Equation pilote décrivant l'évolution d'un petit système S couplé à un grand réservoir R (suite)

But de cette séance : Reprendre le problème précédent dans l'espace des fréquences (ou des énergies), ce qui revient à introduire la résolvante de l'opérateur de Liouville L dans l'espace de Liouville.

Une telle approche permet d'utiliser directement les résultats de VI sur le calcul des restrictions de la résolvante à l'intérieur de divers sous-espaces. Elle permet surtout d'effectuer plus commodément un certain nombre d'approximations sur l'équation d'évolution du petit système A, d'en comprendre le sens physique et les conditions de validité (il est beaucoup plus facile de travailler sur des équations algébriques que sur les équations intégrodifférentielles).

D- Passage dans l'espace des fréquences

① Résolvante $\mathcal{G}(z)$ de L

- Soit
$$\mathcal{U}(t) = e^{-iLt/\hbar} \tag{IX-1}$$
l'opérateur d'évolution associé à l'équation de Liouville (VIII-19). On a :
$$|\rho(t)\gg \; = \; \mathcal{U}(t)\,|\rho(0)\gg \tag{IX-2}$$

- D'après les résultats du cours II, on a :

Pour $t>0$
$$\mathcal{U}(t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{C_+} dz\; e^{-izt/\hbar}\; \mathcal{G}(z) \tag{IX-3}$$
où
$$\mathcal{G}(z) = \frac{1}{z-L} \tag{IX-4}$$
est la résolvante de L.

- Il sera plus commode de parler de fréquences (fréquences de Bohr du petit système) plutôt que d'énergies. En utilisant la définition du contour C_+ (fig 9 page (II-6)), en posant $E=\hbar\omega$, on réécrit (IX.3) et (IX-4) sous la forme :

$$t>0 \qquad \mathcal{U}(t) = \frac{i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\; e^{-i\omega t}\; \mathcal{G}(\omega+i\varepsilon) \tag{IX-5}$$
$$\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon) = \frac{1}{\hbar\omega+i\varepsilon-L} \tag{IX-6}$$

② Restrictions de $\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon)$. Opérateur $\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)$

- Soit $\mathcal{P}$ un projecteur de l'espace de Liouville satisfaisant :
$$\mathcal{P}^2 = \mathcal{P} \tag{IX-7}$$
et $\mathcal{Q}$ l'opérateur
$$\mathcal{Q} = 1-\mathcal{P} \tag{IX-8}$$
qui satisfait lui aussi
$$\mathcal{Q}^2=\mathcal{Q} \qquad \mathcal{P}\mathcal{Q}=\mathcal{Q}\mathcal{P}=0 \tag{IX-9}$$

Nous ne précisons pas plus pour l'instant $\mathcal{P}$ et $\mathcal{Q}$. Nous n'utilisons dans ce § 2 que (IX-7), (IX-8), (IX-9) et l'hypothèse supplémentaire suivante :

$$P L_0 \mathcal{Q} = \mathcal{Q} L_0 P = 0 \qquad \text{(IX-10)}$$

exprimant que P commute avec $L_0 = L_A + L_R$

– Supposons que l'on s'intéresse à l'évolution de $P|\rho(t)\gg$

$$P|\rho(t)\gg \;=\; P\,\mathcal{U}(t)\,|\rho(0)\gg \;=\big(P\,\mathcal{U}(t)\,P + P\,\mathcal{U}(t)\,\mathcal{Q}\big)\,|\rho(0)\gg \qquad \text{(IX-11)}$$

On voit donc qu'on est amené à s'intéresser aux restrictions : $P\,\mathcal{U}(t)\,P$, $P\,\mathcal{U}(t)\,\mathcal{Q}$, c-à-d d'après (IX-5), aux restrictions $P\,\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon)\,P$ $\quad P\,\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon)\,\mathcal{Q}$.

On peut aussi étudier $\mathcal{Q}|\rho(t)\gg$, ce qui conduit à s'intéresser à $\mathcal{Q}\,\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon)\,P$ $\quad \mathcal{Q}\,\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon)\,\mathcal{Q}$.

– Un tel calcul a déjà été fait dans le cours VI . Les seules relations écrites en VI et non en IX-7, 8, 9, 10 sont $P = P^+$ et $\mathcal{Q} = \mathcal{Q}^+$. Mais il est facile de vérifier que dans les calculs de VI, nulle part l'hermiticité de P et $\mathcal{Q}$ n'est utilisée, ce qui fait que les résultats obtenus en VI sont directement applicables ici (où nous envisageons plus loin des projecteurs P et $\mathcal{Q}$ qui ne sont pas hermitiques).

A partir de (VI-12) et (VI-11), on obtient ainsi :

$$P\,\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon)\,P \;=\; \frac{1}{\hbar\omega + i\varepsilon - P L_0 P - P\,\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)\,P} \qquad \text{(IX-12)}$$

où

$$\boxed{\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon) \;=\; L_{AR} + L_{AR}\,\mathcal{Q}\,\frac{1}{\hbar\omega + i\varepsilon - \mathcal{Q} L_0 \mathcal{Q} - \mathcal{Q} L_{AR} \mathcal{Q}}\,\mathcal{Q}\,L_{AR}} \qquad \text{(IX-13)}$$

et des expressions analogues à (VI-13), (VI-16), (VI-18) pour $\mathcal{Q}\,\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon)\,P$, $P\,\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon)\,\mathcal{Q}$, $\mathcal{Q}\,\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon)\,\mathcal{Q}$.

– Si l'on part d'un état initial $|\rho(0)\gg$ tel que $\mathcal{Q}|\rho(0)\gg = 0$ et si l'on ne s'intéresse qu'à $P|\rho(t)\gg$, on voit sur (IX-11) que $P\,\mathcal{G}(\omega+i\varepsilon)\,P$ suffit. En multipliant (IX-5) à droite et à gauche par P et en utilisant IX-12 et (IX-13), on obtient

$$\boxed{P|\rho(t)\gg \;=\; \frac{i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, \frac{e^{-i\omega t}}{\hbar\omega + i\varepsilon - P L_0 P - P\,\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)\,P}\; P|\rho(0)\gg} \qquad \text{(IX-14)}$$

Notons bien que (IX-14) n'est vrai que si $\mathcal{Q}|\rho(0)\gg = 0$. Sinon, il faudrait ajouter un autre terme. De plus, comme nous avons utilisé le contour C_+ dans IX-3 , $\mathcal{U}(t) = 0$ pour $t < 0$ [Nous avons donc pris en réalité $K_+(t) = \theta(t)\,\mathcal{U}(t)$ plutôt que $\mathcal{U}(t)$].

Donc $P|\rho(t)\gg$ défini par (IX-14) est nul pour $t<0$ et prend brusquement la valeur $P|\rho(0)\gg$ à $t=0$. Il évolue ensuite à partir de cet état initial.

③ Comment retrouver l'équation intégrodifférentielle à partir de ce point de vue ?

– Les avantages de l'espace des fréquences ne doivent pas faire complètement oublier ceux de l'espace des temps ! Certaines discussions se font mieux dans l'espace des temps : temps de corrélation d'une perturbation, mémoire d'un processus ...

Il est donc intéressant de savoir passer facilement de l'équation (IX-14) donnant la T.F. de $P|\rho(t)\gg$, à une équation d'évolution donnant la vitesse de variation de $P|\rho(t)\gg$, c-à-d $i\hbar\frac{d}{dt}P|\rho(t)\gg$

– Il suffit pour cela de dériver les 2 membres de (IX-14) par rapport à t. On trouve que la TF de $i\hbar\frac{d}{dt}P|\rho(t)\gg$ est

$$i\hbar \quad \frac{\hbar\omega}{\hbar\omega+i\varepsilon-PL_0P-P\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)P}\,P|\rho(0)\gg \qquad (IX-15)$$

En ajoutant et retranchant au numérateur $PL_0P+P\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)P$ on trouve aisément que :

$$\text{T.F. de } i\hbar\frac{d}{dt}P|\rho(t)\gg \;=\; i\hbar\, P|\rho(0)\gg \;+\; PL_0P \quad \text{T.F. de } P|\rho(t)\gg$$
$$+\,P\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)P \times \text{T.F de } P|\rho(t)\gg \qquad (IX-16)$$

Prenons la T.F. inverse des 2 membres de IX-16. Le membre de gauche donne $i\hbar\frac{d}{dt}P|\rho(t)\gg$. Le 1er terme du membre de droite donne $i\hbar\,\delta(t)\,P|\rho(0)\gg$, le 2ème $PL_0P\,|\rho(t)\gg$, le 3ème la TF d'un produit, c-à-d le produit de convolution de la TF de $P\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)P$ par $P|\rho(t)\gg$. On obtient ainsi

$$\boxed{\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}P|\rho(t)\gg &= i\hbar\,\delta(t)\,P|\rho(0)\gg + PL_0P\,|\rho(t)\gg \\ &+\int_{-\infty}^{+\infty}d\tau\; PR(\tau)P \quad P|\rho(t-\tau)\gg \end{aligned}} \qquad (IX-17)$$

avec

$$\boxed{PR(\tau)P=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}P\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)P\;e^{-i\omega\tau}\,d\omega} \qquad (IX-18)$$

– Le terme $i\hbar\,\delta(t)\,P|\rho(0)\gg$ n'est pas surprenant. $P|\rho(t)\gg$ est en effet nul pour $t<0$ et ce terme permet d'introduire la condition initiale à $t=0$.

– Si l'on compare les 2 intégrales sur τ de (IX-17) et (VIII-64), on voit que les limites d'intégration ne sont pas les mêmes. En fait, ceci peut se comprendre aisément. Comme on impose à $P|\rho(t-\tau)\rangle\rangle$ d'être nul pour $t-\tau<0$, c-à-d pour $\tau>t$, on peut étendre la borne supérieure de (VIII-64) à $+\infty$. D'autre part, à cause du $+i\varepsilon$, on montre aisément que $PR(\tau)P$ défini par (IX-18) est nul pour $\tau<0$. $PR(\tau)P$ n'est donc autre que $\frac{1}{i\hbar}\,\theta(\tau)\,P\,L\,e^{-i\mathcal{Q}L\tau/\hbar}\,\mathcal{Q}\,L\,P$. La présence de $\theta(\tau)$ permet donc d'étendre la borne inférieure de l'intégrale de (VIII-64) à $-\infty$.

– Remarquons enfin que l'équation (IX-17) n'est pas une équation différentielle parce que $PR(\tau)P$ n'est pas une fonction $\delta(\tau)$, c-à-d encore parce que $P\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)P$ n'est pas indépendant de ω.

Le temps de mémoire associé à l'équation intégrodifférentielle est donc l'inverse de la largeur spectrale de $P\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)P$

– Représentation d'interaction. On peut aisément éliminer le terme $PL_0P|\rho(t)\rangle\rangle$ de (IX-17) en posant :

$$|\rho(t)\rangle\rangle = e^{-iL_0t/\hbar}\,|\tilde{\rho}(t)\rangle\rangle \qquad \text{(IX-19)}$$

On obtient alors :

$$i\hbar\frac{d}{dt}P|\tilde{\rho}(t)\rangle\rangle = i\hbar\,\delta(t)\,P|\rho(0)\rangle\rangle + \int_0^{\infty}d\tau\,P\tilde{R}(t,\tau)P\;P|\tilde{\rho}(t-\tau)\rangle\rangle \qquad \text{(IX-20)}$$

où

$$P\tilde{R}(t,\tau)P = P\,e^{iL_0t/\hbar}\,R(\tau)\,e^{-iL_0(t-\tau)/\hbar}\,P \qquad \text{(IX-21)}$$

4 Cas particulier de l'opérateur P défini au § C2. Opérateur $\mathcal{R}_A(\omega+i\varepsilon)$

– Supposons maintenant que P soit le projecteur défini en (VIII-46). En réalité, cette équation définit un projecteur de $\mathcal{L}_R$ puisque

$$P_R = |\sigma_R(0)\rangle\rangle\langle\langle 1_R| \qquad P_R^2 = P_R \qquad \text{(IX-22)}$$

est un opérateur de $\mathcal{L}_R$. P est obtenu en prolongeant P_R dans $\mathcal{L}_A\otimes\mathcal{L}_R$. Il faudrait donc en toute rigueur écrire

$$P = P_R\;\mathbb{1}_A \qquad \text{(IX-23)}$$

où $\mathbb{1}_A$ est l'opérateur unité de $\mathcal{L}_A$.

– Revenons à (IX-12) ou (IX-14). On voit apparaître au dénominateur $P\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)P$ qu'on peut écrire, compte tenu de (IX-22)

$$P\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)P = |\sigma_R(0)\rangle\rangle\langle\langle 1_R|\,\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)\,|\sigma_R(0)\rangle\rangle\langle\langle 1_R|$$

$$= P_R\;\mathcal{R}_A(\omega+i\varepsilon) \qquad \text{(IX-24)}$$

où

$$\boxed{\mathcal{R}_A(\omega+i\varepsilon) = \langle\langle 1_R|\,\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)\,|\sigma_R(0)\rangle\rangle} \qquad \text{(IX-25)}$$

$\mathcal{R}_A$ est l'élément de matrice d'un opérateur de $\mathcal{L}_A\otimes\mathcal{L}_R$ entre 2 vecteurs de $\mathcal{L}_R$. C'est donc un opérateur de $\mathcal{L}_A$. $P\mathcal{R}P$ est $\neq$ au produit de 2 opérateurs, l'un P_R de $\mathcal{L}_R$, l'autre $\mathcal{R}_A$ de $\mathcal{L}_A$

– On voit aussi apparaître dans IX-12 et IX-14 $P L_0 P$. Comme d'après (VIII-56) et (VIII-52), $P L_{AR} P = 0$, $P L_R = 0$, on peut écrire :

$$P L_0 P = P_R L_A \tag{IX-26}$$

– Enfin, par définition même de P :

$$P|\rho(t)\gg = |\sigma_R(0)\gg |\sigma_A(t)\gg \tag{IX-27}$$

où $$|\sigma_A(t)\gg = \ll 1_R|\rho(t)\gg = |Tr_R\, \rho(t)\gg \tag{IX-28}$$

De même : $$P|\rho(0)\gg = |\sigma_R(0)\gg |\sigma_A(0)\gg \tag{IX-29}$$

– On peut donc finalement réécrire (IX-14) sous la forme :

$$|\sigma_R(0)\gg|\sigma_A(t)\gg = \frac{i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \, \frac{e^{-i\omega t}}{\hbar\omega + i\varepsilon - P_R L_A - P_R \mathcal{R}_A(\omega+i\varepsilon)} |\sigma_R(0)\gg|\sigma_A(0)\gg \tag{IX-30}$$

Comme P_R commute avec tout opérateur de $\mathcal{L}_A$ et que $P_R^2 = P_R^3 = \cdots = P_R$, on voit aisément, en développant en série la fraction de IX-30, que l'on peut faire passer P_R du dénominateur au numérateur. Comme de plus $P_R|\sigma_R(0)\gg = |\sigma_R(0)\gg$, on peut finalement éliminer complètement P_R du second membre de (IX-30). En simplifiant par $|\sigma_R(0)\gg$ des 2 côtés du signe =, on obtient finalement.

$$\boxed{|\sigma_A(t)\gg = \frac{i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \, \frac{e^{-i\omega t}}{\hbar\omega + i\varepsilon - L_A - \mathcal{R}_A(\omega+i\varepsilon)} |\sigma_A(0)\gg} \tag{IX-31}$$

On voit alors tout l'intérêt de l'introduction des opérateurs de projection et du choix (IX-22) de P_R. On obtient en (IX-31) une équation ne portant que sur le petit système A et permettant d'étudier l'évolution de l'opérateur densité réduit $\sigma_A(t)$ de A. Toute l'interaction entre A et R est contenue dans le noyau $\mathcal{R}_A(\omega + i\varepsilon)$.

– Avant d'étudier plus en détail ce noyau, écrivons l'équation intégrodifférentielle associée à (IX-31). Un calcul identique à celui du § 3 précédent donne.

$$\boxed{\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}|\sigma_A(t)\gg &= i\hbar\,\delta(t)|\sigma_A(0)\gg + L_A|\sigma_A(t)\gg \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \; R_A(\tau)\,|\sigma_A(t-\tau)\gg \end{aligned}} \tag{IX-32}$$

où

$$R_A(\tau) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{R}_A(\omega+i\varepsilon)\, e^{-i\omega\tau}\, d\omega \tag{IX-33}$$

E - Développement de $\mathcal{R}_A(\omega+i\varepsilon)$ en puissances de l'interaction.

- Développons en série de puissances de L_{AR} l'expression (IX-13) de $\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)$. Comme φ commute avec L_0, on a :

$$\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon) = L_{AR} + L_{AR}\frac{\varphi}{\hbar\omega+i\varepsilon-L_0}L_{AR} + L_{AR}\frac{\varphi}{\hbar\omega+i\varepsilon-L_0}L_{AR}\frac{\varphi}{\hbar\omega+i\varepsilon-L_0}L_{AR}+\cdots \qquad (IX-34)$$

- Calculons maintenant $P\mathcal{R}(\omega+i\varepsilon)P$

(i) Comme $PL_{AR}P=0$, le 1er terme de (IX-34) disparait.

(ii) Notons en plus qu'on peut faire disparaître les 2 opérateurs φ qui figurent à l'extrême gauche ou à l'extrême droite de chaque terme de IX-34 pris entre P et P :

$$PL_{AR}\varphi\cdots\cdots P \qquad \text{ou} \qquad P\cdots\cdots\varphi L_{AR}P$$

Comme $PL_{AR}P=0$, on peut écrire :

$$PL_{AR}\varphi = PL_{AR}\varphi + PL_{AR}P = PL_{AR}(P+\varphi) = PL_{AR}$$
$$\varphi L_{AR}P = \varphi L_{AR}P + PL_{AR}P = (P+\varphi)L_{AR}P = L_{AR}P \qquad (IX-35)$$

- En utilisant l'expression IX-23 de P et la définition (IX-25) de $\mathcal{R}_A(\omega+i\varepsilon)$, on obtient finalement :

$$\mathcal{R}_A(\omega+i\varepsilon) = \ll 1_R\Big|\Big[L_{AR}\frac{1}{\hbar\omega+i\varepsilon-L_0}L_{AR} + L_{AR}\frac{1}{\hbar\omega+i\varepsilon-L_0}L_{AR}\frac{1}{\hbar\omega+i\varepsilon-L_0}L_{AR}$$
$$+ L_{AR}\frac{1}{\hbar\omega+i\varepsilon-L_0}L_{AR}\frac{\varphi}{\hbar\omega+i\varepsilon-L_0}L_{AR}\frac{1}{\hbar\omega+i\varepsilon-L_0}L_{AR}+\cdots\Big|\sigma_R(0)\gg \qquad (IX-36)$$

On constate que formellement ce développement est facile à écrire et qu'il démarre à l'ordre 2

- A l'ordre le plus bas, c-à-d 2, on a donc :

$$\mathcal{R}_A^{(2)}(\omega+i\varepsilon) = \ll 1_R\Big|L_{AR}\frac{1}{\hbar\omega+i\varepsilon-L_0}L_{AR}\Big|\sigma_R(0)\gg \qquad (IX-37)$$

- En reportant le développement (IX-36) dans (IX-33), on obtient un développement de $R_A(\tau)$ faisant intervenir des produits de convolution d'ordre de plus en plus élevé. On peut ensuite reporter l'expression ainsi obtenue pour $R_A(\tau)$ dans (IX-32) et écrire l'équation intégrodifférentielle satisfaite par σ_A sous forme d'un développement en série de V_{AR}.

Sans expliciter le détail des calculs (qui sont laborieux) donnons l'équation ainsi obtenue pour $\tilde{\sigma}_A(t)$ [on utilise la représentation d'interaction, dénotée par un indice ~, et on repasse de l'espace de Liouville à l'espace des états].

- Ordre le plus bas

$$\frac{d}{dt}\tilde{\sigma}_A = -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^t d\tau \, Tr_R\left[\tilde{V}_{AR}(t), \left[\tilde{V}_{AR}(t-\tau), \sigma_R(0)\,\tilde{\sigma}_A(t-\tau)\right]\right] \qquad (IX-38)$$

- Ordre suivant

$$-\frac{1}{\hbar^2}\frac{1}{i\hbar}\int_0^t d\tau\int_0^\tau d\tau' \; Tr_R\left[\tilde{V}_{AR}(t), \left[\tilde{V}_{AR}(t-\tau+\tau'), \left[\tilde{V}_{AR}(t-\tau), \sigma_R(0)\,\tilde{\sigma}_A(t-\tau)\right]\right]\right] \qquad (IX-39)$$

- Ordre suivant

$$-\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_0^t d\tau\int_0^\tau d\tau'\int_0^{\tau'} d\tau''$$

$$\Big\{ Tr_R\left[\tilde{V}_{AR}(t), \left[\tilde{V}_{AR}(t-\tau+\tau'), \left[\tilde{V}_{AR}(t-\tau+\tau''), \left[\tilde{V}_{AR}(t-\tau), \sigma_R(0)\tilde{\sigma}_A(t-\tau)\right]\right]\right]\right]$$

$$- Tr_R\left[\tilde{V}_{AR}(t), \left[\tilde{V}_{AR}(t-\tau+\tau'), \sigma_R(0)\, Tr_R\left[\tilde{V}_{AR}(t-\tau+\tau''), \left[\tilde{V}_{AR}(t-\tau), \sigma_R(0)\tilde{\sigma}_A(t-\tau)\right]\right]\right]\right]\Big\} \qquad (IX-40)$$

On constate bien sur que les équations sont bien plus lourdes à écrire dans le point de vue temporel et dans l'espace des états :

Dans la suite nous n'utiliserons pas ces 3 dernières équations. Nous revenons à (IX-31) et (IX-36). Dans le § suivant nous effectuons un certain nombre d'approximations que nous discuterons ensuite.

F. Introduction d'un certain nombre d'approximations.

L'équation (IX-31) est exacte (moyennant les 3 hypothèses faites sur l'état initial en VIII-37, 38, 55). Nous allons faire maintenant un certain nombre d'approximations.

(1) Approximation de couplage faible

Nous supposons le couplage V_{AR} entre A et R suffisamment petit pour que le développement (IX-36) de $\mathcal{R}_A(\omega+i\varepsilon)$ en puissance de L_{AR} soit très rapidement convergent et nous ne gardons que le terme d'ordre le plus bas $\mathcal{R}_A^{(2)}$ donné en (IX-37)

$$\mathcal{R}_A(\omega+i\varepsilon) \longrightarrow \mathcal{R}_A^{(2)}(\omega+i\varepsilon) \qquad (IX-41)$$

Dans un § ultérieur nous discuterons les conditions de validité d'une telle approximation en précisant l'infiniment petit qui caractérise le développement (IX-36).

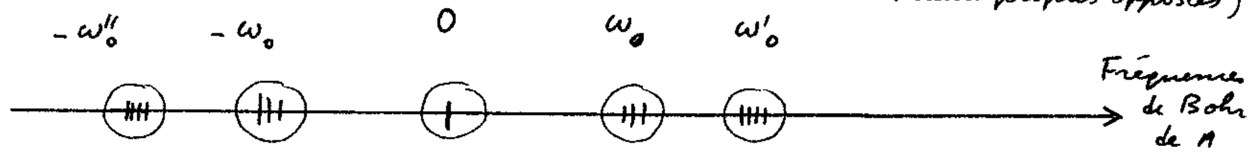
(2) Approximation séculaire

- D'après (IX-31), il nous faut, pour chaque valeur de ω, inverser l'opérateur $\hbar\omega+i\varepsilon-L_A-\mathcal{R}_A^{(2)}(\omega+i\varepsilon)$. Quelle est la forme de la matrice représentant cet opérateur dans la base des états propres de L_A ?

– Nous avons vu plus haut que les valeurs propres de L_A sont (à $\hbar$ près) les fréquences de Bohr de A (cf VIII-29). Comment se répartissent ces fréquences ? Il y a tout d'abord la fréquence 0, correspondant aux états propres $|i\,i^+\rangle$ de L_A. (la projection de $|\sigma_A\rangle\rangle$ sur $|i\,i^+\rangle\rangle$ est l'élément diagonal σ^A_{ii} de σ_A, c-à-d encore la population du niveau $|i\rangle$).
Il y a également les fréquences de Bohr non nulles de A, $\hbar\omega_{ij}$, correspondant aux kets $|i\,j^+\rangle\rangle$ avec $j \neq i$ (et aux éléments non diagonaux σ^A_{ij} de σ_A).

– Nous allons supposer que les fréquences de Bohr de A se répartissent en groupes suffisamment bien séparés les uns des autres (cf figure 1. Noter que le spectre de fréquences est symétrique par rapport à 0 : $|i\,j^+\rangle\rangle$ et $|j\,i^+\rangle\rangle$ ont des valeurs propres opposées).

Fig 1



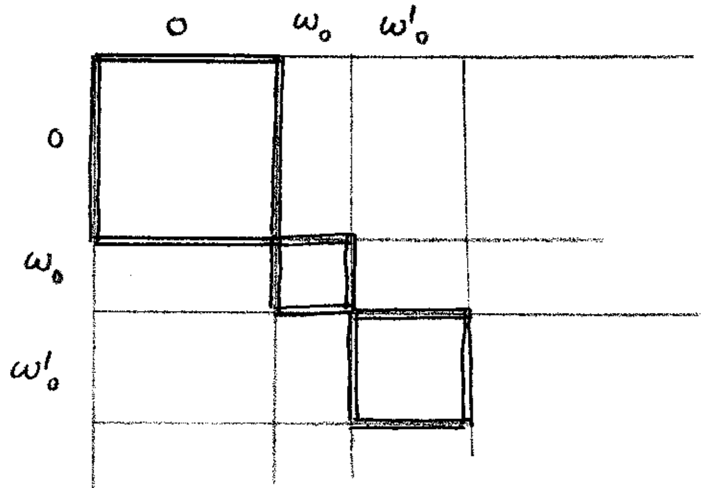
Plus précisément, nous allons supposer que la distance séparant 2 groupes distincts est nettement plus grande que $\mathcal{R}_A^{(2)}$

$$\hbar\,|\omega'_0 - \omega_0| \ll \mathcal{R}_A^{(2)}(\omega'_0)\,,\ \mathcal{R}_A^{(2)}(\omega_0) \qquad (IX-42)$$

Par contre, à l'intérieur de chaque groupe ω_0, les différences de fréquences peuvent être petites ou comparables à $\mathcal{R}_A^{(2)}(\omega_0)$

–

Fig 2



L'approximation séculaire consiste à ne garder de la matrice représentant l'opérateur $\hbar\omega + i\varepsilon - L_A - \mathcal{R}_A^{(2)}(\omega + i\varepsilon)$ dans la base des états propres de L_A que les blocs diagonaux à l'intérieur de chaque groupe de fréquences de Bohr défini plus haut : $0, \omega_0, \omega'_0 \ldots$ [carrés renforcés de la figure 2]
Pourquoi négliger les blocs non-diagonaux entre ω_0 et ω'_0 par exemple ? Parce que d'après l'hypothèse (IX-42), les éléments

de l'opérateur $\hbar\omega - L_A - \mathcal{R}_A^{(2)}(\omega+i\varepsilon)$ figurant dans ces blocs ont un ordre de grandeur, $\mathcal{R}_A^{(2)}(\omega)$, beaucoup plus petit que les différences entre les éléments des blocs diagonaux ω_0 et ω'_0 qui sont de l'ordre de $\hbar(\omega_0-\omega'_0)$

– Notons bien cependant qu'à l'intérieur de chaque bloc diagonal, nous ne négligeons pas les éléments non diagonaux de $\mathcal{R}_A^{(2)}(\omega+i\varepsilon)$.

L'approximation séculaire permet donc de remplacer l'inversion d'une matrice infinie, par l'inversion d'une série infinie de matrices ayant chacune une dimension plus petite, souvent finie.

③ Approximation de mémoire courte

Concentrons nous sur un bloc diagonal, par exemple ω_0.

Tant que ω est différent de ω_0, de manière plus précise tant que :

$$|\hbar\omega - \hbar\omega_0| \gg \mathcal{R}_A^{(2)}(\omega_0+i\varepsilon), \qquad (IX-43)$$

les éléments diagonaux de ce bloc sont beaucoup plus grands que les éléments non diagonaux. On peut donc ignorer ces derniers tant que (IX-43) est satisfait.

Les seules valeurs de ω pour lesquelles $\mathcal{R}_A^{(2)}$ joue donc finalement un rôle sont celles voisines de ω_0

Nous remplacerons alors dans le bloc diagonal ω_0 $\mathcal{R}_A^{(2)}(\omega+i\varepsilon)$ par $\mathcal{R}_A^{2}(\omega_0+i\varepsilon)$

$$\mathcal{R}_A^{(2)}(\omega+i\varepsilon) \longrightarrow \mathcal{R}_A^{(2)}(\omega_0+i\varepsilon) \qquad (IX-44)$$

dans le bloc diagonal ω_0

A chaque bloc diagonal ω_0 de la fig 2 est associé un système d'équations intégrodifférentielles couplant entre eux les éléments de la matrice densité correspondant à des paires de niveaux séparés par $\sim\hbar\omega_0$. Le noyau de cette équation est la T.F. de la restriction $\underbrace{}_{\text{dans le bloc } \omega_0}$ de $\mathcal{R}_A^{(2)}(\omega+i\varepsilon)$. Négliger la variation avec ω de la restriction de $\mathcal{R}_A^{(2)}(\omega+i\varepsilon)$ revient à approximer le noyau par une fonction $\delta(\tau)$, d'où le nom d'approximation de mémoire courte donné à (IX-44).

On voit finalement que cette approximation conduit à un système d'équations différentielles (et non intégro-différentielles) couplant entre eux les éléments de matrice densité correspondant à des paires de niveaux séparés par une distance voisine de $\hbar\omega_0$