongations du i -ème oscillateur du bain :

$$\chi_i = \varphi_i - q \quad (1.44)$$

Dans ce cas, la loi de Boltzmann donne que les χ_i et π_i sont des variables aléatoires gaussiennes centrées vérifiant :

$$\langle \chi_i(0) \rangle = 0 \quad (1.45)$$

$$\langle \pi_i(0) \rangle = 0 \quad (1.46)$$

$$\langle \chi_i(0)\pi_j(0) \rangle = 0 \quad (1.47)$$

$$\langle \chi_i(0)\chi_j(0) \rangle = \frac{1}{\beta\mu_i\omega_i^2}\delta_{ij} \quad (1.48)$$

$$\langle \pi_i(0)\pi_j(0) \rangle = \frac{\mu_i}{\beta}\delta_{ij} \quad (1.49)$$

On peut utiliser directement la définition de $F(t)$, éq. 1.33 pour calculer la moyenne de $F(t)$ au cours du temps :

$$\langle F(t) \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N \left[\chi_i(0) \cos \omega_i t + \frac{\pi_i(0)}{\mu_i \omega_i} \sin \omega_i t \right] \mu_i \omega_i^2 \right\rangle \quad (1.50)$$

$$= 0 \quad (1.51)$$

De même, on peut calculer la fonction d'auto-corrélation de F entre les instants t et t' :

$$\begin{aligned} \langle F(t)F(t') \rangle &= \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left[\chi_i(0) \cos \omega_i t + \frac{\pi_i(0)}{\mu_i \omega_i} \sin \omega_i t \right] \mu_i \omega_i^2 \right. \\ &\quad \left. \times \left[\chi_j(0) \cos \omega_j t' + \frac{\pi_j(0)}{\mu_j \omega_j} \sin \omega_j t' \right] \mu_j \omega_j^2 \right\rangle \end{aligned} \quad (1.52)$$

En injectant les éq. 1.47—1.49, on obtient :

$$\langle F(t)F(t') \rangle = \frac{2}{\beta} \sum_{i=1}^N \mu_i \omega_i^2 \cos \omega_i(t-t') \quad (1.53)$$

$$= \frac{2}{\beta} \Gamma(t-t') \quad (1.54)$$

$F(t)$ est une fonction stochastique gaussienne centrée caractérisée par l'éq. 1.54. À titre d'exemple, considérons l'environnement ohmique discuté dans la sec. 1.2.2). Dans ce cas :

$$\langle F(t)F(t') \rangle = \frac{2\eta}{\beta} \delta(t - t') \quad (1.55)$$

La force aléatoire $F(t)$ que la particule subit est un bruit blanc. Sa puissance spectrale est proportionnelle à la température $1/\beta$ et à la constante dissipative η . Cette relation, ainsi que sa forme plus générale, éq. 1.54 relie bruit et dissipation, elle est connue aussi sous le nom de “second théorème fluctuation–dissipation” [41] En plus de son intérêt pratique, cette relation souligne que le bruit et l'effet de dissipation sont reliés et ont une origine commune.

Physiquement, on peut comprendre ce résultat en disant qu'il y a “compétition” entre le bruit et la dissipation. En effet, le bruit thermique injecte de l'énergie dans la particule (par l'intermédiaire de la force $F(t)$) et simultanément la dissipation absorbe de l'énergie (par l'intermédiaire de la force de friction $-\eta\dot{q}$). Si il n'y avait pas de dissipation l'énergie de particule serait en perpétuelle croissance et, réciproquement, si il n'y avait pas de bruit, la particule finirait par dissiper toute son énergie. La température est donc le rapport entre les deux (cf. [15]). C'est le sens physique que l'on peut prêter à l'éq. 1.54.

Chapitre 2

Généralités sur la décohérence

2.1 Discussion physique

Nous avons vu que, classiquement, l'environnement induit des fluctuations (à travers le bruit) et de la dissipation (à travers la force de friction). Dans un système constitué d'une particule quantique couplée à un environnement quantique, on observe en plus de la décohérence [11, 12]. Qualitativement, on entend par cohérence quantique la capacité d'un système à faire des interférences. La décohérence est précisément la destruction de la cohérence. Par exemple, considérons une expérience où une particule doit traverser une double fente d'Young et produire un impact sur un écran derrière les fentes. Nous savons que cette expérience exhibe le caractère ondulatoire de la particule en produisant une figure d'interférence sur l'écran. Par contre si on essaye de placer un appareil de mesure sur le trajet de la particule qui détecte celle-ci sans l'absorber (par exemple pour savoir par quelle fente elle passe) la figure d'interférence est détruite : il n'y a plus de cohérence. Mais même en l'absence d'appareil de mesure l'environnement de l'expérience peut faire perdre la cohérence de l'état de la particule. Tout se passe comme si l'environnement faisait constamment des mesures sur la particule : chaque degré de liberté de celui-ci sonde l'état de la particule et fait perdre peu à peu la cohérence de son état. En d'autres termes la décohérence résulte de l'*intrication* quantique du système avec l'environnement. Selon le degré d'interaction entre la particule et son environnement la décohérence peut être plus ou moins forte, et la figure d'interférence sera plus ou moins estompée. La fig. 2.1 donne l'allure des figures d'interférences selon que la décohérence est faible, partielle ou forte.

2.2 Description des systèmes quantiques

En mécanique quantique l'état d'un système peut être décrit par un ket $|\psi\rangle$. Une façon plus générale de représenter l'état quantique est l'opérateur densité $\hat{\rho}$ auto-adjoint de trace unité [31, 29]. Donnons-nous un système ("la particule"), une base de l'espace de Hilbert des états quantiques ($|0\rangle, |1\rangle \dots$) et une observable \hat{A} . Nous avons les relations suivantes :

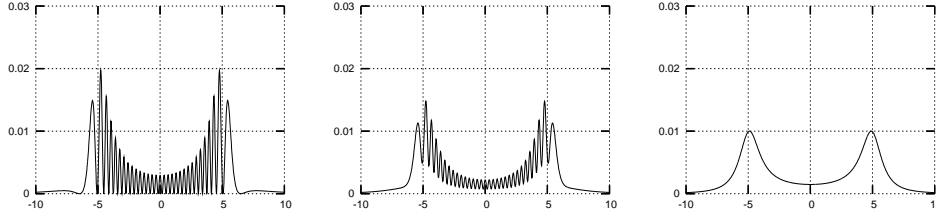


FIG. 2.1 – Ci-dessus on a tracé la densité de probabilité pour que la particule arrive au point considéré de l'écran après avoir traversé les fentes d'Young. Les deux renforcements correspondent aux points de l'écran face aux fentes. À gauche il n'y a pas de décohérence, au milieu la décohérence est partielle et à droite la décohérence est totale.

- $\langle n|\hat{\rho}|n\rangle$ donne la probabilité pour que la particule soit dans l'état $|n\rangle$; cette écriture est une généralisation de $|\langle \psi|n\rangle|^2$.
- $\text{tr}(\hat{\rho}\hat{A})$ donne la valeur moyenne $\langle \hat{A} \rangle$; cette écriture généralise $\langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle$. On calcule la trace par la formule suivante :

$$\text{tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \sum_n \langle n|\hat{\rho}\hat{A}|n\rangle \quad (2.1)$$

Si l'opérateur densité est de la forme $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, alors $\hat{\rho}$ représente un *état pur*, dans ce cas particulier $\hat{\rho}$ et $|\psi\rangle$ représente le même état physique. Si par contre l'opérateur densité est de la forme $\hat{\rho} = \alpha_1|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \alpha_2|\psi_2\rangle\langle\psi_2|$, c'est à dire une combinaison linéaire d'états purs on dit que l'état du système est un *mélange statistique*, dans ce cas il n'existe pas de $|\psi\rangle$ qui représente le même état, le formalisme de l'opérateur densité est donc plus général. Notons, enfin, que $\hat{\rho}$ est soit un état pur, soit un mélange statistique ; il n'y a pas de troisième alternative. À titre d'exemple comparons les deux opérateurs densité suivants, l'un est un état pur et l'autre un mélange :

$$\hat{\rho}_{\text{pur}} = (\alpha_1|\psi_1\rangle + \alpha_2|\psi_2\rangle)(\alpha_1\langle\psi_1| + \alpha_2\langle\psi_2|) \quad (2.2)$$

$$\hat{\rho}_{\text{mélange}} = |\alpha_1|^2|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\alpha_2|^2|\psi_2\rangle\langle\psi_2| \quad (2.3)$$

où $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$. Calculons dans les deux cas la probabilité pour que la particule soit dans un état $|n\rangle$, on obtient :

$$\langle n|\hat{\rho}_{\text{pur}}|n\rangle = |\alpha_1\langle n|\psi_1\rangle + \alpha_2\langle n|\psi_2\rangle|^2 \quad (2.4)$$

$$\langle n|\hat{\rho}_{\text{mélange}}|n\rangle = |\alpha_1\langle n|\psi_1\rangle|^2 + |\alpha_2\langle n|\psi_2\rangle|^2 \quad (2.5)$$

On constate que dans le premier cas on ajoute les amplitudes complexes et que dans le second on ajoute les probabilités. Il s'agit d'un résultat important : dans le cas "pur" on peut avoir des interférences alors que dans le "mélange statistique" on n'en a pas. En pratique, on peut avoir des états "plus ou moins" purs. Une façon de mesurer la pureté d'un état consiste à calculer son entropie dont voici la définition :

$$S = -k \text{tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \quad (2.6)$$

Dans l'exemple ci-dessus, pour l'état pur l'entropie est nulle, alors que pour le mélange statistique on trouve¹ $k \ln 2$.

L'autre avantage majeur de l'opérateur densité par rapport au ket est qu'il permet de décrire l'état d'un sous-système qui fait partie d'un plus grand système. Il est donc préconisé pour la description de l'état d'une particule en interaction avec l'environnement. Pour le calculer, on part de l'opérateur densité de l'ensemble particule-bain et on fait la trace sur toutes les variables du bain ; de cette façon on obtient l'opérateur densité *réduit* qui décrit la particule.

¹En pratique pour faire le calcul, on diagonalise $\hat{\rho}$. Si on note p_i les éléments diagonaux de $\hat{\rho}$ alors les éléments diagonaux de $-\hat{\rho} \ln \hat{\rho}$ sont $-p_i \ln p_i$. En prenant la trace on trouve pour l'entropie :

$$S = -k \sum_i p_i \ln p_i \quad (2.7)$$

Chapitre 3

Décohérence à l'équilibre thermique

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser à l'état quantique à l'équilibre thermique d'une particule couplée à l'environnement à température T (en particulier dans l'état fondamental qui correspond à l'équilibre thermique à $T = 0$). Nous allons nous placer dans le cadre du modèle des oscillateurs indépendants introduit au chapitre 1. On va s'intéresser aux effets quantiques qu'induit l'environnement sur la particule et en particulier à son impact sur les phénomènes d'interférences.

Dans le but de rester précis, nous allons adopter la démarche suivante : Nous allons étudier le système total constitué de la particule et de l'environnement en tant que système isolé puis nous allons prendre la trace sur l'environnement dans le but d'éliminer toute l'information superflue concernant les degrés de liberté de l'environnement. Dans ce but, nous allons présenter la “méthode de la résolvante” [9] bien connue en théorie spectrale, que nous appliquons à ce problème.

En particulier, nous allons calculer l'opérateur densité réduit de la particule en prenant la trace sur l'environnement de l'opérateur densité du système total (particule et environnement). Nous allons voir qu'à température nulle il est marqué par une entropie résiduelle traduisant l'intrication entre la particule et l'environnement. Celle-ci se trouve dans un état similaire à un état de Gibbs caractérisé par une température effective non-nulle. Les résultats qui vont suivre sont déjà connus [25, 24, 17], cependant la méthode de la résolvante réduite n'a pas été appliquée à ce problème, il nous semble donc intéressant de la détailler ici. De plus cette méthode se transpose naturellement aux problèmes hors-équilibre (chapitre suivant).

3.1.1 Modèle

Considérons le système classique constitué d'un oscillateur (la particule) couplé à un ensemble de N oscillateurs indépendants (l'environnement), dont l'hamiltonien suit :

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2}q^2}_{\text{particule}} + \underbrace{\sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\pi_i^2}{2\mu_i} + \frac{\mu_i\omega_i^2}{2}(\varphi_i - q)^2 \right\}}_{\text{environnement}} \quad (3.1)$$

(mêmes notations que dans la section 1.2). Il s'agit de l'hamiltonien éq. 1.24 où le potentiel $V(q)$ est harmonique.

3.1.2 Quantification

Envisageons la version quantique de ce modèle. L'espace de Hilbert \mathcal{H}_{tot} d'un tel système est le produit tensoriel des espaces de Hilbert de ses composantes : celui de la particule $\mathcal{H}_{\text{part}}$ par ceux des oscillateurs de l'environnement $\mathcal{H}_{\text{osc}_1} \dots \mathcal{H}_{\text{osc}_N}$:

$$\mathcal{H}_{\text{tot}} = \mathcal{H}_{\text{part}} \otimes \underbrace{\mathcal{H}_{\text{osc}_1} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{\text{osc}_N}}_{\mathcal{H}_{\text{env}}} \quad (3.2)$$

En représentation position, les éléments de \mathcal{H}_{tot} sont des fonctions $L^2(\mathbf{R}^{N+1})$, à $N + 1$ variables. Avec les notation de Dirac :

$$\langle q, \varphi_1, \dots, \varphi_N | \psi \rangle = \psi(q, \varphi_1, \dots, \varphi_N) \quad \text{pour} \quad |\psi\rangle \in \mathcal{H}_{\text{tot}} \quad (3.3)$$

Les variables canoniques classiques (positions, impulsions) deviennent des opérateurs auto-adjoints en mécanique quantique. Ils vérifient les relations de commutation usuelles :

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \quad (3.4)$$

$$[\hat{\varphi}_j, \hat{\pi}_{j'}] = i\hbar \delta_{jj'} \quad (3.5)$$

$$[\hat{q}, \hat{q}] = [\hat{p}, \hat{p}] = 0 \quad (3.6)$$

$$[\hat{\varphi}_j, \hat{\varphi}_{j'}] = [\hat{\pi}_j, \hat{\pi}_{j'}] = 0 \quad (3.7)$$

$$[\hat{q}, \hat{\varphi}_j] = [\hat{q}, \hat{\pi}_j] = [\hat{p}, \hat{\varphi}_j] = [\hat{p}, \hat{\pi}_j] = 0 \quad (3.8)$$

En représentation position, avec les notation de Dirac, les observables canoniques agissent dans l'espace de Hilbert total \mathcal{H}_{tot} de la façon usuelle :

$$\langle q, \varphi_1, \dots, \varphi_N | \hat{q} \psi \rangle = q \psi(q, \varphi_1, \dots, \varphi_N) \quad (3.9)$$

$$\langle q, \varphi_1, \dots, \varphi_N | \hat{p} \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \psi(q, \varphi_1, \dots, \varphi_N) \quad (3.10)$$

$$\langle \varphi_j, \varphi_1, \dots, \varphi_N | \hat{\varphi}_j \psi \rangle = \varphi_j \psi(q, \varphi_1, \dots, \varphi_N) \quad (3.11)$$

$$\langle q, \varphi_1, \dots, \varphi_N | \hat{\pi}_j \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi_j} \psi(q, \varphi_1, \dots, \varphi_N) \quad (3.12)$$

3.1.3 État d'équilibre

Dans la suite de ce chapitre, nous allons nous intéresser au cas où le système total (particule et environnement) est dans un état de Gibbs à température T . Son opérateur densité est :

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\hat{H}/kT} \quad \text{où} \quad Z = \text{tr} e^{-\hat{H}/kT} \quad (3.13)$$

Rappelons qu'à température $T \rightarrow 0$, l'état $\hat{\rho}$ tend vers l'état fondamental $|0\rangle\langle 0|$ du système total. Nous allons noter $\langle A \rangle$ la valeur moyenne de l'observable A , définie comme suit :

$$\langle A \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \text{tr} (\hat{A} \hat{\rho}) \quad (3.14)$$

Dans la suite, on souhaite calculer l'opérateur densité réduit $\hat{\sigma}$ de la particule définie comme suit :

$$\hat{\sigma} \stackrel{\text{def}}{=} \text{tr}_{\text{env}} \hat{\rho} \quad (3.15)$$

La trace se fait sur l'espace de Hilbert de l'environnement \mathcal{H}_{env} , donc $\hat{\sigma}$ agit dans l'espace de la particule $\mathcal{H}_{\text{part}}$. De cette façon, on élimine toute l'information sur l'environnement tout en conservant l'information complète sur la particule. En effet, à partir de l'opérateur densité réduit, on peut prédire n'importe quelle mesure portant sur les observables de la particule (cf. sec. 2.2).

Pour une observable \hat{a} n'agissant que dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}_{\text{part}}$, les moyennes peuvent être calculées à partir de $\hat{\sigma}$, en effet :

$$\langle a \rangle = \text{tr}(\hat{\rho} \cdot \hat{a} \otimes I_{\text{env}}) \quad (3.16)$$

$$= \text{tr}_{\text{part}} \left[\left(\text{tr}_{\text{env}} \hat{\rho} \right) \hat{a} \right] \quad (3.17)$$

$$= \text{tr} \hat{\sigma} \hat{a} \quad (3.18)$$

3.2 Méthode de la résolvante

Dans cette section on utilise le fait que l'hamiltonien éq. 3.1 est quadratique pour calculer explicitement $\langle q^2 \rangle$ et $\langle p^2 \rangle$. Nous utilisons une approche courante en théorie spectrale [9, 29] très adaptée au problème.

3.2.1 Décomposition en modes normaux

L'hamiltonien du système que l'on étudie (éq. 3.1) est quadratique. Pour ce genre de systèmes, nous pouvons décomposer la trajectoire en modes de vibration collectifs, de façon similaire à la décomposition en mode normaux du mouvement d'une corde vibrante. Pour ce faire, nous allons réécrire l'hamiltonien du système total sous forme matricielle. Mettons les positions (et les impulsions) dans des vecteurs colonnes, on arrive à réécrire l'hamiltonien sous la forme suivante :

$$H = \frac{1}{2}(P|P) + \frac{1}{2}(Q|A^2|Q) \quad (3.19)$$

où :

$$|P\rangle = \begin{pmatrix} \frac{\hat{p}}{\sqrt{m}} \\ \vdots \\ \frac{\hat{\pi}_i}{\sqrt{\mu_i}} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |Q\rangle = \begin{pmatrix} \hat{q}\sqrt{m} \\ \vdots \\ \hat{\varphi}_i\sqrt{\mu_i} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

$$A^2 = \begin{pmatrix} \Omega^2 + \sum \omega_i^2 \frac{\mu_i}{m} & \dots & -\omega_i^2 \sqrt{\frac{\mu_i}{m}} & \dots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -\omega_i^2 \sqrt{\frac{\mu_i}{m}} & & \omega_i^2 & 0 \\ \vdots & 0 & & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

On note $|0\rangle, \dots, |N\rangle$ la base canonique de \mathbf{R}^{N+1} , de sorte que les vecteurs $|Q\rangle$ et $|P\rangle$ aient pour composantes :

$$\begin{aligned} \hat{q}\sqrt{m} &= (0|Q) & \hat{p}/\sqrt{m} &= (0|P) \\ \hat{\varphi}_i\sqrt{\mu_i} &= (i|Q) & \hat{\pi}_i/\sqrt{\mu_i} &= (i|P) \end{aligned} \quad (3.22)$$

Avec ces notations, les relations de commutations entre les observables du systèmes (éq. 3.4 à éq. 3.8) s'écrivent :

$$[(i|P), (i|P)] = 0 \quad (3.23)$$

$$[(i|Q), (i|Q)] = 0 \quad (3.24)$$

$$[(i|Q), (i|P)] = i\hbar \quad (3.25)$$

La matrice A^2 est symétrique et définie positive. On peut donc trouver une base orthonormée de vecteurs propres. Notons $|U_0\rangle \dots |U_N\rangle$ les vecteurs propres associés aux valeurs propres $\nu_0 \dots \nu_N$, ils vérifient :

$$A^2|U_j\rangle = \nu_j^2|U_j\rangle \quad (3.26)$$

$$I = \sum_{j=0}^N |U_j\rangle\langle U_j| \quad (3.27)$$

Comme les valeurs propres sont positives, nous pouvons sans perte de généralité prendre $\nu_j > 0$. Notons les opérateurs canoniques dans la nouvelle base :

$$\hat{x}_j = (U_j|Q) \quad (3.28)$$

$$\hat{y}_j = (U_j|P) \quad (3.29)$$

\hat{x}_j et \hat{y}_j sont les opérateurs positions et impulsions des modes normaux. Vérifions qu'ils sont canoniquement conjugués :

$$[\hat{x}_j, \hat{y}_{j'}] = \quad (3.30)$$

$$= \left[(U_j | \sum_{k=0}^N |k\rangle \langle k| Q), (U_{j'} | \sum_{k'=0}^N |k'\rangle \langle k'| P) \right] \quad (3.31)$$

$$= \sum_{k,k'} (U_j | k\rangle \langle k' | U_{j'}) [(k|Q), (k'|P)] \quad (3.32)$$

$$= (U_j | \sum_k |k\rangle \langle k| U_{j'}) [(k|Q), (k|P)] \quad (3.33)$$

$$= i\hbar \delta_{jj'} \quad (3.34)$$

La notion de mode normal mérite quelques commentaires. En fonction des nouveaux opérateurs canoniques \hat{x}_j et \hat{y}_j , l'hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \sum_{j=0}^N \frac{\hat{y}_j^2}{2} + \nu_j^2 \frac{\hat{x}_j^2}{2} \quad (3.35)$$

il s'agit de l'hamiltonien d'un ensemble de $N + 1$ oscillateurs indépendants : les modes normaux du système. Sous cette forme sa dynamique est triviale. Rappelons nous que :

$$\hat{x}_j = (U_j | Q) \quad (3.36)$$

$$= (U_j | 0) (0 | Q) + \sum_{i=1}^N (U_j | i) (i | Q) \quad (3.37)$$

$$= (U_j | 0) \sqrt{m} \hat{q} + \sum_{i=1}^N \sqrt{\mu_i} (U_j | i) \hat{\varphi}_i \quad (3.38)$$

Chaque mode normal est une superposition linéaire de la position de la particule et de celles de l'environnement. Le mouvement d'un mode normal correspond à l'oscillation collective de tout le système. Réciproquement, les coordonnées de la particule et celles de l'environnement sont une superposition linéaire des coordonnées normales :

$$\hat{q} \sqrt{m} = \sum_{j=0}^N (0 | U_j) \hat{x}_j \quad (3.39)$$

$$\hat{p} / \sqrt{m} = \sum_{j=0}^N (0 | U_j) \hat{y}_j \quad (3.40)$$

3.2.2 Résolvante réduite [9]

Dans la suite, nous allons avoir besoin de calculer des quantités de la forme suivante :

$$M_f \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{j=0}^N (0 | U_j)^2 f(\nu_j) \quad (3.41)$$

où f est une fonction continue $\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$. Nous allons utiliser une méthode standard en théorie spectrale [9, 29, 28], la méthode de la "résolvante réduite". Considérons la résolvante de la matrice A^2 définie de la façon suivante :

$$R(z) \stackrel{\text{def}}{=} (z^2 + A^2)^{-1} \quad (3.42)$$

avec $z \in \mathbb{C}$ tel que $z^2 + \nu_j^2 \neq 0$ pour tout j . C'est une définition légèrement différente (mais équivalente) de celle qu'on trouve dans la littérature. Elle se révélera plus simple dans la suite. Dans la base propre de A , $R(z)$ s'écrit comme :

$$R(z) = \sum_{j=0}^N \frac{|U_j\rangle\langle U_j|}{z^2 + \nu_j^2} \quad (3.43)$$

On définit la résolvante réduite à la particule :

$$r(z) \stackrel{\text{def}}{=} \langle 0|R(z)|0\rangle = \sum_{j=0}^N \frac{\langle 0|U_j\rangle^2}{z^2 + \nu_j^2} \quad (3.44)$$

Appliquons à $R(z)$ la formule suivante (cf. réf. [1]) sur les distributions :

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{(iu \pm \gamma)^2 + \omega^2} = \text{vp} \frac{1}{-u^2 + \omega^2} \mp \frac{i\pi}{2\omega} [\delta(u - \omega) - \delta(u + \omega)] \quad (3.45)$$

on obtient pour la partie imaginaire de $r(z)$, pour z approchant l'axe imaginaire :

$$\mathcal{I}m \left\{ \lim_{\gamma \rightarrow 0} r(iu + \gamma) \right\} = -\pi \sum_{j=0}^N \frac{\langle 0|U_j\rangle^2}{2\nu_j} [\delta(u - \nu_j) - \delta(u + \nu_j)] \quad (3.46)$$

Multiplions par $f(u)$ cette équation et intégrons entre 0 et ∞ , on en déduit :

$$-\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \mathcal{I}m \left\{ \lim_{\gamma \rightarrow 0} r(iu + \gamma) \right\} 2uf(u) du = \sum_{j=0}^N \langle 0|U_j\rangle^2 f(\nu_j) \quad (3.47)$$

ce qui correspond bien à la relation voulue, éq. 3.41. Pour calculer de telles quantités il ne nous reste plus qu'à trouver explicitement l'expression de $r(z)$.

Soit A_0^2 et R_0 les valeurs des matrices A^2 et R en absence d'environnement, c'est à dire lorsque tous les μ_i sont nuls dans l'éq. 3.21. Posons :

$$A^2 = A_0^2 + V \quad (3.48)$$

Alors :

$$R = R_0 + IR - R_0I \quad (3.49)$$

$$= R_0 + R_0(z^2 + A_0^2)R - R_0(z^2 + A_0^2 + V)R \quad (3.50)$$

$$= R_0 - R_0VR \quad (3.51)$$

Utilisons le fait que R_0 est diagonal et que $\langle i|V|j\rangle \neq 0$ seulement si $i = 0$ ou $j = 0$:

$$\langle 0|R|0\rangle = \langle 0|R_0|0\rangle - \langle 0|R_0|0\rangle \langle 0|V|0\rangle \langle 0|R|0\rangle - \sum_{i \geq 1} \langle 0|R_0|0\rangle \langle 0|V|i\rangle \langle i|R|0\rangle \quad (3.52)$$

$$= \frac{1}{z^2 + \Omega^2} - \frac{1}{z^2 + \Omega^2} \sum_{i \geq 1} \frac{\omega_i^2 \mu_i}{m} \langle 0|R|0\rangle + \frac{1}{z^2 + \Omega^2} \sum_{i \geq 1} \omega_i^2 \sqrt{\frac{\mu_i}{m}} \langle i|R|0\rangle \quad (3.53)$$

$$\langle k|R|0\rangle = -\langle k|R_0|k\rangle \langle k|V|0\rangle \langle 0|R|0\rangle \quad (3.54)$$

$$= \sqrt{\frac{\mu_k}{m}} \frac{\omega_k^2}{z^2 + \omega_k^2} \langle 0|R|0\rangle \quad (3.55)$$

En combinant ces deux expressions, on obtient finalement :

$$r(z) = \frac{1}{z^2 + \Omega^2 + z^2 \sum \frac{\omega_i^2 \mu_i / m}{z^2 + \omega_i^2}} \quad (3.56)$$

3.2.3 Passage à la limite continue

Sous la forme ci-dessus, l'expression de la résolvante réduite $r(z)$ est pratiquement inutilisable. En effet, il est généralement difficile de calculer la série faisant intervenir les coefficients μ_i . Cependant, rappelons-nous que nous sommes intéressés par la situation physique où le nombre d'oscillateurs harmoniques dans l'environnement est grand ; alors, nous pouvons prendre la limite continue de la même façon que dans la sec. 1.2.2. Dans ce cas la suite μ_i devient une distribution et la somme devient une intégrale sur la pulsation :

$$r^{-1}(z) = z^2 + \Omega^2 + z^2 \int_0^\infty \frac{\omega^2 \mu(\omega) / m}{z^2 + \omega^2} d\omega \quad (3.57)$$

Posons $z = iu + \gamma$ (avec u et γ réels) et utilisons l'éq. 3.45 pour prendre la limite suivante¹ :

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0^+} r^{-1}(iu + \gamma) = -u^2 + \Omega^2 - \Delta + iu\Gamma \quad (3.59)$$

où on a posé :

$$\Delta(u) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{u^2 / m}{-u^2 + \omega^2} \mu(\omega) \omega^2 d\omega \quad (3.60)$$

$$\Gamma(u) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\pi u^2}{2m} \mu(|u|) \quad (3.61)$$

Finalement on obtient qu'à la limite continue :

$$\sum_{j=0}^N (0|U_j)^2 f(\nu_j) \rightarrow \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\Gamma u^2}{(-u^2 + \Omega^2 - \Delta)^2 + u^2 \Gamma^2} f(u) du \quad (3.62)$$

3.2.4 Fluctuation de la position et de l'impulsion de la particule

Revenons au cas où le système complet (particule et environnement) est à l'équilibre à température T , dans l'état donnée par l'éq. 3.13. En termes de modes normaux, $\hat{\rho}$ peut

¹Remarquons que $\delta(u - \omega)$ est un pic de Dirac de la variable u au point ω . Mais on peut voir cette expression aussi comme un pic de Dirac de la variable ω au point u . Cette même remarque est valable pour :

$$\text{vp} \frac{1}{-u^2 + \omega^2} \quad (3.58)$$

qui est une distribution de la variable u dépendant d'un paramètre ω , qu'on peut voir aussi comme une distribution de la variable ω dépendant d'un paramètre u . Cela nous permet de dire, dans la suite, que $\Delta(u)$ et $\Gamma(u)$ sont des distributions régulières (des fonctions) de la variable u .

s'écrire :

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\sum_{j=0}^N \hat{H}_j/kT} \quad \text{où} \quad \hat{H}_j = \frac{\hat{y}_j^2}{2} + \frac{\nu_j \hat{x}_j^2}{2} \quad (3.63)$$

$$= \frac{e^{-\hat{H}_0/kT}}{Z_0} \otimes \cdots \otimes \frac{e^{-\hat{H}_N/kT}}{Z_N} \quad (3.64)$$

$$\text{où } Z_j = \text{tr } e^{-\hat{H}_j/kT}$$

Cette dernière décomposition de $\hat{\rho}$ comme produit d'opérateurs (normés à l'unité) n'agissant que sur un seul mode normal montre que les modes normaux sont statistiquement indépendants dans un état de Gibbs. Dans ce cas on peut déterminer les moyennes et les fluctuations de position et d'impulsion de chacun des modes indépendamment² :

$$\langle \hat{x}_j \rangle = \langle \hat{y}_j \rangle = 0 \quad (3.65)$$

$$\langle \hat{x}_j \hat{x}_{j'} \rangle = \frac{\hbar}{2\nu_j} \coth\left(\frac{\hbar\nu_j}{2kT}\right) \delta_{jj'} \quad (3.66)$$

$$\langle \hat{y}_j \hat{y}_{j'} \rangle = \frac{\hbar\nu_j}{2} \coth\left(\frac{\hbar\nu_j}{2kT}\right) \delta_{jj'} \quad (3.67)$$

$$\langle \hat{x}_j \hat{y}_{j'} \rangle = 0 \quad (3.68)$$

Calculons les positions et les impulsions moyennes de la particule en utilisant leurs décompositions en modes propres :

$$\langle q \rangle = \frac{1}{\sqrt{m}} \left\langle \sum_{j=0}^N (0|U_j) \hat{x}_j \right\rangle \quad (3.69)$$

$$= \sum_{j=0}^N (0|U_j) \langle \hat{x}_j \rangle \quad (3.70)$$

$$= 0 \quad (3.71)$$

Procédons de la même manière pour les fluctuations :

$$\langle q^2 \rangle = \frac{1}{m} \left\langle \sum_{j=0}^N (0|U_j) \hat{x}_j \sum_{j'=0}^N (0|U_{j'}) \hat{x}_{j'} \right\rangle \quad (3.72)$$

$$= \frac{1}{m} \sum_{jj'} (0|U_j) (0|U_{j'}) \langle \hat{x}_j \hat{x}_{j'} \rangle \quad (3.73)$$

$$= \sum_{j=0}^N (0|U_j)^2 \frac{\hbar}{2m\nu_j} \coth\left(\frac{\hbar\nu_j}{2kT}\right) \quad (3.74)$$

²les modes normaux étant des oscillateurs harmoniques de pulsation propre ν_j , on utilise de relations courantes qui donnent les premiers moments de la position et de l'impulsion d'un oscillateur.

Dans les deux cas, il s'agit de fonctions de la forme de l'éq. 3.41, que nous savons calculer grâce à l'éq. 3.62, on trouve :

$$\langle q^2 \rangle = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\Gamma(u)u^2}{(-u^2 + \Omega^2 - \Delta(u))^2 + u^2\Gamma^2(u)} \frac{\hbar}{2mu} \coth\left(\frac{\hbar u}{2kT}\right) du \quad (3.75)$$

Par exactement la même méthode on trouve que $\langle p \rangle = 0$ et que :

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \sum_{j=0}^N (0|U_j)^2 \frac{\hbar m \nu_j}{2} \coth\left(\frac{\hbar \nu_j}{2kT}\right) \quad (3.76)$$

$$= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\Gamma(u)u^2}{(-u^2 + \Omega^2 - \Delta(u))^2 + u^2\Gamma^2(u)} \frac{\hbar m u}{2} \coth\left(\frac{\hbar u}{2kT}\right) du \quad (3.77)$$

On peut obtenir les mêmes expressions par d'autres méthodes, par exemple à l'aide du théorème fluctuation–dissipation [25, 17] ou à l'aide de la technique des intégrales de chemin et de la fonctionnelle–influence de Feynman–Vernon [22, 24, 13, 14]. La décomposition en modes normaux qu'on a considérée ci-dessus nous paraît naturelle ; dans le chapitre suivant, nous allons voir qu'elle s'applique presque à l'identique au problème dépendant du temps (hors équilibre).

3.3 Opérateur densité réduit

Comme l'hamiltonien du système particule plus environnement (défini par l'éq 3.1, page 22) est quadratique en position et impulsion, l'opérateur densité à l'équilibre thermique défini par :

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\hat{H}/kT}}{Z} \quad \text{avec} \quad Z = \text{tr} e^{-\hat{H}/kT} \quad (3.78)$$

est gaussien. Lorsqu'on prend la trace de $\hat{\rho}$ sur l'environnement, le résultat reste gaussien, donc l'opérateur densité réduit définit par :

$$\hat{\sigma} = \text{tr}_{\text{env}} \hat{\rho} \quad (3.79)$$

est aussi gaussien. On peut l'écrire sous cette forme :

$$\hat{\sigma} = e^{a\hat{q}^2 + b\hat{p}^2 + c} \quad (3.80)$$

où a , b et c sont des coefficients à déterminer. Remarquons qu'il n'y a pas de terme en $\hat{q}\hat{p}$ car l'hamiltonien est invariant par renversement du temps³ alors $\hat{\rho}$ l'est aussi et par conséquent $\hat{\sigma}$ doit l'être. Nous pouvons réécrire $\hat{\sigma}$ avec un autre jeu de coefficients inconnus \tilde{Z} , \tilde{T} et \tilde{m} :

$$\hat{\sigma} = \frac{e^{-\hat{H}_{\text{eff}}/k\tilde{T}}}{\tilde{Z}} \quad \text{où} \quad \hat{H}_{\text{eff}} = \frac{\hat{p}^2}{2\tilde{m}} + \frac{\tilde{m}^2\Omega^2}{2}\hat{q}^2 \quad (3.81)$$

³un renversement du temps change p en $-p$ et π_i en $-\pi_i \forall i$ laisse invariant l'hamiltonien.

ici \tilde{m} a la dimension d'une masse, \tilde{T} celle d'une température et \tilde{Z} est sans dimension. Cette écriture fait ressortir l'analogie entre $\hat{\sigma}$ et un état de Gibbs à température \tilde{T} d'un oscillateur harmonique de fréquence Ω et de masse \tilde{m} . Ce choix de la définition des coefficients n'est pas standard (cf. [25, 24]) et mérite quelques explications. Pour déterminer un état de Gibbs pour un oscillateur nous utilisons trois paramètres : sa pulsation, sa masse et sa température (hors coefficient de normalisation). Or ici que deux des paramètres sont indépendants (le préfacteur \tilde{Z} est déterminé par la normalisation), donc nous avons à faire un choix dans la définition. Ici, nous utilisons comme paramètre pour la pulsation, la vraie pulsation Ω de la particule. Ce choix à priori arbitraire est naturel parce que l'hamiltonien effectif qu'il définit a le même spectre que l'hamiltonien de la particule. De plus, la pulsation est un invariant canonique ; il existe donc une transformation canonique permettant de passer de l'hamiltonien de la particule \hat{H}_{part} à l'hamiltonien effectif \hat{H}_{eff} . Finalement, avec ce choix, les coefficients \tilde{T} (température effective) et \tilde{m} (la masse effective) sont définis de façon unique. Pour déterminer complètement $\hat{\sigma}$, il ne reste plus qu'à trouver leurs valeurs respectives. En utilisant les relations courantes pour un oscillateur harmonique, nous pouvons les relier à la valeur de $\langle q^2 \rangle$ et de $\langle p^2 \rangle$:

$$\langle q^2 \rangle = \text{tr } \hat{q}^2 \hat{\sigma} = \frac{\hbar}{2\tilde{m}\Omega} \coth \frac{\hbar\Omega}{2k\tilde{T}} \quad (3.82)$$

$$\langle p^2 \rangle = \text{tr } \hat{p}^2 \hat{\sigma} = \frac{\hbar\tilde{m}\Omega}{2} \coth \frac{\hbar\Omega}{2k\tilde{T}} \quad (3.83)$$

En prenant le produit et le quotient de $\langle p^2 \rangle$ par $\langle q^2 \rangle$, on obtient :

$$k\tilde{T} = \frac{\hbar\Omega}{2} \frac{1}{\text{Argth} \sqrt{\frac{\hbar^2}{4\langle q^2 \rangle \langle p^2 \rangle}}} \quad (3.84)$$

$$\tilde{m} = \sqrt{\frac{\langle p^2 \rangle}{\Omega^2 \langle q^2 \rangle}} \quad (3.85)$$

En utilisant la condition de normalisation de $\hat{\sigma}$ on trouve :

$$\tilde{Z} = \frac{1}{2 \text{sh} \frac{\hbar\Omega}{2k\tilde{T}}} \quad (3.86)$$

Comme $\langle q^2 \rangle$ et $\langle p^2 \rangle$ on déjà été obtenus par la méthode de la résolvante (éq. 3.75 et éq. 3.77) alors $\hat{\sigma}$ est complètement déterminée (à condition de savoir calculer les intégrales dans les équations 3.75 et 3.77).

3.3.1 Interprétation physique – exemple

La “température effective” \tilde{T} est à priori différente de la température réelle T à cause du couplage entre la particule et l'environnement. De même \tilde{m} diffère de la masse de la particule. En particulier, nous allons voir que nous pouvons avoir $\tilde{T} > 0$ même lorsque

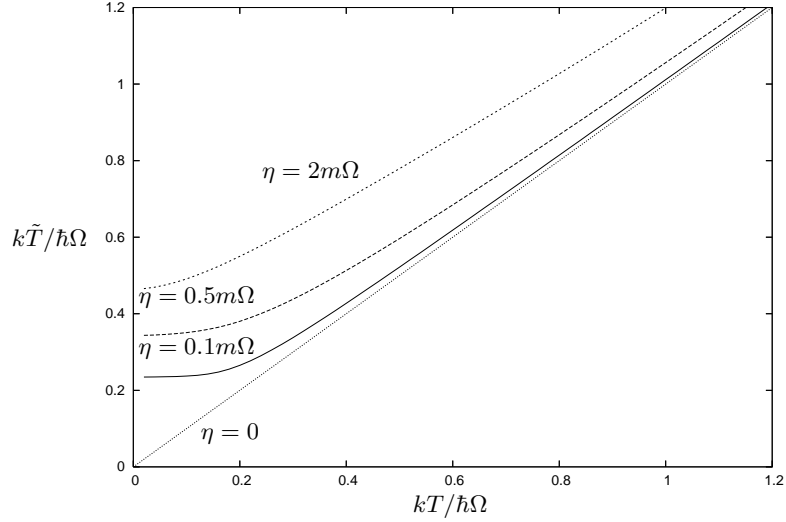


FIG. 3.1 – Température effective \tilde{T} en fonction de la température réelle T , tracée pour différentes valeurs du couplage particule-environnement η .

la température réelle T est nulle. L'écriture de $\hat{\sigma}$ comme un état de Gibbs suggère que \tilde{T} traduit les effets thermiques “effectifs” (fluctuations, état de mélange statistique).

À titre d'exemple, considérons un environnement ohmique avec une fréquence de coupure. Il est défini par la densité de masse suivante :

$$\mu(\omega) = \begin{cases} 2\eta/\pi\omega^2 & \text{si } \omega < \Omega_c \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.87)$$

La fréquence de coupure Ω_c est supposée grande devant la fréquence Ω de la particule. Dans ce cas, \tilde{T} et \tilde{m} peuvent être obtenus explicitement en calculant les intégrales de l'éq. 3.75 et 3.77, cf. [17, 24]. Nous avons tracé sur la fig. 3.1 la dépendance de la température effective $\tilde{T}(T)$ en fonction de la température réelle T pour différentes valeurs du couplage η entre la particule et l'environnement. Lorsque $\eta = 0$ (absence d'environnement) $\tilde{T} = T$; au fur et à mesure que le couplage augmente la température effective croît. L'effet est le plus visible à $T = 0$ lorsque l'ensemble particule-environnement est dans son état fondamental. En ce sens, on peut dire que même à température nulle, la particule subit des effets thermiques effectifs. Ces derniers sont d'autant plus importants que le couplage avec l'environnement est fort. À température strictement nulle, un développement en η autour de zéro donne l'ordre de grandeur de ces effets :

$$k\tilde{T}(0) \sim \frac{\hbar\Omega}{2} \times \frac{2}{\ln(2\pi/\gamma)} \quad (3.88)$$

où $\gamma = \frac{\eta}{m\Omega} \ln(\Omega_c/\Omega)$

On remarque que l'effet est nul lorsque $\hbar = 0$, c'est donc un effet purement quantique. De même, nous avons tracé sur la fig. 3.2 la masse effective $\tilde{m}(T)$ en fonction de la température

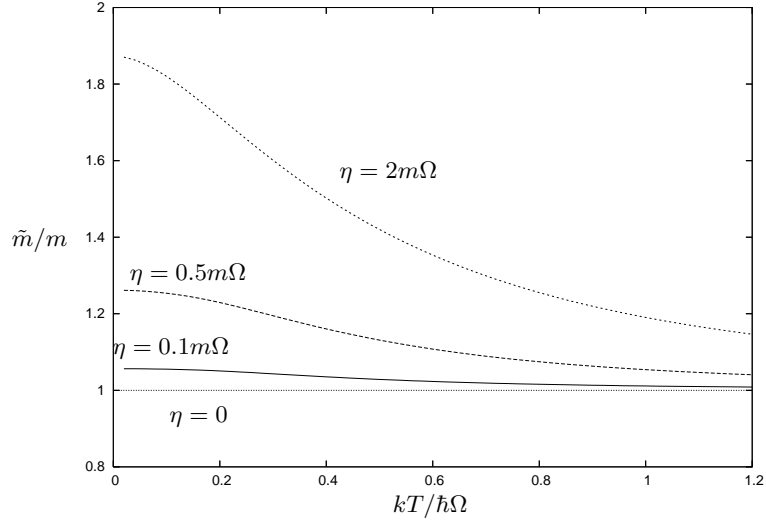


FIG. 3.2 – La masse effective \tilde{m} fonction de la température réelle T , tracée pour différentes valeurs du couplage particule-environnement η .

pour différentes valeurs du couplage particule-environnement η . À température $T = 0$ un développement en η donne :

$$\tilde{m}(0) \sim m (1 + \gamma/\pi) \quad (3.89)$$

Enfin, nous avons supposé que la fréquence de coupure Ω_c de l’environnement était grande devant Ω . Or les quantités qu’on a calculés ci-dessus dépendent de Ω_c , voir même divergent lorsque $\Omega_c/\Omega \rightarrow \infty$. Cependant ceci n’est pas “gênant”, dans le chapitre 6 nous verrons sur un exemple que Ω_c a un sens physique précis et reste fini.

3.3.2 Entropie partielle

L’entropie d’un système dont l’état est donnée par l’opérateur densité $\hat{\rho}$ est définie comme suit :

$$S = -k \operatorname{tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \quad (3.90)$$

Intuitivement, pour un système classique, l’entropie traduit le manque d’information [32, 31] que l’état du système présente. Une entropie nulle correspond à un état qui détermine complètement le système et une entropie grande correspond à un état qui décrit “mal” ce dernier. En mécanique quantique, l’entropie traduit le “degré de mélange statistique” de l’état : un état pur (cohérent) correspond à une entropie nulle et un mélange statistique (incohérent) correspond à une entropie strictement positive. En ce sens, l’entropie est liée à la cohérence quantique et on pourrait l’interpréter comme un manque d’information sur “la phase”. Plus concrètement, on peut se demander quelle est l’entropie de la particule lorsqu’elle est couplée à un environnement. Pour cela, nous allons calculer l’entropie réduite

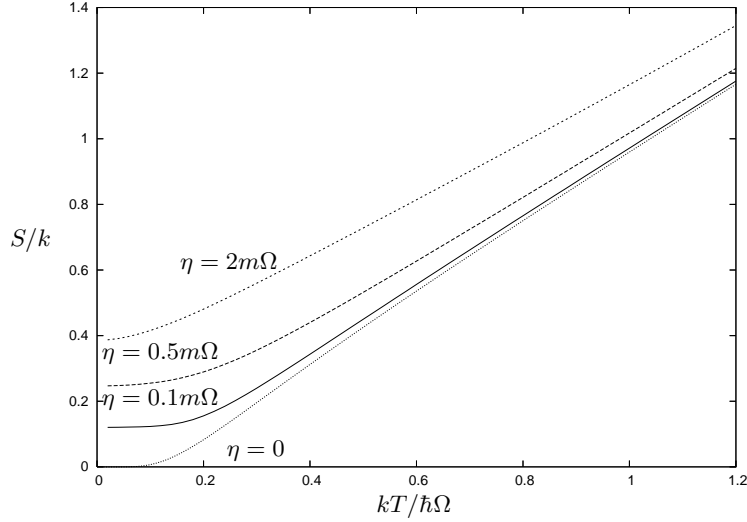


FIG. 3.3 – L'entropie S de la particule fonction de la température réelle T , tracée pour différentes valeurs du couplage particule-environnement η .

de la particule définie par :

$$S = -k \operatorname{tr}(\hat{\sigma} \ln \hat{\sigma}) \quad (3.91)$$

où $\hat{\sigma}$ est l'opérateur densité réduit de la particule considéré dans la section précédente, éq. 3.81. Remarquons que la définition de l'entropie ne dépend pas d'un choix particulier ; contrairement à \tilde{T} et \tilde{m} elle s'exprime uniquement en fonction de l'opérateur densité de la particule (et donc celui du système total). Comme il s'agit d'un état de Gibbs pour un oscillateur harmonique effectif, on peut relier⁴ facilement l'entropie à ses paramètres effectifs :

$$\frac{S}{k} = \frac{\hbar\Omega}{2k\tilde{T}} \coth\left(\frac{\hbar\Omega}{2k\tilde{T}}\right) - \ln\left(2 \operatorname{sh}\frac{\hbar\Omega}{2k\tilde{T}}\right) \quad (3.92)$$

Sur la fig. 3.3 nous avons tracé l'entropie de la particule en fonction de la température réelle pour différentes valeurs du couplage η avec l'environnement. On constate qu'à température nulle la particule a une entropie résiduelle qui croît avec le couplage. Malgré l'apparence, ceci ne contredit pas le troisième principe⁵ de la thermodynamique, en effet en mécanique statistique on néglige souvent le couplage entre le système étudié et l'environnement. Cette approximation est bonne lorsque l'énergie typique liée au couplage est négligeable devant l'énergie thermique, c'est à dire lorsque $T \gg \tilde{T}(0)$.

⁴en utilisant les relations courantes sur l'oscillateur harmonique

⁵à température nulle l'entropie d'équilibre de tout système est nulle.

3.4 Conclusion

À l'aide d'une décomposition en modes normaux du système total (ensemble particule et environnement), nous avons calculé l'opérateur densité réduit de la particule lorsque l'opérateur densité de l'ensemble est un état de Gibbs à température T . Les effets thermiques "effectifs" qu'induit l'environnement sur la particule persistent même à température nulle.

Dans le chapitre suivant nous allons transposer cette même approche au problème dépendant du temps.

Chapitre 4

Décohérence dans l'évolution en temps

4.1 Introduction

Dans le chapitre précédent nous avons utilisé la méthode de la résolvante réduite pour étudier l'état d'équilibre de l'ensemble particule et environnement. Dans cette partie, on se propose d'étendre cette approche à l'étude de l'évolution en temps de ce même système.

Nous allons, donc, considérer l'évolution du système complet (particule et environnement) puis nous allons étudier l'opérateur densité réduit de la particule en traçant sur les degrés de liberté de l'environnement. Nous allons voir que la méthode de la résolvante réduite nous permet de faire cette étude hors-équilibre. Le calcul qui va suivre est inspiré des réfs. [6, 8, 7].

4.1.1 Représentation de Heisenberg

Considérons toujours le même modèle, dont on rappelle l'hamiltonien :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2}\hat{q}^2 + \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\hat{\pi}_i^2}{2\mu_i} + \frac{\mu_i\omega_i^2}{2}(\hat{\varphi}_i - \hat{q})^2 \right\} \quad (4.1)$$

L'ensemble total (particule et environnement) est considéré comme un système isolé. Son état $\hat{\rho}(t)$ obéit à l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (4.2)$$

On peut toujours écrire la solution à cette équation sous cette forme :

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}(0)\hat{U}^\dagger(t) \quad (4.3)$$

où $\hat{U}(t)$ est l'opérateur évolution à l'instant t . La valeur moyenne de toute observable \hat{A} dépend aussi du temps et peut s'écrire :

$$\langle A \rangle (t) = \text{tr}[\hat{A}\hat{\rho}(t)] \quad (4.4)$$

$$= \text{tr}[\hat{A}\hat{U}(t)\hat{\rho}(0)\hat{U}^+(t)] \quad (4.5)$$

$$= \text{tr}[\hat{U}^+(t)\hat{A}\hat{U}(t)\hat{\rho}(0)] \quad (4.6)$$

Par commodité, nous pouvons transférer la dépendance en temps sur les observables en posant :

$$\hat{A}(t) = \hat{U}^+(t)\hat{A}\hat{U}(t) \quad \text{avec} \quad \hat{A}(0) = \hat{A} \quad (4.7)$$

Alors les valeurs moyennes des observables s'obtiennent par :

$$\langle A \rangle (t) = \text{tr}(\hat{A}(t)\hat{\rho}(0)) \quad (4.8)$$

L'évolution des observables est donnée par une équation analogue à l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d\hat{A}}{dt} = [\hat{A}, \hat{H}] \quad (4.9)$$

Dans cette représentation (représentation de Heisenberg) l'état du système ne dépend pas du temps $\hat{\rho} = \hat{\rho}(0)$, contrairement aux observables. Dans suite nous allons toujours nous placer dans cette représentation. Toutes les observables dépendent du temps.

4.1.2 Évolution dans le temps

L'équation du mouvement du système particule plus environnement s'obtient en appliquant l'éq. 4.9. On obtient le système suivant :

$$\frac{d\hat{q}}{dt} = \frac{\hat{p}}{m} \quad \frac{d\hat{p}}{dt} = -m\Omega^2\hat{q} + \sum_{i=1}^N \mu_i\omega_i^2(\hat{\varphi}_i - \hat{q}) \quad (4.10)$$

$$\frac{d\hat{\varphi}_i}{dt} = \frac{\hat{\pi}_i}{\mu_i} \quad \frac{d\hat{\pi}_i}{dt} = -\mu_i\omega_i^2(\hat{\varphi}_i - \hat{q}) \quad (4.11)$$

Il est très analogue aux système d'équations classiques, cf. éq. 1.26. Utilisons les notations vectorielles du chapitre précédent (éq. 3.20, page 24). Alors on obtient une forme compacte des équations du mouvement :

$$\frac{d}{dt}|Q\rangle = |P\rangle \quad (4.12)$$

$$\frac{d}{dt}|P\rangle = -A^2|Q\rangle \quad (4.13)$$

Qu'on peut réécrire en éliminant $|P\rangle$ et on obtient un équation du second ordre en temps :

$$\frac{d^2}{dt^2}|Q\rangle + A^2|Q\rangle = 0 \quad (4.14)$$

Cette équation (linéaire) suggère de considérer les techniques de “réponse linéaire” pour la résoudre. Prenons la transformée de Laplace (par rapport au temps) de $|Q\rangle(t)$:

$$|\Xi\rangle(z) = \int_0^\infty |Q\rangle(t)e^{-zt} dt \quad (4.15)$$

Elle est définie pour $\mathcal{R}e(z) > 0$. L'équation du mouvement s'écrit :

$$z^2|\Xi\rangle + A^2|\Xi\rangle = z|Q_0\rangle + |P_0\rangle \quad (4.16)$$

où $|Q_0\rangle$ et $|P_0\rangle$ désignent les conditions initiales pour $t = 0$, il s'agit des vecteurs-colonnes des opérateurs position et impulsion au sens de Schrödinger. Il s'agit d'une équation algébrique dont la solution s'écrit :

$$|\Xi\rangle = \frac{1}{z^2 + A^2} \{z|Q_0\rangle + |P_0\rangle\} \quad (4.17)$$

On pose :

$$R(z) = \frac{1}{z^2 + A^2} \quad (4.18)$$

On reconnaît la résolvante de A , qu'on avait introduite dans l'étude de l'état d'équilibre (chapitre 3, éq. 3.42, page 25). Pour revenir en représentation temps, on utilise la transformée de Laplace inverse, notons $K(t)$ l'original de $R(z)$. Ainsi :

$$|Q\rangle(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_\Delta |\Xi\rangle(z)e^{zt} dz \quad (4.19)$$

L'intégration porte sur n'importe quel axe Δ parallèle à l'axe imaginaire, tel que tous les pôles de $R(z)$ soient “laissés à gauche”. Comme A^2 n'a que des valeurs propres réelles, Δ doit traverser l'axe réel dans la partie positive. Mais il est souvent plus simple d'essayer d'identifier une transformée de Laplace connue plutôt que de calculer explicitement l'intégrale ci-dessus. On trouve :

$$K(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_\Delta R(z)e^{zt} dz = A^{-1} \sin At \quad (4.20)$$

La solution de l'éq. 4.14 est donc :

$$|Q\rangle(t) = \int_0^t K(t - \tau) [\delta'(\tau)|Q_0\rangle + \delta(\tau)|P_0\rangle] d\tau \quad (4.21)$$

4.2 Résolvante réduite

4.2.1 Définition, notations

Intéressons-nous à l'évolution en temps des observables de la particule comme $\hat{q}(t)$ et $\hat{p}(t)$. Obtenir l'évolution de l'opérateur $\hat{q}(t)$ (et donc de sa dérivée $\hat{p} = m \hat{dq}/dt$) va nous

permettre de calculer la valeur moyenne de n'importe quelle autre observable réduite. Pour obtenir la trajectoire $\hat{q}(t)$ multiplions à gauche l'éq. 4.19 par $(0|$, on trouve :

$$\sqrt{m}\hat{q}(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Delta} (0|\Xi)(z) e^{zt} dz \quad (4.22)$$

Le calcul se fait en deux étapes : expliciter $(0|\Xi)(z)$ puis trouver sa transformée de Laplace inverse. D'après éq. 4.17 :

$$(0|\Xi) = (0|R|0) \left\{ zq(0)\sqrt{m} + p(0)/\sqrt{m} \right\} \quad (4.23)$$

$$+ \sum_{i \geq 1} (0|R|i) \left\{ z\varphi_i(0)\sqrt{\mu_i} + \pi_i(0)/\sqrt{\mu_i} \right\} \quad (4.24)$$

Nous avons besoin des expressions $(0|R|0)$ et $(0|R|i)$, déjà obtenues dans le chapitre 3. On rappelle les éq. 3.53 et éq. 3.55 :

$$(0|R|0) = \frac{1}{z^2 + \Omega^2 + z^2 \sum \frac{\omega_i^2 \mu_i / m}{z^2 + \omega_i^2}} \quad (4.25)$$

$$(k|R|0) = \sqrt{\frac{\mu_k}{m}} \frac{\omega_k^2}{z^2 + \omega_k^2} (0|R|0) \quad (4.26)$$

On rappelle que $r(z)$ définie comme $r(z) = (0|R(z)|0)$ est la résolvante réduite de la matrice A . Elle n'est définie que pour $\mathcal{R}e(z) > 0$ et elle est analytique. Avant de faire le calcul de la trajectoire $\hat{q}(t)$, nous allons nous arrêter sur le comportement de $r(z)$.

4.2.2 Exemple (cas ohmique)

Considérons la limite continue du modèle selon la même procédure que dans le chapitre 3. Dans ce cas les oscillateurs de l'environnement forment un continuum ; on peut les indexer par leur pulsation ω ; leur distribution de masse est donnée par la fonction $\mu(\omega)$ telle que $\mu(\omega) d\omega$ soit la masse des oscillateurs de pulsation comprise entre ω et $\omega + d\omega$. L'environnement ohmique qu'on considère à titre d'exemple, est caractérisé par une constante de friction η . La distribution de masse (qui décrit totalement l'environnement) a la forme particulière suivante :

$$\mu(\omega) = \frac{2\eta}{\pi\omega^2} \quad (4.27)$$

Dans ce cas, pour $\mathcal{R}e(z) > 0$ on a :

$$z^2 \sum_{i \geq 1} \frac{\omega_i^2 \mu_i / m}{z^2 + \omega_i^2} \longrightarrow z^2 \frac{2\eta}{\pi m} \int_0^\infty \frac{1}{z^2 + \omega^2} d\omega = z \frac{\eta}{m} \quad (4.28)$$

Finalement :

$$r(z) = \frac{1}{z^2 + \Omega^2 + z\eta/m} \quad (4.29)$$

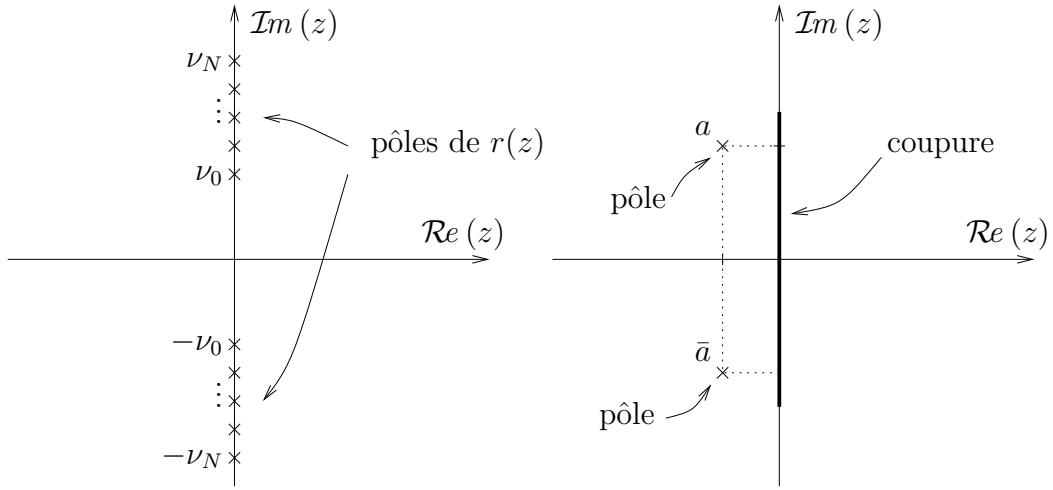


FIG. 4.1 – pôles de la résolvante réduite $r(z)$ dans le cas où l’environnement est discret (à gauche) et dans le cas où l’environnement est continu (à droite).

C’est bien une fonction analytique pour $\mathcal{R}e(z) > 0$, mais on peut dire mieux ; les pôles de $r(z)$ sont aux points :

$$a_{\pm} = -\frac{\eta}{2m} \pm i\sqrt{\Omega^2 - \frac{\eta^2}{4m^2}} \quad (4.30)$$

ce qui montre que dans cet exemple particulier, on peut prolonger analytiquement $r(z)$ sur le domaine $\mathcal{R}e(z) > -\eta/2m$. Ce domaine comprend l’axe imaginaire qui dans le cas discret contenait tous les pôles de $r(z)$.

4.2.3 Prolongement analytique de la résolvante réduite

Lorsque les oscillateurs de l’environnement forment un ensemble discret, les pôles de $r(z)$ sont tous sur l’axe imaginaire. En effet, si $r(z)$ a un pôle, alors c’est forcément un pôle de $R(z)$. Or, d’après les éq. 4.18 et 3.26, $R(z)$ à $2N$ pôles tous de la forme $\pm i\nu_j$. Il n’en est plus ainsi, lorsqu’on passe à la limite continue. Dans ce cas, l’inverse de la résolvante réduite s’écrit :

$$r^{-1}(z) = z^2 + \Omega^2 + \frac{z^2}{m} \int_0^{\infty} \frac{\mu(\omega)\omega^2}{z^2 + \omega^2} d\omega, \quad \mathcal{R}e(z) > 0 \quad (4.31)$$

Nous allons suivre une approche analogue à celle dans le livre de P. Exner [9]. Plaçons nous près de l’axe imaginaire en posant $z = iu \pm \gamma$ puis en prenant la limite $\gamma \rightarrow 0$. Utilisons la formule :

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{(iu \pm \gamma)^2 + \omega^2} = \text{vp} \frac{1}{-u^2 + \omega^2} \mp \frac{i\pi}{2\omega} [\delta(u - \omega) - \delta(u + \omega)] \quad (4.32)$$

On trouve :

$$r^{-1}(iu \pm 0) = -u^2 + \Omega^2 - \Delta \pm iu\Gamma \quad (4.33)$$

où on a posé :

$$\begin{aligned}\Delta(u) &= \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{u^2/m}{-u^2 + \omega^2} \mu(\omega) \omega^2 d\omega \\ \Gamma(u) &= \frac{\pi u^2}{2m} \mu(|u|)\end{aligned}$$

Telle que définie, $r(z)$ présente une discontinuité sur l'axe imaginaire (elle fait un saut de $2iu\Gamma$), mais ce n'est pas un problème puisqu'on ne l'avait définie que pour $\mathcal{Re}(z) > 0$, voir fig. 4.1. Cependant, lorsque $u\Gamma(u) > 0$, on peut prolonger analytiquement sur l'axe imaginaire en posant :

$$r^{-1}(z) = \begin{cases} z^2 + \Omega^2 + \frac{z^2}{m} \int_0^\infty \frac{\mu(\omega)\omega^2}{z^2 + \omega^2} d\omega & \text{si } \mathcal{Re}(z) > 0 \\ z^2 + \Omega^2 - \frac{z^2}{m} \int_0^\infty \frac{\mu(\omega)\omega^2}{z^2 + \omega^2} d\omega & \text{si } \mathcal{Re}(z) < 0 \end{cases} \quad (4.34)$$

Ce prolongement sera très utile pour la suite.

4.2.4 Pôles de la résolvante réduite

On sait que pour $\mathcal{Re}(z) > 0$, $r(z)$ n'a pas de pôles, il reste comme possibilité l'axe imaginaire et le domaine $\mathcal{Re}(z) < 0$. Une fois prolongée analytiquement, $r(z)$ peut être écrite sur l'axe imaginaire :

$$r^{-1}(iu) = -u^2 + \Omega^2 - \Delta + iu\Gamma \quad (4.35)$$

Une condition suffisante pour que $r(z)$ n'y ait pas de pôles est que $\omega^2\mu(\omega)$ soit strictement positive. En effet, dans ce cas $iu\Gamma$ est non-nul pour $u \neq 0$, mais lorsque $u = 0$ la partie réelle de r^{-1} vaut Ω^2 . Par exemple, c'est le cas pour l'environnement ohmique, ci-dessus. Remarquons enfin que si z est un pôle alors \bar{z} l'est aussi.

4.3 Application à la trajectoire $\hat{q}(t)$

En injectant les éq. 4.25 et 4.26 dans l'éq. 4.23 puis l'éq. 4.23 dans l'éq. 4.22 on obtient l'expression de la trajectoire $q(t)$ comme la transformée de Laplace inverse d'une expression :

$$\hat{q}(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Delta} r(z) \underbrace{\left[z\hat{q}(0) + \frac{\hat{p}(0)}{m} + \sum_{i \geq 1} \frac{\mu_i \omega_i^2 / m}{z^2 + \omega_i^2} \left(z\hat{\varphi}_i(0) + \frac{\hat{\pi}_i(0)}{\mu_i} \right) \right]}_{\text{transformée de Laplace de } q(t)} e^{zt} dz \quad (4.36)$$

Appelons $k(t)$ l'original (transformée de Laplace inverse) de $r(z)$. Utilisons les formules suivantes au sens des distributions pour trouver $q(t)$.

$$\begin{aligned} f(t) &\longrightarrow \mathcal{L}[f](z) \\ f * g = \int_0^t f(t-\tau)g(\tau) d\tau &\longrightarrow \mathcal{L}[f] \mathcal{L}[g] \\ f'(t) &\longrightarrow z \mathcal{L}[f](z) \\ \sin \omega t &\longrightarrow \frac{\omega}{z^2 + \omega^2} \\ \cos \omega t &\longrightarrow \frac{z}{z^2 + \omega^2} \end{aligned}$$

On trouve :

$$\hat{q}(t) = \hat{q}(0)k'(t) + \frac{\hat{p}(0)}{m}k(t) + \frac{1}{m}k * \sum_{i \geq 1} \left(\hat{\varphi}_i(0) \cos \omega_i t + \frac{\hat{\pi}_i(0)}{\mu_i \omega_i} \sin \omega_i t \right) \mu_i \omega_i^2 \quad (4.37)$$

Cette expression est valable en mécanique classique comme en mécanique quantique. En effet, on n'a fait que des opérations linéaires en \hat{q} , \hat{p} , $\hat{\varphi}_i$ et $\hat{\pi}_i$. Dans le cas quantique, $\hat{q}(0)$, $\hat{p}(0)$, $\hat{\varphi}_i(0)$ et $\hat{\pi}_i(0)$ désignent les opérateurs canoniques en représentation de Schrödinger et $q(t)$, $p(t)$, $\varphi_i(t)$ et $\pi_i(t)$ désignent leurs représentations de Heisenberg à l'instant t . En mécanique classique, $q(t)$, $p(t)$, $\varphi_i(t)$, $\pi_i(t)$ désignent la trajectoire de la particule et des oscillateurs de l'environnement. Par la même méthode on peut trouver $\hat{p}(t)$, mais il est plus simple d'utiliser le fait que $\hat{p} = m d\hat{q}/dt$. On trouve :

$$\hat{p}(t) = \hat{p}(0)k'(t) + m\hat{q}(0)k''(t) + k * \sum_{i \geq 1} \left(\frac{\hat{\pi}_i(0)}{\mu_i} \cos \omega_i t - \hat{\varphi}_i(0)\omega \sin \omega_i t \right) \mu_i \omega_i^2 \quad (4.38)$$

4.3.1 Exemple (cas ohmique)

En pratique il ne reste plus qu'à déterminer la fonction $k(t)$. Dans le cas ohmique on peut le faire en inversant directement l'expression de $r(z)$, éq. 4.29, on trouve :

$$k(t) = Y(t) \frac{e^{-\frac{\eta t}{2m}} \sin \sqrt{\Omega^2 - \frac{\eta^2}{4m^2}} t}{\sqrt{\Omega^2 - \frac{\eta^2}{4m^2}}} \quad (4.39)$$

où $Y(t)$ est définie par :

$$Y(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t < 0 \\ 1 & \text{si } t > 0 \end{cases} \quad (4.40)$$

4.3.2 Allure de $k(t)$ dans la limite continue

Plaçons nous dans la limite continue du modèle et supposons que $r(z)$ n'ait pas de pôles (par exemple si $\omega^2 \mu(\omega) > 0$). Dans ce cas on peut trouver un réel positif γ tel que dans

le domaine $\mathcal{Re}(z) > -\gamma$, la résolvante $r(z)$ n'ait pas de pôles. Par ailleurs écrivons $k(t)$ comme la transformée de Laplace inverse de $r(z)$:

$$k(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Delta} r(z) e^{zt} dz \quad (4.41)$$

où Δ est n'importe quelle droite parallèle à l'axe imaginaire tel que tous les pôles de $r(z)$ soient à gauche de Δ . On peut donc prendre Δ tel qu'il coupe l'axe réel en $-\gamma$, c'est à dire z de la forme $z = iu - \gamma$. Dans ce cas l'expression de $k(t)$ s'écrit comme la transformée de Fourier inverse suivante :

$$k(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} r(iu - \gamma) e^{iut} du \times e^{-\gamma t} \quad (4.42)$$

Or, en tant que fonction de u , $r(iu - \gamma)$ est indéfiniment dérivable, donc sa transformée de Fourier inverse décroît exponentiellement lorsque $t \rightarrow +\infty$. Donc $k(t)$ décroît plus vite que $e^{-\gamma t}$. Le cas ohmique ci-dessus l'illustre bien : $\gamma = \eta/m$

De manière plus générale lorsque $\omega^2 \mu(\omega) > 0$ les pôles de $r(z)$ sont de partie réelle strictement négative, alors, la décroissance de $k(t)$ est exponentielle. Dans le cas contraire, il peut arriver que $r(z)$ ait un pôle imaginaire, alors il n'existe pas de réel γ , la décroissance (si décroissance) ne peut pas être exponentielle.

4.4 Application à $\langle q^2 \rangle(t)$, $\langle p^2 \rangle(t)$ et $\langle qp + pq \rangle(t)$

4.4.1 Hypothèses – état initial

On va s'intéresser typiquement au problème suivant : pour $t < 0$ la particule et l'environnement ne sont pas couplés et évoluent indépendamment. L'hamiltonien du système est alors :

$$H_{t<0} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2} q^2 + \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\pi_i^2}{2\mu_i} + \frac{\mu_i \omega_i^2}{2} \varphi_i^2 \right\} \quad (4.43)$$

À l'instant $t = 0^-$ l'état de l'ensemble est le produit de l'état de la particule par l'état de l'environnement (ils sont statistiquement indépendants). Ensuite, à l'instant $t = 0$ on branche le couplage, alors l'hamiltonien du problème devient celui donné par l'éq. 4.1. On laisse évoluer le système et on se demande quel est son état à un instant $t > 0$, surtout à la limite $t \rightarrow \infty$. On s'intéresse plus particulièrement à l'état de la particule, obtenu en prenant la trace sur l'environnement de l'état du système total.

État de l'environnement

On suppose qu'à l'instant $t = 0^-$ l'environnement est dans un état tel que pour chaque oscillateur de l'environnement, l'énergie soit équirépartie dans la position et l'impulsion

(par exemple, c'est le cas d'un état de Gibbs). Formellement, pour le i -ème oscillateur, cela se traduit par :

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\mu_i} \langle \pi_i \pi_i \rangle &= \frac{\mu_i \omega_i^2}{2} \langle \varphi_i \varphi_i \rangle = \frac{\epsilon_i}{2} \\ \langle \varphi_i \pi_i \rangle &= \langle \pi_i \varphi_i \rangle = 0 \\ \langle \varphi_i \rangle &= \langle \pi_i \rangle = 0\end{aligned}$$

Où ϵ_i est l'énergie moyenne du i -ème oscillateur. La façon dont ϵ_i dépend de ω_i détermine le problème physique qu'on étudie ; par exemple :

| expression de ϵ_i | sens physique de l'état |
|---|---|
| $\epsilon_i = \frac{1}{\beta}$ | état de Gibbs à température $1/\beta$ pour le problème classique |
| $\epsilon_i = \frac{\hbar\omega_i}{2}$ | état fondamental de l'environnement pour le problème quantique |
| $\epsilon_i = \frac{\hbar\omega_i}{2} \coth \frac{\beta\hbar\omega_i}{2}$ | état de Gibbs à température $1/\beta$ pour le problème quantique |
| $\epsilon_i = \frac{1}{\beta_i}$ | état où chaque oscillateur de l'environnement est dans un état de Gibbs, mais où tous les oscillateurs ne sont pas à la même température. |

Comme l'environnement est composé d'un ensemble d'oscillateurs indépendants, on va supposer leurs état statistiquement indépendants :

$$\begin{aligned}\langle \varphi_i \varphi_j \rangle &= \frac{\epsilon_i}{\mu_i \omega_i^2} \times \delta_{ij} \\ \langle \pi_i \pi_j \rangle &= \mu_i \epsilon_i \times \delta_{ij} \\ \langle \varphi_i \pi_j \rangle &= 0\end{aligned}$$

État de la particule

On suppose que l'état initial de la particule (à l'instant $t = 0^-$) est quelconque. Dans la suite on va s'intéresser qu'aux premiers moments de la position et de l'impulsion de la particule, on va donc juste supposer $\langle q^2 \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ et $\langle pq + qp \rangle$ donnés. De plus comme pour $t < 0$ l'évolution de la particule et de l'environnement sont indépendantes, on va

aussi supposer que leurs états sont statistiquement indépendants à l'instant $t = 0$, ce qui implique que :

$$\langle q\varphi_i \rangle = \langle p\varphi_i \rangle = \langle q\pi_i \rangle = \langle p\pi_i \rangle = 0 \quad (4.44)$$

4.4.2 Calcul de $\langle q^2 \rangle(t)$

Partons de l'éq. 4.37 :

$$\begin{aligned} \langle q^2 \rangle(t) &= \left\langle \left[qk'(t) + \frac{p}{m}k(t) + \frac{k}{m} * \sum_{i \geq 1} \left(\varphi_i \cos \omega_i t + \frac{\pi_i}{\mu_i \omega_i} \sin \omega_i t \right) \mu_i \omega_i^2 \right] \right. \\ &\quad \times \left. \left[qk'(t) + \frac{p}{m}k(t) + \frac{k}{m} * \sum_{j \geq 1} \left(\varphi_j \cos \omega_j t + \frac{\pi_j}{\mu_j \omega_j} \sin \omega_j t \right) \mu_j \omega_j^2 \right] \right\rangle \end{aligned}$$

Utilisons toutes les relations de la section précédente pour annuler tous les termes qui font intervenir des paires d'observables qui ne sont pas des conjuguées canoniques. Ensuite annulons tous les termes de la forme $\langle \varphi_i \pi_j \rangle$. Il reste :

$$\begin{aligned} \langle q^2 \rangle(t) &= k'^2(t) \langle q^2 \rangle + \frac{1}{m} k(t) k'(t) \langle qp + pq \rangle + \frac{1}{m^2} k^2(t) \langle p^2 \rangle \\ &\quad + \frac{1}{m^2} \sum_{i \geq 1} \left[(k * \cos \omega_i t)^2 \langle \varphi_i^2 \rangle + (k * \sin \omega_i t)^2 \frac{\langle \pi_i^2 \rangle}{\mu_i^2 \omega_i^2} \right] \mu_i^2 \omega_i^4 \end{aligned}$$

Dans $\langle q^2 \rangle(t)$, on peut distinguer deux termes : celui qui fait intervenir les observables de la particule (notons le $\langle q^2 \rangle_{\text{intr.}}$) et celui qui fait intervenir les observables de l'environnement (notons le $\langle q^2 \rangle_{\text{env.}}$). À condition de connaître $k(t)$ le terme propre à la particule est facile à calculer. Intéressons-nous au terme propre à l'environnement. Remplaçons y $\langle \varphi_i^2 \rangle$ et $\langle \pi_i^2 \rangle$ par leur valeurs :

$$\begin{aligned} \langle q^2 \rangle_{\text{env.}} &= \frac{1}{m^2} \sum_{i \geq 1} \left[(k * \cos \omega_i t)^2 + (k * \sin \omega_i t)^2 \right] \epsilon_i \mu_i \omega_i^2 \\ &= \frac{1}{m^2} \sum_{i \geq 1} \epsilon_i \mu_i \omega_i^2 \int_0^t \int_0^t k(t - \tau) k(t - \tau') \times \\ &\quad \times [\cos \omega_i(\tau) \cos \omega_i(\tau') + \sin \omega_i(\tau) \sin \omega_i(\tau')] d\tau d\tau' \end{aligned}$$

Finalement on obtient l'expression importante :

$$\langle q^2 \rangle(t) = \langle q_{\text{intr.}}^2 \rangle + \frac{1}{m^2} \sum_{i \geq 1} \epsilon_i \mu_i \omega_i^2 \int_0^t \int_0^t k(\tau) k(\tau') \cos \omega_i(\tau - \tau') d\tau d\tau'$$

De même, on peut obtenir $\langle p^2 \rangle$ et $\langle qp + pq \rangle$. En résumé on a :

$$\langle q^2 \rangle(t) = k'^2 \langle q^2 \rangle + \frac{1}{m} k k' \langle qp + pq \rangle + \frac{1}{m^2} k^2 \langle p^2 \rangle \quad (4.45)$$

$$+ \frac{1}{m^2} \sum_{i \geq 1} \epsilon_i \mu_i \omega_i^2 \int_0^t \int_0^t k(\tau) k(\tau') \cos \omega_i(\tau - \tau') d\tau d\tau' \quad (4.46)$$

$$\langle p^2 \rangle(t) = m^2 k'^2 \langle q^2 \rangle + m k k'' \langle qp + pq \rangle + k^2 \langle p^2 \rangle \quad (4.47)$$

$$+ \sum_{i \geq 1} \epsilon_i \mu_i \omega_i^4 \int_0^t \int_0^t k(\tau) k(\tau') \cos \omega_i(\tau - \tau') d\tau d\tau' \quad (4.48)$$

$$\langle qp + pq^2 \rangle(t) = 2k'k'' \langle q^2 \rangle + (k'^2 + k k'') \langle qp + pq \rangle \frac{2k k'}{m} \langle p^2 \rangle \quad (4.49)$$

Enfin, on remarque que $\langle qp + pq^2 \rangle(t)$ ne dépend pas du choix de ϵ_i . C'est parce que l'état initial de l'environnement est assez particulier.

4.4.3 Limite continue

Comme on l'a vu, dans la limite continue, lorsque $\omega^2 \mu(\omega) > 0$ la décroissance de $k(t)$ est exponentielle. Dans ce cas, les termes de $\langle q^2 \rangle$ qui sont propres à la particule décroissent très vite. Autrement dit la particule "oublie" très vite son état initial; son état pour les temps longs est donc entièrement déterminé par l'état initial de l'environnement.

D'autre part le terme propre à l'environnement converge exponentiellement vite vers la valeur limite suivante, ce qui donne finalement :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle q^2 \rangle(t) = \frac{1}{m^2} \int_0^\infty \epsilon(\omega) \mu(\omega) \omega^2 F(\omega) d\omega \quad (4.50)$$

où on a posé :

$$F(\omega) = \int_0^\infty \int_0^\infty k(\tau) k(\tau') \cos \omega(\tau - \tau') d\tau d\tau' \quad (4.51)$$

4.4.4 Limite $t \rightarrow \infty$

Calculons $F(\omega)$; pour cela écrivons la fonction cosinus comme somme d'exponentielles :

$$\begin{aligned} F(\omega) &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty k(\tau) k(\tau') [e^{i\omega\tau} e^{-i\omega\tau'} + e^{-i\omega\tau} e^{i\omega\tau'}] d\tau d\tau' \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty k(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \int_0^\infty k(\tau') e^{-i\omega\tau'} d\tau' + \frac{1}{2} \int_0^\infty k(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau \int_0^\infty k(\tau') e^{i\omega\tau'} d\tau' \\ &= \frac{1}{2} [r(i\omega)r(-i\omega) + r(-i\omega)r(i\omega)] \end{aligned}$$

En utilisant l'éq. 4.35 on arrive à :

$$F(\omega) = \frac{1}{(-\omega^2 + \Omega^2 - \Delta)^2 + \omega^2 \Gamma^2} \quad (4.52)$$

Ce qui finalement nous conduit à l'expression limite pour $\langle q^2 \rangle$:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle q^2 \rangle(t) = \frac{1}{m^2} \int_0^\infty \frac{1}{(-\omega^2 + \Omega^2 - \Delta)^2 + \omega^2 \Gamma^2} \epsilon(\omega) \mu(\omega) \omega^2 d\omega \quad (4.53)$$

Cette expression est identique à la valeur de $\langle q^2 \rangle$ à l'équilibre (éq. 3.75) discutée dans le chapitre précédent. On peut faire le même raisonnement pour calculer $\langle p^2 \rangle$, on trouve :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle p^2 \rangle (t) = \frac{1}{m^2} \int_0^\infty \frac{\omega^2}{(-\omega^2 + \Omega^2 - \Delta)^2 + \omega^2 \Gamma^2} \epsilon(\omega) \mu(\omega) \omega^2 d\omega \quad (4.54)$$

Enfin, remarquons que comme $\langle qp + pq \rangle (t)$ est proportionnel à $k(t)$ et ses dérivées, on a :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle qp + pq \rangle (t) = 0 \quad (4.55)$$

Remarquons que contrairement à [6], dans cette section nous ne faisons pas d'hypothèse de "couplage faible" entre la particule et environnement. Nous avons uniquement supposé que les pôles du prolongement analytique de la résolvante réduite ont une partie réelle strictement négative.

4.4.5 Exemple (environnement ohmique)

Considérons l'environnement ohmique classique. Dans ce cas on a :

$$\mu(\omega) = \frac{2\eta}{\pi\omega^2} \quad \text{et} \quad \epsilon(\omega) = \frac{1}{\beta} \quad (4.56)$$

Alors on trouve :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle q^2 \rangle (t) = \frac{2\eta}{\pi\beta m^2} \int_0^\infty \frac{1}{(-\omega^2 + \Omega^2)^2 + \omega^2 \eta^2 / m^2} d\omega \quad (4.57)$$

$$= \frac{1}{\beta m \Omega^2} \quad (4.58)$$

$$(4.59)$$

Pour le même environnement, mais dans sa version quantique et il faut prendre comme paramètres :

$$\mu(\omega) = \frac{2\eta}{\pi\omega^2} \quad \text{et} \quad \epsilon(\omega) = \frac{\hbar\omega}{2} \coth \frac{\beta\hbar\omega}{2} \quad (4.60)$$

Alors on trouve :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle q^2 \rangle (t) = \frac{2}{\pi m} \int_0^\infty \frac{\eta/m}{(-\omega^2 + \Omega^2)^2 + \omega^2 \eta^2 / m^2} \frac{\hbar\omega}{2} \coth \frac{\beta\hbar\omega}{2} d\omega \quad (4.61)$$

Résultat identique à celui obtenu dans le chapitre précédent à l'équilibre.

4.5 Évolution de l'état de la particule

4.5.1 Opérateur de Weyl

L'opérateur de Weyl de la particule est défini comme suit :

$$\hat{U}_{xy} = e^{ix\hat{p} + iy\hat{q}} \quad (4.62)$$

où x et y sont réels. Sa valeur moyenne est donc une fonction de x et de y :

$$\langle \hat{U}_{xy} \rangle = \text{tr}(e^{ix\hat{p}+iy\hat{q}}\hat{\rho}) \quad (4.63)$$

elle décrit complètement l'état de la particule (de même que la matrice densité) dans la mesure où on peut en extraire tous les moments de \hat{q} ou de \hat{p} donc de n'importe quelle observable en dérivant $\langle U_{xy} \rangle$. Par exemple :

$$\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial y} \langle \hat{U}_{xy} \rangle_{\substack{x=0 \\ y=0}} = \langle \hat{q} \rangle \quad (4.64)$$

Comme on connaît $\hat{q}(t)$ et $\hat{p}(t)$ (éq. 4.37 et 4.38), on peut calculer $\langle U_{xy} \rangle(t)$. Intéressons-nous à la limite où $t \rightarrow \infty$. Dans ce cas $\hat{q}(t)$ et $\hat{p}(t)$ ne dépendent ni de $\hat{q}(0)$ ni de $\hat{p}(0)$ (puisque $k(t)$ tend exponentiellement vers zéro avec t). Dans ce cas l'opérateur \hat{U}_{xy} ne dépend que des $\hat{\varphi}_i(0)$ et des $\hat{\pi}_i(0)$, donc on peut l'écrire comme $\hat{U}_{xy} = \hat{I} \otimes \hat{W}_{xy}$ où \hat{I} est l'identité de l'espace de Hilbert de la particule et \hat{W}_{xy} n'agit que dans l'espace de Hilbert de l'environnement. Alors la moyenne s'écrit :

$$\langle U_{xy} \rangle = \text{tr}(\hat{I} \otimes \hat{W}_{xy}\hat{\rho}) \quad (4.65)$$

$$= \text{tr}_{\text{env}}(\hat{W}_{xy} \text{tr}_{\text{part}} \hat{\rho}) \quad (4.66)$$

$$= \text{tr}(\hat{W}_{xy}\hat{w}) \quad (4.67)$$

où $\hat{w} = \text{tr}_{\text{part}} \hat{\rho}$ est l'opérateur densité de l'environnement à l'instant $t = 0$. En ce sens, l'état de la particule lorsque $t \rightarrow \infty$ ne dépend que de l'état initial de l'environnement.

4.5.2 Évolution de l'opérateur densité réduit

L'opérateur densité réduit $\hat{\sigma}(t)$ de la particule est défini comme suit :

$$\hat{\sigma}(t) = \text{tr}_{\text{env}}(\hat{\rho}(t)) \quad (4.68)$$

où $\hat{\rho}(t)$ est l'opérateur densité du système complet particule et environnement. Son évolution a été étudiée dans [26] par des techniques d'intégrales de chemin de Feynman [13, 14]. Intéressons-nous au cas particulier où l'état initial est le produit de deux états de Gibbs à température kT , c'est à dire :

$$\hat{\rho}(0) = \frac{e^{-H_{\text{part}}/kT}}{Z_{\text{part}}} \otimes \frac{e^{-H_{\text{env}}/kT}}{Z_{\text{env}}} \quad (4.69)$$

Comme l'hamiltonien du problème est quadratique, $\hat{\sigma}(t)$ est gaussien et on peut le mettre sous la forme :

$$\hat{\sigma}(t) = \frac{1}{Z} e^{\frac{1}{2}(a\hat{q}^2 + b\hat{p}^2 + c(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}))} \quad (4.70)$$

Cet état est déterminé par la donnée de $\langle q^2 \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ et $\langle qp + pq \rangle$. À la limite où $t \rightarrow \infty$, nous avons vu que ces quantités tendent vers leur valeur à l'équilibre éq. 4.53 et 4.54 identiques

à celles du chapitre 3. Il s'en suit qu'à la limite $t \rightarrow \infty$, $\hat{\sigma}(t)$ tend vers l'état d'équilibre $\hat{\sigma}_\beta$ étudié dans le chapitre 3 (nous ajoutons l'indice β pour le distinguer de l'état dépendant du temps). Mais d'après la section précédente, l'état final de la particule ne dépend que de l'état initial de l'environnement, on en déduit que quelque soit l'état initial de la particule :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \hat{\sigma}(t) = \hat{\sigma}_\beta \quad (4.71)$$

où $\hat{\sigma}_\beta$ est l'opérateur densité réduit à l'équilibre étudié dans le chapitre 3. Rappelons que lors de l'étude de l'état d'équilibre, l'opérateur densité de l'ensemble était un état de Gibbs :

$$\hat{\rho}_\beta = \frac{1}{Z} e^{-\hat{H}/kT} \quad (4.72)$$

c'est un état stationnaire. Nous avons calculé $\hat{\sigma}_\beta = \text{tr}_{\text{env}} \hat{\rho}_\beta$. Dans le présent chapitre la situation est toute autre : lors du calcul de $\langle q^2 \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ et $\langle qp + pq \rangle$ nous avons fait l'hypothèse qu'à l'instant $t = 0$ l'état du système total $\hat{\rho}(0)$ est tel que :

$$\hat{w}(0) \stackrel{\text{def}}{=} \text{tr}_{\text{part}} \hat{\rho}(0) = \frac{1}{Z_{\text{env}}} e^{-\hat{H}_{\text{env}}/kT} \quad (4.73)$$

$$\hat{\sigma}(0) \stackrel{\text{def}}{=} \text{tr}_{\text{env}} \hat{\rho}(0) \quad \text{est quelconque} \quad (4.74)$$

Nous voyons que $\hat{\sigma}(t)$ converge vers $\hat{\sigma}_\beta$, sans pour autant que $\hat{\rho}(t)$ converge vers un état particulier. En effet l'ensemble total (particule et environnement) est un système fermé, et son évolution est donc unitaire. Comme l'état initial n'est pas stationnaire, le système total n'atteint jamais d'équilibre.

4.5.3 Évolution de l'entropie de la particule

Reprenons le cas particulier où l'état initial de l'ensemble particule et environnement est donné par l'éq. 4.69. Reprenons l'éq. 4.70 et notons :

$$\lambda = \sqrt{ab - c^2} \quad (4.75)$$

En utilisant des formules courantes sur l'oscillateur harmonique on obtient :

$$\langle q^2 \rangle = \frac{\hbar b}{2\lambda} \coth \frac{\hbar\lambda}{2} \quad (4.76)$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar a}{2\lambda} \coth \frac{\hbar\lambda}{2} \quad (4.77)$$

$$\langle qp + pq \rangle = -\frac{\hbar c}{2\lambda} \coth \frac{\hbar\lambda}{2} \quad (4.78)$$

En inversant les relations ci-dessus, on pourrait trouver a , b et c . Mais nous allons plutôt caractériser $\hat{\sigma}(t)$ en calculant l'entropie (partielle) de la particule, définie comme suit :

$$S = -k \text{tr} (\hat{\sigma} \ln \hat{\sigma}) \quad (4.79)$$

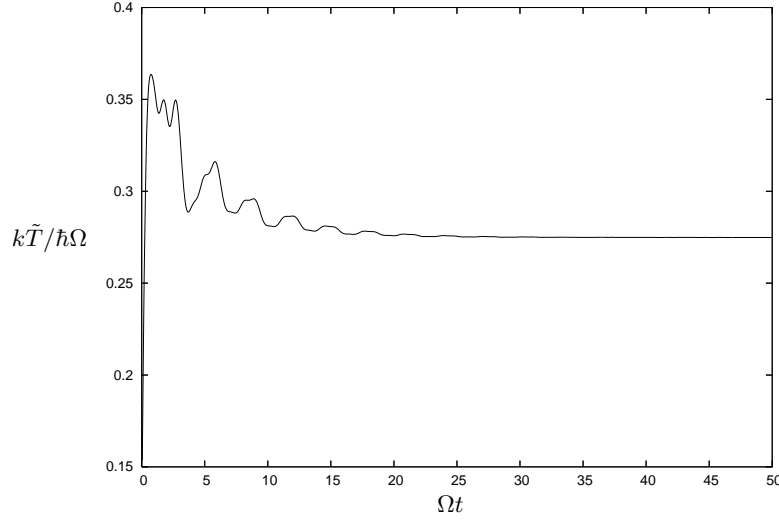


FIG. 4.2 – Température effective $\tilde{T}(t)$ en fonction du temps pour un environnement ohmique caractérisé par $\eta = 0.2m\Omega$. Les températures initiales de l’environnement et de la particule sont nulles.

En utilisant les expressions ci-dessus, on trouve :

$$\frac{S}{k} = \frac{\hbar\lambda}{2} - \ln 2 \operatorname{sh} \frac{\hbar\lambda}{2} \quad \text{où} \quad \lambda = \frac{2}{\hbar} \operatorname{Argth} \sqrt{\frac{\hbar^2/4}{\langle q^2 \rangle \langle p^2 \rangle - \langle qp + pq \rangle}} \quad (4.80)$$

On peut interpréter la quantité :

$$k\tilde{T}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\Omega}{\lambda} \quad (4.81)$$

comme une sorte de température effective instantanée, très analogue à celle définie dans le chapitre précédent. Lorsque t tend vers l’infini, $\langle qp + pq \rangle$ tend vers zéro et $k\tilde{T}(t)$ rejoint la valeur de la température effective considérée dans le chapitre précédent. La fig. 4.2 montre l’évolution en fonction du temps de la température effective dans le cas où l’état initial est le produit des états fondamentaux $|0\rangle_{\text{part}}$ et $|0\rangle_{\text{env}}$ de la particule et de l’environnement :

$$\hat{\rho}(0) = |0\rangle\langle 0|_{\text{part}} \otimes |0\rangle\langle 0|_{\text{env}} \quad (4.82)$$

dans l’application numérique nous avons pris un environnement ohmique caractérisé par la constante de friction $\eta = m\Omega/5$ et une fréquence de coupure $\Omega_c = 5\Omega$. La courbe part de $\tilde{T} = 0$ et croît rapidement, le temps caractéristique de croissance est de l’ordre du temps de mémoire de l’environnement, ici $1/\Omega_c$. Cette évolution abrupte est due au branchement brusque du couplage entre particule et environnement ; il a pour effet d’injecter de l’énergie dans la particule (et de la “réchauffer”). Ensuite, le système se thermalise et kT tend vers sa valeur limite ; le temps caractéristique de convergence est de l’ordre de m/η . L’entropie de l’état $\hat{\sigma}(t)$, représenté sur la fig. 4.3 a une allure similaire.

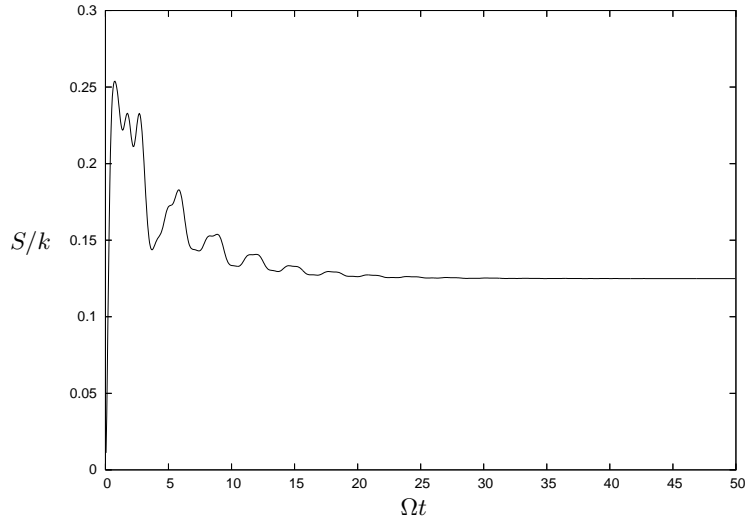


FIG. 4.3 – Entropie $S(t)$ en fonction du temps pour un environnement ohmique caractérisé par $\eta = 0.2m\Omega$. Les températures initiales de l’environnement et de la particule sont nulles.

4.6 Conclusion

Nous avons vu que l’état de la particule $\hat{\sigma}(t)$ tend au cours du temps vers l’opérateur densité réduit à l’équilibre, le même que celui étudié dans le chapitre 3; ceci malgré le fait que le système total (ensemble particule et environnement) ne soit pas dans un état stationnaire. À travers ce chapitre nous avons aussi illustré l’utilité de la méthode de la résolvante réduite. En effet, elle nous a permis de traiter le problème hors-équilibre presque à l’identique du problème à l’équilibre.

Chapitre 5

Application à l'électricité

5.1 Introduction

Plus loin dans ce travail, nous allons avoir à étudier des circuits électriques. Dans cette perspective, dans le présent chapitre nous allons voir comment appliquer la méthode des sections précédentes aux circuits. Nous allons voir que leur dynamique est très analogue à celle d'un système mécanique. Nous allons nous baser sur l'exposé de M. Devoret [4] et sur le travail original de B. Yurke, J. Denker [5]. Dans un premier temps nous allons rappeler comment décrire les circuits par une approche hamiltonienne et lagrangienne. Alors le passage au quantique se fera naturellement. Ensuite nous allons voir qu'une résistance dans un circuit constitue un environnement au sens des chapitres précédents.

5.2 Coordonnées — variables flux

Comme pour tout système électrique, pour résoudre un problème électrocinétique, nous devons trouver l'équation du mouvement de toutes les charges et du champ électromagnétique dans tout l'espace. Généralement, il est difficile de procéder ainsi ; cependant, pour un circuit électrique "usuel" (composé de fils, condensateurs, selfs, ...), on verra que le problème se simplifie. Pour l'instant, mettons de côté les fils reliant les composants du circuit ; considérons ce dernier juste comme un ensemble de composants. On suppose que ces derniers sont suffisamment espacés pour que leur influence électromagnétique mutuelle soit négligeable (ces approximations sont détaillées plus loin). Dans ce cas leurs dynamiques sont indépendantes. Alors, le lagrangien du circuit s'écrit comme la somme des lagrangiens des composants.

Par ailleurs, les degrés de liberté de tout système électromagnétique sont données par les potentiels vecteur \vec{A} et scalaire V du champ électromagnétique dans tout l'espace. Il en est ainsi, du moment où on néglige l'inertie des charges, ce qu'on fait ici. Dans ce cas, le Lagrangien du circuit ne dépend que de \vec{A} , V , $\partial\vec{A}/\partial t$, $\partial V/\partial t$. Cependant, pour les dipôles simples que nous allons considérer (capacités, selfs, ...), nous allons voir, que le Lagrangien de chaque composant peut s'exprimer en fonctions de la variable flux φ et de sa dérivée $\dot{\varphi}$,

définie comme suit :

$$\varphi_{MN}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \int_M^N \vec{A} \cdot d\vec{l} + \int_0^t V_M - V_N dt \quad (5.1)$$

où M et N sont les deux extrémités du dipôle, et V_M et V_N le potentiel scalaire en M et N . L'intégrale curviligne est à prendre sur le chemin que parcourent les charges à l'intérieur du dipôle. Montrons que les lagrangiens d'un condensateur et d'une self peuvent s'écrire à l'aide de variables flux.

5.2.1 Lagrangien d'un condensateur

Comme pour tout système électrique, le lagrangien du condensateur est donnée par celui du champ électrique à l'intérieur du composant :

$$L = \int_{\text{volume}} \frac{1}{2\epsilon_0} (E^2 - c^2 B^2) d\tau \quad (5.2)$$

où E et B sont respectivement le champ électrique et le champ magnétique. L'intégrale porte sur le volume du composant où le champ électromagnétique est localisé. Par ailleurs, dans la jauge de Coulomb, l'énergie électrostatique d'un condensateur de capacité C est donnée par :

$$\int_{\text{volume}} \frac{E^2}{2\epsilon_0} d\tau = \frac{C}{2} (V_M - V_N)^2 \quad (5.3)$$

où V_M et V_N sont les valeurs du potentiel aux deux bornes du condensateur. Comme le potentiel vecteur \vec{A} est nul dans le condensateur (dans la jauge de Coulomb) d'après l'éq. 5.1 $V_M - V_N = \dot{\varphi}$, d'où on déduit l'expression du lagrangien :

$$L(\varphi, \dot{\varphi}) = \frac{C\dot{\varphi}^2}{2} \quad (5.4)$$

Notons que dans cette description on néglige les fuites de champ électrique entre les armatures et les phénomènes de rayonnement lorsqu'une tension de haute fréquence est appliquée au condensateur.

5.2.2 Lagrangien d'une bobine

On peut faire un raisonnement analogue à celui pour le condensateur en se rappelant que l'énergie magnétostatique d'une bobine de self-inductance L est donnée par :

$$\int_{\text{volume}} \frac{c^2 B^2}{2\epsilon_0} d\tau = \frac{\Phi^2}{2L} \quad (5.5)$$

où Φ est le flux du champ magnétique à travers la bobine :

$$\Phi = \oint_{\text{spires}} \vec{A} \cdot d\vec{l} \quad (5.6)$$

où l'intégrale curviligne est à prendre sur toutes les spires de la bobine (le chemin que parcourent les charges). Comme le potentiel V est nul dans la bobine (jauge de Coulomb), d'après l'éq. 5.1 on identifie le flux Φ avec la variable flux φ aux bornes du dipôle. On en déduit le lagrangien de la bobine en fonction de φ :

$$L(\varphi, \dot{\varphi}) = -\frac{\varphi^2}{2L} \quad (5.7)$$

5.2.3 Rôle des fils

Jusqu'ici on avait mis "de côté" les fils qui connectent les composants entre eux ; formalisons leur rôle. Dans ce chapitre, on va supposer qu'il s'agit de conducteurs parfaits vérifiant les hypothèses suivantes :

1. Les fils sont fins et éloignés entre eux pour éviter toute influence capacitive entre eux. Si dans un circuit il y a quand même une telle influence entre deux fils, on peut formellement la représenter par un condensateur supplémentaire.
2. Les fils n'ont pas d'inductance, c-à-d ils ne forment pas de grandes boucles dans le circuit. Si tel était le cas pour un fil, alors dans la description du circuit, on peut formellement ajouter une bobine supplémentaire en série avec ce dernier.
3. Les fils sont courts devant la longueur d'onde $\lambda = c/\omega$ de la lumière dans le circuit, où ω est la fréquence typique à laquelle opère le circuit. Si cette condition n'est pas vérifiée, le fil va se comporter en antenne.

Avec ces hypothèses, on peut dire que $\vec{A} = 0$ le long d'un fil et que la différence de potentiel V est nulle à ses bornes. On en déduit, d'après l'éq 5.1 qu'entre les extrémités de tout fil la variable flux est $\varphi = 0$. Les fils n'ont donc pas de dynamique propre et ne sont donc pas visibles dans le lagrangien du circuit. Son lagrangien (fils compris) est la somme des lagrangiens des composants qui le constituent. Les fils vont intervenir dans le problème en tant que contrainte qui relie les degrés de liberté des composants. Dans ce cas (comme en mécanique lagrangienne), on peut adopter deux approches équivalentes pour résoudre un problème :

1. introduire un multiplicateur de Lagrange pour chaque contrainte (équivalent de la force de contact en mécanique). Cette méthode a l'avantage d'être systématique ; elle permet d'écrire l'équation du mouvement de tout circuit aussi complexe qu'il soit, "sans réfléchir", de manière algorithmique.
2. on peut aussi éliminer les contraintes en trouvant les variables-flux φ_i indépendantes ; l'avantage de cette méthode est d'être plus intuitive et de permettre de mieux comprendre et sentir la dynamique du circuit. Elle est plus facile à mettre en œuvre si le circuit est suffisamment simple. C'est celle qu'on va adopter dans la suite.

Finalement, pour étudier un circuit, il nous faut juste trouver les variables flux indépendantes et écrire le lagrangien en fonction d'elles. Ensuite la difficulté sera de trouver la solution de l'équation du mouvement.

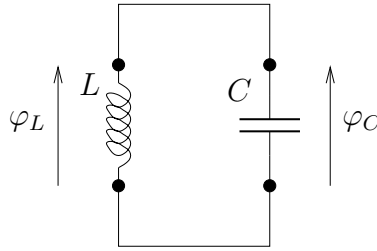


FIG. 5.1 – Circuit LC en terme de variables flux.

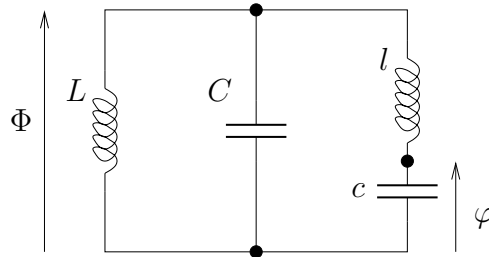


FIG. 5.2 – Deux circuits LC couplés.

5.2.4 Recherche des variables indépendantes

Considérons l'exemple d'un circuit LC , fig. 5.1. Il contient deux composants et a donc deux degrés de liberté : le flux φ_L au bornes de la bobine et celui aux bornes du condensateur φ_C . Mais à cause de la contrainte qu'imposent les fils on a $\varphi_L = \varphi_C$. Alors on peut poser $\varphi = \varphi_L = \varphi_C$ et écrire le lagrangien en termes de la seule variable indépendante :

$$L(\varphi, \dot{\varphi}) = \frac{C\dot{\varphi}^2}{2} - \frac{\varphi^2}{2L} \quad (5.8)$$

Plus généralement, pour trouver les variables flux indépendantes décrivant le circuit, on procède comme suit : on choisit arbitrairement un nœud du circuit (qu'on appelle la "masse") et on écrit les variables flux φ_i en tous les autres nœuds relativement à la masse. Le lagrangien du circuit s'écrit comme la somme des lagrangiens L_j de tous les composants, exprimés en fonction des variable flux φ_i en tous les nœuds :

$$L(\varphi_1, \dots, \varphi_N, \dot{\varphi}_1, \dots, \dot{\varphi}_N) = \sum_{j \in \text{composants}} L_j(\varphi_1, \dots, \varphi_N, \dot{\varphi}_1, \dots, \dot{\varphi}_N) \quad (5.9)$$

Exemple

Considérons le double circuit LC , fig. 5.2. Il comporte 4 dipôles et a donc 4 degrés de liberté. Mais à cause des fils, on voit que les flux aux bornes de tous les composants peuvent être exprimés comme fonctions seulement des flux aux bornes des condensateurs : Φ et φ .

Le lagrangien du circuit s'écrit :

$$L(\Phi, \varphi, \dot{\Phi}, \dot{\varphi}) = \frac{C\dot{\Phi}^2}{2} + \frac{c\dot{\varphi}^2}{2} - \frac{\Phi^2}{2L} - \frac{1}{2l}(\varphi - \Phi)^2 \quad (5.10)$$

5.3 Hamiltonien d'un circuit

On aimerait, notamment en vue de quantifier la dynamique du circuit, avoir une description hamiltonienne de ce dernier. Pour ce faire, par une transformation de Legendre du lagrangien on obtient l'hamiltonien ainsi que les moments conjugués des variables flux. Soit un circuit décrit par les variables $\varphi_1, \dots, \varphi_N$ de lagrangien L . On définit les moments canoniquement conjugués des φ_i par :

$$q_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}_i} \quad (5.11)$$

La variable φ_i ayant la dimension d'un flux, son moment conjugué a la dimension d'une charge (de sorte que le produit $\varphi_i \times q_i$ ait bien la dimension d'une action). L'hamiltonien du circuit est défini comme suit :

$$H(\varphi_1, \dots, \varphi_N, q_1, \dots, q_N) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^N q_i \dot{\varphi}_i - L \quad (5.12)$$

Par exemple, pour le circuit de la fig. 5.2, on trouve :

$$Q = C\dot{\Phi} \quad (5.13)$$

$$q = c\dot{\varphi} \quad (5.14)$$

$$H = \frac{Q^2}{2C} - \frac{\Phi^2}{2L} + \frac{q^2}{2c} - \frac{1}{2l}(\varphi - \Phi)^2 \quad (5.15)$$

Le sens physique de Q et q devient clair en se rappelant que (d'après éq. 5.1) $\dot{\Phi}$ et $\dot{\varphi}$ sont les tensions aux bornes des condensateurs de capacités C et c , Q et q donnent donc leurs charges. On en déduit que leurs dérivés $I = \dot{Q}$ et $i = \dot{q}$ sont les intensités de courants à travers les capacités.

5.3.1 Variables tension—courant

Traditionnellement, en électronique on ne travaille pas avec les variables charge—flux, on préfère utiliser les tensions aux bornes des dipôles et et les intensités qui les traversent. En effet ce sont les quantités qu'on arrive à mesurer. La tension U_{MN} aux bornes M et N d'un dipôle est donnée par :

$$U_{MN} = \int_M^N \vec{E} \cdot d\vec{l} \quad (5.16)$$

En se rappelant que le champ électrique vaut $\vec{E} = -\partial\vec{A}/\partial t - \vec{\nabla}V$ et en utilisant la définition éq. 5.1 on trouve :

$$U_{MN} = \dot{\varphi}_{MN} \quad (5.17)$$

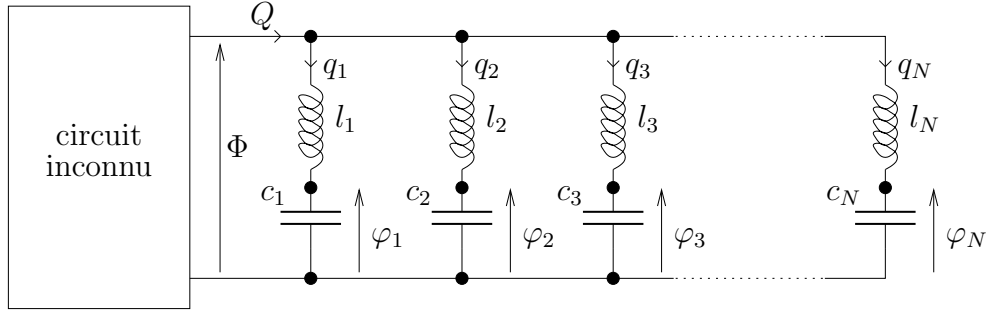


FIG. 5.3 – Circuit LC couplé à N circuits LC .

De même, on peut définir à partir de la charge q_{MN} conjuguée à φ_{MN} le courant traversant le composant :

$$I_{MN} = \dot{q}_{MN} \quad (5.18)$$

Cependant, il n'y a pas de relation de conjugaison canonique entre la tension et le courant. On ne peut donc pas utiliser systématiquement une approche hamiltonienne avec ces variables. Par conséquent, ceci rendrait difficile le passage au quantique.

5.4 Circuit contenant une résistance

Jusqu'à présent nous n'avons considéré que des composants hamiltoniens (condensateurs, selfs, ...). Pour modéliser des résistances (composant non-hamiltonien), nous allons procéder comme dans les chapitres précédents : utiliser des oscillateurs harmoniques (circuits LC) pour reproduire les effets résistifs. Considérons le circuit fig. 5.3. Il s'agit d'un circuit "inconnu" (représenté par la boîte), connecté à N oscillateurs harmoniques. Nous allons étudier les effets de l'ensemble d'oscillateurs sur le circuit inconnu. On peut vérifier facilement qu'on peut le décrire par les $N + 1$ variables-flux indépendantes $\Phi, \varphi_1, \dots, \varphi_N$ et par le Lagrangien suivant :

$$L = L_0(\Phi, \dot{\Phi}) + \sum_{i=1}^N \frac{c_i \dot{\varphi}_i^2}{2} + \frac{c_i \omega_i^2}{2} (\varphi_i - \Phi)^2 \quad (5.19)$$

où L_0 est le lagrangien du circuit inconnu. Par une transformation de Legendre on obtient les charges conjuguées aux variables flux ainsi que l'hamiltonien du circuit :

$$Q \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial L}{\partial \dot{\Phi}} = \frac{\partial L_0}{\partial \dot{\Phi}} \quad (5.20)$$

$$q_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}_i} = c_i \dot{\varphi}_i \quad (5.21)$$

$$H \stackrel{\text{def}}{=} Q \dot{\Phi} + \sum_{i=1}^N q_i \dot{\varphi}_i - L \quad (5.22)$$

$$= H_0 + \sum_{i=1}^N \frac{q_i^2}{2c_i} + \frac{c_i \omega_i^2}{2} (\varphi_i - \Phi)^2 \quad (5.23)$$

où $H_0 = Q\dot{\Phi} - L_0$ est l'hamiltonien du circuit inconnu. Il s'agit de l'analogie électronique du problème étudié dans les chapitres précédents. En reproduisant à l'identique les calculs de la sec. 1.2.1, page 10, on obtient les équations du mouvement du circuit :

$$\dot{\Phi} = \frac{\partial H_0}{\partial Q} \quad (5.24)$$

$$\dot{Q} = -\frac{\partial H_0}{\partial \Phi} - \int_0^t \Gamma(\tau) \dot{\Phi}(t - \tau) d\tau + F(t) \quad (5.25)$$

où l'on a posé :

$$\Gamma(t) = \sum_{i=1}^N c_i \omega_i^2 \cos \omega_i t \quad (5.26)$$

$$F(t) = \sum_{i=1}^N \left[(\varphi_i(0) - \Phi(0)) \cos \omega_i t + \frac{q_i(0)}{c_i \omega_i} \sin \omega_i t \right] c_i \omega_i^2 \quad (5.27)$$

L'effet des oscillateurs est d'ajouter les termes en Γ et F à l'équation du mouvement.

5.4.1 Loi d'Ohm

Dans le système ci-dessus, passons à la limite continue, exactement comme on a fait dans le chapitre 1 pour le système mécanique : des fonctions continues $c(\omega)$, $\varphi(\omega)$, $q(\omega)$ viennent remplacer les suites discrètes c_i , φ_i , q_i . Pour plus de détails, se reporter au chapitre 1. La distribution $c(\omega)$ peut être interprétée comme la densité de capacité par unité de fréquence dans la résistance. Considérons la distribution particulière :

$$c(\omega) = \frac{2}{\pi \eta \omega^2 R}, \quad R \text{ constante} \quad (5.28)$$

Il s'agit de la distribution correspondante à une résistance réelle de valeur R . Dans ce cas, $\Gamma(t) = 1/R\delta(t)$ et l'équation du mouvement éq. 5.24 est simplifiée : le terme en Γ prend la forme $-\dot{\Phi}/R$. Prenons le cas particulier où le circuit inconnu est une source de tension U , alors il faut prendre comme hamiltonien :

$$H_0(\Phi, Q) = UQ \quad (5.29)$$

L'équation du mouvement s'écrit alors :

$$\dot{\Phi} = U \quad (5.30)$$

$$\dot{Q} = -\frac{\dot{\Phi}}{R} + F(t) \quad (5.31)$$

Rappelons-nous que $I = \dot{Q}$ est le courant entrant dans la source, en ces termes, on obtient la loi d'Ohm :

$$I = -\frac{U}{R} + F(t) \quad (5.32)$$

(le signe “ $-$ ” ne doit pas surprendre, il vient du choix de l'orientation de Q et I , en effet nous avons utilisé la convention récepteur pour le générateur). Le circuit composé d'oscillateurs LC , fig. 5.3 est donc équivalent à une résistance. Le courant $F(t)$ ne dépend que de la charge initiale dans les condensateurs du circuit et du flux magnétique initial dans ses bobines ; c'est ce terme qui va engendrer le bruit de Nyquist de la résistance. Si on met la résistance en court-circuit, c'est-à-dire on prend $U = 0$, alors un courant $I = F(t)$ peut continuer traverser le circuit, il ne reste que le bruit.

5.4.2 Bruit dans une résistance

D'après sa définition, éq. 5.27, $F(t)$ est entièrement déterminée par les conditions initiales de l'ensemble d'oscillateurs LC . Supposons que ce dernier soit initialement (à l'instant $t = 0$) à température T et essayons de caractériser $F(t)$. Dans cette approche, les variables φ_i et q_i sont des variables aléatoires vérifiant la distribution de Gibbs à température kT . Comme l'hamiltonien de l'ensemble d'oscillateurs (indépendants) est quadratique, les φ_i et q_i sont des variables gaussiennes centrées indépendantes, elle sont déterminées par leurs moments d'ordre deux :

$$\langle \varphi_i \varphi_j \rangle_{t=0} = kT \frac{1}{c_i \omega_i^2} \delta_{ij} \quad (5.33)$$

$$\langle q_i q_j \rangle_{t=0} = kT c_i \delta_{ij} \quad (5.34)$$

Comme $\varphi_i(0)$ et $q_i(0)$ sont centrées et que $F(t)$ est linéaire en ces derniers (cf. éq. 5.27), on a :

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad (5.35)$$

En injectant les expressions de $\langle \varphi_i \varphi_j \rangle$ et $\langle q_i q_j \rangle$ en $t = 0$ dans la définition de $\langle F(t)F(0) \rangle$, éq. 5.27, on obtient :

$$\langle F(t)F(t') \rangle = 2kT \sum_{i=1}^N c_i \omega_i^2 \cos \omega_i(t - t') \quad (5.36)$$

Dans le cas d'une résistance ohmique où l'ensemble des circuits LC forment un continuum vérifiant la distribution éq. 5.28, on trouve la formule de Nyquist :

$$\langle F(t)F(t') \rangle = \frac{2kT}{R} \delta(t - t') \quad (5.37)$$

dans ce cas $F(t)$ est un bruit blanc. Dans le cadre de ce calcul classique, à température $T = 0$ le bruit disparaît.

5.5 Circuits quantiques

Lorsqu'un système électrique évolue dans un régime de basse énergie, les manifestations de la nature quantique du champ électromagnétique deviennent apparentes. Dans ce cas on utilise une approche quantique de l'électrodynamique. Une façon standard de quantifier le champ électromagnétique consiste à remplacer les potentiels \vec{A} et V par des opérateurs hermitiques agissant en chaque point sur un espace de Hilbert $L_2(\mathbf{R})$ [2, 29]. Comme les variables flux qu'on utilise en électricité sont proportionnelles à \vec{A} et V , ils vont suivre les mêmes règles de quantification. Ainsi, pour quantifier un circuit décrit classiquement par les variable flux-charge φ et q et d'hamiltonien $H(\varphi, q)$, on procède comme en mécanique : on associe au système un espace de Hilbert des états $L_2(\mathbf{R})$. Les observables quantiques $\hat{\varphi}$ et \hat{q} sont des opérateurs sur $L_2(\mathbf{R})$, vérifiant la relation de conjugaison :

$$[\hat{\varphi}, \hat{q}] = i\hbar \quad (5.38)$$

ils sont définis comme suit (avec les notations de Dirac) :

$$\langle \varphi | \hat{\varphi} | \psi \rangle = \varphi \langle \varphi | \psi \rangle \quad (5.39)$$

$$\langle \varphi | \hat{q} | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle \varphi | \psi \rangle \quad (5.40)$$

Mécanique et électricité sont formellement équivalents ; toutes les discussions des chapitres précédents se transposent à l'électricité sans modification, nous n'allons pas les reprendre ici.

5.5.1 Remarque sur le bruit dans une résistance [15]

Ci-dessus nous avons considéré le bruit d'une résistance ohmique avec une approche classique. On peut refaire le même calcul dans un cadre quantique. Même si les objets qu'on manipule sont différents, le calcul reste formellement identique. En prenant :

$$\langle \varphi_i \varphi_j \rangle_{t=0} = \frac{\delta_{ij}}{c_i \omega_i^2} \times \frac{\hbar \omega_i}{2} \coth \frac{\hbar \omega_i}{2kT} \quad (5.41)$$

$$\langle q_i q_j \rangle_{t=0} = c_i \delta_{ij} \times \frac{\hbar \omega_i}{2} \coth \frac{\hbar \omega_i}{2kT} \quad (5.42)$$

On obtient :

$$\langle F(t) F(t') \rangle = 2 \sum_{i=1}^N \frac{\hbar \omega_i}{2} \coth \frac{\hbar \omega_i}{2kT} \cos \omega_i(t - t') c_i \omega_i^2 \quad (5.43)$$

À titre d'exemple, à température $T = 0$ lorsque le circuit est une résistance ohmique de valeur R , l'ensemble des circuits LC forment un continuum vérifiant la distribution éq. 5.28, on trouve la formule de Nyquist quantique à température nulle :

$$\langle F(t) F(t') \rangle = -\frac{2\hbar}{\pi R(t - t')^2} \quad (5.44)$$

on voit que $F(t)$ n'est pas un bruit blanc ; les fluctuations quantiques se manifestent sous la forme d'un bruit "coloré".

5.6 Conclusion

Nous avons vu que les approches lagrangienne et hamiltonienne de la mécanique se transposent aux circuits électriques. Aussi, le passage au quantique se fait exactement de la même manière qu'en mécanique, dans la mesure où la dynamique sous-jacente d'un circuit est celle du champ électromagnétique.

Les résistances peuvent être modélisées par un ensemble d'oscillateurs harmoniques identique à celui étudié dans le chapitre précédent. En d'autres termes une résistance dans un circuit constitue un environnement au sens des chapitres précédents. Alors on s'attend à observer les effets de fluctuation dissipation et décohérence dans les circuits comprenant des résistances : Les degrés de liberté discrets d'un circuit peuvent s'intriquer avec le continuum de degrés de liberté d'une résistance dans le circuit. Nous allons tenter d'illustrer ceci dans les deux prochains chapitres.

Chapitre 6

Particule chargée dans un circuit RC

6.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons étudier dans le cadre d'un modèle simple comment les degrés de libertés mécaniques d'une particule se couplent aux degrés de libertés électriques d'une résistance. Dans ce cas la résistance joue le rôle d'un environnement au sens des chapitres précédents. Nous avons imaginé ce modèle dans le but de donner l'esquisse d'un environnement contrôlé (les paramètres contrôlés sont la valeur et la température de la résistance). Pour traiter le problème, nous allons utiliser (encore) l'approche de la "résolvante réduite".

6.1.1 Le modèle

Soit une particule chargée de masse m , position x , impulsion p et soumise à un potentiel harmonique $V(x) = m\Omega^2 x^2/2$, c'est à dire un oscillateur harmonique de pulsation Ω . On suppose, de plus, que la particule est placée entre les armatures d'un condensateur de capacité C de telle sorte que son mouvement soit perpendiculaire aux armatures du condensateur. Ce dernier est relié à une résistance R , comme indiqué sur la fig. 6.1. Qualitativement, on s'attend à ce qu'un changement de position de la particule induise une modification de la charge des armatures du condensateur. Or pour que sa charge Q varie un courant électrique $I = \dot{Q}$ doit passer dans le circuit, à travers la résistance. La résistance est un composant dissipatif qui va faire perdre l'énergie au système. La particule devrait donc être amortie.

Posons le problème plus précisément. Soit Φ le flux au bornes de la capacité et Q sa charge canoniquement conjuguée. Comme dans le chapitre précédent, nous allons modéliser la résistance par un ensemble continu de circuits LC (fig. 6.2), de fréquences propres $\omega > 0$ avec une distribution de capacité ohmique :

$$c(\omega) = \frac{2}{\pi R \omega^2} \quad (6.1)$$

les inductances sont de la forme $l(\omega) = 1/c(\omega)\omega^2$. Ce circuit est équivalent à une résistance

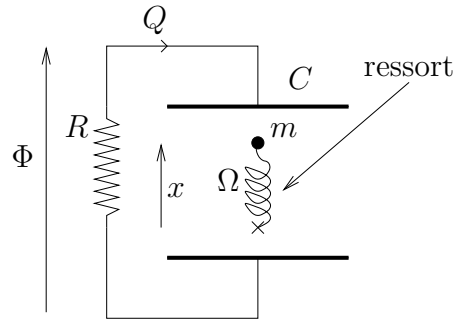


FIG. 6.1 – Particule chargée entre les armatures d'un condensateur

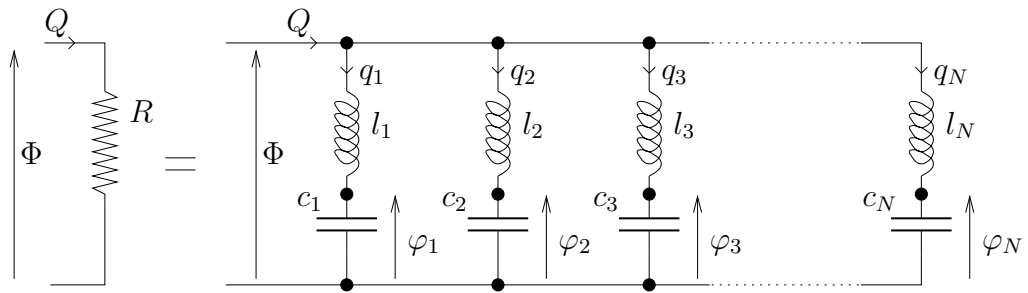


FIG. 6.2 – Circuit équivalent à une résistance

R. L'hamiltonien de l'ensemble particule et circuit est de la forme :

$$H = H_{\text{part}} + H_{\text{circ}} + H_{\text{int}} \quad (6.2)$$

où :

$$H_{\text{part}} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2}x^2 \quad (6.3)$$

$$H_{\text{circ}} = \sum_{i=1}^N \frac{q_i^2}{2c_i} + \frac{c_i\omega_i^2}{2}(\varphi_i - \Phi)^2 + \frac{Q^2}{2C} \quad (6.4)$$

Pour l'instant, nous allons supposer que le circuit est un ensemble discret de N oscillateurs, cela va simplifier les notations et les calculs qui vont suivre. À la fin du chapitre, nous allons prendre la limite continue qui permet de modéliser correctement la résistance. Le terme H_{int} traduit l'interaction entre la particule et le circuit. Il s'agit simplement de l'énergie potentielle d'une charge dans le champ électrique \vec{E} du condensateur. On suppose \vec{E} uniforme. La tension aux bornes du condensateur est Q/C , on en déduit le potentiel électrique :

$$V(x) = \frac{Q}{C} \frac{x}{l} \quad (6.5)$$

où l est la distance entre les deux armatures. Finalement on trouve l'énergie de couplage :

$$H_{\text{int}} = \frac{eQ}{C} \frac{x}{l} \quad (6.6)$$

où e est la charge électrique de la particule.

6.1.2 Objectif

L'hamiltonien H ci-dessus, à la limite continue, représente deux degrés de libertés Φ et x couplés à un continuum. En utilisant la méthode de la résolvante réduite, on va pouvoir diagonaliser l'hamiltonien du circuit de façon à ramener le problème à un oscillateur harmonique (la particule de degré de liberté x) couplée à un environnement mécanique effectif. L'objectif de ce chapitre est de ramener l'hamiltonien du système à :

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\tilde{\Omega}^2}{2}x^2 + \sum_{i=1}^N \left[\frac{\pi_i^2}{2\mu_i} + \frac{\mu_i\omega_i^2}{2}(\chi_i - x)^2 \right] \quad (6.7)$$

et de déterminer $\tilde{\Omega}$ et les μ_i . Nous allons trouver, à la limite continue, à laquelle nous sommes intéressés :

$$m\tilde{\Omega}^2 = m\Omega^2 - \frac{e^2}{l^2C} \quad (6.8)$$

$$\mu(\omega)\omega^2 = \frac{2e^2}{\pi l^2C} \times \frac{1/RC}{\omega^2 + (1/RC)^2} \quad (6.9)$$

6.2 Diagonalisation de $H_{\text{circ}} + H_{\text{int}}$

Le calcul qui va suivre montre comment mettre en œuvre la méthode de la résolvante pour arriver à notre fin. Nous allons le détailler car il complète les chapitres 3 et 4 dans la mesure où il montre comment trouver les composantes des modes normaux du problème (jusqu'à présent on l'avait toujours évité). Étudions $H_{\text{circ}} + H_{\text{int}}$, commençons par le réécrire avec les notations matricielles en posant :

$$|\Phi\rangle = \begin{pmatrix} \Phi\sqrt{C} \\ \vdots \\ \varphi_i\sqrt{c_i} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |Q\rangle = \begin{pmatrix} \frac{q}{\sqrt{C}} \\ \vdots \\ \frac{q_i}{\sqrt{c_i}} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$A^2 = \begin{pmatrix} \sum \omega_i^2 \frac{c_i}{C} & \dots & -\omega_i^2 \sqrt{\frac{c_i}{C}} & \dots \\ \vdots & \ddots & & \\ -\omega_i^2 \sqrt{\frac{c_i}{C}} & & \omega_i^2 & 0 \\ \vdots & 0 & & \ddots \end{pmatrix}$$

Soit $|E_j\rangle$, $j = 0 \dots N$ une base orthonormée de vecteurs propres de A^2 qu'on va préciser et $\nu_0 \leq \dots \leq \nu_N$ les valeurs propres respectives. Dans cette base, l'hamiltonien s'écrit :

$$H_{\text{circ}} = \sum_{j=0}^N \frac{\beta_j^2}{2} + \frac{\nu_j^2 \alpha_j^2}{2} \quad (6.10)$$

où $\alpha_j = (E_j|\Phi)$ et $\beta_j = (E_j|Q)$, on peut vérifier que les α_j et β_j sont canoniquement conjugués. L'hamiltonien d'interaction s'écrit :

$$H_{\text{int}} = \frac{ex}{lC} (0|Q)\sqrt{C} \quad (6.11)$$

$$= \frac{xe}{l\sqrt{C}} (0| \left(\sum_{j=0}^N |E_j\rangle \langle E_j| \right) |Q) \quad (6.12)$$

$$= \frac{xe}{l\sqrt{C}} \sum_{j=0}^N (0|E_j)\beta_j \quad (6.13)$$

Pour atteindre l'objectif qu'on s'est fixé il faut "juste" déterminer $(0|E_j)$, tout le problème se ramène à ça. Nous allons suivre la méthode du chapitre 3. La résolvante réduite du circuit est définie comme :

$$r(z) \stackrel{\text{def}}{=} (0| \frac{1}{z^2 + A^2} |0) \quad (6.14)$$

$$= \sum_{j=0}^N \frac{(0|E_j)^2}{z^2 + \nu_j^2} \quad (6.15)$$

où $z = iu + \gamma$ avec u, γ réels positifs. Prenons la limite $\gamma \rightarrow 0^+$, pour cela utilisons la formule suivante sur les distributions :

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{(iu \pm \gamma)^2 + \omega^2} = \text{vp} \frac{1}{-u^2 + \omega^2} \mp \frac{i\pi}{2\omega} [\delta(u - \omega) - \delta(u + \omega)] \quad (6.16)$$

on trouve :

$$-\frac{2u}{\pi} \mathcal{I}m \lim_{\gamma \rightarrow 0^+} r(iu + \gamma) = \sum_{j=0}^N (0|E_j)^2 \delta(u - \nu_j) \quad (6.17)$$

Or, à la limite continue, on sait calculer la résolvante réduite $r(z)$ pour une résistance ohmique. Le calcul a déjà été fait, alors on va utiliser directement le résultat de l'éq. 4.29. Formellement, du point de vue des notations il faut prendre dans l'éq. 4.29 $\eta = 1/R$, $m = C$, $\Omega = 0$. Ce qui donne :

$$r(z) = \frac{1}{z^2 + \Omega^2 + z\eta/m} = \frac{1}{z} \times \frac{1}{z + 1/RC} \quad (6.18)$$

En prenant $z = iu + \gamma$, puis la limite $\gamma \rightarrow 0^+$ on trouve sans aucune difficulté :

$$\sum_{j=0}^N (0|E_j)^2 \delta(u - \nu_j) \rightarrow \frac{2}{\pi} \frac{1/RC}{u^2 + (1/RC)^2} \quad (6.19)$$

C'est une fonction continue. Dans cette limite, l'ensemble des ν_j devient continu et on remplace la suite de ν_j par la variable réelle u (pour plus de détails sur le passage à la limite continue, se référer au chapitre 3). Finalement on obtient :

$$(E_u|0)^2 = \frac{2}{\pi} \frac{1/RC}{u^2 + (1/RC)^2} \quad (6.20)$$

Remarquons que $(0|E_u)$ donne la composante du mode normal de fréquence u sur le degré de liberté de la capacité. La fonction $(0|E_u)$ est une lorentzienne, son maximum est en $u = 0$ et sa largeur à mi-hauteur est $1/RC$. Ce sont les modes de basse fréquence qui interviennent dans la dynamique de la capacité.

À présent, $(0|E_u)$ étant déterminée, le calcul est fini. Il ne nous reste plus qu'à mettre le résultat en forme.

6.2.1 Mise en forme de $H_{\text{circ}} + H_{\text{int}}$

Nous allons faire un changement de variable pour réécrire $H_{\text{circ}} + H_{\text{int}}$ sous la forme voulue, éq. 6.7. Pour cela posons :

$$f(u) = \frac{e}{l\sqrt{C}} (0|E_u), \quad \text{alors} \quad f^2(u) = \frac{2e^2}{\pi l^2} \frac{1/RC}{u^2 + (1/RC)^2} \quad (6.21)$$

Avec ces notations :

$$H_{\text{circ}} + H_{\text{int}} = -x \int_0^\infty f(u)\beta(u) du + \int_0^\infty \frac{1}{2} [\beta^2(u) + u^2\alpha^2(u)] du \quad (6.22)$$

$$= \int_0^\infty \frac{1}{2} \left[\frac{u^2}{f^2} (\alpha f)^2 + f^2 \left(\frac{\beta}{f} - x \right)^2 \right] du + \frac{x^2}{2} \int_0^\infty f^2(u) du \quad (6.23)$$

Faisons un (dernier) changement de variables canonique :

$$\chi(u) = \alpha(u)f(u), \quad \pi(u) = \frac{\beta(u)}{f(u)}, \quad \mu(u) = \frac{f^2(u)}{u^2} \quad (6.24)$$

Avec les nouvelles variables, on trouve enfin pour l'hamiltonien du circuit et de la particule en interaction :

$$H = H_{\text{part}} + H_{\text{circ}} + H_{\text{int}} \quad (6.25)$$

$$= \frac{p^2}{2m} + \left(\frac{m\Omega^2}{2} - \frac{e^2}{l^2 C} \right) x^2 + \int_0^\infty \left[\frac{\pi^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2}{2} (\chi - x)^2 \right] d\omega \quad (6.26)$$

C'est exactement la forme qu'on voulait.

6.2.2 Discussion

Au départ, nous avons considéré une particule (mode discret) couplée à un condensateur (mode discret) couplé à une résistance (continuum de modes). Dans le calcul que nous avons fait, nous avons “noyé” le mode discret du condensateur dans le continuum de la résistance. Nous avons obtenu un potentiel renormalisé pour la particule de la forme :

$$V(x) = \frac{m\tilde{\Omega}^2}{2} x^2, \quad \text{où} \quad \tilde{\Omega} = \sqrt{\Omega^2 - e^2/ml^2 C} \quad (6.27)$$

nous allons supposer que $\Omega^2 > e^2/ml^2 C$. La fonction spectrale $\mu(\omega)$ du circuit n'est pas ohmique :

$$\mu(\omega)\omega^2 = \frac{2e^2}{\pi l^2 C} \times \frac{1/RC}{\omega^2 + (1/RC)^2} \quad (6.28)$$

C'est une lorentzienne (donc normée), elle démarre avec une dérivée nulle en $\omega = 0$, puis décroît ; sa largeur à mi-hauteur vaut $\Omega_c = 1/RC$ (fréquence de coupure). Physiquement, si $\tilde{\Omega} \ll \Omega_c$, alors la particule ne “voit” que la partie basses fréquences de $\mu(\omega)$, dans ce cas, on peut développer cette dernière au voisinage de l'origine :

$$\mu(\omega)\omega^2 \sim \frac{2Re^2}{\pi l^2} \quad (6.29)$$

(c'est une distribution ohmique). Dans cette limite, on peut dire que l'effet du circuit sur la particule est caractérisé par un environnement ohmique de constante de friction η et fréquence de coupure Ω_c définies comme suit :

$$\eta = \frac{Re^2}{l^2} \quad \text{et} \quad \Omega_c = \frac{1}{RC} \quad (6.30)$$

6.2.3 Conclusion

Nous avons vu, dans ce chapitre, comment mettre en œuvre la méthode de la résolvante pour montrer que la dynamique d'une particule couplée à un circuit RC (fig. 6.1) est identique aux systèmes mécaniques étudiés dans les chapitres 3 et 4. Nous pouvons donc appliquer les résultats qui y sont discutés à la particule couplée au circuit. Du point de vue d'une approche quantique, la particule subit donc les effets de dissipation, fluctuations et décohérence (cf. chapitres 3 et 4)

L'avantage pratique d'un environnement électrique est qu'expérimentalement on peut espérer le contrôler en ajustant la valeur de la résistance et sa température. On peut supposer que celle-ci constitue l'environnement dominant que la particule subit et faire des mesures caractérisant les effets de l'environnement sur la particule. Dans le chapitre suivant, nous allons nous pencher sur le problème de comment mesurer les effets dont on est entrain de discuter.

Chapitre 7

Proposition d'un dispositif pour observer la décohérence

Un des effets les plus importants que l'environnement induit sur un petit système quantique est "d'estomper" les franges d'interférences qu'il est susceptible de produire lors d'une expérience [23, 12, 11]. Dans le but d'illustrer les résultats discutés dans les chapitres précédents nous avons imaginé un dispositif expérimental, basé sur les interférences, mettant en évidence les effets induits par l'environnement sur un petit système quantique. Nous avons voulu que le dispositif soit simple et intuitif.

Dans l'idéal, on aimerait se donner une particule dans un potentiel harmonique, préparée dans un état pur ; à l'instant $t = 0$ on la couplerait à l'environnement et aux instants successifs on sonderait sa matrice densité. Cependant, expérimentalement, on contrôle difficilement le couplage avec l'environnement au cours du temps. Pour cela, nous proposons une expérience qui fait intervenir un degré de liberté supplémentaire, dont voici l'esquisse : On se donne une particule se déplaçant longitudinalement librement dans un guide d'ondes (fig. 7.1), elle y entre dans un état pur (on discute plus loin de comment préparer cet état). Dans une région du guide elle se trouve couplée transversalement à un environnement linéaire contrôlé (région dissipative). À la sortie de la région dissipative, la particule se trouve donc dans un état transversal intriqué avec l'environnement, semblable à ceux étudiés dans les chapitres précédents. Juste à la sortie de la région dissipative, on sonde l'état transversal de la particule à l'aide de deux sondes ponctuelles formant un interféromètre du type Aharonov-Bohm [30]. Son rôle est de produire des interférences ; nous allons voir qu'à travers le contraste des franges d'interférences on arrive à déterminer la longueur de cohérence spatiale de la particule ; celle-ci est directement reliée à l'entropie de sa matrice densité réduite. Cette expérience est analogue à une double fente de Young. La région dissipative peut être constituée par une résistance électrique ajustable à température T (cf. chapitre précédent) ; ceci permet de contrôler totalement les paramètres de l'environnement et ainsi d'étudier leur influence sur la cohérence de la particule. Nous allons voir que même à température nulle les effets du couplage avec l'environnement sont présents : la longueur de cohérence de la particule se trouve d'autant plus réduite que le couplage avec ce dernier est fort.

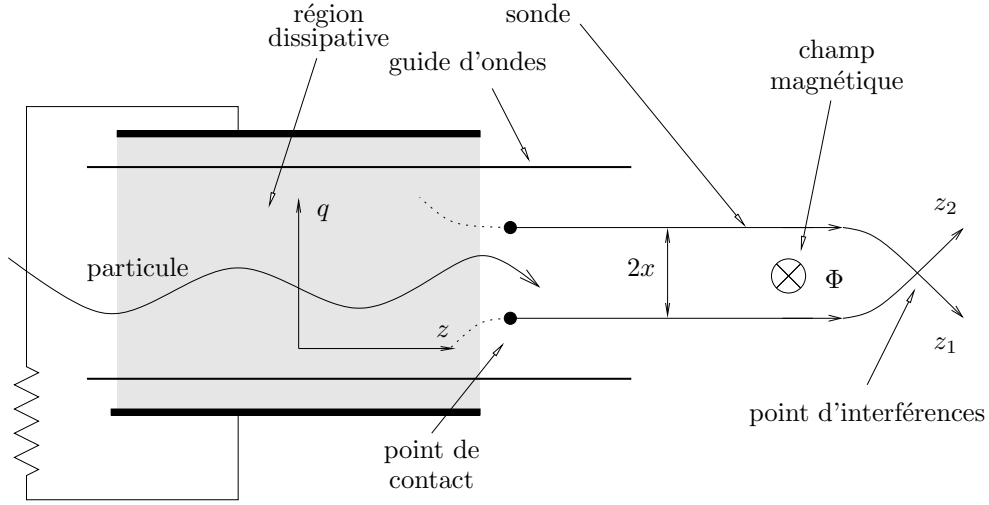


FIG. 7.1 – Une particule traversant le guide d'ondes en étant couplée transversalement à l'environnement est sondée à l'aide de deux sondes.

7.1 Description du dispositif

Considérons une particule dans un guide d'ondes parfait. Dans la direction longitudinale (selon l'axe z) sa dynamique est celle d'une particule libre. Dans la direction transversale la particule est confinée par un potentiel harmonique. Les dynamiques selon ces deux directions sont indépendantes (on a séparation des variables). On peut écrire l'hamiltonien de la particule seule comme suit :

$$\hat{H}_{\text{guide}} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2}\hat{q}^2}_{\hat{H}_{\text{transv.}}} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \quad (7.1)$$

De plus on suppose que le guide d'ondes est relié à deux sondes unidimensionnelles en $z = 0$ séparés d'une distance $2x$, comme indiqué sur la fig. 7.1. La particule incidente peut être transmise dans les sondes (ou continuer dans le guide). Dans la sonde 1 (respectivement 2) la dynamique est celle d'une particule libre unidimensionnelle en mouvement selon l'axe z_1 (respectivement z_2). Son hamiltonien dans la i -ème sonde ($i = 1$ ou $i = 2$) est :

$$\hat{H}_{\text{sonde}_i} = \frac{\hat{p}_{z_i}^2}{2m} \quad (7.2)$$

L'espace de Hilbert de la réunion du guide d'ondes et des 2 sondes est [27] :

$$\mathcal{H}_{\text{tot}} = \mathcal{H}_{\text{guide}} \oplus \mathcal{H}_{\text{sonde}_1} \oplus \mathcal{H}_{\text{sonde}_2} \quad (7.3)$$

où $\mathcal{H}_{\text{sonde}_i} = L_2(\mathbf{R})$ et $\mathcal{H}_{\text{guide}} = L_2(\mathbf{R}^2)$ Dans ce cas l'état quantique de la particule $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{\text{tot}}$ est déterminé en donnant son état dans le guide et dans les deux sondes. Nous allons

l'écrire sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} |\psi\rangle_{\text{guide}} \\ |\psi\rangle_{\text{sonde1}} \\ |\psi\rangle_{\text{sonde2}} \end{pmatrix} \quad (7.4)$$

où $|\psi\rangle_{\text{guide}} \in \mathcal{H}_{\text{guide}}$, $|\psi\rangle_{\text{sonde1}} \in \mathcal{H}_{\text{sonde1}}$, $|\psi\rangle_{\text{sonde2}} \in \mathcal{H}_{\text{sonde2}}$. La particule peut passer du guide d'ondes vers chacune des sondes ; ceci se traduit dans l'hamiltonien par un couplage entre les états du guide, et ceux des deux sondes. On peut l'écrire sous forme matricielle comme suit :

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \begin{pmatrix} \hat{H}_{\text{guide}} & \hat{V}_1 & \hat{V}_2 \\ \hat{V}_1^+ & \hat{H}_{\text{sonde1}} & 0 \\ \hat{V}_2^+ & 0 & \hat{H}_{\text{sonde1}} \end{pmatrix} \quad (7.5)$$

$$\hat{V}_1 = \alpha |v_1\rangle \langle f_1| \quad (7.6)$$

$$\hat{V}_2 = \alpha |v_2\rangle \langle f_2| \quad (7.7)$$

Les termes de couplage sont représentés par les termes hors-diagonaux de la matrice ci-dessus. \hat{V}_1 (respectivement \hat{V}_2) couple le guide à la 1-ère (respectivement 2-ème) sonde. Les états $|v_1\rangle$ (respectivement $|v_2\rangle$) du guide sont supposés très localisés près du point de contact $z = 0$ et $q = x$ (respectivement $z = 0$ et $q = -x$), voir fig. 7.1. De même l'état $|f_1\rangle$ (respectivement $|f_2\rangle$) est localisé près de l'origine $z_1 = 0$ de la 1-ère sonde (respectivement l'origine $z_2 = 0$ de la 2-ème sonde). La constante réelle α représente l'intensité du couplage entre les sondes et le guide d'ondes. Lorsque α est nulle $\hat{V}_1 = \hat{V}_2 = 0$ et la particule ne peut pas passer du guide vers les sondes.

En appliquant un flux magnétique Φ entre les deux sondes on induit une différence de phase ϕ entre elles. La probabilité de détecter la particule en un point commun aux deux sondes oscille lorsque le flux Φ varie : c'est l'effet Aharonov-Bohm [30]. Ce dispositif est équivalent à une double fente de Young¹.

7.2 Couplage transversal avec l'environnement

Supposons qu'il y ait une région délimitée du guide d'ondes où la particule est couplée transversalement à un environnement linéaire extérieur en passant entre les armatures d'un condensateur relié à une résistance (cf. fig. 7.1 et fig. 6.1). Dans le chapitre précédent nous avons montré que (transversalement) la dynamique du système est la même que celle du modèle étudié dans les chapitres 3 et 4 où la fonction spectrale $\mu(\omega)$ est :

$$\mu(\omega) = \frac{2e^2}{\pi\omega^2 l^2 C} \times \frac{1/RC}{\omega^2 + (1/RC)^2} \quad (7.8)$$

¹Le flux Φ qui introduit une différence de marche entre les deux sondes joue le rôle de la position sur l'écran dans la l'expérience de Young. La distance $2x$ entre les deux sondes est quant à elle, l'analogie de la distance entre les deux fentes.

où e est la charge de la particule, l est l'écart entre les deux armatures du condensateur, C est sa capacité et R est la valeur de la résistance. Pour une grande valeur de la fréquence de coupure $\Omega_c = 1/RC$, l'environnement est proche d'un environnement ohmique avec une constante de friction $\eta = Re^2/l^2$. Enfin, nous avons vu que la fréquence de résonance transversale du guide d'ondes est renormalisé comme suit :

$$m\Omega^2 = m\Omega_{\text{guide}}^2 - \frac{e^2}{l^2C} \quad (7.9)$$

où Ω_{guide} est la fréquence transversale du guide d'ondes en absence du condensateur.

Soulignons encore que l'environnement n'agit que selon la direction transversale du guide d'ondes (axe q), c'est une résistance contrôlée expérimentalement. Nous supposons que la région dissipative du guide d'ondes est suffisamment étendue longitudinalement pour que la particule incidente ait le temps d'atteindre l'état d'équilibre discuté dans les chapitres 3 et 4 à la sortie de la zone dissipative. En d'autres termes, si la particule entre avec un état pur de la forme $|\psi\rangle \otimes |k\rangle$ où $|\psi\rangle$ est un état transversal et $|k\rangle$ une onde plane, alors elle va sortir dans un état décrit par un opérateur densité de la forme :

$$\hat{\sigma} \otimes |k\rangle\langle k| \quad (7.10)$$

où $\hat{\sigma}$ est l'état transversal de la particule (selon l'axe q) donnée par l'éq.3.81, page 29. Nous supposons aussi que la longueur séparant la fin de la région dissipative des points de contact des deux sondes est petite devant $\hbar k/m\Omega$.

Plus précisément, l'hamiltonien complet dans le guide d'ondes est :

$$\begin{aligned} H(q, p, \varphi, \pi) &= \frac{p_z^2}{2m} + \frac{p^2}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2}q^2 \\ &+ \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\pi_i^2}{2\mu_i} + \frac{\mu_i\omega_i^2}{2}(\varphi_i - \lambda(z)q)^2 \right\} \end{aligned}$$

où la fonction $\lambda(z) = 1$ si la particule est à l'intérieur de la région dissipative et $\lambda(z) = 0$ sinon. À part sur les bords de la région dissipative nous avons supposé que le couplage entre la particule et l'environnement est transversal. Dans ce cas (sauf sur les bords) les dynamiques transversale et longitudinale sont indépendantes. Cependant il est possible qu'il y ait des phénomènes de diffusion sur les bords. D'une part $\lambda(z)$ n'a pas de singularités, alors la dépendance en z des états stationnaires de la particule est continue : l'état de la particule est le même de part et d'autre de chaque bord de la région dissipative. D'autre part, nous pouvons démontrer (cf. annexe B) que nous pouvons négliger ces phénomènes de diffusion à condition que l'énergie cinétique longitudinale vérifie les deux conditions qui suivent :

$$\frac{p_z^2}{2m} \gg \langle q^2 \rangle \sum \mu_i \omega_i^2 \quad (7.11)$$

$$\frac{p_z^2}{2m} \gg \left(\langle q^2 \rangle \sum \mu_i \omega_i^2 \langle \epsilon_i \rangle \right)^{1/2} \quad (7.12)$$

où $\langle \epsilon_i \rangle$ est l'énergie moyenne du i -ème oscillateur de l'environnement. Avec ces conditions les degrés de liberté transversal et longitudinal sont indépendants le long de tout le guide d'ondes. Dans ce cas, la dynamique le long de l'axe z est triviale, elle équivaut à une translation dans le temps. L'idée derrière l'utilisation d'un guide d'onde est de "dérouler" le temps sur une dimension spatiale pour que les mesures sur un système tel que celui décrit dans le chapitre précédent soient envisageables.

D'un point de vue expérimental, l'état initial $|\psi\rangle \otimes |k\rangle$ qu'on avait supposé pur peut être préparé en injectant la particule incidente avec un vecteur d'onde k donné dans un guide d'ondes ayant un seul canal². Il s'agit forcément de l'état fondamental. Seulement, si le nombre de canaux croît *adiabatiquement* le long de l'axe z alors la particule va nécessairement rester dans l'état fondamental [44]. Dans ce cas l'état transversal dans les expressions ci-dessus est $|\psi\rangle = |0\rangle$.

7.3 Figures d'interférences

La probabilité de trouver la particule dans le point d'intersection où se produisent les interférences est relié à son état transversal à la sortie de la zone dissipative ; c'est à travers la figure d'interférences que l'on va mesurer les effets qu'induit l'environnement sur la particule. Dans l'annexe C on a montré que si l'état de la particule à la sortie de la région dissipative est tel que l'énergie cinétique longitudinale est grande devant l'énergie transversale, alors la probabilité de détecter la particule est :

$$P(\phi) = |\tau|^2 \times (\sigma(x, x) + \sigma(-x, -x)) \quad (7.13)$$

$$\sigma(-x, x)e^{i\phi} + \sigma(x, -x)e^{-i\phi} \quad (7.14)$$

où $\sigma(x, x') = \langle x | \hat{\sigma} | x' \rangle$ est la représentation position de $\hat{\sigma}$ discuté dans le chapitre 3, éq. 3.81, page 29. De même, soit P_1 (respectivement P_2) la probabilité de trouver la particule dans la 1-ère (respectivement la 2-ème) sonde ; elles sont définies comme suit :

$$P_1 = |\tau|^2 \sigma(x, x) \quad (7.15)$$

$$P_2 = |\tau|^2 \sigma(-x, -x) \quad (7.16)$$

À ce stade, pour caractériser les interférences, nous pourrions étudier l'amplitude de $P(\phi)$, mais le contraste C défini ci-dessous est plus fondamental. On définit :

$$C^2 = \frac{\langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2}{2P_1 P_2}, \quad \text{où } \langle f \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\phi) d\phi \quad (7.17)$$

C'est une quantité qui vaut 1 lorsque l'effet d'interférences est total et 0 lorsqu'il n'y a pas d'interférences. Utilisons éq. 3.81 pour trouver la valeur de $\sigma(x, x')$:

$$\sigma(x, x') = \langle x | \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{\kappa T} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\tilde{m}^2 \Omega^2}{2} \hat{q}^2 \right)} | x' \rangle \quad (7.18)$$

²un seul mode transversal

$$= \frac{1}{2\pi \langle \hat{q}^2 \rangle} e^{-\frac{1}{2} \left[\frac{\langle \hat{p}^2 \rangle}{\hbar^2} (x-x')^2 + \frac{1}{4\langle \hat{q}^2 \rangle} (x+x')^2 \right]} \quad (7.19)$$

en l'injectant dans la définition de $P(\phi)$, éq. 7.13 on obtient :

$$P(\phi) = 2|\tau|^2 \sigma(x, x) \times \left(1 + e^{-x^2/2\xi^2} \cos \phi \right) \quad (7.20)$$

$$\text{où } \xi^2 = \frac{\langle \hat{q}^2 \rangle \hbar^2}{4 \langle \hat{p}^2 \rangle \langle \hat{q}^2 \rangle - \hbar^2} \quad (7.21)$$

Finalement on obtient le contraste :

$$C = \exp \left(-\frac{x^2}{2\xi^2} \right) \quad (7.22)$$

Cette expression définit la longueur de cohérence transversale ξ de la particule. Le contraste C des franges d'interférences tend exponentiellement vers 0 lorsque $|x| \gg \xi$ et vers 1 lorsque $|x| \ll \xi$; La particule est capable d'interférer au plus sur une distance ξ . Nous pouvons utiliser éq. 3.75 et éq. 3.77 pour exprimer ξ en fonction de la température et la masse effective \tilde{m} et \tilde{T} , on trouve :

$$\xi^2 = \frac{\hbar}{2\tilde{m}\Omega} \times \frac{1}{1 - \text{th} \frac{\hbar\Omega}{2k\tilde{T}}} \quad (7.23)$$

On peut explicitement calculer ξ en fonction des paramètres de l'environnement, puisque \tilde{T} et \tilde{m} sont connus. La fig. 7.2 montre la longueur de cohérence $\xi(T)$ fonction de la température pour différents couplages η entre la particule et l'environnement (au fait, pour différentes valeurs de la résistance dans le circuit). À température nulle $\xi(T=0)$ est fini; les interférences sur une grande distance sont rendues impossibles par l'environnement. Un développement pour $\eta \sim 0$ à température nulle donne l'ordre de grandeur et le sens d'évolution de ξ :

$$\xi^2(0) \sim \frac{\hbar}{\eta} \times \frac{\pi}{4 \ln(\tilde{\Omega}_c/\Omega)} \quad (7.24)$$

Remarquons, que l'effet d'interférences disparaît quand \hbar tend vers zéro. En termes imagés l'environnement contribue à rendre le système "plus classique".

Enfin, soulignons que l'évolution dans le guide d'ondes n'est pas réversible parce que l'environnement a une infinité de degrés de liberté, ceci doit être pris en compte lorsqu'on s'intéresse aux phénomènes de transport.

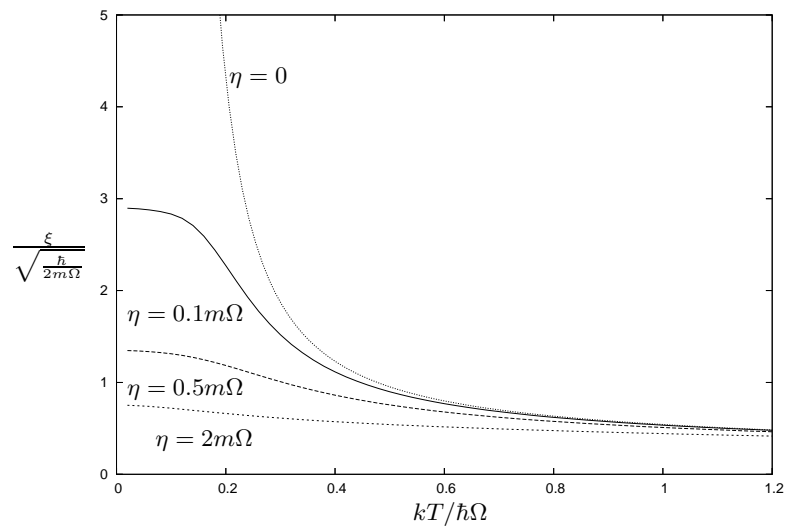


FIG. 7.2 – La longueur de cohérence ξ fonction de la température réelle T , tracée pour différentes valeurs du couplage particule-environnement η .

Chapitre 8

Dynamique quantique d'un SQUID-DC

Dans ce chapitre nous allons considérer la dynamique quantique d'un SQUID-DC excité par un flux radio-fréquence. L'étude a été faite dans le cadre d'une collaboration avec l'équipe expérimentale d'Olivier Buisson (CRTBT, Grenoble). Le dispositif est décrit en détails dans la thèse de F. Balestro [36]. Ici, nous allons prendre cette référence comme point de départ et faire une étude théorique expliquant les mesures expérimentales. Nous avons dégagé une signature quantique dans la dynamique du SQUID ; elle nous permet de mieux situer le régime du circuit et de discuter son comportement en termes d'oscillations de Rabi.

8.1 Le modèle

Le SQUID-DC étudié expérimentalement consiste en une boucle supra-conductrice contenant deux jonctions Josephson identiques. La boucle est traversée par un flux magnétique radio-fréquence susceptible d'exciter le SQUID. L'état dynamique du circuit est décrit par les deux variables flux des jonctions et par leurs charges conjuguées. Cependant dans le régime réalisé dans l'expérience, la dynamique se réduit à celle d'un seul degré de liberté collectif impliquant les deux jonctions [36, 35]. Dans ce cas, on montre que la dynamique du dispositif expérimental est identique à celle d'une particule dans un potentiel $V(x)$ en "tôle ondulée", de la forme :

$$V(x) = -\cos x - \alpha x \quad (8.1)$$

Nous allons nous intéresser au régime où le SQUID est proche du point critique ($\alpha \sim 1$), cf. fig. 8.1. Alors nous pouvons développer le potentiel autour d'un point d'inflexion situé entre un puits de potentiel et une barrière de potentiel. Dans ce cas, l'hamiltonien du problème se met sous la forme suivante :

$$H = \underbrace{\frac{q^2}{2C} + \frac{C\Omega^2}{2}\varphi^2 - \sigma\varphi^3}_{H_0} \underbrace{- a\varphi \sin \omega t}_V \quad (8.2)$$

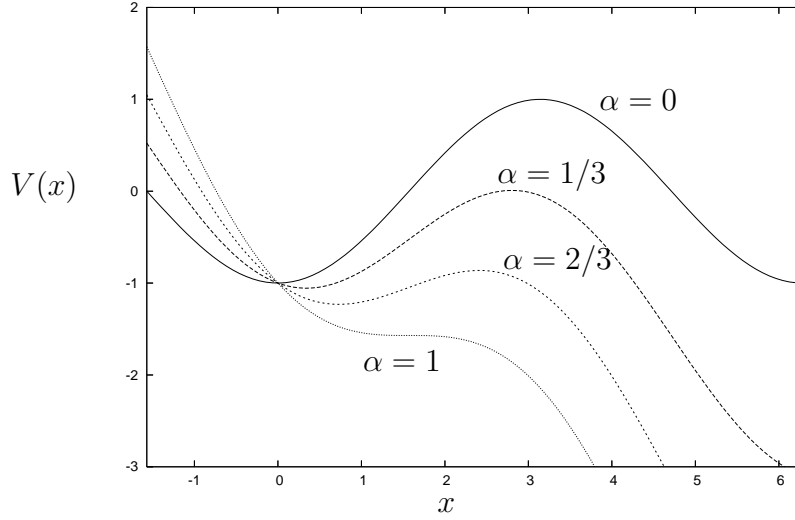


FIG. 8.1 – Potentiel en tôle ondulée

Le terme H_0 correspond au SQUID sans excitation et V représente l'excitation. Les observables φ et q sont les variables conjugués flux-charge. Le paramètre C représente la capacité du SQUID, Ω est sa pulsation de “fond de puits” du potentiel. Le paramètre σ traduit son anharmonicité.

Notre objectif ici est d'étudier la réponse du SQUID en fonction de l'excitation pour comprendre quantitativement les données expérimentales obtenues par l'équipe du CRTBT. On va plus particulièrement identifier une “signature quantique” montrant que le SQUID sur lequel sont faites les mesures est dans un régime quantique. Pour cela nous allons procéder en trois étapes : faire une étude numérique, une étude analytique classique et une étude analytique quantique.

Pour plus de commodité, mais aussi par contrainte numérique, nous allons adimensionner le problème. Pour ce faire, on peut écrire l'hamiltonien ci-dessus comme suit :

$$\tilde{H} = \frac{\tilde{q}^2}{2} + \frac{\tilde{\varphi}^2}{2} - \tilde{\sigma}\tilde{\varphi}^3 - \tilde{a}\tilde{\varphi} \sin \tilde{\omega}\tilde{t} \quad (8.3)$$

où l'on a posé :

$$\tilde{H} = H/\hbar\Omega \quad (8.4)$$

$$\tilde{q} = q/\sqrt{\hbar\Omega C} \quad (8.5)$$

$$\tilde{\varphi} = \varphi\sqrt{C/\hbar\Omega} \quad (8.6)$$

$$\tilde{\sigma} = \sigma\sqrt{\hbar\Omega/C^3} \quad (8.7)$$

$$\tilde{a} = a/\sqrt{\hbar\Omega C} \quad (8.8)$$

$$\tilde{\omega} = \omega/\Omega \quad (8.9)$$

$$\tilde{t} = t\Omega \quad (8.10)$$

Ce changement de variable revient à choisir des unités de mesure telles que $C = 1$, $\Omega = 1$, $\hbar = 1$.

8.2 Étude numérique

Dans le but d'interpréter des données expérimentales, on souhaite résoudre le problème suivant : on se donne comme état initial à l'instant $t = 0$:

$$|\psi(0)\rangle = |0\rangle \quad (8.11)$$

l'état fondamental de l'hamiltonien H_0 dans l'approximation harmonique. Puis on étudie l'évolution au cours du temps de l'état du système pour différentes excitations (pour différentes valeurs de a et de ω). On s'intéresse plus particulièrement à la probabilité $|\langle 0|\psi(t)\rangle|^2$ de trouver la particule dans l'état fondamental directement mesurable dans l'expérience.

Pour ce faire, nous avons écrit un programme qui résout numériquement le problème complet dépendant du temps. Il procède comme suit :

- diagonaliser H_0
- prendre $|\psi\rangle = |0\rangle$
- résoudre pas-à-pas l'équation de Schrödinger dépendant du temps.

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle \quad (8.12)$$

Pour des raisons pratiques, nous travaillons dans une base propre de l'opérateur position $\hat{\varphi}$ discrétisée et tronquée. Nous avons tronqué l'espace en position de façon à ne décrire que les états localisés dans le puits de potentiel, ainsi on néglige l'échappement du puits par effet tunnel. Les détails techniques liés à la résolution numérique ne sont pas donnés ici. Comme on va s'intéresser au régime "basse énergie" du SQUID, nous n'avons retenus que les niveaux dont l'énergie est inférieure à celle de la barrière de potentiel. La validité du calcul numérique est assurée tant que l'excitation reste suffisamment faible pour ne pas exciter les états de haute énergie.

8.2.1 Spectre de H_0

Sur la fig. 8.2 nous avons tracé les énergies propres¹ de H_0 par ordre croissant, en fonction de leur numéro. À cause de la non linéarité, elles ne sont pas également espacées comme pour un oscillateur harmonique. L'écart d'énergie entre l'état $|0\rangle$ et $|1\rangle$ n'est pas le même que celui entre les états successifs de plus haute énergie. Expérimentalement, le paramètre $\sigma \sim 3 \times 10^{-2}$ est petit, ce qui traduit une non-linéarité faible. Nous nous attendons à ce que la dynamique pour des énergies faibles soit similaire à celle d'un oscillateur harmonique, ce que le spectre de H_0 suggère. Mais nous allons voir que le rôle de la non-linéarité est crucial, aussi faible soit-elle. Le calcul analytique du spectre est fait dans la sec. 8.4.

¹en toute rigueur, le spectre de \hat{H}_0 est continu. Cependant, près du fond du puits de potentiel, il est composé de résonances très étroites. On peut donc le considérer comme discret avec une très bonne approximation.

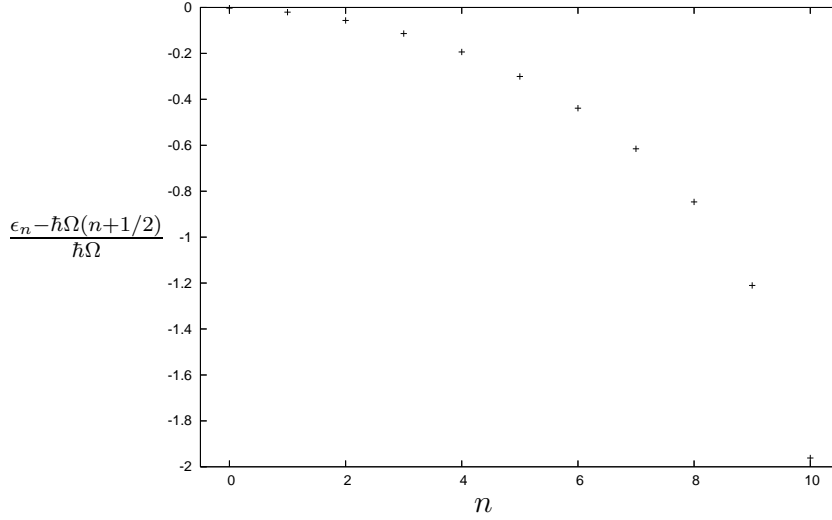


FIG. 8.2 – Écart des “énergies propres” ϵ_n de H_0 aux énergies propres d’un oscillateur harmonique de fréquence Ω . Résultat obtenu numériquement.

8.2.2 Balayage en fréquence

De façon numérique, nous avons résolu l’équation de Schrödinger dépendant du temps pour des valeurs successives de la fréquence d’excitation ω . Pour chaque valeur de ω nous avons effectué le calcul pendant un temps $t \gg 2\pi/\omega$. Sur les fig. 8.3 et 8.4 nous avons tracé la probabilité moyenne au cours du temps que la particule quitte l’état fondamental. La résonance principale a lieu autour de la fréquence “plasma” $\omega = \omega_p$ telle que :

$$\hbar\omega_p = \epsilon_1 - \epsilon_0 \simeq 0.982\hbar\Omega \quad (8.13)$$

(la valeur de ω_p ci-dessus est obtenue numériquement). Sur la fig. 8.3 on voit une résonance plus faible au voisinage de $\omega \sim 2\Omega$. En réalité, en étudiant précisément le spectre de H_0 on peut voir que cette résonance correspond à une transition de l’état $|0\rangle$ vers l’état $|2\rangle$. Sa fréquence vaut exactement ω_{02} définie par :

$$\hbar\omega_{02} = \epsilon_2 - \epsilon_0 \simeq 1.946\hbar\Omega \quad (8.14)$$

(la valeur de ω_{02} ci-dessus est obtenue numériquement). Sur la fig. 8.3 on voit plus de détails sur la résonance principale. Pour les excitation faibles, la résonance a une allure que l’on peut comprendre : lorsqu’on excite le système avec une fréquence égale à la différence de fréquence entre les deux premiers niveaux, on induit des transitions vers l’état $|1\rangle$. Sur les courbes où l’amplitude de l’excitation est grande, on identifie plusieurs résonances. Elle est plus difficile à interpréter ; certaines résonances correspondent à des transitions de la forme :

$$|n\rangle \rightarrow |n+1\rangle \quad (8.15)$$

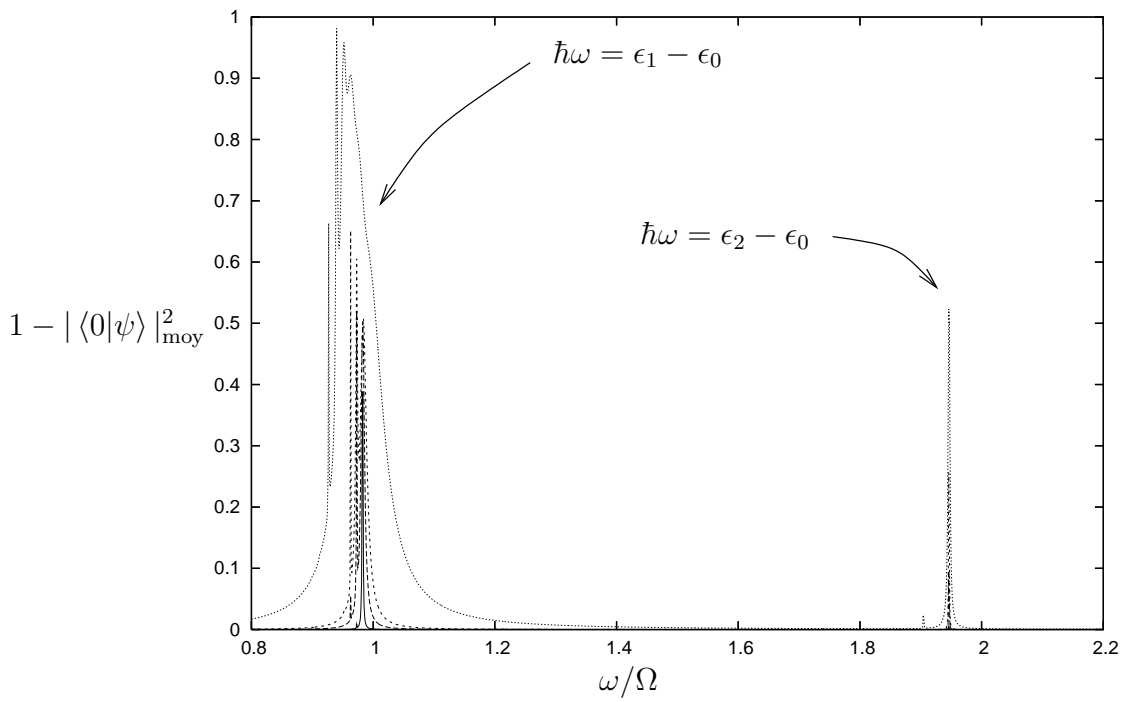


FIG. 8.3 – Réponse en fonction de ω pour plusieurs amplitudes : $a/\sqrt{\hbar\Omega/C} = 0.001, 0.005, 0.01$ et 0.05 , respectivement de bas en haut. Comme on s’y attend, la réponse est d’autant plus forte que l’excitation est forte.

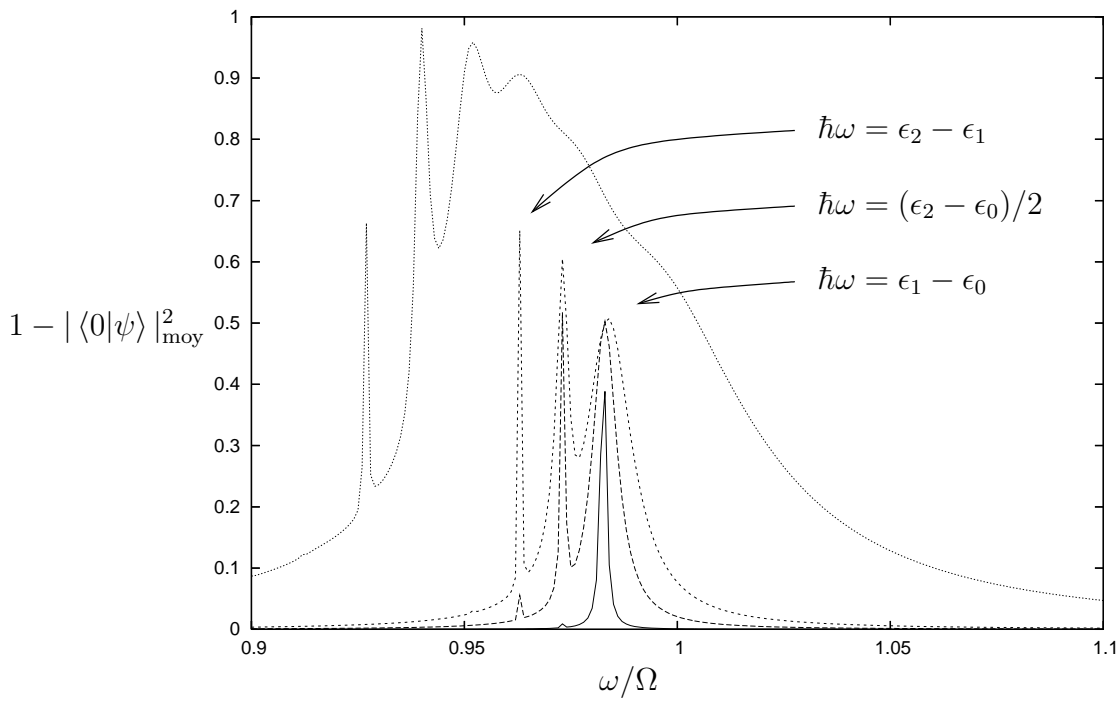


FIG. 8.4 – Zoom autour de la résonance. Réponse en fonction de ω pour plusieurs amplitudes : $a/\sqrt{\hbar\Omega/C} = 0.001, 0.005, 0.01$ et 0.05 , respectivement de bas en haut. Comme on s’y attend, la réponse est d’autant plus forte que l’excitation est forte.

et d'autres correspondent à des transitions de "second ordre" où la fréquence d'excitation vaut exactement la moitié de la fréquence de résonance entre deux niveaux de la forme :

$$|n\rangle \rightarrow |n+2\rangle \quad (8.16)$$

Pour les très fortes excitations, les transitions comme $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$, $|0\rangle \rightarrow |2\rangle$, ... ne sont plus visibles parce que le système ne reste que très peu de temps dans l'état $|0\rangle$.

8.2.3 Balayage en amplitude à la résonance "plasma"

Dans le but d'interpréter des grandeurs directement mesurables par l'équipe expérimentales, intéressons-nous au comportement du système lorsque la fréquence de l'excitation vaut la fréquence plasma ω_p . Pour un oscillateur harmonique excité avec sa fréquence de résonance, l'énergie croît comme t^2 (t - le temps) et diverge². Il n'est pas ainsi pour un système présentant une non-linéarité, aussi faible soit-elle. Dans le système qu'on étudie défini par l'hamiltonien H_0 , éq. 8.2, le terme cubique du potentiel rend le système anharmonique. On entend par oscillateur anharmonique, un oscillateur dont la fréquence d'oscillation dépend de son amplitude (donc de son énergie). Intuitivement, on comprend que si on excite le système (initialement au repos) avec la fréquence de fond de puits du potentiel (donc en résonance) alors son énergie va commencer à croître. Seulement, lorsque l'énergie croît, la fréquence de résonance change et l'excitation n'est plus en résonance. Le comportement d'un tel système est différent de celui d'un oscillateur harmonique.

Plus précisément, nous avons résolu numériquement l'équation de Schrödinger dépendant du temps pour une fréquence d'excitation $\omega = \omega_p$ en résonance et des valeurs successives de l'amplitude a . Sur la fig. 8.5 on voit l'évolution au cours du temps de la population de l'état fondamental lorsqu'on applique l'excitation. On voit qu'elle oscille avec une fréquence qu'on appellera Ω_R (contrairement à un oscillateur harmonique où l'on ne peut pas observer d'oscillation analogue). Il s'agit d'un phénomène dû à l'anharmonicité.

En ordre de grandeur $\Omega_R \ll \Omega$; l'oscillation de la population se fait à une échelle de temps très grande devant l'échelle de temps caractéristique de l'oscillateur, ce qui la rend accessible expérimentalement. En particulier, on va s'intéresser à la dépendance $\Omega_R(a)$ directement mesurée par l'équipe expérimentale du CRTBT. Sur la fig. 8.6 on voit la comparaison entre les prédictions numériques et les mesures expérimentales; nous constatons une adéquation suffisante entre les deux.

8.2.4 Conclusion de l'étude numérique

L'approche numérique que nous avons appliquée au problème nous a permis de confronter ce modèle simple aux résultats expérimentaux. Nous avons aussi vu quel était le régime

²pour s'en convaincre, on peut par exemple résoudre l'équation du mouvement d'un oscillateur en présence d'une excitation sinusoïdale :

$$\ddot{x} + x^2 = \cos t \quad (8.17)$$

On trouve que son énergie $(\dot{x}^2 + x^2)/2 \sim t^2/8$

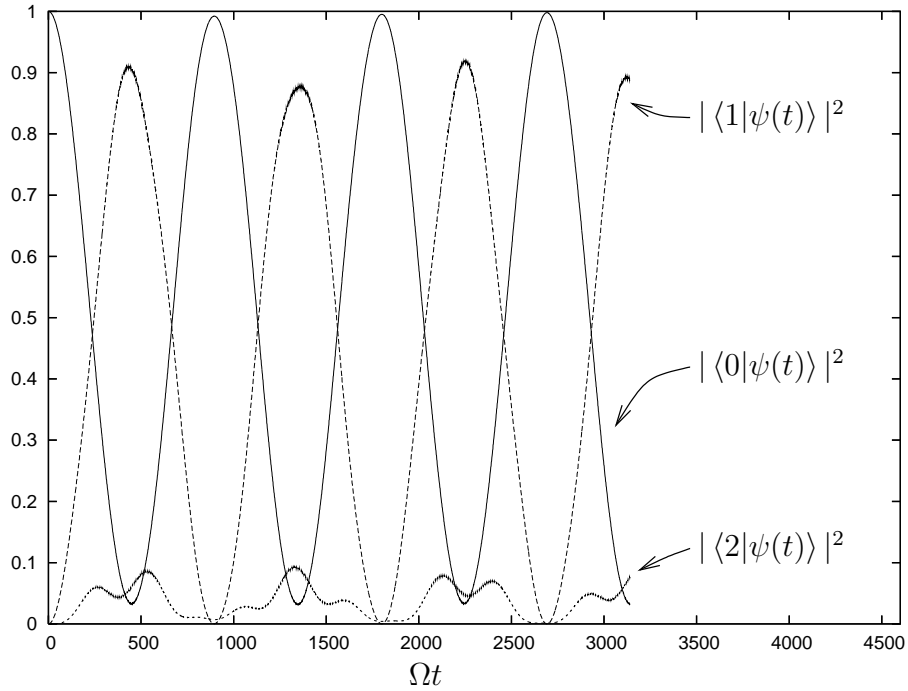


FIG. 8.5 – Population des états $|0\rangle$, $|1\rangle$ et $|2\rangle$ en fonction du temps lorsqu’une excitation de fréquence ω_p est appliquée au système.

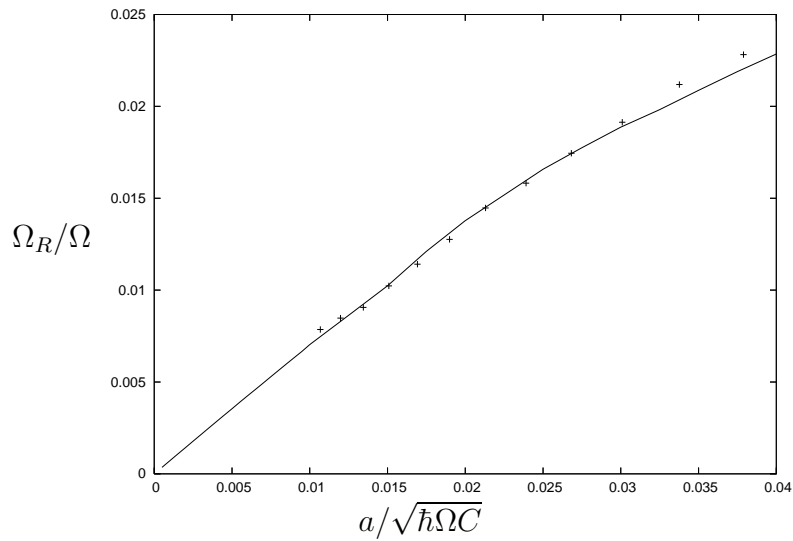


FIG. 8.6 – Fréquence d’oscillation de la population de l’état $|0\rangle$ en fonction de l’amplitude de l’excitation. lorsqu’une excitation de fréquence ω_p est appliquée au système. En trait plein, le résultat du calcul numérique; les points marqués avec des “+” correspondent aux valeurs mesurées expérimentalement. Cette courbe est obtenue sans paramètre ajustable.

atteint par le système selon l'excitation qu'on lui applique. Cependant, on aimerait comprendre plus en détail la dynamique de ce système. On aimerait aussi trouver une "signature quantique" accessible expérimentalement et voir si elle a été observée lors des mesures.

Pour ce faire, nous allons faire deux études : une étude dans le cadre de la mécanique classique et une étude quantique. Ensuite nous allons comparer les résultats pour dégager une différence entre les deux et reconnaître une "signature quantique".

8.3 Étude classique

Dans cette partie, nous souhaitons étudier la dynamique du système classique décrit par l'hamiltonien suivant :

$$H = \frac{q^2}{2} + \frac{\varphi^2}{2} - \sigma\varphi^3 - a\varphi \cos \omega t \quad (8.18)$$

Il s'agit du système précédent décrit par l'éq. 8.3. Dans la suite, nous allons utiliser des méthodes de perturbation canonique [37, 38, 39, 40]. Tout d'abord, mettons l'excitation sous une forme qui nous sera utile par la suite ; pour cela, appliquons le changement de variables suivant :

$$\varphi' = \varphi \quad (8.19)$$

$$q' = q - \frac{a}{2\omega} \sin \omega t \quad (8.20)$$

Nous obtenons un nouvel hamiltonien³

$$H' = \frac{q'^2}{2} + \frac{\varphi'^2}{2} - \sigma\varphi'^3 - \frac{a}{2}(\varphi' \cos \omega t - \frac{q'}{\omega} \sin t) \quad (8.25)$$

Dans ce qui suit nous allons nous intéresser exclusivement au cas où l'excitation est en résonance avec le fond du puits, nous allons prendre $\omega = 1$. Expérimentalement σ et a sont petits devant 1 en ordre de grandeur ($\sigma \sim 10^{-2}$ et $a \sim 10^{-3}$). Ceci va nous permettre

³Ce changement de variable est généré par la fonction génératrice S suivante :

$$S(\varphi, q') = \left(q' + \frac{a}{2\omega} \sin \omega t \right) \varphi \quad (8.21)$$

dans ce cas le changement canonique s'effectue par les équations :

$$\varphi' = \frac{\partial S}{\partial q'} = \varphi \quad (8.22)$$

$$q = \frac{\partial S}{\partial \varphi} = q' + \frac{a}{2\omega} \sin \omega t \quad (8.23)$$

$$H' = H(\varphi, q) + \frac{\partial S}{\partial t} \quad (8.24)$$

d'utiliser des méthodes de perturbation canonique. Écrivons l'hamiltonien en termes de variables angle–action (θ, I) :

$$\varphi' = \sqrt{2I} \cos \theta \quad (8.26)$$

$$q = \sqrt{2I} \sin \theta \quad (8.27)$$

où l'angle θ est 2π -périodique et l'action $I \geq 0$. Ce changement de variable est valable près du fond du puits de potentiel ; on vérifie qu'il est canonique et on trouve pour l'hamiltonien :

$$H' = \underbrace{I - \sigma(2I)^{3/2} \cos^3 \theta}_K - \underbrace{a\sqrt{2I} \cos(\theta - t)}_V \quad (8.28)$$

Pour l'instant laissons de côté l'excitation V et concentrons sur le terme K , il correspond à l'hamiltonien d'un oscillateur anharmonique. La méthode de perturbation canonique consiste à trouver un autre jeu de variables canoniques angle–action $(\tilde{\theta}, \tilde{I})$ dans lequel le nouvel hamiltonien $\tilde{K} = \tilde{K}(\tilde{I})$ ne dépend pas de $\tilde{\theta}$. L'avantage en est qu'avec ces coordonnées, la dynamique du système est triviale :

$$\frac{d\tilde{\theta}}{dt} = \frac{\partial \tilde{K}}{\partial \tilde{I}} = \tilde{\omega}(\tilde{I}) \quad (8.29)$$

$$\frac{d\tilde{I}}{dt} = -\frac{\partial \tilde{K}}{\partial \tilde{\theta}} = 0 \quad (8.30)$$

En effet, \tilde{I} reste constant au cours du temps, égal à sa valeur initiale et $\tilde{\theta}$ croît uniformément dans le temps avec une période $\tilde{T} = 2\pi/\tilde{\omega}(\tilde{I})$. Pour effectuer un tel changement canonique on utilise une fonction génératrice $S(\theta, \tilde{I})$ telle que :

$$\tilde{\theta} = \frac{\partial S}{\partial \tilde{I}}(\theta, \tilde{I}) \quad (8.31)$$

$$I = \frac{\partial S}{\partial \theta}(\theta, \tilde{I}) \quad (8.32)$$

En ce sens il faut considérer les variables $\tilde{\theta}$ et I comme fonctions de (θ, \tilde{I}) .

Développements en puissances σ

Pour déterminer $\tilde{K}(\tilde{I})$ nous allons suivre la méthode présentée dans les refs. [37, 38].

Utilisons l'hypothèse que σ est petit devant 1 pour développer S et I autour de $\sigma = 0$. Formellement, cela s'écrit⁴ :

$$S(\theta, \tilde{I}) = S_0 + \sigma S_1 + \sigma^2 S_2 + \dots \quad (8.33)$$

$$I(\theta, \tilde{I}) = \tilde{I} + \sigma \frac{\partial S_1}{\partial \theta} + \sigma^2 \frac{\partial S_2}{\partial \theta} + \dots \quad (8.34)$$

⁴Remarquons que pour $\sigma = 0$, nous devons avoir $\tilde{I} = I$ et $\tilde{\theta} = \theta$, d'où les termes à l'ordre zéro du développement ci-dessus

Le nouvel hamiltonien par hypothèse ne dépend pas de θ et s'écrit comme une fonction uniquement de \tilde{I} , on peut le développer comme suit :

$$\tilde{K}(\tilde{I}) = \tilde{K}_0(\tilde{I}) + \sigma \tilde{K}_1(\tilde{I}) + \sigma^2 \tilde{K}_2(\tilde{I}) + \dots \quad (8.35)$$

Par ailleurs, nous devons avoir :

$$\tilde{K}(\tilde{I}) = K(\theta, I(\theta, \tilde{I})) \quad (8.36)$$

$$= K(\theta, \tilde{I} + \sigma \frac{\partial S_1}{\partial \theta} + \sigma^2 \frac{\partial S_2}{\partial \theta} + \dots) \quad (8.37)$$

En développant $K(\theta, I)$ autour du point (θ, \tilde{I}) nous obtenons :

$$\tilde{K}(\tilde{I}) = K(\theta, \tilde{I}) + \frac{\partial K}{\partial I} \times \left(\sigma \frac{\partial S_1}{\partial \theta} + \sigma^2 \frac{\partial S_2}{\partial \theta} + \dots \right) \quad (8.38)$$

En remplaçant K par son expression on obtient finalement :

$$\tilde{K}(\tilde{I}) = \tilde{I} + \sigma \left[\frac{\partial S_1}{\partial \theta} - (2\tilde{I})^{3/2} \cos^3 \theta \right] + \sigma^2 \left[\frac{\partial S_2}{\partial \theta} - 3\sqrt{2\tilde{I}} \cos^3 \theta \frac{\partial S_1}{\partial \theta} \right] + \dots \quad (8.39)$$

Jusqu'ici nous n'avons rien fait de particulièrement astucieux ; on s'est contenté d'utiliser l'hypothèse que σ est petit pour développer formellement \tilde{K} en séries. La convergence de ces séries est discutée dans les réfs. [37, 38].

Méthode de la moyenne

Rappelons nous que nous voulons déterminer \tilde{K} et \tilde{I} pour comprendre la dynamique du système. Pour cela, nous devons déterminer $\partial S_1 / \partial \theta$ et $\partial S_2 / \partial \theta$ dans l'expression ci-dessus. Par identification, nous obtiendrons les expressions de $\tilde{K}_0, \tilde{K}_1, \tilde{K}_2 \dots$. Pour cela servons-nous du fait que $\tilde{K}(\tilde{I})$ ne dépend pas de θ , alors :

$$\tilde{K}(\tilde{I}) = \langle \tilde{K} \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \tilde{K}(\tilde{I}) d\theta \quad (8.40)$$

il s'agit de la moyenne de \tilde{K} sur une période de θ , d'où le nom de la méthode. Pour que l'égalité ci-dessus soit vraie il faut que tous les termes du développement de \tilde{K} vérifient la même propriété. À l'ordre zéro, on identifie \tilde{K}_0 dans l'éq. 8.39 :

$$\tilde{K}_0(\tilde{I}) = \tilde{I} \quad (8.41)$$

À l'ordre 1 :

$$\tilde{K}_1(\tilde{I}) = \langle \tilde{K}_1 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left[\frac{\partial S_1}{\partial \theta} - (2\tilde{I})^{3/2} \cos^3 \theta \right] d\theta \quad (8.42)$$

En se rappelant que $S_1(\theta, \tilde{I})$ est périodique en θ , on voit que le terme en $\partial S_1 / \partial \theta$ ne contribue pas à l'intégrale. Finalement on trouve :

$$\tilde{K}_1(\tilde{I}) = 0 \quad (8.43)$$

En déduit que :

$$\frac{\partial S_1}{\partial \theta} = (2\tilde{I})^{3/2} \cos^3 \theta \quad (8.44)$$

Remarquons enfin, qu'il n'y a pas de correction à l'énergie au premier ordre en σ . À l'ordre deux, on procède de la même façon :

$$\tilde{K}_2(\tilde{I}) = \langle \tilde{K}_2 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left[\frac{\partial S_2}{\partial \theta} - 3\sqrt{2\tilde{I}} \frac{\partial S_1}{\partial \theta} \right] d\theta \quad (8.45)$$

De même, le terme en $\partial S_2/\partial \theta$ ne contribue pas à l'intégrale car $S_2(\theta, \tilde{I})$ est périodique. On trouve :

$$\tilde{K}_2(\tilde{I}) = -\frac{15}{4}\tilde{I}^2 \quad (8.46)$$

Nous allons nous arrêter à l'ordre 2 en σ . Finalement on obtient :

$$\tilde{K}(\tilde{I}) = \tilde{I} - \frac{15\sigma^2}{4}\tilde{I}^2 \quad (8.47)$$

En en déduit la dépendance de la fréquence d'oscillation du système en fonction de son amplitude :

$$\tilde{\omega}(\tilde{I}) = 1 - \frac{15\sigma^2}{2}\tilde{I} \quad (8.48)$$

8.3.1 Prise en compte de l'excitation

Plaçons nous dans le système de coordonnées canoniques $(\tilde{\theta}, \tilde{I})$ et écrivons l'excitation V (éq. 8.28). Comme l'excitation est d'amplitude très faible (expérimentalement a atteint 10^{-3}), nous allons aller au premier ordre en a et σ^2 . Ceci revient à négliger les termes de la forme $a\sigma$, $a\sigma^2$, a^2 , σ^3 , etc. Dans ce cas l'excitation peut être développée sous la forme :

$$V = -\frac{a}{2}\sqrt{2\tilde{I}} \cos(t - \tilde{\theta}) \quad (8.49)$$

En faisant encore un changement de variable canonique nous allons éliminer la dépendance temporelle de l'excitation. Considérons le changement de variable $(\tilde{\theta}, \tilde{I}) \mapsto (\theta', I')$ de fonction génératrice $S(\tilde{\theta}, I') = (\tilde{\theta} - t)I'$. Les nouvelles observables et le nouvel hamiltonien dans ce système de coordonnées sont :

$$\tilde{I} = \frac{\partial S}{\partial \tilde{\theta}} = I' \quad (8.50)$$

$$\theta' = \frac{\partial S}{\partial I'} = \tilde{\theta} - t \quad (8.51)$$

$$K'(\theta', I') = \tilde{K}(\tilde{I}) - \frac{\partial S}{\partial t} \quad (8.52)$$

$$= -\frac{15\sigma^2}{4}I'^2 - \frac{a}{2}\sqrt{2I'} \cos \theta' \quad (8.53)$$

Le problème ne dépend plus du temps. Le sens physique de ce changement de variable se voit dans la relation $\theta' = \tilde{\theta} - t$, c'est une sorte de référentiel tournant dans l'espace de phase à vitesse angulaire constante égale à 1. Le nouvel hamiltonien est celui d'un oscillateur anharmonique avec une force extérieure constante $-a/2$. On peut s'en convaincre en posant :

$$x = \sqrt{2I'} \cos \theta' \quad (8.54)$$

$$y = \sqrt{2I'} \sin \theta' \quad (8.55)$$

Alors son hamiltonien $H(x, y) \stackrel{\text{def}}{=} K'(\theta', I')$ s'écrit :

$$H(x, y) = -\frac{15\sigma^2}{4} \left[\frac{x^2 + y^2}{2} \right]^2 - \frac{a}{2}x \quad (8.56)$$

Le signe “-” devant le terme anharmonique indique juste qu'il tourne “à l'envers” dans l'espace de phase.

8.3.2 Étude du point d'équilibre

Un point d'équilibre dans le système de coordonnées du “référentiel tournant” correspond à une trajectoire périodique de période $\tilde{\omega}(\tilde{I})$ en coordonnées directes. Le point d'équilibre (x_0, y_0) (il n'y en a qu'un seul) vérifie l'équation suivante :

$$\frac{\partial H}{\partial x}(x_0, y_0) = \frac{\partial H}{\partial y}(x_0, y_0) = 0 \quad (8.57)$$

En utilisant l'expression ci-dessus de H on trouve :

$$y_0 = 0 \quad \text{et} \quad x_0 = -\left(\frac{2a}{15\sigma^2}\right)^{1/3} \quad (8.58)$$

ici, x_0 donne l'amplitude de la trajectoire périodique dans les coordonnées directes. Il est intéressant de remarquer que l'amplitude de la trajectoire stable est proportionnelle à $(a/\sigma^2)^{1/3}$, ce qui implique que la trajectoire stable sera petite en amplitude seulement si $a \ll \sigma^2$. C'est ce que nous allons supposer dans la suite ; c'est le régime atteint par l'équipe expérimentale.

8.3.3 Petits écarts à l'équilibre

Expérimentalement, les conditions initiales pour le système sont le repos, c-à-d $x = y = 0$. Ce point n'est pas un point d'équilibre dans le référentiel tournant ; nous allons donc observer des oscillations “lentes” d'amplitude $x_0 = (a/\sigma^2)^{1/3}$. Les oscillations lentes dans le référentiel tournant correspondent dans le référentiel direct à une modulation d'amplitude des oscillations rapides. Comme x_0 est petit dans le régime qui nous intéresse, nous allons

linéariser H autour du point stationnaire de façon à étudier les oscillations lentes en termes de “petites oscillations”. Le développement donne au second ordre en x et y :

$$H(x, y) = H(x_0, y_0) - \frac{15\sqrt{3}\sigma^2 x_0^2}{4} \times \frac{(y/\sqrt{3})^2 + ((x - x_0)\sqrt{3})^2}{2} \quad (8.59)$$

Il s’agit de l’hamiltonien d’un oscillateur harmonique de fréquence $\Omega_R = 15\sqrt{3}\sigma^2 x_0^2/4$. La trajectoire dans le référentiel tournant est :

$$x(t) = x_0 (1 - \cos \Omega_R t) \quad \text{où} \quad \Omega_R = -\sqrt{3} \left(\frac{15}{8}\right)^{1/3} \sigma^{2/3} a^{2/3} \quad (8.60)$$

Ceci correspond à une modulation totale de l’amplitude des oscillations en coordonnées directes (on peut s’en assurer en déroulant à l’envers tous les changements de variables effectués jusqu’à présent). Expérimentalement on arrive à mesurer directement la fréquence $\Omega_R(a)$ en fonction de l’amplitude de l’excitation. C’est la quantité qu’on a étudié numériquement dans la section précédente.

8.3.4 Discussion

La pente à l’origine de la courbe $\Omega_R(a)$ ci-dessus est infinie lorsque $a \rightarrow 0$. Manifestement ce n’est pas le cas de la courbe numérique “exacte”, fig. 8.6. Ceci suggère de faire l’étude quantique pour $a \rightarrow 0$ pour comprendre ce qui se passe exactement. On s’attend à ce que la différence entre classique et quantique soit la plus flagrante au point $a = 0$, en effet lorsque l’excitation est faible on exploite la dynamique “basse énergie” qui est généralement marquée par une signature quantique.

8.4 Étude quantique dans la limite $a \rightarrow 0$

Numériquement, on constate (fig. 8.5) que lorsque l’on excite faiblement le système, à la résonance uniquement les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ tendent à être occupés. Physiquement, cela se comprend : en effet, la fréquence de résonance ω_p entre les deux premiers niveaux diffère de la fréquence de résonance entre les niveaux successifs ; pour des excitations de faible amplitude, il n’est donc pas possible de les peupler. La dynamique se réduit, donc, aux deux premiers niveaux. Ceci est d’autant mieux vérifié que l’amplitude d’excitation est petite. Cette remarque va nous permettre de simplifier l’étude en adoptant la démarche suivante : nous allons projeter la dynamique sur les deux premiers états stationnaires (espace de Hilbert de dimension 2) et faire une étude d’un système à deux niveaux ordinaire.

Nous allons nous donner comme point de départ l’hamiltonien classique, le quantifier puis projeter sur l’espace à deux états :

$$\hat{H} = \frac{\hat{q}^2}{2} + \frac{\hat{\varphi}^2}{2} - \sigma \hat{\varphi}^3 - \frac{a}{2} (\hat{\varphi} \cos t - \hat{q} \sin t) \quad (8.61)$$

Soit le projecteur sur l'espace à 2 états :

$$\hat{\Pi} = (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) \quad (8.62)$$

dans la suite nous allons considérer les observables projetées définies comme suit :

$$\hat{H}_{0\Pi} = \hat{\Pi}\hat{H}_0\hat{\Pi} \quad (8.63)$$

$$\hat{H}_{\Pi} = \hat{\Pi}\hat{H}\hat{\Pi} \quad (8.64)$$

$$\hat{\varphi}_{\Pi} = \hat{\Pi}\hat{\varphi}\hat{\Pi} \quad (8.65)$$

$$\hat{q}_{\Pi} = \hat{\Pi}\hat{q}\hat{\Pi} \quad (8.66)$$

à une constante près, $\hat{H}_{0\Pi}$ s'écrit :

$$\hat{H}_{0\Pi} = \frac{\omega_p}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (8.67)$$

Tout d'abord déterminons ω_p . Au lieu d'utiliser une approche "calcul perturbatif quantique", nous allons réutiliser le calcul classique de la section précédente. Partons de l'hamiltonien $\tilde{K}(\tilde{I})$ et quantifions-le. Comme les variables $(\tilde{\theta}, \tilde{I})$ sont des observables angles-actions, le spectre des valeurs propres de \tilde{I} sont de la forme $\epsilon_n = (n + 1/2)$ avec $n \geq 0$ entier. On en déduit que le spectre de :

$$\tilde{K} = \tilde{I} - \frac{15\sigma^2}{4}\tilde{I}^2 \quad (8.68)$$

est :

$$\epsilon_n = (n + 1/2) - \frac{15\sigma^2}{4}(n + 1/2)^2 \quad (8.69)$$

ceci nous livre la fréquence ω_p définie par :

$$\omega_p \stackrel{\text{def}}{=} \epsilon_1 - \epsilon_0 = 1 - \frac{15\sigma^2}{2} \quad (8.70)$$

Comme dans l'étude classique, nous allons nous placer au premier ordre en a et σ^2 . Dans ce cas les projections $\hat{\varphi}_{\Pi}$ et \hat{q}_{Π} des observables présentes dans le terme de l'excitation (éq. 8.61) sont données par les observables d'un oscillateur harmonique de fréquence ω_p projetées sur les deux premiers niveaux :

$$\hat{\varphi}_{\Pi} = \sqrt{\frac{1}{2\omega_p}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.71)$$

$$\hat{q}_{\Pi} = \sqrt{\frac{\omega_p}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \quad (8.72)$$

Finalement, l'hamiltonien à deux niveaux s'écrit :

$$\hat{H}_{\Pi} = \frac{\omega_p}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{a}{2} \sqrt{\frac{1}{2\omega_p}} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega_p t} \\ e^{i\omega_p t} & 0 \end{pmatrix} \quad (8.73)$$

Expérimentalement, l'état initial est $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$; calculons l'évolution au cours du temps de $\langle 0|\psi(t)\rangle$ en résolvant l'équation de Schrödinger :

$$i \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \end{pmatrix} = \hat{H}_\Pi \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \end{pmatrix} \quad (8.74)$$

C'est un problème bien connu traité en détail dans de nombreux ouvrages de mécanique quantique [30]; on pose :

$$\begin{pmatrix} \chi_0 \\ \chi_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_0 e^{-i\omega_p t/2} \\ \psi_1 e^{i\omega_p t/2} \end{pmatrix} \quad (8.75)$$

Alors l'équation se simplifie :

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \chi_0 \\ \chi_1 \end{pmatrix} = \frac{ia}{2} \sqrt{\frac{1}{2\omega_p}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_0 \\ \chi_1 \end{pmatrix} \quad (8.76)$$

qu'on résout sans peine; on trouve comme solution pour la quantité qui nous intéresse :

$$\langle 0|\psi\rangle(t) = e^{i\omega t} \cos\left(\frac{at}{2\sqrt{2}\omega_p}\right) \quad (8.77)$$

La quantité mesurable expérimentalement est en fait $|\langle 0|\psi\rangle|^2(t)$ qui s'écrit :

$$|\langle 0|\psi\rangle|^2(t) = \frac{1}{2} (1 + \cos \Omega_R t) \quad \text{où} \quad \Omega_R = \frac{a}{\sqrt{2}\omega_p} \quad (8.78)$$

Plus précisément, l'équipe expérimentale a mesuré la dépendance de $\Omega_R(a)$ en fonction l'amplitude a de l'excitation. Contrairement à la solution classique (section précédente) où on avait trouvé $\Omega_R \propto a^{2/3}$, en mécanique quantique on trouve $\Omega_R \propto a$. Cette relation reproduit parfaitement la courbe numérique fig. 8.6 près du point $a = 0$.

8.5 Discussion

L'étude numérique nous a donné des résultats quantitatifs qui reproduisent les mesures expérimentales. Les études analytiques classique et quantique nous ont permis de "sentir" la dynamique. En particulier, les expressions obtenues $\Omega_R(a)$ quand $a \rightarrow 0$ dans les deux cas nous permettent d'apprécier la différence entre quantique et classique (cf. tab. 8.1)

Dans les deux cas on observe des oscillations dues à l'anharmonicité du système. Cependant la linéarité de $\Omega_R(a)$ à l'origine (dans le cas quantique) est une signature quantique qui ne peut pas être expliquée par la mécanique classique. On peut donc interpréter la dynamique quantique en termes d'oscillations de Rabi à deux niveaux.

Sur la fig. 8.6 les points expérimentaux de $\Omega_R(a)$ pour a petit, sont alignés sur une droite. On peut en conclure que le dispositif expérimental atteint un régime quantique à deux niveaux. Son comportement est dominée par la nature quantique du dispositif.

| régime | comportement de $\Omega_R(a)$ |
|-----------|-------------------------------|
| classique | $\Omega_R \propto a^{2/3}$ |
| quantique | $\Omega_R \propto a$ |

TAB. 8.1 – Comportement de Ω_R lorsque $a \ll 1$ selon le régime

Conclusion et perspectives

Nous avons étudié les effets de l’environnement à basse température sur un petit système quantique. Pour mener cette discussion, nous avons étudié un modèle très simple : un oscillateur harmonique (“la particule”) couplé à un bain d’oscillateurs harmoniques (“l’environnement”). C’est un système hamiltonien qui, du point de vue de la mécanique classique, modélise bien la dissipation et les fluctuations thermiques.

Nous avons considéré la version quantique du modèle. Tout d’abord, nous avons étudié l’état d’équilibre du système total ; pour ce faire, nous avons appliqué la “méthode de la résolvante réduite”, courante en théorie spectrale. Elle nous a permis de calculer et de discuter sous un angle nouveau l’opérateur densité réduit de la particule, déjà obtenu par d’autres méthodes [25, 24, 17]. Nous avons vu que même à température nulle, la particule subit des effets thermiques effectifs résultant de son intrication avec l’environnement. Ensuite, toujours grâce à la méthode de la résolvante réduite, nous avons étudié l’évolution quantique exacte de l’opérateur densité réduit de la particule : celui-ci tend pour les temps longs vers l’état d’équilibre, malgré l’évolution unitaire du système total (particule et environnement).

Ces résultats ne sont pas propres à la mécanique et se transposent naturellement aux circuits électriques quantiques. Nous avons vu comment avec le même formalisme on peut coupler capacitivement un système mécanique (un oscillateur harmonique) à un environnement électrique (une résistance). Sur base de ces discussions, nous avons proposé l’esquisse d’un dispositif expérimental permettant d’illustrer les résultats précédents et de mettre en évidence l’effet de l’environnement sur la particule. Dans le dispositif, une particule entre dans une région “dissipative” où elle est couplée avec un environnement contrôlé. Elle y réside suffisamment de temps pour se thermaliser avec ce dernier, puis elle en sort pour être mesurée dans interféromètre de type Aharonov–Bohm donnant sa longueur de cohérence spatiale. Celle-ci est réduite à cause du couplage entre particule et l’environnement : cette dernière n’est pas capable de produire des interférences sur une longue distance. L’effet persiste même à basse température et il est d’autant plus important que le couplage avec l’environnement est fort.

En perspective, ce dispositif nous a suggéré deux réalisations expérimentales possibles. Tout d’abord, on peut penser à un gaz bidimensionnel d’électrons dans lequel, en absence d’environnement, la longueur de cohérence des électrons pourrait atteindre en ordre de grandeur la taille du circuit [33]. L’environnement dominant dans ce cas serait réalisé par un circuit extérieur contrôlé. La difficulté dans ce type de dispositif serait la mesure précise de

la longueur de cohérence des électrons ; en effet les contacts ponctuels semblent difficilement réalisables. De plus, dans l'étude théorique, nous devons tenir compte du principe de Pauli, et plus généralement des effets à N particules, dans le gaz, comme discuté dans les travaux de F. Marquardt *et al.* [53].

Une autre réalisation expérimentale du dispositif serait donné par un gaz d'atomes froids dans un piège magnétique. La décohérence des atomes serait induite par les fluctuations du champ magnétique appliqué ("l'environnement"). Des expériences similaires ont été proposées par C. Schroll *et al.* [52] pour étudier la décohérence à haute température. Il serait intéressant d'étendre la discussion au cas où l'environnement est à basse température. Dans ce cas, les effets étudiés dans cette thèse pourront être mesurés.

Sur le plan théorique, nous avons vu que la méthode de la résolvante réduite nous a permis de traiter d'une manière naturelle les problèmes quadratiques où la décomposition de la dynamique en modes normaux est possible. Nous avons étudié un modèle où le couplage entre la particule et l'environnement se fait par l'intermédiaire de leurs positions. Il serait intéressant d'utiliser la même approche pour aborder un modèle similaire mais avec un couplage plus général : en position *et* en impulsion.

Dans le dernier chapitre, indépendamment du travail sur la décohérence, nous avons étudié la dynamique d'un SQUID-DC en présence d'une excitation radio-fréquences. Nous avons ramené sa dynamique classique à celle d'un oscillateur harmonique "lent", c'est donc un problème quadratique et on peut s'interroger quant à la possibilité d'y intégrer les effets de l'environnement en utilisant l'approche considérée tout au long de cette thèse.

Annexe A

Remarque sur le théorème fluctuation–dissipation

Pour un système hamiltonien isolé, à l'équilibre thermique (lorsqu'il est dans un état de Gibbs), le théorème fluctuation–dissipation relie réponse impulsionnelle et fluctuations statistiques. L'hypothèse de “système hamiltonien fermé” est cruciale [41].

Un système ouvert, décrit par l'équation de Langevin (tel qu'une particule brownienne) ne vérifie pas cette hypothèse. On peut cependant appliquer le théorème fluctuation–dissipation à l'ensemble particule et environnement au sens du chapitre 3. Nous allons voir qu'un modèle pour l'environnement justifie l'emploi du théorème fluctuation–dissipation pour un système ouvert [25, 24, 17].

A.1 Énoncé du théorème fluctuation–dissipation

A.1.1 Notations et situation physique

Soit un système quantique d'hamiltonien \hat{H}_0 indépendant du temps, supposons que pour les temps négatifs $t < 0$ son opérateur densité réduit soit un état de Gibbs (stationnaire) à température $1/\beta$:

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta\hat{H}_0}}{Z} \quad \text{où} \quad Z = \text{tr} e^{-\beta\hat{H}_0} \quad (\text{A.1})$$

Soient \hat{x} et \hat{y} deux observables quelconques indépendantes du temps.

A.1.2 Définition de la réponse impulsionnelle

Supposons qu'à l'instant $t = 0$, on excite le système avec une impulsion de sorte que son hamiltonien soit :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \epsilon\delta(t)\hat{x} \quad (\text{A.2})$$

où ϵ est un nombre réel petit. La valeur moyenne au cours du temps de l'observable \hat{y} peut être développée en série de ϵ comme suit :

$$\langle \hat{y}_\epsilon(t) \rangle = \langle \hat{y}_0(t) \rangle + \epsilon \phi(t) + o(\epsilon) \quad (\text{A.3})$$

cela définit $\phi(t)$, la réponse impulsionnelle de \hat{y} à \hat{x} . Ci-dessus, l'opérateur $\hat{y}_\epsilon(t)$ désigne la représentation de Heisenberg de \hat{y} pour l'évolution générée par l'hamiltonien excité. L'indice ϵ est là pour rappeler que l'évolution se fait en présence d'excitation¹. Insistons sur le fait que $\phi(t)$ ne dépend pas de ϵ , elle a un sens à la limite $\epsilon \rightarrow 0$, en absence d'excitation. Remarquons enfin que $\phi(t) = 0$ pour $t < 0$, est conséquence de la causalité dans l'évolution du système.

A.1.3 Définition de la fonction de transfert

La fonction de transfert pour le système ci-dessus est définie à partir de la transformée de Laplace de sa réponse impulsionnelle :

$$\chi(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\gamma \rightarrow 0^+} \int_0^\infty \phi(t) e^{-(i\omega + \gamma)t} dt \quad (\text{A.5})$$

A.1.4 Énoncé de la formule de Kubo

Une démonstration élégante de la formule de Kubo se trouve dans le livre de E. Fick [41]. Ici, nous allons juste l'énoncer. Soit $\hat{y}(t)$ la représentation de Heisenberg de l'observable \hat{y} lorsque le système évolue sans excitation (c'est à dire par l'hamiltonien \hat{H}_0). La formule de Kubo s'énonce :

$$\phi(t) = \left\langle \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}(0), \hat{y}(t)] \right\rangle Y(t) \quad (\text{A.6})$$

où $Y(t)$ est définie par :

$$Y(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t < 0 \\ 1 & \text{si } t > 0 \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

Insistons sur le fait que l'évolution est générée par \hat{H}_0 (sans excitation) et que le système se trouve à tout instant dans un état de Gibbs (stationnaire), éq. A.1.

A.1.5 Énoncé du théorème fluctuation–dissipation

Le théorème fluctuation–dissipation est une réécriture de la formule de Kubo en terme de la fonction de transfert $\chi(\omega)$. Il s'écrit comme suit (cf. [41]) :

$$\langle \hat{y}(t) \hat{x}(0) \rangle = -\frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{I}m \chi(\omega) \left(1 + \coth \frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) e^{i\omega t} d\omega \quad (\text{A.8})$$

¹Plus précisément :

$$\langle y_\epsilon \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \text{tr} \left[\hat{\rho} \hat{U}_\epsilon^+ \hat{y} \hat{U}_\epsilon \right] \quad (\text{A.4})$$

où U_ϵ est l'opérateur évolution à l'instant t généré par l'hamiltonien \hat{H}_ϵ

A.2 L'oscillateur amorti avec le théorème fluctuation–dissipation

Un système ouvert (tel qu'une particule brownienne) décrit par l'équation de Langevin n'est pas défini par un hamiltonien et il n'est donc pas possible a priori d'appliquer le théorème fluctuation–dissipation. Cependant, comme expliqué dans les chapitres 3 et 4 l'environnement peut être décrit de façon hamiltonienne ; on peut donc appliquer le théorème à l'ensemble particule et environnement, cf. [25, 26, 24, 17]. À titre d'exemple considérons un oscillateur le harmonique couplé à un environnement l'ensemble étant décrit par l'hamiltonien éq. 4.1, page 35. En représentation de Heisenberg, les équations du mouvement sont données par éq. 4.9, page 36. Un calcul identique à celui de la section 1.2.1, page 10, donne rigoureusement l'équation de Langevin quantique suivante :

$$m \frac{d^2 \hat{q}}{dt^2} = -m\Omega^2 \hat{q} - \int_0^t \frac{d\hat{q}}{dt}(t-\tau) \Gamma(\tau) d\tau + \hat{F}(t) \quad (\text{A.9})$$

où l'on a posé :

$$\Gamma(t) = \sum_{i=0}^N \mu_i \omega_i^2 \cos \omega_i t \quad (\text{A.10})$$

$$\hat{F}(t) = \sum_{i=0}^N \left\{ (\hat{\varphi}_i(0) - \hat{q}(0)) \cos \omega_i t + \frac{\hat{\pi}_i(0)}{\mu_i \omega_i} \sin \omega_i t \right\} \mu_i \omega_i^2 \quad (\text{A.11})$$

À la limite continue et pour un environnement est ohmique (cf. section 1.2.2, page 11), l'équation de Langevin prend la forme suivante :

$$m \frac{d^2 \hat{q}}{dt^2} = -m\Omega^2 - \eta \frac{d\hat{q}}{dt} + \hat{F}(t) \quad (\text{A.12})$$

Supposons que le système total (ensemble particule et environnement) soit dans un état de Gibbs à température $1/\beta$ et déterminons sa réponse impulsionnelle $\phi(t)$ en choisissant comme observables $\hat{x} = \hat{q}$ et $\hat{y} = \dot{\hat{q}}$. Pour ce faire trouvons l'équation à laquelle obéit la réponse impulsionnelle ; dérivons deux fois par rapport au temps la formule de Kubo :

$$i\hbar\phi = \langle [\hat{q}(0), \hat{q}(t)] \rangle Y(t) \quad (\text{A.13})$$

$$i\hbar\dot{\phi} = \langle [\hat{q}(0), \frac{d\hat{q}}{dt}(t)] \rangle Y(t) \quad (\text{A.14})$$

$$i\hbar\ddot{\phi} = \langle [\hat{q}(0), \frac{d^2\hat{q}}{dt^2}(t)] \rangle Y(t) + \langle [\hat{q}(0), \frac{d\hat{q}}{dt}(0)] \rangle \delta(t) \quad (\text{A.15})$$

En se rappelant que $[\hat{q}(0), \hat{p}(0)] = i\hbar$ et que $m d\hat{q}/dt = \hat{p}$ on trouve que le second terme vaut $i\hbar\delta$. Pour calculer le premier terme, on remplace $d^2\hat{q}/dt^2$ par son expression de l'équation de Langevin et on trouve :

$$i\hbar m \ddot{\phi} = \langle [\hat{q}(0), -m\Omega\hat{q}(t)] \rangle Y(t) + \langle [\hat{q}(0), -\eta \frac{d\hat{q}}{dt}(t)] \rangle Y(t) + \langle [\hat{q}(0), \hat{F}(t)] \rangle Y(t) + i\hbar\delta \quad (\text{A.16})$$

Le premier terme est proportionnel à $\phi(t)$. En sortant la dérivation par rapport au temps du commutateur, on identifie le second terme à $-i\hbar\eta\dot{\phi}$. Comme $\hat{F}(t)$ et $\hat{q}(0)$ commutent, le troisième terme est nul. Au final on trouve :

$$m\ddot{\phi} + \eta\dot{\phi} + m\Omega^2\phi = \delta(t) \quad (\text{A.17})$$

On reconnaît, la réponse impulsionnelle d'un oscillateur harmonique classique amorti. Pour trouver la fonction de transfert, on prend la transformée de Laplace de l'équation ci-dessus et on la résout. On trouve pour la partie imaginaire de $\chi(\omega)$:

$$\mathcal{Im} \chi(\omega) = -\frac{\eta\omega}{m^2(\Omega^2 - \omega^2)^2 + \eta^2\omega^2} \quad (\text{A.18})$$

Injectons $\mathcal{Im} \chi$ dans l'expression du théorème fluctuation–dissipation on trouve :

$$\langle \hat{q}(t)\hat{q}(0) \rangle = \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\eta\omega}{m^2(\Omega^2 - \omega^2)^2 + \eta^2\omega^2} \left(1 + \coth \frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) e^{i\omega t} d\omega \quad (\text{A.19})$$

Si on prend $t = 0$ on retrouve exactement l'expression de $\langle q^2 \rangle$ de l'éq. 3.75, page 29.

A.2.1 Discussion

Sur la base de considérations phénoménologiques et sans utiliser de modèle pour l'environnement, on aurait pu injecter la réponse impulsionnelle déduite de l'équation de Langevin classique dans le théorème fluctuation–dissipation [25]. Alors on aurait obtenu strictement le même résultat que ci-dessus. À première vue, cela aurait pu paraître surprenant dans la mesure où on aurait appliqué le théorème fluctuation–dissipation à un système ouvert (à priori incompatible avec les hypothèses requises). Mais considérer un modèle pour l'environnement permet de justifier les considérations phénoménologiques servant de point de départ. Physiquement, on pourrait dire que la réponse impulsionnelle du système contient aussi "l'information" sur l'environnement.

Annexe B

Couplage entre z et q

On reprend le modèle classique de la sec. 1.2, page 10, composé d'un oscillateur harmonique couplé à un ensemble d'oscillateurs harmoniques. Et on y ajoute une coordonnée supplémentaire z . Selon laquelle la dynamique est celle de la particule libre. On suppose que le couplage entre particule et environnement dépend de z .

B.1 Hamiltonien

On suppose que la particule se déplace dans un plan paramétré par les coordonnées q et z . Selon q la dynamique est donnée par l'hamiltonien éq. 1.24, déjà étudiée. Selon z on prend la dynamique libre. Le couplage entre q et z se fait par l'hamiltonien suivant :

$$H = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{p^2}{2m} + V(q) + \int_0^\infty \frac{\pi^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2}{2}(\varphi - \lambda(z)q)^2 d\omega \quad (\text{B.1})$$

Quand $\lambda(z) = 0$ il n'y a pas de couplage entre particule et environnement, quand elle $\lambda(z) = 1$ le couplage est "total". On remarque que si λ est constante dans un domaine alors les dynamiques selon z et q sont indépendantes. Dans la suite on va s'intéresser plus particulièrement au cas où $\lambda(z)$ fait un saut brusque.

B.2 Équations du mouvement

Les équations de Hamilton pour l'ensemble des coordonnées sont :

$$\dot{q} = \frac{p}{m} \quad \dot{p} = -\frac{\partial V}{\partial q} + \lambda(z) \int_0^\infty \mu\omega^2(\varphi - \lambda(z)q) d\omega \quad (\text{B.2})$$

$$\dot{z} = \frac{p_z}{m} \quad \dot{p}_z = \lambda'(z)q \int_0^\infty \mu\omega^2(\varphi - \lambda(z)q) d\omega \quad (\text{B.3})$$

$$\dot{\varphi} = \frac{\pi}{\mu} \quad \dot{\pi} = -\mu\omega^2(\varphi - \lambda(z)q) \quad (\text{B.4})$$

Pour trouver l'équation du mouvement de la particule uniquement, on procède exactement comme dans la sec. 1.2, (on détaille pas les calculs ici). Cela revient à remplacer formellement :

$$q(t) \longrightarrow \lambda(z(t))q(t) \quad (\text{B.5})$$

il faut aussi bien prendre garde à ne pas oublier que z dépend du temps t . Finalement, on obtient :

$$\dot{p} = -\frac{\partial V}{\partial q} + \lambda(z) \left[-\int_0^t \Gamma(t-\tau) \frac{d}{d\tau} (\lambda(z)q) d\tau + F(t) \right] \quad (\text{B.6})$$

$$\dot{p}_z = \lambda'(z)q \left[-\int_0^t \Gamma(t-\tau) \frac{d}{d\tau} (\lambda(z)q) d\tau + F(t) \right] \quad (\text{B.7})$$

où l'on a posé comme précédemment :

$$\Gamma(t) = \int_0^\infty \mu\omega^2 \cos \omega t d\omega \quad (\text{B.8})$$

$$F(t) = \int_0^\infty \left[(\varphi_0 - \lambda(z_0)q_0) \cos \omega t + \frac{\pi_0}{\mu\omega} \sin \omega t \right] \mu\omega^2 d\omega \quad (\text{B.9})$$

$z_0, q_0, p_0, \varphi_0(\omega), \pi_0(\omega)$ représentent les conditions initiales du système à l'instant $t = 0$.

B.3 Discussion physique

On s'intéresse, ici au cas où $\lambda(z)$ fait un saut brusque. Par "brusque", on entend que le temps que la particule met à franchir le saut de λ est plus petit que tous les temps caractéristiques de la dynamique selon q . Cette dernière est caractérisée par les temps suivants :

- Temps typique d'oscillation dans le potentiel $V(q)$.
- Temps typique de dissipation.
- Temps de mémoire de l'environnement.

Cette hypothèse revient à considérer le cas où $\lambda(z)$ est une fonction "marche" :

$$\lambda(z) = Y(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } z < 0 \\ 1 & \text{si } z > 0 \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

Dans ce cas, on s'attend à observer des diffusions de la particule au passage du point $z = 0$.

B.4 Diffusion

Supposons que la vitesse selon z de la particule est telle qu'il existe un instant t_0 tel que $z(t_0) = 0$. Dans un premier temps nous allons étudier le cas où la particule arrive à franchir la barrière. Utilisons la forme particulière de la fonction λ :

$$\lambda(z(t)) = Y(t - t_0) \quad (\text{B.11})$$

$$\frac{d}{dt} \lambda(z(t)) = \delta(t - t_0) \quad (\text{B.12})$$

L'équation du mouvement selon q s'écrit :

$$\dot{p} = -\frac{\partial V}{\partial q} + \lambda(z) \left[-\int_0^t \Gamma(t-\tau) \frac{d}{d\tau} (\lambda(z)q) d\tau + F(t) \right] \quad (\text{B.13})$$

Le facteur $\lambda(z)$ introduit au plus une discontinuité dans \dot{p} , donc p est continue. L'équation du mouvement selon z s'écrit :

$$\dot{p}_z = \delta(z)q \left[-\int_0^t \Gamma(t-\tau) \frac{d}{d\tau} (Y(z)q) d\tau + F(t) \right] \quad (\text{B.14})$$

$$= \delta(z)q \left[-\int_0^t \Gamma(t-\tau) \frac{d}{d\tau} Y(\tau)q(\tau) d\tau - \int_0^t \Gamma(t-\tau) Y(z)\dot{q}(\tau) d\tau + F(t) \right] \quad (\text{B.15})$$

Le second terme est nul pour $t = t_0$, multiplié par $\delta(z)$ il reste zéro. Le premier terme se simplifie, et finalement on obtient :

$$\dot{p}_z = \delta(z)q [-\Gamma(0)q(t_0) + F(t_0)] \quad (\text{B.16})$$

On remarque que $\dot{p}_z(t)$ s'écrit comme une fonction de $z(t)$. Dans ce cas on peut éliminer la variable t :

$$\dot{z} \frac{dp_z}{dz} = \delta(z)q [-\Gamma(0)q(t_0) + F(t_0)] \quad (\text{B.17})$$

En se rappelant que $\dot{z} = p_z/m$ on obtient :

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{p_z^2}{2m} \right) = \delta(z)q [-\Gamma(0)q(t_0) + F(t_0)] \quad (\text{B.18})$$

D'où, en intégrant autour du point $z = 0$:

$$\Delta E_z = \frac{p_z^2}{2m}(t_0^+) - \frac{p_z^2}{2m}(t_0^-) \quad (\text{B.19})$$

$$= -\Gamma(0)q^2(t_0) + F(t_0)q(t_0) \quad (\text{B.20})$$

L'énergie cinétique longitudinale fait un saut. Tout se passe comme si la particule traversait une marche de potentiel.

B.5 Condition pour ne pas avoir de réflexion

Pour que la particule ne soit pas réfléchié par le bord de la zone dissipative il suffit qu'elle ait une énergie cinétique longitudinale suffisante, telle que l'expression éq. B.19 ait toujours un sens (énergie cinétique positive). Dans le cas où initialement la particule et l'environnement sont chacun dans un état de Gibbs, on peut estimer l'énergie initiale E_z garantissant qu'on n'ait pas de réflexion :

$$E_z \gg \langle |\Delta E_z| \rangle \quad (\text{B.21})$$

On exige que l'énergie longitudinale initiale soit beaucoup plus grande que le saut d'énergie au passage du bord. C'est le cas si elle est beaucoup plus grande que chacun des termes de ΔE_z qu'on moyenne :

$$E_z \gg \Gamma(0) \langle q^2 \rangle \quad (\text{B.22})$$

$$E_z \gg \langle (Fq)^2 \rangle^{1/2} \quad (\text{B.23})$$

En remplaçant Γ et F par leurs valeurs, et en remarquant que F et q sont initialement statistiquement indépendants, on obtient :

$$E_z \gg \int_0^\infty \mu \omega^2 d\omega \langle q^2 \rangle \quad (\text{B.24})$$

$$E_z \gg \left[\int_0^\infty \mu \omega^2 \langle \epsilon(\omega) \rangle d\omega \langle q^2 \rangle \right]^{1/2} \quad (\text{B.25})$$

où $\epsilon(\omega)$ est la densité d'énergie de l'environnement définie par :

$$\epsilon(\omega) = \frac{\pi^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2}{2} \varphi^2 \quad (\text{B.26})$$

Annexe C

Transmission entre le guide d'ondes et les sondes

C.1 Coefficients de diffusion

Considérons le couplage entre le guide d'ondes et les deux sondes étudiés dans le chapitre 7.2. Nous allons le réécrire sous la forme suivante :

$$\hat{V}_1 = \alpha(|g_1\rangle \otimes |f\rangle)\langle f_1| \quad (\text{C.1})$$

$$\hat{V}_2 = \alpha(|g_2\rangle \otimes |f\rangle)\langle f_2| \quad (\text{C.2})$$

On suppose que les états $|f_1\rangle$ et $|f_2\rangle$ des deux sondes sont localisés en leurs origines respectives. Les états transversaux $|g_1\rangle$ et $|g_2\rangle$ du guide d'ondes sont localisés sur les points de contact $q = x$ et $q = -x$; de même l'état longitudinal $|f\rangle$ est localisé à l'origine $z = 0$. La constante réelle α traduit le couplage entre guide d'ondes et sondes. Notons que les états du guide d'ondes sont normés et peuvent donc pas être des pics de Dirac ; cependant, nous allons les prendre tels que :

$$\langle f|f\rangle = 1 \quad (\text{C.3})$$

$$\langle z|f\rangle \sim \sqrt{\epsilon} \delta(z) \quad (\text{C.4})$$

où ϵ est l'extension spatiale typique de l'état $|f\rangle$. Nous nous intéressons aux états stationnaires de la particule composés d'une onde incidente, une onde réfléchie et trois ondes transmises : une dans le guide d'ondes, et une dans chaque sonde. Supposons que l'onde incidente soit dans le n' -ème canal du guide d'ondes (n' -ème état excité transversal). Elle peut être transmise et réfléchie dans tous les autres canaux ; la fonction d'onde dans le n -ème canal est de la forme :

$$\psi_n(q, z) = \chi_n(q)\phi_n(z) \quad (\text{C.5})$$

où $\chi_n(q)$ est la fonction d'ondes stationnaire de l'oscillateur harmonique "transversal" d'énergie $E_n = \hbar(n + 1/2)$; la partie longitudinale $\phi_n(z)$ de la fonction d'ondes ci-dessus

est composée d'une partie incidente, une partie réfléchie et une partie transmise :

$$\phi_n(z) = \begin{cases} \text{if } z < 0 & \delta_{nn'}e^{ik_n z} + r_n e^{-ik_n z} \\ \text{if } z > 0 & t_n e^{ik_n z} \end{cases} \quad (\text{C.6})$$

où $\delta_{nn'}$ est le symbole de Kronecker, t_n et r_n sont respectivement les coefficients de transmission et de réflexion dans le n -ème canal et k_n est le vecteur d'ondes correspondant :

$$k_n = \sqrt{k^2 + 2m(E_{n'} - E_n)/\hbar^2} \quad (\text{C.7})$$

Finalement, la fonction d'onde transmise dans chaque sonde est simplement une onde plane, on peut l'écrire comme :

$$\sigma_1(z_1) = s_1 e^{i\kappa|z_1|} \quad (\text{C.8})$$

$$\sigma_2(z_2) = s_2 e^{i\kappa|z_2|} \quad (\text{C.9})$$

où s_1, s_2 sont les coefficient de transmission du guide d'ondes vers les sondes et κ est le vecteur d'ondes correspondant :

$$\kappa = \sqrt{k^2 + 2mE_{n'}/\hbar^2} \quad (\text{C.10})$$

Comme l'état est par hypothèse stationnaire, il est état propre de l'hamiltonien de l'éq. 7.3, nous pouvons écrire :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\sigma_1'' + \alpha\varepsilon^{3/2}\delta(z_1)\sum_{n=0}^{\infty}\chi_n(x)\phi_n(0) = E\sigma_1 \quad (\text{C.11})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\sigma_2'' + \alpha\varepsilon^{3/2}\delta(z_2)\sum_{n=0}^{\infty}\chi_n(-x)\phi_n(0) = E\sigma_2 \quad (\text{C.12})$$

$$E_n\phi_n - \frac{\hbar^2}{2m}\phi_n'' + \alpha\varepsilon^{3/2}\delta(z)\sigma_1(0)\bar{\chi}_n(x)\delta(z_1) \quad (\text{C.13})$$

$$+ \alpha\varepsilon^{3/2}\delta(z)\sigma_2(0)\bar{\chi}_n(-x)\delta(z_2) = E\phi_n \quad (\text{C.14})$$

De ces trois équations et de la condition de continuité de ϕ_n nous déduisons l'ensemble d'équations linéaires suivant :

$$\begin{aligned} -\hbar^2 ik_n(t_n - \delta_{nn'} + r_n)/2m + \alpha\varepsilon^{3/2}s_2\chi_n(-x) &= 0 \\ -\hbar^2 i\kappa s_1/2m + \alpha\varepsilon^{3/2}\sum_{n=0}^{\infty}\chi_n(x)t_n &= 0 \\ -\hbar^2 i\kappa s_2/2m + \alpha\varepsilon^{3/2}\sum_{n=0}^{\infty}\chi_n(-x)t_n &= 0 \\ \delta_{nn'} + r_n - t_n &= 0 \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

finalement, nous obtenons :

$$s_1 = \frac{\alpha\varepsilon^{3/2}m}{i\hbar^2\kappa} \frac{1}{R^2 + |Z|^2} [R\chi_{n'}(x) - Z\chi_{n'}(-x)] \quad (\text{C.16})$$

$$s_2 = \frac{\alpha\varepsilon^{3/2}m}{i\hbar^2\kappa} \frac{1}{R^2 + |Z|^2} [R\chi_{n'}(-x) - \bar{Z}\chi_{n'}(x)] \quad (\text{C.17})$$

où :

$$R = 1 + \frac{\alpha^2 \varepsilon^3 m^2}{\hbar^2 \kappa^2} \sum \frac{1}{\lambda_n} |\chi_n(x)|^2 \quad (\text{C.18})$$

$$Z = \frac{\alpha^2 \varepsilon^3 m^2}{\hbar^2 \kappa^2} \sum \frac{1}{\lambda_n} \chi_n(x) \bar{\chi}_n(-x) \quad (\text{C.19})$$

$$\lambda_n = \sqrt{1 - \frac{2mE_n}{\hbar^2/\kappa^2}} \quad (\text{C.20})$$

Considérons maintenant le cas simplifié où $\hbar^2 k^2 \gg E_{n'}$. Alors, $\lambda_n \rightarrow 1$, et donc $Z \rightarrow 0$ et $R \rightarrow 1 + (\alpha \varepsilon m / \hbar k)^2$; enfin, les coefficients de transmission peuvent s'écrire comme :

$$s_1 = \tau \chi_{n'}(x) \quad (\text{C.21})$$

$$s_2 = \tau \chi_{n'}(-x) \quad (\text{C.22})$$

où :

$$\tau = \frac{\alpha \varepsilon m}{i \hbar k} \frac{\varepsilon^{1/2}}{1 + \left(\frac{\alpha \varepsilon m}{\hbar k}\right)^2} \quad (\text{C.23})$$

C.2 Franges d'interférence

Soit un état stationnaire dont la partie incidente est de la forme $|\chi_n\rangle \otimes |k\rangle$ où $|\chi_n\rangle$ est un état stationnaire transversal et $|k\rangle$ une onde plane selon l'axe z . Alors la composante transmise dans les deux sondes est :

$$\begin{pmatrix} s_{1n} |k_1\rangle \\ s_{2n} |k_2\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{C.24})$$

où $|k_1\rangle, |k_2\rangle$ sont des ondes planes et $(s_{1n}, s_{2n}) \in \mathbf{C}^2$ sont les coefficients de transmission; ils peuvent dépendre de n et de k . D'après le principe de superposition, si la particule dans le guide est donnée par l'opérateur densité :

$$\hat{\sigma} \otimes |k\rangle\langle k| = \left(\sum_{n,n'} \sigma_{nn'} |\chi_n\rangle\langle\chi_{n'}| \right) \otimes |k\rangle\langle k| \quad (\text{C.25})$$

alors l'état transmis dans les sondes sera l'opérateur densité :

$$\hat{w} = |\tau|^2 \begin{pmatrix} \sigma(x, x) |k_1\rangle\langle k_1| & \sigma(x, -x) |k_1\rangle\langle k_2| \\ \sigma(-x, x) |k_2\rangle\langle k_1| & \sigma(-x, -x) |k_2\rangle\langle k_2| \end{pmatrix} \quad (\text{C.26})$$

Dans ce cas, la probabilité de trouver la particule dans le point d'intersection des deux sondes où les interférences se produisent est :

$$P(\phi) = \langle z_1 | \langle z_2 | \hat{w} | z_1 \rangle | z_2 \rangle \quad (\text{C.27})$$

$$\begin{aligned} &= |\tau|^2 \left[\sigma(x, x) + \sigma(-x, -x) \right. \\ &\quad \left. + \sigma(-x, x) e^{i\phi} + \sigma(x, -x) e^{-i\phi} \right] \quad (\text{C.28}) \end{aligned}$$

Bibliographie

- [1] R. Petit, *L'outil mathématique pour la physique* (Dunod, 1998)
- [2] P. Milonni, *The quantum vacuum : an introduction to quantum electrodynamics* (Academic press, 1994)
- [3] A. Ratchov, *Evolution of a small system coupled to a zero-temperature environment*, in preparation (unpublished)
- [4] M. H. Devoret, *Quantum fluctuation in electrical circuits* Les Houches Session LXIII, 351 (1995)
- [5] B. Yurke, J. S. Denker *Quantum network theory* Phys. Rev. A **29** 1419 (1984)
- [6] E. B. Davies, *The harmonic oscillator in a heat bath* Comm. Math. Phys. **33** 171 (1973)
- [7] V. Jakšić C.-A. Pillet, *Spectral theory of thermal relaxation* Univerité de Genève (1996)
- [8] N. G. van Kampen, *Models for dissipation in quantum mechanics*, 13th Sitgas conference (1994), ISBN : 3540591583
- [9] P. Exner, *Open quantum systems and path integrals* (D. Reidel Publishers, 2002)
- [10] L. Bruneau, S. De Bièvre, Commun. Math. Phys. **229** 511 (2002)
- [11] D. Giulini, E. Joos, C. Kiefer, J. Kupsch, I.-O. Stamatescu, H. D. Zeh, *Decoherence and the appearance of a classical world in quantum theory* (Springer, 1996)
- [12] W. H. Zurek, *Decoherence, einselection and the quantum origins of the classical* Rev. Mod. Phys. **75** (2003)
- [13] R. P. Feynman, F. L. Vernon, *The theory of a general quantum mechanical system interacting with a linear dissipative system* Ann. Phys. **24**, 118 (1963)
- [14] R. P. Feynman, A. R. Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals*, (McGraw-Hill, 1965).
- [15] G. W. Ford, J. T. Lewis, R. F. O'Connell, *Quantum Langevin equation*, Phys. Rev. A **37**, 4419 (1988)
- [16] G. W. Ford, J. T. Lewis, R. F. O'Connell, *quantum measurement and decoherence*, Phys. Rev. A. **64** 032101 (2001)
- [17] K. Nagaev, M. Büttiker, *Ground state energy fluctuations of a system coupled to a bath*, Europhys. Lett. **58**, 475 (2002)

- [18] M. Büttiker, *Irreversibility and dephasing from vacuum fluctuations*,
- [19] A. Jordan, M. Büttiker, *Entanglement energetics at zero temperature* Phys. Rev. Lett. **92**, 247901 (2004)
- [20] P. Cedraschi, V. V. Ponomarenko, and M. Büttiker, *Zero-point fluctuations and the quenching of the persistent current in normal metal rings*, Phys. Rev. Lett. **84**, 346 (2000)
- [21] P. Ullersma, *An exactly solvable model for brownian motion* Physica **32** 27 (1966)
- [22] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Quantum tunnelling in a dissipative system*, An. Phys. **149**, 374-456 (1983)
- [23] A. O. Caldeira, A. J. Leggett, *Influence of damping on quantum interference : an exactly soluble model* Phys. Rev. A **31**, 1059 (1985)
- [24] U. Weiss, *Quantum dissipative systems* (World scientific 2001)
- [25] H. Grabert, U. Weiss, P. Tanker, *Quantum theory of the damped oscillator* Z. Phys. B **55**, 87 (1984)
- [26] H. Grabert, P. Schramm, G.-L. Ingold, *Quantum brownian motion : the functional integral approach* Phys. Rep. **168**, 115 (1988)
- [27] S. Albeverio, F. Haake, P. Kurasov, M. Kuš, P. Šeba *S-matrix, resonances and wave functions for transport through billiards with leads*, J. Math. Phys. **37**, 4888 (1996)
- [28] U. Fano, *Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts*, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961)
- [29] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, *Atom–photon interaction : basic process and applications* (Wiley-Interscience 1998)
- [30] J. J. Sakurai, *Modern quantum mechanics* (Addison–Wesley 1994)
- [31] R. Balian, *Du microscopique au macroscopique*, cours de physique statistique de l'école polytechnique (Ellipses 1982)
- [32] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, B. Roulet, *Éléments de physique statistique*, (Hermann 1993)
- [33] S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems* (Cambridge University Press 2004)
- [34] Thèse de Julien Claudon, Université Joseph Fourier (2005)
- [35] J. Claudon, F. Balestro, F. W. J. Hekking, O. Buisson, *Coherent oscillations in a superconducting multi-level quantum system*, Phys. Rev. Lett. **93**, 187003 (2004)
- [36] Thèse de Frank Balestro, Université Joseph Fourier (2002)
- [37] A. J. Lichtenberg, M. A. Lieberman, *Regular and stochastic motion* (Springer–Verlag 1983)
- [38] M. Tabor, *Chaos and integrability in nonlinear dynamics — an introduction* (John Wiley & Sons 1989)

- [39] V. I. Arnold, *Graduate texts in mathematics* (Springer–Verlag 1989)
- [40] H. Goldstein, *Classical mechanics* (Addison–Wesley 1951)
- [41] E. Fick, G. Sauermaun, *The quantum statistics of dynamic processes* (Springer-Verlag 1990)
- [42] L. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C. Yannoni, M. Sherwood, I. Chuang, *Experimental realization of Shor’s quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance* Nature **414** 883 (2001)
- [43] P. Shor, *Algorithms for quantum computation : discrete logarithms and factoring* Proc. 35-nd Annual Symposium on Foundations of Computer Science (Shafi Goldwasser, ed.), IEEE Computer Society Press (1994), 124–134.
- [44] L. I. Glazman, G. B. Lesovik, D. E. Khmel’nitskii and R. I. Shekhter, *Reflectionless quantum transport and fundamental ballistic resistance steps in mesoscopic constrictions*, JETP Lett. **48** 238 (1988) ; Pis’ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **48** No. 4, 218-220 (1988)
- [45] B. L. Altshuler, A. G. Aronov and D. E. Khmelnitsky, *Effects of electron-electron collisions with small energy transfers on quantum localisation*, J. Phys. C : Solid State Phys., **15**, 7367 (1982)
- [46] D. S. Golubev, A. D. Zaikin, *Quantum decoherence in disordered mesoscopic systems*, Phys. Rev. Lett. **81**, 1074 (1998)
- [47] L. Aleiner, B. L. Altshuler, M. E. Gershenson, *Comment on “Quantum decoherence in disordered mesoscopic systems”*, Phys. Rev. Lett. **82**, 3190 (1999)
- [48] J. von Delft, *Decoherence of interacting electrons in disordered conductors : on the relation between influence functional and diagrammatic approaches*, J. Phys. Soc. Jpn. **72**, Suppl. A, 24 (2003) ; *Influence functional for decoherence of interacting electrons in disordered conductors*, (unpublished)
- [49] F. W. J. Hekking and L. I. Glazman, *Quantum fluctuations in the equilibrium state of a thin superconducting loop*, Phys. Rev. B **55** 10 (1997)
- [50] Y. Imry, *Introduction to mesoscopic physics* (Oxford University Press, 2002)
- [51] P. Mohanty, E. M. Q. Jariwala, and R. A. Webb, *Intrinsic decoherence in mesoscopic systems*, Phys. Rev. Lett. **78**, 3366 (1997)
- [52] C. Schroll, W. Belzig, and C. Bruder, *Decoherence of cold atomic gases in magnetic microtraps*, Phys. Rev. A **68**, 043618 (2003)
- [53] F. Marquardt and D. S. Golubev, *Relaxation and dephasing in a many–fermion generalization of the Caldeira-Leggett model* Phys. Rev. Lett. **93**, 130404 (2004)
- [54] A. Ratchov, F. Faure, F. W. J. Hekking, *Loss of quantum coherence in a system coupled to a zero-temperature environment*, Eur. Phys. J. B **46**, 519-528 (2005)

Titre : Étude du couplage de petits systèmes quantiques avec leur environnement : fluctuations et décohérence à basse température.

Résumé : Dans cette thèse, on discute l'influence de l'environnement sur un petit système quantique à basse température dans le cadre d'un modèle très simple : un oscillateur harmonique ("la particule") couplé à un bain d'oscillateurs harmoniques ("l'environnement"). Tout d'abord, on étudie l'état d'équilibre du système total en utilisant la "méthode de la résolvante réduite", courante en théorie spectrale. Elle permet de calculer et de discuter sous un angle nouveau l'opérateur densité réduit de la particule, déjà connu. À basse température, la particule subit des effets thermiques effectifs résultant de son intrication avec l'environnement. Ensuite, toujours grâce à la méthode de la résolvante réduite, on étudie l'évolution quantique exacte de l'opérateur densité réduit de la particule : celui-ci converge vers l'état d'équilibre, malgré l'évolution unitaire du système total. Ces résultats se transposent naturellement aux circuits électriques quantiques. Avec le même formalisme on étudie le couplage capacitif d'un système mécanique (un oscillateur harmonique) à un environnement électrique (une résistance). Sur base de ces discussions, on propose un dispositif expérimental permettant d'étudier les effets d'un environnement électrique contrôlé sur une particule chargée. On montre que la longueur de cohérence spatiale de celle-ci est réduite à cause du couplage entre la particule et l'environnement : L'effet persiste même à basse température et il est d'autant plus important que le couplage avec l'environnement est fort.

Mots clés : environnement, basse température, fluctuations, dissipation, décohérence, oscillateur harmonique, résolvante réduite

Title : Fluctuations and loss of quantum coherence in a system coupled to a low temperature environment

Abstract : In this thesis, we discuss the influence of a zero temperature environment on a small quantum system in the framework of a very simple model: a harmonic oscillator ("the particle") coupled to a bath of harmonic oscillators ("the environment"). First, we study the equilibrium state of the total system, using the "reduced resolvent" approach, well-known in spectral theory. We calculate the reduced density operator of the particle. At low temperature, the environment induces effective thermal effects. Then, by using the same method, we consider the time-evolution of the reduced density operator of the particle. The latter converges to the equilibrium state, despite of the unitary evolution of the total system. These results can be transposed to quantum electric circuits. With the same formalism we consider the coupling between a mechanical system (a harmonic oscillator) and an electric environment (an ohmic resistor). Finally, we propose an experimental device showing the effects induced by a controlled electric environment on a charged particle. We show that the particle coherence length is reduced by the coupling between the particle and the environment. The effect persists in the zero temperature limit.

Keywords : environment, low temperature, fluctuations, dissipation, decoherence, harmonic oscillator, reduced resolvent