

Problèmes dépendant du temps en mécanique quantique

Au programme

Formulation générale du problème

Théorie des perturbations dépendent du temps

**Etats discrets: Evolution cohérente et approximation
séculaire**

Couplage aux états du continuum et relaxation

Motivation

Pourquoi étudier des problèmes dépendant du temps ?

- Pour étudier la dynamique dans les cas complexes (impliquant plus de 2 niveaux), par exemple les réactions nucléaires
- Besoin de faire évoluer l'état quantique vers un état pré-défini (RMN, inversion des populations, ordinateurs quantiques: quantum control, en appliquant par exemple un champ B)
- Besoin de comprendre l'évolution (parfois non désirée) d'un état quantique, notamment sous l'action d'une action externe (relaxation)

Équation fondamentale, dite de « Schroedinger » $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$

Supposons dans un premier temps que le Hamiltonien ne dépende pas explicitement du temps

Partie A : Hamiltonien indépendant du temps

Solution générique (pour un H indép du temps)

On suppose l'existence d'un ensemble d'états dits « propres » ou « stationnaires » $\{|n\rangle\}$ (orthogonaux entre eux) tels que

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

Énergie de l'état $|n\rangle$

Sous l'action de l'équation de Schroedinger, tout état stationnaire va acquérir une phase au cours du temps :

$$|n(t=0)\rangle = |n\rangle \rightarrow |n(t)\rangle = e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle$$

En effet

$$i\hbar \frac{d}{dt} |n(t)\rangle = i\hbar \times \left(-i\frac{E_n}{\hbar}\right) \times e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle = E_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle = E_n |n(t)\rangle = \hat{H}|n(t)\rangle$$

Ce résultat se généralise aisément à toute CL d'états propres :

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_{n=1}^N a_n |n\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^N a_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle$$

A noter que la probabilité d'observer un état $|m\rangle$ donné ne change pas au cours du temps (exo simple)...

Solution générique (pour un H indép du temps)

En effet on sait que $p_m(t) = |\langle m|\psi(t)\rangle|^2$ (postulats de la méca Q)

Et

$$\begin{aligned}\langle m|\psi(t)\rangle &= \langle m|\left(\sum_{n=1}^N a_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|n\rangle\right) \\ &= \sum_{n=1}^N a_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{m,n}} \quad \text{(orthogonalité)} \\ &= a_m e^{-i\frac{E_m t}{\hbar}}\end{aligned}$$

➔ $p_m(t) = |a_m e^{-i\frac{E_m t}{\hbar}}|^2 = |a_m|^2$

Solution générique (pour un H indép du temps)

... par contre, l'état quantique développe des interférences qui sont « visibles » dès que l'on considère des observables O telles que $\langle m \neq n | \hat{O} | n \rangle \neq 0$:

$$\begin{aligned}
 \langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle &= \sum_n \sum_{n'} a_n^* a_{n'} e^{i \frac{(E_n - E_{n'})t}{\hbar}} \langle n | \hat{O} | n' \rangle \\
 &= \sum_n |a_n|^2 \langle n | \hat{O} | n \rangle + \sum_n \sum_{n' \neq n} a_n^* a_{n'} e^{i \frac{(E_n - E_{n'})t}{\hbar}} \langle n | \hat{O} | n' \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \left(\sum_n \sum_{n' \neq n} a_n^* a_{n'} e^{i \frac{(E_n - E_{n'})t}{\hbar}} \langle n | \hat{O} | n' \rangle + \sum_n \sum_{n' \neq n} a_{n'}^* a_n e^{-i \frac{(E_n - E_{n'})t}{\hbar}} \langle n' | \hat{O} | n \rangle \right) \\
 &\hspace{15em} n \leftrightarrow n' \text{ pour la moitié de la somme}
 \end{aligned}$$

Hermiticité : $\langle n' | \hat{O} | n \rangle = \langle n | \hat{O}^\dagger | n' \rangle^* = \langle n | \hat{O} | n' \rangle^*$

$$= \frac{1}{2} \left(\sum_n \sum_{n' \neq n} a_n^* a_{n'} e^{i \frac{(E_n - E_{n'})t}{\hbar}} \langle n | \hat{O} | n' \rangle + \text{c.c.} \right)$$

$$\langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle = \sum_n |a_n|^2 \langle n | \hat{O} | n \rangle + \sum_n \sum_{n' \neq n} \Re \left(a_n^* a_{n'} e^{i \frac{(E_n - E_{n'})t}{\hbar}} \langle n | \hat{O} | n' \rangle \right)$$

Solution générique (pour un H indép du temps)

$$\langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle = \sum_n |a_n|^2 \langle n | \hat{O} | n \rangle + \sum_n \sum_{n' \neq n} \Re \left(a_n^* a_{n'} e^{i \frac{(E_n - E_{n'})t}{\hbar}} \langle n | \hat{O} | n' \rangle \right)$$

Phénomène de battement, sur une fenêtre temporelle $\Delta t \approx \frac{\hbar}{E_n - E_{n'}}$

Si système à 2 niveaux (ou juste 2 niveaux peuplés), alors 1 fréquence de battement.

Si système à N niveaux, alors $\frac{N \times (N-1)}{2}$ fréquences de battement (peut vite devenir compliqué)

Cas particulier : oscillateur harmonique

Résultat important : les états propres d'un hamiltonien forment une base de l'espace de Hilbert \mathcal{E} sur lequel il est défini.

⇒ Tout état $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ admet, pour évolution temporelle : $|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle$
où $a_n = \langle n | \psi \rangle$

On remarque en particulier, pour $t=0$: $|\psi\rangle = \underbrace{\sum_n |n\rangle \langle n|}_{\mathbb{I}} |\psi\rangle$

Solution générique (pour un H indép du temps)

Remarques:

- Ce n'est pas parce qu'on possède une solution explicite qu'elle est nécessairement simple[♠], en particulier lorsque 1) l'espace de Hilbert est de dimension infinie et 2) lorsque les niveaux d'énergie forment un continuum.
- Dans de nombreux cas, on ne peut effectuer la somme infinie et on doit la « tronquer ». On considère pour ce faire un niveau

$$N | E_N \gg E \text{ typique}$$

- On a fait exprès de ne pas préciser la nature de la base et de travailler avec des kets génériques.

♠ : Il est en général plus difficile de sommer des fonctions oscillantes

Exercices qui illustrent bien ce concept de superposition:

- Paquet libre
- Paquet gaussien dans un puits harmonique
- Oscillation des neutrino

Systeme à 2 niveaux + perturbation

On considère un système à 2 niveaux, correspondant par exemple à un spin plongé dans champ magnétique :

$$\begin{array}{c} \text{-----} E_2 \\ \\ \\ \\ \text{-----} E_1 \end{array} \Leftrightarrow H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad \text{dans la base } \{|1\rangle, |2\rangle\}$$

Appliquons une perturbation λW qui va coupler les deux états :

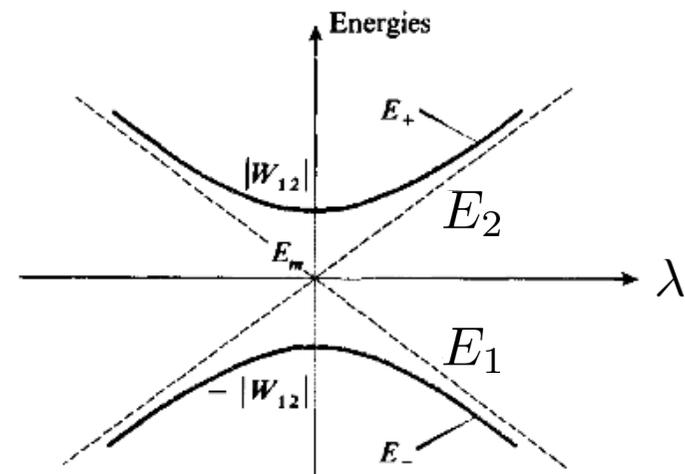
$$\Rightarrow \hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & \lambda W_{12} \\ \lambda W_{12}^* & E_2 \end{pmatrix} \quad \text{N.B.: On peut aussi considérer des éléments } W_{11} \text{ et } W_{22}, \text{ mais cela n'a pas une grande valeur ajoutée}$$

On recherche les nouvelles énergies propres en résolvant le système

$$\det(\hat{H} - E\mathbb{I}) = 0 \Leftrightarrow \det \begin{pmatrix} E_1 - E & \lambda W_{12} \\ \lambda W_{12}^* & E_2 - E \end{pmatrix} = 0$$

$$\text{Soit } (E - E_1)(E - E_2) - \lambda^2 |W|^2 = 0$$

$$\Rightarrow E_{\pm} = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_1 - E_2)^2}{4} + \lambda^2 |W_{12}|^2}$$



Système à 2 niveaux + perturbation

Les états propres associés sont

$$|\psi_+\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |1\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |2\rangle$$

$$|\psi_-\rangle = -\sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |1\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |2\rangle$$

avec

$$\tan \theta = \frac{2|W_{12}|}{E_1 - E_2}, \quad \varphi = \arg(W_{12})$$

Soit une transformation unitaire

$$\begin{pmatrix} |\psi_+\rangle \\ |\psi_-\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} & \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \\ -\sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} & \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix}$$

Avec la relation inverse :

$$\begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} & -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} & \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_+\rangle \\ |\psi_-\rangle \end{pmatrix}$$

Evolution temporelle:

On s'intéresse à l'évolution de l'état $|1\rangle$ en supposant que la perturbation W est appliquée en $t=0$. On veut prédire l'évolution des populations sur les niveaux $|1\rangle$ et $|2\rangle$

Systeme à 2 niveaux + perturbation

Evolution temporelle:

État initial : $|\psi(0)\rangle = |1\rangle = e^{-i\varphi/2} \left[\cos \frac{\theta}{2} |\psi_+\rangle - \sin \frac{\theta}{2} |\psi_-\rangle \right]$

Chaque état propre du hamiltonien complet évolue avec sa fréquence propre :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\varphi/2} e^{-i\frac{E_1+E_2}{2\hbar}t} \left[\cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\sqrt{\Delta E^2 + |W_{12}|^2}t}{\hbar}} |\psi_+\rangle - \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\sqrt{\Delta E^2 + |W_{12}|^2}t}{\hbar}} |\psi_-\rangle \right]$$

On en déduit alors l'amplitude suivant $|2\rangle$ au temps t :

$$\Delta E = \frac{E_2 - E_1}{2}$$

$$\begin{aligned} \langle 2|\psi(t)\rangle &= e^{i\Phi} \left[\cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\sqrt{\Delta E^2 + |W_{12}|^2}t}{\hbar}} \langle 2|\psi_+\rangle - \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\sqrt{\Delta E^2 + |W_{12}|^2}t}{\hbar}} \langle 2|\psi_-\rangle \right] \\ &= e^{i\Phi'} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \left[e^{-i\frac{\sqrt{\Delta E^2 + |W_{12}|^2}t}{\hbar}} - e^{i\frac{\sqrt{\Delta E^2 + |W_{12}|^2}t}{\hbar}} \right] \\ &= -ie^{i\Phi'} \sin \theta \sin \frac{\sqrt{\Delta E^2 + |W_{12}|^2}t}{\hbar} \end{aligned}$$

De même que la probabilité d'observer l'état selon $|2\rangle$:

$$\mathcal{P}_2(t) = \sin^2 \theta \sin^2 \frac{\sqrt{\Delta E^2 + |W_{12}|^2}t}{\hbar} = \frac{|W_{12}|^2}{\Delta E^2 + |W_{12}|^2} \sin^2 \frac{\sqrt{\Delta E^2 + |W_{12}|^2}t}{\hbar}$$

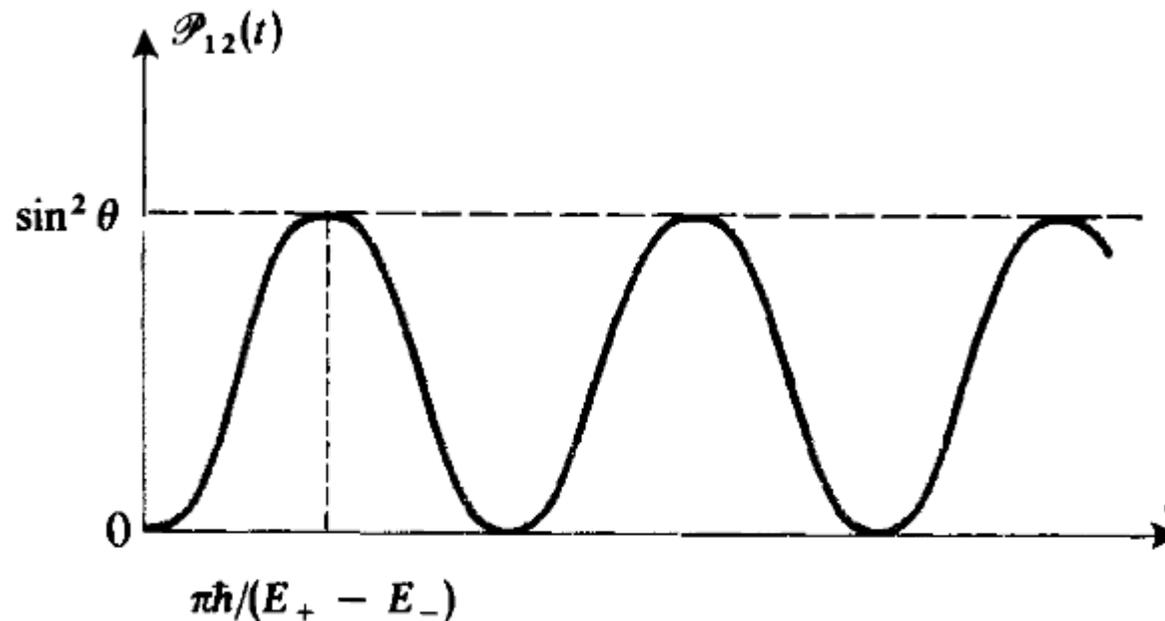
Systeme à 2 niveaux + perturbation

Evolution temporelle: $\mathcal{P}_2(t) = \frac{|W_{12}|^2}{\Delta E^2 + |W_{12}|^2} \sin^2 \frac{\sqrt{\Delta E^2 + |W_{12}|^2} t}{\hbar}$

= 2 * Différence d'énergie entre les deux niveaux perturbés

Remarques :

- La \mathcal{P}_2 reste « limitée » par l'ampleur de la perturbation $W \Rightarrow$ **limitation de la capacité d'induire une transition entre 2 états** (2 valeurs du Qbit, par exemple)
- Oscillations dites « de Rabi »



Fonction de Green (opérateur d'évolution)

Vu la linéarité du problème, on peut exprimer plus synthétiquement l'évolution d'un état quantique $|\psi(t=0)\rangle$ sous la forme

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

En écrivant l'équation de Schroedinger, on déduit

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t=0) |\psi(0)\rangle = \hat{H} \hat{U}(t, t=0) |\psi(0)\rangle, \quad \forall |\psi(0)\rangle$$

➡ $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t=0) = \hat{H} \hat{U}(t, t=0)$ Équation « opératorielle »

Solution :

$$\hat{U}(t, t=0) = c_0 \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)$$

Preuve : Il suffit d'écrire la série terme à terme et de dériver.

De plus, on doit avoir $\hat{U}(0, 0) = \mathbb{I} \Rightarrow c_0 = 1$ ➡ $\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right)$

Propriétés essentielles :

- L'opérateur d'évolution U est unitaire: $U^\dagger = U^{-1}$ Il préserve donc la norme
- On a la propriété de factorisation $\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_1) \hat{U}(t_1, t_0)$

Fonction de Green (opérateur d'évolution)

N.B.: Pour le moment, nous sommes restés assez vagues quant à la formulation explicite de l'opérateur d'évolution...

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

... mais on peut se placer dans la base qui nous convient (en général, celle qui entraîne le plus de simplifications).

$$\begin{aligned} \text{Ainsi : } \underbrace{\langle x|\psi(t)\rangle}_{\psi(x,t)} &= \langle x|\hat{U}(t, t=0) \times \underbrace{\mathbb{I}}_{=\int dx' |x'\rangle\langle x'|} |\psi(0)\rangle \\ &= \int dx' \langle x|\hat{U}(t, t=0)|x'\rangle \times \langle x'|\psi(0)\rangle \\ &= \int dx' \underbrace{U(x, t; x', 0)} \psi(x', 0) \end{aligned}$$

En général $\neq 0$ pour $x \neq x'$ (fonction dite « non locale » compliquée à calculer)

$$\text{Mais aussi : } \underbrace{\psi(p, t)}_{\text{Espace de Fourier}} = \int dp' U(p, t; p', 0) \psi(p', 0)$$

Espace de Fourier

Fonction de Green (opérateur d'évolution)

Cas particulier d'un Hamiltonien sans potentiel (mouvement libre)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

On écrit alors : $\langle p | \hat{H} | p' \rangle = \frac{p^2}{2m} \delta(p - p')$

↳ $\langle p | \hat{H}^n | p' \rangle = \left(\frac{p^2}{2m} \right)^n \delta(p - p')$

↳ $\langle p | \exp \left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar} \right) | p' \rangle = \exp \left(-i \underbrace{\frac{p^2}{2m\hbar}}_{\text{Pulsation } \omega(p)} t \right) \delta(p - p')$

Fonction locale en p

Et donc simplement : $\psi(p, t) = \int dp' U(p, t; p', 0) \psi(p', 0)$

$$= \exp \left(-i \frac{p^2}{2m\hbar} t \right) \psi(p, 0)$$

Représentation de Heisenberg

Evolution de la valeur moyenne d'une observable:

$$\begin{aligned}\text{On a: } E_O(t) &:= \langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{U}^\dagger(t, 0) | \hat{O} | \hat{U}(t, 0) | \psi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{O} \hat{U}(t, 0) | \psi(0) \rangle\end{aligned}$$

Dans l'interprétation de Heisenberg, ce ne sont pas les états qui dépendent du temps mais bien les opérateurs ! On définit ainsi :

$$\begin{aligned}\hat{O}_H(t) &:= \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{O}_{(S)} \hat{U}(t, 0) = \hat{U}^{-1}(t, 0) \hat{O}_{(S)} \hat{U}(t, 0) \\ &= e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{O}_{(S)} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\end{aligned}$$

On établit l'équation d'évolution

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \hat{O}_H(t) &= \frac{d}{dt} \left(e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \right) \hat{O} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} + e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{O} \frac{d}{dt} \left(e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \right) \\ &= \frac{i\hat{H}}{\hbar} e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{O} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} - e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{O} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \frac{i\hat{H}}{\hbar} \\ &= \frac{i\hat{H}}{\hbar} \hat{O}_H(t) - \hat{O}_H(t) \frac{i\hat{H}}{\hbar} = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \hat{O}_H(t) \right]\end{aligned}$$

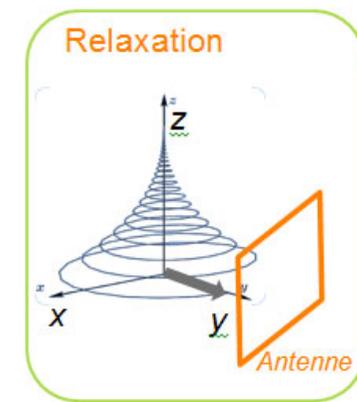
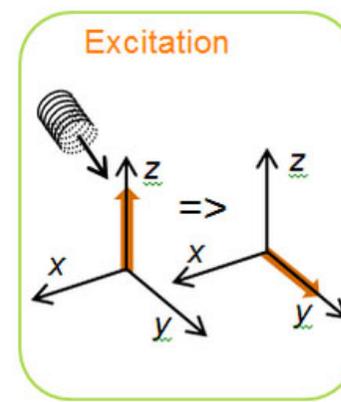
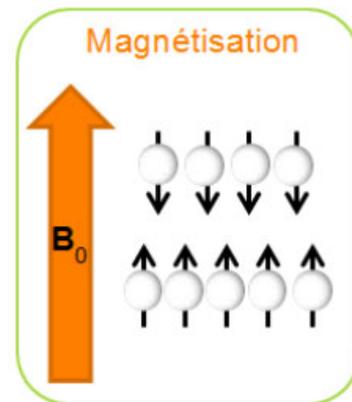
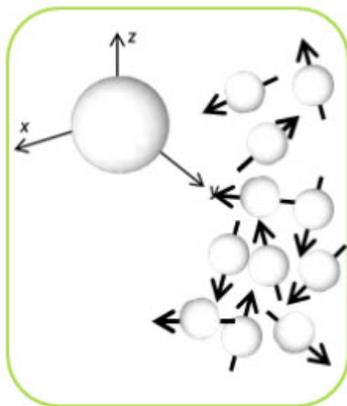
Équation de Heisenberg

Problème : Autour de l'IRM (RMN)

- Soit un proton de moment dipolaire magnétique $\gamma\vec{S}$ plongé dans un champ magnétique de 1T orienté selon Oz. Exprimez la différence d'énergie entre les deux niveaux en MHz ainsi qu'en eV

Soit une population de spin.

- Au temps $t=0$, tous les spins sont alignés selon la direction OZ (état $|+\rangle$). En vous plaçant dans la représentation de Heisenberg, décrivez l'évolution de l'opérateur spin, puis du spin moyen.
- En un temps ultérieur, un champ magnétique additionnel B_x est appliqué selon OX. Décrivez l'évolution de l'opérateur spin, de même que du spin moyen. Quel doit être le temps d'application de ce champ pour engendrer, en fin de pulse, une valeur moyenne nulle du spin selon OZ. Ceci est-il toujours possible ?
- Décrivez ensuite l'évolution des opérateurs S_x , S_y et S_z . Comment qualifiez-vous un tel mécanisme ?



Problème : Autour de l'IRM (RMN)

<http://www.cic-it-nancy.fr/fr/quest-ce-que-lirm/>

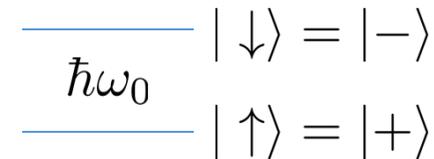
1) le rapport gyromagnétique est le rapport entre le moment magnétique et le moment cinétique d'une particule.

Noyaux	γ ($10^6 \text{ rad}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{T}^{-1}$)	$\gamma/2\pi$ (MHz/T)
^1H	267,513	42,576

$$H_0 = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma \hat{S}_z B = -\hbar \underbrace{\gamma B_0}_{=\omega_0 \text{ fréquence de Larmor}} \frac{\sigma_z}{2} \quad \text{où} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

➔ $\omega_0 = 267,513 \text{ MHz}$

$\hbar \approx 6,582\,119\,570 \times 10^{-16} \text{ eV s} \Rightarrow E_- - E_+ = 0,176 \text{ } \mu\text{eV}$



2) On a l'équation de Heisenberg : $\frac{d\hat{O}_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}_H(t)]$

$$[\hat{H}_0, \hat{S}_z] = 0 \Rightarrow \hat{S}_z = \text{cst}$$

En conséquence, le spin moyen n'évolue pas

Problème : Autour de l'IRM (RMN)

3) On considère maintenant que le champ magnétique est orienté selon $\vec{B} = B_0\vec{e}_z + B_x\vec{e}_x$

$$\frac{d\hat{O}_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}_H(t)]$$

$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma \frac{\hbar}{2} (\hat{\sigma}_z B + \hat{\sigma}_x B_x) \quad \text{où} \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

On a les équations d'évolution

$$\frac{d\hat{S}_z}{dt} = \frac{i}{\hbar} [-\gamma \frac{\hbar}{2} (\sigma_z B + \sigma_x B_x), \hat{S}_z] = -i\gamma B_x \frac{\hbar}{4} \underbrace{[\sigma_x, \sigma_z]}_{2i\epsilon_{132}\sigma_y} = -\gamma B_x \underbrace{\frac{\hbar}{2}\sigma_y}_{\hat{S}_y}$$

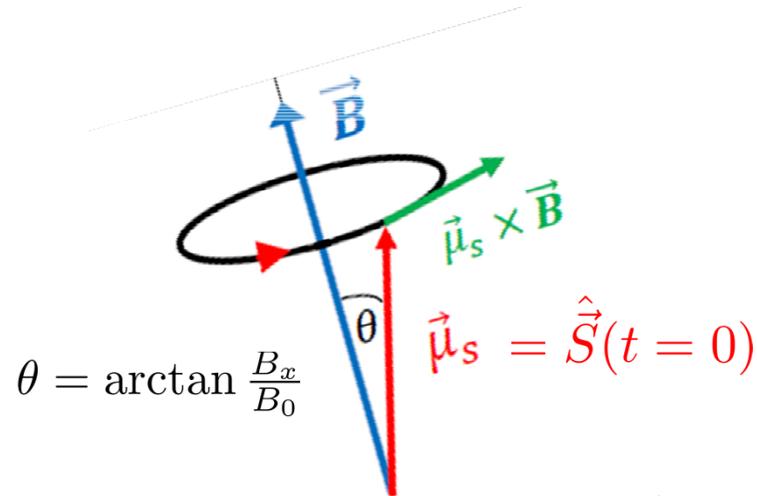
$$\begin{aligned} \frac{d\hat{S}_y}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [-\gamma \frac{\hbar}{2} (\sigma_z B_0 + \sigma_x B_x), \hat{S}_y] = -i\gamma \frac{\hbar}{4} (B_x [\sigma_x, \sigma_y] + B_0 [\sigma_z, \sigma_y]) \\ &= \dots = \gamma (B_x \hat{S}_z - B_0 \hat{S}_x) \end{aligned}$$

$$\frac{d\hat{S}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} [-\gamma \frac{\hbar}{2} (\sigma_z B_0 + \sigma_x B_x), \hat{S}_x] = -i\gamma \frac{\hbar}{4} B_0 [\sigma_z, \sigma_x] = \dots = \gamma B_0 \hat{S}_y$$

Que l'on résume sous la forme

$$\frac{d\vec{\hat{S}}}{dt} = -\gamma \vec{B} \wedge \vec{\hat{S}} \quad \text{Dont la solution est un mouvement de précession autour de } \vec{B}, \text{ à la fréquence angulaire } \omega = \gamma \|\vec{B}\|$$

Problème : Autour de l'IRM (RMN)

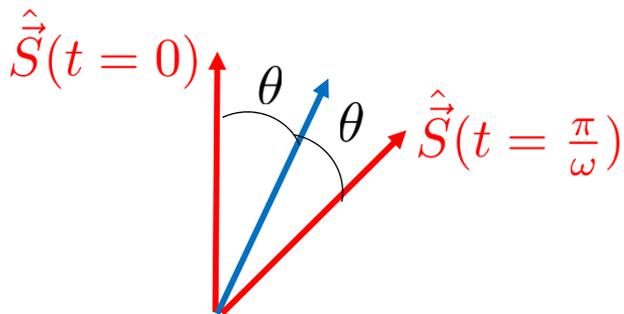


$$\frac{d\hat{S}}{dt} = -\gamma \vec{B} \wedge \hat{S}$$

Pour résoudre l'évolution, on décompose le spin selon

- une composante dans la direction de B qui est invariante
- 2 composantes dans le plan orthogonal à B, engendré par $\{\vec{e}_\perp = \cos \theta \vec{e}_x - \sin \theta \vec{e}_z, \vec{e}_y\}$

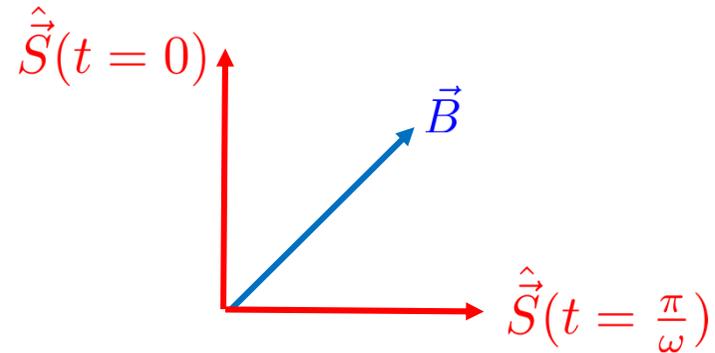
Situation au bout de π/ω :



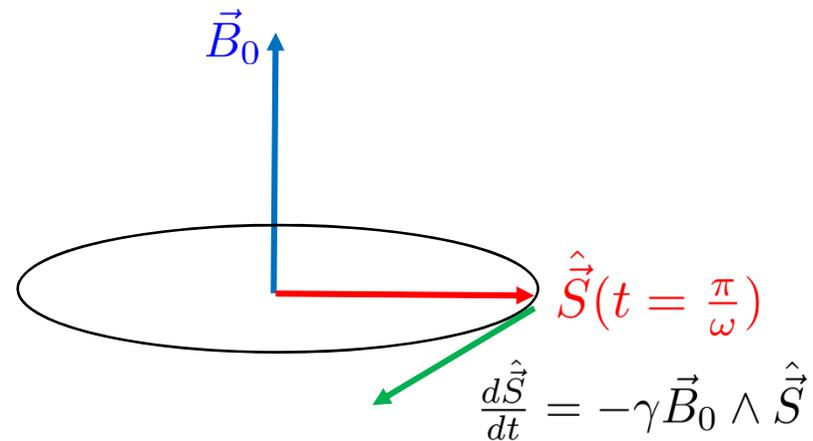
Le spin conserve une composante selon Oz si l'angle θ ne vaut pas au moins 45° , ce qui demande que B_x soit au moins aussi grand que B_0 ... pas simple en pratique, augmente les coûts de construction

Problème : Autour de l'IRM (RMN)

4) En supposant que $B_x=B_0$, le spin en fin de pulse est amené // Ox .



La valeur moyenne de S_z est alors nulle $\langle + | S_x | + \rangle = 0$. On a ensuite une nouvelle situation initiale :



Et la précession va se poursuivre dans le plan Oxy ...

Partie B : Hamiltonien dépendant du temps

Hamiltonien dépendant du temps

Positionnement du problème:

On considère – dans la représentation usuelle de schroedinger – :

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}(t)$$

On écrit le hamiltonien dépendant du temps de cette manière afin de faire référence à un problème où le hamiltonien stationnaire est « perturbé » par un hamiltonien d'interaction H_{int} résultant le plus souvent d'une interaction avec un autre système (comme par exemple une onde électromagnétique ou un bain thermique).

Dans un premier temps, on peut s'interroger sur la possibilité de calculer explicitement la solution de l'équation de Schroedinger. On essaie pour ce faire de généraliser l'équation gouvernant l'opérateur d'évolution :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0)$$

Remarquons que si le hamiltonien était une fonction usuelle (et non pas un opérateur), la solution explicite de cette équation est triviale :

$$\hat{U}(t, t_0) = \underbrace{\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1)\right)}_{\text{Simple facteur de phase}} \hat{\mathbb{I}}$$

Simple facteur de phase

Quoiqu'incorrect, ce résultat va nous guider sur la forme de la solution...

Hamiltonien dépendant du temps

Equation d'évolution: $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0)$

En intégrant par rapport au temps, on obtient une solution *implicite*...

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{\mathbb{I}} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \hat{U}(t_1, t_0)$$

... dont on ne peut faire grand-chose. On peut toutefois itérer cette solution avec elle-même et obtenir :

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{\mathbb{I}} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \left(\hat{\mathbb{I}} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_2) \hat{U}(t_2, t_0) \right)$$

En procédant de la sorte, on obtient la série

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) = & \hat{\mathbb{I}} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \\ & + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^3 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \hat{H}(t_3) + \dots \end{aligned}$$

On peut réécrire le 3^e terme sous une forme plus compacte :

$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 T \left(\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \right)$$

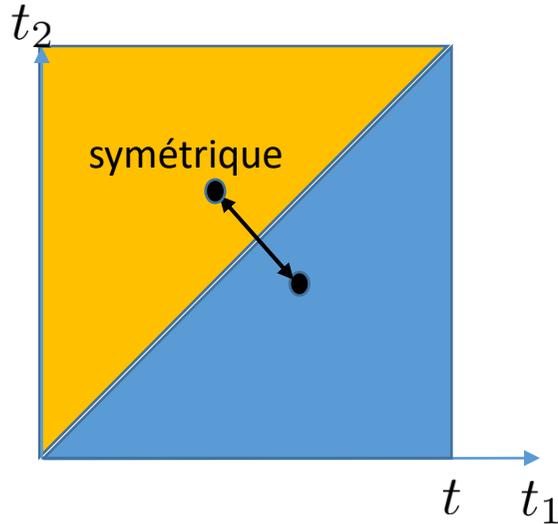
Produit ordonné en temps

où

$$T \left(\hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \right) := \begin{cases} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) & \text{si } t_2 < t_1 \\ \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) & \text{si } t_1 < t_2 \end{cases}$$

Hamiltonien dépendant du temps

Equation d'évolution: $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0)$



$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 T \left(\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \right)$$

$$T \left(\hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \right) := \begin{cases} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) & \text{si } t_2 < t_1 \\ \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) & \text{si } t_1 < t_2 \end{cases}$$

On généralise la démarche :

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) &= \hat{\mathbb{I}} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) + \frac{1}{2} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 T \left(\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \right) \\ &\quad + \frac{1}{3!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^3 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^t dt_3 T \left(\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \hat{H}(t_3) \right) + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int \prod_{o=1}^n dt_o T \left(\hat{H}(t_1) \dots \hat{H}(t_n) \right) = T \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \right) \end{aligned}$$

Résultat assez similaire au cas classique, à la différence du produit ordonné en temps

Hamiltonien dépendant du temps

Opérateur d'évolution: $\hat{U}(t, 0) = T \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 \hat{H}(t_1) \right)$

Ce résultat est fort joli symboliquement, mais pas d'une grande utilité opérationnelle, à moins que l'on soit capable de calculer explicitement des quantités telles que

$$T \left(\hat{H}(t_1) \dots \hat{H}(t_n) \right)$$

Et les réduire à des expressions plus simples. Imaginons à titre d'exemple un oscillateur Harmonique plongé dans un potentiel arbitraire dépendant du temps

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_{\text{osc}} + V(\hat{r}, t)$$

On a

$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 T \left(\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \right) - \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) \times \int_{t_0}^t dt_2 H(t_2) = \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 [H(t_1), H(t_2)]$$

tandis que $[\hat{H}(t_1), H(t_2)] = [\hat{H}_{\text{osc}}, V(\hat{r}, t_2)] - [\hat{H}_{\text{osc}}, V(\hat{r}, t_1)]$

Au sein de H_{osc} , seule la contribution cinétique ne commute pas avec $V(r)$:

$$[\hat{p}^2, V(r)] = \hat{p}[\hat{p}, V(r)] + [\hat{p}, V(r)]\hat{p} = \frac{\hbar}{i} (\partial_r V(r, t)\hat{p} + \hat{p}\partial_r V(r, t))$$

$$\begin{aligned} \hookrightarrow [\hat{H}(t_1), H(t_2)] &= \frac{\hbar}{2m i} [-(F(r, t_2)\hat{p} + \hat{p}F(r, t_2)) + (F(r, t_1)\hat{p} + \hat{p}F(r, t_1))] \\ &= \frac{\hbar}{2m i} [(F(r, t_1) - F(r, t_2))\hat{p} + \hat{p}(F(r, t_1) - F(r, t_2))] \end{aligned}$$

Hamiltonien dépendant du temps

Opérateur d'évolution (réduction):

$$\text{On a par ailleurs } \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 F(r, t_1) = \int_0^t dt_1 t_1 F(r, t_1)$$

$$\text{et } \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 F(r, t_2) = \int_0^t dt_2 F(r, t_2) \int_{t_2}^t dt_1 = \int_0^t dt_2 F(r, t_2)(t-t_2) = \int_0^t dt_1 F(r, t_1)(t-t_1)$$

De sorte que

$$\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 (F(r, t_1) - F(r, t_2)) = \int_0^t dt_1 (t - 2t_1) F(r, t_1)$$

$$\Rightarrow \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 [H(t_1), H(t_2)] = \hat{p}A(\hat{r}, t) + A(\hat{r}, t)\hat{p} \quad \text{avec} \quad A(\hat{r}, t) = \frac{\hbar}{m i} \int_0^t dt_1 \left(\frac{t}{2} - t_1\right) F(\hat{r}, t_1)$$

Et donc

$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 T \left(\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \right) = \int_0^t dt_1 \hat{H}(t_1) \times \int_0^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_2) + \{ \hat{p}, A(\hat{r}, t) \}$$

Anticommutateur

Apparition d'une nouvelle structure, impliquant une intégrale temporelle simple.

Question: peut-on poursuivre la méthode ?

Hamiltonien dépendant du temps

Opérateur d'évolution (réduction):

$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^t dt_3 T \left(\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \hat{H}(t_3) \right) - \int_0^t dt_1 H(t_1) \times \int_0^t dt_2 H(t_2) \times \int_0^t dt_3 H(t_3) = ?$$

Plusieurs contributions :

$t_1 > t_2 > t_3$	0
$t_1 > t_3 > t_2$	$\int_0^t dt_1 H(t_1) \{ \hat{p}, \hat{A}(r, t_1) \}$
$t_2 > t_1 > t_3$	$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 [\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_2)] \hat{H}(t_3)$
$t_3 > t_1 > t_2$	$H(t_1)H(t_2)H(t_3) = H(t_3)H(t_1)H(t_2) - [H(t_3), H(t_1)H(t_2)]$ $= H(t_3)H(t_1)H(t_2) - [H(t_3), H(t_1)]H(t_2) - H(t_1)[H(t_3), H(t_2)]$
$t_3 > t_2 > t_1$	$H(t_1)H(t_2)H(t_3) = H(t_3)H(t_2)H(t_1) + [H(t_1), H(t_2)]H(t_3) + H(t_2)[H(t_1), H(t_3)]$ $+ [H(t_2), H(t_3)]H(t_1)$

Etc. Pas une structure qui apparaît naturellement.

Théorie des perturbations dépendant du temps

Motivation:

Le problème général étant très complexe à résoudre en général, on va se limiter ici à traiter les cas où le Hamiltonien est dominé par sa partie indépendante du temps. On écrit alors

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}(t) \quad \text{avec} \quad \hat{H}_{\text{int}}(t) = \lambda \hat{W}(t) \quad \text{où} \quad \lambda \ll 1$$

Ceci nous permet de nous souvenir que le Hamiltonien d'interaction est très petit devant H_0 . La stratégie consiste alors à chercher des solutions qui s'écrivent sous la forme de séries de λ .

Pour ce faire, on développe naturellement la solution sur la base des états propres de H_0 :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{+\infty} a_n(t) |n\rangle$$

Et on se propose d'établir un ensemble d'équations couplées pour les coefficients a_n . Avant de se lancer avec fougue, on se souvient toutefois qu'en l'absence de H_{int} , on a

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{+\infty} b_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle \quad \text{avec} \quad b_n = \langle n | \psi(t=0) \rangle$$

On a donc une phase « rapide » qui provient de H_0 , de même qu'un comportement plus lent résultant du Hamiltonien d'interaction. On va donc écrire les coefficients $a_n(t)$ comme

$$a_n(t) = b_n(t) \times e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}$$


Evolution lente

Théorie des perturbations dépendant du temps

Evolution des b_n :

On écrit alors l'équation de Schroedinger (membre de gauche) :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= i\hbar \sum_k \left(\dot{b}_k(t) e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} - i\frac{E_k t}{\hbar} b_k(t) \right) |k\rangle \\ &= \sum_k \left(i\hbar \dot{b}_k(t) + E_k b_k(t) \right) e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} |k\rangle \end{aligned}$$

Tandis que le membre de droite s'écrit :

$$\hat{H}(t) |\psi(t)\rangle = \sum_k b_k(t) e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} \left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{W}(t) \right) |k\rangle = \sum_k b_k(t) e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} \left(E_k + \lambda \hat{W}(t) \right) |k\rangle$$

On projette alors sur l'état $|n\rangle$. Le membre de gauche conduit à

$$\sum_k \left(i\hbar \dot{b}_k(t) + E_k b_k(t) \right) e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} \underbrace{\langle n|k\rangle}_{\delta_{k,n}} = \left(i\hbar \dot{b}_n(t) + E_n b_n(t) \right) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$$

Tandis que le membre de droite conduit à

$$\langle n|\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle = \dots = b_n(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} E_n + \lambda \sum_k b_k(t) e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} \langle n|\hat{W}(t)|k\rangle$$

Soit au final
$$\dot{b}_n(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_k e^{i\frac{(E_n - E_k)t}{\hbar}} \langle n|\lambda \hat{W}(t)|k\rangle b_k(t)$$

Théorie des perturbations dépendant du temps

Evolution des b_n :
$$\dot{b}_n(t) = -\frac{i\lambda}{\hbar} \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \langle n | \hat{W}(t) | k \rangle b_k(t), \quad \forall n \quad \text{où} \quad \omega_{nk} := \frac{E_n - E_k}{\hbar}$$

On obtient alors la solution implicite :

$$b_n(t) = b_n(0) - \frac{i\lambda}{\hbar} \int_0^t dt_1 \sum_k e^{i\omega_{nk}t_1} \langle n | \hat{W}(t_1) | k \rangle b_k(t_1), \quad \forall n$$

que l'on peut itérer, ce qui conduit à

$$b_n(t) = b_n(0) - \frac{i\lambda}{\hbar} \sum_k \int_0^t dt_1 e^{i\omega_{nk}t_1} \langle n | \hat{W}(t_1) | k \rangle b_k(0) + \left(-\frac{i\lambda}{\hbar} \right)^2 \sum_{k,m} \int_0^t dt_1 e^{i\omega_{nk}t_1} \langle n | \hat{W}(t_1) | k \rangle \int_0^{t_1} dt_2 e^{i\omega_{km}t_2} \langle k | \hat{W}(t_2) | m \rangle b_m(t_0) + \dots$$

Soit la série en λ recherchée.

On va maintenant étudier quelques grands « classiques ». On notera toutefois deux grands cas de figure rencontrés en pratique:

- Soit l'ordre 1 permet de conclure et on se limite alors généralement à ce terme
- Soit l'ordre 1 est insuffisant pour conclure et il faut alors recourir à certaines approximations supplémentaires

Théorie des perturbations dépendant du temps

$$b_n(t) \approx b_n(0) - \frac{i\lambda}{\hbar} \int_0^t dt_1 \sum_k e^{i\omega_{nk}t_1} \langle n | \hat{W}(t_1) | k \rangle b_k(0).$$

Cas d'une perturbation harmonique: $\langle n | \lambda \hat{W}(t) | k \rangle = \cos(\omega t) \times \underbrace{\langle n | \lambda \hat{W} | k \rangle}_{W_{nk}}$

Comme le problème est linéaire, on peut partir d'une répartition simple des états initiaux:

$$b_n(0) = \delta_{n,i}$$

On s'intéresse alors, au premier ordre, à la population d'un niveau dit « final » $f \neq i$. (on pourra étudier l'évolution de la population du niveau i dans un second temps):

$$\begin{aligned} b_f(t) &\approx -\frac{iW_{fi}}{\hbar} \int_0^t dt_1 e^{i\omega_{fi}t_1} \cos(\omega t_1) & \omega_{fi} &:= \frac{E_f - E_i}{\hbar} \\ &\approx -\frac{iW_{fi}}{2\hbar} \int_0^t dt_1 \left(e^{i(\omega_{fi}+\omega)t_1} + e^{i(\omega_{fi}-\omega)t_1} \right) \\ &\approx -\frac{W_{fi}}{2\hbar} \left(\frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)t} - 1}{\omega_{fi} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} \right) \end{aligned}$$

Evolution aux **petits temps** : $b_f(t) \approx -\frac{iW_{fi}}{\hbar}t$ Transition douce, indépendante de ω , proportionnelle à l'amplitude de la perturbation.

Théorie des perturbations dépendant du temps

Cas d'une perturbation harmonique:

$$\langle n | \lambda \hat{W}(t) | k \rangle = \cos(\omega t) \times \underbrace{\langle n | \lambda \hat{W} | k \rangle}_{W_{nk}}$$

$$b_f(t) \approx -\frac{W_{fi}}{2\hbar} \left(\frac{e^{i(\omega_{fi} + \omega)t} - 1}{\omega_{fi} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} \right)$$

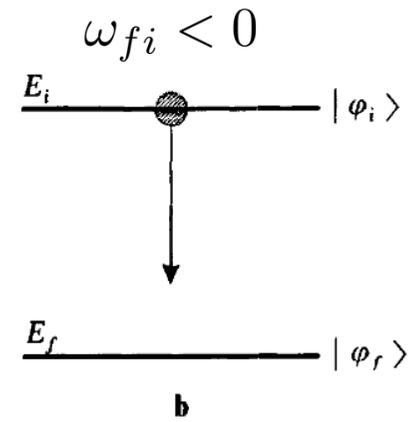
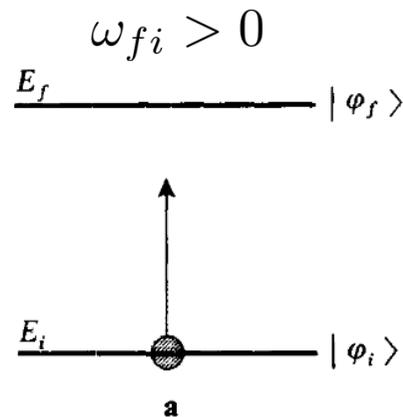
Evolution aux **temps intermédiaires** (plusieurs cycles) : On peut distinguer deux cas:

- Si ω n'est pas proche de $|\omega_{fi}|$, aucun des dénominateurs n'est grand et on a

$$0 \lesssim |b_f(t)| \lesssim \frac{|W_{fi}|}{2\hbar |\omega_{if}| - \omega} \quad \text{avec un comportement oscillant entre ces deux bornes}$$

- Si ω est proche de $|\omega_{fi}|$, l'un des deux termes va dominer sur l'autre et on va observer un comportement résonant

Transition
entre 2 états
discrets :



Terme dominant :

$$\frac{e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega}$$

$$\frac{e^{i(\omega_{fi} + \omega)t} - 1}{\omega_{fi} + \omega}$$

Théorie des perturbations dépendant du temps

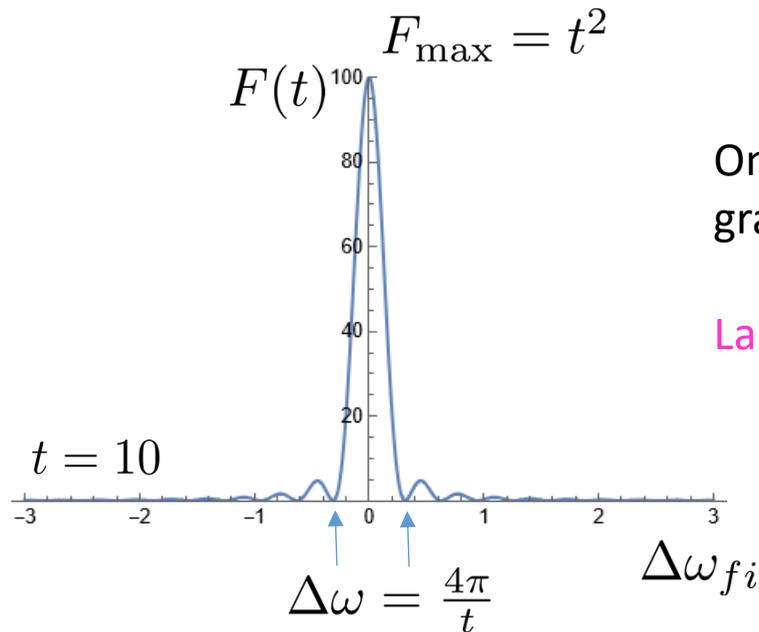
Exemple d'une transition d'un niveau $i \rightarrow f$ | $E_f > E_i$: Il s'agit du cas **a**.

$$b_f(t) \approx -\frac{W_{fi}}{2\hbar} \frac{e^{i(|\omega_{fi}|-\omega)t} - 1}{|\omega_{fi}| - \omega} \approx -\frac{W_{fi}}{2\hbar} e^{i\frac{|\omega_{fi}|-\omega}{2}t} \times \frac{e^{i\frac{\omega-|\omega_{fi}|}{2}t} - e^{-i\frac{\omega-|\omega_{fi}|}{2}t}}{\omega - |\omega_{fi}|}$$

$$\hookrightarrow |b_f(t)|^2 \approx \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} \underbrace{\left(\frac{\sin \Delta\omega_{fi}t}{\Delta\omega_{fi}} \right)^2}_{F(t, \Delta\omega_{fi})} \quad \text{avec} \quad \Delta\omega_{fi} := \frac{\omega - |\omega_{fi}|}{2}$$

On obtient un résultat similaire pour le cas **b**.

On analyse la physique soit en considérant une valeur fixe de t :



On atteint une valeur maximale d'autant plus grande que ω est proche de $|\omega_{fi}|$.

Largeur en fréquence \times temps ≈ 1 (Heisenberg)

Théorie des perturbations dépendant du temps

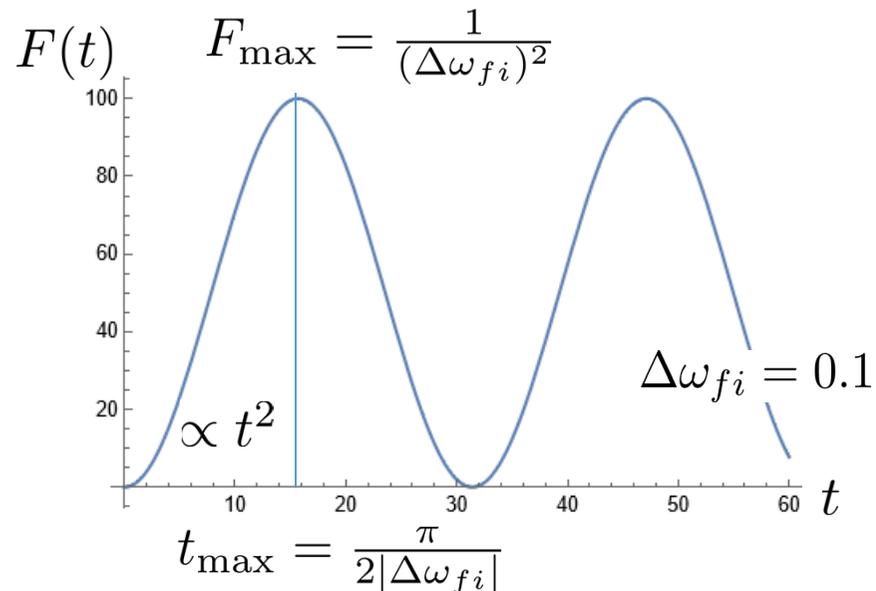
Exemple d'une transition d'un niveau $i \rightarrow f$ | $E_f > E_i$: Il s'agit du cas **a**.

$$b_f(t) \approx -\frac{W_{fi}}{2\hbar} \frac{e^{i(|\omega_{fi}|-\omega)t} - 1}{|\omega_{fi}| - \omega} \approx -\frac{W_{fi}}{2\hbar} e^{i\frac{|\omega_{fi}|-\omega}{2}t} \times \frac{e^{i\frac{\omega-|\omega_{fi}|}{2}t} - e^{-i\frac{\omega-|\omega_{fi}|}{2}t}}{\omega - |\omega_{fi}|}$$

$$\hookrightarrow |b_f(t)|^2 \approx \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} \underbrace{\left(\frac{\sin \Delta\omega_{fi}t}{\Delta\omega_{fi}} \right)^2}_{F(t, \Delta\omega_{fi})} \quad \text{avec} \quad \Delta\omega_{fi} := \frac{\omega - |\omega_{fi}|}{2}$$

On obtient un résultat similaire pour le cas **b**.

On analyse la physique soit en considérant une valeur fixe de $\Delta\omega_{fi}$:



On atteint une valeur maximale d'autant plus grande que ω est proche de $|\omega_{fi}|$.

La population sur le niveau f finit toujours par décroître, sauf dans le cas improbable où $\Delta\omega_{fi} = 0$.

Théorie des perturbations dépendant du temps

Limite du développement à l'ordre 1: $|b_f(t)|^2 \approx \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left(\frac{\sin \Delta\omega_{fi}t}{\Delta\omega_{fi}} \right)^2$

On sait que, par contrainte, la probabilité d'occupation d'un niveau ne peut être supérieure à l'unité.

Dans le cas où $\frac{|W_{fi}|}{2\hbar|\Delta\omega_{fi}|} \ll 1$, le résultat précédent satisfait bien cette contrainte et paraît acceptable en tout temps.

Par contre, dans le cas $\frac{|W_{fi}|}{2\hbar|\Delta\omega_{fi}|} \gtrsim 1$ voire $\gg 1$, le résultat ne peut être acceptable que jusqu'à un temps $t \approx \frac{2\hbar}{|W_{fi}|}$.

Remarques :

- La plupart des résultats discutés précédemment s'appliquent également pour les évolutions temporelles résultant d'une perturbation fixe, en prenant simplement $\omega=0$. La résonance a alors lieu entre deux états dégénérés.
- On n'a pas dit grand-chose des éléments $W_{fi} := \langle f | \lambda \hat{W} | i \rangle$ (amplitudes de transition), mais il faut être conscient que dans la pratique, ils ne sont pas tous différents de 0 (règles dites de « sélection »)... En particulier, on a souvent $W_{ii} = W_{ff} = 0$
- **Contrairement à la formule de Rabi, les probabilités de transitions peuvent être grandes**

Problèmes

1. Reprendre le problème « Autour de l'IRM » et proposer une meilleure stratégie pour réaliser le pulse qui va permettre la « bascule des spins » dans le plan OXY. Décrivez le matériel que vous allez devoir vous procurer.
2. Soit un dipôle plongé dans un champ électrique variable (périodique) dans le temps. On supposera ici que le dipôle est aligné sur E en permanence. La distance relative entre les charges + et – est décrite par un hamiltonien harmonique.
 - Quelle stratégie mettre en œuvre pour faire passer le dipôle dans son premier état excité ?
 - ... idem pour le 2^e état excité.

N.B.: dans cet exercice, vous vous attacherez au calcul explicite des éléments W_{fi} .

Résolution exacte pour système à 2 niveaux et approximation séculaire

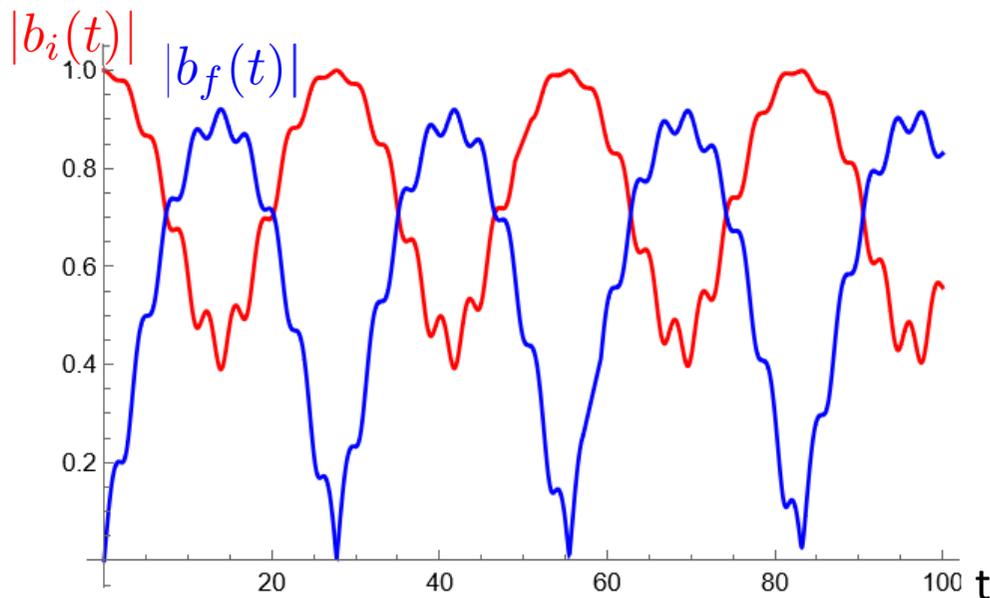
Au-delà de l'ordre 1:

Afin d'illustrer les concepts, on va considérer un système à 2 niveaux tel que la perturbation harmonique externe satisfait $W_{ii}=W_{ff}=0$. Dans ce cas, les deux équations couplées s'écrivent

$$\dot{b}_f(t) = -\frac{i}{\hbar} e^{i\omega_{fi}t} \cos(\omega t) W_{fi} b_i(t)$$

$$\dot{b}_i(t) = -\frac{i}{\hbar} e^{-i\omega_{fi}t} \cos(\omega t) W_{if} = -\frac{i}{\hbar} e^{-i\omega_{fi}t} \cos(\omega t) W_{fi}^* b_f(t)$$

En injectant l'une de ces deux équations dans la dérivée de la seconde, on obtient une équation différentielle linéaire du 2^e ordre à coefficients non constants, en général insoluble analytiquement => approche numérique...



$$\hbar = 1, W_{fi} = 0.2$$

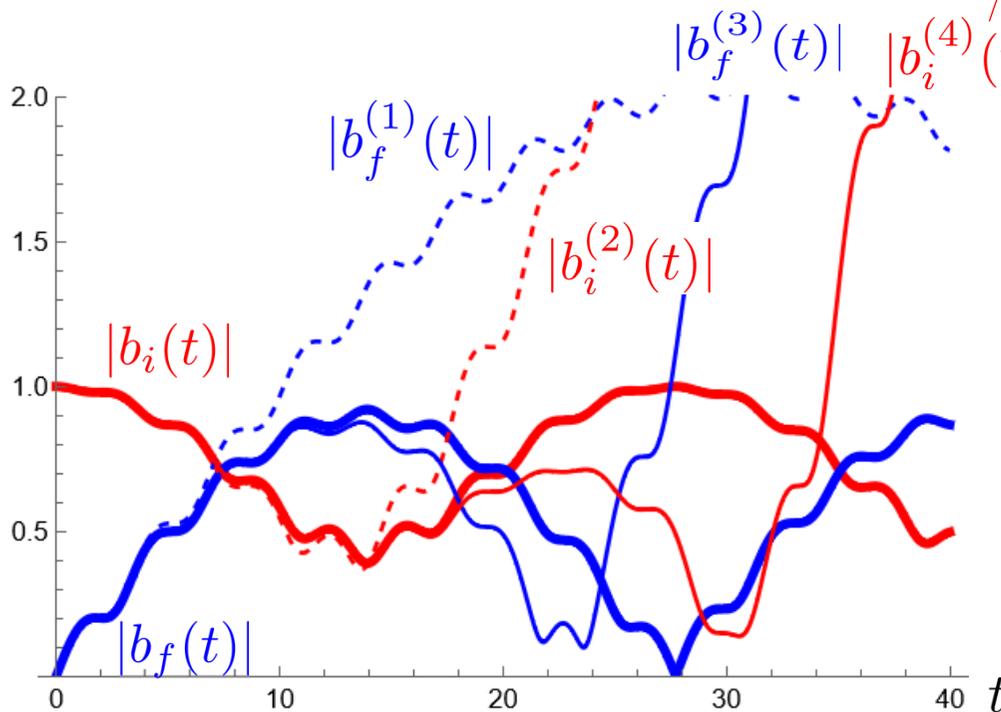
$$\omega_{fi} = 1, \omega = 0.9$$

Structure compliquée, caractérisée par des oscillations lentes et des oscillations rapides de moindre amplitude ... **Que peut-on en comprendre ?**

Résolution exacte pour système à 2 niveaux et approximation séculaire

Au-delà de l'ordre 1: Comparaison avec le développement perturbatif

$$1 - \frac{1}{128} W_{fi}^2 \left(\frac{16 t^2 W_{fi}^2 w_{if}^2}{(\omega - w_{if})^2 (\omega + w_{if})^2} - \frac{8 W_{fi}^2 w_{if}}{\omega (\omega - w_{if})^2 (-3\omega + w_{if}) (\omega + w_{if})} - \frac{8 W_{fi}^2 w_{if}}{\omega (\omega - w_{if}) (\omega + w_{if})^2 (3\omega + w_{if})} + \frac{W_{fi}^2}{\omega^2 (\omega + w_{if}) (3\omega + w_{if})} + \frac{W_{fi}^2}{\omega^2 (3\omega^2 - 4\omega w_{if} + w_{if}^2)} - \frac{32 i t w_{if} (-2 (\omega^2 - w_{if}^2)^2 + W_{fi}^2 (\omega^2 + 3 w_{if}^2))}{(\omega - w_{if})^3 (\omega + w_{if})^3} \right) \\
(4 (-4 (3\omega - w_{if}) (\omega^2 - w_{if}^2)^2 + W_{fi}^2 (\omega^3 + 7\omega^2 w_{if} + 15\omega w_{if}^2 - 7 w_{if}^3))) / (\omega (\omega - w_{if})^3 (3\omega - w_{if}) (\omega + w_{if})^2) - (4 (-4 (3\omega + w_{if}) (\omega^2 - w_{if}^2)^2 + W_{fi}^2 (\omega^3 - 7\omega^2 w_{if} + 15\omega w_{if}^2 + 7 w_{if}^3))) / (\omega (\omega - w_{if})^2 (\omega + w_{if})^3 (3\omega + w_{if})) + (8 w_{if} (-8\omega (\omega^2 - w_{if}^2)^2 (9\omega^2 - w_{if}^2) + W_{fi}^2 (41\omega^5 + 27\omega^4 w_{if} + 138\omega^3 w_{if}^2 + 6\omega^2 w_{if}^3 - 19\omega w_{if}^4 - w_{if}^5))) / (\omega (\omega - w_{if})^4 (\omega + w_{if})^3 (-9\omega^2 + w_{if}^2)) + (8 w_{if} (-8\omega (\omega^2 - w_{if}^2)^2 (9\omega^2 - w_{if}^2) + W_{fi}^2 (41\omega^5 - 27\omega^4 w_{if} + 138\omega^3 w_{if}^2 - 6\omega^2 w_{if}^3 - 19\omega w_{if}^4 + w_{if}^5))) / (\omega (-\omega + w_{if})^3 (\omega + w_{if})^4 (-9\omega^2 + w_{if}^2)) - (8 e^{-i t w_{if}} w_{if} (-8\omega (\omega^2 - w_{if}^2)^2 (9\omega^2 - w_{if}^2) + W_{fi}^2 (-27\omega^4 w_{if} - 6\omega^2 w_{if}^3 + w_{if}^5 + \omega w_{if}^4 (-19 - 4 i t w_{if}) + 2\omega^3 w_{if}^2 (69 + 20 i t w_{if}) + \omega^5 (41 - 36 i t w_{if}))) (\cos[t\omega] - i \sin[t\omega])) / (\omega (-\omega + w_{if})^3 (\omega + w_{if})^4 (-9\omega^2 + w_{if}^2)) - (8 e^{-i t w_{if}} w_{if} (-8\omega (\omega^2 - w_{if}^2)^2 (9\omega^2 - w_{if}^2) + W_{fi}^2 (27\omega^4 w_{if} + 6\omega^2 w_{if}^3 - w_{if}^5 + \omega w_{if}^4 (-19 - 4 i t w_{if}) + 2\omega^3 w_{if}^2 (69 + 20 i t w_{if}) + \omega^5 (41 - 36 i t w_{if}))) (\cos[t\omega] + i \sin[t\omega])) / (\omega (\omega - w_{if})^4 (\omega + w_{if})^3 (-9\omega^2 + w_{if}^2)) + (4 (-4 (3\omega - w_{if}) (\omega^2 - w_{if}^2)^2 + W_{fi}^2 (3\omega w_{if}^2 (5 - 2 i t w_{if}) + \omega^2 w_{if} (7 - 2 i t w_{if}) + w_{if}^3 (-7 + 2 i t w_{if}) + \omega^3 (1 + 6 i t w_{if}))) (\cos[2t\omega] - i \sin[2t\omega])) / (\omega (\omega - w_{if})^3 (3\omega - w_{if}) (\omega + w_{if})^2) + (4 (-4 (3\omega + w_{if}) (\omega^2 - w_{if}^2)^2 + W_{fi}^2 (3\omega w_{if}^2 (5 - 2 i t w_{if}) + w_{if}^3 (7 - 2 i t w_{if}) + \omega^2 w_{if} (-7 + 2 i t w_{if}) + \omega^3 (1 + 6 i t w_{if}))) (\cos[2t\omega] + i \sin[2t\omega])) / (\omega (\omega - w_{if})^2 (\omega + w_{if})^3 (3\omega + w_{if})) + \frac{8 e^{-i t w_{if}} W_{fi}^2 w_{if} (\cos[3t\omega] - i \sin[3t\omega])}{\omega (\omega - w_{if}) (\omega + w_{if})^2 (3\omega + w_{if})} + \frac{8 e^{-i t w_{if}} W_{fi}^2 w_{if} (\cos[3t\omega] + i \sin[3t\omega])}{\omega (\omega - w_{if})^2 (-3\omega + w_{if}) (\omega + w_{if})} - \frac{W_{fi}^2 (\cos[4t\omega] - i \sin[4t\omega])}{\omega^2 (3\omega^2 - 4\omega w_{if} + w_{if}^2)} - \frac{W_{fi}^2 (\cos[4t\omega] + i \sin[4t\omega])}{\omega^2 (\omega + w_{if}) (3\omega + w_{if})} \Big)$$



Augmenter les ordres du traitement perturbatif permet de gagner en précision sur les premiers cycles « courts », mais ne permet pas de décrire les cycles lents...

Résolution exacte pour système à 2 niveaux et approximation séculaire

Au-delà de l'ordre 1:

En décomposant le cosinus :

$$\dot{b}_i(t) = -\frac{i W_{fi}^*}{2\hbar} \left(e^{i(\omega - \omega_{fi})t} + e^{-i(\omega_{fi} + \omega)t} \right) b_f(t)$$

$$\dot{b}_f(t) = -\frac{i W_{fi}}{2\hbar} \left(e^{i(\omega_{fi} + \omega)t} + e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} \right) b_i(t)$$

On considère $\omega_{fi} > 0$ et ω proche de ω_{fi} . Les termes en $\exp(i(\omega_{fi} + \omega)t)$ et $\exp(-i(\omega_{fi} + \omega)t)$ vont, après intégration donner des contributions proportionnelles à $1/|\omega_{fi} + \omega|$ – pourvu que la variation temporelle des $b(t)$ soit lente, i.e. pourvu que W_{fi} ne soit pas trop important (ce qui est bien l'esprit d'une perturbation) – et peuvent dès lors être négligées : **approximation dite « séculaire »** (rotating phase approximation).

On obtient alors :

$$\dot{b}_f(t) \approx -\frac{i W_{fi}}{2\hbar} e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} b_i(t) \quad \dot{b}_i(t) \approx -\frac{i W_{fi}^*}{2\hbar} e^{i(\omega - \omega_{fi})t} b_f(t)$$

$$\ddot{b}_f(t) \approx -\frac{i W_{fi}}{2\hbar} e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} \left(i(\omega_{fi} - \omega) b_i(t) + \dot{b}_i(t) \right)$$

$$\approx i(\omega_{fi} - \omega) \dot{b}_f(t) - \frac{i W_{fi}}{2\hbar} e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} \dot{b}_i(t)$$

$$\ddot{b}_f(t) \approx -i(\omega - \omega_{fi}) \dot{b}_f(t) - \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} b_f(t)$$

qui est une simple EDO à **coefficients constants**

Résolution exacte pour système à 2 niveaux et approximation séculaire

Approximation séculaire:
$$\ddot{b}_f(t) \approx -i(\omega - \omega_{fi})\dot{b}_f(t) - \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} b_f(t)$$

Avec, pour conditions initiales : $b_f(0) = 0, \dot{b}_f(0) = -\frac{i W_{fi}}{2\hbar}$

Problème : résoudre cette équation – en commençant éventuellement par le cas le plus simple $\omega = \omega_{fi}$; pour le cas le plus général on pourra poser $a_f(t) = b_f(t) \exp(i \alpha t)$ avec α bien choisi pour éliminer le terme contenant la dérivée par rapport au temps –, analyser la structure de la solution obtenue puis comparer avec la solution exacte numérique et commenter.

Résolution exacte pour système à 2 niveaux et approximation séculaire

Approximation séculaire: $\ddot{b}_f(t) \approx -i(\omega - \omega_{fi})\dot{b}_f(t) - \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} b_f(t)$

Avec, pour conditions initiales : $b_f(0) = 0, \dot{b}_f(0) = -\frac{i W_{fi}}{2\hbar}$

Problème : résoudre cette équation – en commençant éventuellement par le cas le plus simple $\omega = \omega_{fi}$ –, analyser la structure de la solution obtenue puis comparer avec la solution exacte numérique et commenter.

Réponse : après calcul, on obtient : $\mathcal{P}_{if}(t; \omega) = \frac{|W_{if}|^2}{|W_{if}|^2 + \hbar^2(\omega - \omega_{fi})^2} \sin^2 \left[\sqrt{\frac{|W_{if}|^2}{\hbar^2} + (\omega - \omega_{fi})^2} \frac{t}{2} \right]$

- Cette solution est fort proche de la formule de Rabi, avec $\omega_{fi} \rightarrow \omega_{fi} - \omega$ (et aussi W_{fi} réduit d'un facteur 2; pourquoi ?)...
- En conséquence, pour ω proche de ω_{fi} , la transition vers l'état « f » peut se faire avec une probabilité 1 au temps $t_{\text{trans}} = \frac{\hbar\pi}{|W_{fi}|}$, ce qui constitue une différence essentielle.
- Par rapport à la théorie des perturbations dép. du temps, le temps en lequel la probabilité dans f atteint son maximum n'est plus $\frac{\pi}{2|\omega_{fi} - \omega|}$ (qui peut être très grand) mais bien

$$\frac{\pi}{\sqrt{\frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} + (\omega_{fi} - \omega)^2}}$$

- Il y a donc une limite intrinsèque au phénomène de résonance, due au fait que le « réservoir » de probabilité dans l'état i diminue au cours du temps => saturation de la probabilité de transition $\rightarrow f$.

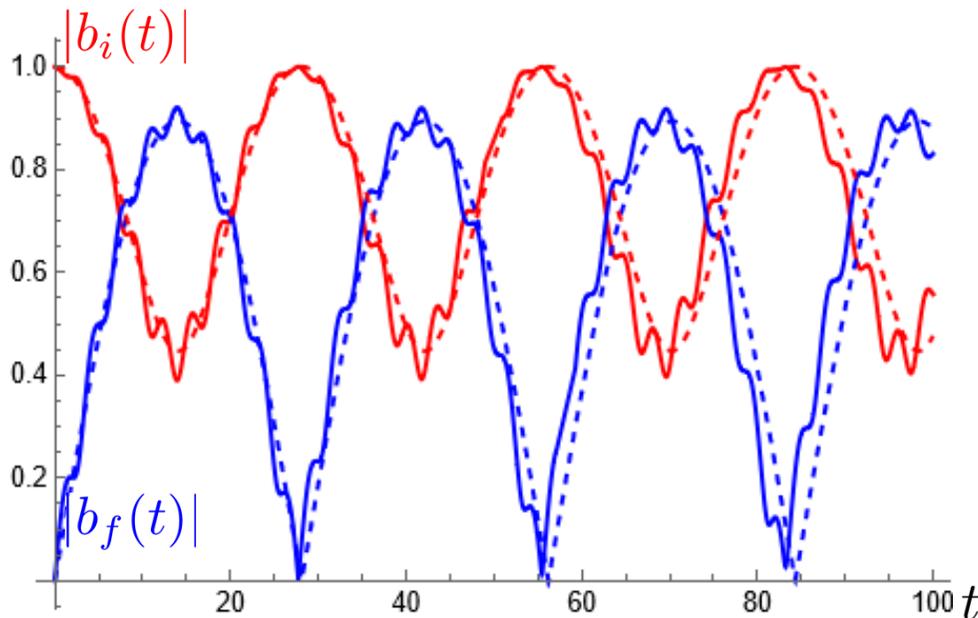
Résolution exacte pour système à 2 niveaux et approximation séculaire

Approximation séculaire:
$$\ddot{b}_f(t) \approx -i(\omega - \omega_{fi})\dot{b}_f(t) - \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} b_f(t)$$

Avec, pour conditions initiales : $b_f(0) = 0, \dot{b}_f(0) = -\frac{i W_{fi}}{2\hbar}$

Problème : résoudre cette équation – en commençant éventuellement par le cas le plus simple $\omega = \omega_{fi}$ –, analyser la structure de la solution obtenue puis comparer avec la solution exacte numérique et commenter.

Réponse : Comparaison avec le résultat numérique exact:



Les résultats de l'approximation séculaire (trait interrompu) reproduisent bien les variations lentes du résultat numérique « exact ». Par contre:

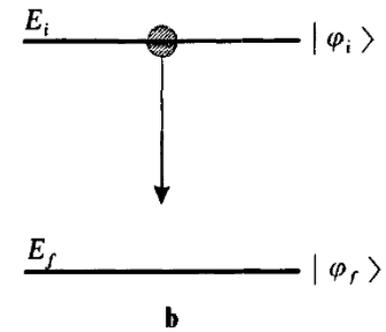
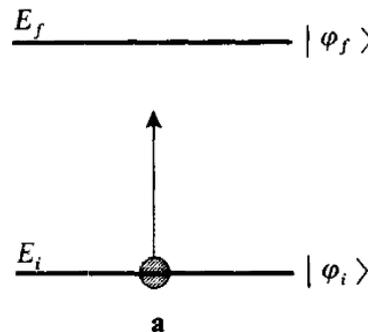
- les oscillations plus rapides ne sont pas captées par cette approximation
- on observe un déphasage progressif.

Théorie des perturbations dépendant du temps

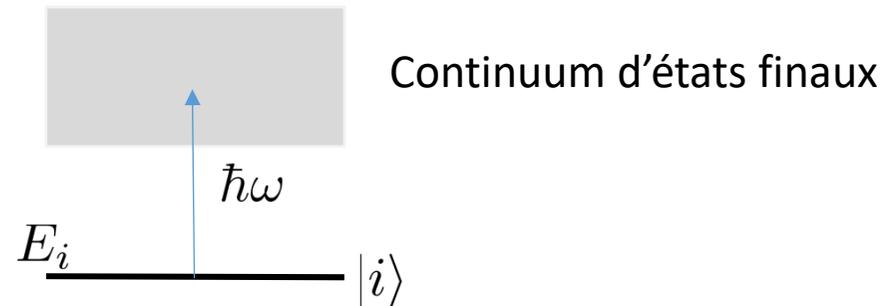
Couplage d'un état discret au continu:

Auparavant : transition simple entre 2 états discrets:

Résultat important : même avec un couplage faible, on peut faire transiter toute la probabilité de $i \rightarrow f$ pourvu que l'on aie $\hbar\omega \approx |E_f - E_i|$



Etudions la situation suivante :



La grande différence est que le continuum d'états doit être décrit par une densité de niveaux: $\rho(\beta, E)$ telle que la probabilité de trouver le quanton entre une énergie E et $E + \Delta E$ s'écrit

$$\mathcal{P}(E, E + \Delta E; t) = \int d\beta dE' \rho(E', \beta) |\langle E', \beta | \psi(t) \rangle|^2$$

Autre nombre quantique

Avec un peu de recul : les interaction "système quantique – environnement" mettent en jeu un continuum d'états => important de bien maîtriser ces concepts

Théorie des perturbations dépendant du temps

Couplage d'un état discret au continu:

Pour un état initial $|i\rangle$, la densité de probabilité admet une expression identique au cas de 2 états discrets :

$$|\langle E', \beta | \psi(t) \rangle|^2 \approx \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} \underbrace{\left(\frac{\sin \Delta\omega_{fi} t}{\Delta\omega_{fi}} \right)^2}_{F(t, \Delta\omega_{fi})} \quad \text{avec} \quad \Delta\omega_{fi} := \frac{\omega - \frac{E' - E_i}{\hbar}}{2}$$

Avec le temps croissant, la fonction F devient de plus en plus piquée au voisinage de $\Delta\omega_{fi}=0$, soit au sens des distributions :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F(t, \Delta\omega_{fi}) = \pi t \delta(\Delta\omega_{fi}) = 2\pi t \hbar \delta(E' - E_i - \hbar\omega)$$

Et il vient alors

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(E, E + \Delta E; t) &= \frac{\pi t}{2\hbar} \int d\beta dE' \rho(E', \beta) |\langle E', \beta | W | i \rangle|^2 \delta(E' - E_i - \hbar\omega) \\ &= \frac{\pi t}{2\hbar} \int d\beta \rho(E_i + \hbar\omega, \beta) |\langle E_i + \hbar\omega, \beta | W | i \rangle|^2 \end{aligned}$$

qui croît linéairement dans le temps. On définit dès lors le taux de transitions comme le taux d'accroissement de la probabilité, soit

$$\mathcal{W} = \frac{\pi}{2\hbar} \int d\beta \rho(E_f = E_i + \hbar\omega, \beta) |\langle E_f = E_i + \hbar\omega, \beta | W | i \rangle|^2$$

Règle d'or de Fermi ; formule équivalente si $\omega=0$ (facteur x4)

Théorie des perturbations dépendant du temps

Remarques importantes:

- Un cas important d'interaction entre un système quantique et le monde externe est celui d'une particule plongée dans un champ électromagnétique appliqué. Le hamiltonien s'écrit alors

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - q\vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 + V(\vec{x}) - \gamma \vec{S} \cdot \vec{B}(\vec{x}, t)$$

Charge de la particule

rapport gyromagnétique (voir cours sur les moments cinétiques par V. Vlaminc)

Énergie potentielle usuelle (par exemple, puits coulombien)

$$\vec{B} = \text{rot} \vec{A}$$

- On peut alors écrire ce Hamiltonien sous la forme

$$\hat{H}(t) = \underbrace{\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\vec{x})}_{H_0} - \frac{q}{m} \hat{\vec{p}} \cdot \vec{A}(\vec{x}, t) - \gamma \vec{S} \cdot \vec{B}(\vec{x}, t) + \underbrace{\frac{q^2 \vec{A}^2(\vec{x}, t)}{2m}}$$

En général faible car quadratique en le champ externe

avec un hamiltonien d'interaction linéaire en le champ électromagnétique appliqué :

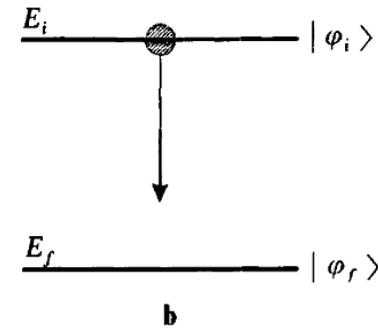
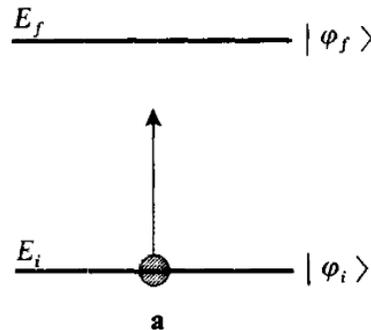
$$\hat{H}_{\text{int}}(t) := \underbrace{-\frac{q}{m} \hat{\vec{p}} \cdot \vec{A}(\vec{x}, t)}_{\hat{H}_{\text{int},1}} - \underbrace{\gamma \vec{S} \cdot \vec{B}(\vec{x}, t)}_{\hat{H}_{\text{int},2}}$$

Théorie des perturbations dépendant du temps

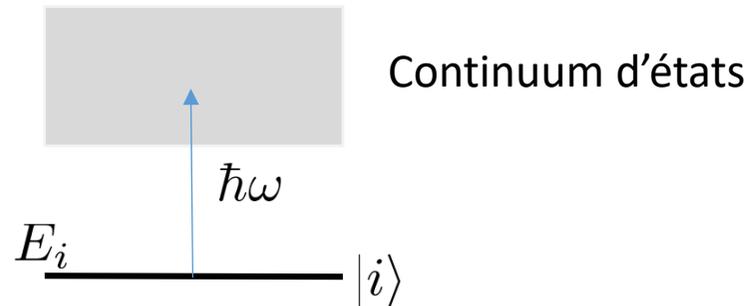
Remarques importantes:

- Dans ce contexte, les transitions considérées précédemment prennent tout leur sens :

Transitions induites
entre états discrets :



Ionisation

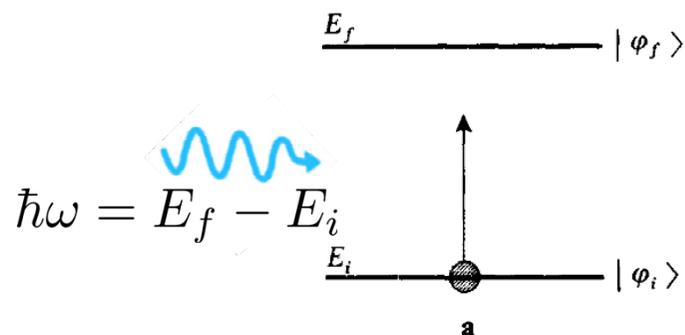


- On ne pourra toutefois pas entrer dans le détail des règles de sélection qui sont fort importantes en pratique.
- Exercice : Montrer que $H_{\text{int}1}$ implique une amplitude de transition dipolaire électrique de type $\langle f|\vec{x}|i\rangle$; l'évaluer pour des cas simples

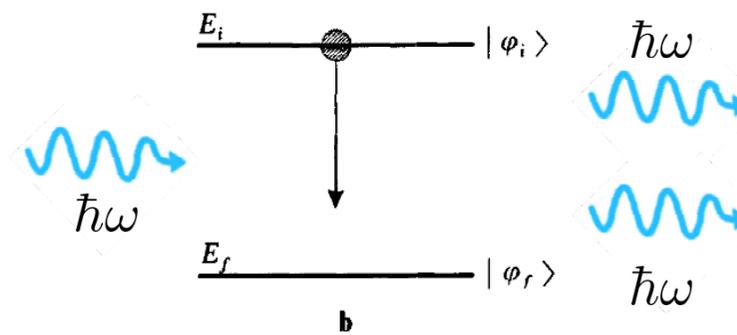
Théorie des perturbations dépendant du temps

Remarques importantes:

- Dans le hamiltonien particule – champ électrique affiché précédemment, il y a une dissymétrie importante entre le traitement de la particule (mécanique quantique) et le champ électromagnétique (traitement classique).
- En réalité, il est connu que les champs électromagnétiques sont quantifiés et constitués de photons. Dans une version plus complète, on a :



Absorption d'un photon et excitation de la particule vers un niveau supérieur



Création d'un 2^e photon à partir d'un photon incident et d'un niveau excité (avec transition -> état inférieur)

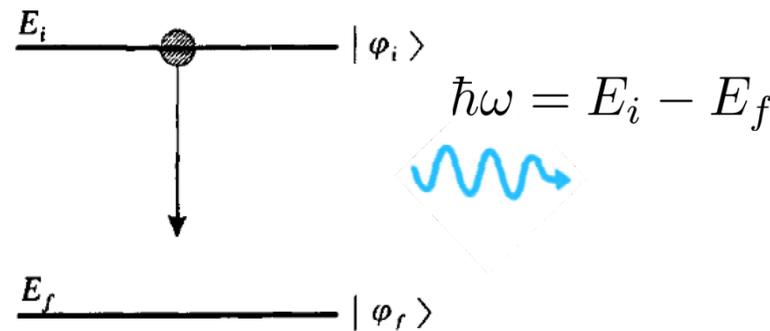
- Ces deux mécanismes peuvent toutefois être correctement décrits en supposant un champ classique (tant que le nombre de photons qu'il renferme est tel qu'il peut être considéré comme « macroscopique »)...

Théorie des perturbations dépendant du temps

Remarques importantes:

- ... mais il existe un 3^e mécanisme propres aux champs électromagnétiques quantiques :

Emission spontanée : le photon est « auto généré » tandis que la particule transite dans un état d'énergie inférieure, par exemple l'état fondamental !!!



- => Les états excités d'une particule chargée (ou possédant un moment gyromagnétique) ne sont pas stables vis-à-vis du processus d'émission spontanée. C'est un des mécanismes qui contribue à la relaxation des systèmes quantiques. Relaxation = retour d'un système perturbé à l'équilibre.
- Puisque les photons forment un continuum d'états, on est proche de la dernière situation discutée : transition $|i, 0\gamma\rangle \rightarrow |f, 1\gamma\rangle$, qui permet alors d'évaluer la demi-vie de l'état excité.
- N.B.: Un tel calcul ne peut être effectué rigoureusement que dans le cadre de l'électrodynamique quantique.

Au-delà de la (dé)croissance linéaire

Couplage d'un état discret au continu, **suite**:

Il est clair que la croissance linéaire (en temps) de la probabilité de transition de $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$ ne peut se poursuivre indéfiniment (voir cas de la transition entre 2 états discrets)

Question pour un champion : va-t-on observer des phénomènes d'oscillation « lente » comme dans le cas de 2 états discrets ?

Pour répondre à une telle question, il faut évidemment soit aller au-delà de l'ordre 1 dans la théorie des perturbations, soit adopter une méthode plus globale.

Au-delà de la (dé)croissance linéaire

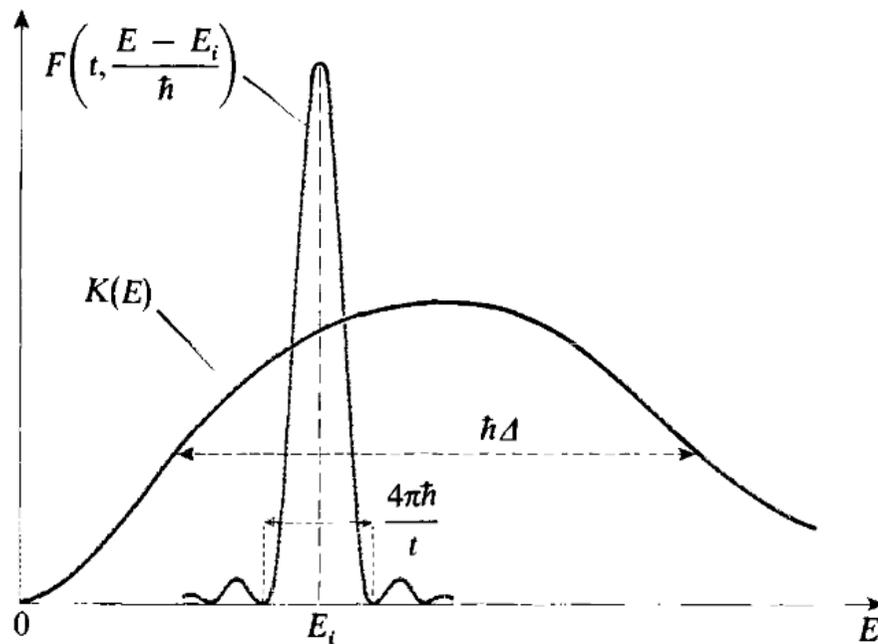
Rappel des principaux résultats de la TPDT : ($\omega=0 \Rightarrow$ pas de transfert d'énergie)

Probabilité de transition vers les états $|f\rangle$ du continuum d'énergie E :

$$\mathcal{P}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \int d\beta dE \rho(E, \beta) |\langle E, \beta | W | i \rangle|^2 F(t, \omega_{fi}) \quad \text{où} \quad F(t, \Delta\omega_{fi}) = \left(\frac{\sin \frac{\omega_{fi} t}{2}}{\frac{\omega_{fi}}{2}} \right)^2$$

A la limite des « grands » temps, on a $\mathcal{P}(t) \approx \Gamma t \dots$ et donc, la probabilité de survie sur l'état $|i\rangle$ vaut $\mathcal{P}_i(t) \approx 1 - \Gamma t$, ce qui ne peut être vrai que pour $\Gamma t \ll 1$.

Posons $K(E) = \int d\beta \rho(E, \beta) |\langle E, \beta | W | i \rangle|^2$ et supposons que cette fonction possède un support $\hbar\Delta$ sur lequel elle varie doucement :



On voit facilement que la croissance linéaire est établie dès que la largeur de la fonction F – de l'ordre de $\frac{\hbar}{t}$ – devient (nettement) inférieure à $\hbar\Delta$, soit $t \gg 1/\Delta$.

La croissance linéaire en temps est donc valable pour

$$\frac{1}{\Delta} \ll t \ll \frac{1}{\Gamma} = \frac{\hbar}{2\pi K(E_i)}$$

On suppose par la suite que la fonction K satisfait $K(E_i) \ll \hbar\Delta$ de sorte qu'un tel régime est possible

Au-delà de la (dé)croissance linéaire

Modèle étendu :

$$|\psi(t)\rangle = b_i(t) e^{-iE_i t/\hbar} |\varphi_i\rangle + \int d\alpha b(\alpha, t) e^{-iEt/\hbar} |\alpha\rangle$$

$$= \{E, \beta\}$$

On néglige les transitions entre les états du continuum

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} b_i(t) = \int d\alpha e^{i(E_i - E)t/\hbar} \langle \varphi_i | W | \alpha \rangle b(\alpha, t) \\ i\hbar \frac{d}{dt} b(\alpha, t) = e^{i(E - E_i)t/\hbar} \langle \alpha | W | \varphi_i \rangle b_i(t) \end{cases}$$

L'état $|\varphi_i\rangle$ bénéficie d'un « retour » de la part de tous les états du continuum

On intègre la dernière équation et on injecte la solution dans la première. Il en résulte :

$$\frac{d}{dt} b_i(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int d\alpha \int_0^t dt' e^{i(E_i - E)(t-t')/\hbar} |\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle|^2 b_i(t')$$

On intègre sur β et on utilise la définition de $K(E)$:

$$\frac{d}{dt} b_i(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE \int_0^t dt' K(E) e^{i(E_i - E)(t-t')/\hbar} b_i(t')$$

Équation intégrodifférentielle sur b_i

Au-delà de la (dé)croissance linéaire

Modèle étendu :

On définit alors
$$g(E_i, t - t') = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE K(E) e^{i(E_i - E)(t - t')/\hbar}$$

Comme étant le noyau de l'équation intégral-différentielle.

On comprend bien que g est essentiellement non nulle pour $t-t'$ de l'ordre $1/\Delta$ ou plus petit. Pour $t-t' > 1/\Delta$, l'exponentielle effectue plusieurs cycles sur le domaine d'intégration et s'amenuise rapidement.

Pourvu que b_i varie peu sur cette échelle – ce qui est exactement notre hypothèse de travail ($\Gamma \ll \Delta$) –, on peut alors approximer $b_i(t')$ par $b_i(t)$ au sein de l'équation ID, et on obtient.

$$\dot{b}_i(t) = \int_0^t dt' g(E_i, t - t') b_i(t')$$

Il reste à procéder à l'intégrale sur t' pour obtenir la valeur du coefficient directeur de l'ED.

On montre que cette intégrale atteint sa valeur asymptotique dès que $t \gtrsim \frac{1}{\Delta}$

Avec
$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t e^{i(E_i - E)\tau/\hbar} d\tau = \hbar \left[\pi \delta(E_i - E) + i \mathcal{P} \left(\frac{1}{E_i - E} \right) \right]$$

Partie principale
$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{f(x)}{x - x_0} := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\int_{-\infty}^{x_0 - \epsilon} dx \frac{f(x)}{x - x_0} + \int_{x_0 + \epsilon}^{+\infty} dx \frac{f(x)}{x - x_0} \right)$$

Et donc, dans ce régime :

$$\dot{b}_i(t) \approx -\frac{1}{\hbar} \int_0^{+\infty} dE K(E) \left[\pi \delta(E - E_i) + i \mathcal{P} \left(\frac{1}{E_i - E} \right) \right] b_i(t)$$

Au-delà de la (dé)croissance linéaire

Modèle étendu : $\dot{b}_i(t) \approx -\frac{1}{\hbar} \int_0^{+\infty} dE K(E) \left[\pi \delta(E - E_i) + i\mathcal{P} \left(\frac{1}{E_i - E} \right) \right] b_i(t)$
 $\approx -\frac{i}{\hbar} \int_0^{+\infty} dE K(E) \left[\mathcal{P} \left(\frac{1}{E_i - E} \right) - i\pi \delta(E - E_i) \right] b_i(t)$

En reprenant les équations d'évolution des b_n :

$$\dot{b}_n(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_k e^{i \frac{(E_n - E_k)t}{\hbar}} \langle n | \lambda \hat{W}(t) | k \rangle b_k(t)$$

on comprend que l'on peut formuler

$$\int_0^{+\infty} dE K(E) \left[\mathcal{P} \left(\frac{1}{E_i - E} \right) - i\pi \delta(E - E_i) \right] \equiv \langle n | H_{\text{int,eff}} | k \rangle \delta_{n,k}$$

i.e. un hamiltonien d'interaction effectif agissant sur l'état $|i\rangle$.

En posant $\delta E = \mathcal{P} \int_0^{+\infty} dE \frac{K(E)}{E_i - E}$, il vient $\langle i | H_{\text{int,eff}} | i \rangle = \delta E - i\pi K(E_i)$

➡ $\dot{b}_i(t) = -\frac{i}{\hbar} (\delta E - i\pi K(E_i)) b_i(t)$

➡ $b_i(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} (\delta E - i\pi K(E_i))t} b_i(0) = e^{-\frac{i\delta E}{\hbar}t - \frac{\pi K(E_i)}{\hbar}t}$

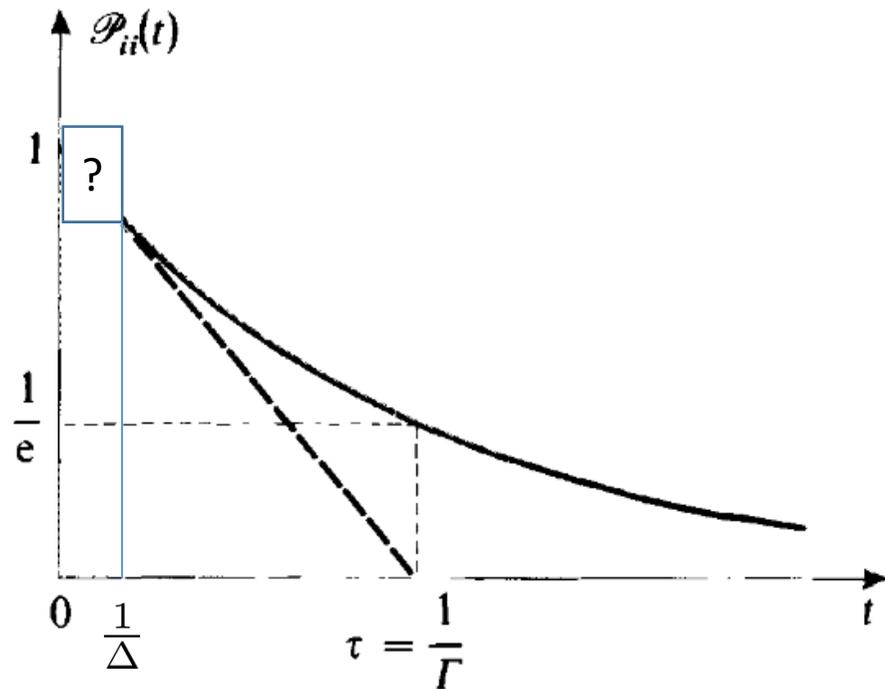
Déplacement de l'énergie de l'état $E_i \rightarrow E_i + \delta E$ dû au couplage avec les états du continuum (peut aussi être déduit dans une théorie des perturbations indépendante du temps)

Au-delà de la (dé)croissance linéaire

Modèle étendu : $b_i(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(\delta E - i\pi K(E_i))t} b_i(0) = e^{-\frac{i\delta E}{\hbar}t} e^{-\frac{\pi K(E_i)}{\hbar}t}$

Décroissance exponentielle de la population dans l'état $|i\rangle$

$$\mathcal{P}_{ii}(t) = |b_i(t)|^2 = e^{-\frac{2\pi K(E_i)}{\hbar}t} = e^{-\Gamma t}$$



Temps de vie

Contrairement au cas à deux niveaux, la probabilité ne « rebondit » pas lorsqu'elle quitte l'état $|i\rangle$. Le poids a en fait tendance à se répartir sur tous les niveaux continus sans retour majeur vers l'état $|i\rangle$: **irréversibilité**.

Ceci est le premier exemple que nous rencontrons en mécanique quantique de **relaxation**.

Pour un système constitué de charges électriques, tous les niveaux excités sont affectés par ce phénomène... seul l'état fondamental est préservé (pas de décroissance possible)

Au-delà de la (dé)croissance linéaire

Modèle étendu : population des états du continuum

On a maintenant $b_i(t) = e^{-\frac{i\delta E}{\hbar}t - \frac{\pi K(E_i)}{\hbar}t}$ pour $t \gtrsim \frac{1}{\Delta}$

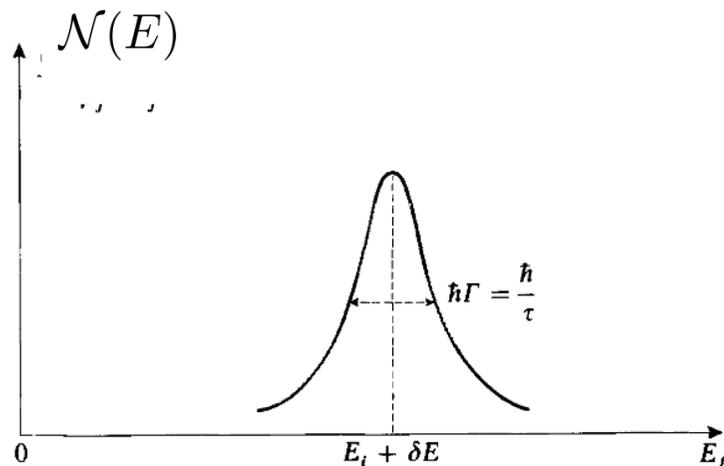
Et $\dot{b}(\alpha = \{E, \beta\}, t) = \frac{1}{i\hbar} e^{i\frac{E-E_i}{\hbar}t} \langle \alpha | W | i \rangle b_i(t) = \frac{1}{i\hbar} e^{i\frac{E-E_i-\delta E}{\hbar}t - \frac{\Gamma}{2}t} \langle \alpha | W | i \rangle$

Après intégration, on trouve asymptotiquement :

$$b(\alpha, \infty) = \langle \alpha | W | i \rangle \times \frac{1}{E - E_i - \delta E + i\frac{\hbar\Gamma}{2}}$$

d'où une distribution de niveaux (après intégration sur β)

$$\mathcal{N}(E) = \frac{K(E)}{(E - E_i - \delta E)^2 + \frac{\hbar^2\Gamma^2}{4}} \approx \frac{K(E_i)}{(E - E_i - \delta E)^2 + \frac{\hbar^2\Gamma^2}{4}} \approx \frac{1}{2\pi} \frac{\hbar\Gamma}{(E - E_i - \delta E)^2 + \frac{\hbar^2\Gamma^2}{4}}$$



- Distribution piquée en $E_i + \delta E$.
- Largeur $\hbar\Gamma$!!! « l'état $|i\rangle$ peut seulement être observé durant son temps de vie τ . Lorsqu'on essaie de déterminer son énergie en mesurant l'état final du système, l'incertitude ΔE sur le résultat ne peut être inférieure à \hbar/τ » Cohen-Tanoudji.

Résumé

- Résolution exacte: souvent impossible. Une formule de référence : oscillations de Rabi
- Méthode des perturbations dépendant du temps « brute »: s'applique dans le cas des niveaux discrets et des continuum... fonctionne tant que l'évolution globale des probabilités reste modérée
- Pour aller plus loin : approximation séculaire dans le cas des états discrets => cycles longs et quasi périodicité.
- A grand temps, les transitions vers le continuum se font de manière irréversible : relaxation
- En particulier, les niveaux atomiques ou moléculaires excités peuvent émettre un photon de manière spontanée (couplage avec le champ quantifié). Il en résulte une largeur spectrale en accord avec le principe de Heisenberg.

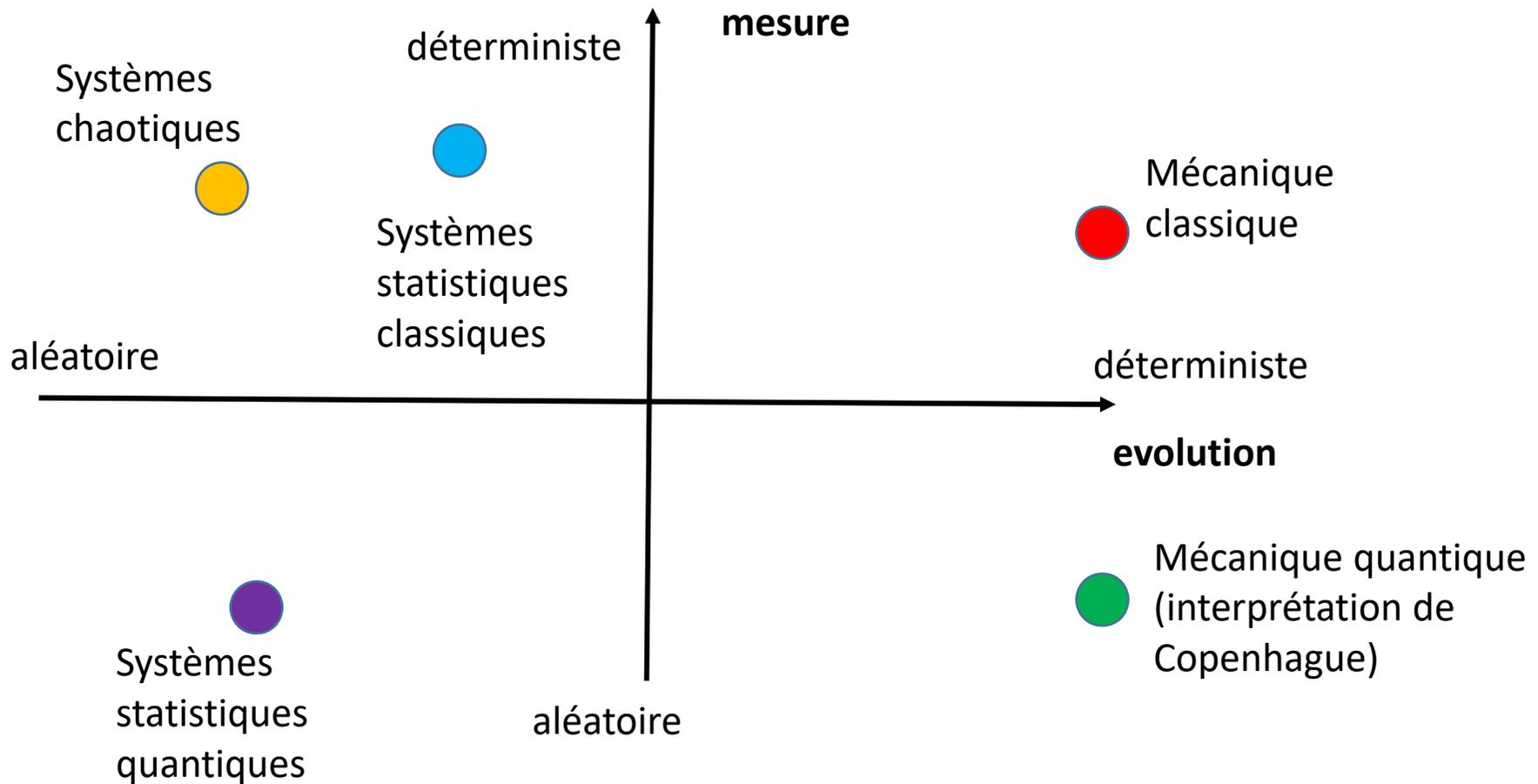
Problème : conséquence de la relaxation

On désire reprendre le problème de la transition induite entre 2 niveaux par application d'une perturbation harmonique, en supposant que l'état initial est l'état fondamental et en se plaçant dans les conditions de l'approximation séculaire... **tout en considérant (nouveau) que l'état excité peut subir une émission spontanée de rayonnement électromagnétique.**

On demande d'établir les équations d'évolution, de les résoudre, de commenter la physique et d'envisager les conséquences plus « technologiques » en vous plaçant dans le contexte de votre choix.

Partie C : La 2^e Révolution Quantique : les conséquences de l'environnement

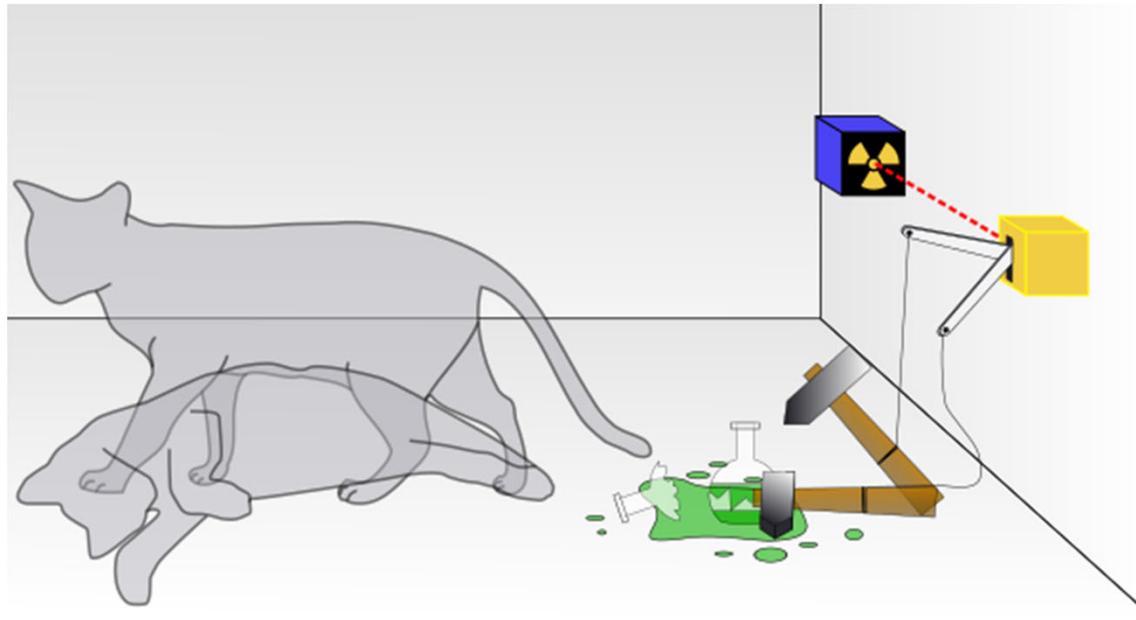
Déterminisme en physique



À quoi est dû le hasard ???

Point de vue de N. Bohr (interprétation de Copenhague)

La mesure physique de l'état ne peut être dissociée de l'appareillage de mesure, et cette cohésion doit être maintenue au sens strict => une description complète doit donc intégrer la fonction d'onde du photon ET de l'appareillage de mesure.



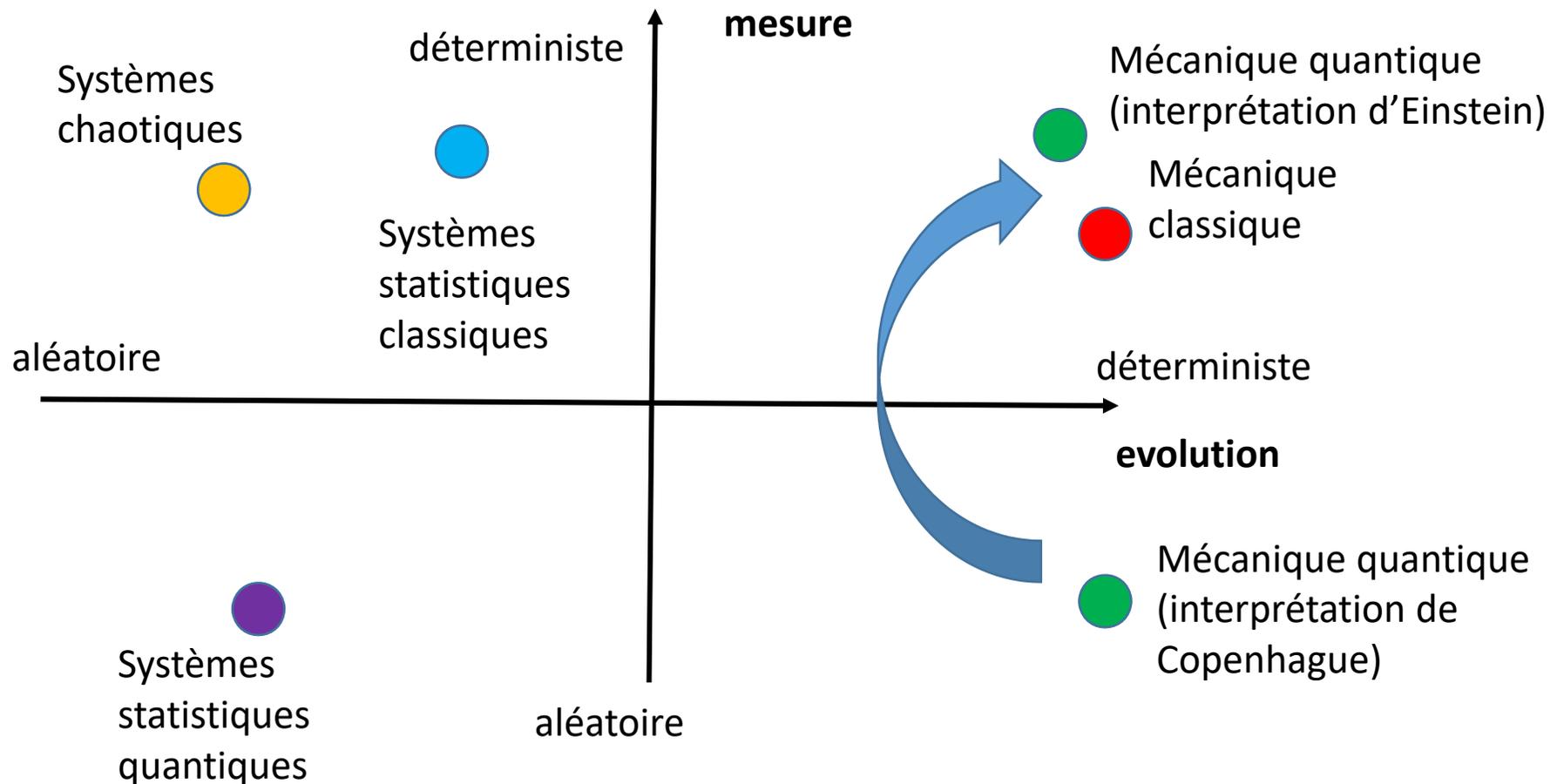
Suite à la désintégration radioactive, Le chat est-il vivant ou mort ? : tant que je ne regarde pas, je ne peux pas savoir...

Mais quand se passe la bifurcation, et quels éléments implique-t-elle ?

Et le chat là dedans, qu'en pense-t-il ?

Outre les questionnements philosophiques, une question plus pratique se pose : **“Comment une théorie déterministe de l'évolution peut-elle aboutir à une mesure aléatoire si l'appareil de mesure doit être intégré dans la description ?”** ou encore “Qu'est ce qui incarne les observables hermitiques ?”

Déterminisme en physique



En physique statistique, le "hasard" est dû à une partie masquée / perdue de l'information... Et si c'était pareil en mécanique quantique ? Notion de variables cachées... invalidées par les expériences d'Aspect.

Une bonne experience de physique



L'observatoire Borexino au Laboratoire national du Gran Sasso en septembre 2015.

Recherche de particules rares et furtives .



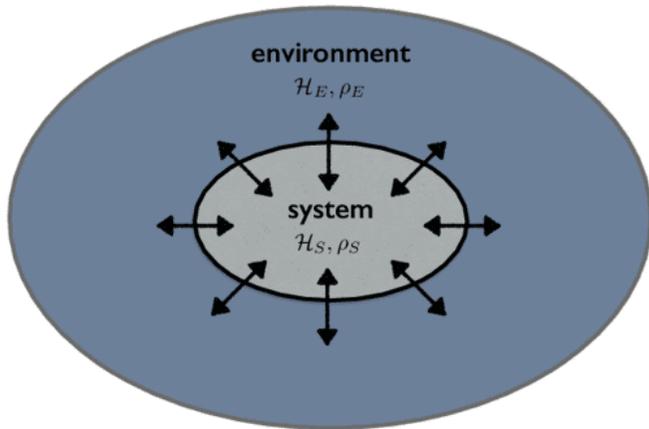
Besoin de s'isoler au maximum des rayonnements cosmiques et en general de l'environnement.



Paradigme du système isolé... aussi adopté par les fondations de la mécanique quantique et les "early experiments" (microscopique) ... mais difficultés conceptuelles dès que l'on va vers le macroscopique....

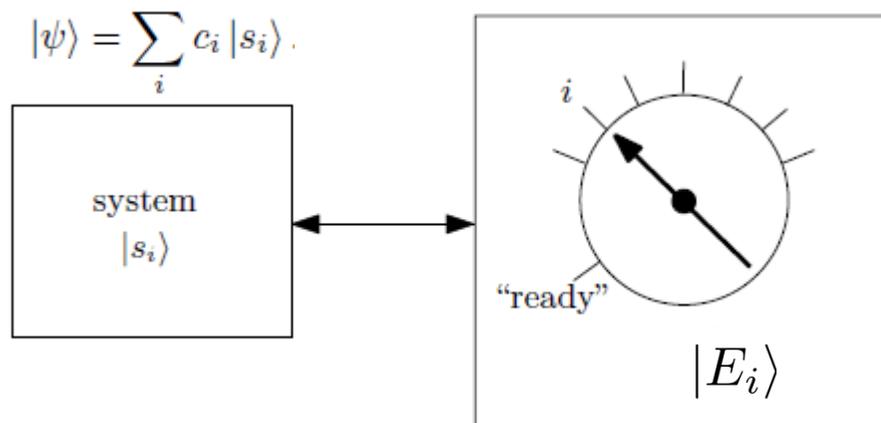
... Et de nos jours, micro et macro ne sont plus deux mondes bien séparés (importance du méso)

Decoherence, system-environment interaction, OQS



From B. Vacchini

- Since 1970
- Revisited all longstanding problems of quantum mechanics with a new paradigm : **quantum systems are naturally coupled to some external environment whose role cannot be ignored.**
- Starting from uncorrelated system – detector / environment state, the interaction between the system and the environment will build some global entangled state (environment is more than a mere perturbation)



Interaction with environment

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) |E_0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle |E_1\rangle + |\psi_2\rangle |E_2\rangle)$$

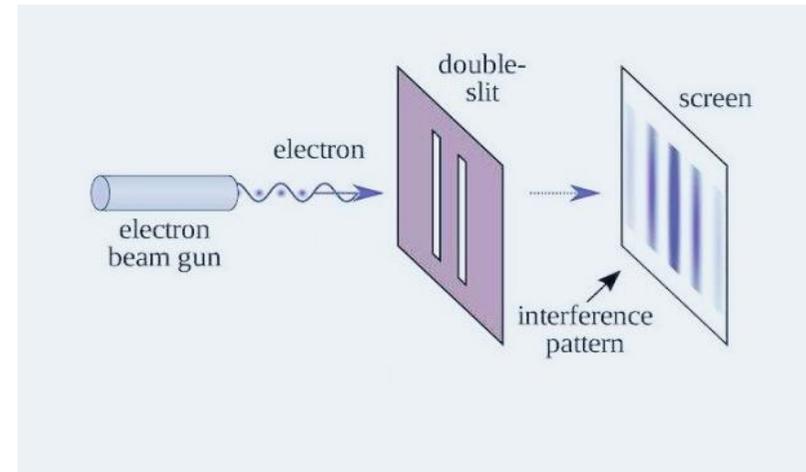
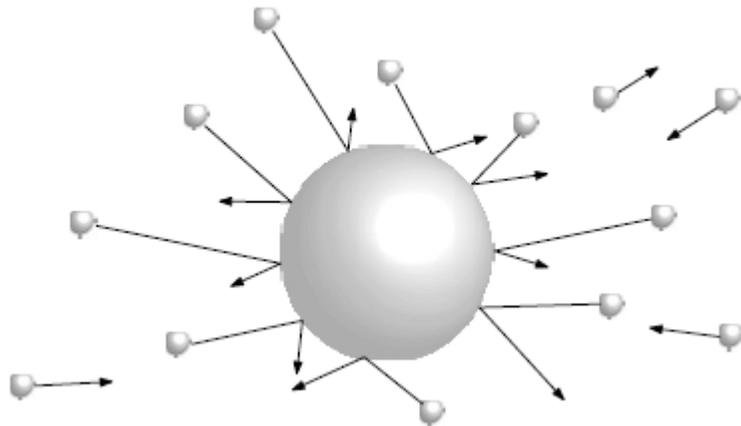
Entangled !

Coherence has been « delocalized » in the larger system (in a basis « invariant » way)... and this will translate into some effective decoherence of the quantum system.

N.B.: Such entanglement also applies in Von Neumann scheme for quantum measurement

Decoherence, system-environment interaction, OQS

- As postulated by Zurek : by interacting with different states of the quantum System, the environment outcome (in $|E_1\rangle, |E_2\rangle, \dots$) get the information about this system which can be considered as a genuine measurement of this system



Analogy with the 2 slits experiment and the « which state » observer... (played by the environment)

Quite effective for macroscopic systems

- Environment « measures » the system... and carry away part of its coherence
- This is the reason why a system usually evolves from « quantum like » to « classical like », over some decoherence time t_d (exemples will be given)

Decoherence, system-environment interaction, OQS

Concepts importants :

- Superposition: $|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$ chaque état ψ_n est dans l'état total simultanément !
- Entanglement / intrication: Pour deux systèmes S1 et S2

$$\text{Intrication} \Leftrightarrow |\Psi\rangle \neq |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$$

Si $|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$, l'état quantique correspond à des systèmes indépendants (la mesure effectuée sur l'un n'affecte pas l'autre)

$$\text{Exemple : état de Bell : } |\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_1 |1\rangle_2 + |1\rangle_1 |0\rangle_2)$$

Intrication *maximale* : mesurer l'état du système 2 (l'environnement) permet également de réduire complètement la superposition dans le système 1.

En general : $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle_1 |\phi_1\rangle_2 \pm |\psi_2\rangle_1 |\phi_2\rangle_2)$ intrication intermédiaire ;
l'intrication va se renforcer avec le temps.

Decoherence, system-environment interaction, OQS

Concepts importants :

- Matrice densité: On peut écrire $\bar{O} = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \text{tr} \left(\hat{O} | \psi \rangle \langle \psi | \right)$

On définit la **matrice densité** $\hat{\rho} := | \psi \rangle \langle \psi |$ et on écrit $\bar{O} = \text{tr} \left(\hat{O} \hat{\rho} \right)$

Sur la base des $|n\rangle$, les éléments de la diagonale de la matrice densité sont les poids “classiques” $|c_n|^2$, tandis que les termes non-diagonaux représentent les interférences.

Normalisation : $\text{tr} (\hat{\rho}) = \langle \psi | \psi \rangle = 1$

L’intérêt de la matrice densité est de permettre d’effectuer quelques opérations qui ne peuvent être définies sur un état quantique, telle que :

- la réduction (on intègre sur les variables du système 2 et on obtient une matrice densité (dite “réduite”) portant sur le système 1
- Les moyennes statistiques sur des systèmes qui ne sont pas complètement déterminés. Ainsi, si chaque état $| \psi_i \rangle$ est préparé avec une probabilité (classique) p_i , on peut définir (état mixte)

$$\hat{\rho} := \sum_i p_i | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i |$$

Decoherence, system-environment interaction, OQS

Concepts importants :

- Matrice densité: Exemple d'une expérience où spin up préparé dans 50% des cas et spin down dans 50% des cas :

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} 0,5 & 0 \\ 0 & 0,5 \end{pmatrix}$$

- ... alors qu'expérience où superposition quantique :

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \quad \Rightarrow \hat{\rho} = \dots?$$

- Dans ce cas

$$\bar{O} = \text{tr} \left(\hat{O} \hat{\rho} \right) = \sum_i p_i \bar{O}_i \quad \text{Moyenne double : quantique ET statistique}$$

!!! On ne peut pas “remonter” aux valeurs des p_i et aux $|\psi_i\rangle$ sur la base de la matrice densité “mixte”; il n’y a pas de “base privilégiée”.

Decoherence, system-environment interaction, OQS

Concepts importants :

- Matrice densité réduite: Supposons comme annoncé, que le système s'intrique avec l'environnement :

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) |E_0\rangle \xrightarrow{\text{Interaction with environment}} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle |E_1\rangle + |\psi_2\rangle |E_2\rangle)$$

Entangled !

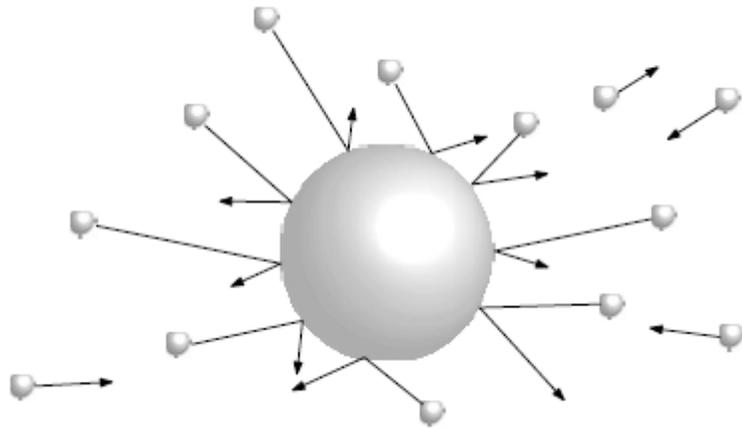
- L'environnement étant complexe, on ne peut en general le mesurer, on peut juste effectuer des experiences sur le système... soit O_s une telle observable. On peut alors bien entendu écrire

$$\bar{O}_s = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle \psi_i | O_s | \psi_j \rangle \langle E_i | E_j \rangle$$

Dans l'espace de Hilbert du système
 Dans l'espace de Hilbert de l'environnement

- ... mais on perd alors toute la matrice densité
- On préfère définir la matrice densité réduite $\hat{\rho}_S = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle E_i | E_j \rangle | \psi_j \rangle \langle \psi_i | \in \mathcal{H}_S^2$ telle que $\bar{O}_s = \text{tr}(\hat{\rho}_S O_s)$; il s'agit de la partie "observable" du système quantique complet.
- On note également $\hat{\rho}_S = \text{tr}_{\mathcal{E}}(\hat{\rho})$

Decoherence, system-environment interaction, OQS



The system gets intricated with the environment over time due to their mutual interactions

The environment acquires information from the various “states” of the system, in a irreversible way (think about the transitions):

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) |E_0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle|E_1\rangle + |\psi_2\rangle|E_2\rangle)$$

N.B. : This is completely independent from any observer (moon’s existence does not depend on whether we observe it !)

- There exists a preferred ensemble of states (in $|E_1\rangle, |E_2\rangle, \dots$) such that the interactions with the system leads to progressive (but « fast ») orthogonality $\langle E_1|E_2\rangle \sim 0$, as the environment acquires more and more « which path » information

Preferred basis or « pointer states » $\langle E_1|E_2\rangle \propto e^{-\frac{t}{t_d}}$ t_d : decoherence time

- Challenge : come with concrete physical models to support this picture and evaluate t_d

Decoherence, syst-env. interaction, OQS

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) |E_0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle|E_1\rangle + |\psi_2\rangle|E_2\rangle)$$

Consequence on the reduced density matrix

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi| \xrightarrow{\text{Tracing out the environment}} \hat{\rho}_S = \text{tr}_E (|\Psi\rangle\langle\Psi|)$$

$$\hat{\rho}_S = \frac{\langle E_0|E_0\rangle}{2} (|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2| + |\psi_1\rangle\langle\psi_2| + |\psi_2\rangle\langle\psi_1|) \quad \hat{\rho}_S = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \text{ pure state}$$



$t \gg t_d$

$$\hat{\rho}_S = \frac{1}{2} (|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2| + \langle E_2|E_1\rangle|\psi_1\rangle\langle\psi_2| + \langle E_1|E_2\rangle|\psi_2\rangle\langle\psi_1|)$$



$$\hat{\rho}_S \approx \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \approx 0 \\ \approx 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- Coherence still present at the global level (entangled state)
- Not observable at the « local » (system) level
- Appears as a « decohered » / classical density (1/2 for « 1 » state and 1/2 for « 2 » state)... in a irreversible way.

Appears as **quasi classical mixed state**

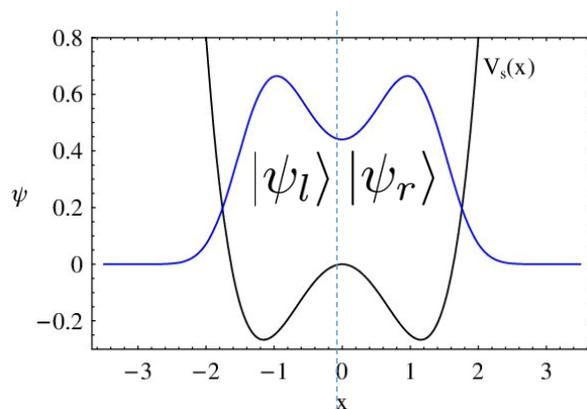
Decoherence, syst-env. interaction, OQS

$$t \gg t_d$$

- Disappearance of interferences
- Measurements (and dynamics) in terms of classical probabilities
- ... **but in the system states that are the best « measured » by the environment the so-called pointer states (preferred basis) !**

(superselection rule)

Link between decoherence and « suppression »



Case A: Ground state of double well potential put in contact with environment...

Assume $|\psi_1\rangle = |\psi_l\rangle$ and $|\psi_2\rangle = |\psi_r\rangle$ are 2 pointer states

$$|GS\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) \quad \hat{\rho}_{GS} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \text{prob}(GS, t = 0) = 1 &\longrightarrow \text{prob}(GS, t \gg t_d) = \text{tr}(\hat{\rho}_S(t) \cdot \hat{\rho}_{GS}) \\ &\approx \text{tr} \left(\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \right) \\ &\approx \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Decoherence \equiv suppression

Decoherence, syst-env. interaction, OQS

$t \gg t_d$

- Disappearance of interferences
- Measurements (and dynamics) in terms of classical probabilities
- ... **but in the system states that are the best « measured » by the environment the so-called pointer states (preferred basis) !**

(superselection rule)

Link between decoherence and « suppression »

Case B: compact state put in contact with environment...

Assumes preferred states : {eigenstates of the system Hamiltonian}

$$|\Psi\rangle = \underbrace{(\sqrt{p_{\text{GS}}}\psi_{\text{GS}} + \sqrt{p_1}\psi_1 + \dots)}_{|\psi\rangle} |E_0\rangle$$

$$\begin{aligned} \text{prob}(\text{GS}, t = 0) = p_{\text{GS}} &\longrightarrow \text{prob}(\text{GS}, t \gg t_d) = \text{tr}(\hat{\rho}_S(t) \cdot \hat{\rho}_{\text{GS}}) \\ &\approx \text{tr} \left(\begin{pmatrix} p_{\text{GS}} & 0 & 0 \\ 0 & p_1 & 0 \\ 0 & 0 & p_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right) \\ &\approx p_{\text{GS}} \end{aligned}$$

Decoherence : \neq suppression

: just « reveals » the various components of the initial eigenstate

Decoherence, syst-env. interaction, OQS

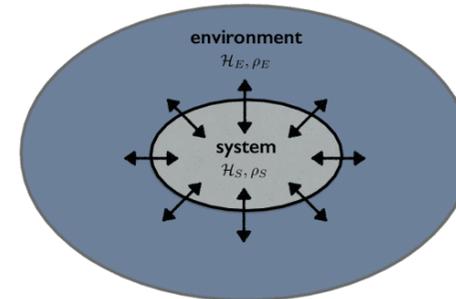
First conclusion from the study of usual decoherence scheme :

- ✓ Essential to characterize the « preferred states » : *maximally robust against decoherence*
- ✓ Need to (semi)-quantify the decoherence time

➔ Hamiltonian $\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{H}_{\text{int}}$

Interaction hamiltonian btwn S and E

Usual linear coupling: $\hat{H}_{\text{int}} = g \sum_a \hat{S}_a \otimes \hat{E}_a$



Time scales :

τ_S : Time scale associated to the system (indep. Environment)

$\tau_S \sim \frac{1}{\Delta E_S}$ \equiv Heisenberg time (mind if discrete states + continuous)
 Energy gap

τ_E : Time scale associated to the environment (indep. System)

$\tau_E \sim \frac{1}{T}$ (for instance)
 Temperature



τ_R : System relaxation time scale resulting from interaction with the env. (in general $\neq t_d$!)

When $\tau_E \ll \tau_S$: Environnement perçu par le système comme un ensemble de bruits aléatoires (chocs rapides)

Decoherence, syst-env. interaction, OQS

Standard textbook (M. Schlosshauer) results for OQS:

✓ 3 regimes :

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{H}_{int}$$

Name	condition	Consequence for Preferred States
quantum-measurement limit	Evolution of the system dominated by H_{int}	PS: eigenstates of H_{int} (often : \Leftrightarrow positions)
The intermediary regime	evolution of the system governed by H_{int} and H_S in roughly equal strengths	PS: localized in phase space, i.e., in both position and momentum
The quantum limit of decoherence.	The environment is slow and the Hamiltonian H_S dominates the evolution of the system	PS: Eigenstates of H_S

La décohérence (modèle simple)

Modèle simple...:

✓ On considère un spin plongé dans un champ magnétique aléatoire

✓ Le Hamiltonien s'écrit : $\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}(t) = \dots = \vec{f}(t) \cdot \vec{\sigma}$



« Force » aléatoire locale en temps

✓ Equation de Schrödinger *stochastique* : $i\hbar \frac{d\psi}{dt} = \hat{H}(t)\psi$

✓ Solution formelle : $\psi(t, \{\vec{f}\}) = \mathbf{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}(t')\right) \psi(0)$



Produit ordonné en temps

✓ Deux difficultés :

- Calcul concret pour une séquence de forces données.
- Comment se faire une vision “moyenne”



... solution pas si simple !

Deux moyennes : stochastique et quantique

La décohérence (modèle simple)

Opérateur densité:

- ✓ On définit l'opérateur $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$
- ✓ L'intérêt de cet opérateur est de pouvoir encoder plus simplement les moyennes

Moyenne quantique

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \rangle = \langle \text{tr}(\hat{O} \hat{\rho}) \rangle = \text{tr}(\hat{O} \langle \hat{\rho} \rangle)$$

↑
Moyenne sur les forces
stochastiques

- ✓ On peut donc gérer l'aspect "moyenne sur les forces stochastiques" en considérant l'opérateur densité "moyenné" $\langle \hat{\rho} \rangle$ et son évolution
- ✓ Evolution de $\hat{\rho}$:

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi\rangle\langle\psi| + \frac{i}{\hbar} |\psi\rangle\langle\psi| \hat{H} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{\rho} + \frac{i}{\hbar} \hat{\rho} \hat{H} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho} = \mathcal{N}(\hat{\rho})$$

Equation de Von Neumann

La décohérence (modèle simple)

Opérateur densité:

✓ Pour le spin :

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}^* & \psi_{\downarrow}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxed{\rho_{\uparrow}} & \psi_{\uparrow}\psi_{\downarrow}^* \\ \psi_{\uparrow}^*\psi_{\downarrow} & \boxed{\rho_{\downarrow}} \end{pmatrix}$$

Densité de spin up

Densité de spin down

La décohérence (modèle simple)

Opérateur densité:

✓ Pour le spin :

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}^* & \psi_{\downarrow}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{\uparrow} & \boxed{\psi_{\uparrow}\psi_{\downarrow}^*} \\ \boxed{\psi_{\uparrow}^*\psi_{\downarrow}} & \rho_{\downarrow} \end{pmatrix}$$

Terme d'interférence

Terme d'interférence

$$\langle\hat{\rho}\rangle = \begin{pmatrix} \langle\rho_{\uparrow}\rangle & \langle\psi_{\uparrow}\psi_{\downarrow}^*\rangle \\ \boxed{\langle\psi_{\uparrow}^*\psi_{\downarrow}\rangle} & \langle\rho_{\downarrow}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\hat{\rho}\rangle_{\uparrow} & \langle\hat{\rho}\rangle_{\uparrow\downarrow} \\ \langle\hat{\rho}\rangle_{\downarrow\uparrow} & \langle\hat{\rho}\rangle_{\downarrow} \end{pmatrix} \quad \text{où tous les termes sont considérés comme des moyennes stochastiques}$$

Plus factorisable

4 composantes

Equation dynamique pour $\langle\hat{\rho}\rangle$: besoin d'hypothèses physiques supplémentaires : variations rapides des forces et évolution "lente" de $\langle\hat{\rho}\rangle$

=> on va réaliser les moyennes stochastiques "localement en temps"

=> Besoin d'un développement à l'ordre 2 en temps pour intégrer les corrélations.

La décohérence (modèle simple)

Evolution à l'ordre 2:

✓ Développement Taylor : $\hat{\rho}(t + dt) = \hat{\rho}(t) + dt \frac{d\hat{\rho}}{dt} + \frac{dt^2}{2} \frac{d^2\hat{\rho}}{dt^2}$

✓ Avec : $\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]$

$$\frac{d^2\hat{\rho}}{dt^2} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \frac{d\hat{\rho}}{dt} + \frac{i}{\hbar} \frac{d\hat{\rho}}{dt} \hat{H}$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{\rho} + \frac{i}{\hbar} \hat{\rho} \hat{H} \right) + \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{\rho} + \frac{i}{\hbar} \hat{\rho} \hat{H} \right) \hat{H}$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \left(2\hat{H} \hat{\rho} \hat{H} - \hat{H}^2 \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{H}^2 \right)$$

 $\frac{d^2\hat{\rho}_{ij}}{dt^2} = \sum_{kl} \frac{1}{\hbar^2} \left(2\hat{H}_{ik} \hat{H}_{lj} \hat{\rho}_{kl} - (\hat{H}^2)_{ik} \delta_{jl} \hat{\rho}_{kl} - \hat{\rho}_{kl} \delta_{ik} (\hat{H}^2)_{lj} \right)$

$$= \sum_{kl} \frac{1}{\hbar^2} \left(2\hat{H}_{ik} \hat{H}_{lj} - (\hat{H}^2)_{ik} \delta_{jl} - \delta_{ik} (\hat{H}^2)_{lj} \right) \hat{\rho}_{kl}$$

✓ Moyennes stochastiques : $\langle \hat{H} \rangle = 0 \Rightarrow \langle [\hat{H}, \hat{\rho}] \rangle \Rightarrow \frac{d\langle \hat{\rho} \rangle}{dt} = 0$

La décohérence (modèle simple)

Evolution à l'ordre 2:

✓ Développement Taylor $\hat{\rho}(t + dt) = \hat{\rho}(t) + dt \frac{d\hat{\rho}}{dt} + \frac{dt^2}{2} \frac{d^2\hat{\rho}}{dt^2}$ Moyenne dépend des forces antérieurs à t

$$\langle \hat{\rho} \rangle_{ij}(t + dt) = \langle \hat{\rho} \rangle_{ij}(t) + \frac{dt^2}{2\hbar^2} \sum_{kl} \left(2\langle \hat{H}_{ik} \hat{H}_{lj} \rangle - \langle \hat{H}^2 \rangle_{ik} \delta_{jl} - \delta_{ik} \langle \hat{H}^2 \rangle_{lj} \right) \langle \hat{\rho} \rangle_{kl}(t)$$

$$\frac{d\langle \hat{\rho} \rangle_{ij}}{dt} = \frac{dt}{\hbar^2} \sum_{kl} \left(\langle \hat{H}_{ik} \hat{H}_{lj} \rangle - \frac{1}{2} \langle \hat{H}^2 \rangle_{ik} \delta_{jl} - \frac{1}{2} \delta_{ik} \langle \hat{H}^2 \rangle_{lj} \right) \langle \hat{\rho} \rangle_{kl}$$

✓ Il ne reste plus qu'à calculer : $\hat{H} = \vec{f}(t) \cdot \vec{\sigma} \Rightarrow \langle f_a f_b \rangle = \frac{\eta \hbar^2}{dt} \delta_{ab}$ où $[\eta] = s^{-1}$

$$\frac{dt}{\hbar^2} \langle \hat{H}^2 \rangle_{ik} = \eta \sum_{a,b} \delta_{ab} (\sigma^a \cdot \sigma^b)_{ik} = \eta \sum_a \underbrace{(\sigma^a \cdot \sigma^a)}_{=\mathbb{I}_2} = 3\eta \delta_{ik}$$

$$\frac{dt}{\hbar^2} \langle \hat{H}_{ik} \hat{H}_{lj} \rangle = \eta \sum_{a,b} \delta_{ab} \sigma_{ik}^a \sigma_{lj}^b = \eta \sum_a \sigma_{ik}^a \sigma_{lj}^a = \dots$$

Auto-corrélation des forces stochastiques

« diagonal »

La décohérence (modèle simple)

✓ Méta indices:

$$\langle \hat{\rho} \rangle = \begin{pmatrix} \langle \hat{\rho} \rangle_{\uparrow} & \langle \hat{\rho} \rangle_{\uparrow\downarrow} \\ \langle \hat{\rho} \rangle_{\downarrow\uparrow} & \langle \hat{\rho} \rangle_{\downarrow} \end{pmatrix} \rightarrow \eta \sum_a \sigma_{ik}^a \sigma_{lj}^a = \dots = \eta \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$\alpha = 1$ $\alpha = 3$
 $\alpha = 4$ $\alpha = 2$

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \\ \rho_4 \end{pmatrix} = \eta \begin{pmatrix} -2 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \\ \rho_4 \end{pmatrix}$$

← Termes « densité »
← Termes d'interférence

Solution des équations :

- ✓ Décroissance progressive des termes d'interférence : $\rho_{\uparrow\downarrow}(t) = e^{-4\eta t} \rho_{\uparrow\downarrow}(0)$
- ✓ Conservation de la norme : $\rho_{\uparrow}(t) + \rho_{\downarrow}(t) = \text{cst}$
- ✓ Mélange des populations : $\rho_{\uparrow}(t) - \rho_{\downarrow}(t) = e^{-2\eta t} (\rho_{\uparrow}(0) - \rho_{\downarrow}(0))$

La décohérence (modèle simple)

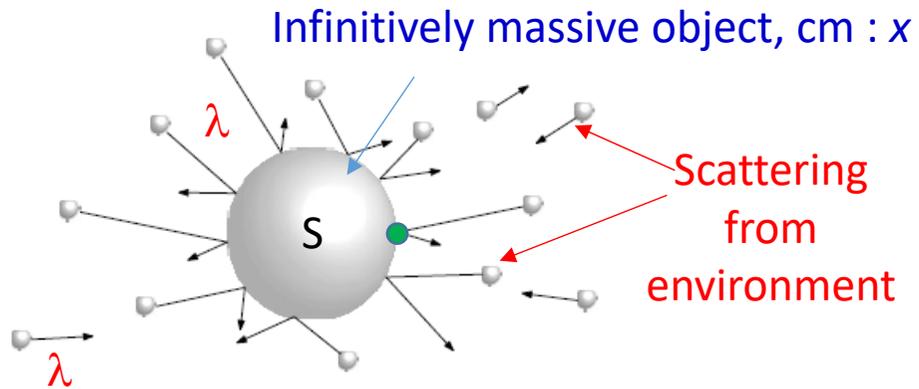
Solution des équations :

- ✓ État initial $|\psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$ \rightarrow $\langle\hat{\rho}\rangle(t=0) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$
- ✓ Après $t \gg \eta^{-1}$: $\langle\hat{\rho}\rangle(t) \approx \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$ Subsistance des seuls termes « classiques » (quoiqu'aléatoires): probabilité de trouver le spin up ou down
- ✓ Décohérence quantique \Leftrightarrow diffusion statistique.
- ✓ Comportement générique \Rightarrow aussi vrai dans le cas de 2 spins intriqués
- ✓ Toute la question est la maîtrise de l'échelle temporelle $1/\eta$ (temps de relaxation)

\rightarrow **Besoin d'un modèle plus réaliste**

Decoherence from syst-env. interaction

Quantitative model :



$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{H}_{\text{int}}$$

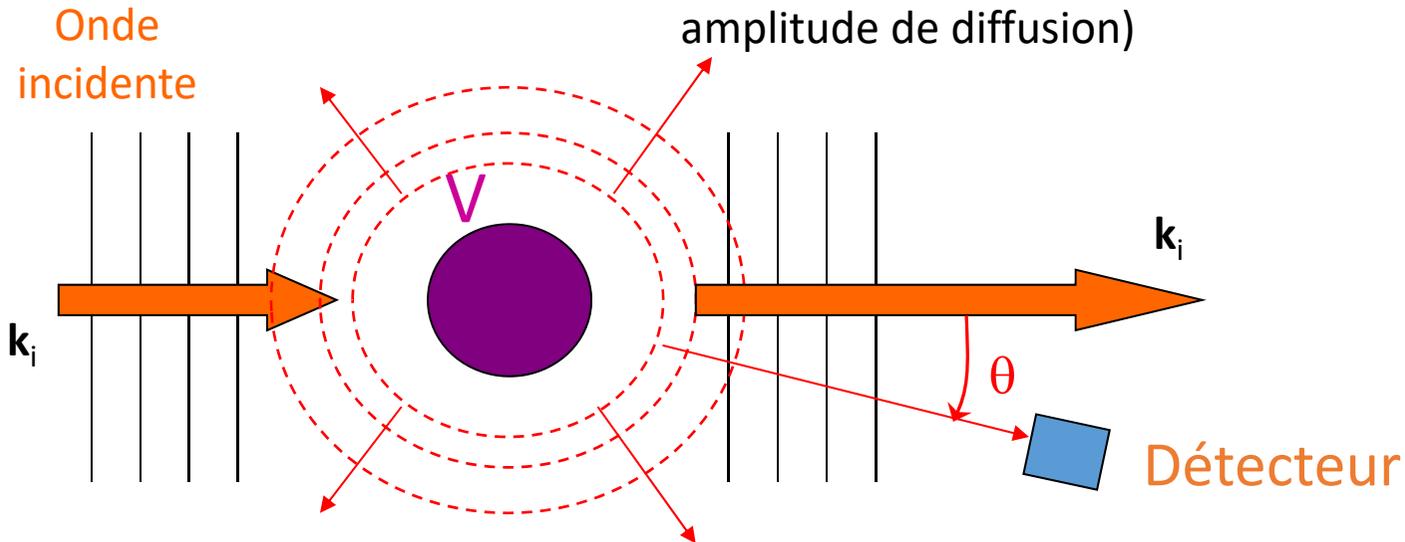
Reduced density matrix $\rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$

Some snapshots of the derivation...

Préalable: Théorie de la diffusion

Onde défléchie par le H_{int} ; on a $k = |\mathbf{k}_i|$ (conserv. Energ.)

(Onde sphérique modulée par le facteur directionnel f :
amplitude de diffusion)



Fonction d'onde stationnaire : $\psi \propto e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$

Vision dynamique : on transite en permanence depuis l'état initial (onde plane) -> état diffusé, avec un taux de collision régit par la *section efficace*.

Section efficace σ :

- ✓ nbre d'événements par unité de temps = flux de particules incidents Φ ($\text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$) $\times \sigma$ (m^2)
- ✓ σ Traduit donc l'ampleur de l'interaction
- ✓ Section efficace différentielle (par unité d'angle solide): $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2$

Préalable: Théorie de la diffusion

Diffusion d'un état entrant/initial en $t=-\infty$ \rightarrow un état sortant/final en $t=+\infty$:

$$|\text{in}\rangle \rightarrow |\text{out}\rangle = S|\text{in}\rangle$$

Définition de la matrice S .

L'évolution préserve la norme : $\langle \text{out} | \text{out} \rangle = \langle \text{in} | S^\dagger \cdot S | \text{in} \rangle = \langle \text{in} | \text{in} \rangle \Rightarrow S^\dagger \cdot S = \mathbb{I}$

On écrit : $S = \mathbb{I} + iT \Rightarrow$ l'unitarité entraîne alors $\hat{T}\hat{T}^\dagger + i(\hat{T} - \hat{T}^\dagger) = 0$.

Aucune diffusion
(vers l'avant)

Diffusion effective

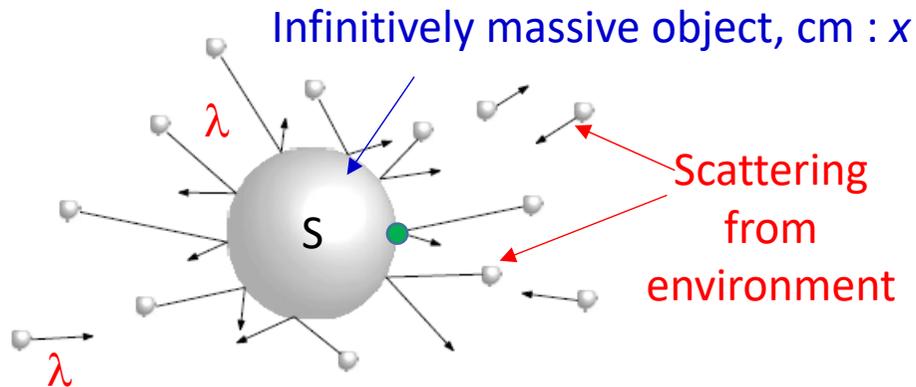
Transition de $q' \rightarrow q$

$$\langle q | \hat{T} | q' \rangle = \frac{i}{2\pi\hbar q} \delta(q - q') f(q, q') = \frac{i}{2\pi\hbar m} \delta(E - E') f(q, q')$$

Conservation de l'énergie (diffusion sur un objet massif)

Decoherence from syst-env. interaction

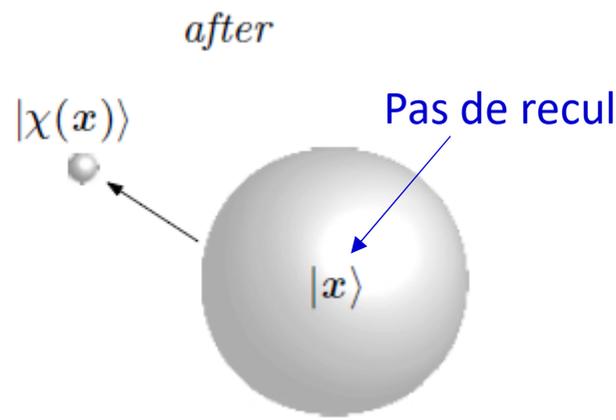
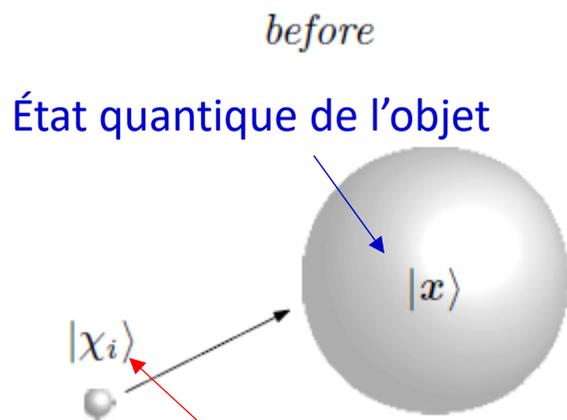
Quantitative model :



$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{H}_{\text{int}}$$

Reduced density matrix $\rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$

Some snapshots of the derivation...



État quantique de l'environnement; l'état final dépend de $|x\rangle$ (intrication !)

$$|x\rangle |\chi_i\rangle \longrightarrow \hat{S} |x\rangle |\chi_i\rangle = |x\rangle \hat{S}_x |\chi_i\rangle \equiv |x\rangle |\chi(x)\rangle \quad \text{avec} \quad \hat{S}_x \equiv e^{-i\hat{q}\cdot x/\hbar} \hat{S}_0 e^{i\hat{q}\cdot x/\hbar},$$

(translation de l'opérateur S_0 défini en $x=0$)

Decoherence from syst-env. interaction

opérateur densité
“avant collisions”:

$$\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\rho}_E(0) = \int dx \int dx' \rho_S(x, x', 0) \underbrace{|x\rangle\langle x'|}_{\text{système}} \otimes \underbrace{|\chi_i\rangle\langle\chi_i|}_{\text{Environ.}}$$

(pas d'intrication entre système et environnement)



opérateur densité
“après collisions”:

$$\hat{\rho} = \int dx \int dx' \rho_S(x, x', 0) |x\rangle\langle x'| \otimes |\chi(x)\rangle\langle\chi(x')|.$$

L'environnement emporte la cohérence du système



opérateur densité réduit
“après collisions”:

$$\hat{\rho}_S = \text{Tr}_E \hat{\rho} = \int dx \int dx' \rho_S(x, x', 0) |x\rangle\langle x'| \underbrace{\langle\chi(x')|\chi(x)\rangle}_{\text{Recouvrement}}$$

Recouvrement (Voir aussi planche 71)

Soit aussi

$$\rho_S(x, x', 0) \longrightarrow \rho_S(x, x', 0) \langle\chi(x')|\chi(x)\rangle$$

Il convient maintenant d'évaluer l'évolution du recouvrement...

Decoherence from syst-env. interaction

Modèle pour le recouvrement...

$$\langle \chi(x') | \chi(x) \rangle = \langle \chi_i | \hat{S}_{x'}^\dagger \hat{S}_x | \chi_i \rangle = \text{Tr}_E \left\{ \hat{\rho}_E(0) \hat{S}_{x'}^\dagger \hat{S}_x \right\} \quad \text{où} \quad \hat{\rho}_E(0) = |\chi_i\rangle \langle \chi_i|$$

État initial environnement

De manière plus générale: distribution de particules dans un volume V, avec densité de quantités de mouvement q :

$$\hat{\rho}_E(0) = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{q \in Q_V} \mu(q) |\tilde{q}\rangle \langle \tilde{q}|$$

$$\begin{aligned} \hookrightarrow \langle \chi(x') | \chi(x) \rangle &= \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{q \in Q_V} \mu(q) \langle \tilde{q} | \hat{S}_{x'}^\dagger \hat{S}_x | \tilde{q} \rangle = e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x} / \hbar} \times |\tilde{q}\rangle \\ &= \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{q \in Q_V} \mu(q) \langle \tilde{q} | e^{-i\hat{q} \cdot \mathbf{x}' / \hbar} \hat{S}_0^\dagger e^{-i\hat{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \hat{S}_0 e^{i\hat{q} \cdot \mathbf{x} / \hbar} | \tilde{q} \rangle \\ &= \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{q \in Q_V} \mu(q) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \langle \tilde{q} | \hat{S}_0^\dagger e^{-i\hat{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \hat{S}_0 | \tilde{q} \rangle. \end{aligned}$$

On insère ensuite $\hat{\mathbb{I}} = \sum_{q' \in Q_V} |\tilde{q}'\rangle \langle \tilde{q}'|$ dans la chaîne =>

$$\langle \tilde{q} | \dots | \tilde{q} \rangle = \sum_{q' \in Q_V} \langle \tilde{q} | \hat{S}_0^\dagger e^{-i\hat{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} | \tilde{q}' \rangle \langle \tilde{q}' | \hat{S}_0 | \tilde{q} \rangle = \sum_{q' \in Q_V} e^{-i\mathbf{q}' \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \underbrace{\langle \tilde{q} | \hat{S}_0^\dagger | \tilde{q}' \rangle \langle \tilde{q}' | \hat{S}_0 | \tilde{q} \rangle}_{\text{Probabilité de passage de } q \rightarrow q'}$$

Probabilité de passage de q->q' 89

Decoherence from syst-env. interaction

Modèle pour le recouvrement...

$$\langle \chi(x') | \chi(x) \rangle = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_V} \mu(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{q}' \in \mathbf{Q}_V} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar} |\langle \tilde{q}' | \hat{S}_0 | \tilde{q} \rangle|^2$$

Premier constat physique : x et x' balaient la densité définissant la position du cm de l'objet.
Plus l'extension sera grande et plus $|x-x'|$ sera grand \Rightarrow somme fortement oscillante \Rightarrow moyenne nulle \Rightarrow perte de coherence...

La coherence sur de grandes distance s'avère bcp plus "fragile"

On remplace maintenant $S_0 \rightarrow \mathbb{I} + iT$

$$\hookrightarrow |\langle \tilde{q}' | \hat{S}_0 | \tilde{q} \rangle|^2 = \underbrace{|\langle \tilde{q}' | \mathbb{I} | \tilde{q} \rangle|^2}_{\delta_{q,q'}} + i \underbrace{\langle \tilde{q} | \mathbb{I} | \tilde{q}' \rangle \langle \tilde{q}' | \hat{T} | \tilde{q} \rangle}_{\delta_{q,q'} T_{q,q}} - i \underbrace{\langle \tilde{q} | \hat{T}^\dagger | \tilde{q}' \rangle \langle \tilde{q}' | \mathbb{I} | \tilde{q} \rangle}_{\delta_{q,q'} T_{q,q}^\dagger} + |\langle \tilde{q}' | \hat{T} | \tilde{q} \rangle|^2$$

$$\hookrightarrow \sum_{\mathbf{q}' \in \mathbf{Q}_V} \dots = \boxed{1} + i (T - T^\dagger)_{q,q} + \sum_{\mathbf{q}' \in \mathbf{Q}_V} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar} \underbrace{|\langle \tilde{q}' | \hat{T} | \tilde{q} \rangle|^2}_{\propto \frac{d\sigma}{d\Omega}}$$

Pas d'évolution
(="avant")

$$= -(TT^\dagger)_{q,q} = -\sum_{\mathbf{q}' \in \mathbf{Q}_V} |\langle \tilde{q}' | \hat{T} | \tilde{q} \rangle|^2$$

Véritable diffusion

Decoherence from syst-env. interaction

Après – avant :

$$\begin{aligned}\Delta\rho_S &= -\rho_S(x, x') \times \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{q \in Q_V} \mu(q) (\langle \chi(x') | \chi(x) \rangle - 1) \\ &= -\rho_S(x, x') \times \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{q \in Q_V} \mu(q) \sum_{q' \in Q_V} \mu(q') \left(1 - e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar}\right) |\langle \tilde{q}' | \hat{T} | \tilde{q} \rangle|^2\end{aligned}$$

Trois opérations résiduelles :

➤ Passage au continu : $\frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{q \in Q_V} \rightarrow \int d\mathbf{q}$.

↳ $\rho_S(x, x', t) - \rho_S(x, x', 0) = -\rho_S(x, x', 0) \times \int d\mathbf{q} \mu(q) \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \int d\mathbf{q}' \left(1 - e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar}\right) |\langle \mathbf{q} | \hat{T} | \mathbf{q}' \rangle|^2$

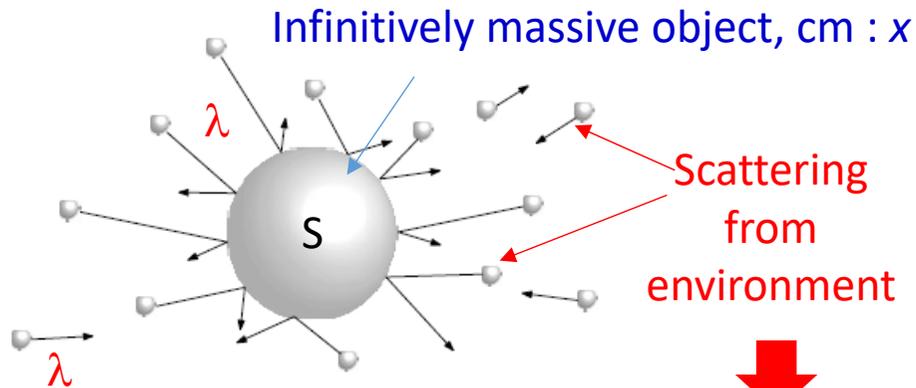
➤ expression des éléments de T : $\langle \mathbf{q} | \hat{T} | \mathbf{q}' \rangle = \frac{i}{2\pi\hbar m} \delta(E - E') f(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$

La $\delta^2(E-E') \rightarrow \delta(E-E') \times t$ (cf règle d'or de Fermi) \Rightarrow en divisant par t , on obtient un taux d'évolution de ρ_S . La $\delta(E-E')$ transcrit que **l'environnement n'emporte pas d'énergie au système... juste de la cohérence**

➤ Densité d'états : $\mu(\mathbf{q}) \equiv \frac{1}{4\pi} \left(\frac{N}{V}\right)^{-1} \varrho(\mathbf{q}) d\mathbf{q} d\hat{n}$ avec $\int d\mathbf{q} \rho(\mathbf{q}) =$ densité volumique₉₁

Decoherence from syst-env. interaction

Quantitative model :



$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{H}_{\text{int}}$$

Reduced density matrix $\rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$



Wigner density $W_S(\mathbf{X} = \frac{\mathbf{x} + \mathbf{x}'}{2}, p)$

Fourier conjugate of $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$

$$\frac{\partial \rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t)}{\partial t} = -F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t)$$

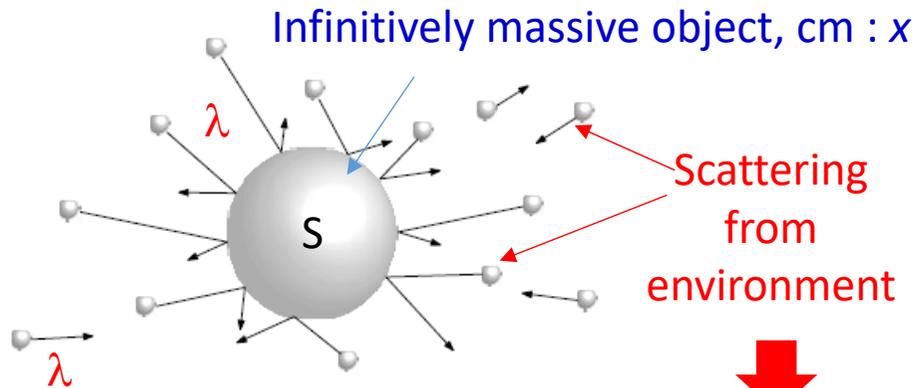
Decoherence factor:

$$F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \int dq \rho(q) v(q) \int \frac{d\hat{n} d\hat{n}'}{4\pi} \left(1 - e^{iq(\hat{n} - \hat{n}') \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \right) \underbrace{|f(q\hat{n}, q\hat{n}')|^2}_{\frac{d\sigma}{d\Omega(\hat{n}, \hat{n}')}}$$

Problem : check the dimension of F

Decoherence from syst-env. interaction

Quantitative model :



$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{H}_{\text{int}}$$

Reduced density matrix $\rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$



Wigner density $W_S(\mathbf{X} = \frac{\mathbf{x} + \mathbf{x}'}{2}, p)$

Fourier conjugate of $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$

$$\frac{\partial \rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t)}{\partial t} = -F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t)$$

Decoherence factor:

$$F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \int dq \rho(q) v(q) \int \frac{d\hat{n} d\hat{n}'}{4\pi} \left(1 - e^{iq(\hat{n} - \hat{n}') \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \right) \underbrace{|f(q\hat{n}, q\hat{n}')|^2}_{\frac{d\sigma}{d\Omega(\hat{n}, \hat{n}')}}^2$$

Short wave length ($\lambda \ll \Delta x$)

$$F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \Gamma_{\text{tot}}$$

Total collision rate

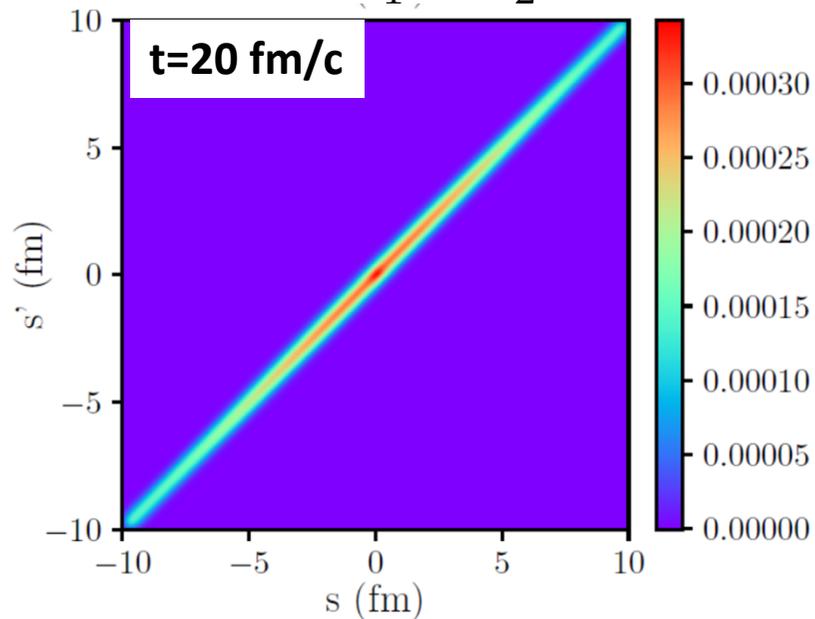
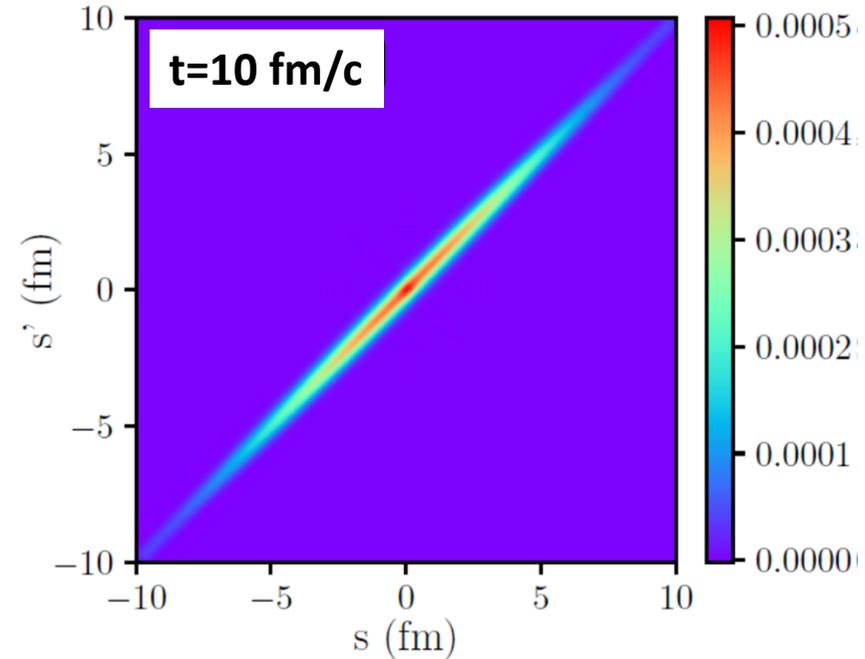
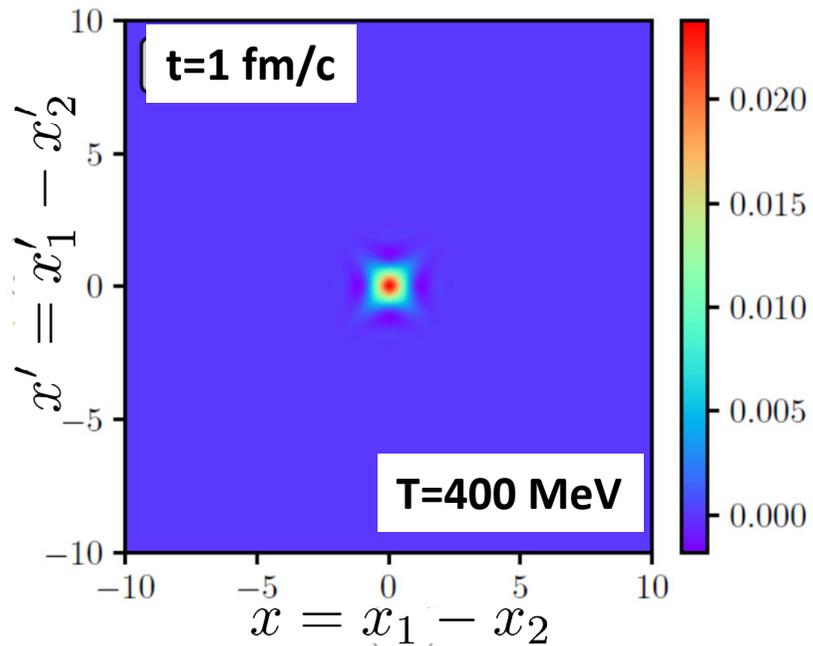
Long wave length ($\lambda \gg \Delta x$)

$$F \approx \int dq \rho(q) v(q) q^2 \sigma_{\text{transp}}(q) \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 \approx \kappa (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2$$

Supprime la coherence à grand $x-x'$: classicalisation

Standard textbook (M. Schlosshauer) results for OQS:

✓ Decoherence :



$$\rho_S(x, x', t) \sim \rho_S(x, x', 0) e^{-\Lambda(x-x')^2 t}$$

- Compactification along the short diagonal
= « classicalization »
- $t_d \sim \frac{1}{\kappa(\Delta x)^2} \sim \frac{1}{TM\eta_D(\Delta x)^2}$

Einstein relation

Single part. relaxation rate

$$t_d \sim \frac{\tau_R^{\text{single}}}{\frac{1}{\lambda_{th}^2}(\Delta x)^2} \sim \tau_R^{\text{single}} \times \left(\frac{\lambda_{th}}{\Delta x}\right)^2$$

Decoherence from syst-env. interaction

Quantitative model :

	Poussière (10^{-3} cm)	Agrégat moléculaire (10^{-5} cm)	Molécule complexe (10^{-6} cm)
Dans l'air	10^{-36} s	10^{-32} s	10^{-30} s
Vide de laboratoire (10^6 molécules par centimètre cube)	10^{-23} s	10^{-19} s	10^{-17} s
Vide parfait + éclairage solaire	10^{-21} s	10^{-17} s	10^{-13} s
Vide intergalactique + rayonnement 3 K	10^{-6} s	10^6 s ~ 11 jours	10^{12} s ~ 32 000 ans

E. Joos, H.D. Zeh, C. Kiefer, D. Giulini, K. Kupsch et I.O. Stamatescu, *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, Springer-Verlag, 1996. Deuxième édition : 2003. ([ISBN 3-540-00390-8](https://www.amazon.fr/Decoherence-and-the-Appearance-of-a-Classical-World-in-Quantum-Theory/dp/3540003908))

Chat de Schroedinger ?

Projets possibles :

- Approfondir l'un des cas du tableau ci dessus afin de comprendre l'ordre de magnitude du temps de décohérence
- Evolution d'un paquet d'onde pour un cas usuel de la mécanique quantique (en l'absence de potentiel, + potentiel harmonique) ... en présence d'interaction avec l'environnement.
- ... Conséquence du couplage à l'environnement pour votre système quantique favori

Decoherence, system-environment interaction, OQS

Limitation importante:

La décohérence ne résoud pas le problème des aspects aléatoires des “résultats” de mesures.

En gros, elle explique pourquoi le chat ne peut pas être vivant et mort à la fois, mais ne permet pas d'expliquer ce qui fait qu'on l'observe vivant ou mort !

Partie D : réponse aux problèmes

Th des perturbations dep du temps

1. Soit un dipôle plongé dans un champ électrique variable (périodique) dans le temps. On supposera ici que le dipôle est aligné sur E en permanence. La distance relative entre les charges + et – est décrite par un hamiltonien harmonique.
 - Quelle stratégie mettre en œuvre pour faire passer le dipôle dans son premier état excité ?
 - ... idem pour le 2^e état excité.
 - Estimer, pour une source réaliste, le temps associé au « cycle long » (cf approximation séculaire) en estimant que les transitions se font majoritairement entre l'état fondamental et le premier état excité.

N.B.: dans cet exercice, vous vous attacherez au calcul explicite des éléments W_{fi} .

Th des perturbations dep du temps

1. Soit une molécule associée à un dipôle électrique plongé dans un champ électrique variable (périodique) dans le temps. On supposera ici que le dipôle est aligné sur E en permanence. La distance relative entre les charges + et - est décrite par un hamiltonien harmonique.
 - Quelle stratégie mettre en œuvre pour faire passer le dipôle dans son premier état excité ?
 - ...

N.B.: dans cet exercice, vous vous attacherez au calcul explicite des éléments W_{fi} .

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2} \longrightarrow \phi_1(\xi) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} 2x e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2}$$

$$E_x(x, t) = E_0 \cos(k(x - ct))$$

$$= \frac{E_0}{2} \left(e^{ik(x-ct)} + e^{-ik(x-ct)} \right)$$

Terme le plus efficace pour faire passer de $E_i \rightarrow E_f > E_i$

Pour passage \rightarrow le premier état, l'optimum est donc de considérer $\omega \approx \omega_0$. La partie spatiale du potentiel vaut donc $E_0 \cdot d \exp(ikx) = E_0 q x (\cos(kx) + i \sin(kx))$

\Rightarrow Les éléments de transition s'écrivent donc :

$$W_{fi} = \frac{qE_0}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi_1^*(x) x (\cos(kx) + i \sin(kx)) \phi_0(x) \quad \text{Seul le cos contribue !}$$

Th des perturbations dep du temps

Du coup, effectuons quelques estimations. Pour une molécule, on va supposer une énergie

$$\hbar\omega_0 \approx 1 \text{ eV} \approx 2 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$\text{On a donc } \omega_0 \approx \frac{2 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{\hbar} \approx 2 \times 10^{15} \text{ s}^{-1} \Rightarrow k = \frac{\omega}{c} \approx \frac{2}{3} \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

Pour x , on a des tailles de l'ordre du nanomètre. Dès lors, on peut considérer, que l'argument du cos est quasi nul \Rightarrow

$$W_{fi} \approx \frac{qE_0}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi_1^*(x) x \phi_0(x)$$

Toutefois
$$x\phi_0(x) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} \phi_1(x) \Rightarrow W_{fi} \approx \frac{qE_0}{4} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi_1^*(x) \phi_1(x)}_{=1}$$

On sait par ailleurs que $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} = \sqrt{\langle x^2 \rangle_0}$, la taille du dipôle dans l'état fondamental.

On en déduit que $W_{1,0} \approx \frac{1}{4} \sqrt{\langle x^2 \rangle_0} q E_0$ Les transitions d'état pair \leftrightarrow impair se font donc de manière assez efficace.

Pour la transition de 0- \rightarrow 2, la piste naturelle consiste à appliquer une fréquence double. Dans l'intégrale sur x , le terme en $\cos(kx)$ engendre une contribution nulle. On doit alors explorer la contribution du terme en $\sin(kx)$, qui sera affecté par une « pénalité » $\propto \frac{k \langle x^2 \rangle_1}{\sqrt{\langle x^2 \rangle_0}}$ par rapport à la transition 0- \rightarrow 1.

D'autres idées ?

Th des perturbations dep du temps

Estimation réaliste de W_{10} : On suppose que la molécule possède un moment dipolaire de l'ordre de 1 Debye ($\approx 10^{-30}$ Cm). Soit une source de puissance P répartie sur une surface S. On peut par exemple considérer le cas d'un laser de puissance 100W dont le faisceau est réparti sur 1mm^2 , soit un flux de puissance de $\Phi \approx 10^8 \text{ W m}^{-2}$.

Ce flux est égal au vecteur de Poynting, qui représente typiquement la densité volumique de puissance électromagnétique ($\epsilon_0 E^2$) x vitesse de la lumière. On en déduit

$$E_0 \approx \sqrt{\frac{\Phi}{\epsilon_0 c}} \approx \frac{10^4}{\sqrt{8 \times 10^{-12} \times 3 \times 10^8}} \approx 0.2 \times 10^5 \text{ V} \cdot \text{m}^{-1}$$

Et donc

$$W_{1,0} \approx 10^{-30} \times 0.2 \times 10^5 \approx 2 \times 10^{-26} \text{ J.}$$

Le temps de cycle long vaut dès lors $\frac{\hbar}{W_{1,0}} \approx \frac{6 \times 10^{-34}}{2 \times 10^{-26}} \approx 3 \times 10^{-8} \text{ s}$

Problème : conséquence de la relaxation

On désire reprendre le problème de la transition induite entre 2 niveaux par application d'une perturbation harmonique, en supposant que l'état initial est l'état fondamental et en se plaçant dans les conditions de l'approximation séculaire... **tout en considérant (nouveau) que l'état excité peut subir une émission spontanée de rayonnement électromagnétique.**

On demande d'établir les équations d'évolution, de les résoudre, de commenter la physique et d'envisager les conséquences plus « technologiques » en vous plaçant dans le contexte de votre choix.

Problème : conséquence de la relaxation

- Soit un état fondamental $|0\rangle = |i\rangle \rightarrow |f\rangle$

$$\dot{b}_f = -\frac{i W_{fi}}{2\hbar} e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} b_i - \left(i\delta E + \frac{\Gamma}{2} \right) b_f \quad \dot{b}_i = -\frac{i W_{fi}^*}{2\hbar} e^{i(\omega-\omega_{fi})t} b_f$$

- On va absorber le nouveau terme en posant $\tilde{b}_f = e^{i(\delta E - i\frac{\Gamma}{2})t} b_f$ auquel cas la première équation se simplifie en

$$\dot{\tilde{b}}_f = -\frac{i W_{fi}}{2\hbar} e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} \times e^{i(\delta E - i\frac{\Gamma}{2})t} b_i$$

- On pose $\tilde{\omega}_{fi} = \frac{E_f + \delta E - i\frac{\Gamma}{2} - E_i}{\hbar}$, ce qui correspond à un état excité $|f\rangle$ dont l'énergie est déplacée dans le plan complexe. On a alors

$$\dot{\tilde{b}}_f = -\frac{i W_{fi}}{2\hbar} e^{i(\tilde{\omega}_{fi}-\omega)t} b_i$$

- Par ailleurs, on écrit

$$\dot{b}_i = -\frac{i W_{fi}^*}{2\hbar} e^{i(\omega-\omega_{fi})t} e^{-i(\delta E - i\frac{\Gamma}{2})t} \tilde{b}_f = -\frac{i W_{fi}^*}{2\hbar} e^{i(\omega-\tilde{\omega}_{fi})t} \tilde{b}_f$$

- On obtient ainsi un problème de la transition induite en remplaçant simplement $E_f \rightarrow E_f + \delta E - i\frac{\Gamma}{2}$

Problème : conséquence de la relaxation

- On adapte alors simplement la relation

$$\mathcal{P}_{if}(t; \omega) = \frac{|W_{if}|^2}{|W_{if}|^2 + \hbar^2(\omega - \omega_{fi})^2} \sin^2 \left[\sqrt{\frac{|W_{if}|^2}{\hbar^2} + (\omega - \omega_{fi})^2} \frac{t}{2} \right]$$

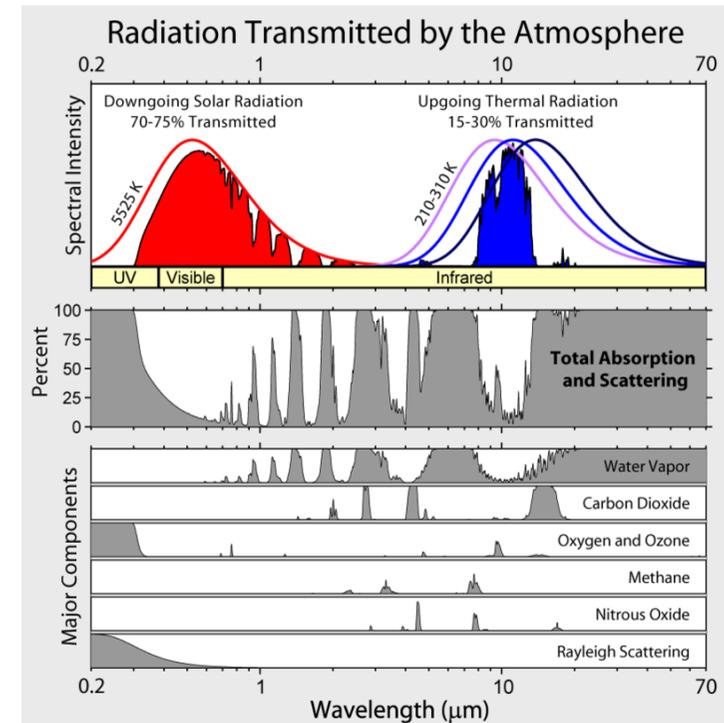
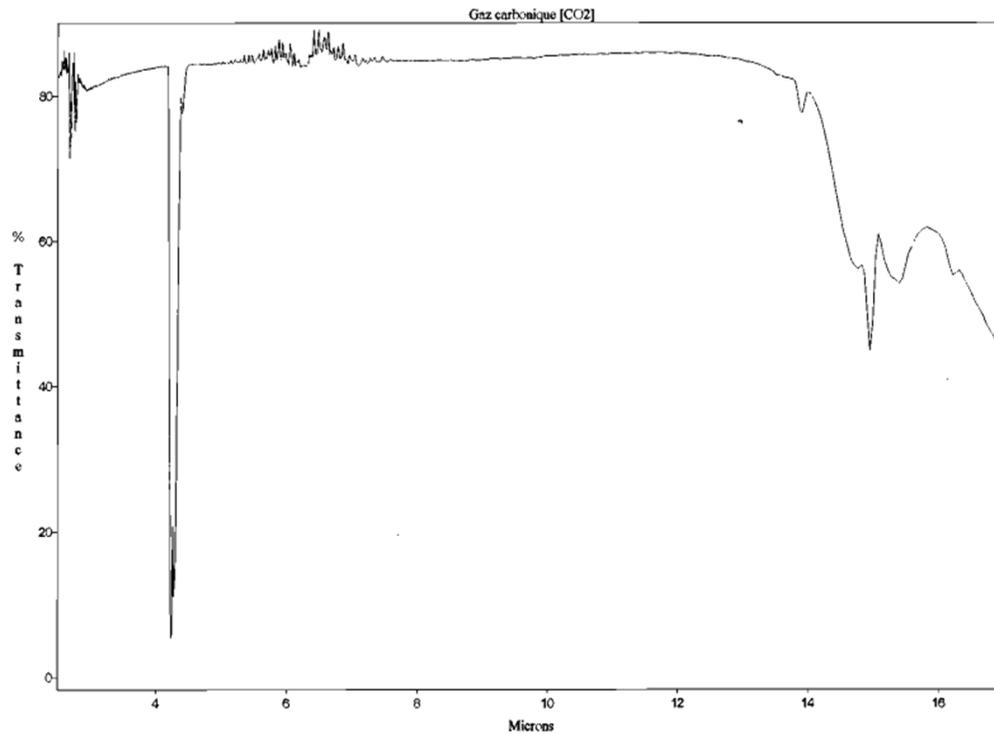
qui devient :

$$\mathcal{P}_{if}(t, \omega) = \frac{|W_{fi}|^2}{|W_{fi}|^2 + \frac{\hbar^2}{4}\Gamma^2 + (E_f + \delta E - E_i - \hbar\omega)^2} \times e^{-\Gamma t} \times \sin^2 \left[\sqrt{\frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} + \frac{\Gamma^2}{4} + (E_f + \delta E - E_i - \hbar\omega)^2} \frac{t}{2} \right]$$

- Principales modifications :
 - La fréquence optimale est modifiée à cause du shift (pas un grand souci).
 - Dans le cas où $|W_{fi}| \ll \hbar\Gamma$, la probabilité maximale de transition est fortement réduite et advient en un temps nettement inférieur (plus complexe à contrôler)

Problème : conséquence de la relaxation

- Application technologique : On peut reprendre le problème précédent pour une estimation de Γ , et s'inspirer de quelques spectres trouvés sur internet pour se faire une idée du temps de vie et du Γ associé :



$$\Delta\lambda \approx 0.1\mu\text{m} \Rightarrow \Delta k \approx \dots \Rightarrow \Delta\omega \approx \dots$$

\uparrow
 $\approx \Gamma$