RAPPORT DE STAGE — DEA PMR, Grenoble I

Influence de l'environnement sur un système mésoscopique à température nulle.

A. Ratchov, sous la direction de F. Faure et F. Hekking

juin 2002

Table des matières

1 Introduction

La notion de système physique isolé est une idéalisation. Cependant, bien souvent les effets de l'environnement sur le système étudié peuvent se révéler importants et donner lieu à des phénomènes intéressants. Par exemple un atome seul dans le vide subit l'influence du champ électromagnétique dans son état fondamental (le “vide quantique”). Le “Lamb–shift” découvert en 1949 est l'un des effets qui résultent de cette influence. Il a donné lieu à des développements théoriques importants comme la théorie de la renormalisation en physique des particules [5].

Des expériences récentes [10] semblent montrer que dans un conducteur à température nulle la longueur de cohérence d'un électron est finie. Or on s'attendait à ce qu'à la limite $T \to 0$ les processus inélastiques qui engendrent la décohérence soient inhibés. Ces expériences suscitent encore le débat. Dans ce cadre K. Nagaev et M. Büttiker [1] se sont récemment intéressés aux fluctuations de l'énergie d'un système simple à température nulle. Ils ont étudié le modèle suivant : un oscillateur harmonique (le système test) couplé à un bain d'oscillateurs harmoniques (son environnement). La simplicité de ce modèle fait ressortir l'essentiel du phénomène. Penser par exemple que le champ électromagnétique n'est rien d'autre qu'un bain d'oscillateurs harmoniques découplés.

Dans cet exposé, nous allons d'abord étudier un modèle simple dans le cadre de la mécanique classique. Notre but est de dégager deux effets induits par l'environnement : la dissipation et les fluctuations. Puis nous allons transcrire et exploiter le modèle dans un cadre quantique. Cette étape va servir à mettre en évidence l'intrication entre la particule et le bain. Ensuite, en s'inspirant du travail de K. Nagaev et de M. Büttiker [1] et grâce à une approximation, nous allons obtenir les fluctuations de l'énergie à température nulle. Enfin, pour mieux maîtriser cette approximation et pour aller au delà des fluctuations de l'énergie, nous allons calculer la matrice densité réduite du système. Ceci nous donnera l'occasion de discuter de la décohérence induite par l'environnement.

2 Environnement – généralités

Dans cette partie, nous allons discuter qualitativement des effets que peut induire l'environnement sur un système qui lui est couplé.

2.1 Effets classiques

Considérons un système couplé à un environnement. Du point de vue de la mécanique classique, on peut dégager deux effets.

Dissipation : Si le système est initialement en mouvement alors, étant couplé à l'environnement, il va exciter les degrés de liberté de ce dernier en lui cédant son énergie. Ce phénomène est irréversible parce que l'environnement contient généralement beaucoup de degrés de liberté et le temps de retour de l'énergie dans le petit système sera en pratique infini. Comme exemple de dissipation on peut considérer un pendule macroscopique plongé dans un fluide visqueux. Au cours de son mouvement, le pendule va entraîner le fluide et ainsi lui transférer son énergie, celle-ci va se répartir dans le très grand nombre de degrés de liberté microscopiques du fluide et ne sera jamais restituée au pendule. Du point de vue de ce dernier, la dissipation est sentie comme une force opposée et proportionnelle à sa vitesse.

Fluctuations : En plus de la dissipation, l'environnement induit un second effet sur le système qui lui est couplé : des fluctuations. En effet il se peut que la multitude de degrés de liberté de l'environnement soient initialement excités ; par l'intermédiaire du couplage l'énergie sera transférée vers le système. Comme le nombre de degrés de liberté de l'environnement est très grand, les excitations senties par le système vont paraître pratiquement décorrélées : ce dernier va sentir une force erratique. Comme exemple, on peut considérer le mouvement brownien d'une particule immergée dans un fluide à température non–nulle. Au cours de son mouvement, elle subit constamment des chocs avec les molécules du fluide ; or ces dernières ont des impulsions distribués aléatoirement : la particule aura une trajectoire du type “marche aléatoire”. De son point de vue, les fluctuations sont ressenties comme une force extérieure aléatoire.

2.2 Effets quantiques – décohérence

En plus des échanges d'énergie qu'on vient de citer, les systèmes de nature essentiellement quantique subissent un troisième effet : la décohérence. Qualitativement, on entend par cohérence quantique la capacité d'un système de 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 (par exemple pour savoir par où elle passe) la figure d'interférence est détruite : alors 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, alors la figure d'interférence sera plus ou moins estompée. La fig. 1 donne l'allure des figures d'interférences selon que la décohérence est faible, partielle ou forte. La fig. 1 est à rapprocher des figures d'interférence réalisées avec différents types de lumière.

Un autre exemple de décohérence est le fait qu'à température nulle la longueur de cohérence dans les métaux est finie ; en principe un électron “libre” est cohérent sur une très longue distance, mais à cause de l'interaction avec l'environnement, la longueur sur laquelle il est réellement cohérent se trouve réduite. En physique mésoscopique, on mesure cette longueur de cohérence à travers des grandeurs physiques comme la conductivité. Dans cet exemple le rôle de l'environnement est joué par les modes de vibration du réseau cristallin du métal.

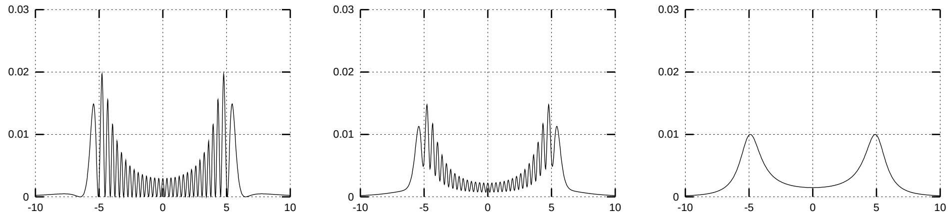

FIG. 1 – Ci–dessus on a tracé la densité de probabilité pour que la particule arrive au point considéré de l'écran après avoir traversé les fentes d'Young. Le deux renforcements correspondent aux points de l'écran face aux fentes. À gauche il n'y a pas de décohérence, au milieu la décohérence est partielle et à droite la décohérence est totale.

3 Modèles classiques pour l'environnement

Le but de cette section est de présenter un modèle d'environnement en mécanique classique. Nous allons discuter les principaux effets : dissipation et fluctuation. Certains résultats vont servir de point de départ pour l'étude quantique de la section suivante.

Pour prendre en compte l'effet de l'environnement sur un petit système, du point de vue de la mécanique classique, on introduit des paramètres phénoménologiques ; par exemple, pour une particule de position q, masse m, dans un potentiel $V(q)$ on écrit l'équation du mouvement comme :

$$m\ddot{q} = -\frac{\partial V}{\partial q} - \eta\dot{q}$$

La force $-\eta\dot{q}$ est introduite pour tenir compte de la dissipation. C'est une force phénoménologique qui ne peut pas être dérivée d'un hamiltonien[1], elle est entièrement caractérisée par la constante de friction η. De même, pour tenir compte des fluctuations, on introduit une force aléatoire $F(t)$ (du bruit thermique) de valeur moyenne nulle. L'équation ci-dessus prend la forme de l'équation de Langevin :

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

Pour une approche quantitative et pour mieux comprendre les effets de l'environnement sur le système considéré il est important de pouvoir relier les paramètres phénoménologiques η et $F(t)$ aux paramètres microscopiques caractérisant l'environnement. Ceci nécessite un modèle pour ce dernier. De plus, pour faire une étude quantique on aura besoin d'écrire l'hamiltonien du système. Mais comme on veut prendre en compte les effets dus à l'environnement, l'hamiltonien doit nécessairement décrire aussi ce dernier. Dans sa forme la plus générale il sera de la forme :

$$H = H_{\text{particule}} + H_{\text{interaction}} + H_{\text{bain}}$$

Dans la suite, pour éviter toute confusion, nous allons désigner par "la particule" le petit système que l'on étudie et par "le bain" l'environnement auquel il est couplé.

[1] car elle ne conserve pas l'aire dans l'espace de phase.

3.1 Le modèle de Lamb

Pour avoir un “bon” environnement, nous avons besoin d’un système qui puisse *absorber* de l’énergie et qui contienne une infinité de degrés de liberté de sorte que l’absorption soit irréversible. Une autre condition importante est que le modèle reproduise les équations phénoménologiques données un peu plus haut.

La chaîne infinie d’oscillateurs harmoniques couplés entre plus proches voisins paraît être un bon candidat [9], fig. 2. En effet, on imagine que si l’on accroche la particule, initialement en mouvement, à l’origine de la corde vibrante, la particule va entraîner la corde et y induire une déformation en perdant un peu de son énergie cinétique. À son tour, la corde va propager la déformation vers l’infini. L’énergie que la particule a perdu pour mettre en mouvement la corde ne lui sera jamais restituée ; la corde l’a absorbée irréversiblement. Pour montrer que ce modèle reproduit bien les équations phénoménologiques, faisons le calcul.

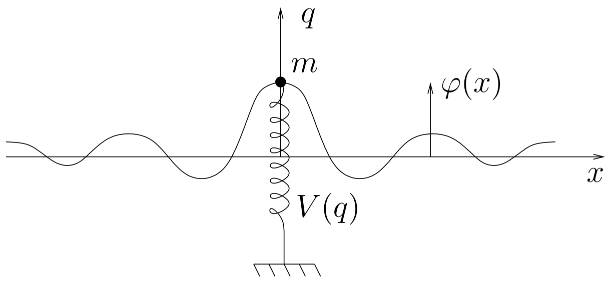

FIG. 2 – Modèle de Lamb. Pour les notations, se référer au texte.

3.1.1 Hamiltonien

En ce qui concerne la particule seule , avec les notations usuelles, l’hamiltonien s’écrit :

$$H_{\text{particule}}(q,p) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

où q et p sont des réels. On considère la corde vibrante infinie tendue selon un axe et paramétrée par la variable réelle x. Elle est de masse linéique μ et de vitesse de propagation naturelle c. Elle est décrite par son élongation $\varphi(x,t)$ et par sa densité d’impulsion $\varpi(x,t)$. Sa fonction (fonctionnelle) de Hamilton est :

$$H_{\text{corde}}(\varphi,\varpi) = \int \left[\frac{\varpi^2}{2\mu} + \frac{\mu c^2}{2} \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x} \right)^2 \right] \mathrm{d}x$$

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.

3.1.2 Couplage et contraintes

Dans ce modèle (continu), le couplage ne se traduit pas par un terme d’interaction dans l’hamiltonien. Par contre, on suppose la particule *fixée* à l’origine (point $x = 0$) de la corde. L'interaction sera traduite par la contrainte que la particule soit solidaire à l'origine de la corde (point $x = 0$). Formellement, on écrit la contrainte :

$$f(q, \varphi) = q - \varphi(0) = 0$$

3.1.3 Équation du mouvement classique

Le mouvement classique de l'ensemble est donné par les équations de Hamilton. Pour intégrer correctement la contrainte aux équations du mouvement, on utilise la méthode des multiplicateurs de Lagrange, ce qui revient à ajouter aux équations respectivement $-\lambda \partial f/\partial q$ et $-\lambda \delta f/\delta \varphi$ où λ est le multiplicateur associé à la contrainte f. Finalement il vient :

$$m\ddot{q} + \frac{\partial V}{\partial q} = -\lambda$$
$$\mu\ddot{\varphi} + \mu c^2 \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \lambda \delta(x)$$

Physiquement, λ représente la force de réaction entre la corde et la particule qui maintient la contrainte, elle dépend donc du temps. Résolvons d'abord l'équation sur φ ; pour cela on fait une transformation de Fourier :

$$\xi(k, t) = \int \varphi(x, t) e^{-ikx} \, \mathrm{d}x$$

alors l'équation du mouvement devient :

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

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 :

$$\xi(k, t) = \underbrace{\xi(k, 0) \cos kct + \frac{\dot{\xi}(k, 0)}{kc} \sin kct}_{\xi_h(k,t)} + \underbrace{\frac{1}{\mu} \int_0^t \frac{\sin kc\tau}{kc} \lambda(t - \tau) \, \mathrm{d}\tau}_{\xi_p(k,t)} \quad (1)$$

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

$$\frac{1}{2\pi} \int \frac{\sin kct}{kc} e^{ikx} \, \mathrm{d}k = \frac{1}{2c} \Pi\left(\frac{x}{2ct}\right) \quad \text{où} \quad \Pi(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } |x| < 1/2 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On en déduit que la solution particulière est :

$$\varphi_p(x, t) = \frac{1}{2\mu c} \int_0^{t - x/2c} \lambda(\tau) \, \mathrm{d}\tau$$

De là on peut tirer l'expression du multiplicateur λ en fonction de $\varphi(x = 0, t)$:

$$\begin{aligned} \lambda(t) = 2\mu c \, \dot{\varphi}_p(0, t) &= 2\mu c \, \dot{\varphi}(0, t) - 2\mu c \, \dot{\varphi}_h(0, t) \\ &= 2\mu c \, \dot{q}(t) - 2\mu c \, \dot{\varphi}_h(0, t) \end{aligned}$$

car on se rappelle que la contrainte imposée au système est que $\varphi(x = 0, t) = q(t)$. On peut injecter l'expression de $\lambda(t)$ dans l'équation de la particule et on trouve :

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

Si, à l'instant initial $t = 0$, les conditions initiales pour la corde sont $\varphi = \dot{\varphi} = 0$ alors la solution homogène φ_h est identiquement nulle. Dans ce cas l'équation du mouvement de la particule est purement dissipative :

$$m\ddot{q} = -\frac{\partial V}{\partial q} - \eta\dot{q} \quad \text{avec} \quad \eta = 2\mu c$$

Dans le cas général, exprimons le terme correspondant à la solution homogène. Pour cela, dérivons ξ_h, cf. eq. 1, par rapport au temps :

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

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 :

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

Ainsi, on peut poser :

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

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

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

où la fonction F ne dépend que des conditions initiales sur la corde. Finalement nous retrouvons bien l'équation voulue. Dans cette approche nous avons une expression de η et $F(t)$ en fonction des caractéristiques du bain.

3.1.4 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 la force dépendant du temps $F(t)$ qui, à l'instant t, 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.

3.1.5 Illustration numérique

Pour tester et visualiser l'évolution d'un système dissipatif dans le cadre du modèle de Lamb, nous avons fait une série de simulations numériques. Leur but est aussi de tester la stabilité du modèle vis-à-vis des méthodes numériques. Par exemple, ici nous avons besoin de discrétiser la corde vibrante et de la tronquer.

Particule test. Pour l'application numérique, on choisit comme particule test un oscillateur harmonique. Le potentiel $V(q)$ introduit plus haut est alors de la forme :

$$V(q) = \frac{m\Omega^2}{2} q^2$$

Unités On choisit les unités suivantes :
- m, la masse de la particule comme unité de masse
- Ω, la pulsation propre de la particule comme inverse de l'unité de temps.
- c, la vitesse naturelle sur la corde comme unité de vitesse.

les autres unités s'en déduisent : par exemple l'unité de longueur est $\ell = c/\Omega$.

Discrétisation. En discrétisant la corde vibrante on se ramène à une chaîne linéaire de N oscillateurs harmoniques couplés par des ressorts entre plus proches voisins. En ce qui concerne les bords, on choisit des conditions aux limites périodiques. Comme la chaîne ainsi construite est finie, le temps des simulations ne devra pas excéder c/L où L est la longueur de la chaîne, il correspond au temps que les déformations émises par la particule mettent à revenir.

Évolution dans le temps. La fig. 3 montre quatre clichés de l'évolution de la chaîne au cours du temps, la particule se trouve à l'abscisse $x = 0$. Pour l'application numérique, nous avons utilisé comme paramètres :
- $L = 200\, c/\Omega$
- $N = 1000$
- $\mu = 0.05\, m\Omega/c$, ce qui donne $\eta = 0.1\, m\Omega$

Constante de dissipation. Comme l'équation du mouvement de la particule est celle d'un oscillateur harmonique, on peut montrer facilement que son énergie décroît au cours du temps comme $e^{-\eta t/m}$. En représentant l'évolution de l'énergie donnée par la simulation on arrive à comparer le η théorique au η issu de la simulation. La fig. 4 montre qu'analytique et numérique coïncident parfaitement.

3.2 Modèle plus général : "Caldeira–Leggett"

Le modèle de Lamb est parmi les plus simples et intuitifs, mais la dissipation via une force de la forme $-\eta\dot{q}$ est seulement un cas particulier d'une situation plus générale. En fait, une force de dissipation linéaire peut contenir de la "mémoire" ; elle est alors de la forme :

$$-\int_0^t \Gamma(\tau)\, \dot{q}(t-\tau)\, \mathrm{d}\tau$$

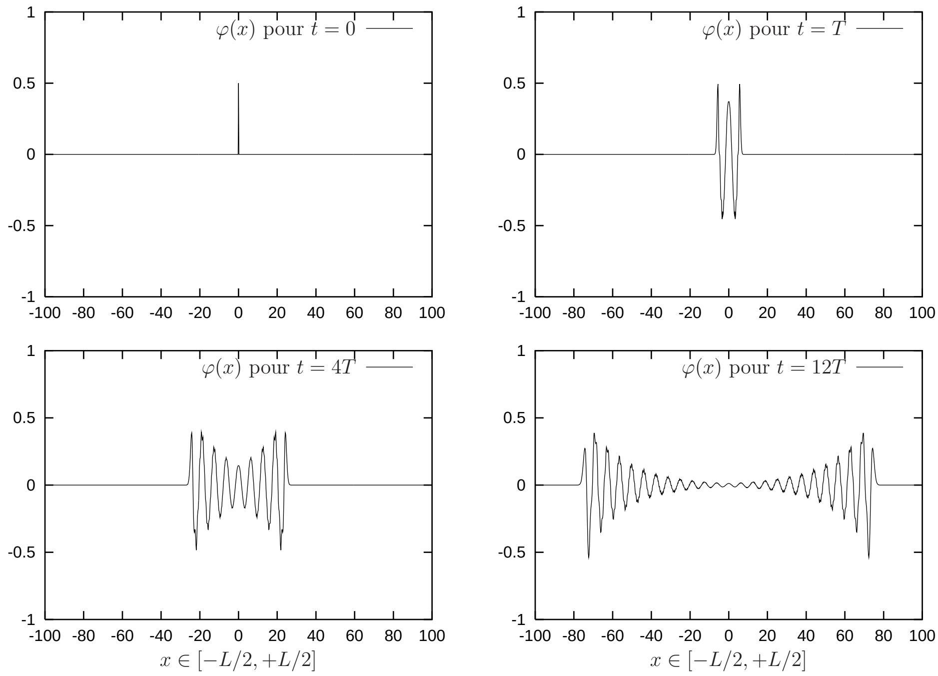

FIG. 3 – Simulation : évolution de l'élongation de la corde vibrante $\varphi(x)$ pour les temps : $t = 0$, $t = T$, $t = 4T$ et $t = 12T$ où T est la période naturelle de l'oscillateur "test". Le premier cliché montre que les conditions initiales sur le bain sont : $\varphi = 0$

On parle de "mémoire" parce que la valeur de la force à l'instant t dépend de l'état (la vitesse) de la particule à tous les instants antérieurs à t. La dissipation en $-\eta\dot{q}$, appelée "ohmique" ou bien "sans mémoire" est simplement le cas particulier où $\Gamma = \eta\delta(t)$. Un modèle plus général que celui de Lamb permet de reproduire de la dissipation avec mémoire : le modèle de Caldeira–Leggett [8, 6]. Ce dernier consiste en un continuum d'oscillateurs harmoniques indépendants couplés à la particule. La fig. 5 illustre l'idée générale de ce modèle. On imagine que si la particule est excitée, elle va transférer son mouvement aux oscillateurs du bain via le couplage. Mais comme le bain contient des oscillateurs de toutes les fréquences leurs mouvements ne seront jamais en phase. Formellement, on va paramétrer les oscillateurs du bain par leur fréquence propre ; on va noter $\varphi(\omega)$ l'élongation de l'oscillateur de pulsation ω, $\varpi(\omega)$ sera son impulsion et μ sa masse. Le couplage particule–oscillateur sera pris de la forme $-\gamma(\omega)\, q\, \varphi(\omega)$, où $\gamma(\omega)$ est la constante qui traduit l'intensité du couplage. Avec ces notations, l'hamiltonien de l'ensemble particule–bain est :

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{\partial V}{\partial q} \quad + \quad \int_0^\infty \frac{\varpi^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2}{2}\left(\varphi - \frac{\gamma}{\mu\omega^2}q\right)^2 \,\mathrm{d}\omega$$

Ici, nous n'allons pas faire le calcul qui est analogue à celui du modèle de Lamb, au final on obtient comme équation du mouvement de la particule l'équation de Langevin avec mémoire :

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

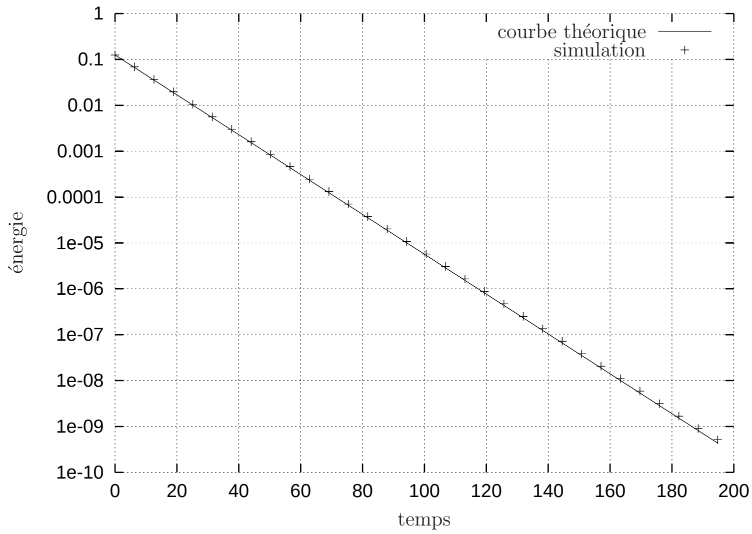

FIG. 4 – Énergie de la particule en fonction du temps en échelle logarithmique.

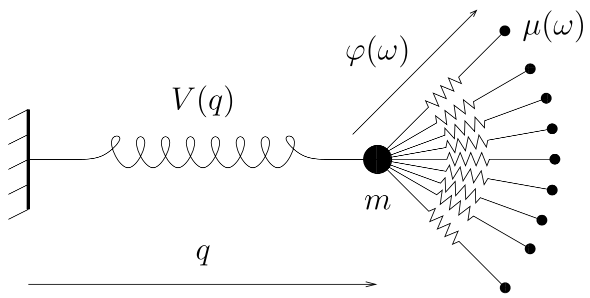

FIG. 5 – Modèle de Caldeira et Leggett. Pour les notations, se référer au texte.

La fonction $\Gamma(\tau)$ s'obtient à partir à partir des paramètres caractérisant le bain, on montre que Γ est directement liée à la transformée de Fourier de γ, on obtient[2] :

$$\Gamma(t) \propto \mathcal{F}^{-1}\left(\frac{\gamma^2}{\omega^2}\right)$$

Remarquons enfin que si $\gamma(\omega) \propto \omega$ on retombe sur le cas particulier de la dissipation ohmique où $\Gamma \propto \delta(t)$.

3.3 Discussion

Notons que ces modèles ne sont pas une invention purement formelle. Le bain d'oscillateurs existe bel et bien dans la nature : par exemple les modes de vibration d'un cristal, le

[2]Souvent, dans la littérature on utilise la "fonction spectrale" $J(\omega)$ pour écrire Γ de la forme :

$$\Gamma(t) \propto \mathcal{F}^{-1}\left(\frac{J}{\omega}\right)$$

dans notre cas $J(\omega) = \gamma^2/\omega$.

champ électromagnétique et, plus généralement, n'importe quel système ayant beaucoup de degrés de liberté étudié au voisinage d'un position d'équilibre. De plus, comme dans le modèle de Caldeira et Leggett, on n'a fait aucune hypothèse sur la forme du couplage particule–bain (fonction γ) qui peut être quelconque, il peut modéliser n'importe quel comportement, pourvu qu'il soit linéaire, c'est donc un modèle générique.

Enfin, ces modèles simples donnent une façon élégante et intuitive d'introduire la dissipation dans un contexte hamiltonien connu justement pour ne pas supporter celle–ci. L'intérêt en est grand parce qu'on arrive ainsi via la formulation hamiltonienne à entrer dans le cadre quantique (chose difficile sans avoir d'hamiltonien). De plus la linéarité permet, comme on va le voir, de réutiliser sans approximations un certain nombre de résultats classiques dans un cadre quantique.

4 Modèles quantiques pour l'environnement

Nous avons vu que, classiquement, l'effet de l'environnement peut être considérable. On peut déjà se demander comment les systèmes dissipatifs classiques se comportent à la limite quantique. De plus un effet nouveau, essentiellement quantique va se manifester : la décohérence. Enfin, notons que c'est à température $T = 0$ que les effets quantiques sont exhibés le plus, puisque les seules fluctuations qui persistent dans le système sont les fluctuations quantiques de l'état fondamental.

Dans cette section nous allons d'abord écrire l'équation de Langevin classique en mécanique quantique. Ensuite nous allons partir du résultat obtenu et utiliser le formalisme de la réponse linéaire pour obtenir les fluctuation d'énergie à température nulle. Enfin, nous allons calculer la matrice densité réduite. À travers cette étude nous allons voir qu'il y a décohérence á température nulle.

4.1 Première approche : équation de Langevin

Dans cette partie nous allons essayer de transposer à la mécanique quantique le raisonnement fait pour l'environnement dans le cadre classique. Nous allons voir que pour les systèmes dont l'hamiltonien est quadratique (c'est le cas de celui du modèle de Lamb) les résultats classiques peuvent être directement réutilisés.

4.1.1 Représentation de Heisenberg

Dans la représentation de Schrödinger, l'état quantique du système considéré évolue dans le temps, les observables, elles, sont indépendantes du temps. Dans cette représentation, par exemple, la moyenne de l'observable $\hat{A}$ est donnée par :

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

où $|\psi(t)\rangle$ désigne l'état du système à l'instant t ; cet état peut être obtenu grâce à l'opérateur évolution, en utilisant la propriété :

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle$$

Rappelons que l'opérateur évolution est défini par l'équation :

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t} = \hat{H}\hat{U} \quad \text{où } \hat{H} \text{ est l'hamiltonien}$$

Ainsi on peut réécrire $\langle \hat{A} \rangle$ en fonction de l'état $|\psi(0)\rangle$:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(0)|\hat{U}^{+}(t)\,\hat{A}\,\hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$$

Cette écriture suggère de poser :

$$\hat{A}(t) = \hat{U}^{+}(t)\,\hat{A}\,\hat{U}(t)$$

Dans cette représentation, dite de Heisenberg [3], l'état du système est fixé $|\psi(0)\rangle$ et ne dépend pas du temps ; toute la dépendance en temps est absorbée par les opérateurs, les équations du mouvement portent donc sur les observables. Par exemple :

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}\hat{U}^{+}}{\mathrm{d}t}\hat{A}\hat{U} + \hat{U}^{+}\hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t} \\
&= \frac{1}{i\hbar}\left(-i\hbar\hat{H}\hat{U}^{+}\hat{A}\hat{U} + i\hbar\hat{H}\hat{U}^{+}\hat{A}\hat{U}\right) \\
&= \frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{H}]
\end{aligned}$$

En particularisant cette expression aux opérateurs position $\hat{q}$ et impulsion $\hat{p}$ d'une particule, on obtient :

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\hat{q}}{\mathrm{d}t} &= \frac{1}{i\hbar}[\hat{q},\hat{H}] \\
\frac{\mathrm{d}\hat{p}}{\mathrm{d}t} &= \frac{1}{i\hbar}[\hat{p},\hat{H}]
\end{aligned}$$

4.1.2 Cas d'un hamiltonien quadratique

Raisonnons sur un exemple ; supposons que l'hamiltonien d'un système soit de la forme :

$$H = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i,j} \alpha_{ij}\,\hat{q}_i\hat{q}_j$$

Les observables $\hat{q}_i$ et $\hat{p}_i$ vérifient les règles de commutation canoniques :

$$\begin{aligned}
[\hat{q}_i,\hat{p}_j] &= i\hbar\delta_{ij} \\
[\hat{q}_i,\hat{q}_j] &= [\hat{p}_i,\hat{p}_j] = 0
\end{aligned}$$

ils permettent de calculer les commutateurs avec l'hamiltonien :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i,\hat{H}] &= \frac{\hat{p}_i}{m_i} \\
\frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i,\hat{H}] &= -\sum_j \alpha_{ij}\hat{q}_j
\end{aligned}$$

On en tire les équations du mouvement, conformément à la sous–section précédente :

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\hat{q}_i}{\mathrm{d}t} &= \frac{\hat{p}_i}{m_i} \\
\frac{\mathrm{d}\hat{p}_i}{\mathrm{d}t} &= -\sum_j \alpha_{ij}\hat{q}_j
\end{aligned}$$

Par ailleurs, on peut obtenir pour le même hamiltonien les ´équations du mouvement classique (équation de Hamilton), on trouve :

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}q_i}{\mathrm{d}t} &= \frac{p_i}{m_i} \\ \frac{\mathrm{d}p_i}{\mathrm{d}t} &= -\sum_j \alpha_{ij} q_j \end{aligned}$$

Les équations du mouvement classiques et quantiques sont formellement les mêmes[3]. Pour passer du classique au quantique il suffit de *remplacer les observables par des opérateurs.*

4.1.3 Modèle de Lamb quantique

À condition de choisir les “bons” α_{ij}, l'hamiltonien ci–dessus peut représenter une chaîne linéaire d'oscillateurs. Considérons le modèle de Lamb dans le cas particulier où la particule test est un oscillateur harmonique. Dans ce cas on peut appliquer le résultat de la sous-section précédente : on remplace dans l'équation classique de Langevin les observables par des opérateurs et on obtient *l'équation de Langevin quantique* [9] :

$$\boxed{m\frac{\mathrm{d}^2\hat{q}}{\mathrm{d}t^2} = -m\Omega^2\hat{q} - \eta\frac{\mathrm{d}\hat{q}}{\mathrm{d}t} + \hat{F}(t)} \tag{3}$$

Notons que les opérateurs sont à prendre au sens de Heisenberg.

Interprétation. Le système quantique décrit par expression ci-dessus est la réunion de la particule “test” et de son bain (ici la corde vibrante). L'espace de Hilbert décrivant le système est donc le produit des espaces respectifs de chacun des sous-systèmes :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\text{particule}} \otimes \mathcal{E}_{\text{bain}}$$

Tous les opérateurs qui sont dans l'éq. 3 agissent sur cet espace produit. Cependant à l'instant $t = 0$ on connaît l'expression de $\hat{q}$, d'après le paragraphe 4.1.1 $\hat{q}(0)$ est l'opérateur position usuel de la particule (*i.e.* la “multiplication par q”), il agit uniquement sur la particule, sur le bain il a l'effet de l'identité. L'opérateur $\hat{F}(t)$ qui représente le terme de bruit est, d'après l'eq. 2 page 7, une expression linéaire de opérateur $\hat{\varphi}(x, t = 0)$, il agit donc sur le bain. Compte tenu de la forme de l'éq. 3, visiblement pour $t > 0$, $\hat{q}(t)$ va aussi agir sur le bain. Ceci montre que l'évolution “entrelace” le degré de liberté de la particule avec ceux du bain. On parle d'*intrication quantique* entre le système test et son environnement. Elle est dûe au *couplage* entre le système et le bain.

Évolution des valeurs moyennes. Si on se donne un état initial quelconque pour l'ensemble particule–bain, on peut calculer les valeurs moyennes des observables ; prenons alors la valeur moyenne de chacun des deux membres de l'éq. 3, on trouve simplement :

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle\hat{q}\rangle = -m\Omega^2\langle\hat{q}\rangle - \eta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{q}\rangle + \langle\hat{F}\rangle(t) \tag{4}$$

[3]D'une manière plus générale, la relation entre quantique et classique peut se faire :

$$\frac{\partial}{\partial p} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar}[\hat{q},\ \cdot\ ] \quad \text{et} \qquad -\frac{\partial}{\partial q} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar}[\hat{p},\ \cdot\ ]$$

du fait de la linéarité des équation sur $\hat{q}$, l'équation sur la valeur moyenne est identique à l'équation classique. Ce résultat apparaît comme une généralisation du théorème d'Ehrenfest.

Conclusion L'équation de Langevin quantique met en évidence l'intrication entre le système et le bain et donne une formule sur les moyennes utile pour la suite. Cependant elle ne nous aide pas pour l'étude quantique du système à température nulle ; nous devons considérer une autre approche.

4.2 Seconde approche : la réponse linéaire

Pour l'étude du système à température nulle, nous allons aborder le problème en termes de réponse linéaire. Cette approche est largement inspirée du récent article de K. Nagaev et M. Büttiker [1]. Dans cette section nous allons calculer des moyennes telles que $\langle H^2 \rangle$, $\langle q^2 \rangle$, $\langle H^2 \rangle \ldots$ à température nulle. Les résultats seront obtenus au prix d'une approximation qu'on va discuter dans la section 4.3.

4.2.1 Rappels, définitions générales [4]

Soit un système physique isolé, notons $\hat{H}_0$ son hamiltonien. Donnons nous deux observables $\hat{x}$ et $\hat{y}$ qui ne dépendent pas explicitement du temps. Dans la suite nous allons considérer le cas où l'on excite faiblement le système par une force extérieure dépendant du temps. L'excitation se traduit par un terme supplémentaire dans l'hamiltonien, nous allons supposer que l'hamiltonien excité a la forme suivante :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \hat{x} f(t)$$

à cause de l'excitation, la valeur moyenne $\langle \hat{y} \rangle(t)$ va être différente par rapport à la moyenne sans excitation $\langle \hat{y} \rangle_0(t)$. À la limite où l'excitation est petite, on peut toujours faire un développement au premier ordre par rapport à f et écrire :

$$\langle \hat{y} \rangle(t) = \langle \hat{y} \rangle_0(t) + \int_0^t \phi_{xy}(\tau) f(t-\tau)\, \mathrm{d}\tau + o(f)$$

Cette relation définit la réponse impulsionnelle $\phi_{xy}(t)$, elle traduit la réponse de $\hat{y}$ à une excitation de $\hat{x}$. Parfois il est utile de travailler avec des fréquences plutôt qu'avec le temps, par exemple quand on s'intéresse à des excitations sinusoïdales. Dans ce cas, on peut faire une transformation de Fourier $t \to \omega$ sur les grandeurs auxquelles on s'intéresse et on peut alors être amené à utiliser la fonction de transfert définie ainsi :

$$\chi_{xy}(\omega) = \lim_{\epsilon \to 0^+} \int_0^\infty \phi_{xy}(t) e^{(i\omega+\epsilon)t}\, \mathrm{d}t$$

l'introduction de $\epsilon > 0$ n'est pas seulement un artifice de calcul, il est nécessaire pour que le comportement décrit par χ soit causal [4]. Dans la suite nous allons utiliser les notations suivantes :

$$\chi' = \mathcal{R}e\, \chi \quad \text{et} \quad \chi'' = \mathcal{I}m\, \chi$$

4.2.2 Théorème fluctuation–dissipation [4]

Soit un système isolé décrit dans le cadre de l'ensemble canonique à température $T = 1/k\beta$ (ensemble de Gibbs). Il est dans un état d'équilibre, sa distribution statistique est stationnaire (ne dépend pas du temps). Considérons deux observables $\hat{x}$ et $\hat{y}$ qui ne dépendent pas explicitement du temps. Dans la représentation de Heisenberg, que nous allons utiliser dans ce paragraphe, $\hat{x}$ et $\hat{y}$ dépendent du temps, mais à cause de la stationnarité de la distribution statistique leurs moyennes $\langle \hat{x} \rangle_\beta$ et $\langle \hat{x} \rangle_\beta$ ne dépendent pas du temps. En revanche, des moyennes telles que $\langle \hat{x}(t_1)\hat{y}(t_2) \rangle_\beta$ vont dépendre de la différence $t_2 - t_1$. Puisque la distribution de Gibbs est stationnaire, ce résultat peut paraître surprenant. À titre d'exemple considérons que le système est un simple oscillateur harmonique à température $T = 0$, donc dans son fondamental $|0\rangle$ intéressons–nous à sa position en prenant $\hat{x} = \hat{y} = \hat{q}$. Avec les notations usuelles :

$$\begin{aligned}
\langle 0|\hat{q}(0)\hat{q}(t)|0\rangle &= \langle 0|\hat{q}(0) \left\{ \hat{q}(0)\cos\omega t + \frac{\hat{p}(0)}{m}\sin\omega t \right\} |0\rangle \\
&= \langle 0|\hat{q}^2(0)|0\rangle \cos\omega t + \frac{1}{m}\langle 0|\hat{q}(0)\hat{p}(0)|0\rangle \sin\omega t \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\cos\omega t
\end{aligned}$$

Mais pour un système quelconque on ne peut pas faire les calculs aussi simplement parce qu'en général on ne sait expliciter ni le fondamental ni la distribution statistique. Cependant le théorème fluctuation–dissipation peut donner un certain nombre de résultats ; voici son énoncé [4] :

$$\langle \hat{x}(0)\hat{y}(t) \rangle_\beta = -\frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \chi''_{xy}(\omega) \left(1 + \coth\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) e^{i\omega t}\, \mathrm{d}\omega$$

χ_{xy} est la partie imaginaire de la fonction de transfert qui décrit la réponse de $\hat{y}$ à une excitation de $\hat{x}$.

4.2.3 Application au modèle de Lamb à $T = 0$ [1]

Revenons au modèle de Lamb, et considérons que la particule test est un oscillateur harmonique de pulsation propre Ω. Dans la suite nous allons nous placer à température $T = 0$. Dans ce cas les moyennes se calculent dans l'état fondamental de l'ensemble particule–bain :

$$\langle \cdot \rangle = \langle 0| \cdot |0\rangle$$

D'après la section 4.1.3 l'équation sur la position moyenne de la particule test (oscillateur harmonique) est :

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle \hat{q} \rangle = -m\Omega^2 \langle \hat{q} \rangle - \eta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{q} \rangle + \langle \hat{F} \rangle(t)$$

Si on se place à température $T = 0$ on peut faire l'*approximation* suivante : le terme $\langle \hat{F} \rangle(t)$ intervient peu dans l'équation de Langevin alors on va le négliger. Dans ce cas l'équation ci–dessus est celle d'un simple oscillateur amorti. Or on connaît bien la fonction de transfert pour ce système :

$$\begin{aligned}\chi'(\omega) &= \frac{1}{m}\frac{\Omega^2-\omega^2}{(\Omega^2-\omega^2)^2+\eta^2\omega^2/m^2}\\ \chi''(\omega) &= -\frac{1}{m}\frac{\eta\omega/m}{(\Omega^2-\omega^2)^2+\eta^2\omega^2/m^2}\end{aligned}$$

Utilisons la dernière expression dans le théorème fluctuation–dissipation et prenons la limite $T \to 0$ (*c-à-d* $\beta \to +\infty$), il vient :

$$\langle\hat{q}(0)\hat{q}(t)\rangle = \frac{\hbar}{\pi m}\int_0^\infty \frac{\eta\omega e^{i\omega t}/m}{(\Omega^2-\omega^2)^2+\eta^2\omega^2/m^2}\,\mathrm{d}\omega \tag{5}$$

Rappelons qu'ici le système étudié est l'ensemble particule–bain et que la variable β correspond à la température de l'ensemble. La limite "température nulle" revient à considérer l'état fondamental de l'ensemble, c'est précisément ce qui nous intéresse. À partir de l'expression ci–dessus, on peut calculer un certain nombre de valeurs moyennes.

Calcul de $\langle\hat{q}^2\rangle$. Comme la moyenne est à prendre dans l'état fondamental de l'ensemble et que ce dernier est stationnaire $\langle\hat{q}^2\rangle$ ne dépend pas du temps. Pour le calculer, il suffit d'évaluer l'expression (5) pour $t = 0$. On calcule l'intégrale par changement de variable et finalement on trouve :

$$\boxed{\langle\hat{q}^2\rangle = \frac{\hbar}{2\pi m\sqrt{\Omega^2-\eta^2/4m^2}}\left(\frac{\pi}{2}+\arctan\frac{\Omega^2-\eta^2/2m^2}{\eta/m\sqrt{\Omega^2-\eta^2/4m^2}}\right)}$$

La fig. 6 montre l'allure de cette fonction ; dans le cas où $\eta \to 0$ on retombe bien sur la valeur pour un oscillateur harmonique sans environnement.

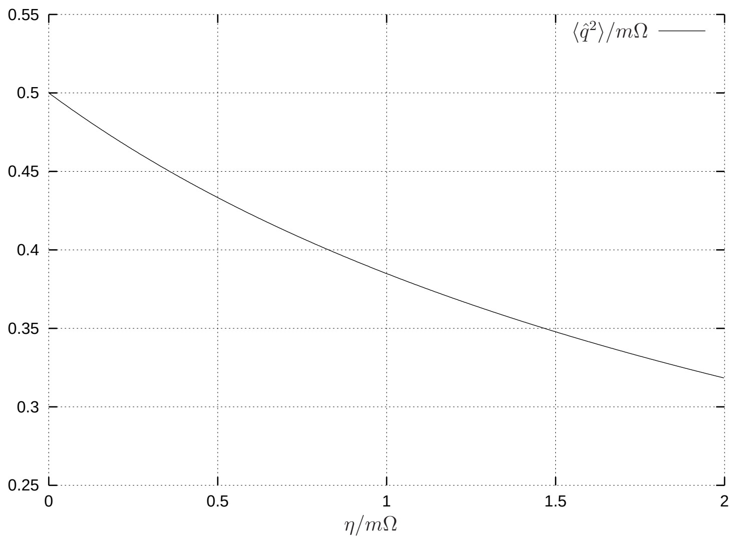

FIG. 6 – Ci–dessus on a tracé $\langle\hat{q}^2\rangle m\Omega/\hbar$ en fonction de $\eta/m\Omega$.

Calcul de $\langle \hat{p}^2 \rangle$. En remarquant que $\hat{p}(t) = m\,\mathrm{d}\hat{q}/\,\mathrm{d}t$ on trouve que :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{q}(0)\hat{q}(t)\rangle = \frac{1}{m}\langle \hat{q}(0)\hat{p}(t)\rangle$$

Comme le système est dans son fondamental et que c'est un état stationnaire, $\langle \hat{q}(0)\hat{p}(t)\rangle = \langle \hat{q}(-t)\hat{p}(0)\rangle$, alors en dérivant encore une fois $\langle \hat{q}(0)\hat{q}(t)\rangle$ on trouve :

$$\langle \hat{p}(0)\hat{p}(t)\rangle = -m^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle \hat{q}(0)\hat{q}(t)\rangle$$

Ainsi, en dérivant deux fois l'expression (5) par rapport au temps puis en prenant $t = 0$ on obtient $\langle \hat{p}^2 \rangle$. En pratique on dérive sous le signe intégrale de l'expression (5), ce qui nous amène à calculer :

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty \frac{\eta \omega^3 e^{i\omega t}}{(\Omega^2 - \omega^2)^2 + \eta^2 \omega^2/m^2}\,\mathrm{d}\omega$$

L'expression sous le signe intégrale se comporte comme $1/\omega$ pour $\omega \to \infty$, donc l'intégrale diverge. Pour l'estimer on peut introduire une fréquence de coupure Ω_c, on trouve alors :

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{\hbar}{\pi}\eta \ln \frac{\Omega_c}{\Omega} + m^2(\Omega^2 - \eta^2/2m^2)\langle \hat{q}^2 \rangle$$

on peut interpréter Ω_c en imaginant que la chaîne d'oscillateurs est caractérisée par un paramètre de maille petit mais non–nul.

Calcul de $\langle \hat{H} \rangle$. À partir de ces expressions on peut calculer $\langle \hat{H} \rangle$, l'énergie moyenne de la particule test. En effet :

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle \hat{p}^2 \rangle}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2}\langle \hat{q}^2 \rangle$$

Au premier ordre en η, on trouve :

$$\boxed{\langle \hat{H} \rangle \sim \frac{\hbar\Omega}{2} + \eta \times \text{const}}$$

tout comme $\langle \hat{p}^2 \rangle$, $\langle \hat{H} \rangle$ diverge logarithmiquement avec la fréquence de coupure.

Calcul de $\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2$. Ce résultat est plus compliqué parce qu'il contient des moyennes de produits à quatre termes. Comme le système est quadratique et qu'on considère l'état fondamental, le théorème de Wick est valable et nous permet d'exprimer les moyennes à quatre termes en fonction des moyennes à deux termes :

$$\begin{aligned}
&\langle \hat{q}^4 \rangle = 3\langle \hat{q}^2 \rangle^2 \\
&\langle \hat{p}^4 \rangle = 3\langle \hat{p}^2 \rangle^2 \\
&\langle \hat{q}^2\hat{p}^2 \rangle = 2\langle \hat{q}\hat{p} \rangle\langle \hat{p}\hat{q} \rangle + \langle \hat{q}^2 \rangle\langle \hat{p}^2 \rangle
\end{aligned}$$

Ainsi on obtient pour l'écart quadratique moyen de l'énergie :

$$(\Delta \hat{H})^2 = \frac{\langle \hat{p}^2 \rangle^2}{2m^2} + \Omega^2 \langle \hat{q}\hat{p} \rangle\langle \hat{p}\hat{q} \rangle + \frac{m^2\Omega^4}{2}\langle \hat{q}^2 \rangle^2$$

Au premier ordre en η, on trouve :

$$\boxed{(\Delta\hat{H})^2 \sim \eta \times \text{const}}$$

Ces résultats ont été publiés en 2002 par K. Nagaev et M. Büttiker [1]. Nous allons les commenter à la fin de la section suivante.

Au prix d'une petite approximation on obtient l'écart quadratique moyen à température nulle. La prochaine section nous permettra d'aller plus loin en calculant la matrice densité réduite du système.

4.3 Troisième approche : calculs directs

Dans la section 4.2.3 nous avons négligé le terme $\langle\hat{F}\rangle$ qui provenait des fluctuations du bain. Pour maîtriser cette approximation, nous avons adopté une approche directe qui consiste à faire des changements de variable dans l'hamiltonien de façon à le rendre diagonalisable. Lorsque les calculs analytiques ne nous étaient pas possibles nous nous sommes appuyés sur des méthodes numériques. Nous discuterons de la possibilité de faire tous les calculs analytiquement dans la conclusion.

4.3.1 Modes normaux

Dans ce qui suit nous allons chercher les modes normaux du modèle de Lamb. Nous allons voir qu'il peut être décomposé en oscillateurs harmoniques indépendants. Pour simplifier le calcul nous allons d'abord discrétiser le modèle de Lamb. La corde vibrante est remplacée par une chaîne d'oscillateurs harmoniques couplés entre plus proches voisins. La "particule test" sera identifié au premier oscillateur de la chaîne, voir fig. 7. En ces

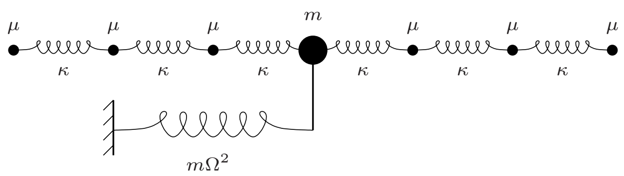

FIG. 7 – Modèle de Lamb discrétisé.

termes, l'hamiltonien s'écrit :

$$H = \underbrace{\frac{p_1^2}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2}q_1^2}_{\hat{H}_0} + \sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2\mu} + \sum_{i=1}^{N}\frac{\kappa}{2}(q_{i+1} - q_i)^2$$

$q_1 = q$ et $p_1 = p$ désignent respectivement la position et l'impulsion de la particule test et $q_{i\geq 2}$,$p_{i\geq 2}$ celles des particules du bain. Le coefficient μ correspond aux masses des particules du bain et κ à la raideur du potentiel de couplage entre particules voisines (cf. fig. 7). Ces coefficients sont obtenus en fonction de la constante de friction η et la célérité naturelle de la corde c par le schéma de discrétisation utilisé dans la section 3.1.5. L'hamiltonien ci–dessus est une forme quadratique qu'on peut diagonaliser en faisant un changement de variables. Avec les nouvelles variables de position $x_1, \ldots, x_N$ et d'impulsion $y_1, \ldots, y_N$ le nouvel hamiltonien s'écrit :

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i^2}{2} + \frac{\omega_i^2}{2} x_i^2 \right) \tag{6}$$

Il s'agit de l'hamiltonien de N oscillateurs harmoniques *indépendants* ; les ω_i^2 sont les valeurs propres obtenues lors de la diagonalisation de la forme quadratique. Les matrices de passage s_{ij} et t_{ij} qui lient les anciennes coordonnées aux nouvelles sont définies par :

$$q_i = \sum_j s_{ij} x_j \tag{7}$$

$$p_i = \sum_j t_{ij} y_j \tag{8}$$

Le nouveau jeu de variables permet de faire facilement certains calculs quantiques. Le nouvel hamiltonien représente des oscillateurs indépendants ; l'état fondamental $|0\rangle$ du système total est le produit des fondamentaux $|0\rangle_i$ de tous les oscillateurs :

$$|0\rangle = |0_1\rangle \otimes |0_2\rangle \otimes \cdots \otimes |0_N\rangle \tag{9}$$

À partir de là on peut calculer un certain nombre de valeurs moyennes.

4.3.2 Calculs de valeurs moyennes

Calcul de $\langle \hat{q}^2 \rangle$. En utilisant l'expression (7) on arrive à :

$$\langle q^2 \rangle = \langle 0| \left(\sum_j s_{1j} x_j \right)^2 |0\rangle = \sum_{ij} s_{1i} s_{1j} \langle 0|x_i x_j|0\rangle$$

Dans cette somme on distingue les termes où $i = j$ qui font apparaître $\langle 0|x_i^2|0\rangle$ et ceux où $i \neq j$ qui font apparaître $\langle 0|x_i x_j|0\rangle = \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle$. Les derniers sont tous nuls parce que la position moyenne de tout oscillateur dans son fondamental est nulle. Les termes où $i = j$ sont bien connus [3] :

$$\langle 0|x_i^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2\omega_i}$$

Finalement on en déduit le résultat simple :

$$\boxed{\langle q^2 \rangle = \sum_j s_{1j}^2 \frac{\hbar}{2\omega_j}}$$

Malheureusement nous n'avons pas encore d'expression analytique pour les coefficients s_{0j} en fonction de la constante de friction η et de la célérité c de la corde. Pour les calculs concrets qui vont suivre on fera usage de méthodes numériques. Cependant, remarquons que nous avons besoin d'une petite partie seulement des s_{ij} (ceux avec $i = 1$) ; c'est encourageant parce qu'on espère pouvoir contourner la diagonalisation complète de l'hamiltonien dans la limite continue.

À titre d'exemple, nous avons calculé numériquement $\langle q^2 \rangle$ avec ces paramètres :

- $N = 100$
- $L = 10\, c/\Omega$

– $0 \leq \eta \leq 5\, m\Omega$

nous avons pris exactement les mêmes unités que dans la section 3.1.5. Sur la fig. 8 nous avons tracé en trait plein le résultat obtenu pour $\langle q^2 \rangle m\Omega/\hbar$ en fonction de η. Pour comparer avec le résultat de la section 4.2.3 nous avons reporté la fig. 6 en pointillés. Les deux courbes coïncident très bien à la limite $\eta \to 0$ mais s'écartent très légèrement

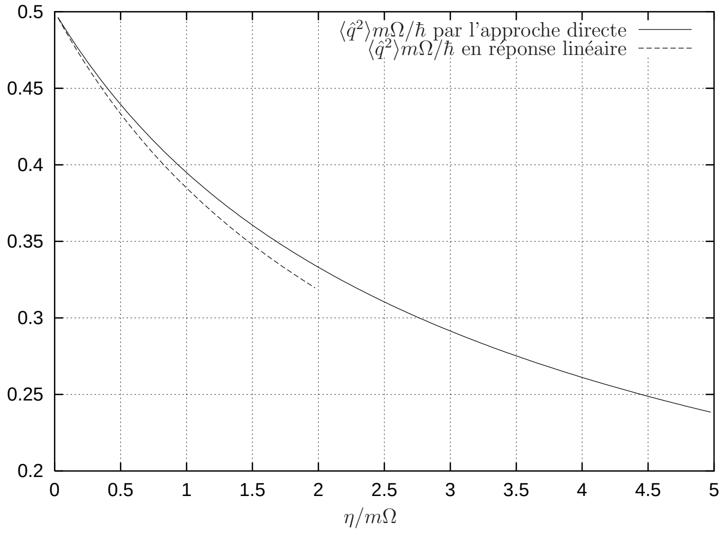

FIG. 8 – Ci–dessus on a tracé en trait plein $\langle \hat{q}^2 \rangle m\Omega/\hbar$ en fonction de $\eta/m\Omega$ en utilisant l'approche directe et un calcul numérique des s_{ij}. La même courbe obtenue en utilisant le formalisme de la réponse linéaire est tracée en pointillés.

quand η croît ; pour l'instant on n'a pas pu conclure que cet écart est nécessairement dû à l'approximation faite dans la section 4.2.3.

Calcul d'autres moyennes. Les expressions pour $\langle p^2 \rangle$, $\langle q^4 \rangle$, $\langle p^4 \rangle$ *etc.* se calculent exactement de la même façon que $\langle q^2 \rangle$: on fait le calcul analytique dans la base des modes normaux $x_1, \ldots, x_N, y_1, \ldots, y_N$ et ensuite, à l'aide des matrices de passage, on transcrit les résultats en fonction de q et p. Par cette méthode nous avons calculé l'énergie moyenne $\langle H_0 \rangle$ de la particule test et son écart quadratique moyen $\langle H_0^2 \rangle - \langle H_0 \rangle^2$; la fig. 9 donne leur valeur en fonction de la constante de friction η. Ces courbes méritent quelques commentaires.

Tout d'abord, à la limite $\eta \to 0$, $\langle H_0 \rangle = \hbar\Omega/2$ et $(\Delta H_0)^2 = 0$, ceci prouve qu'à température nulle si $\eta = 0$ la particule est dans son fondamental : c'est un état pur et on n'a pas de décohérence. Ce résultat est prévisible si on remarque que dans le cadre du modèle de Lamb lorsque $\eta \to 0$ la densité de masse de la corde tend aussi vers zéro : dans cette limite le bain disparaît et la particule test devient une particule isolée. Dès que η devient non–nul, $(\Delta H_0)^2$ diffère de zéro, l'énergie de la particule n'est plus bien définie. Lorsque la particule passe dans un régime très amorti (*c-à-d* $\eta/m\Omega \to \infty$) les fluctuations d'énergie (ΔH_0) dépassent largement l'écart entre deux niveaux d'énergie ; l'énergie de la particule est très mal définie. Cependant, le fait que la particule ne soit pas dans un état propre de son hamiltonien n'implique pas qu'il y ait de la décohérence, puisqu'il se peut que son état soit un état pur. Pour discuter de la décohérence il faut calculer l'opérateur densité réduit de la particule test. C'est ce que nous allons faire.

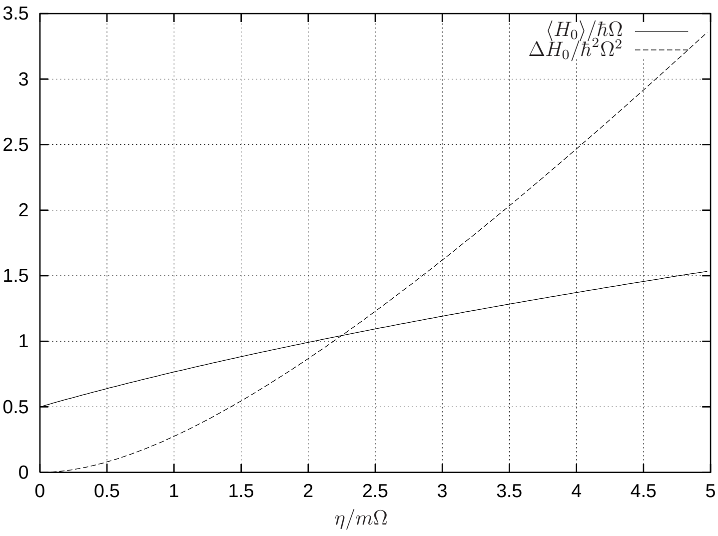

FIG. 9 – Moyenne et écart quadratique moyen de l'énergie de la particule.

4.3.3 Calcul de l'opérateur densité réduit à $T = 0$

Rappels sur l'opérateur densité [2, 3] 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 $\hat{\rho}$. Dans ce qui suit, à travers des exemples, nous allons juste rappeler quelques relations utiles le concernant. Donnons nous un système ("la particule"), une base de l'espace de Hilbert des états quantiques $(|0\rangle, |1\rangle \ldots)$ et une observable $\hat{A}$. Nous avons les relations suivantes :

- $\langle n|\hat{\rho}|n\rangle$ donne la probabilité que la particule soit dans l'état $|n\rangle$; cette écriture est une généralisation de $|\langle\psi|n\rangle|^2$.
- $\mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{A})$ 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 :

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

Si l'opérateur densité est de la forme $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, on dit que $\hat{\rho}$ 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 suivant, l'un est un état pur et l'autre un mélange :

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{\mathrm{pur}} &= (\alpha_1|\psi_1\rangle + \alpha_2|\psi_2\rangle)(\alpha_1\langle\psi_1| + \alpha_2\langle\psi_2|) \\ \hat{\rho}_{\mathrm{melange}} &= |\alpha_1|^2|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\alpha_2|^2|\psi_2\rangle\langle\psi_2|\end{aligned}$$

Calculons dans les deux cas la probabilité que la particule soit dans un état $|n\rangle$, on obtient :

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{\rho}_{\mathrm{pur}}|n\rangle &= |\alpha_1\langle n|\psi_1\rangle + \alpha_2\langle n|\psi_2\rangle|^2 \\ \langle n|\hat{\rho}_{\mathrm{melange}}|n\rangle &= |\alpha_1\langle n|\psi_1\rangle|^2 + |\alpha_2\langle n|\psi_2\rangle|^2\end{aligned}$$

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 :

$$S = -\mathrm{tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$$

Dans l'exemple ci–dessus, pour l'état pur l'entropie est nulle, alors que pour le mélange statistique on trouve[4] $\ln 2$.

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 un bain. 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. Naturellement il ne dépend que des variables de celle–ci.

Expression de l'opérateur densité réduit Revenons à l'hamiltonien du modèle de Lamb en termes de modes normaux (eq .6). Considérons son fondamental qui s'écrit comme le produit des fondamentaux de chacun des modes (eq .9). C'est un état pur et l'opérateur densité de l'ensemble s'écrit comme :

$$\hat{\rho} = \Big(|0_1\rangle \otimes \ldots \otimes |0_N\rangle\Big)\Big(\langle 0_1| \otimes \ldots \otimes \langle 0_N|\Big)$$

Écrivons les éléments de matrice de $\hat{\rho}$ en représentation position :

$$\langle x_1, \ldots, x_N|\hat{\rho}|x'_1, \ldots, x'_N\rangle = \langle x_1|0_1\rangle\langle 0_1|x'_1\rangle \cdots \langle x_N|0_N\rangle\langle 0_N|x'_N\rangle$$

Mais on se rappelle que la fonction d'onde $\langle x_i|0_i\rangle$ est une gaussienne. Et comme ρ est un produit de gaussiennes, on peut l'écrire comme l'exponentielle d'une somme de la forme :

$$\rho \propto e^{-\sum \alpha_i (x_i^2 + x'^2_i)}$$

Maintenant on peut remplacer les x_i et x'_i par leurs expressions en fonction des q_i et q'_i en utilisant eq. 7. Ensuite on fait la trace sur tous les degrés de liberté du bain : on intègre $\hat{\rho}$ sur $q_2, \ldots, q_N$. Le calcul se ramène à des intégrales gaussiennes, et en manipulant les intégrales, on arrive à montrer que la densité réduite qui décrit la particule seule est de la forme :

$$\boxed{\sigma(q, q') = \frac{1}{Z} e^{\frac{1}{2}\left(\frac{a}{2}(q^2 + q'^2) - bqq'\right)}} \tag{10}$$

Z est une constante de normalisation, qu'on calcule en imposant $\mathrm{tr}\hat{\sigma} = 1$. Pour trouver a et b on peut écrire les quantités déjà calculées dans la section précédente :

$$\langle q^2\rangle = \mathrm{tr}(\hat{\sigma}\hat{q}^2)$$
$$\langle p^2\rangle = \mathrm{tr}(\hat{\sigma}\hat{p}^2)$$

[4]En 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 $-p_i \ln pi$. En prenant la trace on trouve pour l'entropie :

$$S = -\sum_i p_i \ln p_i$$

Ainsi on trouve deux relations entre a, b, $\langle q^2 \rangle$ et $\langle p^2 \rangle$, ce qui nous permet d'exprimer a et b en fonction de $\langle q^2 \rangle$ et $\langle p^2 \rangle$ qu'on connaît déjà. On trouve :

$$\begin{aligned} a &= \frac{2\langle p^2 \rangle}{\hbar^2} + \frac{1}{2\langle q^2 \rangle} \\ b &= \frac{2\langle p^2 \rangle}{\hbar^2} - \frac{1}{2\langle q^2 \rangle} \end{aligned}$$

La fig. 10 montre l'allure de a en trait plein et de b en pointillés en fonction de la constante de friction η.

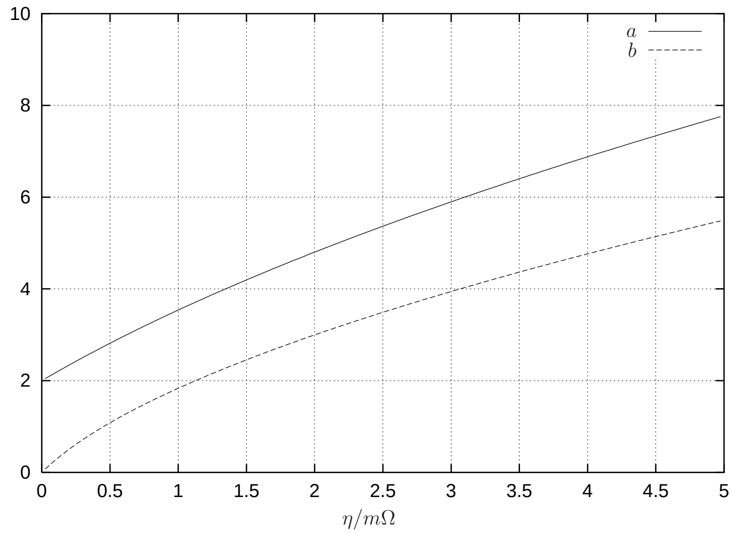

Fig. 10 – Allure des coefficient a et b en en fonction de $\eta/m\Omega$.

Discussion : Finalement on a obtenu la matrice densité réduite de la particule test couplée à un environnement. Rappelons que ce résultat est valable à température nulle. Commentons l'expression (10). Sauf dans le cas particulier où b est nul (qui correspond à l'absence de bain), $\sigma(q, q')$ ne peut pas se factoriser :

$$\sigma(q, q') \neq \varphi(q)\bar{\varphi}(q')$$

C'est un résultat important car il montre qu'à température nulle on observe une perte de cohérence induite par le couplage avec l'environnement. Enfin, nous pouvons déduire de σ la densité de probabilité de présence pour la particule test en fonction de la position q :

$$\begin{aligned} \langle q|\hat{\sigma}|q\rangle &= \sigma(q, q') \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\langle q^2 \rangle}} e^{-\frac{1}{2}\frac{q^2}{\langle q^2 \rangle}} \end{aligned}$$

Il s'agit d'une gaussienne centrée sur l'origine. Compte tenu de l'allure de $\langle q^2 \rangle$ en fonction de η (cf. fig. 8) la distribution en position tend à être de plus en plus localisée au fur et à mesure que la constante de friction η devient grande.

Température et pulsation effectives Ici nous allons juste faire un changement de variable pour réécrire la matrice densité de la particule test sous une autre forme. Introduisons les variables $\tilde{\beta}$ et $\tilde{\Omega}$ en posant :

$$\begin{aligned} \hbar^2\theta^2 &= 4\langle p^2\rangle\langle q^2\rangle \\ \hbar^2 m^2\tilde{\Omega}^2 &= \frac{p^2}{q^2} \\ \operatorname{ch}\hbar\tilde{\beta}\tilde{\Omega} &= \frac{\theta^2+1}{\theta^2-1} \end{aligned}$$

avec ces notations $\sigma(q,q')$ se réécrit

$$\sigma(q,q') = \left(\frac{m\tilde{\Omega}(\cosh\tilde{\beta}\hbar\tilde{\Omega}-1)}{\pi\hbar\sinh\tilde{\beta}\hbar\tilde{\Omega}}\right)^{1/2} e^{-\frac{m\tilde{\Omega}}{2\hbar\sinh\tilde{\beta}\hbar\tilde{\Omega}}\left\{(q^2+q'^2)\cosh\tilde{\beta}\hbar\tilde{\Omega}-2qq'\right\}}$$

on "reconnaît" la matrice densité d'un oscillateur harmonique *isolé* de pulsation $\tilde{\Omega}$ à température $\tilde{T} = 1/k\tilde{\beta}$. On réécrit l'expression ci–dessus sous la forme :

$$\boxed{\hat{\sigma} = \frac{1}{\tilde{Z}} e^{-\tilde{\beta}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{m\tilde{\Omega}^2}{2}\hat{q}^2\right)}}$$

où $\tilde{Z}$ est une constante de normalisation.

Ce résultat montre qu'à température nulle, à cause de l'environnement la particule test se comporte comme un oscillateur de pulsation effective $\tilde{\Omega}$ à température effective $\tilde{T} = 1/k\tilde{\beta}$. La fig. 11 représente l'allure de $\tilde{T}$ et de $\tilde{\Omega}$. Rappelons que l'entropie d'un oscillateur

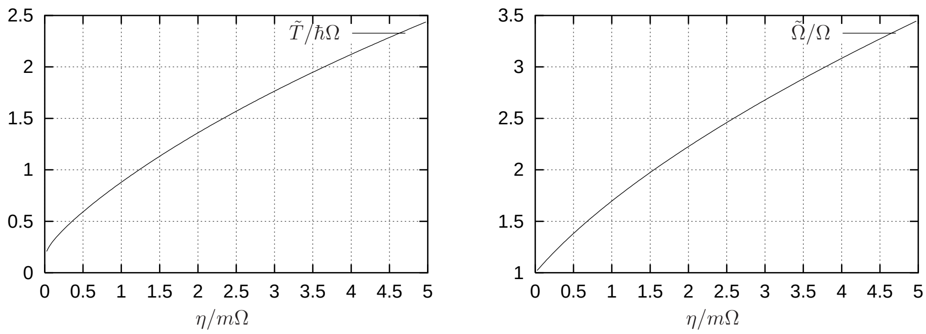

Fig. 11 – On a représenté la température effective $\tilde{T}/\hbar\Omega$ (à gauche) et la pulsation effective $\tilde{\Omega}/\Omega$ (à droite) en fonction de $\eta/m\Omega$.

isolé augmente avec la température. Ici, comme la température effective augmente avec η l'entropie de la particule test augmente. Or nous avons vu que l'entropie mesure le "degré de décohérence", on en déduit que la décohérence du système augmente quand le couplage avec son environnement croît.

5 Conclusion et perspectives

Dans ce travail, nous avons étudié un modèle décrivant un système couplé à son environnement. D'abord nous avons étudié ce modèle dans le cadre de la mécanique classique pour dégager les notions de dissipation et de fluctuation. Nous en avons ensuite dérivé une première approche quantique. Cela nous a permis de mettre en évidence l'intrication quantique entre le système et son bain lors de son évolution, sans toutefois donner de résultats précis à température nulle. Ensuite, au prix d'une approximation et en s'inspirant des travaux de K. Nagaev et de M. Büttiker[1], nous avons calculé les fluctuations d'énergie à température nulle ; ces fluctuations sont une manifestation quantique du couplage entre la particule et son bain. Toutefois, à ce stade, nous n'avons pas mis en évidence de la décohérence pour la particule. Enfin, pour aller au delà de ces résultats nous avons calculé la matrice densité réduite de la particule à température nulle. Ce dernier calcul nous a permis de mettre en évidence une décohérence résiduelle à température nulle due au couplage de la particule avec son environnement.

Ce travail nous suggère un certain nombre de perspectives. Dans la dernière approche du problème, nous avons utilisé des méthodes numériques pour le calcul des "coefficients s_{ij}" ; il nous semble possible d'obtenir leur expression analytique en s'inspirant des travaux de Fano [7] ; ceci nous donnera une expression analytique exacte de la matrice densité réduite en fonction du paramètre η de dissipation classique. Ensuite, on pourra appliquer notre approche à des systèmes autres que l'oscillateur harmonique et on pourra également étudier d'autres types de couplage. Enfin, à plus long terme, on peut étudier la perte de cohérence au cours du temps dans les systèmes dissipatifs.

Le travail en cours présente aussi des perspectives expérimentales assez directes. Par exemple, on observe des effets quantiques dans la dynamique d'une jonction de Josephson. L'influence de l'environnement est essentielle et le modèle étudié dans ce travail s'adapte bien à ces systèmes.

Références

[1] K. Nagaev and M. Büttiker, Europhys. Lett. **58**, 475 (2002).

[2] B. Diu, C. Guthmann, D.Lederer, B. Roulet – Physique statistique.
`ISBN 2-7056-6065-8`

[3] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë – Mécanique quantique.
`ISBN 2-7056-5733-9`

[4] E. Fick G. Sauermann – The quantum statistics of dynamic processes.
`ISBN 3-540-50824-4`

[5] P. W. Milonni – The quantum vacuum, an introduction to QED.
`ISBN 0-12-498080-5`

[6] U. Weiss – Quantum dissipative systems.
`ISBN 981-02-0754-9`

[7] U. Fano, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).

[8] A. O. Caldeira, A. J. Leggett, An. Phys. **149**, 374–456 (1983).

[9] G. W. Ford, J. T. Lewis, R. F .O'Connell, Phys. Rev. A **37**, 4419 (1988)

[10] D. Nelson *et al*, Phys. Rev. Lett. **86**, 1821 (2001)