

N° d'ordre 41/2012-M/PH

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
HOUARI BOUMEDIENNE
FACULTE DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de MAGISTER

En PHYSIQUE

Spécialité : Physique Théorique de la Matière et des Hautes Energies

Par : OUBAGHA Rabah

Sujet :

Décohérence et évolution du système quantique

Soutenu publiquement, le 16/05/2012, devant le Jury composé de :

M. Abdelhamid Kellou	Professeur à L'USTHB	Président
M. Mahmoud Hachemane	Professeur à L'USTHB	Directeur de Mémoire
M. Abdallah Smida	Professeur à L'USTHB	Examineur
M. Mourad Djebli	Professeur à L'USTHB	Examineur
M^{me}.Amel-Hiba Hamici	Maître de Conférences/ A, à L'USTHB	Examinatrice

Table des matières

1	INTRODUCTION	3
2	THÉORIE QUANTIQUE DE LA MESURE	6
2.1	Notions de base de la mécanique quantique	6
2.1.1	Base discrète	6
2.1.2	Base continue	7
2.2	Matrice densité	9
2.2.1	États purs	9
2.2.2	Mélanges statistiques	10
2.2.3	Mesure du degré de mélange	12
2.3	Intrication	13
2.4	Mesure en mécanique quantique	15
2.4.1	Mesure dans le formalisme de la matrice densité	15
2.4.2	Mesure et destruction de la cohérence	16
2.4.3	Théorie de la mesure dans le formalisme de Von-Neumann	18
2.4.4	Problème de la base préférée	20
3	Décohérence induite par l'environnement	22
3.1	Interaction environnement-système	22
3.2	Effet de l'environnement sur la mesure dans le formalisme de Von-Neumann	25
3.3	Application à un bain de spins	26
3.4	L'environnement induit la super-sélection	29
4	Évolution des systèmes quantiques ouverts	32
4.1	Équation maitresse	32
4.2	Équation de Lidnblad	36
4.2.1	Représentation de Kraus des super-opérateurs :	36
5	Évolution dans l'espace des phases	40
5.1	Application à un modèle canonique	40

<i>TABLE DES MATIÈRES</i>	2
5.2 Représentation espace des phases ordinaires	45
5.3 Mécanique Quantique Stochastique	48
5.4 Représentation espace des phases stochastique	50
6 conclusion	54
6.1 Définition d'une mesure mathématique	56
6.2 Définition d'un semi groupe	56
6.3 Propriétés Des super-opérateurs :	57
6.4 Espace des opérateurs linéaires et bornés	58
6.5 Équation de Born-Markov stochastique pour le mouvement Brownien	59

Chapitre 1

INTRODUCTION

L'école de Copenhague considère que l'appareil de mesure est un objet classique. Von-Neumann suit une autre alternative où il décrit ce dernier par un état quantique. Dans son modèle, Von-Neumann représente, en partie, la mesure comme la suppression non causale des termes d'interférences pour un développement de l'opérateur densité dans la base propre de l'observable mesurée [1,2]. On considère la mesure dans ce cas comme l'interaction entre le système physique et l'appareil de mesure, leurs état initial est représenté par le produit tensoriel de leur états quantique correspondants. Ce dernier suivra une évolution unitaire pour atteindre un état de pré-mesure marquant une intrication entre le système et l'appareil de mesure. Selon le postulat de Von-Neumann, juste après la pré-mesure, l'opérateur densité correspondant subira une disparition non causale de ses éléments hors diagonaux (ses cohérences).

Ceci a permis au phénomène de décohérence d'avoir un impact important dans l'interprétation des résultats de la mesure, car ce phénomène représente partiellement l'effondrement de la fonction d'onde lors de la mesure. Le mécanisme de ce phénomène trouve une explication dans l'idée, évoquée en 1970 par Zeh Deiter [3], que les systèmes quantiques macroscopiques sont ouverts. Cette idée n'a eu de succès qu'avec l'avènement des travaux de Zurek, où il considère le système physique comme un résidu de l'intrication avec l'environnement. L'idée de base dans ce modèle, est de considérer que le système physique et son environnement sont indissociables. L'état initial de l'ensemble est représenté par le produit tensoriel dont l'évolution unitaire est dominée essentiellement par le hamiltonien d'interaction, conduisant à une intrication du système physique avec son environnement. La décohérence apparaît ainsi comme une conséquence de l'orthogonalité des états de l'environnement, dans la description du système physique à part, en calculant la trace partielle de l'opérateur densité global par rapport à l'environnement.

Désormais le système physique sera considéré comme ouvert et non pas fermé.

Pour cela, toute description d'un tel système doit tenir compte de l'interaction

de ce dernier avec l'environnement possédant un grand nombre de degrés de liberté, que l'on représente ainsi par un état stationnaire. L'état du système est obtenu à partir de la trace partielle de la matrice densité globale, représentée dans le cadre de l'approximation de Born par le produit tensoriel des matrices densités du système et de l'environnement. Ce procédé fait apparaître l'effet de la décohérence à travers les fonctions de corrélation schématisant le caractère markovien de la description, nous décrivons les systèmes quantiques ouverts avec l'équation de Born-Markov qui est une généralisation de l'équation de Von-Neumann.

Une des méthodes les plus commodes pour représenter la décohérence dans l'espace des phases est de passer aux modèles canonique de la théorie, tel que le mouvement brownien quantique de l'oscillateur harmonique, dont l'évolution est régie par l'équation de Caldeira-Legget, représentée dans l'espace des phases par la fonction de Wigner. La fonction de Wigner est bonne d'un point de vue pratique, mais elle n'est pas toujours définie positive, ce qui nuit la définition d'une densité de probabilité. On espère y remédier en passant au formalisme de la mécanique quantique stochastique qui est une représentation généralisée de la mécanique quantique conventionnelle dans l'espace des phases. Cette représentation qui fournit une bonne densité de probabilité définie positive, est réalisée par des projections sur une base non orthogonale[4] assurant l'accord avec le principe d'incertitude de Heisenberg.

Dans le présent travail, nous avons repris l'étude de la décohérence sous sa forme classique et comme résultat de l'évolution des systèmes quantiques ouverts. Notre propre contribution est la constatation que l'équation de Caldeira-Legget demeure valable en théorie stochastique. Pour cela, nous avons organisé notre travail comme suit :

Le chapitre 2 représente une introduction au formalisme de la mesure pour l'opérateur densité, ainsi que la description du modèle de Von-Neumann qui repose sur l'intrication du système avec l'appareil de mesure représenté par un état quantique d'un seul degré de liberté. Dans le chapitre 3, on se propose d'étudier le mécanisme de la décohérence dans le formalisme de Zurek, ainsi que son apport dans la confirmation du modèle de Von-Neumann et la résolution de ses anomalies, tel que le problème de la base préférée au moyen de la super-sélection. De plus, on fera une application dans le cas d'un environnement décrit par un bain de spin. On passe par la suite à l'étude des systèmes ouverts en contact avec l'environnement par le biais de l'équation de Born-Markov qu'on établira au niveau du chapitre 4, ainsi que la représentation de Karus des super opérateurs. Dans la section 5.1 et 5.2, l'étude de la décohérence est abordée dans l'espace des phases, où on étudiera un des modèles canoniques de la théorie. Il s'agit du mouvement Brownien d'un oscillateur harmonique dont l'évolution est régie par l'équation de Caldeira-Legget qui est représentée

dans l'espace des phases par la fonction de Wigner. Au niveau de la section 5.4, on reprend l'étude du système précédent, dans le cadre de la mécanique quantique stochastique. On n'y fera que la projection de l'équation de Caldeira-Legget dans l'espace des phases stochastique dans le but de remplacer la fonction de Wigner par la densité de probabilité stochastique. En effet, cette dernière est définie-positive[4], contrairement à la fonction de Wigner. On termine par une conclusion.

Chapitre 2

THÉORIE QUANTIQUE DE LA MESURE

2.1 Notions de base de la mécanique quantique

Un système physique quantique est décrit par un vecteur d'état que l'on note $|\Psi\rangle$ (en notation de Dirac). L'ensemble des kets $\{|\Psi\rangle\}$ constitue un espace de Hilbert H doté d'un produit scalaire $\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle$ et d'une base. On distingue deux types de bases, la base discrète et la base continue.

2.1.1 Base discrète

La base $B = \{|\varphi_n\rangle\}$ à indice discret n est orthonormée.

$$\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm} \quad (2.1)$$

Elle vérifie la relation de fermeture, qui est une somme sur les projecteurs élémentaires orthogonaux P_n

$$\sum_{n=1}^{n=\dim H} P_n = \sum_{n=1}^{n=\dim H} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \mathbf{1}_H \quad (2.2)$$

$$P_n = |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| \quad (2.3)$$

Par conséquent, un ket $|\Psi\rangle$ se décompose dans B de la manière suivante :

$$|\Psi\rangle = \sum_n \langle\varphi_n|\Psi\rangle |\varphi_n\rangle = \sum_n C_n |\varphi_n\rangle \quad (2.4)$$

où $C_n = \langle \varphi_n | \Psi \rangle$. Le produit scalaire est alors donné par

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \sum_n C_{1n}^* C_{2n} \quad (2.5)$$

Pour construire une telle base, remarquons qu'à toute grandeur physique classique A , on associe en mécanique quantique un opérateur hermitique \hat{A} grâce à la règle de correspondance. Cet opérateur est appelé observable et ses vecteurs propres constituent une base dans H . Le vecteur $|\varphi_n\rangle$ est un vecteur propre de \hat{A} s'il vérifie l'équation aux valeurs propres

$$\hat{A} |\varphi_n\rangle = a_n |\varphi_n\rangle \quad (2.6)$$

Du point de vue interprétation physique[5,6], la quantité

$$p_n = \langle \Psi | P_n | \Psi \rangle = |C_n|^2 \quad (2.7)$$

est la probabilité que la mesure de la grandeur physique A donne la valeur a_n . Si cette valeur est effectivement obtenue, elle est considérée comme valeur réelle de A et le système physique est projeté (juste après la mesure) dans l'état $P_n | \Psi \rangle$.

$$|\Psi\rangle \rightarrow P_n |\Psi\rangle \quad (2.8)$$

C'est le postulat de la réduction du paquet d'onde $|\Psi\rangle$. L'un des buts de la théorie de la décohérence est l'explication partielle de cette réduction.

2.1.2 Base continue

La base $\{|\varphi_a\rangle \equiv |a\rangle\}$ à indice continu $a \in \mathbb{R}$ (on considère le cas à une dimension) est constituée des vecteurs propres de l'observable \hat{A}

$$\hat{A} |\varphi_a\rangle = a |\varphi_a\rangle \quad (2.9)$$

Cette fois-ci la relation de fermeture sera définie comme une somme continue sur les projecteurs élémentaires $P_a = |\varphi_a\rangle \langle \varphi_a|$

$$\int da |\varphi_a\rangle \langle \varphi_a| = \mathbf{1}_H \quad (2.10)$$

Par conséquent, la décomposition d'un ket $|\Psi\rangle$ sera donnée par

$$|\Psi\rangle = \int da \Psi(a) |\varphi_a\rangle, \quad \Psi(a) = \langle \varphi_a | \Psi \rangle \quad (2.11)$$

Le produit scalaire est alors donné par

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int da \Psi_1^*(a) \Psi_2(a) \quad (2.12)$$

Le module au carré $|\Psi(a)|^2 = \langle \Psi | P_a | \Psi \rangle$ de l'amplitude $\Psi(a)$ représente la densité de probabilité que la mesure de la grandeur A donne une valeur entre a et $a + da$. Comme dans le cas discret, si la mesure donne la valeur a , celle-ci est interprétée comme valeur réelle de A et l'état $|\Psi\rangle$ sera projeté sur l'état $P_a |\Psi\rangle$ (non normalisés, car cela nous sera utile pour les développements futurs)

$$|\Psi\rangle \rightarrow P_a |\Psi\rangle \quad (2.13)$$

Cependant, comme les vecteurs $|\varphi_a\rangle$ n'appartiennent pas à l'espace de Hilbert des états physiques, les expressions $\langle \Psi | P_a | \Psi \rangle$ et $P_a |\Psi\rangle$ ne sont que formelles. Pour décrire les probabilités d'une manière rigoureuse, on ne doit pas s'intéresser aux densités de probabilité définies en un point, mais aux probabilités définies sur une région B . Pour cela, associons à chaque région B de \mathbb{R}^3 l'opérateur $E^A(B)$

$$[E^A(B)\Psi](a) = \chi_B(a) \Psi(a) \quad (2.14)$$

défini au moyen de la fonction caractéristique[2]

$$\chi_B(a) = \begin{cases} 1 & \text{si } a \in B \\ 0 & \text{si } a \notin B \end{cases} \quad (2.15)$$

La probabilité pour que a appartienne à B sera alors définie comme la valeur moyenne du projecteur $E^A(B)$ dans un état normalisé

$$P_\Psi(B) = \langle \Psi | E^A(B) | \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(a) [E^A(B)\Psi](a) dx = \int_B |\Psi(a)|^2 da \quad (2.16)$$

La fonction d'ensemble

$$E^A : B \rightarrow E^A(B) \quad (2.17)$$

qui associe à chaque sous-ensemble B l'opérateur $E^A(B)$ est appelée mesure à valeur opératorielle projective (mesure PV, de l'anglais projector valued measure). En effet, chaque opérateur $E^A(B)$ est un opérateur de projection et peut s'écrire formellement comme une intégrale des projecteurs élémentaires

$$E^A(B) = \int_B P_a da \quad (2.18)$$

Aussi, cette application vérifie les propriétés d'une mesure :

Ces propriétés traduisent le fait que $\langle \Psi | E^A(B) | \Psi \rangle$ soit une probabilité. Cette mesure est appelé système d'imprimitivité si elle vérifie la propriété de covariance suivante vis-à-vis d'un groupe de symétrie G du système physique :

$$\begin{aligned} U(g) E^A(B) U^{-1}(g) &= E^A(gB) \\ gB &= \{ga/a \in B\}, \quad g \in G \end{aligned} \quad (2.19)$$

Cette dernière propriété traduit l'invariance de la probabilité $\langle \Psi | E^A(B) | \Psi \rangle$ quand la région B est transformée par un élément g du groupe et l'état $|\Psi\rangle$ par l'opérateur $U(g)$ (la représentation du groupe).

2.2 Matrice densité

La décohérence provient de l'interaction du système physique avec l'environnement qui possède un très grand nombre de degrés de liberté. Dans ce cas, le formalisme de Dirac devient insuffisant et le formalisme de la matrice densité est plus adéquat. Présentons ce formalisme pour les états purs et les mélanges.

2.2.1 États purs

Considérons un système physique décrit à l'instant t par le vecteur d'état

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |S_n\rangle \quad (2.20)$$

dont l'évolution en fonction du temps est donnée par l'équation de Schrödinger

$$i \hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle \quad (2.21)$$

où $H(t)$ est l'hamiltonien du système. On cherche l'évolution en fonction du temps de l'opérateur densité $\rho(t)$ défini par

$$\rho(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| \quad (2.22)$$

$$= \sum_{mn} c_m^*(t) c_n(t) |S_n\rangle \langle S_m| \quad (2.23)$$

A partir de l'équation de Schrödinger, on obtient l'évolution au cours du temps de $\rho(t)$, (c'est l'équation de Von-Neumann)[5]

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = \left(\frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle \right) \langle \Psi(t)| + |\Psi(t)\rangle \frac{d}{dt} \langle \Psi(t)| = \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)] \quad (2.24)$$

L'opérateur densité est un projecteur car il est hermitique et idempotent

$$\rho^\dagger(t) = \rho(t) \quad (2.25)$$

$$\rho^2(t) = \rho(t) \quad (2.26)$$

Notons que l'idempotence (et donc la projection orthogonale) est une propriété des états purs qui cessera d'être valable pour les mélanges qui seront décrits dans le sous-paragraphe suivant.

Les éléments de matrice de cet opérateur sont

$$\rho_{mn}(t) = \langle S_m | \rho(t) | S_n \rangle = c_m^*(t) c_n(t) \quad (2.27)$$

Notons que les éléments diagonaux représentent les probabilités des différents résultats de mesure de la grandeur physique A (dont les vecteurs propres sont les $|\varphi_n\rangle$)[5]. La conservation de la probabilité $\sum_n |c_n(t)|^2 = 1$ s'écrit alors comme suit :

$$\text{tr}(\rho) = \sum_n \rho_{nn}(t) = \sum_n P_n = 1 \quad (2.28)$$

où tr désigne la trace. L'élément de matrice ρ_{mn} représente l'interférence entre les états $|S_m\rangle$ et $|S_n\rangle$ dans l'état $|\Psi(t)\rangle$: si cet élément n'est pas nul, l'état $|\Psi(t)\rangle$ est une combinaison linéaire cohérente des états $|S_m\rangle$ et $|S_n\rangle$. Quand il devient nul sans l'avoir été au préalable, la cohérence est perdue et on parle de décohérence.

La valeur moyenne d'une observable \hat{B} vérifie la relation suivante :

$$\langle \hat{B} \rangle(t) = \langle \Psi(t) | \hat{B} | \Psi(t) \rangle = \sum_{nm} \rho_{mn}(t) B_{nm} = \text{tr}(\rho \hat{B}) \quad (2.29)$$

Appliquée au projecteur élémentaire $\hat{P}_n^B = |\varphi_n^B\rangle \langle \varphi_n^B|$ correspondant aux vecteurs propres $|\varphi_n^B\rangle$ de \hat{B} , cette relation nous donne la probabilité d'obtenir comme résultat de mesure la valeur propre b_n de \hat{B}

$$p(b_n) = \langle \Psi(t) | \hat{P}_n^B | \Psi(t) \rangle = \text{tr}(\hat{P}_n^B \rho) \quad (2.30)$$

2.2.2 Mélanges statistiques

Dans le cas d'un mélange, le système ne sera pas décrit par un seul vecteur d'état mais par plusieurs vecteurs d'états purs $\{|\Psi_k\rangle\}$ pondérés par des probabilités classiques ω_k . On définit alors un opérateur densité élémentaire $\rho_k(t) = |\Psi_k(t)\rangle \langle \Psi_k(t)|$ pour chaque $|\Psi_k(t)\rangle$. Cet opérateur vérifie les relations précédentes des matrices densité des états purs.

Montrons que l'expression de la matrice densité globale $\rho(t)$ du système est une conséquence de la relation [5] en notant $p_k(a_n) = \langle \Psi_k | \hat{P}_n | \Psi_k \rangle$ la probabilité que la mesure de l'observable \hat{A} donne la valeur propre a_n , quand le système est dans l'état $|\Psi_k\rangle$ [5]. Si le système est dans l'un de ces états mais avec une probabilité ω_k , la probabilité que la mesure donne une valeur propre a_n est

$$p(a_n) = \sum_k \omega_k p_k(a_n) \quad (2.31)$$

avec

$$0 \leq \omega_k \leq 1, \quad \sum_k \omega_k = 1 \quad (2.32)$$

D'après la définition $p_k(a_n) = \text{tr}(\hat{P}_n \rho_k)$ de la probabilité des états purs et la linéarité de la trace, on obtient

$$p(a_n) = \text{tr}\left(\hat{P}_n \sum_k \omega_k \rho_k\right) = \text{tr}\left(\hat{P}_n \rho\right) \quad (2.33)$$

où ρ est la matrice densité globale du système

$$\rho = \sum_k \omega_k \rho_k \quad (2.34)$$

La valeur moyenne d'une observable \hat{A} est donnée par

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_n a_n p(a_n) \quad (2.35)$$

$$= \text{tr}\left(\sum_n a_n \hat{P}_n \rho\right) \quad (2.36)$$

La décomposition spectrale $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$, qui découle du fait que \hat{A} est diagonal dans sa base propre, permet de retrouver le même résultat que pour les états purs

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{tr}(\rho \hat{A})$$

Cependant, un mélange diffère d'un état pure par le fait que $\rho^2 \neq \rho$, ce qui conduit à

$$\text{tr} \rho^2 \leq \text{tr} \rho = 1$$

Une autre manière de distinguer les deux cas utilise la convexité de l'ensemble $S(H)$ des opérateurs densité : si ρ_1 et ρ_2 sont des opérateurs densité, alors leur combinaison

linéaire convexe

$$\rho = \lambda \rho_1 + (1 - \lambda) \rho_2, \quad \lambda \in [0, 1]$$

est aussi un opérateur densité. Pour un état pur ρ , cette décomposition n'est possible que si $\rho = \rho_1 = \rho_2$, ce qui signifie qu'un mélange d'états purs est statistiquement identique aux deux sous-ensembles d'états purs qui le composent. Les états purs se trouvent sur la frontière de $S(H)$.

2.2.3 Mesure du degré de mélange

En vertu des propriétés évoquées plus haut, la matrice densité d'un système pur se réduit à un simple projecteur, associé à la fonction d'onde $|\Psi\rangle$ sensée décrire le système, ce qui suggère l'acquisition d'un maximum d'informations concernant le système.

La conservation des probabilités nous permet d'écrire

$$\zeta = \text{tr}(\rho^2) = \text{tr}(\rho) = 1 \tag{2.37}$$

où ζ est la pureté du système[7].

Dans le cas d'un mélange :

$$\zeta = \text{tr}(\rho^2) = \sum_{k=1}^N P_k^2 \leq 1 \tag{2.38}$$

Dans le cas d'un mélange maximal, notre ignorance sur l'état du système est optimale, on prend donc $P_k = \frac{1}{N}$ d'où

$$\frac{1}{N} \leq \zeta \leq 1 \tag{2.39}$$

on remarque que plus la valeur numérique de ζ est maximale (proche de 1), plus notre connaissance du système est meilleure, ce qui n'est pas le cas pour l'entropie, donnée par[7]

$$\hat{S}(\rho) = \text{tr}(\rho \log(\rho)) = \sum_k \lambda_k \log(\lambda_k) \tag{2.40}$$

Pour un état pur $\hat{S}(\rho) = 0$. Pour un mélange équiprobable maximale $\hat{S}(\rho) = \log(N)$. On remarque bien que l'entropie représente le manque d'information, qui est une sorte de désordre quantique.

Les états qui ne sont pas purs peuvent être des mélanges au sens propre du terme ou des mélanges impropres que nous introduisons à travers l'intrication.

2.3 Intrication

On considère deux systèmes physiques A et B décrits respectivement par $|\Psi_A\rangle$ et $|\Psi_B\rangle$. Dans la base $\{|\varphi_n^A\rangle\}$ de H_A , l'état $|\Psi_A\rangle$ se décompose en

$$|\Psi_A\rangle = \sum_n c_n^A |\varphi_n^A\rangle \quad (2.41)$$

De même, l'état $|\Psi_B\rangle$ se décompose dans la base $\{|\varphi_m^B\rangle\}$ de H_B en

$$|\Psi_B\rangle = \sum_m c_m^B |\varphi_m^B\rangle \quad (2.42)$$

Le système total $S = A + B$ est dit non intriqué si on peut écrire sa fonction d'onde sous la forme d'un produit tensoriel

$$|\Psi\rangle = |\Psi_A\rangle \otimes |\Psi_B\rangle = \sum_{n,m} c_n^A c_m^B |\varphi_n^A\rangle |\varphi_m^B\rangle \quad (2.43)$$

Aussi, la matrice densité est un produit tensoriel

$$\rho = |\Psi\rangle \langle\Psi| = |\Psi_A\rangle \langle\Psi_A| \otimes |\Psi_B\rangle \langle\Psi_B| = \rho_A \otimes \rho_B \quad (2.44)$$

Ceci n'est pas toujours le cas car, d'une manière générale, l'état quantique décrivant le système S appartient à l'espace $H = H_A \otimes H_B$ et doit s'écrire

$$|\Psi\rangle = \sum_{n,m} c_{nm} |\varphi_n^A\rangle |\varphi_m^B\rangle \quad (2.45)$$

$$\rho = \sum_{nmpq} c_{nm} c_{pq}^* |\varphi_n^A\rangle \langle\varphi_p^A| |\varphi_m^B\rangle \langle\varphi_q^B| \quad (2.46)$$

Il est toujours possible de réaliser une diagonalisation (de Schmidt) de ce vecteur par un changement de base. Dans sa formulation générale, la décomposition de Schmidt[8] conduit à

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle |v_i\rangle \quad (2.47)$$

au moyen des transformations unitaires suivantes :

$$|u_i\rangle = \sum_n S_{in} |\varphi_n^A\rangle \quad (2.48)$$

$$|v_i\rangle = \sum_m T_{im} |\varphi_m^B\rangle \quad (2.49)$$

d'où la relation entre les coefficients c_i de la décomposition de Schmidt et les coefficients c_{nm}

$$c_{nm} = \sum_i c_i S_{in} T_{im} \quad (2.50)$$

On voit bien que l'état non intriqué correspond au cas particulier où la somme précédente ne contient qu'un seul terme (tous les c_{nm} se factorisent).

La plupart des états sont donc intriqués et ceci a des conséquences physiques très importantes car chaque sous-système influence l'autre même s'ils ne sont pas en interaction.

Pour montrer que la diagonalisation est toujours possible, considérons d'abord la sommation sur m dans [8] pour obtenir l'état [8]

$$|\phi_n\rangle = \sum_m c_{nm} |\varphi_m^B\rangle \in H_B \quad (2.51)$$

Alors,

$$|\Psi\rangle = \sum_n |\varphi_n^A\rangle |\phi_n\rangle \quad (2.52)$$

$$\rho = \sum_{nm} |\varphi_n^A\rangle \langle \varphi_m^A| \otimes |\phi_n\rangle \langle \phi_m| \quad (2.53)$$

L'état de A est décrit par la densité réduite ρ_A qui n'est autre que la trace partielle de la densité totale ρ par rapport à B [8]

$$\rho_A = tr_B(\rho) = \sum_k \langle \varphi_k^B | \rho | \varphi_k^B \rangle \quad (2.54)$$

$$= \sum_{nmk} |\varphi_n^A\rangle \langle \varphi_m^A| \langle \phi_n | \varphi_k^B \rangle \langle \varphi_k^B | \phi_m \rangle \quad (2.55)$$

La relation de fermeture sur $|\varphi_k^B\rangle$ conduit à

$$tr_B(\rho) = \sum_{nm} |\varphi_n^A\rangle \langle \varphi_m^A| \langle \phi_n | \phi_m \rangle \quad (2.56)$$

On peut toujours choisir la base $|\varphi_n^A\rangle$ de manière à diagonaliser ρ_A

$$\rho_A = tr_B(\rho) = \sum_n p_n |\varphi_n^A\rangle \langle \varphi_n^A| \quad (2.57)$$

Les deux dernières relations montrent que les états $|\phi_n\rangle$ doivent être orthogonaux

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = p_n \delta_{nm} \quad (2.58)$$

Après normalisation

$$|\phi_n^B\rangle = \frac{1}{\sqrt{p_n}} |\varphi_n\rangle \quad (2.59)$$

l'état du système s'écrit sous la forme de Schmidt

$$|\Psi\rangle = \sum_n \sqrt{p_n} |\varphi_n^A\rangle |\phi_n^B\rangle \quad (2.60)$$

La matrice densité ρ sera donnée par

$$\rho = |\Psi\rangle \langle\Psi| = \sum_{mn} \sqrt{p_m p_n} |\varphi_m^A\rangle \langle\varphi_n^A| \otimes |\phi_m^B\rangle \langle\phi_n^B| \quad (2.61)$$

Le fait que la matrice densité $\rho_A = \sum_i p_i |\varphi_i^A\rangle \langle\varphi_i^A|$ de A soit la matrice réduite du système total, obtenue en calculant la trace partielle par rapport à la base de B , signifie que l'état de A est un mélange, mais "*impropre*", car cette expression n'est pas intrinsèque au système A . C'est-à-dire que la matrice ρ_A contient l'information de l'interaction de A avec B , et ne décrit pas A comme s'il était seul (contrairement à un mélange propre où les p_i ne représentent pas le nombre de copies de A qui sont dans la même état $|\varphi_i^A\rangle$).

2.4 Mesure en mécanique quantique

2.4.1 Mesure dans le formalisme de la matrice densité

Cas simple On considère un système physique décrit par un ket $|\Psi\rangle$ dans la base propre d'une observable \hat{A} :

$$|\Psi\rangle = c_1 |a_1\rangle + c_2 |a_2\rangle \quad (2.62)$$

La matrice densité de ce système est donnée dans la base $\{|a_1\rangle, |a_2\rangle\}$ par

$$\rho = |\Psi\rangle \langle\Psi| = \begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1 c_2^* \\ c_1^* c_2 & |c_2|^2 \end{pmatrix} \quad (2.63)$$

on considère la matrice ρ' donnée par

$$\rho' = \begin{pmatrix} |c_1|^2 & 0 \\ 0 & |c_2|^2 \end{pmatrix} \quad (2.64)$$

on appelle "décohérence" le passage[2] :

$$\rho \longrightarrow \rho' \quad (2.65)$$

Cas général On considère un système physique décrit par la matrice densité

$$\rho = |\Psi\rangle \langle\Psi| \quad (2.66)$$

$$= \sum_k b_k |S_k\rangle \langle S_k| \quad (2.67)$$

On cherche à mesurer l'observable \hat{A} dont la base propre est $\{|a_k\rangle\}_{k=1,\dots,N}$ et les projecteurs orthogonaux appropriés sont $\{P_k = |a_k\rangle \langle a_k|\}_{k=1,\dots,N}$. La probabilité que la mesure de l'observable \hat{A} donne une valeur propre a_k est

$$p_k = \text{tr}(P_k \rho) \quad (2.68)$$

Juste après cette mesure, la matrice densité devient

$$\rho_k = \frac{P_k \rho P_k}{\text{tr}(P_k \rho)} \quad (2.69)$$

Le postula de Von-Neumann décrit l'état global du système par ρ' après la mesure par

$$\rho' = \sum_k P_k \rho P_k \quad (2.70)$$

qui s'écrit dans la base propre de \hat{A}

$$\rho' = \sum_k |c_k|^2 |a_k\rangle \langle a_k| \quad (2.71)$$

On appelle processus de réduction ou décohérence le passage[2] :

$$\rho \longrightarrow \rho' \quad (2.72)$$

Afin de donner une explication à ce passage, on doit étudier la corrélation du système avec d'autres systèmes tels que l'appareil de mesure et l'environnement.

2.4.2 Mesure et destruction de la cohérence

Avant d'aborder le modèle de Von-Neumann, il serait intéressant de visualiser le côté phénoménologique de la décohérence. L'exemple instructif auquel on va s'intéresser est la fameuse expérience des fentes de Young. On utilise le dispositif

des fentes de Young pour des ondes atomiques émises par une source S [9]. On met au niveau de chaque fente $F1$ et $F2$ une cavité supra-conductrice qui sert à détecter le photon émis par l'atome lors de sa dés-excitation durant son passage par l'une des deux fentes, cette dernière est induite par un faisceau laser situé entre la source S et le plan contenant les deux fentes. Il est important de noter que l'excitation ne modifie pas la trajectoire de l'atome, car sa grande inertie due à sa masse rend l'énergie de recul négligeable.

Notons $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ les états quantiques associés au passage de l'atome par les fentes $F1$ et $F2$ respectivement. L'état quantique du système sera ainsi donné par

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle] \quad (2.73)$$

la probabilité de détecter l'atome sur l'écran en une abscisse x donnée est

$$p(x) = \langle x|\rho|x\rangle = |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + 2\text{Re}[\psi_1^*(x)\psi_2(x)] \quad (2.74)$$

Les deux premiers termes $|\psi_1(x)|^2$ et $|\psi_2(x)|^2$ représentent les probabilités de détecter l'atome en un point x sur l'écran en passant par la fente $F1$ ou $F2$, respectivement. Le dernier terme qui représente la cohérence des deux paquets d'ondes $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$ est responsable de leur interférence. Notons que $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont orthogonaux, car leurs fonctions d'ondes ne se recouvrent pas les deux fentes étant bien discernables.

On se place maintenant dans le cas du dispositif des fentes de Young avec cavités, où on introduit les états quantiques $|a_1\rangle$ et $|a_2\rangle$ qui représentent la détection du photon émis par l'atome dans les fentes $F1$ et $F2$, respectivement. L'état quantique du système total (atome + photon) sera décrit par :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\psi_1\rangle \otimes |a_1\rangle + |\psi_2\rangle \otimes |a_2\rangle] \quad (2.75)$$

La matrice densité réduite de l'atome, prend donc la forme

$$\rho_{\text{atome}} = \text{tr}_{\text{photon}}(\rho_{\text{total}}) \quad (2.76)$$

qui s'écrit, dans la base $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$ comme :

$$\rho_{\text{atome}} = \begin{bmatrix} 1/2 & \langle a_1|a_2\rangle \\ \langle a_1|a_2\rangle & 1/2 \end{bmatrix} \quad (2.77)$$

Les termes hors diagonaux sont les garants de la cohérence des deux états $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ schématisée par la figure d'interférence.

On remarque que pour la valeur $\langle a_1|a_2\rangle = 0$, la figure d'interférence disparaît et elle est parfaitement visible pour $\langle a_1|a_2\rangle = 1$.

Le but de l'expérience est de déterminer la trajectoire de l'atome[9]. Pour cela, on considère les deux situations suivantes :

- On remarque que la figure d'interférence disparaît quand $|a_1\rangle$ et $|a_2\rangle$ sont orthogonaux, cela correspond à une détermination de la trajectoire de l'atome sans ambiguïté mais avec des probabilités classiques, ce qui sera expliqué par la suite par le passage de l'atome à un état de mélange statistique avec son environnement.
- $\langle a_1|a_2\rangle = 1$ l'appareil de mesure n'affiche rien car les deux états $|a_1\rangle$ et $|a_2\rangle$ sont confondus, mais la figure d'interférences ne subit aucune modification grâce à la cohérence de $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$

En conclusion, la mesure engendre une réduction du paquet d'ondes et une apparition des probabilités classique car le système est dans un mélange statistique avec son environnement. C'est le phénomène de décohérence.

2.4.3 Théorie de la mesure dans le formalisme de Von-Neumann

Cette théorie est un modèle d'une fécondité inouïe, car il nous a permis de voir une problématique, qui est à la base du développement de la théorie de la décohérence, et qui a permis à une notion comme l'environnement d'émerger,

Dans son modèle, Von-Neumann décrit la mesure comme une interaction entre le système physique S et l'appareil de mesure macroscopique qu'il décrit avec un ket $|a\rangle$ de l'espace de Hilbert H_A de l'appareil de mesure

$$\hat{H}_{int} = -g(t)\hat{A} \otimes \hat{P} \quad (2.78)$$

\hat{A} est l'observable qu'on souhaite mesurer et agit dans l'espace H_S des états $|\psi\rangle$ du système physique. \hat{P} qui agit dans H_A est l'observable conjuguée (l'impulsion) de x la position du curseur dont la fonction d'onde intrinsèque est centrée en la position initiale de ce dernier pour $t = 0$, en $t = \epsilon$. La fonction[3]

$$g(t) = \left\{ \begin{array}{ll} g & 0 \leq t \leq \epsilon \\ 0 & \text{ailleurs} \end{array} \right\} \quad (2.79)$$

est très grande pendant l'interaction, c'est pour cela que c'est le hamiltonien d'interaction qui domine dans la limite de la mesure quantique et

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_A + \hat{H}_{int} \simeq \hat{H}_{int} \quad (2.80)$$

L'espace de Hilbert total est le produit tensoriel de l'espace de Hilbert de l'appareil de mesure et du système physique

$$H = H_S \otimes H_A \quad (2.81)$$

A $t = 0s$

$$|\Psi_0\rangle = |\psi\rangle \otimes |a\rangle \quad (2.82)$$

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |S_k\rangle \in H_S \quad (2.83)$$

où les $|S_k\rangle$ sont de vecteurs propres de \hat{A}

$$\hat{A} |S_k\rangle = b_k |S_k\rangle \quad (2.84)$$

Pendant l'interaction, on a

$$i \hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H}_{int} |\Psi(t)\rangle \quad (2.85)$$

d'où

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i \int_0^t g(\tau) \hat{A} \otimes \hat{P} d\tau} |\Psi_0\rangle \quad (2.86)$$

$$= \sum_k c_k |S_k\rangle |a_k\rangle \quad (2.87)$$

$$|a_k\rangle = e^{-i \int_0^t g(\tau) b_k \hat{P} d\tau} |a\rangle \quad (2.88)$$

On appelle pré-mesure le passage,[10]

$$|\Psi_0\rangle \rightarrow |\Psi(t)\rangle \quad (2.89)$$

$$\rho_0 \rightarrow \rho \quad (2.90)$$

$$\rho_0 = |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0| \quad (2.91)$$

$$\rho = |\Psi\rangle \langle \Psi| = \sum_{ij} c_i c_j^* |S_i\rangle \langle S_j| \otimes |a_i\rangle \langle a_j| \quad (2.92)$$

Selon Von-Neumann, c'est le processus 2 du mode d'évolution d'un système quantique. Il est unitaire et obéit à l'équation de Schrödinger. On appelle décohérence le passage

$$\rho \longrightarrow \rho' \quad (2.93)$$

$$\sum_i c_i c_j^* |S_i\rangle \langle S_j| \otimes |a_i\rangle \langle a_j| \longrightarrow \sum_i |c_i|^2 |S_i\rangle \langle S_i| \otimes |a_i\rangle \langle a_i| \quad (2.94)$$

qui signifie que si l'on observe l'appareil de mesure dans un état quelconque ($|a_2\rangle$, par exemple), on saura que le système juste après cette mesure est dans l'état correspondant ($|S_2\rangle$). C'est le processus 1 de Von-Neumann qui est non unitaire, induit par la mesure et postulé par Von-Neumann.

2.4.4 Problème de la base préférée

L'équation

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |S_k\rangle |a_k\rangle \quad (2.95)$$

est d'une importance primordiale car elle représente une parfaite corrélation entre l'appareil de mesure et le système (les états de l'observable qu'on souhaite mesurer). Le fait qu'il n'y ait pas de terme croisé indique que, pour chaque position du curseur de l'appareil de mesure $|a_k\rangle$, on associe une seule valeur propre b_k de l'observable du système qu'on souhaite mesurer. Cependant, l'unitarité des transformations nous permet développer $|\Psi\rangle$ dans plusieurs bases

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |S_k\rangle |a_k\rangle = \sum_{k'} c'_{k'} |S'_{k'}\rangle |a'_{k'}\rangle \quad (2.96)$$

ce qui va induire une ambiguïté dans la description de la mesure (ambiguïté du choix de l'observable à mesurer \hat{A} ou \hat{A}'). C'est le problème de la base préférée que nous allons illustrer dans l'exemple classique suivant.

On considère que le système physique S représente des électrons, et que l'observable qu'on souhaite mesurer est la composante S_z du spin, dont la base est $\{|0_z\rangle, |1_z\rangle\}$. Selon le formalisme de Von-Neumann, les états du système $S - A$ vérifient le schéma suivant avant et après la mesure :

$$|0_z\rangle_S |pret\rangle_A \rightarrow |0_z\rangle_S |0_z\rangle_A \quad (2.97)$$

$$|1_z\rangle_S |pret\rangle_A \rightarrow |1_z\rangle_S |1_z\rangle_A \quad (2.98)$$

Ainsi, on obtient l'état global après la mesure

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0_z\rangle_S |0_z\rangle_A + |1_z\rangle_S |1_z\rangle_A] \quad (2.99)$$

sachant que l'état du système S est

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0_z\rangle_S + |1_z\rangle_S] \quad (2.100)$$

A l'aide de la transformation unitaire

$$|0_z\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0_x\rangle_S + |1_x\rangle_S] \quad (2.101)$$

$$|1_z\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0_x\rangle_S - |1_x\rangle_S] \quad (2.102)$$

l'état global devient

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0_x\rangle_S |0_x\rangle_A + |1_x\rangle_S |1_x\rangle_A] \quad (2.103)$$

l'équivalence des deux écritures de $|\Psi\rangle$ montre qu'il s'agit de la mesure de deux observables S_x et S_z qui ne commutent pas, ce qui est absurde en mécanique quantique. Par conséquent, en plus du fait que le formalisme de Von-Neumann n'explique pas la réduction du paquet, il possède aussi ce problème de la base préférée[7].

Chapitre 3

Décohérence induite par l'environnement

Afin de répondre aux problèmes qu'on vient de présenter, on va introduire un nouveau degré de liberté autre que celui de l'appareil de mesure, il s'agit bien de l'environnement du système auquel on s'intéresse. L'introduction d'une telle notion nous permet de regarder les systèmes physiques dans un horizon plus large, le système physique n'est qu'une partie de son environnement, il sera ainsi considéré ouvert et n'est plus isolé

3.1 Interaction environnement-système

On considère l'interaction entre un système physique \hat{S} décrit dans la base propre de son observable par

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |\hat{S}_k\rangle \in H_{\hat{S}} \quad (3.1)$$

L'interaction du système physique \hat{S} et de l'environnement est donnée par la matrice diagonale bloc

$$\hat{H} \simeq \hat{H}_{int} = \sum_k \hat{P}_k \otimes \hat{A}_k = \begin{pmatrix} \hat{A}_k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{A}_k & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{A}_k & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{A}_k \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

où

$$\hat{P}_k = |\hat{S}_k\rangle \langle \hat{S}_k| \quad (3.3)$$

L'action de l'opérateur \hat{A}_k sur les états $|\phi\rangle \in H_\varepsilon$ de l'environnement est

$$e^{\frac{-i}{\hbar}\hat{A}_k t} |\phi\rangle = |\phi_k\rangle; \quad |\phi_k\rangle \in H_\varepsilon \quad (3.4)$$

Pendant l'interaction, [11]l'évolution de tout l'ensemble sera donnée par l'opérateur évolution

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) &= \exp \left[-i\hat{H}_{int}t \right] \\ &= \exp \left[-i \left(\sum_k \hat{P}_k \otimes \hat{A}_k \right) t \right] \end{aligned} \quad (3.5)$$

A l'instant initial $t = 0s$, le système est découplé car l'interaction n'a pas encore agit

$$|\Psi_0\rangle = |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle \quad (3.6)$$

$$= \sum_k c_k |\acute{S}_k\rangle \otimes |\phi\rangle \quad (3.7)$$

A l'instant t , l'état est

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \hat{U}(t) |\Psi_0\rangle \\ &= \sum_k c_k \hat{U}(t) \left(|\acute{S}_k\rangle \otimes |\phi\rangle \right) \end{aligned} \quad (3.8)$$

Or, comme on a écrit \hat{P}_k dans la base canonique des matrices carrés, l'état $|\acute{S}_k\rangle \otimes |\phi\rangle$ s'écrit

$$\begin{aligned} |\acute{S}_k\rangle \otimes |\phi\rangle &= \\ &= \begin{matrix} \text{ligne 1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \text{ligne } k \\ \cdot \\ \cdot \end{matrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes |\phi\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ |\phi\rangle \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Ainsi

$$\begin{aligned}
 \hat{U}(t) \left[\left| \hat{S}_k \right\rangle \otimes |\phi\rangle \right] &= \begin{pmatrix} \exp -i\hat{A}_1 t & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \exp -i\hat{A}_2 t & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 0 & \ddots & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 0 & \exp -i\hat{A}_k t & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \ddots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ |\phi\rangle \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \exp -i\hat{A}_k t |\phi\rangle \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ |\phi_k\rangle \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes |\phi_k\rangle = \left| \hat{S}_k \right\rangle \otimes |\phi_k\rangle
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

d'où

$$\left| \Psi(t) \right\rangle = \sum_k c_k \left| \hat{S}_k \right\rangle \otimes |\phi_k\rangle \in H_{\hat{S}} \otimes H_{\varepsilon} \tag{3.11}$$

La matrice densité associée est

$$\rho_{\hat{S}\varepsilon} = |\Psi\rangle \langle \Psi| = \sum_{kl} c_k c_l^* \left| \hat{S}_k \right\rangle \left\langle \hat{S}_l \right| \otimes |\phi_k\rangle \langle \phi_l| \tag{3.12}$$

Afin d'observer le système physique \hat{S} comme un résidu de l'interaction avec l'environnement, calculons la trace partielle de $\rho_{\hat{S}\varepsilon}$ par rapport à ε

$$\begin{aligned}
 \rho_{\hat{S}} &= \text{tr}_{\varepsilon}(\rho_{\hat{S}\varepsilon}) \\
 &= \sum_m \langle \phi_m | \rho_{\hat{S}\varepsilon} | \phi_m \rangle \\
 &= \sum_{kl} \sum_m c_k c_l^* \left| \hat{S}_k \right\rangle \left\langle \hat{S}_l \right| \otimes \langle \phi_m | \phi_k \rangle \langle \phi_l | \phi_m \rangle
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

On suppose que pour un temps d'interaction t très grand devant le temps τ_D de décohérence, les états de l'environnement sont quasiment orthogonaux :

$$\lim_{t \gg \tau_D} \langle \phi_m | \phi_k \rangle = \delta_{mk}$$

d'où :

$$\rho'_{\hat{S}} = \lim_{t \gg \tau_D} \rho_{\hat{S}} = \sum_m |c_m|^2 \left| \hat{S}_m \right\rangle \left\langle \hat{S}_m \right|$$

C'est un opérateur diagonal qui ne contient plus les termes de cohérence. Le processus de réduction revient donc au passage de la matrice densité de l'ensemble "système-environnement" à celle du système moyennant l'orthogonalité des états de l'environnement après évolution. Cette orthogonalité a lieu dès que le temps d'évolution t devient large devant le temps de décohérence τ_D . [11]

3.2 Effet de l'environnement sur la mesure dans le formalisme de Von-Neumann

Le but de cette partie est d'expliquer le processus de réduction dans le formalisme de Von-Neumann en introduisant la notion d'environnement. Pour cela, appliquons le modèle qu'on vient de voir au modèle de Von-Neumann [11], posons donc

$$\hat{S} = S + A \quad (3.14)$$

et

$$H = H_{\hat{S}} \otimes H_{\varepsilon} = H_S \otimes H_A \otimes H_{\varepsilon} \quad (3.15)$$

A $t = 0$, l'état global du système ($S - A - \varepsilon$) est

$$|\Psi_0\rangle = |\psi\rangle \otimes |a\rangle \otimes |\phi\rangle = \left[\sum_k c_k |S_k\rangle \right] \otimes |a\rangle \otimes |\phi\rangle \in H_S \otimes H_A \otimes H_{\varepsilon} \quad (3.16)$$

Selon le modèle de Von-Neumann, juste après la mesure on a

$$|\Psi\rangle = \left[\sum_k c_k |S_k\rangle |a_k\rangle \right] \otimes |\phi\rangle = \left[\sum_k c_k |\hat{S}_k\rangle \right] \otimes |\phi\rangle \quad (3.17)$$

Comme on vient de le voir plus haut, lorsque l'interaction $\hat{S} - \varepsilon$ a lieu pendant un temps t , on obtient

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k c_k |S_k\rangle \otimes |a_k\rangle \otimes |\phi_k\rangle \quad (3.18)$$

La matrice densité associée est

$$\rho_{SA\varepsilon} = |\Psi\rangle \langle \Psi| = \sum_{kl} c_k c_l^* |S_k\rangle \langle S_l| \otimes |a_k\rangle \langle a_l| \otimes |\phi_k\rangle \langle \phi_l| \quad (3.19)$$

Évaluons ρ_{SA} pour $t \gg \tau_D$:

$$\begin{aligned}
 \rho_{SA} &= \text{tr}_\varepsilon(\rho_{SA\varepsilon}) \\
 &= \sum_{kl} \sum_m c_k c_l^* |S_k\rangle \langle S_l| \otimes |a_k\rangle \langle a_l| \otimes \langle \phi_m | \phi_k \rangle \langle \phi_l | \phi_m \rangle \\
 &= \sum_k |c_k|^2 |S_k\rangle \langle S_k| \otimes |a_k\rangle \langle a_k|
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

On retrouve bien le processus de réduction, mais cette fois-ci l'état $|S_k\rangle$ du système est en correspondance directe avec l'état $|a_k\rangle$. Autrement dit, la prise en compte de l'environnement a permis d'expliquer le processus 1 de Von-Neumann dans le cadre même de la mécanique quantique. Ce processus n'est plus considéré comme postulat à part.

3.3 Application à un bain de spins

Considérons un système à deux états $|u\rangle$ et $|d\rangle$, en interaction magnétique avec l'environnement et l'appareil de mesure constitués de n particules à deux états $|u_k\rangle$ et $|d_k\rangle$, $k = 1, ..n$. [7,11] L'interaction est exprimées en fonction des constantes g_k et de l'opérateur identité $I_k = |u_k\rangle \langle u_k| + |d_k\rangle \langle d_k|$ agissant dans l'espace de la particule k :

$$\hat{H} \simeq \hat{H}_{int} = [|u\rangle \langle u| - |d\rangle \langle d|] \otimes \left[\sum_k g_k (|u_k\rangle \langle u_k| - |d_k\rangle \langle d_k|) \otimes_{k' \neq k} I_{k'} \right] \tag{3.21}$$

$$\begin{aligned}
 &= [|u\rangle \langle u| - |d\rangle \langle d|] [g_1 (|u_1\rangle \langle u_1| - |d_1\rangle \langle d_1|) \otimes I_2 \otimes \dots \otimes I_n] \\
 &+ [|u\rangle \langle u| - |d\rangle \langle d|] [I_1 \otimes g_2 (|u_2\rangle \langle u_2| - |d_2\rangle \langle d_2|) \otimes I_3 \otimes \dots \otimes I_n] \tag{3.22}
 \end{aligned}$$

+

$$+ [|u\rangle \langle u| - |d\rangle \langle d|] [I_1 \otimes I_2 \otimes \dots \otimes I_{n-1} \otimes g_n (|u_n\rangle \langle u_n| - |d_n\rangle \langle d_n|)]$$

L'état initial qui est un vecteur propre de \hat{H} donné par

$$|\Psi(0)\rangle = [a|u\rangle + b|d\rangle] \otimes_{k=1}^n [\alpha_k |u_k\rangle + \beta_k |d_k\rangle] \tag{3.23}$$

$$1 = |a|^2 + |b|^2 = |\alpha_k|^2 + |\beta_k|^2 \tag{3.24}$$

Donc,

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \hat{U}(t) |\Psi(0)\rangle \\ \hat{U}(t) &\simeq \exp -i\hat{H}_{int}t \end{aligned} \quad (3.25)$$

Calculons l'action de $\hat{U}(t)$ sur les différents états

$$\hat{U}(t) |u\rangle \otimes_{k=1}^n [\alpha_k |u_k\rangle + \beta_k |d_k\rangle] = \prod_{l=1}^n e^{-ig_l(S_z \otimes S_{l_z} \otimes_{l' \neq l} I_{l'})t} |u\rangle \otimes_k [\alpha_k |u_k\rangle + \beta_k |d_k\rangle]$$

où

$$S_{l_z} = |u_l\rangle \langle u_l| - |d_l\rangle \langle d_l|$$

L'opérateur $e^{-ig_l(S_z \otimes S_{l_z})t}$ agit de la façon suivante :

$$e^{-ig_l(S_z \otimes S_{l_z})t} |u\rangle \otimes [\alpha_l |u_l\rangle + \beta_l |d_l\rangle] = |u\rangle \otimes [\alpha_l e^{-ig_l t} |u_l\rangle + \beta_l e^{ig_l t} |d_l\rangle]$$

Donc, pour l fixé, on a

$$e^{-ig_l(S_z \otimes S_{l_z} \otimes_{l' \neq l} I_{l'})t} |u\rangle \otimes_k [\alpha_k |u_k\rangle + \beta_k |d_k\rangle] = |u\rangle \otimes [\alpha_l e^{-ig_l t} |u_l\rangle + \beta_l e^{ig_l t} |d_l\rangle] \otimes_{k \neq l} [\alpha_k |u_k\rangle + \beta_k |d_k\rangle]$$

Ce qui conduit aux relations

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) |u\rangle \otimes_k [\alpha_k |u_k\rangle + \beta_k |d_k\rangle] &= |u\rangle \otimes_k [\alpha_k e^{-ig_k t} |u_k\rangle + \beta_k e^{ig_k t} |d_k\rangle] \\ \hat{U}(t) |d\rangle \otimes_k [\alpha_k |u_k\rangle + \beta_k |d_k\rangle] &= |d\rangle \otimes_k [\alpha_k e^{ig_k t} |u_k\rangle + \beta_k e^{-ig_k t} |d_k\rangle] \end{aligned}$$

qui donnent directement l'état intriqué

$$|\Psi(t)\rangle = a |u\rangle \otimes |e_u(t)\rangle + b |d\rangle \otimes |e_d(t)\rangle \quad (3.26)$$

où

$$|e_u(t)\rangle = \otimes_{k=1}^{k=n} [\alpha_k e^{-ig_k t} |u_k\rangle + \beta_k e^{ig_k t} |d_k\rangle] = |e_d(-t)\rangle \quad (3.27)$$

La matrice densité correspondante est

$$\rho_{S_\varepsilon} = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} &= |a|^2 |u\rangle \langle u| \otimes |e_u(t)\rangle \langle e_u(t)| + |b|^2 |d\rangle \langle d| \otimes |e_d(t)\rangle \langle e_d(t)| \\ &+ ab^* |u\rangle \langle d| \otimes |e_u(t)\rangle \langle e_d(t)| + a^*b |d\rangle \langle u| \otimes |e_d(t)\rangle \langle e_u(t)| \end{aligned} \quad (3.29)$$

En remarquant que $\langle e_u(t) | e_u(t) \rangle = \langle e_d(t) | e_d(t) \rangle = 1$ et en utilisant la relation de fermeture

$$\sum_k \langle e_u(t) | u_k \rangle \langle u_k | e_d(t) \rangle = \langle e_u(t) | e_d(t) \rangle = z(t)$$

la densité ρ_S (la trace partielle de ρ par rapport à ε) s'écrit

$$\begin{aligned} \rho_S &= tr_\varepsilon(\rho_{S\varepsilon}) = \sum_{k=1}^n \langle u_k | \rho_{S\varepsilon} | u_k \rangle \\ &= \langle e_u(t) | \rho_{S\varepsilon} | e_u(t) \rangle + \langle e_d(t) | \rho_{S\varepsilon} | e_d(t) \rangle \\ &= |a|^2 |u\rangle \langle u| + |b|^2 |d\rangle \langle d| + z(t) ab^* |u\rangle \langle d| + z^*(t) a^*b |d\rangle \langle u| \end{aligned} \quad (3.30)$$

qui s'écrit dans la base $\{|u\rangle, |d\rangle\}$:

$$\rho_S = \begin{pmatrix} |a|^2 & z^*(t) a^*b \\ z(t) ab^* & |b|^2 \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

L'amplitude de corrélation est

$$\begin{aligned} z(t) &= \langle e_u(t) | e_d(t) \rangle \\ &= \langle e_u(t) | e_u(-t) \rangle \\ &= \otimes_{k=1}^{k=n} [\alpha_k^* e^{ig_k t} \langle u_k | + \beta_k^* e^{-ig_k t} \langle d_k |] \otimes_{l=1}^{l=n} [\alpha_l e^{igt} |u_l\rangle + \beta_l e^{-igt} |d_l\rangle] \\ &= \prod_k [|\alpha_k|^2 e^{2ig_k t} + |\beta_k|^2 e^{-2ig_k t}] \\ &= \prod_k \{ [|\alpha_k|^2 + |\beta_k|^2] \cos(2g_k t) + i [|\alpha_k|^2 - |\beta_k|^2] \sin(2g_k t) \} \\ &= \prod_k \{ \cos(2g_k t) + i [|\alpha_k|^2 - |\beta_k|^2] \sin(2g_k t) \} \end{aligned} \quad (3.32)$$

Son module est

$$\begin{aligned} |z(t)|^2 &= z(t) z^*(t) \\ &= \prod_k \left\{ 1 + \left[(|\alpha_k|^2 - |\beta_k|^2)^2 - 1 \right] \sin^2(2g_k t) \right\} \end{aligned} \quad (3.33)$$

Comme les fonctions sinus et cosinus sont bornées, la valeur moyenne sur une période, $z(t)$ s'annule

$$\langle z(t) \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t-\frac{T}{2}}^{t+\frac{T}{2}} z(t') dt' = 0$$

mais pas celle de $|z(t)|^2$

$$\langle |z(t)|^2 \rangle = \prod_{k=1}^n \frac{1 + (|\alpha_k|^2 - |\beta_k|^2)^2}{2}$$

Cette valeur tend vers zéro si l'environnement contient un nombre infini de spins car $|\alpha_k|^2 - |\beta_k|^2 \leq 1$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle |z(t)|^2 \rangle = 0 \quad (3.34)$$

La cohérence $z(t)$ disparaît alors, et la matrice ρ_S est diagonale, quand le nombre de degrés de liberté n de l'environnement devient important. Ceci correspond à une transition du quantique vers le classique.

3.4 L'environnement induit la super-sélection

Afin de donner une solution au problème de la base préférée, dans le cadre du modèle de l'interaction environnement-système, on considère les bases du système S et de l'environnement ε , respectivement

$$\{|S_n\rangle\} \text{ est une base de } H_S \quad (3.35)$$

$$\{|\phi_j\rangle\} \text{ est une base de } H_\varepsilon \quad (3.36)$$

Leur espace de Hilbert total est

$$H = H_S \otimes H_\varepsilon \quad (3.37)$$

Le hamiltonien total s'écrit

$$\hat{H} = \hat{H}_S \otimes I_\varepsilon + H_\varepsilon \otimes I_S + \hat{H}_{int} \quad (3.38)$$

$$= \sum_n \delta_n \hat{P}_n \otimes I_\varepsilon + I_S \otimes \sum_j \varepsilon_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j| + \sum_{n,j} \gamma_{nj} \hat{P}_n \otimes |\phi_j\rangle \langle \phi_j| \quad (3.39)$$

où $\hat{P}_n = |S_n\rangle \langle S_n|$.

Avant que l'interaction n'ait eu lieu, l'état du système global n'est pas intriqué

$$|\Psi(0)\rangle = |\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle = \left[\sum_n \alpha_n |S_n\rangle \right] \otimes \left[\sum_j \beta_j |\phi_j\rangle \right] = \sum_{n,j} \alpha_n \beta_j |S_n\rangle \otimes |\phi_j\rangle \quad (3.40)$$

Après un temps t d'interaction[11], il devient

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \hat{U}(t) |\Psi(0)\rangle \\ &= \exp -i\hat{H}t |\Psi(0)\rangle \end{aligned} \quad (3.41)$$

l'équation aux valeurs propres

$$\hat{H} [|S_m\rangle \otimes |\phi_k\rangle] = (\delta_m + \varepsilon_k + \gamma_{mk}) [|S_m\rangle \otimes |\phi_k\rangle] = \mu_{mk} [|S_m\rangle \otimes |\phi_k\rangle]$$

nous permet d'écrire

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{nj} \alpha_n \beta_j \exp[-i(\mu_{nj})t] |S_n\rangle \otimes |\phi_j\rangle \quad (3.42)$$

état qui correspond à la matrice densité

$$\begin{aligned} \rho &= |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| \\ &= \sum_{njmk} \alpha_n \alpha_m^* \beta_j \beta_k^* \exp[-i(\mu_{nj} - \mu_{mk})t] |S_n\rangle \langle S_m| \otimes |\phi_j\rangle \langle \phi_k| \end{aligned} \quad (3.43)$$

Calculons la densité matrice réduite ρ_S

$$\begin{aligned} \rho_S &= \text{tr}_\varepsilon(\rho_{S\varepsilon}) \\ &= \sum_p \langle \phi_p | (\rho_{S\varepsilon}) | \phi_p \rangle \\ &= \sum_{nmp} \alpha_n \alpha_m^* |\beta_p|^2 \exp[-i(\mu_{np} - \mu_{mp})t] |S_n\rangle \langle S_m| \\ &= \sum_{nm} \alpha_n \alpha_m^* \exp[-i(\delta_n - \delta_m)t] \left[\sum_p |\beta_p|^2 \exp[-i(\gamma_{np} - \gamma_{mp})t] \right] |S_n\rangle \langle S_m| \\ &= \sum_{m n} \rho_{n m}(t) |S_n\rangle \langle S_m| \end{aligned} \quad (3.44)$$

où la matrice densité

$$\rho_{n m}(t) = \alpha_n \alpha_m^* \exp[-i(\delta_n - \delta_m)t] Z_{nm}(t) \quad (3.45)$$

s'écrit en termes de la fonction

$$Z_{nm}(t) = \sum_k |\beta_k|^2 \exp[-i(\gamma_{nk} - \gamma_{mk})t] = \sum_k p_k \exp[-i(\omega_{nm}^k)t] \quad (3.46)$$

qui représente la cohérence [12,13](voir Zurek 1982). La moyenne de cette fonction est nulle sur un temps T infini pour $m \neq n$

$$\langle Z_{nm}(t) \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} Z_{nm}(t') dt' = 0, \quad n \neq m \quad (3.47)$$

Ce résultat nous suggère que seules les états $|S_n, \alpha\rangle$ d'un sous-espace propre H_n dégénéré sur α vis-à-vis de \hat{H}_{int} peuvent coexister car $\omega_{nm}^k = \omega_{n\alpha, n\beta}^k = 0$ [14,15]. Leur cohérence est protégée de l'effet de l'environnement. Cette dernière hypothèse induit la décomposition en somme directe de H_S

$$H_S = \oplus_n H_n \quad (3.48)$$

La cohérence $H_n \leftrightarrow H_m$ pour $n \neq m$ n'est pas protégée de l'effet de l'environnement car $\langle Z_{nm}(t) \rangle = 0$.

En termes d'opérateurs, après évolution on obtient :

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \rho_S = \lim_{T \rightarrow \infty} \text{tr}_\varepsilon(\hat{U}(t) \rho_{S\varepsilon}(0) \hat{U}^\dagger(t)) = \sum_n |\alpha_n|^2 \hat{P}_n = \sum_n |\alpha_n|^2 |n\rangle \langle n| \quad (3.49)$$

On remarque donc que seuls les opérateurs de la forme $|n\rangle \langle n|$ restent stables au cours de l'interaction. Ceci nous mène à écrire

$$[\hat{H}_{int}, \hat{O}_S] = 0 \quad (3.50)$$

où \hat{O}_S est une observable qui s'écrit en fonction de ses vecteurs propres, qui ne s'intriquent pas avec l'environnement, comme

$$\hat{O}_S = \sum_n o_n |n\rangle \langle n| \quad (3.51)$$

Les états propres de O_S sont dits états pointeurs qui appartiennent à la base préférée.

Chapitre 4

Évolution des systèmes quantiques ouverts

4.1 Équation maitresse

Dans cette partie, on va établir approximativement l'équation d'évolution des systèmes quantiques ouverts faiblement corrélés et faiblement couplés avec l'environnement, pour une dynamique markovienne, car celle-ci est très répandue pour la description stochastique des phénomènes quantiques tels que les interactions entre atomes et champ électromagnétique et la résonance magnétique nucléaire. Pour cela, on doit considérer l'évolution moyenne du système pour des intervalles de temps Δt dictés par la dynamique du système et pour lesquels l'approximation "à gros grains" de la matrice densité soit adéquate avec le caractère markovien. Cette approximation consiste à faire le remplacement[16,17] :

$$\rho_S(t) \mapsto \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \rho_S(t) dt \quad (4.1)$$

où Δt doit vérifier la condition des échelles de temps :

$$\tau_c \ll \Delta t \ll \tau_e \quad (4.2)$$

où τ_c est le temps de relaxation des effets de mémoire et τ_e est un temps caractéristique de l'évolution du système S [17,18].

L'interaction entre le système S et l'environnement ε est représentée par \hat{H}_{int} , de sorte que l'hamiltonien global soit

$$\hat{H} = \hat{H}_S \otimes I_\varepsilon + I_S \otimes \hat{H}_\varepsilon + \hat{H}_{int} \quad (4.3)$$

Le système global $S - \varepsilon$ sera décrit par la matrice densité $\rho = \rho_{S\varepsilon}$ qui s'écrit

$$\rho_{S\varepsilon}(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_\varepsilon(t) \quad (4.4)$$

car le système S et l'environnement ε sont faiblement corrélés. De plus,

$$\rho_\varepsilon(t) = |\varphi\rangle\langle\varphi| = \rho_\varepsilon(0) \quad (4.5)$$

car on peut, par le biais de la condition des échelles de temps, considérer que l'état de l'environnement est stationnaire puisqu'il effectue des fluctuations autour d'un équilibre statistique avec la période τ_c .

L'évolution du système global est donnée par l'équation de Liouville Von-Neumann qui s'écrit dans la représentation interaction

$$\frac{d}{dt}\rho^I(t) = -i \left[\hat{H}_{int}, \rho^I(t) \right] \quad (4.6)$$

où H_{int} s'écrit en termes d'opérateurs S_α agissant sur les états du système et E_α agissant sur les états de l'environnement

$$\hat{H}_{int}(t) = \sum_{\alpha} S_{\alpha}(t) \otimes E_{\alpha}(t) \quad (4.7)$$

La forme intégrale de l'équation d'évolution est

$$\rho^I(t) = \rho^I(0) - i \int_0^t dt' \left[\hat{H}_{int}(t'), \rho^I(t') \right] \quad (4.8)$$

En injectant cette expression dans le commutateur de l'équation d'évolution différentielle, on obtient

$$\frac{d}{dt}\rho^I(t) = -i \left[\hat{H}_{int}, \rho^I(0) \right] - \int_0^t dt' \left[\hat{H}_{int}(t), \left[\hat{H}_{int}(t'), \rho^I(t') \right] \right] \quad (4.9)$$

On remarque qu'à l'instant initial, le système et l'environnement sont supposés être découplés ($H_{int} = 0$) de sorte que

$$\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_\varepsilon(0) = \rho^I(0) \quad (4.10)$$

De plus[7]

$$tr_{\varepsilon} \left[\hat{H}_{int}, \rho(0) \right] = \sum_{\alpha} [S_{\alpha}(t), \rho_S(0)] tr (E_{\alpha}(t) \rho_{\varepsilon}^I(0)) = 0 \quad (4.11)$$

En prenant la trace sur l'environnement de l'équation [7],[19], on déduit l'équation d'évolution exacte de l'opérateur densité du système

$$\frac{d}{dt}\rho_S^I(t) = -\int_0^t dt' \text{tr}_\varepsilon \left[\hat{H}_{int}(t), \left[\hat{H}_{int}(t'), \rho^I(t') \right] \right] \quad (4.12)$$

C'est une équation intégrodifférentielle où la densité à l'instant t dépend de la densité aux instants antérieurs t' . Autrement, dit l'évolution du système dépend de son histoire, c'est un effet de mémoire. L'approximation de Born puis celle de Markov permettent de simplifier cette équation. La première est essentiellement basée sur la faiblesse de l'interaction et l'immensité de l'environnement. Par conséquent, seul le système étudié est sensible à l'interaction. L'état global est un produit tensoriel où l'évolution de l'environnement est négligeable

$$\rho^I(t) = \rho_S^I(t) \otimes \rho_\varepsilon^I(t) = \rho_S^I(t) \otimes \rho_\varepsilon^I(0) \quad (4.13)$$

Définissons aussi la fonction d'auto-corrélation de l'environnement par [19]

$$C_{\alpha\beta}(t, t') = \text{tr}_\varepsilon \left(E_\alpha(t) E_\beta(t') \rho_\varepsilon^I(t') \right) \quad (4.14)$$

Comme l'environnement est dans un état stationnaire (équilibre thermique), cette dernière s'écrit

$$C_{\alpha\beta}(t, t') = C_{\alpha\beta}(t - t') = \text{tr}_\varepsilon \left(E_\alpha(t - t') E_\beta \rho_\varepsilon^I(t') \right) \quad (4.15)$$

En remplaçant (4.13) et en utilisant (4.15) dans (4.12), l'équation d'évolution exacte devient [19]

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_S^I(t) = & -\sum_{\alpha\beta} \int_0^t dt' \{ C_{\alpha\beta}(t - t') [S_\alpha(t) S_\beta(t') \rho_S^I(t') - S_\beta(t') \rho_S^I(t') S_\alpha(t)] \\ & + C_{\beta\alpha}(t' - t) [\rho_S^I(t') S_\beta(t') S_\alpha(t) - S_\alpha(t) \rho_S^I(t') S_\beta(t')] \} \end{aligned} \quad (4.16)$$

L'environnement est maintenant séparé du système mais l'effet de mémoire demeure effectif. Pour l'éliminer, on fait appel à l'approximation de Markov selon laquelle l'auto-corrélation entre les parties de l'environnement est détruite au bout d'un temps plus grand que le temps de corrélation τ_c . Comme le temps τ_s , caractéristique de l'évolution du système, est grand devant τ_c , l'environnement aura déjà oublié son passé avant même que le système ait eu le temps d'évoluer. Ceci signifie que

$C_{\alpha\beta}(t - t')$ est tellement piquée en t que l'on peut remplacer $\rho_S^I(t')$ par $\rho_S^I(t)$ et étendre l'intégrale sur $\tau = t - t'$ à l'infini. L'équation devient

$$\frac{d}{dt}\rho_S^I(t) = - \sum_{\alpha\beta} \int_0^{\infty} d\tau C_{\alpha\beta}(\tau) [S_\alpha(t) S_\beta(t - \tau) \rho_S^I(t) - S_\beta(t - \tau) \rho_S^I(t) S_\alpha(t)] \quad (4.17)$$

$$+ C_{\beta\alpha}(-\tau) [\rho_S^I(t) S_\beta(t - \tau) S_\alpha(t) - S_\alpha(t) \rho_S^I(t) S_\beta(t - \tau)] \quad (4.18)$$

En utilisant le passage au point de vue de Schrödinger pour le système étudié, selon lequel

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i [H_S, \rho_S(t)] + \exp -i\hat{H}_S t \left(\frac{d}{dt}\rho_S^I(t) \right) \exp +i\hat{H}_S t \quad (4.19)$$

et en tenant compte du fait que

$$\exp -i\hat{H}_S t (S_\alpha(t) S_\beta(t - \tau) \rho_S^I(t)) \exp +i\hat{H}_S t = S_\alpha S_\beta(-\tau) \rho_S(t) \quad (4.20)$$

en plus de la définition des opérateurs

$$B_\alpha = \int_0^{\infty} d\tau \sum_{\beta} C_{\alpha\beta}(\tau) S_\beta(-\tau) \quad (4.21)$$

$$C_\alpha = \int_0^{\infty} d\tau \sum_{\beta} C_{\beta\alpha}(-\tau) S_\beta(-\tau) \quad (4.22)$$

on obtient l'équation maitresse de Bron-Markov, dont le premier terme représente l'évolution unitaire indépendamment de l'environnement et le second terme contient l'effet de la décohérence

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i [\hat{H}_S, \rho_S(t)] + \sum_{\alpha} \{[S_\alpha, B_\alpha \rho_S(t)] + [\rho_S(t) C_\alpha, S_\alpha]\} \quad (4.23)$$

$$= -i [\hat{H}_S, \rho_S(t)] + D [\rho_S(t)] \quad (4.24)$$

Une des alternatives qui nous permettent d'assurer la positivité de $\rho_S(t)$ est le passage à la forme de Lindblad. Cette dernière nous permet de donner une description algébrique de l'évolution de $\rho_S(t)$. Pour cela, on passe à la représentation de Karus des super-opérateurs $\{L_\nu\}$ où la dynamique est entièrement décrite à l'aide du

générateur \mathcal{L} du semi-groupe d'évolution[19]

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \mathcal{L} \rho_S(t) \quad (4.25)$$

$$\rho_S(t) = \exp(\mathcal{L}t) \rho_S(0) \quad (4.26)$$

4.2 Équation de Lidnblad

4.2.1 Représentation de Kraus des super-opérateurs :

Le but de cette représentation est de déterminer l'expression de la matrice densité $\rho_{S\varepsilon}$ de $H_S \otimes H_\varepsilon$ après une évolution unitaire $\hat{U}(t)$. A $t = 0s$,

$$\rho_{S\varepsilon}(0) = \rho_S \otimes \rho_\varepsilon = \rho_S \otimes |\phi\rangle\langle\phi| \quad (4.27)$$

L'évolution à un instant t quelconque

$$\rho_{S\varepsilon}(t) = \hat{U}(t) \rho_{S\varepsilon}(0) \hat{U}^\dagger(t) = \rho'_{S\varepsilon} \quad (4.28)$$

donne

$$[\rho'_S]_{mn} = [tr_\varepsilon(\rho'_{S\varepsilon})]_{mn} = \sum_{\mu pq} \hat{U}_{m\mu,p0} [\rho_S]_{pq} \hat{U}^\dagger_{n\mu,q0} \quad (4.29)$$

où

$$\hat{U}_{m\mu,p0} = \langle S_m \otimes \phi_\mu | \hat{U} | S_p \otimes \phi \rangle \quad (4.30)$$

On définit ainsi la représentation de Karus de ρ_S dans une base $\{|\phi_\mu\rangle\}_\mu$ de H_ε par

$$K(\rho_S) = \sum_{\mu} M_\mu \rho_S M_\mu^\dagger = \rho'_S \quad (4.31)$$

$$M_\mu = \langle \phi_\mu | \hat{U} | \phi \rangle \quad (4.32)$$

Les opérateurs M_μ vérifient la relation de fermeture[19]. En effet, l'opérateur évolution dans $H_S \otimes H_\varepsilon$ agit sur un état $|S_p \otimes \phi\rangle$, où les états $|S_p\rangle$ du système étudié sont orthonormés, de la façon suivante :

$$\hat{U} |S_p \otimes \phi\rangle = \sum_{\mu} [M_\mu \otimes I_\varepsilon] |S_p \otimes \phi_\mu\rangle = |\Psi_p\rangle \quad (4.33)$$

Exprimons le produit scalaire $\langle \Psi_q | \Psi_p \rangle$ en fonction des opérateurs M_μ

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_q | \Psi_p \rangle &= \left\langle \sum_{\mu\nu} \langle S_q \otimes \phi_\nu | [M_\nu^\dagger \otimes I_\varepsilon] | [M_\mu \otimes I_\varepsilon] | S_p \otimes \phi_\mu \rangle \right\rangle \\
 &= \langle S_q | \left[\sum_\mu M_\mu^\dagger M_\mu \right] | S_p \rangle \\
 &= \langle S_q | S_p \rangle \\
 &= \delta_{qp}
 \end{aligned} \tag{4.34}$$

d'où la relation de fermeture :

$$\sum_\mu M_\mu^\dagger M_\mu = I_{T(H_S)} \tag{4.35}$$

définie sur l'ensemble $T(H_S)$ des opérateurs linéaires et bornés de H_S .

Au cours d'une évolution entre t et $t + \Delta t$ la représentation de Karus s'écrit

$$K_t^{t+\Delta t}(\rho_S) = \sum_\mu M_\mu^\dagger(\Delta t) \rho_S M_\mu(\Delta t) \tag{4.36}$$

En supposant que l'un des M_μ (M_0 par exemple) soit du premier ordre en Δt et les autres sont de l'ordre $\sqrt{\Delta t}$ [rosanov20]

$$M_0(\Delta t) = I_S + [K - iH_S] \Delta t \tag{4.37}$$

$$M_\mu(\Delta t) = L_\mu \sqrt{\Delta t} \quad \mu \neq 0 \tag{4.38}$$

le super-opérateur de Krauss agit de la façon suivante :

$$\rho_S(t + \Delta t) = K_t^{t+\Delta t}(\rho_S) = \rho_S(t) + O(\Delta t) \tag{4.39}$$

Les équations mènent à l'équation de Lindblad pour $\Delta t \mapsto 0$ [8]

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -i[H_S, \rho_S(t)] - \frac{1}{2} \{K, \rho_S(t)\} + \sum_{\mu>0} L_\mu^\dagger \rho_S(t) L_\mu \tag{4.40}$$

Le terme $[H_S, \rho_S(t)]$ représente l'évolution unitaire, $\{K, \rho_S(t)\}$ représente la dissipation et $\sum_{\mu>0} L_\mu^\dagger \rho_S(t) L_\mu$ représente les sauts quantiques. En comparant avec l'équation de Bron-Markov (4.24), on déduit l'expression de l'opérateur de décohérence

$$D[\rho_S(t)] = -\frac{1}{2} \{K, \rho_S(t)\} + \sum_{\mu>0} L_\mu^\dagger \rho_S(t) L_\mu \tag{4.41}$$

Cette forme peut être réécrite d'une manière plus commode en remarquant que K est un opérateur hermitique et qu'il se détermine à partir de la condition de normalisation des supers-opérateurs

$$\sum_{\mu=0} M_{\mu}^{\dagger}(\Delta t) M_{\mu}(\Delta t) = I_{T(H_S)} \quad (4.42)$$

En séparant le terme $\mu = 0$ dans l'expression précédente, on trouve

$$K = -\frac{1}{2} \sum_{\mu>0} L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu} \quad (4.43)$$

Dans le cas où L_{μ} est hermitique [7], l'équation de Lindblad devient

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_S(t) &= -i [H_S, \rho_S(t)] + \sum_{\mu} [L_{\mu}, [L_{\mu}, \rho_S(t)]] \\ D[\rho_S(t)] &= \sum_{\mu} [L_{\mu}, [L_{\mu}, \rho_S(t)]] \end{aligned}$$

La particularité de ce formalisme réside dans l'irréversibilité de l'évolution du système qu'on ne peut décrire avec un opérateur unitaire, d'où l'appellation semi-groupe. Dans le cas d'une évolution unitaire, l'ensemble des opérateurs $\{\hat{U}(t), t \geq 0\}$ constitue un groupe à un paramètre t , car il contient l'élément neutre

$$\hat{U}(t=0) = I_H, \quad (4.44)$$

vérifie l'associativité

$$\hat{U}(t_1) \left(\hat{U}(t_2) \hat{U}(t_3) \right) = \left(\hat{U}(t_1) \hat{U}(t_2) \right) \hat{U}(t_3) \quad (4.45)$$

et contient l'inverse

$$\hat{U}^{-1}(t) = \hat{U}(-t) \quad (4.46)$$

Ceci n'est pas le cas pour notre système car $\hat{U}^{-1}(t)$ n'existe pas. Pour une évolution unitaire, on écrit[21 ,22]

$$\rho(t) = \hat{U}(t) \rho(0) \hat{U}^{\dagger}(t) \quad (4.47)$$

Dans notre cas, l'évolution de ρ est donnée par

$$\rho_S(t) = \exp(\mathcal{L}t) \rho_S(0) \quad (4.48)$$

\mathcal{L} est le générateur du semi-groupe d'évolution appelé Liouvillien et agissant de la

façon suivante :

$$\mathcal{L}\rho_S(t) = \frac{d}{dt}\rho_S(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{\sum_{\mu} M_{\mu}^{\dagger}(\Delta t) \rho_S M_{\mu}(\Delta t) - \rho_S(t)}{\Delta t} \right] \quad (4.49)$$

cette équation est dite équation de Liouville [23,24,25].

Chapitre 5

Évolution dans l'espace des phases

5.1 Application à un modèle canonique

Le but de cette partie est d'exhiber la décohérence dans l'espace des phases. Pour cela, on se propose d'illustrer cette évolution dans le cas d'un oscillateur harmonique quantique de masse m et de fréquence Ω , qui joue le rôle du système physique S en interaction avec son environnement représenté par un bain thermique d'oscillateurs harmoniques de masses m_i et de fréquences ω_i , au voisinage d'un équilibre thermodynamique.

Le Hamiltonien total est donné par

$$\hat{H} = \hat{H}_S \otimes I_{bain} + I_S \otimes \hat{H}_{bain} + \hat{H}_{int} \quad (5.1)$$

où

$$\hat{H}_S = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 X^2 \quad (5.2)$$

$$\hat{H}_{bain} = \sum_i \frac{P_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2}m_i\omega_i^2 q_i^2 = \sum_i \hat{H}_i \quad (5.3)$$

$$\hat{H}_{int} = \sum_i c_i q_i \otimes X \quad (5.4)$$

La fonction de corrélation [7] est donnée par

$$\begin{aligned} C(\tau) &= \sum_{ij} c_i c_j \langle q_i(\tau) q_j \rangle \\ &= \sum_i c_i^2 \langle q_i(\tau) q_i \rangle \end{aligned} \quad (5.5)$$

car dans le cas de l'algèbre de l'oscillateur harmonique

$$\langle q_i(\tau) q_j \rangle = \delta_{ij} \langle q_i(\tau) q_i \rangle \quad (5.6)$$

avec

$$\begin{aligned}
 q_i(\tau) &= U^\dagger(\tau) q_i U(\tau) \\
 &= e^{+i H_i \tau} q_i e^{-i H_i \tau} \\
 &= (2m_i \omega_i)^{-1/2} \left\{ a_i e^{-i \omega_i \tau} + a_i^\dagger e^{+i \omega_i \tau} \right\}
 \end{aligned} \tag{5.7}$$

On peut donc écrire que

$$\langle q_i(\tau) q_i \rangle = \frac{1}{2m_i \omega_i} \left\{ \langle a_i a_i^\dagger \rangle e^{-i \omega_i \tau} + \langle a_i^\dagger a_i \rangle e^{+i \omega_i \tau} \right\} \tag{5.8}$$

où le nombre moyen d'occupation d'un niveau d'énergie

$$\langle a_i^\dagger a_i \rangle = \langle \hat{n}_i \rangle = n_i \tag{5.9}$$

sera déterminé à partir de la statistique de Bose Einstein

$$n_i = \frac{1}{e^{(\omega_i/k_B T)} - 1} \tag{5.10}$$

car l'ensemble des oscillateurs harmoniques schématisant l'environnement est en équilibre thermodynamique. En utilisant la relation de commutation

$$[a_i, a_i^\dagger] = 1 \tag{5.11}$$

on obtient

$$\langle a_i a_i^\dagger \rangle = 1 + n_i \tag{5.12}$$

et

$$\langle q_i(\tau) q_i \rangle = \frac{1}{2m_i \omega_i} \left\{ (1 + 2n_i) \cos(\omega_i \tau) - i \sin(\omega_i \tau) \right\} \tag{5.13}$$

Sachant que

$$1 + 2n_i = \frac{e^{\omega_i/k_B T} + 1}{e^{\omega_i/k_B T} - 1} = \coth(\omega_i/k_B T) \tag{5.14}$$

la fonction de corrélation s'écrit

$$C(\tau) = \sum_i \frac{c_i^2}{2m_i \omega_i} \left\{ \coth(\omega_i/k_B T) \cos(\omega_i \tau) - i \sin(\omega_i \tau) \right\} \tag{5.15}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_i c_i^2 \langle \{q_i(\tau), q_i\} \rangle + \frac{1}{2} \sum_i c_i^2 \langle [q_i(\tau), q_i] \rangle \tag{5.16}$$

où

$$\langle \{q_i(\tau), q_i\} \rangle = \langle q_i(\tau) q_i + q_i q_i(\tau) \rangle = \frac{1}{m_i \omega_i} \coth(\omega_i/k_B T) \cos(\omega_i \tau) \quad (5.17)$$

$$\langle [q_i(\tau), q_i] \rangle = \langle q_i(\tau) q_i - q_i q_i(\tau) \rangle = \frac{i}{m_i \omega_i} \sin(\omega_i \tau) \quad (5.18)$$

On voit que la fonction de corrélation devient

$$C(\tau) = \xi(\tau) - i \eta(\tau) \quad (5.19)$$

où la partie réelle

$$\xi(\tau) = \frac{1}{2} \sum_i c_i^2 \langle \{q_i(\tau), q_i\} \rangle \quad (5.20)$$

$$= \sum_i \frac{c_i^2}{2m_i \omega_i} \coth\left(\frac{\omega_i}{k_B T}\right) \cos(\omega_i \tau) \quad (5.21)$$

$$= \int_0^{+\infty} J(\omega) \coth\left(\frac{\omega}{k_B T}\right) \cos(\omega \tau) d\omega \quad (5.22)$$

et la partie imaginaire

$$\eta(\tau) = \frac{i}{2} \sum_i c_i^2 \langle [q_i(\tau), q_i] \rangle \quad (5.23)$$

$$= \sum_i \frac{c_i^2}{2m_i \omega_i} \sin(\omega_i \tau) \quad (5.24)$$

$$= \int_0^{+\infty} J(\omega) \sin(\omega \tau) d\omega \quad (5.25)$$

s'expriment au moyen de la fonction spectrale

$$J(\omega) = \sum_i \frac{c_i^2}{2m_i \omega_i} \delta(\omega - \omega_i) \quad (5.26)$$

Ainsi, la fonction de corrélation devient une somme continue sur ω

$$C(\tau) = \int_0^{+\infty} J(\omega) \left[\coth\left(\frac{\omega}{k_B T}\right) \cos(\omega \tau) - i \sin(\omega \tau) \right] \quad (5.27)$$

ce qui montre que

$$C(-\tau) = \xi(\tau) + i \eta(\tau) \quad (5.28)$$

La prise en compte de cette dernière propriété dans l'équation de Born-Markov

$$\frac{d}{dt}\rho_s(t) = -i \left[\hat{H}_S, \rho_s(t) \right] - \int_0^{+\infty} d\tau \left\{ C(\tau) [X, X(-\tau)\rho_s(t)] + C(-\tau) [\rho_s(t)X(-\tau), X] \right\} \quad (5.29)$$

conduit à

$$\frac{d}{dt}\rho_s(t) = -i \left[\hat{H}_S, \rho_s(t) \right] - \int_0^{+\infty} d\tau \left\{ \xi(\tau) [X, [X(-\tau), \rho_s(t)]] + \eta(\tau) [X, \{X(-\tau), \rho_s(t)\}] \right\} \quad (5.30)$$

Cette équation est valable pour un système physique S quelconque, car nous n'avons pas tenu compte du fait que celui-ci est un oscillateur harmonique dont le hamiltonien

$$\hat{H}_S = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 X^2 \quad (5.31)$$

gouverne l'évolution de l'opérateur position selon la loi bien connue

$$X(\tau) = U^\dagger(\tau) X U(\tau) \quad (5.32)$$

$$= e^{+\frac{i}{\hbar} H_S \tau} X e^{-\frac{i}{\hbar} H_S \tau}$$

$$= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} ad_{\hat{H}_S} \tau\right) X \quad (5.33)$$

où le symbole $ad_{\hat{H}_S}$ désigne le commutateur avec \hat{H}_S . Par exemple,

$$ad_{\hat{H}_S} X = [\hat{H}_S, X] = -i \frac{P}{m} \quad (5.34)$$

$$(ad_{\hat{H}_S})^2 X = [\hat{H}_S, [\hat{H}_S, X]] = \Omega^2 X \quad (5.35)$$

$$(ad_{\hat{H}_S})^3 X = [\hat{H}_S, [\hat{H}_S, [\hat{H}_S, X]]] = -i \frac{\Omega^2}{m} P \quad (5.36)$$

$$(ad_{\hat{H}_S})^4 X = [\hat{H}_S, [\hat{H}_S, [\hat{H}_S, [\hat{H}_S, X]]]] = \Omega^4 X \quad (5.37)$$

Le développement en séries, paire et impaire, de l'exponentielle donne

$$X(\tau) = \sum_{p \geq 0} (-1)^p \frac{(ad_{\hat{H}_S})^{2p} X}{(2p)!} \tau^{2p} + i \sum_{p \geq 0} (-1)^p \frac{(ad_{\hat{H}_S})^{2p+1} X}{(2p+1)!} \tau^{2p+1}$$

Les puissances précédentes de l'opérateur $ad_{\hat{H}_S}$ se généralisent facilement à

$$(ad_{\hat{H}_S})^{2p+1} X \tau^{2p+1} = \frac{-i}{m \Omega} (\Omega \tau)^{2p+1} P \quad (5.38)$$

$$(ad_{\hat{H}_S})^{2p} X \tau^{2p} = (\Omega \tau)^{2p} X \quad (5.39)$$

Par conséquent, l'opérateur position prend la forme suivante :

$$X(\tau) = \sum_{p \geq 0} (-1)^p \frac{(\Omega \tau)^{2p}}{(2p)!} X + i \left(\frac{-i}{m \Omega} \right) \sum_{p \geq 0} (-1)^p \frac{(\Omega \tau)^{2p+1}}{(2p+1)!} P \quad (5.40)$$

$$X(\tau) = X \cos(\Omega \tau) + \left(\frac{P}{m \Omega} \right) \sin(\Omega \tau) \quad (5.41)$$

Ceci conduit à une écriture physiquement plus commode des différents termes de l'équation (5.30)

$$[X, [X(-\tau), \rho_s(t)]] = D [X, [X, \rho_s(t)]] + f [X, [P, \rho_s(t)]] \quad (5.42)$$

$$[X, \{X(-\tau), \rho_s(t)\}] = -\frac{i}{2} m \tilde{\omega}^2 [X^2, \rho_s(t)] - i \gamma [X, \{P, \rho_s(t)\}] \quad (5.43)$$

On obtient ainsi l'équation de Caldeira-Legget [5]

$$\frac{d}{dt} \rho_s(t) = -i \left[\hat{H}_S + \frac{1}{2} m \Omega^2 X^2, \rho_s(t) \right] - i \gamma [X, \{P, \rho_s(t)\}] - f [X, [P, \rho_s(t)]] - D [X, [X, \rho_s(t)]] \quad (5.44)$$

Les différents termes du second membre de l'équation représentent respectivement l'évolution unitaire du pseudo-oscillateur harmonique de fréquence $\Omega^2 = \omega^2 + \tilde{\omega}^2$, la dissipation, la diffusion anormale, la diffusion et la décohérence. Les coefficients correspondants sont

$$D = \int_0^{+\infty} d\tau \xi(\tau) \cos(\Omega \tau) \quad (5.45)$$

$$f = -\frac{1}{m \Omega} \int_0^{+\infty} d\tau \xi(\tau) \sin(\Omega \tau) \quad (5.46)$$

$$\tilde{\omega}^2 = \int_0^{+\infty} d\tau \eta(\tau) \cos(\Omega \tau) \quad (5.47)$$

$$\gamma = \frac{1}{m \Omega} \int_0^{+\infty} d\tau \eta(\tau) \sin(\Omega \tau) \quad (5.48)$$

Sachant que

$$\langle x | P \rho_s(t) | x' \rangle = -i \frac{\partial}{\partial x} \langle x | \rho_s(t) | x' \rangle = -i \frac{\partial}{\partial x} \rho_s(x, x', t) \quad (5.49)$$

l'équation maîtresse prend la forme suivante en représentation coordonnées [26,27] :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_s(x, x', t) = \Delta(x, x') \rho_s(x, x', t) \quad (5.50)$$

$$\Delta(x, x') = -\frac{i}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) - i m (\omega^2 + \tilde{\omega}^2) (x^2 - x'^2) + \gamma (x - x') \left(\frac{\partial}{\partial x'} - \frac{\partial}{\partial x} \right) + i f (x - x') \quad (5.51)$$

5.2 Représentation espace des phases ordinaires

L'opérateur densité nous permet de calculer les valeurs moyennes des observables d'un système physique S ainsi que les probabilités des transitions entre les états quantiques correspondants, mais il ne fournit pas autant d'informations que la densité de probabilités en statistique classique dans l'espace des phases [28,29]. Ceci n'est pas possible en mécanique quantique en vertu du principe d'incertitude. La meilleure approximation, dans ce cas, est la fonction de Wigner w que l'on peut obtenir à partir de la matrice densité :

$$\rho(x, x', t) = \int dp w(q, p, t) \exp^{-ipu} = \left\langle q + \frac{u}{2} \middle| \rho(t) \middle| q - \frac{u}{2} \right\rangle = F(q, u) \quad (5.52)$$

où

$$x = q + \frac{u}{2} \quad (5.53)$$

$$x' = q - \frac{u}{2} \quad (5.54)$$

De la même manière, on peut l'écrire en représentation impulsion :

$$\rho\left(\Pi = p + \frac{v}{2}, \Pi' = p - \frac{v}{2}, t\right) = \int dq w(q, p, t) \exp^{-iqv} = \left\langle p + \frac{v}{2} \middle| \rho(t) \middle| p - \frac{v}{2} \right\rangle = G(p, v) \quad (5.55)$$

La distribution de Wigner vérifie les propriétés suivantes :

$$R(q) = \int dp w(q, p, t) = \langle q | \rho(t) | q \rangle = F(q, 0) \quad (5.56)$$

$$P(p) = \int dq w(q, p, t) = \langle p | \rho(t) | p \rangle = G(p, 0) \quad (5.57)$$

où $R(q)$ et $P(p)$ sont les densités de probabilité en position et en impulsion, respectivement, d'où l'on déduit la normalisation

$$\text{tr}(\rho) = \int dq dp w(q, p, t) = 1 \quad (5.58)$$

Reprenons l'équation [Eq (5.1.50)] dans laquelle on utilise [28] la transformation

$$q = \frac{x + x'}{2} \quad (5.59)$$

$$u = x - x' \quad (5.60)$$

d'où

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q} + \frac{\partial}{\partial u} \quad (5.61)$$

$$\frac{\partial}{\partial x'} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial u} \quad (5.62)$$

Après une intégration par parties pour chaque terme, on obtient l'équation d'évolution de $w(q, p, t)$ [30]

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{p}{m} \frac{\partial w}{\partial q} + m(\omega^2 + \tilde{\omega}^2) \frac{\partial w}{\partial p} + \gamma \frac{\partial(pw)}{\partial p} - f \frac{\partial^2 w}{\partial p \partial q} + D \frac{\partial^2 w}{\partial p^2} \quad (5.63)$$

Étudions l'équation précédente dans une superposition de deux états cohérents, dont l'état initial est donné par

$$\psi(x, t = 0) = \psi_+(x, t = 0) + \psi_-(x, t = 0) \quad (5.64)$$

La première composante

$$\psi_+(x, t = 0) = N \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\delta^2} \right] \exp[ip_0 x] \quad (5.65)$$

est localisé en x_0 et se propage dans le sens négatif avec une impulsion p_0 . La second

$$\psi_-(x, t = 0) = N \exp \left[-\frac{(x + x_0)^2}{2\delta^2} \right] \exp[-ip_0 x] \quad (5.66)$$

est localisée en $-x_0$ et se propage dans le sens positif.

La fonction de Wigner associée à $\psi(x, t = 0)$ est

$$w(q, p, t = 0) = w_+(q, p, t = 0) + w_-(q, p, t = 0) + w_{int}(q, p, t = 0) \quad (5.67)$$

où

$$w_+(q, p, t = 0) = N^2 \delta^2 \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\delta^2} \right] \exp[-\delta^2 (p - p_0)^2] \quad (5.68)$$

est la fonction de Wigner associée à ψ_+ , et

$$w_-(q, p, t = 0) = N^2 \delta^2 \exp \left[-\frac{(x + x_0)^2}{2\delta^2} \right] \exp [-\delta^2 (p + p_0)^2] \quad (5.69)$$

est celle associée à ψ_- . Le dernier terme

$$w_{int}(q, p, t = 0) = 2N^2 \delta^2 \exp \left[-\frac{x^2}{\delta^2} - \delta^2 p^2 \right] \cos [2x_0 p + 2p_0 x] \quad (5.70)$$

décrit l'interférence entre les deux composantes. C'est à ce terme que nous devons porter notre attention lors de l'évolution au cours du temps. S'il s'annule, l'interférence sera perdue et la décohérence aura lieu[26,31,32].

on montrée que la fonction de Wigner exacte à un instant t quelconque, prend la forme

$$w(q, p, t) = w_+(q, p, t) + w_-(q, p, t) + w_{int}(q, p, t) \quad (5.71)$$

où

$$w_+(q, p, t) = N^2 \delta^2 \frac{\delta_2}{\delta_1} \exp \left[-\frac{(x - x_c)^2}{2\delta_1^2} \right] \exp [-\delta_2^2 (p - p_c - \beta (x - x_c))^2] \quad (5.72)$$

$$w_-(q, p, t) = N^2 \delta^2 \frac{\delta_2}{\delta_1} \exp \left[-\frac{(x + x_c)^2}{2\delta_1^2} \right] \exp [-\delta_2^2 (p + p_c - \beta (x + x_c))^2] \quad (5.73)$$

$$w_{int}(q, p, t) = N^2 \delta^2 \frac{\delta_2}{\delta_1} \exp [-A_{int}] \exp \left[-\frac{x^2}{2\delta_1^2} - \delta_2^2 (p - \beta x)^2 \right] \cos [2k_p p + 2(k_x - \beta k_p) x] \quad (5.74)$$

$$\delta_2(t = 0) = \delta_1(t = 0) = \delta, k_x(t = 0) = p_0, k_p(t = 0) = x_0 \quad (5.75)$$

avec des expressions compliquées et dépendant du temps des coefficients x_c , p_c , δ_1 , δ_2 , β , k_x et k_p . Des formes plus simples peuvent être obtenues en utilisant l'approximation de Bron-Markov[7].

$$\exp [-A_{int}] = \frac{w_{int}(q = 0, p = 0)}{[w_+(q = x_0, p = p_0) + w_-(q = -x_0, p = -p_0)]^{\frac{1}{2}}} \quad (5.76)$$

est appelé « terme de visibilité des interférences ». En effet, il mesure le rapport du pic de w_{int} par rapport à ceux de w_+ et w_- . L'étude de ce terme et la représentation graphique de $w(x, p, t)$ montre que les termes d'interférences disparaissent au cours du temps. Ceci est rapidement visible dans l'espace de configuration et lentement visible dans l'espace des impulsion [7].

L'atténuation de $w_{int}(q, p, t)$ est gouvernée par le « terme de visibilité des interférences » qui s'écrit à haute température sous la forme

$$\exp[-A_{int}] \simeq \exp - \left[\gamma_0 \frac{(2x_0)^2}{\lambda_{DB}^2} \right] t \rightarrow 0. \quad (5.77)$$

Ce qui représente le phénomène de décohérence pour une durée

$$\tau_{\Delta x} = \gamma_0 \frac{\lambda_{DB}^2}{(\Delta x)^2} \quad (5.78)$$

où Δx est la séparation spatiale cohérente et $\lambda_{DB} = \frac{1}{\sqrt{2mk_b T}}$ est la longueur d'onde de De Broglie thermique.

5.3 Mécanique Quantique Stochastique

Considérons l'espace de Hilbert $L^2(\Gamma)$ des fonctions $\psi(q, p)$ de carré sommable définies sur l'espace des phase $\Gamma = \{(q, p) / q \in \mathbb{R}^3, p \in \mathbb{R}^3\}$ avec le produit scalaire

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int_{\Gamma} dq dp \psi_1^*(q, p) \psi_2(q, p) \quad (5.79)$$

On peut construire un sous-espace $L^2(\Gamma_{\xi})$ en ne considérant que les fonctions qui s'obtiennent de la représentation configuration par la transformation unitaire \hat{W}_{ξ} :

$$\psi(q, p) = [\hat{W}_{\xi} \hat{\psi}] (q, p) = \int_{\mathbb{R}^3} \hat{\xi}_{q,p}^*(x) \hat{\psi}(x) dx \quad (5.80)$$

$$\hat{\xi}_{q,p}(x) = [U(q, p) \hat{\xi}](x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} p \cdot (x - q)\right) \hat{\xi}(x - q) \quad (5.81)$$

où $\hat{\xi}$ est une fonction qui doit vérifier les propriétés suivantes :

- La normalisation $\|\hat{\xi}\| = (2\pi\hbar)^{3/2}$ pour assurer l'unitarité $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \hat{\psi}_1 | \hat{\psi}_2 \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} dx \hat{\psi}_1^*(x) \hat{\psi}_2(x)$
- L'invariance par rotation $\hat{\xi}(Rx) = \hat{\xi}(x)$ pour assurer l'équivalence de la représentation espace des phases $L^2(\Gamma_{\xi})$ avec la représentation configuration $L^2(\mathbb{R}^3)$.
- La réalité $\hat{\xi}^*(x) = \hat{\xi}(x)$ si l'on veut que la densité de courant quantique soit définie d'une manière naturelle $j = j_{\xi}$

$$j = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\hbar}{2mi} \psi^*(q, p) \overleftrightarrow{\nabla}_q \psi(q, p) dp \quad (5.82)$$

$$j_{\xi} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{p}{m} |\psi(q, p)|^2 dp \quad (5.83)$$

La probabilité (marginale) que la mesure de la position donne une valeur q dans la région \hat{B} est

$$P_\psi(\hat{B}) = \int_{\hat{B}} dq \int_{R^3} dp |\psi(q, p)|^2 \quad (5.84)$$

$$= \int_{\hat{B}} dq \int_{R^3} dx \hat{\chi}_q(x) \left| \hat{\psi}(x) \right|^2 \quad (5.85)$$

$$\hat{\chi}_q(x) = (2\pi\hbar)^3 \left| \hat{\xi}(x - q) \right|^2 \quad (5.86)$$

Cela signifie que la fonction $\hat{\chi}$ doit être considérée comme probabilité conditionnelle que l'appareil de mesure donne la valeur q alors que la particule se trouve à la position x . L'intégrale $\int_{R^3} dx \hat{\chi}_q(x) \left| \hat{\psi}(x) \right|^2$ est la probabilité que cet appareil donne la valeur q indépendamment de la position de la particule. La fonction $\hat{\chi}$ est appelée fonction de confiance et caractérise l'imperfection de l'appareil de mesure. Sa racine $\hat{\xi}$ est interprétée alors comme fonction d'onde propre de l'appareil de mesure qui devient désormais quantique. Les mêmes résultats s'obtiennent en utilisant la représentation impulsion (\tilde{W}_ξ , $\tilde{\psi}(k)$, $\tilde{\xi}_{q,p}(k) = e^{\frac{i}{\hbar}kq} \tilde{\xi}(k)$, et $\tilde{\chi}_q(x) = (2\pi\hbar)^3 \left| \tilde{\xi}(x - q) \right|^2$). Dans cette théorie, il est possible de mesurer simultanément la position q et l'impulsion p sans violer le principe d'incertitude car chaque variable est entachée d'erreur déterminée par $\hat{\chi}$ et $\tilde{\chi}$ [4],[34]. Une façon succincte de résumer ceci est dire que $L^2(\Gamma_\xi)$ détermine une représentation dans un espace des phases stochastique $\Gamma_\xi = \{(q, p, \chi_{q,p}) / (q, p) \in \Gamma\}$. C'est-à-dire que la fonction d'onde $\psi(q, p)$ est l'amplitude de probabilité que la mesure simultanée de la position et de l'impulsion donne la valeur stochastique $(q, p, \chi_{q,p})$ liée à la valeur réelle (x, k) au moyen de la distribution

$$\chi_{q,p}(x, k) = \hat{\chi}_q(x) \tilde{\chi}_p(k) \quad (5.87)$$

La famille $\{|\xi_{q,p}\rangle / (q, p) \in \Gamma\}$, où $\xi = \hat{W}_\xi \hat{\xi}$ est la fonction d'onde propre dans la représentation espace des phases stochastique. Elle définit un opérateur de projection P_ξ de $L^2(\Gamma)$ sur $L^2(\Gamma_\xi)$ qui vérifient donc la relation de fermeture dans ce dernier :

$$P_\xi = \int_{\Gamma} |\xi_{q,p}\rangle dq dp \langle \xi_{q,p}| = 1_{L^2(\Gamma_\xi)} \quad (5.88)$$

On dit alors que l'état $|\xi\rangle$ ou l'opérateur $\gamma = |\xi\rangle\langle\xi|$ est générateur d'une résolution de l'identité. Ainsi, un état quelconque possède la décomposition

$$|\psi\rangle = \int_{\Gamma} dqdp \psi(q,p) |\xi_{q,p}\rangle \quad (5.89)$$

$$\psi(q,p) = \langle \xi_{q,p} | \psi \rangle \quad (5.90)$$

La deuxième ligne de l'égalité vient de l'unitarité de \hat{W}_{ξ} et de la définition [4] qui n'est autre que le produit scalaire dans la représentation configuration

$$\psi(q,p) = \langle \hat{\xi}_{q,p} | \hat{\psi} \rangle = \langle \xi_{q,p} | \psi \rangle \quad (5.91)$$

En restreignant l'intégrale de la relation de fermeture à une région B de l'espace des phases Γ , on obtient des opérateurs positifs (et non de projection)

$$E(B) = \int_B |\xi_{q,p}\rangle dqdp \langle \xi_{q,p}| \quad (5.92)$$

qui donnent les probabilités

$$P_{\psi}(B) = \langle \psi | E(B) | \psi \rangle = \int_B |\psi(q,p)|^2 dqdp \quad (5.93)$$

pour que la mesure simultanée de la position et de l'impulsion donne un résultat (q,p) dans B au sens stochastique.

La fonction d'onde dépendante du temps vérifie l'équation de Schrödinger par rapport à q

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q,p,t)}{\partial t} = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_q + V(Q) \right] \psi(q,p,t) \quad (5.94)$$

où $V(Q)$ est le potentiel d'interaction exprimé en fonction de l'opérateur Q .

5.4 Représentation espace des phases stochastique

Pour un système de N particules stochastiques, on considère l'espace des phases

$$\Gamma^{3N} = \{(q,p) / q = (q_1, \dots, q_N) \in \mathbb{R}^{3N}, p = (p_1, \dots, p_N) \in \mathbb{R}^{3N}\} \quad (5.95)$$

et les états propres stochastiques

$$|\xi_{q,p}\rangle = |\xi_{q_1,p_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\xi_{q_N,p_N}\rangle \quad (5.96)$$

On leur associe l'opérateur

$$\gamma_{qp} = U_{qp} \gamma U_{qp}^\dagger = |\xi_{q,p}\rangle \langle \xi_{q,p}| \quad (5.97)$$

où

$$\gamma = |\xi\rangle \langle \xi| \quad (5.98)$$

et $U_{q,p}$ est le produit tensoriel des transformations $U(q_i, p_i)$ [4]. La matrice densité $\rho(q, p)$ dans la représentation espace des phases est liée à l'opérateur densité ρ de la mécanique quantique est définie par

$$\rho(q, p) = \text{tr}(\rho \gamma_{qp}) = \langle \xi_{q,p} | \rho | \xi_{q,p} \rangle \quad (5.99)$$

A l'aide de l'opérateur positif

$$\hat{P}_\gamma(\Delta) = \int_{\Delta} \gamma_{qp} dq dp \quad (5.100)$$

$$\Delta \subset \Gamma^{3N} \quad (5.101)$$

on calcule les probabilités de présence

$$P_\rho(\Delta) = \text{tr}(\hat{P}_\gamma(\Delta) \rho) \quad (5.102)$$

$$= \int_{\Delta} \rho(q, p) dq dp \quad (5.103)$$

Contrairement à la fonction de Wigner $w(q, p)$, la matrice densité $\rho(q, p)$ est définie positive et s'interprète comme une densité de probabilité comme en témoigne la relation précédente. L'idée du présent travail est d'étudier la décohérence et l'évolution des systèmes quantiques ouverts dans la représentation espace des phases stochastique qui fournit une bonne densité de probabilité[4].

à fin d'étudier le mouvement Brownien dans l'espace des phases stochastique, on fait la projection de l'équation de Caldeira-Legget, qui est donnée par

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H + \frac{1}{2}m\tilde{\omega}^2 Q^2, \rho] - i\gamma[Q, \{P, \rho\}] - D[Q, [Q, \rho]] - f[Q, [P, \rho]] \quad (5.104)$$

la projection donne

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(q, p, q', p', t) = \left\langle \xi_{q,p} | \frac{d\rho}{dt} | \xi_{q',p'} \right\rangle \quad (5.105)$$

$$= \left\langle \xi_{q,p} | -i[H + \frac{1}{2}m\tilde{\omega}^2 Q^2, \rho] - i\gamma[Q, \{P, \rho\}] - D[Q, [Q, \rho]] - f[Q, [P, \rho]] | \xi_{q',p'} \right\rangle \quad (5.106)$$

ou on utilise la représentation espace des phases stochastique pour les opérateurs Q et P dont les expressions sont respectivement

$$\langle \xi_{q,p} | Q \rho | \xi_{q',p'} \rangle = (q + i\partial_p) \langle \xi_{q,p} | \rho | \xi_{q',p'} \rangle = (q + i\partial_p) \rho(q, p, q', p', t) \quad (5.107)$$

et

$$\langle \xi_{q,p} | P \rho | \xi_{q',p'} \rangle = -i\partial_q \rho(q, p, q', p', t) \quad (5.108)$$

le calcul de chaque terme a part donne

$$\begin{aligned} \text{Terme unitaire : } & \left\langle \xi_{q,p} \left| -i \left[\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \Omega^2 Q^2, \rho \right] \right| \xi_{q',p'} \right\rangle = \\ & \left[\frac{1}{2} \frac{i}{m} (\partial_q^2 - \partial_{q'}^2) - \frac{1}{2} i m \Omega^2 (q^2 - (q')^2) \right] \rho + \left[\frac{1}{2} i m \Omega^2 (\partial_p^2 - \partial_{p'}^2) + m \Omega^2 (q \partial_p + q' \partial_{p'}) \right] \rho \end{aligned} \quad (5.109)$$

Terme γ :

$$\langle \xi_{q,p} | -i\gamma [Q, \{P, \rho\}] | \xi_{q',p'} \rangle = \gamma (q' - q) (\partial_q - \partial_{q'}) \rho - i\gamma (\partial_q - \partial_{q'}) (\partial_p + \partial_{p'}) \rho \quad (5.110)$$

Terme en f :

$$= \langle \xi_{q,p} | -f [Q, [P, \rho]] | \xi_{q',p'} \rangle = -if (q' - q) (\partial_q + \partial_{q'}) \rho - f (\partial_q + \partial_{q'}) (\partial_p + \partial_{p'}) \rho \quad (5.111)$$

:

Terme D :

$$-D (q' - q)^2 \rho \langle \xi_{q,p} | -D [Q, [Q, \rho]] | \xi_{q',p'} \rangle = +2iD (q' - q) (\partial_p + \partial_{p'}) \rho + D (\partial_p + \partial_{p'})^2 \rho \quad (5.112)$$

La projection de l'équation Caldeira-Legget dans $L^2(\Gamma_\xi)$ donne

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(q, p, q', p', t) = \Delta(q, q') \rho(q, p, q', p', t) + \Delta_{stoch}(q, p, q', p') \rho(q, p, q', p', t) \quad (5.113)$$

L'opérateur $\Delta(q, q')$ est celui de la mécanique quantique conventionnelle (équation de Caldeira-Legget en représentation coordonnées [Eq (5.1.50)]). Le second est un terme stochastique donné par :

$$\Delta_{stoch}(q, p, q', p') = (\partial_p + \partial_{p'}) \left[\hat{D}_+(q, p) + \hat{D}_-(q', p') \right] \quad (5.114)$$

où

$$\hat{D}_\pm(q, p) = m\Omega^2 q - (f \pm i\gamma) \partial_q + D\partial_p \quad (5.115)$$

La nullité du terme stochastique [Eq (5.4.20)] peut éventuellement nous permettre de retrouver la description de mécanique quantique conventionnelle [Eq (5.1.50)], à partir de l'équation [Eq (5.4.19)].

Chapitre 6

conclusion

En mécanique quantique, l'état d'un système physique est généralement représenté par un ket de l'espace de Hilbert qui vérifie les axiomes de la mesure et dont l'évolution est donnée par l'équation de Schrödinger. Dans le présent travail, cette dernière a été remplacée par l'équation de Von-Neumann décrivant l'évolution de la matrice densité qui est commode dans l'étude des états de mélange statistique et des états intriqués. Nous avons utilisé pour décrire l'état du système dans la pré-mesure selon le modèle de Von-Neumann.

Le même formalisme de la matrice densité a été exploité aussi pour décrire l'interaction environnement-système où la décohérence n'est plus un postulat, mais une conséquence de l'orthogonalité des états de l'environnement. En outre, ce modèle résout le problème de la base préférée en choisissant les états propres de l'observable (mesurée) qui ne s'intriquent pas avec l'environnement (super-selection).

De tels résultats ont donné naissance à l'étude de la dynamique irréversible des systèmes quantiques ouverts. Leur évolution est régie par l'équation de Born-Markov qui est déduite de la trace partielle de la matrice densité du système global en utilisant l'approximation de Born puis celle de Markov. Le phénomène de décohérence représente la perte de l'information du système au sein d'un environnement possédant un grand nombre de degrés de liberté, ce qui suggère l'irréversibilité de la dynamique. Pour cela on ne peut considérer l'ensemble des opérateurs d'évolution comme un groupe à un paramètre à cause de l'absence de l'élément inverse. Nous passons ainsi au formalisme du semi-groupe avec les super-opérateurs, l'équation de Born-Markov prend ainsi une nouvelle forme dite équation de Lindblad où la positivité de l'opérateur densité est plus évidente [Appendice].

L'étude du mouvement brownien d'un oscillateur harmonique a conduit à l'équation de Caldeira-Legget qui a fait apparaître, en plus de l'évolution unitaire réversible, des termes de dissipation en énergie et de diffusion. Cette équation s'écrit dans la représentation configuration mais s'étudie dans la représentation espace des

phases où le rôle de la matrice densité est pris par la fonction de Wigner. Comme cette dernière n'est pas toujours définie-positve, nous avons repris l'étude de la théorie quantique stochastique qui offre d'une part, une représentation espace des phases avec une mesure simultanée mais imprécise de la coordonnée et de l'impulsion de la particule [4], et d'un autre coté, une densité de probabilité définie-positve.

Ceci nous a permis de vérifier que les équations de Born-Markov de Caldeira-Legget demeurent valables en théorie stochastique. L'écriture de la dernière équation dans l'espace des phases stochastique a reproduit dans l'équation d'évolution [Eq (5.4.19)], la description de la mécanique quantique conventionnelle [Eq (5.1.50)], ainsi qu'un nouveau terme stochastique [Eq (5.4.20)], ce qui peut offrir les perspectives suivantes :

- Poursuivre l'étude du mouvement quantique brownien en tenant compte de l'effet de l'imprécision de l'appareil de mesure à l'aide des fonctions de confiance.
- L'application du modèle, avec des fonctions d'ondes stochastiques propres gaussiennes [4], permettrait éventuellement d'établir une relation entre la longueur caractéristique stochastique et le temps de décohérence.
- Reprendre toutes les études de la décohérence dans le cadre de la théorie stochastique, ce qui constitue une multitude d'axes de recherche.

Appendice :

6.1 Définition d'une mesure mathématique

Soit un ensemble non vide E et soit $P(E)$ l'ensemble des parties de E .
une partie $\mathfrak{R} = \{S_k\}_{k=0, \dots, \infty}$ de $P(E)$, est dite σ -anneau, si elle vérifie

$$\forall S_1, S_2 \in \mathfrak{R}, S_1 \cup S_2 \in \mathfrak{R}$$

$$\forall S_1, S_2 \in \mathfrak{R}, S_1 \cap S_2 \in \mathfrak{R}$$

Le σ -anneau \mathfrak{R} est dit σ -algèbre

une application $\mu : \mathfrak{R} \rightarrow \mathbb{R}^+$ est dite mesure si elle vérifie elle vérifie[34]

$$\mu(\emptyset) = 0$$

$$\mu(S_k) \geq 0$$

$$\mu\left(\bigcup_{k \geq 0} S_k\right) = \sum_{k \geq 0} \mu(S_k)$$

6.2 Définition d'un semi groupe

On appelle semi-groupe à un paramètre sur un espace de Banach E , la donnée d'un ensemble $\{T_t, t \geq 0\}$ d'opérateurs linéaires et bornés qui vérifient les conditions suivantes[34] :

$$T_t T_s = T_{t+s} \tag{6.1}$$

$$T_0 = I \tag{6.2}$$

Le générateur J du semi-groupe vérifie

$$\lim_{t \rightarrow 0} \|T_t x - (x + t Jx)\| = 0 \tag{6.3}$$

où x est dans le domaine de J ($x \in Dom(J)$), un sous-espace invariant de E sous l'action de T_t [aliki], d'où

$$(T_t J - J T_t) x = 0 \quad (6.4)$$

On exprime les éléments du semi-groupe en fonction du générateur à l'aide de l'exponentielle

$$T_t = \exp(Jt) = \sum_{n \geq 0} \frac{t^n}{n} J^n \quad (6.5)$$

On s'intéresse dans notre cas à la situation où $E = T(H_S)$ et $T_t = \exp(\mathcal{L}t)$ où J n'est que le Liouvillien \mathcal{L} .

6.3 Propriétés Des super-opérateurs :

Un super-opérateur K est une application linéaire de qui doit vérifier les conditions suivantes [18] :

$$K : T(H_S) \rightarrow T(H_S)$$

La linéarité

$$K(\alpha\rho + \beta\varrho) = \alpha K(\rho) + \beta K(\varrho)$$

L'hermiticité

$$K(\rho) = [K(\rho)]^\dagger$$

Conservation de la trace

$$tr [K(\rho)] = 1$$

La positivité

$$K(\rho) \geq 0$$

:

La représentation de Karus de l'évolution de ρ_S est donnée par :

$$K(\rho_S) = \sum_{\mu} M_{\mu} \rho_S M_{\mu}^\dagger = \rho'_S$$

:

La représentation de Karus de l'opérateur K dans $T(H_S)$ conserve les propriétés suivantes :

L'hermiticité

$$\rho'_S = [\rho'_S]^\dagger$$

La conservation de la trace, qui résulte de la relation de fermeture

$$tr [\rho'_S] = 1$$

La positivité

$$\langle S | \rho'_S | S \rangle = \left\langle S \left| \sum_{\mu} M_{\mu} \rho_S M_{\mu}^{\dagger} \right| S \right\rangle = \sum_{\mu} \langle S^{\mu} | \rho_S | S^{\mu} \rangle \geq 0$$

:

6.4 Espace des opérateurs linéaires et bornés

Considérons un espace de Hilbert H_S séparable sur \mathbb{C} dont le produit scalaire de deux éléments φ et Ψ est noté par $\langle \varphi | \Psi \rangle$, et la norme d'un élément par $\|\Psi\| = \sqrt{\langle \Psi | \Psi \rangle}$. L'ensemble $L(H_S)$ des opérateurs linéaires de H_S est doté de la norme infinie

$$\|A\|_{\infty} = \sup_{\|\Psi\| \leq 1} \|A\Psi\| \quad (6.6)$$

où $A \in L(H_S)$ et $\Psi \in H_S$. Un opérateur A de $L(H_S)$ est dit borné s'il vérifie

$$\sup_{\|\Psi\| \leq 1} \|A\Psi\| \leq \infty \quad (6.7)$$

L'ensemble des opérateurs de $L(H_S)$ vérifiant cette propriété est noté $B(H_S)$ [34]. Il constitue une algèbre de Banach et vérifie

$$\begin{aligned} \langle A^{\dagger} \Psi | \varphi \rangle &= \langle \Psi | A \varphi \rangle & (6.8) \\ (AB)^{\dagger} &= B^{\dagger} A^{\dagger} \\ (A^{\dagger})^{\dagger} &= A \\ (\alpha A + \beta B)^{\dagger} &= \alpha^* A^{\dagger} + \beta^* B^{\dagger} \\ \|A^{\dagger} A\|_{\infty} &= \|A^2\|_{\infty} = \|(A^{\dagger})^2\|_{\infty} \end{aligned}$$

Un opérateur $A \in B(H_S)$ est dit auto-adjoint (hermitique) si

$$A^{\dagger} = A \quad (6.9)$$

Un opérateur $A \in B(H_S)$ est positif $A \geq 0$ si

$$\langle \Psi | A | \Psi \rangle \geq 0; \quad \forall \Psi \in H_S \quad (6.10)$$

La trace d'un opérateur $A \in B(H_S)$ est donnée par

$$\text{tr}(A) = \sum_n \langle \varphi_n | A | \varphi_n \rangle \quad (6.11)$$

où $\{|\varphi_n\rangle\}_n$ est une base orthonormée. Un opérateur densité $\rho \in B(H_S)$ est "mathématiquement acceptable" ou bien un opérateur trace, si

$$\text{tr}(\rho\rho^*)^{1/2} \text{ existe} \quad (6.12)$$

L'ensemble de ces opérateurs est un espace de Banach noté $T(H_S)$ et ayant la norme

$$\|\rho\|_1 = \text{tr}(\rho\rho^*)^{1/2} \quad (6.13)$$

correspondant au produit scalaire (pour une base orthonormée $\{\rho_\alpha\}$)

$$(\rho_\alpha, \rho_\beta) = \text{tr}(\rho_\alpha\rho_\beta^*)^{1/2} = \delta_{\alpha\beta} \quad (6.14)$$

La représentation spectrale de $\rho \in B(H_S)$ s'il est hermitique et elle est donnée par

$$\rho = \sum_{k=1}^M \lambda_k |\varphi_k\rangle \langle \varphi_k| \quad (6.15)$$

6.5 Équation de Born-Markov stochastique pour le mouvement Brownien

Équation de Born-Markov pour le mouvement Brownien

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H + \frac{1}{2}m\Omega^2Q^2, \rho] - i\gamma[Q, \{P, \rho\}] - D[Q, [Q, \rho]] - f[Q, [P, \rho]]$$

Avec $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2Q^2$. Posons $\Omega^2 = \omega^2 + \tilde{\omega}^2$, et le pseudo-potentiel $\tilde{V} = \frac{1}{2}m\Omega^2Q^2$, alors

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2Q^2, \rho] - i\gamma[Q, \{P, \rho\}] - D[Q, [Q, \rho]] - f[Q, [P, \rho]]$$

Calcul :

$$\langle \xi_{q,p} | Q \rho | \xi_{q',p'} \rangle = (q + i\partial_p) \langle \xi_{q,p} | \rho | \xi_{q',p'} \rangle = (q + i\partial_p) \rho(q, p, q', p', t)$$

L'hermiticité de ρ et Q , conduit à :

$$\langle \xi_{q,p} | \rho Q | \xi_{q',p'} \rangle = \langle \xi_{q',p'} | Q \rho | \xi_{q,p} \rangle^* = [(q' + i\partial_{p'}) \langle \xi_{q',p'} | \rho | \xi_{q,p} \rangle]^* = (q' - i\partial_{p'}) \langle \xi_{q,p} | \rho | \xi_{q',p'} \rangle$$

D'où

$$\langle \xi_{q,p} | \rho Q | \xi_{q',p'} \rangle = (q' - i\partial_{p'}) \rho(q, p, q', p', t)$$

Pour l'impulsion, un calcul identique nous donne

$$\langle \xi_{q,p} | P \rho | \xi_{q',p'} \rangle = -i\partial_q \rho(q, p, q', p', t)$$

$$\langle \xi_{q,p} | \rho P | \xi_{q',p'} \rangle = +i\partial_{q'} \rho(q, p, q', p', t)$$

Pour simplifier les calculs ultérieurs, on omettra les kets et bras de ξ ainsi que les variables de ρ . On aura les cas suivants :

a. Application de Q et P à gauche de ρ

$\langle \xi_{q,p} | Q \rho | \xi_{q',p'} \rangle$ sera noté $Q\rho = Q = q + i\partial_p$ (on omet ρ pour simplifier d'avantage)

$\langle \xi_{q,p} | P \rho | \xi_{q',p'} \rangle$ sera noté $P\rho = -i\partial_p \rho = P = -i\partial_q$

b. Application de Q et P à droite de ρ

$\langle \xi_{q,p} | \rho Q | \xi_{q',p'} \rangle$ sera noté $\rho Q' = (q' + i\partial_{p'})\rho = Q' = q' - i\partial_{p'}$

$\langle \xi_{q,p} | \rho P | \xi_{q',p'} \rangle$ sera noté $\rho P' = -i\partial_{p'}\rho = P' = i\partial_{q'}$

Considérons maintenant chaque terme à part

Terme unitaire :

$$\begin{aligned}
 & -i\left[\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 Q^2\right]\rho + i\rho\left[\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 Q^2\right] = -i\left[\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 Q^2\right] + i\left[\frac{P'^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 Q'^2\right] \\
 & = -i\left[\frac{(-i\partial_q)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2(q + i\partial_p)^2\right] + i\left[\frac{(i\partial_{q'})^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2(q' - i\partial_{p'})^2\right] \\
 & = -i\frac{(-i\partial_q)^2}{2m} + \frac{i}{2}m\Omega^2(q + i\partial_p)^2 + i\frac{(i\partial_{q'})^2}{2m} + \frac{i}{2}m\Omega^2(q' - i\partial_{p'})^2 \\
 & = m\Omega^2 q' \partial_{p'} - m\Omega^2 q \partial_p + \frac{1}{2}imq^2\Omega^2 + \frac{1}{2}im\Omega^2(q')^2 + \frac{1}{2}\frac{i}{m}\partial_q^2 - \frac{1}{2}\frac{i}{m}\partial_{q'}^2 - \frac{1}{2}im\Omega^2\partial_p^2 - \\
 & \frac{1}{2}im\Omega^2\partial_{p'}^2 \\
 & \frac{1}{2}\frac{i}{m}(\partial_q^2 - \partial_{q'}^2) + \frac{1}{2}im\Omega^2(q^2 + (q')^2) + m\Omega^2(q'\partial_{p'} - q\partial_p) - \frac{1}{2}im\Omega^2(\partial_p^2 + \partial_{p'}^2) \\
 & -i\left(\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 Q^2\right) + i\left(\frac{P'^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 Q'^2\right) = \frac{1}{2}\frac{i}{m}\partial_q^2 - \frac{1}{2}\frac{i}{m}\partial_{q'}^2 - \frac{1}{2}im\Omega^2(q + i\partial_p)^2 + \\
 & \frac{1}{2}im\Omega^2(q' - i\partial_{p'})^2 \\
 & = \frac{1}{2}\frac{i}{m}\partial_q^2 - \frac{1}{2}\frac{i}{m}\partial_{q'}^2 - \frac{1}{2}imq^2\Omega^2 + \frac{1}{2}im\Omega^2(q')^2 + \frac{1}{2}im\Omega^2\partial_p^2 - \frac{1}{2}im\Omega^2\partial_{p'}^2 + m\Omega^2 q \partial_p + \\
 & m\Omega^2 q' \partial_{p'} \\
 & = \frac{1}{2}\frac{i}{m}(\partial_q^2 - \partial_{q'}^2) - \frac{1}{2}im\Omega^2(q^2 - (q')^2) + \frac{1}{2}im\Omega^2(\partial_p^2 - \partial_{p'}^2) + m\Omega^2(q\partial_p + q'\partial_{p'})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \left\langle \xi_{q,p} \left| -i\left[\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 Q^2, \rho\right] \right| \xi_{q',p'} \right\rangle = \\
 \left[\frac{1}{2}\frac{i}{m}(\partial_q^2 - \partial_{q'}^2) - \frac{1}{2}im\Omega^2(q^2 - (q')^2) \right] \rho \\
 + \left[\frac{1}{2}im\Omega^2(\partial_p^2 - \partial_{p'}^2) + m\Omega^2(q\partial_p + q'\partial_{p'}) \right] \rho
 \end{aligned}$$

Terme γ

$$\begin{aligned}
 -i\gamma[Q, \{P, \rho\}] & = -i\gamma Q\{P, \rho\} + i\gamma\{P, \rho\}Q = -i\gamma QP\rho - i\gamma Q\rho P + i\gamma P\rho Q + i\gamma\rho PQ \\
 & = -i\gamma QP - i\gamma QP' + i\gamma PQ' + i\gamma P'Q' \\
 & = \gamma q' \partial_q - \gamma q \partial_q + \gamma q' \partial_{q'} - \gamma q \partial_{q'} - i\gamma \partial_p \partial_q + i\gamma \partial_p \partial_{q'} - i\gamma \partial_q \partial_{p'} + i\gamma \partial_{p'} \partial_{q'} \\
 & = \gamma(q' - q)(\partial_q - \partial_{q'}) - i\gamma(\partial_q - \partial_{q'})(\partial_p + \partial_{p'})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \xi_{q,p} | -i\gamma[Q, \{P, \rho\}] | \xi_{q',p'} \rangle = \\
 \gamma(q' - q)(\partial_q - \partial_{q'})\rho \\
 - i\gamma(\partial_q - \partial_{q'})(\partial_p + \partial_{p'})\rho
 \end{aligned}$$

Terme D

$$\begin{aligned}
 -D[Q, [Q, \rho]] &= -DQ[Q, \rho] + D[Q, \rho]Q = -DQ^2\rho + 2DQ\rho Q - D\rho Q^2 = \\
 &= -DQ^2 + 2DQ\rho - D(Q')^2 \\
 &= 2qDq' - 2iqD\partial_p + 2iDq'\partial_p - 2iqD\partial_{p'} + 2iDq'\partial_{p'} + 2D\partial_p\partial_{p'} - q^2D - D(q')^2 + \\
 &D\partial_p^2 + D\partial_{p'}^2 \\
 &= -D(q' - q)^2 + 2iD(q' - q)(\partial_p + \partial_{p'}) + D(\partial_p + \partial_{p'})^2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \xi_{q,p} | -D[Q, [Q, \rho]] | \xi_{q',p'} \rangle &= \\
 &= -D(q' - q)^2 \rho \\
 &+ 2iD(q' - q)(\partial_p + \partial_{p'}) \rho \\
 &+ D(\partial_p + \partial_{p'})^2 \rho
 \end{aligned}$$

Terme en f

$$\begin{aligned}
 -f[Q, [P, \rho]] &= -fQ[P, \rho] + f[P, \rho]Q = -fQP\rho + fQ\rho P + fP\rho Q - f\rho PQ \\
 &= -fQP + fQP' + fPQ' - fP'Q' \\
 &= ifq\partial_q - ifq'\partial_q + ifq\partial_{q'} - ifq'\partial_{q'} - f\partial_p\partial_q - f\partial_p\partial_{q'} - f\partial_q\partial_{p'} - f\partial_{p'}\partial_{q'} \\
 &= -if(q' - q)(\partial_q + \partial_{q'}) - f(\partial_q + \partial_{q'}) (\partial_p + \partial_{p'})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \xi_{q,p} | -f[Q, [P, \rho]] | \xi_{q',p'} \rangle &= \\
 &= -if(q' - q)(\partial_q + \partial_{q'}) \rho \\
 &= -f(\partial_q + \partial_{q'}) (\partial_p + \partial_{p'}) \rho
 \end{aligned}$$

:

$$\begin{aligned}
 \Delta_{stochastique}(q, p, q', p') \langle \xi_{q,p} | \rho | \xi_{q',p'} \rangle &= \\
 &= (\partial_p + \partial_{p'}) [m\Omega^2(q + q') - f(\partial_q + \partial_{q'}) - i\gamma(\partial_q - \partial_{q'}) + D(\partial_p + \partial_{p'})] \langle \xi_{q,p} | \rho | \xi_{q',p'} \rangle \\
 &= (\partial_p + \partial_{p'}) [m\Omega^2(q + q') - (f + i\gamma)\partial_q - (f - i\gamma)\partial_{q'} + D(\partial_p + \partial_{p'})] \langle \xi_{q,p} | \rho | \xi_{q',p'} \rangle \\
 &= (\partial_p + \partial_{p'}) [\{m\Omega^2q - (f + i\gamma)\partial_q + D\partial_p\} + \{m\Omega^2q' - (f - i\gamma)\partial_{q'} + D\partial_{p'}\}] \langle \xi_{q,p} | \rho | \xi_{q',p'} \rangle \\
 &= (\partial_p + \partial_{p'}) [D(\hat{q}, p) + D^\dagger(\hat{q}', p')] \langle \xi_{q,p} | \rho | \xi_{q',p'} \rangle \tag{6.16}
 \end{aligned}$$

$$\hat{\pm}(q, p) = m\Omega^2q - (f \pm i\gamma)\partial_q + D\partial_p \tag{6.17}$$

Pour la diagonale $\rho(q, p)$ on obtient

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(q, p) = 4 \left[\frac{\partial \tilde{V}}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - f \frac{\partial^2}{\partial p \partial q} + D \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right] \rho(q, p) \tag{6.18}$$

Bibliographie

- [1] J. Von Neumann, *Mathematical Foundations OF Quantum Mechanics* , Princeton University Press (1955).
- [2] M. B. Mensky, *Countinious quantum measurment and path integrals*, IOP Publising Ltd, (1993).
- [3] R. Omnès, *Comprendre la mécanique quantique*, EDP Sciences, (2000).
- [4] E. Prugovesky, *Stochastic quantum mecanics and quntum space time*, Kluwer Academic Publisher, (1984).
- [5] C. Cohen-Tannoudji and al, *Mécanique quantique*, T1,Herman, (1973).
- [6] H. Hachemi, A. Kara-Hachemi, *Eléments de mécanique quantique*, OPU(1998).
- [7] M. Schlosshauer, *Decoherence and The quantum-to-classical transition*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (2007).
- [8] J. Preskill, *Lecture notes on quantum computation*, (1998), <http://www.theory.caltech.edu/preskill/ph229>.
- [9] M. le Bellac, *Physique quantique*, 1e édition, EDPSciences/CNRSÉDITIONS, (2003).
- [10] M. Rédei, M. Stöltzner, *John Von Neumann and the foundations of quantum physics*, Kluwer Academic Publishers, (2001).
- [11] T. Dass, *Measurments and decoherence*, arXiv :quant-ph/0505070 v1, 10 May (2005).
- [12] M. Schlosshauer, *Decoherence,the measurement problem, and interpretations of quantum mechanics*, arXiv :quant-ph/0312059v4, 28 Jun (2005).
- [13] W. H. Zurek, *Environment-induced superselection rules*, Phys. Rev. D 26, 1862–1880 (1982).

- [14] W. H. Zurek, Pointer basis of quantum apparatus : Into what mixture does the wave packet collapse ?, *Phys. Rev. D* 24, 1516–1525 (1981).
- [15] E. Joos, C. Kiefer, J. Kupsch, I.O Stamatescu, H. D. Zeh, *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, Springer
- [16] E. Belorizky, W. Gorecki, *Introduction à la mécanique statistique*, OPU(1993).
- [17] F. A. Reuse, *Électrodynamique et optique quantiques*, polytechnique publications romande(2007).
- [18] M. le Bellac, *Physique quantique*, 2e édition, EDPSciences/CNRSÉDITIONS(2007).
- [19] S. L. Kryszewski and J. Czechowska-Kryszk, Master equation – tutorial approach, arXiv :0801.1757v1 [quant-ph], 11 Jan (2008).
- [20] Y. Rosanov, *Processus aléatoires* éditions Mir. Moscou (1975).
- [21] H-P. Breuer, F. Petruccione, *The theory of open quantum systems*, Oxford University Press,(2002).
- [22] H-P. Breuer, F. Petruccione, Stochastic Dynamics Of Open Quantum systems : Derivation Of The Differential Chapman-Kolmogorov Equation, *Phys. Rev. E* 51,(1994).
- [23] H-P. Breuer, F. Petruccione, Stochastic Dynamics Of Quantum Jumps,*Phys. Rev. E* 52,(1995).
- [24] H-P. Breuer, F. Petruccione, On Liouville Master-Equation Formulation Of Open Quantum systems, preprint THEP 18/1994.
- [25] Heinz–Peter Breuer, Bernd Kappler and Francesco Petruccione Stochastic wave function method for non-Markovian quantum master equations, arXiv :quant-ph/9906024v1, 7 Jun (1999).
- [26] B. L. Hu, J. P. Paz, Y. Zang, Quantum Brownian motion in a general environment : Exact master equation with nonlocal dissipation and colored noise, *Phys. Rev. D* 45, 2843–2861 (1992).
- [27] W. H. Zurek, Decoherence and the Transition from Quantum to Classical—Revisited, Los Alamos Science Number 27,(2002).
- [28] C. Cohen-Tannoudji, Opérateur densité d’une particule quantique, représentation de Wigner, [http ://www.phys.ens.fr/cours/college-de-france/](http://www.phys.ens.fr/cours/college-de-france/).

- [29] E.P. Wigner, M.O. Scully, R.F. O'Connell, M. Hillery, Distributions functions in physics fundamentals, PHYSICS REPORTS (Review Section of Physics Letters) 106, No. 3 (1984) 121—167
- [30] J. J. Halliwell, Alternative derivations of the Ho-Paz-Zhang master equation of quantum Brownian motion, arXiv :quant-ph/9508004 v1 4, Aug (1995).
- [31] J. P. Paz, S. Habib, W. H. Zurek, Reduction of the wave packet : Preferred observable and decoherence time scale, Phys. Rev. D 47, 488–501 (1993).
- [32] C. Cohen-Tannoudji, étude quantitative de la destruction des cohérences spatiales d'une particule Brownienne, (1989-1990). <http://www.phys.ens.fr/cours/college-de-france/>.
- [33] Y.Oualili, La stochasticité pour la particule étendue, Thèse de magistère USTHB, Alger(2006).
- [34] R. Alicki and K. Lendi, Quantum Dynamical Semigroups and Applications, Lect. Notes Phys 717, Springer, Berlin Heidelberg, (2007).