

Zeitschrift: Helvetica Physica Acta

Band: 41 (1968)

Heft: 3

Artikel: Dynamique quantique des systèmes amortis "non markoviens"

Autor: Favre, Christian / Martin, Philippe A.

DOI: <https://doi.org/10.5169/seals-113896>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. [Siehe Rechtliche Hinweise.](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. [Voir Informations légales.](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. [See Legal notice.](#)

Download PDF: 06.10.2024

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

Dynamique quantique des systèmes amortis «non markoviens»

par **Christian Favre** et **Philippe A. Martin**

Institut de Physique Théorique de l'Université de Genève

(14 XII 67)

Abstract. A quantum dynamical description of a small system interacting with a thermal bath is given. The Liouville space formalism allows us to derive a 'Macrocanonical Master Equation' (i. e. an equation describing the evolution of the reduced state of the small system [9, 10]) within a precisely formulated mathematical frame. The weak coupling assumption is taken into account by applying the Born approximation. The integrodifferential equation obtained in this way is solved for the cases where the small system is a spin or a harmonic oscillator interacting with a thermal bath. The solution is valid for a very general class of baths. For these models, the thermodynamic limit taken over the bath suffices to ensure an approach towards thermal equilibrium, and the use of stochastic assumptions is avoided. The approach to equilibrium may be studied in terms of the microscopic structure of the bath. In general it is not an exponential one. The Boltzmann thermal equilibrium is reached for every initial state. In the limit of high temperature and short internal correlation times for the bath, the given macrocanonical master equation reduces to the phenomenological Bloch equation (with two relaxation times $T_1 \neq T_2$) for the spin, and to the Fokker-Planck equation for the harmonic oscillator.

I. Introduction

Le problème fondamental de la mécanique statistique des systèmes hors d'équilibre est de concilier une équation irréversible du type de Boltzmann, aux équations élémentaires de la mécanique classique ou quantique, réversibles. L'histoire de ce problème est déjà fort longue et un très bon survol des différentes approches utilisées pour le résoudre peut être trouvé dans un article de YVON [1]. Cet auteur remarque que la méthode correspondant au traitement macrocanonique semble avoir été sous estimée et que de nombreux résultats intéressants peuvent en être extraits. Cette ligne sera suivie dans ce travail. Elle s'applique en particulier chaque fois que l'approche à l'équilibre d'une quantité microscopique a un sens. C'est le cas lorsque cette quantité microscopique peut être considérée comme représentative de l'état moyen d'un ensemble de systèmes indépendants. On rencontre cette situation lorsqu'on s'intéresse à l'effet (macroscopique) produit par un grand nombre de tels systèmes indépendants «démocratiquement» en interaction avec un thermostat. Bien qu'individuellement aucun élément ne montre un comportement irréversible, l'état représentatif de l'ensemble peut cependant atteindre un équilibre. Cette voie a été développée pour traiter les phénomènes de la résonance magnétique. Une assemblée de spins indépendants couplés à un thermostat montre avec éclat la tendance du système à atteindre l'équilibre thermique. Ce schéma est également commode pour l'étude de la relaxation d'un mode de champ électromagnétique dans une cavité. Son utilité a été mise en

évidence dans la théorie quantique du laser. Ces situations ne peuvent être décrites à l'aide de l'équation maîtresse de Pauli qui ne gouverne que les éléments diagonaux de la matrice densité. Les spécialistes de ces questions ont donc été conduits à faire directement la théorie de leurs expériences et leur but a été avant tout pragmatique. Les points de vues développés dans ce domaine vont être brièvement rappelés ci-dessous.

Une méthode employée pour traiter le bain thermique consiste à le décrire par un potentiel extérieur aléatoire agissant sur le système d'intérêt. L'irréversibilité ainsi que la température sont introduites par une hypothèse ad hoc sur cette variable aléatoire, par exemple l'existence d'un temps de corrélation fini. Ce schéma a été utilisé dans les travaux de pionniers de B. P. P. [2] puis élaboré par REDFIELD [3] et PRIMAS [4]. Une présentation très simple de ce point de vue est donnée par STENHOLM et TER HAAR [5]. Cette approche a pour avantage de ne pas introduire les variables internes du bain. Bien que la compréhension intuitive du phénomène soit assez satisfaisante, une telle méthode offre conceptuellement de sérieux inconvénients, car le traitement ne correspond pas aux principes de base de la mécanique statistique. En effet, dans ce cadre on se proposerait d'obtenir des équations macroscopiques à partir de:

- I les lois de la mécanique qui régissent les particules formant le système,
- II des hypothèses probabilistes qui traduisent notre manque d'information sur le système.

La description mécanique et les considérations statistiques devraient donc être clairement séparées. Ceci n'est évidemment pas le cas pour la méthode du potentiel aléatoire.

Pour pallier cet inconvénient on considère un système physique isolé, obéissant donc à l'équation de Schrödinger, qu'on divise en deux sous-systèmes: le système d'intérêt A et le reste, considéré comme un bain thermique B . Conformément aux principes de base de la mécanique quantique, la quantité contenant l'information nécessaire au calcul des valeurs moyennes de toutes les observables du sous-système A est l'état réduit de A [6]. Il s'obtient par élimination des variables du bain au moyen de l'opération de trace partielle (ou opération de réduction) sur l'opérateur densité du système total $\rho(t)$:

$$\rho_A(t) = \text{Tr}^B \rho(t).$$

Le problème se ramène alors à trouver une équation d'évolution purement mécanique pour $\rho_A(t)$ où le thermostat n'apparaît que par l'intermédiaire de ses valeurs moyennes internes. De plus, la connaissance de l'état du bain n'est requise qu'à l'instant initial. La discussion de l'approche à l'équilibre peut se faire alors en prenant une limite thermodynamique sur le bain.

A notre connaissance BLOCH et WANGNESS [7] ont été les premiers à développer ce point de vue. Cependant ces auteurs introduisent une hypothèse de nature statistique supplémentaire: l'effacement des corrélations entre les deux systèmes, répété après chaque intervalle de temps Δt , si bien que $\rho_A(t)$ n'est plus régi par des lois strictement mécaniques. D'autres auteurs [8] introduisent diverses formulations de ces hypothèses de perte de mémoire. Le système est ainsi rendu «markovien» (cf. IIB). C'est à ARGYRES et KELLEY [9a] qu'il faut attribuer le mérite d'avoir obtenu sur une base

purement mécanique, une équation close pour $\rho_A(t)$ qui contient un terme de mémoire. Sa dérivation suit une ligne parallèle à celle qui conduit à l'équation maîtresse généralisée [10] et nous l'appellerons équation maîtresse macrocanonique (équation (II.31)). En fait, l'équation d'évolution de l'état réduit $\rho_A(t)$ est donnée ici en toute généralité quels que soient les deux systèmes A et B . Cette terminologie est réservée au cas où le système B est un thermostat. FANO [9b] use d'une technique similaire dans sa théorie de la relaxation.

Il faut encore remarquer que dans tous les traitements cités, l'approche à l'équilibre n'est pas étudiée, mais seule la solution stationnaire est calculée. Le problème de savoir si cet état est effectivement atteint pour n'importe quelle condition initiale du système d'intérêt n'est pas abordé.

On se propose de montrer ici que pour des systèmes simples tels l'oscillateur harmonique et le spin 1/2 (ou système à deux niveaux), dont les exemples d'application sont nombreux, les équations de mouvement peuvent être résolues sur cette base purement mécanique. Ainsi, le comportement du système en dehors de l'équilibre et son approche peuvent être discutés pour n'importe quelle condition initiale. Ces évolutions ne sont généralement pas de nature exponentielle. Il est néanmoins clair que pour obtenir une description explicite, il est nécessaire de faire une approximation d'interaction faible. En effet, à notre connaissance un seul modèle est actuellement rigoureusement soluble: c'est celui d'un ensemble d'oscillateurs harmoniques en couplage linéaire [11]. Le calcul de perturbation ordinaire se montre tout à fait inadéquat dans les problèmes d'approche à l'équilibre. Il faut donc recourir à d'autres approximations, et celle qui sera faite ici est du type de celle de Born.

Dans le second paragraphe, le formalisme de l'espace de Liouville est introduit afin de situer la dérivation de l'équation maîtresse macrocanonique dans un cadre mathématique précis. Ainsi, des conditions de validité des opérations effectuées peuvent être données (Appendice A). Les conditions qui restreignent le second système à un thermostat sont introduites et l'approximation de Born précisée. De plus, cette formulation permet de montrer très simplement et en toute généralité que l'hypothèse de chaos moléculaire répété (ou effacement répété des corrélations) conduit à la propriété de semi-groupe pour l'évolution du système réduit.

En application, le troisième paragraphe est consacré à la description d'une expérience de précession libre d'un spin 1/2, ou à la relaxation d'un système à deux niveaux en interaction avec un environnement donné. Les équations intégrodifférentielles obtenues pour les composantes de la matrice densité sont rigoureusement résolues et l'approche à l'équilibre discutée. Dans la limite des températures élevées, l'équation phénoménologique de BLOCH [12] correspondant à notre cas est retrouvée, ce qui concorde bien avec son domaine de validité.

Finalement, dans le dernier paragraphe, l'oscillateur harmonique en interaction avec un thermostat est traité dans la représentation des états cohérents [13]. L'équation de mouvement de la quasiprobabilité P est donnée. Elle se réduit à l'équation de Fokker-Planck habituelle [14] dans le cas où les temps de corrélation du bain sont infiniment courts. Les valeurs moyennes de l'énergie et des opérateurs de position et d'impulsion sont discutées. On termine (Appendice B) par une brève comparaison de ces quantités avec les solutions exactes obtenues dans le cas particulier du couplage linéaire.

II. L'équation maîtresse macrocanonique

A. L'espace de Liouville et l'opérateur de réduction

Considérons deux systèmes A et B , décrits respectivement dans les espaces de Hilbert h_A et h_B , dont les hamiltoniens sont H_A et H_B .

Le système composé, décrit dans l'espace produit $h_A \otimes h_B$, évolue avec la loi unitaire de Schrödinger $U_t = e^{-iHt}$, où H est l'hamiltonien total:

$$H = H_A \otimes I_B + I_A \otimes H_B + V = H_0 + V. \quad (1)$$

On se propose de trouver la loi d'évolution de l'état réduit $\rho_A(t)$:

$$\rho_A(t) = \text{Tr}^B U_t \rho(0) U_t^{-1}. \quad (2)$$

La connaissance de l'état réduit $\rho_A(t)$ à tout temps suffit à décrire l'évolution de toutes les observables relatives au système A [6]. Une caractéristique essentielle de cette évolution est qu'elle n'est plus unitaire, et peut transformer un état pur en un mélange. Il est donc approprié de choisir comme ensemble de base non pas les éléments de l'espace de Hilbert, qui ne décriraient que des états purs, mais l'ensemble des opérateurs densité eux-mêmes. Il faut remarquer que cet ensemble, caractérisé par

$$\rho = \rho^\dagger; \quad \rho > 0; \quad \text{Tr} \rho = 1 \quad (3)$$

n'est pas linéaire, mais jouit seulement de la propriété de convexité. Afin de donner un sens précis aux opérations qu'on effectue sur les états, il convient de considérer une structure un peu plus large que celle qui est définie par (3). Ceci est réalisé par l'introduction de l'espace de Liouville \mathcal{L} , dont les éléments sont les opérateurs de type Hilbert-Schmidt agissant sur h . L'espace de Liouville possède lui-même la structure d'un espace de Hilbert, si bien qu'on est maintenant capable de représenter et de discuter les diverses opérations qu'on effectue sur les états dans le cadre de la théorie des transformations linéaires dans un espace de Hilbert. C'est son principal intérêt, et la raison de son emploi [9b, 10].

Soient \mathcal{L}_A et \mathcal{L}_B les espaces de Liouville attachés respectivement à h_A et h_B . L'espace de Liouville \mathcal{L} du système composé est alors donné par le produit tensoriel habituel

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_A \otimes \mathcal{L}_B.$$

Introduisons maintenant les principaux opérateurs dans l'espace de Liouville \mathcal{L} . Tout d'abord, l'opérateur d'évolution:

$$\mathcal{U}_t \rho = U_t \rho U_t^{-1} \quad (4)$$

et le liouvillien proprement dit:

$$\mathcal{H} \rho = [H, \rho] = [H_0, \rho] + [V, \rho] = (\mathcal{H}_0 + \mathcal{V}) \rho. \quad (5)$$

\mathcal{U}_t est unitaire sur \mathcal{L} et admet \mathcal{H} comme générateur infinitésimal. Nous posons des définitions analogues pour les systèmes individuels A et B .

L'opération de réduction définit également un opérateur linéaire dans \mathcal{L} . Considérons tout d'abord l'opération de trace partielle, notée par \mathcal{J} :

$$\mathcal{J} \rho \equiv \text{Tr}^B \rho \equiv \rho_A. \quad (6)$$

\mathcal{J} conserve les propriétés (3) caractéristiques des états. \mathcal{J} applique donc les états de \mathcal{L} sur ceux de \mathcal{L}_A .

Afin de construire un opérateur agissant dans l'espace de Liouville \mathcal{L} du système composé, il est commode d'envisager une application \mathcal{A} , appelée amplification, de \mathcal{L}_A dans \mathcal{L} par

$$\mathcal{A} \varrho_A = \varrho_A \otimes \varrho_B \quad (7)$$

où ϱ_B est un état fixé qui est supposé commuter avec l'hamiltonien libre du système B :

$$[H_B, \varrho_B] = 0.$$

A cette restriction près, ϱ_B est choisi pour l'instant arbitrairement dans \mathcal{L}_B .

L'opérateur de réduction \mathcal{R} que nous voulons considérer est alors défini par

$$\mathcal{R} = \mathcal{A} \mathcal{J}. \quad (8)$$

\mathcal{R} jouit des deux propriétés remarquables suivantes: premièrement, \mathcal{R} est idempotent

$$\mathcal{R}^2 = \mathcal{R}. \quad (9)$$

On le vérifie en notant que $\mathcal{J} \mathcal{A} = \mathcal{J}_A$, \mathcal{J}_A étant l'opérateur unité dans \mathcal{L}_A ¹⁾. On a aussi

$$\mathcal{R} \mathcal{A} = \mathcal{A}, \quad \mathcal{J} \mathcal{R} = \mathcal{J}. \quad (10)$$

Deuxièmement, \mathcal{R} commute avec le liouvillien libre. On a précisément:

$$\mathcal{R} \mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_0 \mathcal{R} = \mathcal{A} \mathcal{H}_A \mathcal{J} \quad (11)$$

c'est une simple conséquence des définitions et des propriétés de la trace partielle (cf. Appendice A6).

Avec ces notations, l'état réduit (2) s'écrit

$$\varrho_A(t) = \mathcal{J} \mathcal{U}_t \varrho(0) \quad (12)$$

ou encore, dans l'espace de Liouville \mathcal{L} du système composé,

$$\varrho_A(t) \otimes \varrho_B = \mathcal{R} \varrho(t) = \mathcal{R} \mathcal{U}_t \varrho(0). \quad (13)$$

Cette expression montre que l'évolution du système A est gouvernée par $\mathcal{R} \mathcal{U}_t$, appelé opérateur d'évolution réduit. Sa connaissance permet de donner les lois de mouvement de toutes les quantités relatives au système A . En général $\mathcal{R} \mathcal{U}_t$ ne jouit plus des propriétés de groupe et d'unitarité. C'est une application dynamique qui conserve l'hermiticité, la positivité et la normalisation des états, mais qui est de caractère beaucoup plus général que celle de Schrödinger.

La signification de \mathcal{R} est la suivante: supposons que les systèmes soient sans corrélations initiales

$$\varrho(0) = \varrho_A \otimes \varrho_B$$

et qu'on choisisse précisément de faire l'amplification (7) avec ϱ_B , l'état initial du système B . Alors $\varrho(0)$ est invariant sous \mathcal{R} :

$$\mathcal{R} \varrho(0) = \varrho(0). \quad (14)$$

¹⁾ Il faut toutefois remarquer que \mathcal{R} n'est en général pas un projecteur (cf. appendice A).

La quantité $(\mathcal{J} - \mathcal{R}) \varrho(t) = \varrho(t) - \varrho_A(t) \otimes \varrho_B$, qui est nulle à $t = 0$, est donc une mesure des corrélations introduites entre les deux systèmes par leur interaction au cours de l'évolution.

B. L'effacement répété des corrélations

Avant de procéder à la dérivation de l'équation exacte à laquelle obéit $\mathcal{R} \mathcal{U}_t$, nous voulons montrer que l'effacement répété des corrélations entre les systèmes conduit à attribuer à l'évolution réduite le caractère de semi-groupe.

Supposons qu'après un temps Δt les corrélations entre les deux systèmes se sont pratiquement complètement dissipées. L'état du système composé $\varrho(\Delta t)$ peut alors être approximé par l'expression décorrelée $\varrho_A(\Delta t) \otimes \varrho_B(0)$ où le système B est rétabli dans son état initial $\varrho_B(0)$. Supposons de plus que l'on puisse répéter cette approximation après chaque nouvel intervalle de temps Δt . On se convainc que l'état du système composé est donné après un temps $\tau = n \Delta t$ par [15]:

$$\begin{aligned} \varrho(n \Delta t) &\cong \varrho_A(n \Delta t) \otimes \varrho_B(0) \equiv \mathcal{R} \mathcal{U}_{\Delta t} \dots \mathcal{R} \mathcal{U}_{\Delta t} \mathcal{R} \mathcal{U}_{\Delta t} \varrho_A(0) \otimes \varrho_B(0) \\ &= (\mathcal{R} \mathcal{U}_{\Delta t})^n \varrho_A(0) \otimes \varrho_B(0) \end{aligned}$$

l'amplification étant effectuée à chaque fois avec l'état $\varrho_B(0)$. Pour l'état réduit, on obtient immédiatement

$$\varrho_A(n \Delta t) = \mathcal{J}(\mathcal{R} \mathcal{U}_{\Delta t})^n \mathcal{A} \varrho_A(0) = (\mathcal{J} \mathcal{U}_{\Delta t} \mathcal{A})^n \varrho_A(0). \quad (15)$$

Si l'échelle d'observation de la variation du phénomène dans le temps est beaucoup plus grande que le temps d'effacement Δt , on peut traiter $\tau = n \Delta t$ comme un paramètre continu. Après cette opération de lissage dans le temps, l'évolution du système réduit est décrite par $(\mathcal{J} \mathcal{U}_{\Delta t} \mathcal{A})^{\tau/\Delta t}$ qui est manifestement un semi-groupe du paramètre τ . Le générateur de ce semi groupe est

$$\mathbf{K} = \frac{\mathcal{J} \mathcal{U}_{\Delta t} \mathcal{A} - \mathcal{J}}{\Delta t},$$

et les équations de mouvement de l'état réduit forment le système d'équations différentielles linéaire suivant:

$$\frac{d\varrho_A(\tau)}{d\tau} = \mathbf{K} \varrho_A(\tau). \quad (16)$$

On dit dans ce cas que le comportement du phénomène observé est markovien. Ceci doit être compris dans le sens des équations (16) qui montrent que l'état au temps $\tau + d\tau$ est complètement déterminé par sa valeur à l'instant antérieur τ ²⁾. Une caractéristique importante de l'évolution décrite avec cette approximation est que le propagateur qui gouverne l'état du temps initial τ_1 au temps final τ_2 ne dépend que de la différence $\tau_2 - \tau_1$. Ceci signifie que l'évolution du phénomène, à l'échelle macroscopique de temps τ (macroscopique par rapport à Δt) apparaît comme homogène.

²⁾ L'usage du terme markovien par les physiciens ne coïncide pas avec la définition adoptée par les mathématiciens. En fait, la connaissance de la forme de l'équation d'évolution pour l'état ne permet pas de décider si le processus est markovien au sens de la théorie des probabilités [16].

C. L'équation maîtresse macrocanonique

Nous voulons maintenant établir l'équation exacte à laquelle satisfait l'opérateur d'évolution réduit $\mathcal{R} \mathcal{U}_{\Delta t}$ valable pour toute valeur du temps microscopique t , suivant la méthode de projection utilisée dans [10].

Nous partons de l'équation de Liouville qui régit l'évolution du système total

$$i \frac{d \mathcal{U}_t}{dt} = \mathcal{H} \mathcal{U}_t. \quad (17)$$

En multipliant cette expression à gauche par \mathcal{R} , et utilisant (5) et (11), on obtient

$$i \frac{d \mathcal{R} \mathcal{U}_t}{dt} = \mathcal{H}_0 \mathcal{R} \mathcal{U}_t + \mathcal{R} \mathcal{V} \mathcal{U}_t. \quad (18)$$

Comme en général \mathcal{R} ne commute pas avec l'interaction \mathcal{V} , (17) et (18) forment un système de deux équations différentielles couplées pour les quantités \mathcal{U}_t et $\mathcal{R} \mathcal{U}_t$. Afin d'obtenir une équation close pour la quantité réduite $\mathcal{R} \mathcal{U}_t$, on se propose de résoudre ce système par la méthode de la transformation de Laplace.

Notre premier but sera d'établir entre \mathcal{U}_t et $\mathcal{R} \mathcal{U}_t$ une relation intégrale équivalente à (18). Pour ceci, introduisons les deux résolvants

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(s) &= \int_0^{\infty} e^{-st} \mathcal{U}_t dt = (s + i \mathcal{H})^{-1} \\ \mathbf{G}_0(s) &= \int_0^{\infty} e^{-st} \mathcal{U}_{0t} dt = (s + i \mathcal{H}_0)^{-1}. \end{aligned} \quad (19)$$

Les conditions d'existence de ces formules et la validité des opérations qui suivent sont discutées dans l'appendice A. Ces résolvants vérifient l'identité fondamentale suivante:

$$\mathbf{G}(s) - \mathbf{G}_0(s) = -i \mathbf{G}(s) \mathcal{V} \mathbf{G}_0(s) = -i \mathbf{G}_0(s) \mathcal{V} \mathbf{G}(s). \quad (20)$$

En multipliant cette expression à gauche par

$$\bar{\mathcal{R}} \equiv \mathcal{J} - \mathcal{R} \quad (21)$$

on obtient

$$\mathbf{G}(s) = \bar{\mathcal{R}} \mathbf{G}(s) - i \mathbf{G}_0(s) \bar{\mathcal{R}} \mathcal{V} \mathbf{G}(s) + \mathbf{G}_0(s) \bar{\mathcal{R}}. \quad (22)$$

On revient à la variable t en prenant la transformée de Laplace inverse de (22) et en appliquant le théorème de la convolution:

$$\mathcal{U}_t = \bar{\mathcal{R}} \mathcal{U}_t - i \int_0^t \mathcal{U}_{0\tau} \bar{\mathcal{R}} \mathcal{V} \mathcal{U}_{t-\tau} d\tau + \mathcal{U}_{0t} \bar{\mathcal{R}}. \quad (23)$$

Cette équation intégrale, qui lie l'évolution unitaire \mathcal{U}_t à l'évolution réduite $\bar{\mathcal{R}} \mathcal{U}_t$, prend une forme plus claire si on l'applique sur un état sans corrélations initiales. Avec (14), on trouve

$$\varrho(t) = \varrho_A(t) \otimes \varrho_B - i \int_0^t \mathcal{U}_{0\tau} \bar{\mathcal{R}} \mathcal{V} \varrho(t-\tau) d\tau. \quad (24)$$

On reconnaît que la relation entre l'état corrélé par l'interaction et l'état sans corrélations se présente, sous cette forme, de façon analogue à une relation intégrale de diffusion. Le terme intégral décrit le développement temporel des corrélations. Sa solution par itérations successives fournit pour elles une série en puissances de l'interaction.

Notre seconde tâche est de résoudre (23) de façon à exprimer \mathbf{u}_t entièrement par l'évolution réduite. Ceci peut se faire au moyen de nouveaux résolvants définis à partir des liouvilliens réduits:

$$\left. \begin{aligned} \bar{\mathbf{G}}(s) &= \int_0^{\infty} e^{-st} e^{-i\bar{\mathbf{R}}\mathcal{H}t} dt = (s + i\bar{\mathbf{R}}\mathcal{H})^{-1}, \\ \bar{\mathbf{G}}_0(s) &= \int_0^{\infty} e^{-st} e^{-i\bar{\mathbf{R}}\mathcal{H}_0t} dt = (s + i\bar{\mathbf{R}}\mathcal{H}_0)^{-1}. \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

On remarque qu'avec (9), (11) et (21)

$$\bar{\mathbf{R}}\mathbf{G}_0(s) = \bar{\mathbf{R}}\bar{\mathbf{G}}_0(s) \quad (26)$$

si bien que (22) peut se mettre sous la forme

$$(\mathcal{J} + i\bar{\mathbf{G}}_0(s)\bar{\mathbf{R}}\mathcal{V})\mathbf{G}(s) = \bar{\mathbf{R}}\mathbf{G}(s) + \bar{\mathbf{G}}_0(s)\bar{\mathbf{R}}. \quad (27)$$

De l'identité (20) écrite cette fois pour $\bar{\mathbf{G}}(s)$ et $\bar{\mathbf{G}}_0(s)$, on tire

$$(\mathcal{J} - i\bar{\mathbf{G}}(s)\bar{\mathbf{R}}\mathcal{V})(\mathcal{J} + i\bar{\mathbf{G}}_0(s)\bar{\mathbf{R}}\mathcal{V}) = \mathcal{J}. \quad (28)$$

Combinant (27) et (28), on reçoit

$$\mathbf{G}(s) = \bar{\mathbf{R}}\mathbf{G}(s) - i\bar{\mathbf{G}}(s)\bar{\mathbf{R}}\mathcal{V}\bar{\mathbf{R}}\mathbf{G}(s) + \bar{\mathbf{G}}(s)\bar{\mathbf{R}} \quad (29)$$

ou encore

$$\mathbf{u}_t = \bar{\mathbf{R}}\mathbf{u}_t - i \int_0^t e^{-i\bar{\mathbf{R}}\mathcal{H}\tau} \bar{\mathbf{R}}\mathcal{V}\bar{\mathbf{R}}\mathbf{u}_{t-\tau} d\tau + e^{-i\bar{\mathbf{R}}\mathcal{H}t} \bar{\mathbf{R}}. \quad (30)$$

Cette expression est la solution explicite de (23).

Nous sommes maintenant en mesure d'écrire l'équation de mouvement générale désirée pour l'état réduit $\varrho_A(t)$. Il suffit de substituer (30) dans le dernier terme de (18). On a alors l'équation qui régit l'opérateur d'évolution réduit $\bar{\mathbf{R}}\mathbf{u}_t$, qu'on applique sur un état initial arbitraire $\varrho(0)$ (qui n'est pas nécessairement sans corrélations). Après avoir effectué une réduction sur le système B , en utilisant (10) et (11), on obtient:

$$\begin{aligned} \frac{d\varrho_A(t)}{dt} &= -i\mathcal{H}_A\varrho_A(t) - i\mathcal{J}\mathcal{V}\mathcal{A}\varrho_A(t) \\ &\quad - \mathcal{J}\mathcal{V} \int_0^t e^{-i\bar{\mathbf{R}}\mathcal{H}\tau} \bar{\mathbf{R}}\mathcal{V}\mathcal{A}\varrho_A(t-\tau) d\tau - i\mathcal{J}\mathcal{V} e^{-i\bar{\mathbf{R}}\mathcal{H}t} \bar{\mathbf{R}}\varrho(0). \end{aligned} \quad (31)$$

Le premier terme $-i[H_A, \varrho_A(t)]$ donne l'évolution libre.

Le second terme peut également être mis sous forme d'un commutateur. Il suffit d'utiliser les propriétés (A6) de la trace partielle :

$$\mathcal{J} \mathcal{V} \mathcal{A} \varrho_A(t) = [\mathcal{J} (V I_A \otimes \varrho_B), \varrho_A(t)]. \quad (32)$$

On peut donc l'interpréter comme une modification de l'hamiltonien libre H_A par un potentiel $V_A = \mathcal{J} (V I_A \otimes \varrho_B)$ dû à la présence du système B .

Le troisième terme décrit l'effet sur A de la formation des corrélations entre les deux systèmes, résultant de l'enclenchement de l'interaction. Cette partie intégrale dans (31) contient les effets de mémoire typiquement non markoviens. Remarquons que le nouveau propagateur qui y apparaît n'est pas unitaire si \mathcal{R} n'est pas un projecteur.

Le dernier terme enfin donne l'évolution des corrélations antérieurement présentes entre les systèmes.

Jusqu'à présent, aucune approximation n'a été faite et aucune spécification des systèmes n'a été donnée. En fait, (31) s'applique dans toute situation où on ne s'intéresse qu'à un système partiel, et le mouvement qu'elle décrit peut être aussi bien réversible qu'irréversible suivant la nature des systèmes en présence. Afin d'utiliser (31) pour l'étude explicite de l'approche à l'équilibre, il convient de préciser leurs propriétés ainsi que celles de leur interaction mutuelle. Nous appellerons (31) l'équation maîtresse macrocanonique si B joue le rôle d'un thermostat.

D. Propriétés du thermostat et l'approximation de Born

Nous introduisons maintenant essentiellement une dissymétrie entre A et B : A est un système microscopique tandis que B est un bain thermique dont le nombre de degrés de liberté est infiniment supérieur à celui de A . C'est cette dissymétrie qui est responsable du comportement irréversible de A . Nous traduisons ceci dans la description au moyen des quatre hypothèses suivantes :

1) une hypothèse sur la nature de l'état initial des systèmes : nous choisissons l'état initial $\varrho(0)$ le plus probable compatible avec les contraintes, que $Tr \varrho H_B = E_B$ est l'énergie du bain et que $\mathcal{J} \varrho = \varrho_A(0)$ est un état initial de A donné ; c'est à dire l'état sans corrélation :

$$\varrho(0) = \varrho_A(0) \otimes \varrho_B^T.$$

où ϱ_B^T est l'état d'équilibre thermique du système macroscopique :

$$\varrho_B^T = \frac{e^{-\beta H_B}}{Tr^B e^{-\beta H_B}}; \quad \beta = \frac{1}{k T}. \quad (33)$$

Nous choisissons de faire l'amplification \mathcal{A} au moyen de l'état initial ϱ_B^T du système B . En conséquence

$$\bar{\mathcal{R}} \varrho(0) = 0$$

ce qui supprime le dernier terme de (31).

Nous soulignons que cette hypothèse d'absence de corrélations n'est faite qu'au temps $t = 0$.

2) L'ensemble des interactions possibles doit être restreint à celles qui sont susceptibles de décrire une approche à l'équilibre. En particulier, les interactions qui donnent lieu à l'effet d'une force extérieure constante sur le système A sont à proscrire. Ce serait précisément ce que donnerait le second terme de (31). Nous astreignons donc l'interaction à satisfaire à³⁾:

$$\mathcal{J}(V I_A \otimes \varrho_B^T) = 0. \quad (34)$$

En conséquence ce second terme est supprimé, ainsi que l'opérateur $\bar{\mathcal{R}}$ qui figure sous l'intégrale devant l'interaction \mathcal{V} .

3) Le thermostat B est suffisamment grand par rapport à A , et son interaction avec A est suffisamment faible pour permettre de traiter les corrélations au premier ordre. On voit que ceci revient à se limiter à la première itération dans l'équation intégrale (24), ou à remplacer $e^{-i\bar{\mathcal{R}}\mathcal{H}t}$ par le propagateur libre dans (30) et (31). On a donc traité la relation de l'état corrélaté $\varrho(t)$ à l'état sans corrélations $\varrho_A(t) \otimes \varrho_B^T$ à l'approximation de Born.

Avec les trois hypothèses énoncées ci-dessus, (31) devient

$$\frac{d\varrho_A(t)}{dt} = -i [H_A, \varrho_A(t)] - \mathcal{J} \mathcal{V} \int_0^t e^{-i\mathcal{H}_0\tau} \mathcal{V} (\varrho_A(t-\tau) \otimes \varrho_B^T) d\tau. \quad (35)$$

Quant aux corrélations, elles peuvent être évaluées au moyen de (24)

$$\varrho(t) - \varrho_A(t) \otimes \varrho_B^T = -i \int_0^t e^{-i\mathcal{H}_0\tau} \mathcal{V} (\varrho_A(t-\tau) \otimes \varrho_B^T) d\tau \quad (36)$$

sitôt que la solution $\varrho_A(t)$ de (35) est connue.

Sous la forme (35), l'équation de mouvement n'est pas encore explicitement écrite en termes de l'état réduit $\varrho_A(t)$ à cause de l'opération de trace partielle \mathcal{J} devant l'intégrale, qui reste à effectuer. Pour ceci, remarquons qu'une interaction générale V peut être développée de la façon suivante:

$$V = \sum_i V_A^i \otimes V_B^i \quad (37)$$

où les V_A^i et V_B^i agissent respectivement sur les systèmes A et B . Ces opérateurs sont tels que V soit hermitien. En introduisant cette expression de l'interaction dans (35) et en effectuant les opérations d'algèbre et de réduction indiquées, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{d\varrho_A(t)}{dt} = & -i [H_A, \varrho_A(t)] - \int_0^t \sum_{ij} \{c_{ij}(\tau) [V_A^i, U_A(\tau) V_A^j \varrho_A(t-\tau) U_A^{-1}(\tau)] \\ & - c_{ji}(-\tau) [V_A^i, U_A(\tau) \varrho_A(t-\tau) V_A^j U_A^{-1}(\tau)]\} d\tau \end{aligned} \quad (38)$$

où

$$c_{ij}(\tau) = \text{Tr}^B \varrho_B^T V_B^i U_B(\tau) V_B^j U_B^{-1}(\tau) \quad (39)$$

³⁾ (34) ne peut pas être satisfait en toute généralité pour n'importe quelle interaction, par simple renormalisation de l'hamiltonien libre.

Si on modifie l'hamiltonien H_A , on modifie aussi la description physique du système A .

$U_A(t)$ et $U_B(t)$ sont les opérateurs d'évolution libre des deux systèmes. On a utilisé le fait que l'état initial du bain commute avec H_B , et la possibilité de permuter les opérateurs sous la trace.

On constate que le système B n'apparaît dans la description du mouvement (38) que par l'intermédiaire des fonctions $c_{ij}(t)$ qui sont des fonctions de corrélation internes du thermostat.

C'est à ce point que s'introduit la quatrième hypothèse, celle de limite thermodynamique. Le thermostat possède un si grand nombre de degrés de liberté que la densité des états propres de son hamiltonien peut être considérée comme continue. Dans le calcul des quantités $c_{ij}(t)$ les sommes discrètes sur ces états (provenant de l'évaluation de la trace) peuvent être remplacées par des intégrations. Ce passage au continu a pour effet d'éviter les cycles de Poincaré qui apparaîtraient nécessairement si le bain était fini.

Définissant les transformées de Fourier des fonctions de corrélation⁴⁾

$$L_{ij}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} c_{ij}(t) e^{+i\omega t} dt, \quad (40)$$

on trouve [17]

$$L_{ij}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \eta(\varepsilon) \eta(\varepsilon + \omega) e^{-\beta\varepsilon} \langle \varepsilon | V_B^i | \varepsilon + \omega \rangle \langle \varepsilon + \omega | V_B^j | \varepsilon \rangle \quad (41)$$

$\eta(\varepsilon)$ étant la densité des états d'énergie du bain.

De cette dernière expression, on tire deux propriétés essentielles de ces fonctions:

1) une propriété de symétrie

$$L_{ij}(\omega) = e^{\beta\omega} L_{ji}(-\omega) \quad (42)$$

2) une propriété de positivité

$$L_{ij}(\omega) \geq 0 \quad \text{si} \quad V_B^i = V_B^{j\dagger}. \quad (43)$$

L'équation de mouvement (35) ainsi que ces deux dernières propriétés forment la base de la description, et aucune hypothèse nouvelle autre que les quatre que nous venons d'exprimer ne sera introduite. Avant de procéder à la résolution de (35) dans des modèles particuliers, faisons encore quelques remarques sur l'approximation de Born, qui est en réalité la seule approximation à la solution exacte que nous avons faite.

Les fluctuations du bain autour de la valeur d'équilibre thermique peuvent être évaluées en calculant $\varrho_B(t) = Tr^A \varrho(t)$. L'état du système total est donné à l'approximation de Born par (36). En y introduisant la forme (37) de l'interaction, on trouve

$$\varrho_B(t) = \varrho_B^T - i [V_B(t), \varrho_B^T] \quad (44)$$

où

$$V_B(t) = \int_0^t \sum_i (Tr^A \varrho_A(t-\tau) V_A^i) U_B(\tau) V_B^i U_B^{-1}(\tau) d\tau.$$

⁴⁾ En supposant l'existence de ces transformées de Fourier, nous faisons une hypothèse implicite sur la nature du bain et des opérateurs d'interaction V_B^i .

Soit O_B une constante du mouvement du bain libre :

$$[O_B, H_B] = 0 \quad (45)$$

alors O_B est encore une constante du mouvement après l'enclenchement de l'interaction avec le système A . C'est une conséquence directe de (44) et (45) :

$$\text{Tr}^B O_B \varrho_B(t) = \text{Tr}^B O_B \varrho_B^T = \text{constante.}$$

Ainsi, à l'approximation de Born, les fluctuations du bain ne sont pas négligées comme ce serait le cas dans le cadre d'un traitement avec effacement répété des corrélations. Cependant, elles sont décrites de telle façon que les constantes du mouvement du thermostat libre ne sont pas affectées par son couplage avec le système A . Ces constantes du mouvement sont essentiellement des quantités macroscopiques, comme par exemple l'énergie totale H_B . Il est raisonnable de penser qu'elles sont insensibles à la présence du système microscopique A .

III. Spin en interaction faible avec un thermostat

A. Le modèle

Comme première illustration des équations générales, nous nous proposons d'obtenir explicitement l'évolution de l'état d'un moment magnétique (spin 1/2) en interaction avec un bain thermique, tel qu'il a été introduit dans le paragraphe II D. Les éléments de ce modèle, qui correspond à la description d'une expérience de précession libre en résonance magnétique, sont fixés de la façon suivante :

1) Les matrices de Pauli $\sigma_0 = \mathbf{1}$; σ_z ; $\sigma_{\pm} = 1/2 (\sigma_x \pm i \sigma_y)$ forment une base dans l'espace de Liouville \mathcal{L}_A attaché au spin, il sera donc commode d'exprimer les quantités qui s'y rapportent au moyen de ces matrices.

2) L'hamiltonien du système d'intérêt est celui d'un spin 1/2 dans un champ magnétique statique de direction z et d'intensité $\omega_0/\gamma \hbar$ (γ est le rapport gyromagnétique).

$$H_A = -\frac{1}{2} \omega_0 \sigma_z \quad (1)$$

3) L'hamiltonien du thermostat, qui n'est pas précisé microscopiquement, est H_B .

4) L'interaction la plus générale possible s'écrit

$$V = \sigma_+ \otimes V_B^+ + \sigma_- \otimes V_B^- + \sigma_z \otimes V_B^z. \quad (2)$$

L'hermiticité de V entraîne

$$V_B^+ = (V_B^-)^\dagger; \quad V_B^z = (V_B^z)^\dagger. \quad (3)$$

5) Nous imposons une propriété de symétrie géométrique naturelle au thermostat : l'environnement du spin est isotrope autour de la direction privilégiée z que crée le champ statique. Nous exprimons cette symétrie cylindrique en requérant que l'équation de mouvement (II.38) soit invariante sous les rotations autour de l'axe z . Plus précisément, si

$$U_R = e^{i\alpha\sigma_z/2}$$

est la représentation d'une rotation d'angle α dans le plan $(x; y)$, alors

$$\varrho_A^R(t) \equiv U_R \varrho_A(t) U_R^{-1}$$

obéit à la même équation que $\varrho_A(t)$.

Le développement de l'opérateur densité sera noté

$$\varrho_A(t) = \sum_{\nu} m_{\nu}(t) \sigma_{\nu} \quad \nu = (0, z, +, -) \quad (4)$$

avec

$$m_0 = \frac{1}{2} \text{Tr} \varrho_A(t) = \frac{1}{2}$$

$$m_z(t) = \frac{1}{2} \text{Tr} \sigma_z \varrho_A(t) \quad m_{\pm}(t) = \text{Tr} \sigma_{\mp} \varrho_A(t). \quad (5)$$

Dans cette base les composantes de l'état ont une signification physique immédiate: $\gamma \hbar m_z(t)$ est l'aimantation le long du champ statique ($\omega_0 m_z(t)$ étant l'énergie moyenne) tandis que $\gamma \hbar m_{\pm}(t)$ donne l'aimantation transversale.

B. Les équations de mouvement

Nous allons maintenant spécialiser l'équation maîtresse macrocanonique (à l'approximation de Born) à ce modèle particulier. Pour ceci, il suffit d'utiliser le dictionnaire qui fait correspondre les symboles lus dans (II.38) à ceux que nous venons de définir, c'est-à-dire

$$H_A = -\frac{1}{2} \omega_0 \sigma_z \quad U_A(t) = e^{i1/2 \omega_0 \sigma_z t} \quad V_A^i = \sigma_i \quad i = +, -, z$$

On constate dans (II.38) que les 9 fonctions de corrélation $c_{ij}(t)$, $i, j = +, -, z$ apparaissent respectivement associées aux termes qui comprennent les deux facteurs σ_i et σ_j . La condition d'invariance se manifeste alors de la façon suivante: en notant que

$$U_R \sigma_{\pm} U_R^{-1} = e^{\pm i \alpha} \sigma_{\pm} \quad U_R \sigma_z U_R^{-1} = \sigma_z.$$

$\varrho_A^R(t)$ satisfait encore (II.38) si et seulement si les termes d'indices $++$, $--$, $-z$, $z+$, $z+$ et $z-$ disparaissent. C'est dire que la symétrie cylindrique impose que seules contribuent les fonctions $c_{+-}(t)$, $c_{-+}(t)$ et $c_{zz}(t)$ et que les 6 autres sont identiquement nulles.

Après cette simplification, on applique l'algèbre des matrices de Pauli pour effectuer les commutateurs, et on établit les équations de mouvement des composantes de l'état réduit au moyen de (5).

Tous calculs faits, on trouve:

$$\frac{dm_0}{dt} = 0.$$

qui exprime la conservation de la trace.

$$\frac{dm_z(t)}{dt} = - \int_0^t d\tau m_z(t-\tau) f(\tau) + g(t) \quad (6)$$

où

$$f(\tau) = 2 \operatorname{Re} [e^{-i\omega_0\tau} (c_{+-}(\tau) + c_{-+}(-\tau))] \quad (6a)$$

$$g(t) = \operatorname{Re} \int_0^t e^{-i\omega_0\tau} (c_{-+}(-\tau) - c_{+-}(\tau)) d\tau \quad (6b)$$

$$\frac{dm_-(t)}{dt} = -i\omega_0 m_-(t) - \int_0^t d\tau m_-(t-\tau) h(\tau) \quad (7)$$

où

$$h(\tau) = 2 e^{-i\omega_0\tau} (c_{zz}(\tau) + c_{zz}(-\tau)) + c_{+-}(\tau) + c_{-+}(-\tau) \quad (7a)$$

et l'équation complexe conjuguée de (7) pour $m_+(t)$.

L'influence du thermostat se manifeste par l'intermédiaire des trois fonctions f , g et h , formées par certaines combinaisons des fonctions de corrélation. Pour faire apparaître explicitement la dépendance de la température, on écrira ces dernières sous forme des transformées de Fourier (II.40), et on utilisera (II.42). Les expressions (6a), (6b) et (7a) deviennent

$$f(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \cos(\omega - \omega_0) t \varphi(\omega) \quad (8a)$$

$$g(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\sin(\omega - \omega_0) t}{\omega - \omega_0} L_{-+}(\omega) (1 - e^{-\beta\omega}) \quad (8b)$$

$$h(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} \psi(\omega) \quad (9)$$

où

$$\varphi(\omega) = 2 L_{-+}(\omega) (1 + e^{-\beta\omega}) \quad (10a)$$

$$\psi(\omega) = \frac{1}{2} \varphi(\omega) + 2 L_{zz}(\omega - \omega_0) (1 + e^{-\beta(\omega - \omega_0)}) \quad (10b)$$

comme conséquence de (II.43) et (3):

$$\varphi(\omega) \geq 0 \quad \text{et} \quad \psi(\omega) \geq 0. \quad (11)$$

Avant de procéder à l'examen de ces équations, faisons la remarque suivante: les parties diagonale et non diagonale de l'état (dans la représentation qui diagonalise l'hamiltonien libre) évoluent tout à fait indépendamment. Cette propriété, due à la symétrie imposée, entraîne celle de «conservation de la diagonalité» de l'état au cours du temps, à savoir, si pour $t = 0$ $[\varrho_A(0), H_A] = 0$ alors pour tout $t > 0$, on a encore $[\varrho_A(t), H_A] = 0$.

Ainsi l'évolution de l'aimantation longitudinale n'est pas couplée à celle de l'aimantation transversale.

La résolution de (6), que nous allons présenter maintenant en détail, servira d'exemple à celle d'équations du même type que nous rencontrerons par la suite (cf. équation (7) et celles obtenues dans le paragraphe suivant pour l'oscillateur).

C. Résolution

L'emploi de la transformation de Laplace a l'avantage de transformer, au moyen du théorème de la convolution, les équations intégrodifférentielles telles que (6) en équations algébriques. On désignera par

$$\tilde{f}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt, \quad s > 0 \quad (12)$$

la transformée de Laplace de $f(t)$. (6) devient

$$s \tilde{m}_z(s) - m_z(0) = -\tilde{f}(s) \tilde{m}_z(s) + \tilde{g}(s) \quad (13)$$

où $m_z(0)$ est la condition initiale $m_z(t=0)$. En résolvant (13) par rapport à $\tilde{m}(s)$ on a :

$$\tilde{m}_z(s) = \tilde{G}(s) \tilde{g}(s) + \tilde{G}(s) m_z(0) \quad (14)$$

où

$$\tilde{G}(s) = \frac{1}{s + \tilde{f}(s)} \quad (15)$$

L'inversion de (14) donne la solution

$$m_z(t) = \int_0^t G(t-\tau) g(\tau) d\tau + G(t) m_z(0). \quad (16)$$

Il s'agit maintenant de trouver la forme explicite de $G(t)$ qui est la transformée inverse de $\tilde{G}(s)$. Cette forme est fixée par la structure analytique de $\tilde{G}(s)$ dans le plan complexe s . Le point essentiel est que les deux propriétés générales (II.42) et (II.43), combinées dans (11), déterminent complètement la nature des singularités de $\tilde{G}(s)$ ⁵⁾.

D'après (15), (12) et (8a) :

$$(\tilde{G}(s))^{-1} = s \left(1 + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varphi(\omega) d\omega}{(\omega - \omega_0)^2 + s^2} \right) \quad (17a)$$

$$= s + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \varphi(\omega) \left\{ \frac{1}{s + i(\omega - \omega_0)} + \frac{1}{s - i(\omega - \omega_0)} \right\}. \quad (17b)$$

De ces expressions, on conclut que $\tilde{G}(s)$ est holomorphe dans tout le plan $s = s_1 + i s_2$ coupé par l'axe imaginaire. En effet, il suffit de remarquer que (17) n'a pas de zéros pour $s_1 \neq 0$. Sur (17a), on voit que si $s \neq 0$ le premier facteur n'est pas nul. Le second facteur est non nul pour $s = s_1$ réel non nul en vertu de (11). Pour $s = s_1 + i s_2$, $s_1 \neq 0$ et $s_2 \neq 0$ sa partie imaginaire vaut

$$-2 s_1 s_2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\varphi(\omega)}{((\omega - \omega_0)^2 + s_1^2 - s_2^2)^2 + (2 s_1 s_2)^2} \quad (18)$$

⁵⁾ $\varphi(\omega)$ est supposée dans ce qui suit suffisamment régulière pour assurer la validité des diverses opérations effectuées, c'est à dire satisfait à la condition de Hölder et est absolument intégrable [23a].

qui est également non nulle puisque l'intégrande est positif. Ainsi (17b) définit une fonction holomorphe en dehors de l'axe imaginaire [23]. Sur celui-ci, $\tilde{G}(s)$ a une discontinuité qui peut être évaluée à l'aide de la propriété limite:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i \varepsilon} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right) \mp i \pi \delta(x). \tag{19}$$

D'autre part, le comportement asymptotique de $\tilde{G}(s)$ est donné par

$$\lim_{s \rightarrow \infty} s \tilde{G}(s) = 1. \tag{20}$$

Ces considérations permettent l'application de la formule d'inversion complexe [18].

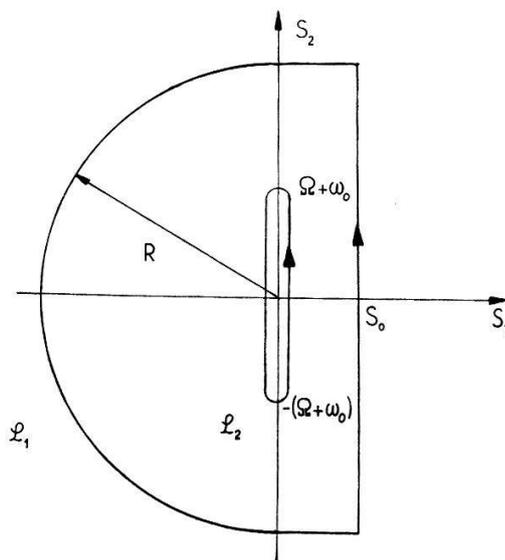
$$G(t) = \frac{1}{2 i \pi} \int_{s_0 - i \infty}^{s_0 + i \infty} e^{ts} \tilde{G}(s) ds, \quad s_0 > 0. \tag{21}$$

Afin de calculer cette intégrale par la méthode de Cauchy, il est convenable de ramener pour un instant la ligne de discontinuité à une portion finie de l'axe imaginaire. Pour ceci, on introduit la suite de fonctions tronquées

$$\varphi_{\Omega}(\omega) = \begin{cases} \varphi(\omega) & |\omega| \leq \Omega \\ 0 & |\omega| > \Omega \end{cases}$$

ainsi que le $\tilde{G}_{\Omega}(s)$ correspondant. On s'assure que $\tilde{G}_{\Omega}(s)$ est holomorphe partout sauf sur le segment

$$s_1 = 0, \quad |s_2| \leq \Omega + \omega_0.$$



Envisageons les contours définis sur la figure. On vérifie que les contributions des segments horizontaux et du grand cercle s'annulent lorsque $R \rightarrow \infty$. En vertu du théorème de Cauchy:

$$\int_{s_0 - i \infty}^{s_0 + i \infty} = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{L_1} = \int_{L_2}.$$

Finalement, en faisant $\Omega \rightarrow \infty$ afin de recouvrir la fonction $\varphi(\omega)$ originale, on constate qu'il suffit d'évaluer l'intégrale le long de la ligne de discontinuité $s_1 = 0$. Si on fait usage de la propriété limite (19) sur l'expression (17b), on obtient pour l'intégrale (21):

$$G(t) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ixt} B(x) dx \quad (22)$$

où

$$B(x) = \frac{q(x)}{(x+p(x))^2 + q(x)^2} \quad (23)$$

avec

$$q(x) = \frac{\pi}{2} (\varphi(\omega_0 + x) + \varphi(\omega_0 - x)) \quad (24a)$$

$$p(x) = \oint_{-\infty}^{+\infty} \frac{x \varphi(\omega)}{(\omega - \omega_0)^2 - x^2} d\omega. \quad (24b)$$

D. Discussion de la solution

L'évolution de l'aimantation longitudinale est maintenant explicitement donnée par (16) et (22) en fonction de $L_{-+}(\omega)$ et de la température T . On se propose de montrer qu'elle approche l'équilibre thermique dans la limite du temps infini.

Examinons auparavant quelques propriétés caractéristiques de $G(t)$ et leurs conséquences.

1) On remarquera tout d'abord que

$$B(x) = B(-x) \geq 0. \quad (25)$$

Donc

$$G(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} B(x) \cos x t dx \quad (26)$$

est une fonction réelle paire du temps. Comme $g(t)$ est impaire, (16) montre que $m_z(t)$ est symétrique sous l'inversion du temps.

2) On a de (26):

$$\left. \frac{dG(t)}{dt} \right|_{t=0} = 0.$$

La courbe de relaxation débute toujours avec une tangente horizontale, ce qui n'est jamais le cas dans une relaxation purement exponentielle.

3) La propriété asymptotique de la transformée de Laplace $\lim_{s \rightarrow \infty} s \tilde{G}(s) = G(0)$ [19], combinée avec (20), donne

$$G(0) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} B(x) dx = 1. \quad (27)$$

On a donc bien, sur (16), $\lim_{t \rightarrow 0} m_z(t) = m_z(0)$ qui est la condition initiale arbitraire donnée.

Notons que de (26) et (27) $|G(t)| \leq 1$ à tout temps.

4) De (25) et (27), $B(x)$ est absolument intégrable, d'où [20]:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} G(t) = 0. \quad (28)$$

Par conséquent, la valeur de l'aimantation à l'équilibre est indépendante de sa valeur initiale. Il ne subsiste pas de mémoire de l'état initial.

Montrons maintenant que $m_z(t)$ atteint effectivement une limite pour $t \rightarrow \infty$. Il faut remarquer que la fonction $g(t)$ possède une limite qui, d'après (8b) vaut

$$\lim_{t \rightarrow \infty} g(t) = \pi L_{-+}(\omega_0) (1 - e^{-\beta \omega_0}). \quad (29)$$

Dans ce cas, comme conséquence du théorème cité dans [21], on obtient⁶⁾

$$\lim_{t \rightarrow \infty} m_z(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} g(t) \int_0^{\infty} G(t) dt. \quad (30)$$

Cette dernière intégrale peut être évaluée en utilisant [22]:

$$\int_0^{\infty} G(t) dt = \lim_{s \rightarrow +0} \tilde{G}(s) = \frac{1}{\pi \varphi(\omega_0)}. \quad (31)$$

Combinant (29), (31) et (10), on voit qu'on trouve la valeur correcte de la magnétisation à l'équilibre thermique

$$\lim_{t \rightarrow \infty} m_z(t) = \frac{1}{2} \frac{e^{\beta \omega_0/2} - e^{-\beta \omega_0/2}}{e^{\beta \omega_0/2} + e^{-\beta \omega_0/2}} = \frac{1}{2} \tanh \frac{\beta \omega_0}{2}. \quad (32)$$

L'existence et la valeur de la limite sont donc complètement indépendantes de la nature détaillée du thermostat et de l'interaction.

Par contre, l'approche est explicitement liée à un modèle spécifique du bain par l'intermédiaire de $L_{-+}(\omega)$, dont il faut connaître la forme pour calculer $G(t)$. Remarquons cependant que si $L_{-+}(\omega)$ est telle que $B(x)$ est k fois dérivable, alors on peut affirmer que [23]⁷⁾

$$G(t) = o\left(\frac{1}{t^k}\right), \quad t \rightarrow \infty.$$

Si $B(x)$ est infiniment dérivable, la mémoire de la condition initiale disparaît asymptotiquement comme une exponentielle.

Avant de conclure cette discussion, examinons rapidement l'évolution de l'aimantation transversale. Les équations qui régissent les éléments non diagonaux $m_+(t)$ et $m_-(t)$ sont tout-à-fait similaires à celles que nous venons de traiter à la différence près qu'elles n'ont pas de terme inhomogène. Le calcul peut être mené de façon complètement parallèle au précédent, et tous les mêmes arguments s'y appliquent. On trouve:

$$m_-(t) = D(t) m_-(0) \quad (33)$$

⁶⁾ Il faut encore que $G(t)$ soit absolument intégrale, ce qui est vrai dès que $\varphi(\omega)$ est suffisamment régulière.

⁷⁾ Le §12 de la référence [23a] entraîne que $k \geq 1$.

avec

$$D(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ixt} \frac{\psi(x)}{\left(x - \omega_0 + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\psi(\omega)}{\omega - x} d\omega\right)^2 + \pi^2 \psi^2(x)} dx \quad (34)$$

$\psi(x)$ étant donnée par (10b).

$D(t)$ jouit de propriétés semblables à celles de $G(t)$, en particulier :

$$D(0) = 1, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} D(t) = 0. \quad (35)$$

Les résultats sont analogues pour $m_+(t) = (m_-(t))^*$. Ainsi, on voit que les termes non diagonaux s'annulent pour $t \rightarrow \infty$.

Ceci achève de prouver que l'état $\rho_A(t)$ du spin évolue vers la valeur canonique d'équilibre $e^{-\beta H_A} / \text{Tr} e^{-\beta H_A}$ à partir de tout état initial donné et pour la classe très générale de thermostats envisagée.

Si le bain et l'interaction n'avaient pas cette propriété de symétrie cylindrique, on obtiendrait pour les composantes de l'état un système d'équations intégrodifférentielles linéaires couplées qui pourrait être résolu en principe de la même façon. L'existence et la valeur de l'état d'équilibre dépendraient alors plus spécifiquement des caractéristiques du thermostat.

E. L'équation de Bloch

Comme (22), (23) et (24) le montrent, les lois d'approche à l'équilibre ne sont en général pas exponentielles⁸⁾ ($p(x)$, $q(x)$ n'étant pas constant, $B(x)$ n'est pas une courbe de Lorentz) et dépendent explicitement de la structure microscopique du bain, par l'intermédiaire de $\varphi(\omega)$ et $\psi(\omega)$. Cependant nous allons voir que dans la limite où la température du thermostat devient infiniment élevée, le système tend vers l'équilibre thermique exponentiellement, ce qui correspond à la solution des équations phénoménologiques de Bloch, avec deux temps de relaxation. Pour une agitation thermique maximum dans le bain, il est raisonnable de prendre des durées de corrélation internes du bain (temps pendant lequel les fonctions $c_{ij}(\tau)$ sont appréciablement non nulles) extrêmement courtes. Prenons pour commencer le cas idéalisé

$$c_{ij}(\tau) = c_{ij} \delta(\tau) \quad (36)$$

et la relation de symétrie (II.43) devient avec $T \rightarrow \infty$

$$L_{ij}(\omega) = L_{ji}(\omega) = \frac{1}{2\pi} c_{ij}. \quad (37)$$

Dans ce cas, de (36) et (37) on a

$$q(x) = 2c_{-+} \geq 0 \quad (38)$$

$p(x) = 0$ (la partie principale prise sur une fonction symétrique étant nulle) d'où

$$G(t) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ixt} \frac{2c_{-+}}{x^2 + (2c_{-+})^2} dx = e^{-2c_{-+}t}. \quad (39)$$

⁸⁾ Ceci est confirmé par des calculs explicites et numériques [29].

D'autre part, de (6b)

$$\lim_{T \rightarrow \infty} g(t) = 0.$$

A la limite de la température infinie, l'aimantation longitudinale a le comportement⁹⁾:

$$m_z(t) = e^{-t/T_1} m_z(0) \quad (40)$$

où

$$T_1 = \frac{1}{2 c_{-+}}. \quad (41)$$

De même on obtient pour les composantes transversales

$$m_{\pm}(t) = e^{\pm i \omega_0 t} e^{-t/T_2} m_{\pm}(0) \quad (42)$$

où

$$T_2 = \frac{1}{c_{-+} + 2 c_{zz}}, \quad c_{zz} \geq 0 \quad (43)$$

ou encore

$$\begin{aligned} m_x(t) &= e^{-t/T_2} (\cos \omega_0 t m_x(0) + \sin \omega_0 t m_y(0)) \\ m_y(t) &= e^{-t/T_2} (-\sin \omega_0 t m_x(0) + \cos \omega_0 t m_y(0)) \end{aligned} \quad (44)$$

(40) et (44) sont les solutions de l'équation phénoménologique de Bloch pour un système magnétique dans un champ statique de direction z

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = \hbar \gamma (\mathbf{m} \times \mathbf{H}_0) - \mathbf{i} \frac{m_x}{T_2} - \mathbf{j} \frac{m_y}{T_2} - \mathbf{k} \frac{m_z}{T_1}$$

avec d'après (41) et (43)

$$T_1 \geq \frac{1}{2} T_2. \quad (45)$$

Les résultats obtenus dans le cas limite des températures infinies et durées de corrélation nulles sont encore valables avec une très bonne approximation pour les hautes températures

$$\frac{\hbar \omega_0}{k T} \ll 1 \quad (46)$$

et les durées de corrélation courtes

$$\tau_c \cong \frac{1}{\omega_1} \quad (47)$$

où ω_1 , est l'intervalle sur lequel $L_{-+}(\omega)$ peut être considéré comme constant.

En effet on voit sur (22) que la contribution majeure à l'intégrale provient du voisinage de $x = 0$, puisque $p(x)$ et $q(x)$ sont proportionnelles au couplage, donc petites. D'après les définitions (23), (24), il suffit donc que $\varphi(\omega)$ varie peu au voisinage de ω_0 pour avoir approximativement le résultat (39). C'est le cas dès que $L_{-+}(\omega)$ est elle-même lentement variable près de ω_0 , et que la condition (46) est remplie. Pour l'ordre de grandeur de τ_c , nous renvoyons à l'appendice de la référence [24] où une discussion détaillée est faite sur une fonction du type de (22), (34).

L'inégalité $T_1 \geq 1/2 T_2$ est générale pour tout bain, décrivant l'interaction spin-réseau, qui possède la propriété de symétrie donnée.

⁹⁾ En introduisant directement (36) dans l'équation de mouvement (6), on peut vérifier que (40) en est bien la solution.

IV. Oscillateur en interaction faible avec un thermostat

A. L'équation maîtresse

L'oscillateur harmonique amorti a fait l'objet de si nombreux travaux que nous ne voulons pas discuter ici tous les aspects de cet intéressant système. Nous nous proposons de donner la généralisation non markovienne de l'équation maîtresse obtenue généralement avec l'approximation de l'effacement répété des corrélations. Nous choisissons l'hamiltonien total de la forme suivante, où le couplage entre les deux systèmes est linéaire:

$$H = \omega_0 a^\dagger a \otimes I_B + I_A \otimes H_B + a^\dagger \otimes V_B^+ + a \otimes V_B^- \quad (1)$$

Il est convenable de décrire l'état de l'oscillateur dans la représentation des états cohérents, à l'aide de la fonction de quasi-probabilité introduite dans [13]:

$$\varrho_A(t) = \int d^2\alpha P(\alpha, t) |\alpha\rangle \langle\alpha|. \quad (2)$$

Cette représentation doit son avantage au fait que l'état y est entièrement caractérisé par une seule fonction (ou éventuellement distribution) réelle de deux variables $\alpha = (\alpha_1; \alpha_2)$ et du temps [25].

Il s'agit maintenant de transcrire l'équation opératorielle (II.38) pour $P(\alpha, t)$. L'action des opérateurs a^\dagger et a sur un état cohérent $|\alpha\rangle$ est connue. De là, on établit facilement [26]¹⁰⁾:

$$a \varrho(t) = \int d^2\alpha [\alpha P(\alpha, t)] |\alpha\rangle \langle\alpha| = (\varrho(t) a^\dagger)^\dagger \quad (3)$$

$$a^\dagger \varrho(t) = \int d^2\alpha \left[\left(\alpha^* - \frac{\partial}{\partial\alpha} \right) P(\alpha, t) \right] |\alpha\rangle \langle\alpha| = (\varrho(t) a)^\dagger \quad (4)$$

et également

$$e^{-i\omega_0 a^\dagger a \tau} \varrho(t) e^{i\omega_0 a^\dagger a \tau} = \int d^2\alpha P(\alpha e^{i\omega_0 \tau}, t) |\alpha\rangle \langle\alpha|. \quad (5)$$

Il suffit d'appliquer ces règles de correspondance à (II.38), afin de la transformer en une équation portant uniquement sur $P(\alpha, t)$. Par exemple, le terme

$$U_A(\tau) a^\dagger \varrho_A(t - \tau) U_A^{-1}(\tau) a$$

qui apparaît dans le premier commutateur de (II.38) donne lieu pour $P(\alpha, t)$ à la contribution suivante:

$$e^{-i\omega_0 \tau} \left[1 + \alpha \alpha^* - \frac{\partial}{\partial\alpha} \alpha - \frac{\partial}{\partial\alpha^*} \alpha^* + \frac{\partial^2}{\partial\alpha \partial\alpha^*} \right] P(\alpha e^{i\omega_0 \tau}, t - \tau).$$

Transformant ainsi chaque terme de (II.38) et collectant toutes les expressions reçues, on arrive à

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\alpha, t)}{\partial t} = & -i\omega_0 \left(\frac{\partial}{\partial\alpha^*} \alpha^* - \frac{\partial}{\partial\alpha} \alpha \right) P(\alpha, t) + \int_0^t d\tau \left\{ \left[\lambda(\tau) \frac{\partial^2}{\partial\alpha \partial\alpha^*} \right. \right. \\ & \left. \left. + \mu(\tau) \frac{\partial}{\partial\alpha} \alpha - \lambda'(\tau) \frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} - \mu'(\tau) \frac{\partial}{\partial\alpha} \alpha^* \right] P(\alpha e^{i\omega_0 \tau}, t - \tau) + \text{compl. conj.} \right\} \quad (6) \end{aligned}$$

¹⁰⁾ Nous considérons maintenant $\alpha = \alpha_1 + i\alpha_2$ et $\alpha^* = \alpha_1 - i\alpha_2$ comme variables indépendantes

avec

$$\lambda(t) = c_{-+}(t) e^{-i\omega_0 t} = \int_{-\infty}^{+\infty} L_{+-}(\omega) e^{-\beta\omega} e^{i(\omega - \omega_0)t} d\omega \quad (7a)$$

$$\mu(t) = (c_{+-}(t) - c_{-+}(-t)) e^{i\omega_0 t} = \int_{-\infty}^{+\infty} L_{+-}(\omega) (1 - e^{-\beta\omega}) e^{-i(\omega - \omega_0)t} d\omega \quad (7b)$$

$$\lambda'(t) = c_{++}(t) e^{-i\omega_0 t} \quad \mu'(t) = (c_{++}(t) - c_{++}(-t)) e^{-i\omega_0 t} \quad (8)$$

$$c_{-+}^*(t) = c_{-+}(-t), \quad c_{++}^*(t) = c_{--}(-t).$$

L'équation maîtresse (6) est de type intégrodifférentiel partiel de second ordre. Pour discuter l'existence et l'approche de l'équilibre, il faudrait la résoudre en toute généralité, ce qui est un problème difficile. Il sera plus simple, et aussi plus illustratif, d'étudier le comportement de certaines valeurs moyennes, comme celle de l'énergie de l'oscillateur, de sa position ou de son impulsion.

Auparavant, on peut faire sur (6) quelques remarques d'ordre général.

- 1) On constate qu'il apparaît dans (6) essentiellement deux sortes de termes:
- les termes qui sont associés à $c_{-+}(t)$ (ou à $c_{+-}(t)$) appelés résonants. Ils sont invariants sous la transformation de phase $\alpha \rightarrow e^{i\varphi} \alpha$.
 - les termes qui sont associés à $c_{++}(t)$ (ou à $c_{--}(t)$) généralement appelés anti-résonants [27]. Ils ne sont pas invariants sous cette transformation.

Nous imposons dès maintenant une restriction supplémentaire à l'interaction entre les deux systèmes: nous la supposons indépendante de la phase de l'oscillateur, de façon qu'elle ne donne pas de contribution non résonante. En conséquence, les termes non invariants (8) doivent être nuls, c'est-à-dire

$$c_{++}(t) = c_{--}(t) = 0. \quad (9)$$

Dans ce cas, (6) conserve la diagonalité de l'état, comme on l'avait pour le spin. En effet, la commutation de $\varrho_A(t)$ avec l'hamiltonien libre équivaut à dire que la quasi-probabilité ne dépend que du module $r = |\alpha|$ de la variable α . Si (6) est invariante sous la transformation $\alpha \rightarrow e^{i\varphi} \alpha$, cette propriété est préservée au cours du temps. Ce fait permet de découpler les équations de mouvement qui régissent les parties diagonale et non diagonale de l'état. Pour la partie diagonale, on peut alors écrire une équation plus simple en passant à la variable $r = |\alpha|$:

$$\frac{\partial P(r, t)}{\partial t} = \int_0^t d\tau \left[2 \operatorname{Re} \lambda(\tau) \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + 2 \operatorname{Re} \mu(\tau) \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \right] P(r, t - \tau). \quad (10)$$

2) Si $P(\alpha, t)$ atteint une limite $P(\alpha, \infty)$ pour $t \rightarrow \infty$, cette limite est alors nécessairement l'état d'équilibre thermique. En effet, si on fait $t \rightarrow \infty$ dans (6) et qu'on applique le théorème [21] on trouve que $P(\alpha, \infty)$ doit satisfaire à:

$$\left[2 \lambda \frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \alpha^*} + \mu_1 \left(\frac{\partial}{\partial \alpha} \alpha + \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \alpha^* \right) + i \mu_2 \left(\frac{\partial}{\partial \alpha} \alpha - \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \alpha^* \right) \right] P(\alpha, \infty) = 0 \quad (11)$$

où les constantes réelles λ , μ_1 et μ_2 s'obtiennent facilement de (7a) et (7b):

$$\begin{aligned}\lambda &= \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \lambda(t) dt = \pi L_{+-}(\omega_0) e^{-\beta\omega_0} \\ \mu_1 &= \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \mu(t) dt = \pi L_{+-}(\omega_0) (1 - e^{-\beta\omega_0}) \\ \mu_2 &= \int_0^{\infty} \operatorname{Im} \mu(t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{L_{+-}(\omega) (1 - e^{-\beta\omega}) d\omega}{\omega - \omega_0}\end{aligned}\quad (12)$$

(11) admet une unique solution non nulle qui est, après normalisation:

$$P(\alpha, \infty) = \frac{1}{\pi n_T} e^{-\alpha \alpha^*/n_T} \quad (13)$$

où

$$n_T = \frac{\lambda}{\mu_1} = \frac{1}{e^{\beta\omega_0} - 1} \quad (14)$$

(13) est la représentation de l'état canonique de l'oscillateur.

3) Si la température est très élevée ($\hbar \omega_0/k T \ll 1$) et que les temps de corrélation internes du thermostat sont extrêmement courts, la situation peut être approximée par le cas limite où on pose les deux fonctions $\lambda(t)$ et $\mu(t)$ proportionnelles à $\delta(t)$:

$$\lambda(t) = 2\lambda \delta(t) \quad \mu(t) = 2\mu_1 \delta(t)$$

λ et μ_1 sont déterminés par (12). On voit alors que (6) se réduit à l'équation markovienne habituelle de Fokker-Plank pour la quasi-probabilité $P(\alpha, t)$ dont la solution explicite est donnée dans [14].

B. L'approche de l'équilibre

Nous voulons maintenant montrer l'approche de l'équilibre sur la valeur moyenne de l'énergie $\omega_0 N(t)$

$$N(t) \equiv \operatorname{Tr} a^\dagger a \varrho_A(t) = \int d^2\alpha \alpha \alpha^* P(\alpha, t) \quad (15)$$

$$\frac{dN(t)}{dt} = \int \alpha \alpha^* \frac{\partial P(\alpha, t)}{\partial t} d^2\alpha.$$

Après avoir substitué sous l'intégrale la valeur donnée par (6) pour l'évolution de la quasi-probabilité, on peut facilement se débarrasser des dérivées partielles $\partial/\partial\alpha$ et $\partial/\partial\alpha^*$ par intégration par partie.

Les parties intégrées sont nulles, car la conservation de la trace

$$\operatorname{Tr} \varrho_A(t) = \int d^2\alpha P(\alpha, t) = 1 \quad (16)$$

ainsi que l'existence de quantités telles que $N(t)$ et des moments d'ordre supérieur assure que $P(\alpha, t)$ tend suffisamment rapidement vers zéro pour $\alpha \rightarrow \infty$. On trouve

alors que $N(t)$ obéit à

$$\frac{dN(t)}{dt} = - \int_0^t f(\tau) N(t - \tau) d\tau + g(t) \quad (17)$$

où

$$f(t) = 2 \operatorname{Re} \mu(t) = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} L_{+-}(\omega) (1 - e^{-\beta\omega}) \cos(\omega - \omega_0) t d\omega \quad (18a)$$

$$g(t) = \int_0^t 2 \operatorname{Re} \lambda(\tau) d\tau = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} L_{+-}(\omega) e^{-\beta\omega} \frac{\sin(\omega - \omega_0) t}{\omega - \omega_0} d\omega. \quad (18b)$$

Ces équations sont tout-à-fait similaires à celles qui régissent l'aimantation longitudinale (équations III.6, III.8, III.10a). Comme seule différence, le facteur thermique de Fermi est remplacé par celui de Bose dans (18a)¹¹.

Ainsi toute la discussion du paragraphe précédent peut être intégralement reprise ici, et les conclusions valables pour $m_z(t)$ le sont pour $N(t)$. La solution s'écrit sous la forme (III.16) où les fonctions sont convenablement définies dans (III.24) conformément à (18a) et (18b). En particulier

$$\lim_{t \rightarrow \infty} N(t) = n_T = \frac{1}{e^{\beta\omega_0} - 1}$$

pour toute condition initiale.

Si nous calculons maintenant

$$A(t) \equiv \operatorname{Tr} a \rho_A(t) = \int \alpha P(\alpha, t) d^2\alpha \quad (19)$$

nous obtenons l'évolution de

$$p = \frac{i}{\sqrt{2}} (a^\dagger - a) \quad \text{et} \quad q = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger + a)$$

et une information sur le mouvement de la partie non diagonale de l'état.

En appliquant les mêmes considérations que pour $N(t)$, on établit :

$$\frac{dA(t)}{dt} = -i\omega_0 A(t) - \int_0^t h(\tau) A(t - \tau) d\tau \quad (20)$$

$$h(t) = e^{-i\omega_0 t} \mu(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega L_{+-}(\omega) (1 - e^{-\beta\omega}) e^{-i\omega t}. \quad (21)$$

Ici à nouveau l'équation et sa solution sont semblables à celles de l'aimantation transversale (équations III.7, III.9, III.10b). On a pour tout état initial :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} A(t) = 0.$$

Dans l'appendice B, nous particularisons le bain à celui d'un ensemble d'oscillateurs libres, linéairement couplés avec l'oscillateur d'intérêt. On peut alors comparer

¹¹) Les conséquences que cette différence entraîne pour la résolution de (17) sont discutées dans l'appendice B.

les quantités obtenues ici à l'approximation de Born aux résultats du calcul rigoureux qui est possible avec ce modèle. On constate que pour $A(t)$ les expressions trouvées dans les deux cas sont identiques. Ceci n'est plus vrai pour les moments d'ordre supérieur. Ce fait ne constitue en aucune manière une justification de l'approximation de Born, mais montre qu'il existe au moins des cas où, pour certaines grandeurs, les résultats sont identiques, ou très proches de la valeur exacte.

Conclusion

Nous nous sommes principalement attachés, dans cette présentation, à montrer comment la théorie générale de la relaxation, reformulée dans le §II, peut conduire à des résultats explicites. En tirant parti de ses caractéristiques essentielles, nous avons pu résoudre l'équation maîtresse dans des exemples simples, mais qui possèdent un haut degré de généralité, sans recourir à toutes les approximations habituelles (§III et IV). Deux voies de recherche semblent s'ouvrir naturellement.

D'une part, l'exploration de l'équation maîtresse serait poursuivie dans le cadre de l'espace de Liouville, où l'existence, l'approche de l'équilibre ainsi que la nature des interactions qui y conduisent pourraient être discutées indépendamment des modèles spécifiques. On tâcherait en particulier de s'affranchir de l'approximation de Born, ou au moins, d'en délimiter nettement le domaine de validité.

D'autre part, l'application à des situations physiques concrètes peut aisément être donnée, vu la large classe d'interactions et de thermostats envisagée: il suffit de les préciser de façon réaliste et de calculer les fonctions de corrélation. On obtiendrait alors l'ordre de grandeur des effets non markoviens, qui doivent être d'autant plus manifestes que les temps de relaxation sont longs et la température du bain est basse.

Remerciements

Les auteurs tiennent à remercier très vivement le professeur J. M. JAUCH de les avoir introduits dans ce champ de recherche. C'est grâce à ses constants encouragements que ce travail a pu être mené à bien. Ils remercient également le professeur C. P. ENZ et leurs collègues de l'Institut d'avoir participé à plusieurs intéressantes discussions sur ce sujet, tout spécialement le Dr. J.-P. MARCHAND.

Appendice A

Rappelons ici la définition de l'espace de Liouville et quelques unes de ses propriétés. Nous nous référons à [10b] pour une exposition plus détaillée.

L'espace de Liouville \mathcal{L} attaché à un espace de Hilbert h est formé de l'ensemble des opérateurs X bornés sur h qui satisfont à:

$$\text{Tr } X^\dagger X < \infty. \quad (\text{A.1})$$

La formule

$$(X_1, X_2) = \text{Tr } X_1^\dagger X_2 \quad (\text{A.2})$$

définit sur \mathcal{L} un produit scalaire et une norme positive définie $\|X\| = \sqrt{\text{Tr } X^\dagger X}$. Par rapport à ce produit scalaire, \mathcal{L} a la structure d'un espace hilbertien complexe.

Un sous-ensemble important de \mathcal{L} est celui des opérateurs à trace finie (c'est-à-dire tels que $\text{Tr}(X X^\dagger)^{1/2} < \infty$), dont les états forment la partie convexe. Ce sous-ensemble est dense dans \mathcal{L} .

De la définition (4), on peut vérifier l'unitarité et la continuité de l'application \mathcal{U}_t . Si l'hamiltonien H est borné sur \mathfrak{h} , l'opérateur de Liouville \mathcal{H} l'est aussi sur \mathcal{L} , et on a

$$|\mathcal{H}|_{\mathcal{L}} \leq 2 |H|_{\mathfrak{h}}. \quad (\text{A.3})$$

Dans ce cas, l'application \mathcal{U}_t est uniformément continue et peut être écrite sous la forme [10b, 28]

$$\mathcal{U}_t = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} (-i \mathcal{H})^n = e^{-i \mathcal{H} t}. \quad (\text{A.4})$$

La représentation (II.19) du résolvant $\mathbf{G}(s)$ comme transformée de Laplace de \mathcal{U}_t est alors valable au moins pour $|s| > |\mathcal{H}|_{\mathcal{L}}$ [28a].

Si H_0 est borné sur \mathcal{L} , les mêmes considérations s'appliquent à $\mathcal{U}_{0,t}$ et $\mathbf{G}_0(s)$.

Les identités (II.20) et (II.22) sont valables partout où les résolvants $\mathbf{G}(s)$ et $\mathbf{G}_0(s)$ existent, et (II.23) s'obtient comme conséquence de [28b].

Examinons maintenant la nature de l'opérateur de réduction \mathcal{R} . Tout d'abord remarquons que l'opération de trace partielle jouit des propriétés suivantes:

- 1) Si ϱ est un état dans $\mathcal{L} = \mathcal{L}_A \otimes \mathcal{L}_B$, alors $\mathcal{J}\varrho = \varrho_A$ est un état dans \mathcal{L}_A .
- 2) Soient X_A, X_B, X respectivement dans $\mathcal{L}_A, \mathcal{L}_B, \mathcal{L}$ alors on a formellement

$$\mathcal{J}(X_A \otimes X_B) = X_A \mathcal{J} X_B \quad (\text{A.5})$$

$$\mathcal{J}((X_A \otimes X_B) X) = X_A \mathcal{J}((I_A \otimes X_B) X)$$

$$\mathcal{J}(X(X_A \otimes X_B)) = \mathcal{J}((I_A \otimes X_B) X) X_A. \quad (\text{A.6})$$

En général, \mathcal{J} ne peut être étendu à \mathcal{L} entier comme le montre (A.5): \mathcal{J} est seulement défini sur le sous-ensemble d'éléments de \mathcal{L} dont la composante dans \mathcal{L}_B est à trace finie.

L'amplification \mathcal{A} applique \mathcal{L}_A sur le sous-ensemble de \mathcal{L} de la forme $X_A \otimes \varrho_B$, $X_A \in \mathcal{L}_A$, ϱ_B fixe dans \mathcal{L}_B . Ainsi $\mathcal{R} = \mathcal{A} \mathcal{J}$ est défini au plus sur un domaine dense dans \mathcal{L} et n'est pas borné.

En fait, \mathcal{R} n'est borné sur \mathcal{L} que si la dimension N_B de l'espace de Hilbert du système B est finie, et on a alors

$$|\mathcal{R}|_{\mathcal{L}} = \sqrt{N_B} \|\varrho_B\|. \quad (\text{A.7})$$

Si c'est le cas, les opérateurs de Liouville réduits $\bar{\mathcal{R}} \mathcal{H}$ et $\bar{\mathcal{R}} \mathcal{H}_0$ sont également bornés (supposant toujours H et H_0 bornés), et les mêmes considérations que ci-dessus s'appliquent aux résolvants, $\bar{\mathbf{G}}(s)$ et $\bar{\mathbf{G}}_0(s)$ et à l'équation (II.30).

Ce cas est réalisé en particulier si les systèmes A et B sont de dimension finie, B pouvant consister en un très grand nombre de systèmes finis. Si ces conditions ne sont pas remplies, les opérations de ce paragraphe doivent être considérées comme formelles, et leur validité vérifiée dans chaque exemple particulier.

Ajoutons la remarque suivante: Si N_B est la dimension de \mathfrak{h}_B , on vérifie facilement que \mathcal{R} devient un projecteur si et seulement si on amplifie avec l'état de dégénérescence

maximum dans \mathcal{L}_B , soit I_B/N_B . La borne de \mathcal{R} est alors égale à 1 (comme on peut aussi le voir directement sur (A.7)). Dans ces circonstances très particulières,

$$\|\mathcal{R} \mathcal{U}_t x\|_{\mathcal{L}} \leq \|x\| \quad x \text{ dans } \mathcal{L} \quad (\text{A.8})$$

montre que l'évolution réduite $\mathcal{R} \mathcal{U}_t$ est un opérateur de contraction sur \mathcal{L} . Cette situation serait réalisée dans le cas limite où le système B serait un thermostat à température infinie.

Appendice B

Dans le cas de l'oscillateur, on a de (IV.18a) $\varphi(\omega) = 2 L_{+-}(\omega) (1 - e^{-\beta\omega})$ au lieu de (III.10a). Alors que (III.10a) était positive pour toute valeur de ω , ici, à cause de la modification de signe, on a seulement

$$\begin{aligned} \varphi(\omega) &\geq 0 & \omega &\geq 0 \\ \varphi(\omega) &\leq 0 & \omega &\leq 0. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Le fait que $\tilde{G}(s)$ n'a pas de pôles pour $s_1 \neq 0$ était basé sur la positivité de $\varphi(\omega)$. Elle assure que l'intégrale qui apparaît dans (III.17a) soit positive pour s réel, et que sa partie imaginaire soit non nulle pour $s_1 \neq 0$, $s_2 \neq 0$. On a encore les mêmes résultats ici si on suppose

$$L_{+-}(\omega) - L_{-+}(\omega) \geq 0 \quad \text{pour } \omega \geq 0. \quad (\text{B.2})$$

Dans ce cas, avec (IV.18a) et (II.42):

$$\varphi(\omega) + \varphi(-\omega) = (1 - e^{-\beta\omega}) (L_{+-}(\omega) - L_{-+}(\omega)) \geq 0 \quad \omega \geq 0 \quad (\text{B.3})$$

Ceci suffit à rendre l'intégrale dans (III.17a) positive. En effet, en scindant l'intervalle d'intégration en deux parties, on a

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\varphi(\omega)}{(\omega - \omega_0)^2 + s^2} d\omega &= \int_0^{\infty} \frac{\varphi(\omega)}{(\omega - \omega_0)^2 + s^2} d\omega + \int_0^{\infty} \frac{\varphi(-\omega)}{(\omega + \omega_0)^2 + s^2} d\omega \\ &\geq \int_0^{\infty} \varphi(\omega) \left[\frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + s^2} - \frac{1}{(\omega + \omega_0)^2 + s^2} \right] d\omega \end{aligned}$$

par (B.3).

Avec (B.1), cette dernière intégrale est manifestement positive. Par un raisonnement analogue, on montre que la partie imaginaire (III.18) est non nulle.

La condition (B.2) est vérifiée en particulier si l'opérateur d'interaction V_B^+ est hermitien, puisqu'alors $L_{+-}(\omega) = L_{-+}(\omega)$. Elle est également remplie dans le cas du couplage linéaire discuté ci-dessous.

Ensemble d'oscillateurs harmoniques en couplage linéaire

Prenons un modèle de bain formé d'oscillateurs indépendants

$$H_B = \sum_{i=1}^{\infty} \omega_i b_i^\dagger b_i \quad V = \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i a^\dagger \otimes b_i + \text{h.c.} \quad (\text{B.4})$$

Les fonctions de corrélation sont aisément calculées à partir de leur définition. En posant $\gamma(\omega) d\omega = \sum_{\omega \leq \omega_i < \omega + d\omega} \gamma_i$ on obtient après passage à la limite thermodynamique :

$$c_{+-}(t) = \int_0^{\infty} |\gamma(\omega)|^2 \frac{1}{1 - e^{-\beta\omega}} e^{-i\omega t} d\omega \quad (\text{B.5})$$

$$c_{--}(t) = c_{++}(t) = 0.$$

D'où

$$L_{+-}(\omega) = \begin{cases} |\gamma(\omega)|^2 \frac{1}{1 - e^{-\beta\omega}} & \omega \geq 0 \\ 0 & \omega < 0 \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

et

$$L_{-+}(\omega) = e^{\beta\omega} L_{+-}(-\omega).$$

De (IV.20), (IV.21) et (III.34), on trouve

$$A(t) = A(0) \int_0^{\infty} e^{-ixt} \frac{|\gamma(x)|^2}{\left(x - \omega_0 + \int_0^{\infty} \frac{|\gamma(\omega)|^2}{\omega - x} d\omega\right)^2 + \pi^2 |\gamma(x)|^2} dx.$$

C'est exactement la solution qu'on aurait obtenue en résolvant rigoureusement [11a] les équations de Heisenberg du mouvement à partir de (B.4). Le fait que l'approximation de Born donne pour $A(t)$ la même valeur que le calcul rigoureux peut se comprendre de la façon suivante: si on avait retenu des termes d'ordre supérieur dans l'interaction, on aurait aussi des dérivées d'ordre supérieur en $\partial/\partial\alpha$ et $\partial/\partial\alpha^*$ dans (IV.6). Dans le cas du couplage (B.4), les dérivées supérieures ne donnent pas de contribution au premier moment (à cause de l'intégration par partie dans le calcul de $\partial A(t)/\partial t$). Par contre, elles se manifesteraient dans le calcul des moments d'ordre supérieur.

Références

- [1] J. YVON, *J. Phys. Rad.* 21, 505 (1960).
- [2] BLOEMBERGEN, PURCELL and POUND, *Phys. Rev.* 73, 679 (1948).
- [3] A. G. REDFIELD, *I.B.M. Journal* 7, 19 (1957).
- [4] PRIMAS, *Helv. phys. Acta* 34, 36 (1961).
- [5] STENHOLM, TER HAAR, *Physica* 32, 1361 (1966).
- [6] J. M. JAUCH, *Helv. phys. Acta* 37, 293 (1964).
- [7] R. K. WANGNESS and F. BLOCH, *Phys. Rev.* 89, 728 (1956); F. BLOCH, *Phys. Rev.* 102, 104 (1956); F. BLOCH, *Phys. Rev.* 105, 1206 (1957).
- [8] P. S. HUBBARD, *Rev. Mod. Phys.* 33, 249 (1961) et références citées dans cette revue.
- [9a] P. N. ARGYRES and P. L. KELLEY, *Phys. Rev.* 134, A98 (1964).
- [9b] U. FANO, *Phys. Rev.* 131, 259 (1963).
- [10a] R. ZWANZIG, *Physica* 30, 1109 (1964).
- [10b] G. G. EMCH, *Helv. phys. Acta* 37, 532 (1964).
- [11a] F. T. ARRECHI and R. J. GLAUBER, *International School of Physics 'Enrico Fermi' XLII course*, Quantum optics (Varenna 1967).
- [11b] P. ULLERSMA, *Physica* 32, 27 (1966).

- [11c] W. H. LOUISELL, L. R. WALKER, *Phys. Rev.* *137*, B204 (1965).
- [12] F. BLOCH, *Phys. Rev.* *70*, 460 (1946).
- [13] R. J. GLAUBER, *Phys. Rev.* *131*, 2766 (1963).
- [14] R. BONIFACIO and F. HAAKE, *Z. Phys.* *200*, 526 (1967).
- [15] C. J. FAVRE et J. P. MARCHAND, *Helv. phys. Acta* *39*, 5 (1966).
- [16] I. OPPENHEIM and K. E. SHULER, *Phys. Rev.* *138*, B1007 (1965).
- [17] Par exemple F. BLOCH, *Phys. Rev.* *105*, 1206 (1957).
- [18] G. DOETSCH, *Handbuch der Laplace-Transformation*, Band I (Birkhäuser, Basel 1950), Satz 6, p. 267.
- [19] G. DOETSCH, *Handbuch der Laplace-Transformation*, Band II (Birkhäuser, Basel und Stuttgart 1955), Satz 1, p. 174.
- [20] Lemme de RIEMANN-LEBESQUE.
- [21] D. V. WIDDER, *The Laplace Transform* (Princeton University Press 1946), Théorème 11.6a, p. 89.
- [22] D. V. WIDDER, *The Laplace Transform* (Princeton University Press 1946), Théorème 3a, p. 186.
- [23] S. BOCHNER, *Lectures on Fourier Integrals* (Princeton University Press 1959), chap. I, § 3.
- [23a] N. I. MUSHELISHVILI, *Singular Integral Equations* (Noordhoff, Groningen 1953).
- [23b] Référence précédente § 12.
- [24] P. ULLERSMA, réf. 11b, p. 52.
- [25] Pour la généralité de la représentation P , voir par exemple: R. J. GLAUBER, Les Houches 1964, *Quantum Optics and Electronics*, p. 63 (Gordon and Breach 1965).
- [26] W. H. LOUISELL, *International School of Physics 'Enrico Fermi', XLII course*, Quantum optics (Varenna 1967).
- [27] W. WEIDLICH and F. HAAKE, *Z. Phys.* *185*, 30 (1963).
- [28a] E. HILLE et R. S. PHILLIPS, *Amer. Math. Soc. Colloquium Publications XXXI* (1957), Théorème 11.4.1.
- [28b] Idem: lemme 13.3.6.
- [29] A. QUATTROPANI, *Phys. kondens. Mat.* *5*, 318 (1966).