

① - Introduction - Buts de ce chapitre

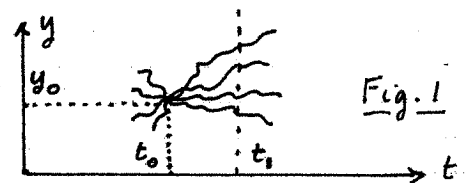
- L'impulsion $p(t)$ d'un atome soumis au refroidissement radiatif est une fonction aléatoire du temps (voir cours IV). Les "moments" d'ordre 1 et 2, $\overline{Sp}$ et $\overline{Sp^2}$, de l'accroissement Sp de $p(t)$ au cours de St ont été calculés plus haut. Peut-on aller plus loin et étudier la distribution $P(p, t)$ des valeurs possibles de p à un instant donné, déterminer la vitesse de variation de cette distribution ? Y a-t-il une distribution stationnaire pour p ? Est-elle gaussienne pour qu'on puisse parler effectivement de température ?
- Autre exemple de problème : pièges radiatifs. Dans l'exemple précédent, les forces radiatives ne dépendent pas de la position x de l'atome et, seule, l'impulsion p joue un rôle important. Ce n'est plus vrai pour un atome dans un puits de potentiel optique. Peut-on alors définir une fonction de distribution $P(x, p; t)$ pour x et p à l'instant t , étudier sa vitesse de variation, et en déduire par exemple la probabilité pour l'atome de s'échapper hors du puits ?
- Le fait de parler de x et p au même instant implique un point de vue classique. C'est un tel point de vue qui sera adopté dans ce chapitre. Le but est d'introduire simplement des équations cinétiques et de se familiariser avec leur structure et les approximations que l'on peut faire pour les résoudre. Le problème sera repris ensuite quantiquement, et on montrera qu'on obtient des équations tout à fait analogues pour la fonction de Wigner.

② Equation pilote pour un processus stochastique de mémoire très courte (processus de Markov) [pour plus de détails, voir références 1 à 3]a) Processus stochastique stationnaire

- Fonction $y(t)$ [ou plusieurs fonctions $y(t), z(t), \dots$] non connues avec certitude. Ensemble de toutes les "réalisations" possibles de $y(t)$
- Moyennes d'ensemble sur toutes ces réalisations permettant de définir des densités de probabilité à 1 ou plusieurs temps
 $W(y, t_1)$: probabilité d'avoir y_1 à t_1
 $W(y_1, t_1, y_2, t_2)$: probabilité d'avoir y_1 à t_1 et y_2 à t_2 etc...
- Stationnarité : invariance par translation dans le temps
 $W(y, t_1)$ est indépendant de t_1 ; $W(y_1, t_1, y_2, t_2)$ ne dépend que de $t_2 - t_1, \dots$
- Exemple : impulsion $p(t)$ de l'atome étudié dans le cours IV

b) Sous-ensemble des réalisations partant d'un état initial y_0, t_0 donné

- Tous les systèmes partant de y_0 à t_0 se trouvent répartis à un instant ultérieur $t_1 > t_0$ suivant une distribution qui ne coïncide pas en général avec $W(y, t_1)$ (sauf si $t_1 - t_0 \gg$ "temps de relaxation")



En imposant une condition initiale, on associe donc à un processus stochastique stationnaire un autre processus non stationnaire, dont nous noterons les densités de probabilité P (pour les distinguer des W)

$P_{y_0 t_0}(y, t_1)$: probabilité d'avoir y à $t_1 > t_0$, sachant qu'on a y_0 à t_0 | V-2

$P_{y_0 t_0}(y, t_1, y_2 t_2)$: pbté d'avoir y à $t_1 > t_0$ et y_2 à $t_2 > t_1$, sachant qu'on a y_0 à t_0 ...

- Nous noterons encore $P_{y_0 t_0}(y, t_1) = \pi_1(y_0 t_0 | y, t_1) \quad (t_1 > t_0) \quad (5.1)$

π_1 : "probabilité de transition" $y_0 t_0 \rightarrow y, t_1$ (ne dépend que de $t_1 - t_0$)

Normalisation $\int dy, \pi_1(y_0 t_0 | y, t_1) = 1 \quad (5.2)$

- $P_{y_0 t_0}(y, t_1, y_2 t_2) = \pi_1(y_0 t_0 | y, t_1) \pi_2(y_0 t_0, y, t_1 | y_2 t_2) \quad (t_2 > t_1 > t_0) \quad (5.3)$

$\pi_2(y_0 t_0, y, t_1 | y_2 t_2)$: pbté d'avoir y_2 à t_2 sachant qu'on a y_0 à t_0 et y à t_1 .

Signification de (5.3) : parmi toutes les réalisations partant de $y_0 t_0$, $\pi_1(y_0 t_0 | y, t_1)$ donnent la proportion de celles qui passent par y, t_1 . Parmi ces réalisations (celles qui passent par $y_0 t_0$ et y, t_1), $\pi_2(y_0 t_0, y, t_1 | y_2 t_2)$ donne la proportion de celles qui arrivent en $y_2 t_2$. Le produit de π_1 par π_2 donne donc la probabilité d'avoir y, t_1 puis $y_2 t_2$ après un départ en $y_0 t_0$.

- Comme $\int dy, P_{y_0 t_0}(y, t_1, y_2 t_2) = P_{y_0 t_0}(y_2 t_2)$, on déduit de (5.3) et (5.1) que

$$\pi_1(y_0 t_0 | y_2 t_2) = \int dy, \pi_1(y_0 t_0 | y, t_1) \pi_2(y_0 t_0, y, t_1 | y_2 t_2) \quad (5.4)$$

- Généralisation : au lieu d'avoir à t_0 une condition initiale y_0 très bien définie, on peut avoir un "mélange statistique" de y_0 avec des "poids" $P(y_0)$. Les généralisations de (5.1) et (5.3) sont alors

$$P_{t_0}(y, t_1) = \int dy_0 P(y_0) \pi_1(y_0 t_0 | y, t_1) \quad (t_1 > t_0) \quad (5.5)$$

$$P_{t_0}(y, t_1, y_2 t_2) = \int dy_0 P(y_0) \pi_1(y_0 t_0 | y, t_1) \pi_2(y_0 t_0, y, t_1 | y_2 t_2) \quad (t_2 > t_1 > t_0) \quad (5.6)$$

c) Processus de Markov - Equation de Smoluchowski

- Définition : $\pi_2(y_0 t_0, y, t_1 | y_2 t_2) = \pi_1(y, t_1 | y_2 t_2) \quad (5.7)$

$$\pi_3(y_0 t_0, y, t_1, y_2 t_2 | y_3 t_3) = \pi_1(y_2 t_2 | y_3 t_3) \quad (5.8)$$

et ainsi de suite ... Dans un "chemin" $y_0 t_0, y, t_1, \dots, y_{n-1} t_{n-1}, y_n t_n$, la probabilité du dernier "saut" $y_{n-1} t_{n-1} \rightarrow y_n t_n$ ne dépend que de l'état $y_{n-1} t_{n-1}$ juste avant ce saut, et non de toute "l'histoire antérieure". Processus sans mémoire.

- En reportant (5.7) dans (5.4), on obtient l'équation de Smoluchowski

$$\pi_1(y_0 t_0 | y_2 t_2) = \int dy, \pi_1(y_0 t_0 | y, t_1) \pi_1(y, t_1 | y_2 t_2) \quad (5.9)$$

- L'équation (5.6) prend également une forme plus simple

$$P_{t_0}(y, t_1, y_2 t_2) = P_{t_0}(y, t_1) \pi_1(y, t_1 | y_2 t_2) \quad (5.10)$$

Finalement, si le processus est markovien, il suffit de connaître l'état initial $P(y_0)$ et la probabilité de transition $\pi_1(y_i t_i | y_j t_j) \quad (t_j > t_i)$, que nous noterons π pour simplifier, pour tout connaître.

d) Forme différentielle de l'équation de Smoluchowski. Equation pilote

- Dans (5.9) posons $t_1 = t \quad (t > t_0)$ et choisissons $t_2 = t + \delta t$

$$\pi(y_0 t_0 | y, t + \delta t) = \int dy' \pi(y_0 t_0 | y', t) \pi(y', t | y, t + \delta t) \quad (5.11)$$

$\pi(y', t | y, t + \delta t)$, qui ne dépend que de δt , est la pbté de transition élémentaire

- En multipliant les 2 membres de (5.11) ^{par $P(y_0)$} , et en intégrant sur y_0 , on obtient compte tenu de (5.5) [en omettant, pour simplifier, l'indice t_0 sur P]

$$P(y, t + \delta t) = \int dy' P(y', t) \pi(y', t | y, t + \delta t) \quad (5.12)$$

Ainsi, pour un processus de Markov (et seulement dans ce cas), la fonction de distribution à $t + \delta t$ peut être reliée directement à la même fonction à t

par une expression ne faisant intervenir que la probabilité de transition élémentaire entre t et $t+\delta t$, et pas l'histoire antérieure à t .
 les équations (5.11) ou (5.12) sont appelées "équations pilotes".

- En utilisant la condition de normalisation (5.2), on peut encore écrire

$$P(y, t+\delta t) - P(y, t) = \int dy' P(y', t) \pi(y' | y, t+\delta t) - \int dy'' P(y'', t) \pi(y'' | y, t+\delta t) \quad (5.13)$$

Signification très claire : la variation de P en y entre t et $t+\delta t$ est égale à ce qui arrive en y moins ce qui part de y .

Pour δt suffisamment petit, le second membre de (5.13) est également petit, de l'ordre de δt , et on peut obtenir alors une équation donnant la vitesse de variation $\partial P(y, t) / \partial t$ de $P(y, t)$ en fonction de P au même instant.

e) Processus de Markov approchés

Tout processus physique a, en général, un temps de mémoire fini τ_c (temps de corrélation de la "force" faisant évoluer y , par exemple temps de collision pour une particule brownienne). Pour pouvoir négliger cette mémoire, et considérer le processus comme un processus de Markov approché, il faut garder δt fini dans (5.11), (5.12) ou (5.13), et grand devant τ_c . D'autre part, pour pouvoir tirer de (5.13) une vitesse de variation, il faut que δt soit très petit devant le temps caractéristique d'évolution de P , le temps de relaxation τ_R . En physique, l'écriture d'une équation pilote implique donc l'existence de 2 échelles de temps bien distinctes τ_c, τ_R avec

$$\tau_R \gg \tau_c \quad (5.14)$$

Remarque : exemple de processus non markovien ($F(x)$)

Particule brownienne soumise en plus à une force extérieure $F(x)$ dépendant de x . Peut-on considérer la vitesse toute seule v (ou l'impulsion $p = Mv$) comme une variable stochastique markovienne ? L'accroissement δv de v entre t et $t+\delta t$ dépend, non seulement des collisions avec les particules du fluide (qui ont un temps de mémoire très court et dont l'effet dépend très peu du passé de v), mais également de la force extérieure au point $x(t)$ où se trouve la particule à l'instant t . Si l'on veut exprimer l'effet de la force extérieure entre t et $t+\delta t$ en fonction de v seulement, il faut réexprimer dans $F(x)$, $x(t)$ en fonction de v :
 $x(t) = x(t_0) + \int_{t_0}^t v(t') dt'$, et on voit que toute l'histoire antérieure de v intervient.

Par contre, si l'on considère l'ensemble $\{x(t), v(t)\}$, cet ensemble est markovien, puisque l'évolution de $x(t)$ et $v(t)$ entre t et $t+\delta t$ ne dépend que de $x(t)$ et $v(t)$ et non du passé de ces 2 variables.

Ainsi, une variable stochastique peut ne pas être markovienne, mais faire partie d'un ensemble plus vaste qui, lui, est markovien.

C'est seulement pour cet ensemble qu'on peut écrire une équation pilote. Dans l'exemple précédent, on peut écrire une équation pilote pour $P(x, v; t)$ mais non pour $P(v, t)$. Nous rencontrerons plus loin une telle situation pour une particule dans un puits de potentiel optique.

f) Allure de la probabilité de transition élémentaire

Comment varie la pte de transition élémentaire $\pi(y' | y, t+\delta t)$ en fonction de l'amplitude $y-y'$ du "saut" de y pendant δt . 2 situations extrêmes

(i) Sauts faibles : pour δt petit, π n'est appréciable que pour $y-y'$ petit.

Exemple des collisions faibles d'une particule brownienne avec des particules beaucoup plus légères, ou de la diffusion résonnante d'un photon par un atome (variation de p at faible, de l'ordre de $\hbar k$. Voir cours IV)

Après 1 collision faible (ou 1 diffusion), l'allure de π en fonction de y dépend du processus étudié. Mais après plusieurs collisions faibles indépendantes (en nombre pas trop élevé toutefois pour que l'effet global reste petit), l'allure de π tend vers une gaussienne (théorème de la limite centrale). Dans l'exemple du refroidissement radiatif il faut prendre $\delta t \gg \tau_0^{-1}$ pour avoir plusieurs cycles de fluorescence, mais $\delta t \ll \gamma^{-1}$ pour avoir un effet global faible.

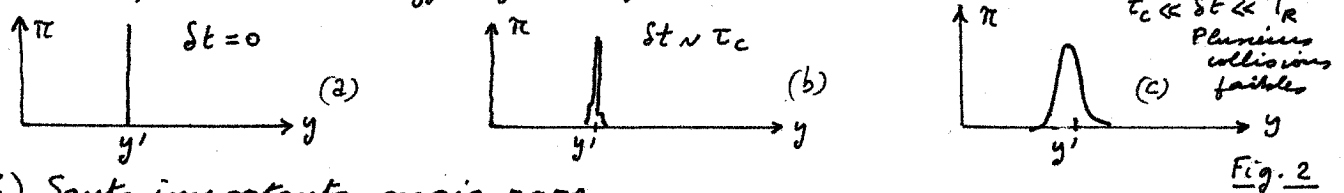


Fig. 2

(ii) Sauts importants mais rares

Exemple de collision entre particules de masse comparable. Chaque collision fait varier la vitesse de la particule de manière appréciable. Mais, pour qu'on puisse écrire une équation pilote, il faut 2 échelles de temps : un temps entre collisions T_c beaucoup plus long que le temps de collision τ_c . En prenant $\tau_c \ll \delta t \ll T_c$, la probabilité pour qu'une particule subisse une collision pendant δt est faible, mais l'effet d'une telle collision, quand elle se produit, est important (Fig. 3).

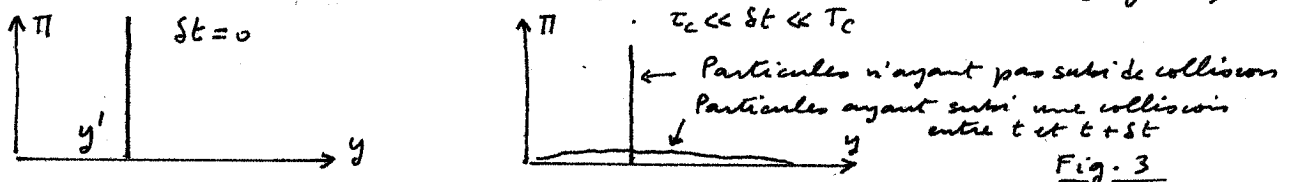


Fig. 3

Par suite de la petitesse de τ_c , le problème des forces radiatives entre dans la catégorie (i).

③ - Limite des faibles sauts - Équation de Fokker-Planck

a) Hypothèses sur la probabilité de transition élémentaire $\pi(y't|y,t+\delta t)$

- $\pi(y't|y,t+\delta t)$ est une fonction de y' , $y-y'$, δt qui varie beaucoup plus vite en fonction de $y-y'$ qu'en fonction de y' , et qui, pour δt petit, n'est appréciable que pour $y-y'$ petit (cas i de 2f).
- Dans l'expression (5.12), π varie beaucoup plus vite en fonction de $y-y'$ autour de $y-y' \approx 0$ que $\mathcal{P}(y',t)$ en fonction de y' : l'amplitude des sauts est beaucoup plus faible que la largeur de la distribution $\mathcal{P}$.

b) Développement de Kramers Moyal - Approximation de Fokker-Planck

- Posons $y-y' = \delta y$ et récrivons (5.12) sous la forme

$$\mathcal{P}(y,t+\delta t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d(\delta y) \mathcal{P}(y-\delta y,t) \pi(y-\delta y,t|y,t+\delta t) \quad (5.15)$$

D'après l'hypothèse (i) du § a ci-dessus, l'intégrand de (5.15) est une fonction de y et δy qui varie lentement en y sur un intervalle de l'ordre de l'amplitude des sauts δy . On peut donc valablement effectuer un développement de Taylor

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(y-\delta y,t) \pi(y-\delta y,t|y,t+\delta t) &= \mathcal{P}(y,t) \pi(y,t|y+\delta y,t+\delta t) \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} (\delta y)^n \frac{\partial^n}{\partial y^n} \mathcal{P}(y,t) \pi(y,t|y+\delta y,t+\delta t) \end{aligned} \quad (5.16)$$

En reportant (5.16) dans (5.15), on obtient, compte tenu de (5.2)

$$P(y, t + \delta t) - P(y, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial y^n} P(y, t) \int_{-\infty}^{+\infty} d(\delta y) (\delta y)^n \pi(y, t | y + \delta y, t + \delta t) \quad (V-5) \quad (5.17)$$

c'est à dire encore

$$\frac{\partial}{\partial t} P(y, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial y^n} M_n(y) P(y, t) \quad (5.18)$$

où

$$M_n(y) = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{1}{n!} \frac{1}{\delta t} \int_{-\infty}^{+\infty} d(\delta y) (\delta y)^n \pi(y, t | y + \delta y, t + \delta t) \quad (5.19)$$

est le quotient par $n! \delta t$ du moment d'ordre n de l'accroissement δy de y pendant δt . Le développement (5.19) est le développement de Kramers - Moyal.

En toute rigueur, la limite $\delta t \rightarrow 0$ de (5.19) doit être comprise comme δt petit devant T_R tout en restant grand devant τ_c .

- Si la largeur en y de $P(y, t)$ est petite devant l'amplitude δy des sauts (hypothèse ii du § a ci-dessus), les termes successifs de (5.19) sont de plus en plus petits. L'équation de Fokker - Planck correspond à l'approximation où les termes d'ordre supérieur à 2 sont négligés

$$\frac{\partial}{\partial t} P(y, t) = - \frac{\partial}{\partial y} M_1(y) P(y, t) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} M_2(y) P(y, t) \quad (5.20)$$

La petitesse des sauts permet ainsi d'approximer l'équation pilote qui est en général une équation intégrale en y par une équation aux dérivées partielles.

c) Quelques propriétés de l'équation de Fokker - Planck

Vocabulaire

Le 1^{er} terme du 2^{ème} membre de (5.20) est appelé terme de transport, ou de convection, ou de dérive ; le 2^{ème} terme, terme de diffusion ou de fluctuations.

L'équation de Fokker - Planck (5.20) est toujours linéaire en P . La dénomination d'équation de F.P. linéaire est cependant souvent réservée à une situation où $M_1(y)$ est proportionnel à y et $M_2(y)$ indépendant de y . Quand $M_2(y)$ est indépendant de y et que $M_1(y)$ est une fonction non-linéaire de y , on parle parfois d'équation quasi-linéaire.

Courant

L'équation de Fokker - Planck peut être encore écrite

$$\frac{\partial}{\partial t} P(y, t) + \frac{\partial}{\partial y} J(y, t) = 0 \quad (5.21)$$

et apparaît comme une équation de continuité pour la densité de probabilité $P(y, t)$ et le courant

$$J(y, t) = M_1(y) P(y, t) - \frac{\partial}{\partial y} M_2(y) P(y, t) \quad (5.22)$$

Le premier terme de (5.22) est un courant de convection (proportionnel à P), le second, un courant de diffusion (proportionnel à un gradient). L'équation (5.21) entraîne que $\int dy P(y, t)$ est conservé au cours du temps.

Solution stationnaire

La distribution stationnaire $P_{st}(y)$, quand elle existe, correspond à $J=0$ et est donc solution de

$$M_1(y) P_{st}(y) - \frac{\partial}{\partial y} M_2(y) P_{st}(y) = 0 \quad (5.23)$$

Elle s'écrit

$$P_{st}(y) = \frac{C}{M_2(y)} \exp \int_0^y \frac{M_1(y')}{M_2(y')} dy' \quad (5.24)$$

où C est une constante [à condition que P_{st} soit normalisable]

Fonction de Green

V-6

C'est la solution de (5.20) qui, à l'instant initial t_0 , se réduit à $\delta(y-y_0)$

Pour $t-t_0 \ll T_R$, la fonction de Green de (5.20) reste une fonction très étroite, localisée près de y_0 . Elle varie avec y beaucoup plus vite que $M_1(y)$ et $M_2(y)$ et est donc très proche de la fonction de Green d'une équation de Fokker-Planck plus simple

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{P}(y,t) = -M_1(y_0) \frac{\partial}{\partial y} \tilde{P}(y,t) + M_2(y_0) \frac{\partial^2}{\partial y^2} \tilde{P}(y,t) \quad (5.25)$$

Par transformée de Fourier, on montre que la fonction de Green de (5.25) est une gaussienne centrée en $y_0 + M_1(y_0)(t-t_0)$ et de variance $2M_2(y_0)(t-t_0)$. On en déduit qu'aux temps très courts ($t-t_0 \ll T_R$), la fonction de Green de (5.20) est très proche d'une telle gaussienne. Aux temps plus longs, la fonction de Green de (5.20) n'est plus forcément gaussienne.

Peut-on considérer la fonction de Green de l'équation de Fokker-Planck (5.20) comme la solution de l'équation pilote (5.12) se réduisant à $\delta(y-y_0)$ pour $t=t_0$, c'est à dire encore comme la probabilité de transition $\pi(y_0, t_0 | y, t)$ du processus de Markov. Aux temps très courts, $t-t_0 \ll T_R$, sans doute pas, car l'hypothèse ci-dessus n'est pas valable : la largeur de $\tilde{P}(y,t)$ est alors très faible et ne peut être considérée ^{comme} grande devant celle de π . L'approximation de (5.12) par (5.20) n'est alors pas bonne. Par contre, si $t-t_0$ est suffisamment grand pour qu'il y ait eu plusieurs "collisions faibles" entre t_0 et t , tout en restant très petit devant T_R , nous avons vu plus haut (voir Fig. 2c) que π est alors proche d'une gaussienne, dont les moments d'ordre 1 et 2 sont, d'après (5.19), $M_1(y_0)(t-t_0)$ et $2M_2(y_0)(t-t_0)$. On en déduit que la fonction de Green de (5.20) devient alors une bonne approximation de $\pi(y_0, t_0 | y, t)$

Avantages de l'équation de Fokker-Planck

Pour un processus de Markov à faibles sauts, il suffit de calculer, par une méthode perturbative par exemple, les moments d'ordre 1 et 2, $\overline{\delta y}$ et $\overline{\delta y^2}$ de l'accroissement δy de y pendant δt . Si l'on montre que, pour δt suffisamment petit,

$$\overline{\delta y} = M_1(y) \delta t \quad \overline{\delta y^2} = 2 M_2(y) \delta t \quad (5.26)$$

on peut alors écrire l'équation (5.20) correspondant aux fonctions ainsi trouvées, et en déduire des informations sur le comportement à long terme du système

Généralisation à un processus à plusieurs variables

Pour un processus de Markov à plusieurs variables $\{y, y_2 \dots y_N\}$, l'équation de Fokker-Planck (5.20) se généralise aisément

$$\frac{\partial P(\vec{y}, t)}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial y_i} M_{1i}(\vec{y}) P(\vec{y}, t) + \sum_i \sum_j \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} M_{2ij}(\vec{y}) P(\vec{y}, t) \quad (5.27)$$

où

$$\overline{\delta y_i} = M_{1i}(\vec{y}) \delta t \quad (5.28)$$

$$\overline{\delta y_i \delta y_j} = 2 M_{2ij}(\vec{y}) \delta t \quad (5.29)$$

④ 1^{er} exemple : Equations de Fokker-Planck pour la distribution d'impulsion d'atomes soumis au refroidissement radiatif

IV-7

a) Etablissement de l'équation de Fokker-Planck

- La composante p_z de l'impulsion le long de l'axe Oz du refroidissement (figure 1 page IV-1) est une variable markovienne : pas de force dépendant de x , découplage entre les mouvements sur les 3 axes Ox, Oy, Oz , temps de corrélation $\tau_c = \tau^{-1}$ (durée d'un cycle de fluorescence) court devant le temps de relaxation γ^{-1} de p_z (voir cours IV). On peut donc écrire une équation pilote pour p_z (noté p pour simplifier). Comme les "sauts" de p (de l'ordre de $\hbar k$) sont petits devant la largeur de la distribution d'impulsion $\mathcal{P}(p, t)$, l'approximation de Fokker-Planck est valable.

- D'après le cours IV, pour $\tau^{-1} \ll \delta t \ll \gamma^{-1}$ (5.30)

$$\overline{\delta p} = -\gamma p \delta t \quad (5.31)$$

$$\overline{\delta p^2} = (\overline{\delta p})^2 + 2D \delta t = \gamma^2 p^2 \delta t^2 + 2D \delta t \quad (5.32)$$

$$D \approx n_0 \hbar^2 k^2 \quad (5.33)$$

D étant le coefficient de diffusion, n_0 la probabilité par unité de temps d'un cycle de fluorescence. On déduit de (5.26)

$$M_1(p) = \overline{\delta p} / \delta t = -\gamma p \quad (5.34)$$

$$M_2(p) = \overline{\delta p^2} / 2 \delta t = D + \gamma^2 p^2 \delta t / 2 \quad (5.35)$$

Pour évaluer l'ordre de grandeur du dernier terme de (5.35), remplaçons p^2 par la valeur moyenne $\langle p^2 \rangle$ à l'équilibre calculée au cours IV (voir 4.31)

$$\langle p^2 \rangle = p_0^2 = 2M \frac{p_0^2}{2M} = 2M \frac{D}{2M\gamma} = \frac{D}{\gamma} \quad (5.36)$$

On a donc

$$M_2(p) = D + \frac{1}{2} \gamma^2 p^2 \delta t \approx D \left(1 + \frac{1}{2} \gamma \delta t\right) \approx D \quad (5.37)$$

Même si l'on ne fait pas tendre δt vers zéro (pour garder $\delta t \gg \tau^{-1}$ et considérer le processus comme markovien), on voit qu'on peut négliger le terme en δt de (5.35), puisque, d'après (5.30), $\gamma \delta t \ll 1$. Le même argument s'appliquerait pour tous les autres termes en $\delta t, \delta t^2, \dots$ des autres moments M_n ($n > 2$), qui sont en $\gamma \delta t, \gamma^2 \delta t^2, \dots$

- Il vient ainsi finalement

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}(p, t) = \gamma \frac{\partial}{\partial p} p \mathcal{P}(p, t) + D \frac{\partial^2}{\partial p^2} \mathcal{P}(p, t)} \quad (5.38)$$

b) Solution stationnaire et fonction de Green

- Le courant J associé $\mathcal{P}$ est, d'après (5.22), (5.34), (5.37)

$$J(p, t) = -\gamma p \mathcal{P}(p, t) - D \frac{\partial}{\partial p} \mathcal{P}(p, t) \quad (5.39)$$

et la solution stationnaire ($J=0$) vaut

$$\mathcal{P}_{st}(p) = C^{\frac{1}{2}} \exp(-\gamma p^2 / 2D) \quad (5.40)$$

C'est bien une gaussienne qu'on peut encore écrire

$$\mathcal{P}_{st}(p) = C^{\frac{1}{2}} \exp(-p^2 / 2M k_B T) \quad (5.41)$$

$$\text{avec } k_B T = D / M \gamma \quad (5.42)$$

- La température introduite au cours IV (voir 4.33) peut donc bien être considérée comme la température d'équilibre des degrés de liberté de translation

- On peut vérifier que

$$\left[\frac{2\pi D}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) \right]^{-1/2} \exp \left[-\frac{\gamma}{2D} \frac{(p - p_0 e^{-\gamma t})^2}{1 - e^{-2\gamma t}} \right] \quad (5.43)$$

car la solution de (5.38) se réduisant à $\delta(p - p_0)$ pour $t=0$, et donc la fonction de Green de (5.38). Le fait que cette fonction de Green soit une gaussienne pour tout t est dû à la forme simple de M_1 (linéaire en p) et M_2 (indépendant de p). On peut vérifier également que, pour $t \gg \gamma^{-1}$, la fonction de Green (5.43) tend vers la distribution stationnaire (5.40). Les conditions initiales sont "oubliées" après un temps supérieur à γ^{-1} .

c) Description équivalente par équation de Langevin

- Il existe une autre description possible de la variable stochastique markovienne $p(t)$, entièrement équivalente à celle donnée par (5.38). Elle repose sur l'équation de Langevin

$$\frac{d}{dt} p(t) = -\gamma p(t) + F(t) \quad (5.44)$$

Equation dynamique où l'effet du rayonnement sur l'impulsion est décrit par

- une force de friction, $-\gamma p(t)$, représentant l'effet moyen du rayonnement (linéaire en p pour p suffisamment petit)
- une force de Langevin aléatoire, $F(t)$, représentant la partie fluctuante de l'effet du rayonnement.

- Comme $F(t)$ est aléatoire, la solution $p(t)$ de (5.44) représente un processus stochastique. Pour qu'il y ait équivalence avec celui décrit par (5.38), certaines conditions doivent bien sûr être imposées sur F

Conditions sur $F(t)$

(i) Stationnarité [car $p(t)$ est stationnaire]

$$(ii) \text{ Moment d'ordre 1 } \quad \overline{F(t)} = 0 \quad (5.45)$$

(l'effet moyen du rayonnement est pris en compte dans $-\gamma p(t)$)

$$(iii) \text{ Moment d'ordre 2 } \quad \overline{F(t)F(t+\tau)} = g(\tau) \quad (5.46)$$

$g(\tau)$: Fonction d'auto-corrélation de F , donc paire en τ , de largeur $\tau_c \sim \gamma^{-1}$, très étroite devant γ^{-1} .

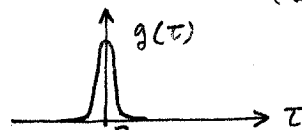


Fig. 4

Pour préciser g , égalons les $\overline{\delta p^2}$ calculés à partir de (5.44) et (5.38). Les réalisations partant de p_0 à t_0 , correspondent à la solution de (5.44) avec une condition initiale donnée p_0 .

$$p(t) = p_0 e^{-\gamma(t-t_0)} + \int_{t_0}^t dt' F(t') e^{-\gamma(t-t')} \quad (5.47)$$

Pour $\tau_c \ll \delta t = t - t_0 \ll \gamma^{-1}$, on peut écrire

$$\delta p = p(t_0 + \delta t) - p(t_0) = \int_{t_0}^{t_0 + \delta t} F(t') dt' \quad (5.48)$$

plus des termes d'ordre 1 en $\gamma \delta t$ qui ne contribueront pas pour les termes linéaires en δt dans les moments d'ordre ≥ 2 . On en déduit,

$$\overline{\delta p^2} = \int_{t_0}^{t_0 + \delta t} dt' \int_{t_0}^{t_0 + \delta t} dt'' \overline{F(t')F(t'')} \quad (5.49)$$

Comme $\delta t \gg \tau_c$ est très grand devant la largeur de $g(\tau)$, et que g est paire

$$\overline{\delta p^2} = \delta t \int_{-\infty}^{+\infty} g(\tau) d\tau = 2\delta t \int_0^{\infty} g(\tau) d\tau \quad (5.50)$$

Or, d'après (5.35) et (5.37), $\overline{\delta p^2} = 2D \delta t$. Vis à vis des fonctions de τ , de largeur grande devant $\tau_c \sim \gamma^{-1}$, on peut donc écrire

$$g(\tau) = \overline{F(t)F(t+\tau)} = 2D \delta(\tau) \quad (5.51)$$

Nous avons vu plus haut que la distribution des valeurs possibles de S_p est une gaussienne. Si l'on impose à la force de Langevin $F(t)$ d'être une fonction aléatoire gaussienne, on montre alors que la grandeur S_p reliée à F par (5.48) est distribuée suivant une gaussienne. Comme les moments d'ordre 1 et 2 des gaussiennes associées à (5.38) et (5.44) ont été déjà ajustés, grâce aux conditions (5.45) et (5.51), ces 2 gaussiennes coïncident. Le fait d'imposer à $F(t)$ d'être gaussienne correspond bien également à l'image d'une force résultant de la succession d'un grand nombre de processus faibles et indépendants (cycles de fluorescence).

Finalement, moyennant les conditions (i) à (iv) imposées à F , les descriptions (5.38) et (5.44) du refroidissement radiatif sont équivalentes. Elles utilisent les mêmes paramètres physiques essentiels: temps d'amortissement γ de p , coefficient de diffusion D , et l'idée que l'atome évolue sous l'effet d'une succession de processus indépendants, faisant changer chacun p d'une petite quantité.

Remarque. Exemple de calcul plus simple à faire à partir de (5.44) qu'à partir de (5.38): fonction d'auto-corrélation de p dans l'état stationnaire.

Avec l'équation de Fokker-Planck, il faut utiliser (5.10) avec $t_1 - t_0 \gg \gamma^{-1}$, de sorte que $P_{t_0}(y, t_1)$ et $P_{t_0}(y, t_1, y_2, t_2)$ se réduisent aux distributions stationnaires à 1 et 2 temps

$$W(y, t_1, y_2, t_2) = W(y_1) \pi(y, t_1 | y_2, t_2) \quad (5.52)$$

Comme on connaît $W(y_1)$ et π [voir (5.40) et (5.43)], on en déduit

$$\overline{y(t_1) y(t_2)} = \iint dy_1 dy_2 y_1 y_2 W(y, t_1, y_2, t_2) \quad (5.53)$$

Il est plus simple, par transformée de Fourier de (5.44), de relier la densité spectrale J_p de p (module du carré de la transformée de Fourier de p) à la densité spectrale J_F de F

$$J_p(\omega) = \frac{J_F(\omega)}{\gamma^2 + \omega^2} \quad (5.54)$$

Par suite de (5.51), $J_F(\omega)$ peut être considéré comme un spectre blanc (indépendant de ω), de sorte que $J_p(\omega)$ est une lorentzienne. Comme la fonction d'auto-corrélation de p est la transformée de Fourier de la densité spectrale (théorème de Wiener-Khinchine), on a

$$\overline{p(0) p(\tau)} = \overline{p(0)}^2 e^{-\gamma |\tau|} = \frac{D}{\gamma} e^{-\gamma \tau} \quad (5.55)$$

REFERENCES

- 1 - C. Cohen-Tannoudji Cours au Collège de France 1977-78
Cours I, II, III, IV.
2. P. Nozières Cours sur le mouvement brownien. Grenoble 1979.
3. N.G. Van Kampen "Stochastic processes in physics and chemistry"
North Holland, 1981