

① Introduction

Exemples d'arguments utilisés souvent pour montrer que la mécanique quantique permet de rendre compte de certains comportements classiques.

(i) Mouvement d'une particule macroscopique libre

- Le théorème d'Ehrenfest montre que le mouvement du centre du paquet d'ondes $\langle \vec{r} \rangle$ obéit aux équations classiques.
- L'étalement du paquet d'ondes est négligeable si la masse est suffisamment grande.

(ii) Observation d'une grosse molécule chirale dans un état droit ou gauche bien défini, et non dans une superposition linéaire des états droit et gauche, comme on s'y attend pour les états propres de l'hamiltonien qui doivent avoir une parité bien définie

L'effet tunnel d'une position à l'autre est de plus en plus difficile pour une molécule de plus en plus grosse et la période de l'oscillation de Rabi entre l'état droit et l'état gauche devient si longue qu'on peut considérer que les états droit et gauche sont stationnaires.

Quelques critiques de ces arguments.

- Si une particule est vraiment libre et si on attend suffisamment longtemps, le paquet d'ondes finira toujours par s'étaler. Peut-on imaginer un objet astronomique, comme une planète ou une étoile, dont le centre de masse est décrit par un paquet d'ondes qui s'étale indéfiniment?
- Rien dans les arguments précédents n'interdit à un système d'être dans une superposition de 2 états macroscopiquement différents. En particulier, pourquoi n'observe-t-on pas des molécules chirales "au milieu de leur oscillation de Rabi", dans une superposition des 2 états droit et gauche.
- Peut-on oublier l'interaction avec l'environnement? La notion de système isolé a-t-elle vraiment un sens pour un système macroscopique? Comment décrire la dynamique du système en présence de telles interactions?

Buts de ce cours

- Préciser quelques ordres de grandeur sur des exemples concrets et montrer que l'interaction avec l'environnement ne peut être ignorée pour des objets suffisamment peu microscopiques.
- Utiliser les idées développées dans les cours antérieurs pour décrire l'effet de l'environnement. Comme les interactions dépendent essentiellement des distances relatives, la base privilégiée de l'objet est la base des états propres de la position. L'interaction avec l'environnement détruit donc les cohérences spatiales de l'objet. Elle explique la localisation de l'objet.
- On commence par étudier un système ayant un spectre continu,

une particule se déplaçant dans l'espace et interagissant, soit avec une autre particule éloignée par un potentiel dépendant de la distance (§2), soit subissant des collisions répétées avec un ensemble d'autres particules microscopiques, comme des atomes, des photons... (§3).

- On envisagera ensuite un système ayant un spectre discret, par exemple une molécule chirale dont les 2 états d'énergie les plus bas sont les superpositions linéaires symétrique et antisymétrique des états droit et gauche. On montrera comment la prise en compte de l'effet des collisions subies par une telle molécule permet de mieux comprendre l'origine de la stabilité des isomères optiques (cours suivant IX).

② Cas de 2 particules interagissant par un potentiel dépendant de la distance.

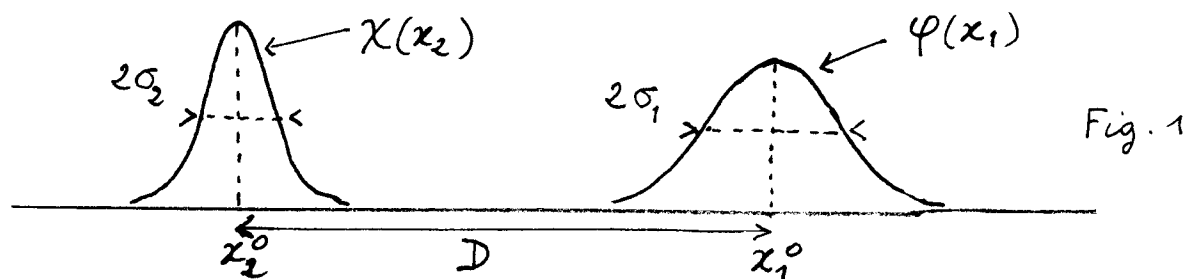
a. Notations

- On se limite au mouvement le long de l'axe Ox joignant les positions moyennes des 2 particules.

- A l'instant $t=0$, la particule 1 est dans l'état $|\varphi\rangle$, la particule 2 dans l'état $|\chi\rangle$

$$|\Psi(0)\rangle = |\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle \quad (8.1)$$

La fonction d'onde $\varphi(x_1) = \langle x_1 | \varphi \rangle$ représentant $|\varphi\rangle$ est centrée en x_1^0 , a pour largeur $2\sigma_1$ et est symétrique par rapport à x_1^0 . De même, $\chi(x_2) = \langle x_2 | \chi \rangle$ est centrée en x_2^0 , a pour largeur $2\sigma_2$ et est symétrique par rapport à x_2^0 (Fig. 1)



- L'hamiltonien des 2 particules s'écrit

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(x_1 - x_2) \quad (8.2)$$

où $V(x_1 - x_2)$ est une interaction dépendant de la distance et qu'on peut développer en puissances de ξ_1/D et ξ_2/D , où ξ_1 et ξ_2 sont les écarts de chaque particule par rapport à sa position moyenne

$$\xi_1 = x_1 - x_1^0 \quad \xi_2 = x_2 - x_2^0 \quad (8.3)$$

et où $D = |x_2^0 - x_1^0|$ est la distance entre les 2 paquets d'ondes

$$\begin{aligned} V(x_1 - x_2) &= V(x_1^0 - x_2^0 + \xi_1 - \xi_2) \\ &= V_0 + (\xi_1 - \xi_2)V'_0 + \frac{1}{2}(\xi_1 - \xi_2)^2 V''_0 + \frac{1}{6}(\xi_1 - \xi_2)^3 V'''_0 + \dots \end{aligned} \quad (8.4)$$

$$V_0 = V(x_1^0 - x_2^0) \quad V'_0 = V'(x)|_{x=x_1^0-x_2^0} \quad V''_0 = V''(x)|_{x=x_1^0-x_2^0} \quad V'''_0 = V'''(x)|_{x=x_1^0-x_2^0} \quad (8.5)$$

b - Vitesse d'apparition des corrélations quantiques entre les 2 particules

- A $t=0$, l'état des 2 particules est l'état produit (8.1). Sous l'effet de l'interaction $V(x_1-x_2)$, des corrélations quantiques vont apparaître entre les 2 particules et leur état ne sera plus un produit. D'après le cours VII, la valeur propre $\Pi_0(t)$ des opérateurs densités réduits de 1 et 2, qui tend vers 1 quand t tend vers zéro, vaut

$$\Pi_0(t) = 1 - At^2 \quad (8.6)$$

où

$$A = \frac{1}{\hbar^2} \langle 1\varphi 2\chi | V(x_1-x_2) [1-|1\varphi\rangle\langle 1\varphi|] [1-|2\chi\rangle\langle 2\chi|] V(x_1-x_2) |1\varphi 2\chi\rangle \quad (8.7)$$

Le temps $T = 1/\sqrt{A}$ caractérise le temps au bout duquel les corrélations quantiques entre 1 et 2 deviennent appréciables.

- Supposons les masses m_1 et m_2 suffisamment grandes pour que, pendant le temps $1/\sqrt{A}$, on puisse négliger le déplacement des particules sous l'effet de leur interaction et de leur mouvement propre (on suppose $\langle p_1 \rangle = \langle p_2 \rangle = 0$ à $t=0$). Les distributions de positions $\langle x_1 | \rho_1 | x_1 \rangle$ et $\langle x_2 | \rho_2 | x_2 \rangle$ n'ont pas bougé entre $t=0$ et $t=1/\sqrt{A}$. Il n'en est pas de même pour les cohérences spatiales, par exemple pour $\langle x_1 | \rho_1 | x'_1 \rangle$ avec $x_1 \neq x'_1$, qui satisfait à l'inégalité suivante, caractéristique de tout opérateur densité

$$|\langle x_1 | \rho_1 | x'_1 \rangle| \leq \sqrt{\langle x_1 | \rho_1 | x_1 \rangle \langle x'_1 | \rho_1 | x'_1 \rangle} \quad (8.8)$$

l'égalité n'étant réalisée que si ρ_1 est un cas pur. Effectivement, à $t=0$, $\rho_1(0) = |1\varphi\rangle\langle 1\varphi|$, et on a bien

$$|\langle x_1 | \rho_1 | x'_1 \rangle| = |\langle x_1 | \varphi \rangle \langle \varphi | x'_1 \rangle| = \sqrt{|\varphi(x_1)|^2 |\varphi(x'_1)|^2} \quad (8.9)$$

Par contre, pour $t \sim 1/\sqrt{A}$, ρ_1 n'est plus un état pur, et $|\langle x_1 | \rho_1(t) | x'_1 \rangle|$ a diminué par rapport à (8.9). On peut donc dire, dans ce cas, que $1/\sqrt{A}$ caractérise le temps au bout duquel les longueurs de cohérence de 1 et 2 deviennent de l'ordre des largeurs σ_1 et σ_2 des fonctions d'ondes initiales.

- Le calcul de A à partir de (8.7) ne pose pas de problème particulier. Si on remplace les 2 opérateurs $V(x_1-x_2)$ par les développements (8.4) et qu'on utilise le fait que les valeurs moyennes dans $|1\varphi\rangle$ et $|2\chi\rangle$ des puissances impaires de ξ_1 et ξ_2 sont nulles, on obtient, à l'ordre le plus bas non nul en σ_1/D et σ_2/D , et après un calcul long mais sans difficulté

$$A = \frac{1}{\hbar^2} \langle \varphi | \xi_1^2 | \varphi \rangle \langle \chi | \xi_2^2 | \chi \rangle V_0''^2 \quad (8.10)$$

Comme $\langle \varphi | \xi_1^2 | \varphi \rangle \sim \sigma_1^2$ et $\langle \chi | \xi_2^2 | \chi \rangle = \sigma_2^2$ (voir Fig. 1), on obtient pour le temps $T = 1/\sqrt{A}$

$$T = \frac{1}{\sqrt{A}} \sim \frac{\hbar}{\sigma_1 \sigma_2 V_0''} \quad (8.11)$$

c - Calcul non perturbatif à la limite $m_1, m_2 \rightarrow \infty$

- Le résultat (8.11) résulte d'une expression perturbative (8.7) qui n'est valable qu'aux temps courts. A la limite $m_1, m_2 \rightarrow \infty$, on peut négliger les 2 premiers termes de (8.2) et obtenir pour l'opérateur

densité' réduit de 1 une expression valable à tout instant .

- Si l'hamiltonien H se réduit à $V(x_1 - x_2)$, l'état de 1+2 à l'instant t s'écrit simplement :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iV(\hat{x}_1 - \hat{x}_2)t/\hbar} |1\varphi 2\chi\rangle \quad (8.12)$$

(On a mis le symbole $\wedge$ sur x_1 et x_2 pour rappeler que ce sont des opérateurs). On a alors

$$\begin{aligned} \langle x_1 | \rho_1(t) | x'_1 \rangle &= \langle x_1 | T_{x_2} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t) | x'_1 \rangle = \\ &= \int dx_2 \langle x_1 x_2 | e^{-iV(\hat{x}_1 - \hat{x}_2)t/\hbar} |1\varphi 2\chi\rangle \langle 1\varphi 2\chi | e^{iV(\hat{x}_1 - \hat{x}_2)t/\hbar} |x'_1 x_2\rangle \\ &= \int dx_2 |\chi(x_2)|^2 \varphi(x_1) \varphi^*(x'_1) e^{-i[V(x_1 - x_2) - V(x'_1 - x_2)]t/\hbar} \end{aligned} \quad (8.13)$$

L'utilisation des développements (8.4) donne alors pour l'exponentielle de (8.13)

$$\begin{aligned} e^{-i[V(x_1 - x_2) - V(x'_1 - x_2)]t/\hbar} &= \\ &= e^{-i[(\xi_1 - \xi'_1)V'_0 + \frac{1}{2}(\xi_1^2 - \xi'^2_1)V''_0]t/\hbar} e^{i(\xi_1 - \xi'_1)\xi_2 V''_0 t/\hbar} \end{aligned} \quad (8.14)$$

La 1^{re} exponentielle de la 2^{ème} ligne de (8.14) est un facteur de phase. En changeant de variables ($x_1 \rightarrow \xi_1$, $x_2 \rightarrow \xi_2$) et en notant que $\varphi(x_1)\varphi^*(x'_1) = \langle \xi_1 | \rho_1(0) | \xi'_1 \rangle$, on déduit de (8.13) et (8.14) que

$$|\langle \xi_1 | \rho_1(t) | \xi'_1 \rangle| = |\langle \xi_1 | \rho_1(0) | \xi'_1 \rangle| \int d\xi_2 |\chi(\xi_2)|^2 e^{i(\xi_1 - \xi'_1)\xi_2 V''_0 t/\hbar} \quad (8.15)$$

la cohérence spatiale de 1 entre ξ_1 et ξ'_1 a un module qui décroît au cours du temps comme la transformée de Fourier de $|\chi(\xi_2)|^2$ évaluée à $(\xi_1 - \xi'_1)V''_0 t/\hbar$. Si l'on prend pour $|\chi(\xi_2)|^2$ une gaussienne

$$|\chi(\xi_2)|^2 = \frac{1}{\sigma_2 \sqrt{\pi}} e^{-\xi_2^2 / \sigma_2^2} \quad (8.16)$$

(8.15) devient

$$|\langle \xi_1 | \rho_1(t) | \xi'_1 \rangle| = |\langle \xi_1 | \rho_1(0) | \xi'_1 \rangle| e^{-(\xi_1 - \xi'_1)^2 \sigma_2^2 V''_0{}^2 t^2 / 4\hbar^2} \quad (8.17)$$

On retrouve bien que la longueur de cohérence de 1 devient inférieure à $2\sigma_1$ quand $t \sim \hbar / V''_0 \sigma_1 \sigma_2$, ce qui coïncide avec (8.11) (l'exponentielle de (8.17) est alors de l'ordre de $1/e$ pour $|\xi_1 - \xi'_1| \sim 2\sigma_1$)

- Le calcul qui précède peut être interprété de la manière suivante. Si 2 est en x_2 , l'énergie de 1 est $V(x_1 - x_2)$ en x_1 , $V(x'_1 - x_2)$ en x'_1 . La cohérence de 1 entre x_1 et x'_1 évolue donc à la fréquence $[V(x_1 - x_2) - V(x'_1 - x_2)]/\hbar$. Cette fréquence change si la position de 2 varie dans un intervalle b_2 autour de x_2^0 et c'est le battement entre les exponentielles correspondant à ces diverses fréquences de Bohr possibles de $\langle x_1 | \rho_1(t) | x'_1 \rangle$ qui conduit à un amortissement de $\langle x_1 | \rho_1(t) | x'_1 \rangle$. La "mesure de la position de 1 par 2" produit en quelque sorte un élargissement inhomogène du spectre de fréquences de $\langle x_1 | \rho_1(t) | x'_1 \rangle$.

d. Quelques ordres de grandeur

Pour simplifier, nous prenons $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$ (cas symétrique) et calculons le temps T donné par (8.11), temps au bout duquel la longueur de cohérence de 1 ou 2 commence à devenir inférieur à σ .

Interactions électrostatiques entre 2 charges élémentaires q

$$V_0 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 D} \quad V''_0 = \frac{q^2}{2\pi\epsilon_0 D^3} \quad (8.18)$$

$$T \sim \frac{\hbar}{\sigma^2 V''_0} \sim \frac{\hbar 2\pi\epsilon_0}{q^2} \frac{D^3}{\sigma^2} \quad (8.19)$$

$$\hbar = 10^{-34} \text{ J.s} \quad q = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C} \quad \epsilon_0 = 1/36\pi \cdot 10^9 \text{ MKSA}$$

$$\hookrightarrow T \sim 2 \cdot 10^{-7} \frac{D^3}{\sigma^2} \quad (T \text{ en sec, } D \text{ et } \sigma \text{ en m})$$

$$\text{Si } D = 1 \text{ cm} = 10^{-2} \text{ m}, \quad \sigma = 0.1 \text{ mm} = 10^{-4} \text{ m}, \quad T \sim 2 \cdot 10^{-5} \text{ sec}$$

- On en conclut que 2 charges élémentaires situées à une distance de 1 cm l'une de l'autre ne peuvent garder une longueur de cohérence de 0.1 mm au delà de 20 μ s.

- Distance parcourue pendant T sous l'effet de la force électrostatique

$$F = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 D^2} \quad \text{Accélération } a = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 D^2 m} \quad \ell = \frac{1}{2} a T^2 = \frac{q^2 T^2}{8\pi\epsilon_0 D^2 m}$$

$$\text{Si } m = 10^{-9} \text{ Kg (grain de poussière)} \rightarrow \ell \sim 4.6 \cdot 10^{-25} \text{ m}$$

- Etalement du paquet d'ondes, de largeur initiale σ , pendant T

$$\frac{\hbar}{m\sigma} T \sim 10^{-26} \text{ m}$$

On peut donc bien négliger tout déplacement des particules pendant le temps de destruction des cohérences

Interactions gravitationnelles entre 2 masses

$$V_0 = \frac{G m_1 m_2}{D} \quad V''_0 = \frac{2 G m_1 m_2}{D^3} \quad (8.20)$$

$$T \sim \frac{\hbar}{\sigma^2 V''_0} \sim \frac{\hbar}{2 G m_1 m_2} \frac{D^3}{\sigma^2} \quad G = 6.67 \cdot 10^{-11} \text{ MKSA} \quad (8.21)$$

$$\text{1^{er} exemple} \quad m_1 = m_2 = 10^{-9} \text{ Kg} \rightarrow T \sim 7.5 \cdot 10^{-7} \frac{D^3}{\sigma^2}$$

Même ordre de grandeur que pour l'exemple pris plus haut.

$$\text{Si } D = 10^{-2} \text{ m}, \quad \sigma = 10^{-4} \text{ m} \quad T \sim 8 \cdot 10^{-5} \text{ sec}$$

2^{ème} exemple Centres de masse de la terre et de la lune

$$m_1 = 6 \cdot 10^{24} \text{ Kg} \quad m_2 = 7.3 \cdot 10^{22} \text{ Kg}$$

$$T \sim 1.7 \cdot 10^{-72} \frac{D^3}{\sigma^2}$$

$$\text{Ici } D \text{ est fixé : } D = 3.8 \cdot 10^8 \text{ m}$$

$$\text{Si on prend } \sigma \sim 1 \text{ F} = 10^{-15} \text{ m}, \text{ on trouve } T = 10^{-16} \text{ s !}$$

Les centres de masse de la terre et de la lune ne peuvent garder une longueur de cohérence de 1 Fermi au delà de 10^{-16} sec.

③ Cas d'une particule de masse M subissant des collisions répétées avec d'autres particules microscopiques

a - Limite $M \rightarrow \infty$. Rappels de résultats concernant la vitesse de destruction des cohérences spatiales.

- Considérons une grosse particule de masse M , subissant de collisions répétées avec des photons, des électrons, des atomes, des molécules... Nous avons montré dans le cours 88-89 (cours IV) que, à la limite $M \rightarrow \infty$, les cohérences spatiales $\langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle$ de la grosse particule cible sont détruites par les collisions suivant l'équation :

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle = - \frac{D}{3\hbar^2} (\vec{r}' - \vec{r}'')^2 \langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle \quad (8.22)$$

où D est un coefficient dont l'expression est

$$D = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_i} v_i n(\vec{k}_i) \sum_{\vec{k}_f} \sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f) \hbar^2 (\vec{k}_i - \vec{k}_f)^2 \quad (8.23)$$

Dans (8.23), $\sigma(\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f)$ est la section efficace de collision correspondant aux processus où le vecteur d'onde de la particule projectile passe de $\vec{k}_i$ à $\vec{k}_f$; $n(\vec{k}_i)$ est le nombre de particules projectiles par unité de volume dont le vecteur d'onde vaut $\vec{k}_i$, v_i la vitesse de ces particules. En fait, D est le coefficient de diffusion de l'impulsion de la particule cible sous l'effet des collisions avec les particules projectiles (voir cours 88-89, cours IV et V). L'interprétation du fait que le temps de destruction des cohérences spatiales entre $\vec{r}'$ et $\vec{r}''$ est proportionnel à D et au carré de la distance $(\vec{r}' - \vec{r}'')^2$ a été redonné plus haut (voir cours I)

- Rappelons enfin que l'équation (8.22) n'est valable que si $|\vec{r}' - \vec{r}''|$ est plus petit que la longueur d'onde de de Broglie $1/k_i$ des particules projectiles. Si $|\vec{r}' - \vec{r}''| \gg 1/k_i$, la cohérence spatiale $\langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle$ est entièrement détruite après une seule collision. Si $|\vec{r}' - \vec{r}''| \ll 1/k_i$, elle n'est que partiellement détruite après une collision, et c'est l'effet cumulatif des collisions successives qui détruit $\langle \vec{r}' | \rho | \vec{r}'' \rangle$ conformément à (8.22).

- Nous nous intéressons ici aux ordres de grandeur du temps T au bout duquel la cohérence spatiale d'une grosse particule entre 2 points distants de l est réduite de manière significative par les collisions. D'après (8.22)

$$\frac{1}{T} \sim \frac{D}{\hbar^2} l^2 \sim \Lambda l^2 \quad \text{ou} \quad \Lambda = \frac{D}{\hbar^2} \quad (8.24)$$

b - Quelques ordres de grandeur

- D'après (8.24) et (8.23), le coefficient Λ , qui s'exprime en $m^{-2}s^{-1}$, a pour ordre de grandeur

$$\Lambda \sim \frac{1}{\hbar^2} v n_0 \sigma_0 \hbar^2 k^2 \quad (8.25)$$

n_0 : nombre de particules projectiles / m^3

σ_0 : section efficace totale de collision

v : vitesse des projectiles = $\hbar k / m$

(m : masse des projectiles)

- Si le rayon a de la grosse particule est grand devant la longueur d'onde de de Broglie des projectiles, une bonne approximation pour σ_0 est la section efficace géométrique

$$\sigma_0 \sim \pi a^2 \quad (8.26)$$

- Considérons alors une grosse particule de rayon $a = 10^{-3} \text{ cm} = 10^{-5} \text{ m} = 10 \mu\text{m}$, dans un excellent vide de laboratoire, $n_0 = 10^6$ molécules de $\text{N}_2 / \text{cm}^3 = 10^{12}$ particules / m^3 , à une température $T = 300 \text{ K}$

$$\hbar^2 k^2 \sim m k_B T, \quad v = \hbar k / m \sim \sqrt{k_B T / m}$$

$$\text{de sorte que} \quad \Lambda \sim \frac{1}{\hbar^2} n_0 \pi a^2 (k_B T)^{3/2} \sqrt{m}$$

En utilisant la valeur de m pour une molécule de N_2 , $m = 14 \times 1.6 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$, on obtient

$$\Lambda \sim 10^{27} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

Il s'ensuit que, au bout de 1 seconde, la cohérence spatiale du centre de masse est réduite à $\sqrt{10^{-27}} \text{ m} \sim 3 \cdot 10^{-14} \text{ m} = 30 \text{ Fermi}$, (ce qui est bien plus petit que la longueur d'onde de de Broglie thermique des molécules d'azote).

- La référence (1) contient également une estimation de Λ correspondant à la diffusion du rayonnement à 3° K , rayonnement relique du big-bang. Le processus de diffusion est un processus de diffusion Rayleigh (la particule est assimilée à une petite sphère de diélectrique). On trouve alors pour la même particule que celle étudiée plus haut

$$\Lambda \sim 10^{10} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

ce qui implique que, au bout de 1 seconde, le rayonnement à 3° K réduit la longueur de cohérence spatiale à $\sqrt{10^{-10}} \text{ m} = 10^{-5} \text{ m} = 10 \mu\text{m}$.

- Ces 2 exemples montrent clairement à quel point il est difficile d'isoler de l'environnement une particule ayant seulement $10 \mu\text{m}$ de rayon.

C - Compétition entre l'effet de l'étalement du paquet d'ondes et l'effet des collisions.

Dans ce qui précède, nous avons négligé le mouvement propre de la particule, décrit par le terme $P^2/2M$ de l'hamiltonien. Nous essayons maintenant d'estimer l'effet de ce terme afin de voir si l'effet de l'étalement du paquet d'ondes peut l'emporter sur celui des collisions.

Equation pilote utilisée

- Nous ferons l'approximation des vitesses de variation indépendante conduisant à l'équation d'évolution suivante pour ρ .

$$\frac{d}{dt} \rho = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{P^2}{2M}, \rho \right] + \left(\frac{d\rho}{dt} \right)_{\text{coll}} \quad (8.26)$$

où le dernier terme de (8.26) correspond à (8.22). Une telle approximation revient à supposer que, pendant une collision donnée, l'effet du mouvement de la particule est négligeable (temps de collision très court, vitesse de la particule cible très faible devant celle des projectiles). Entre 2 collisions, la particule cible est en vol libre.

- En réalité, nous savons que si la particule cible est en mouvement lent, la distribution des vitesses des particules projectiles est légèrement anisotrope dans son référentiel au repos, ce qui donne naissance à une force de friction opposée à la vitesse p/m de la particule cible (voir § 3 du cours IV du cours 88-89). L'équation pilote (8.26) ne tient pas compte de ce phénomène et conduit, pour la fonction de Wigner de la particule, à une équation de Fokker-Planck sans terme de friction.

Justification du fait que la friction peut être négligée pour une particule macroscopique

- Soit γ le coefficient de friction décrivant l'amortissement de $\langle p \rangle$

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\gamma \langle p \rangle \quad (8.27)$$

Le temps γ^{-1} est le temps au bout duquel la particule cible atteint l'équilibre thermodynamique (on suppose que le gaz qui l'entoure est lui-même en équilibre à la température T). On sait que les coefficients de friction γ et de diffusion D sont reliés par l'équation

$$D = M \gamma k_B T \quad (8.28)$$

et que, à l'équilibre, la longueur de cohérence spatiale de la particule est la longueur d'onde de de Broglie thermique λ_T

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{M k_B T}} \quad (8.29)$$

qui est extrêmement petite pour une particule macroscopique. Par exemple, pour une sphère de rayon $10 \mu\text{m}$ et de densité 1, on a $M = 4 \cdot 10^{-12} \text{ Kg}$ et $\lambda_T \approx 10^{-18} \text{ m}$ pour $T = 300 \text{ K}$!

- Etant donné la petitesse de λ_T , il est donc tout à fait raisonnable de prendre, pour décrire l'état de la particule à $t=0$, un paquet d'ondes de largeur σ telle que

$$\sigma \gg \lambda_T \quad (8.30)$$

A cette largeur en x , $\Delta x = \sigma$, correspond une largeur en p $\Delta p \sim h/\sigma$. L'effet des collisions va être d'élargir cette distribution en p d'une manière qui devient appréciable au bout d'un temps $T_{\Delta p}$ tel que l'élargissement correspondant $\sqrt{D T_{\Delta p}}$ soit de l'ordre de $\Delta p = h/\sigma$. On a donc

$$T_{\Delta p} \sim \frac{h^2}{D \sigma^2} \quad (8.31)$$

Comparons alors les temps $T_{\Delta p}$ et γ^{-1} . D'après (8.29), (8.31) et (8.28)

$$\frac{T_{\Delta p}}{\gamma^{-1}} \sim \frac{h^2 \gamma}{D \sigma^2} = \frac{h^2}{M k_B T \sigma^2} = \frac{\lambda_T^2}{\sigma^2} \ll 1 \quad (8.32)$$

La petitesse de λ_T , due à la valeur élevée de M , entraîne donc que l'effet des collisions sur la distribution en impulsion $\mathcal{P}(p)$, et donc sur la longueur de cohérence spatiale qui lui est reliée (voir cours I), va se manifester bien avant que la friction ait eu un effet quelconque. Il est donc tout à fait légitime d'ignorer la friction pour une particule macroscopique partant d'un état initial satisfaisant (8.30).

Solution de l'équation pilote - Conclusion

- Cette solution a déjà été donnée dans le cours 88-89 (cours VII) avec $\gamma \neq 0$, pour un état initial de la particule correspondant à un paquet d'ondes ^{gausien} à 1 dimension, de largeur σ , centré en $x=0$ et d'impulsion moyenne p_0 . Nous nous contenterons ici de donner les résultats qui peuvent être déduits de cette solution à la limite $\gamma t \ll 1$, puisque nous ne tenons pas compte ici de la friction.

- Pour caractériser la cohérence spatiale entre x' et x'' , nous considérons la cohérence normalisée

$$\Gamma(x', x'') = \frac{|\langle x' | \rho(t) | x'' \rangle|}{\sqrt{\langle x' | \rho(t) | x' \rangle \langle x'' | \rho(t) | x'' \rangle}} \quad (8.33)$$

qui vaut 1 à $t=0$ (cas pur). A partir des résultats établis dans le cours VII du cours 88-89, on peut montrer que la solution de (8.26) donne pour $\Gamma(x', x'')$ à la limite

$$T_{\Delta p} \ll t \ll \gamma^{-1} \quad (8.34)$$

la valeur

$$\Gamma(x', x'') \sim e^{-\frac{Dt}{4\hbar^2} (x' - x'')^2} \quad (8.35)$$

alors qu'en l'absence de vol libre, la solution de 8.26, sans le 1^{er} terme, donne à 1 dimension

$$\Gamma(x', x'') \sim e^{-\frac{Dt}{\hbar^2} (x' - x'')^2} \quad (8.36)$$

La comparaison de (8.35) et (8.36) montre que l'effet des collisions prédomine toujours sur celui du vol libre aux temps longs ($t \gg T_{\Delta p}$). La destruction des cohérences spatiales normalisées est 4 fois plus lente en présence de vol libre qu'en l'absence de vol libre, mais la longueur de cohérence décroît toujours avec le temps, comme $2\hbar/\sqrt{Dt}$.

Remarque : Si, au lieu de caractériser la cohérence spatiale par (8.33), on utilise la cohérence spatiale globale à une distance u , $F(u) = \int dx \langle x + \frac{u}{2} | \rho(t) | x - \frac{u}{2} \rangle$, on trouve que $F(u) = F(x' - x'')$ a la même décroissance que celle donnée en (8.36), que l'on tienne compte ou non du vol libre. Ce résultat n'est pas surprenant puisque $F(u)$ est la transformée de Fourier de la distribution d'impulsion $P(p)$ (voir cours I), et que l'évolution de $P(p)$ est insensible au 1^{er} terme de (8.26) (le vol libre ne peut changer l'impulsion p).

- En ce qui concerne l'évolution de $\langle x \rangle$ et $\langle p \rangle$, la solution de (8.26) donne, à la limite (8.34), le résultat

$$\langle p \rangle(t) = p_0 \quad \langle x \rangle(t) = \frac{p_0}{m} t \quad (8.37)$$

qui est bien le résultat classique pour une particule libre de masse m et d'impulsion initiale p_0 .

Références

- (1) E. Joos, H. D. Zeh, Z. Phys. B59, 223 (1985)
- (2) E. Joos in "New techniques and ideas in quantum measurement theory", D. Greenberger ed., The New York Academy of Sciences, New York 1986, p. 6

Quelques questions pouvant être soulevées à propos du § 2

- ① - Le résultat du § 2 semble indiquer que toute interactions entre 2 particules 1 et 2 finit par détruire les cohérences spatiales de 1 et 2.

Or, dans un système atomique comme l'atome d'Hydrogène, l'électron e^- et le proton p^+ interagissent en permanence. Faut-il en conclure que les cohérences spatiales de e^- vont toujours être détruites au bout d'un certain temps, même dans un état stable comme l'état fondamental $1s$?

- ② - Dans le § 2 c, on a fait tendre m_1 et m_2 vers l'infini et trouvé que les cohérences spatiales de 1 et 2 sont toujours détruites au bout d'un certain temps.

Or, si l'on fait tendre seulement m_2 vers l'infini (et non m_1), il semble a priori correct de considérer que 1 évolue dans un potentiel extérieur créé par la particule 2 infiniment lourde et immobile. Si cela est bien correct, l'état de 1 peut rester pur quel que soit t . Ce résultat n'est-il pas contradictoire avec celui du § 2 c?

- ③ Si les 2 particules 1 et 2 en interaction sont macroscopiques, peut-on construire des états quasiclassiques produits qui évoluent en restant purs pendant des temps longs (sans qu'il apparaisse de corrélations quantiques entre 1 et 2)? Si oui, quels sont les ordres de grandeur des longueurs de cohérence de tels états?

Réponse à la question ①. Existence d'autres variables qui peuvent rester décorrélés

- L'état initial considéré dans le § 2 est un état produit vis à vis des variables de 1 et 2

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{r}_1) \chi(\vec{r}_2) \quad (8.38)$$

Par ailleurs, on ne s'intéresse ensuite qu'à 1 ou à 2, et jamais aux grandeurs sensibles aux corrélations entre 1 et 2. Le but est de comprendre comment le comportement de 1 tout seul est modifié par son interaction avec 2.

- Or, pour un système de 2 particules 1 et 2 interagissant par un potentiel $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$, on peut s'intéresser aussi à d'autres problèmes où les observations sont directement sensibles aux corrélations entre 1 et 2 et ne peuvent s'exprimer en fonction des seuls opérateurs de moments réduits $\rho(1) = \text{Tr}_2 \rho(1,2)$ et $\rho(2) = \text{Tr}_1 \rho(1,2)$. Par exemple, l'absorption et l'émission de lumière par un atome d'hydrogène est déterminée par le couplage du moment dipolaire électrique $\vec{D} = q(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ avec le champ électromagnétique et est donc sensible aux corrélations entre les positions de e^- et p^+

Pour un tel problème, les variables intéressantes sont, non pas $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$, mais

$$\begin{cases} \vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} \\ \vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \end{cases} \quad (8.39.a) \quad \begin{cases} \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \\ \vec{p} = \frac{\vec{p}_1}{m_1} - \frac{\vec{p}_2}{m_2} \end{cases} \quad (8.39.b) \quad \text{avec } m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (8.39.c)$$

qui sont les variables du centre de masse ($\vec{R}, \vec{P}$) et celles de la particule (fictive) relative ($\vec{r}, \vec{p}$). Ecrit en fonction de ces variables, l'hamiltonien H s'écrit

$$H = \frac{\vec{P}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{P}_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \underbrace{\frac{\vec{P}^2}{2(m_1+m_2)}}_{H_{CM}} + \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m}}_{H_{rel}} + V(\vec{r}) \quad (8.40)$$

et ne contient aucun terme d'interaction entre variables du centre de masse et variables de la particule relative.

Donc, si l'on part d'un état initial produit vis à vis de $\vec{R}$ et $\vec{r}$

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}, t=0) = \Psi_{CM}(\vec{R}) \Psi_{rel}(\vec{r}) \quad (8.41)$$

la factorisation (8.41) demeure valable quel que soit t (en l'absence bien sûr de toute autre interaction avec le monde extérieur):

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}, t) = \Psi_{CM}(\vec{R}, t) \Psi_{rel}(\vec{r}, t) = \left[e^{-iH_{CM}t/\hbar} \Psi_{CM}(\vec{R}) \right] \left[e^{-iH_{rel}t/\hbar} \Psi_{rel}(\vec{r}) \right] \quad (8.42)$$

les cohérences spatiales de la particule relative (de même que celles du centre de masse) subsistent alors quel que soit t .

- Il faut bien voir que l'état initial (8.41) n'est pas un état produit vis à vis de $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$. L'électron et le proton sont déjà fortement corrélés dans l'état initial (8.41) et le calcul du § 2 ne peut être appliqué tel quel puisqu'il suppose un état initial de la forme (8.38).

On peut bien sûr calculer à partir de (8.42) l'opérateur densité réduit de 1

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1 | \rho_1(t) | \vec{r}_1' \rangle &= \int d^3r_2 \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \rho(t) | \vec{r}_1', \vec{r}_2 \rangle = \\ &= \int d^3r_2 \Psi_{CM}^* \left(\frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, t \right) \Psi_{rel}^* (\vec{r}_1 - \vec{r}_2, t) \Psi_{CM} \left(\frac{m_1 \vec{r}_1' + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, t \right) \Psi_{rel} (\vec{r}_1' - \vec{r}_2, t) \end{aligned} \quad (8.43)$$

On peut montrer aisément que, par suite de l'étalement du paquet d'ondes du centre de masse, $\langle \vec{r}_1 | \rho_1(t) | \vec{r}_1' \rangle$ va finir par tendre vers 0 quand $t \rightarrow \infty$.

- En conclusion de ce §, il existe bien des variables qui peuvent rester décorréliées $\forall t$ et donc conserver leur cohérence spatiale $\forall t$, mais ce ne sont pas $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$.

Réponse à la question (2) - Limite $m_2 \rightarrow \infty$

- La vitesse d'apparition des corrélations quantiques dépend de l'état initial choisi. Comme nous l'avons vu dans le cours VII, ces corrélations apparaissent très vite pour certains états initiaux, alors qu'elles n'apparaissent pas du tout pour d'autres états initiaux.

- Dans le problème qui nous intéresse ici, le temps T d'apparition des corrélations quantiques est donné par (voir (8.11))

$$T \sim \frac{\hbar}{\sigma_1 \sigma_2 V''_0} \quad (8.44)$$

Il est clair sur (8.44) que, si l'on fait tendre σ_2 vers 0, T va tendre vers l'infini et devenir plus long que le temps caractéristique $1/\omega_0$ d'évolution de 1 autour de 2. On peut alors négliger l'apparition des corrélations quantiques entre 1 et 2 et considérer que 1 et 2, partant de l'état (8.38), restent dans des états purs non corrélés. Encore faut-il vérifier que, pendant le temps d'évolution $1/\omega_0$ de 1 autour de 2, le paquet d'ondes de 2 ne s'étale pas trop, ce

qui va être le cas si l'on diminue trop σ_2 . Mais on fait tendre ici m_2 vers l'infini, en même temps que σ_2 vers 0 et l'étalement du paquet d'ondes de 2 pendant $1/\omega_0$ est négligeable si

$$\frac{\hbar}{m_2 \sigma_2} \frac{1}{\omega_0} < \sigma_2 \quad (8.45)$$

On peut donc faire tendre m_2 vers l'infini et σ_2 vers 0 en gardant

$$m_2 \sigma_2^2 > \frac{\hbar}{\omega_0} \quad (8.46)$$

Comme T ne dépend pas de m_2 , de même que ω_0 (si $m_2 \gg m_1$), on voit que, pour σ_2 suffisamment petit, on aura $T \gg 1/\omega_0$.

La particule 1 peut donc faire plusieurs tours autour de 2 avant que n'apparaissent des corrélations quantiques entre 1 et 2.

Conclusion : Si l'on fait tendre m_2 vers l'infini, on peut, en faisant tendre aussi σ_2 vers 0, réaliser des conditions où l'apparition de corrélations quantiques entre 1 et 2 est négligeable. La particule 1 reste alors décrite par une fonction d'onde et se comporte comme une particule évoluant dans un potentiel extérieur créé par une particule fixe en un point donné.

- Remarque : Que se passe-t-il si l'on fait tendre m_2 vers l'infini en gardant σ_2 constant ? On peut en effet toujours prendre pour 2 une fonction d'onde $\chi(\vec{r}_2)$ de largeur σ_2 non nulle, même si m_2 est très grand.

Si σ_2 est suffisamment grand (et si σ_1 n'est pas trop petit), le temps T donné par (8.44) peut être plus petit que $1/\omega_0$. Le calcul du § 2 est alors valable et montre que les corrélations quantiques apparaissent entre 1 et 2 avant que 1 n'ait eu le temps d'évoluer autour de 2 - les cohérences spatiales sont alors détruites.

Or, si $m_2 \rightarrow \infty$, on est tenté de considérer que 1 se déplace dans un potentiel extérieur créé par la distribution de charge statistique $q_2 |\chi(\vec{r}_2)|^2$. Montrons que cette intuition est fautive. A la limite $m_2 \rightarrow \infty$, l'hamiltonien H s'écrit

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (8.47)$$

Le même type de calcul que celui fait dans le § 2c donne alors pour l'opérateur densité réduit de 1 à l'instant t

$$\begin{aligned} \rho_1(t) = \int d^3 r_2 < \vec{r}_2 | e^{-i \left[\frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right] t / \hbar} | 1 \varphi 2 \chi > \times \\ \times < 1 \varphi 2 \chi | e^{i \left[\frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right] t / \hbar} | \vec{r}_2 > \end{aligned} \quad (8.48)$$

Comme $\vec{r}_2$ commute avec $\vec{r}_1$ et $\vec{p}_1$ (il n'y a plus de $\vec{p}_2$ dans H), cette expression se calcule aisément et devient

$$\rho_1(t) = \int d^3 r_2 |\chi(\vec{r}_2)|^2 e^{-i \left[\frac{\vec{p}_1^2}{2m} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right] t / \hbar} | 1 \varphi > < 1 \varphi | e^{i \left[\frac{\vec{p}_1^2}{2m} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right] t / \hbar} \quad (8.49)$$

On voit sur (8.49) que $\rho_1(t)$ diffère de l'état pur obtenu à partir de $| 1 \varphi >$ par évolution dans le potentiel extérieur

$$\int d^3 r_2 |\chi(\vec{r}_2)|^2 V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (8.50)$$

Pour l'évolution de 1, la charge 2 délocalisée dans l'état $\chi(\vec{r}_2)$ n'est pas équivalente à une distribution continue de charge. Pour

chaque position possible $\vec{r}_2$ de 2, il faut calculer l'opérateur densité ~~réduit~~ de 1, puis moyenner sur $\vec{r}_2$, ce qui conduit à un mélange statistique pour $\rho_1(t)$. C'est ce qu'exprime (8.49).

Réponse à la question (3) : exemple d'états quasiclassiques pour 2 particules interagissant par un potentiel en $1/r$

— On va se limiter à des états quasiclassiques circulaires l'interaction est attractive

$$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (8.51)$$

où $e^2 = \frac{|q_1 q_2|}{4\pi\epsilon_0}$ ou $e^2 = G m_1 m_2$ (8.52)

suivant qu'on considère des interactions électrostatiques ou gravitationnelles.

Pour simplifier, on suppose

$$m_2 \gg m_1 \quad (8.53)$$

mais on ne prend pas la limite $m_2 \rightarrow \infty$.

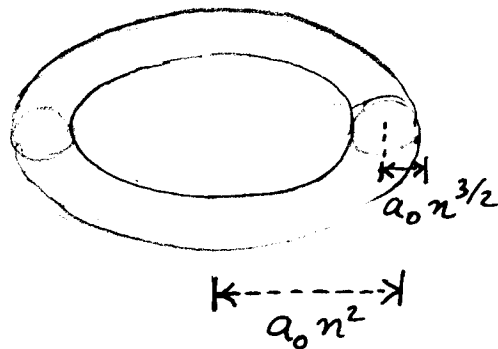
— la fonction d'onde d'un état circulaire $n, l=n-1$ est localisé sur un tore de rayon

$$D = n^2 a_0 \quad (8.54)$$

et dont la section est un cercle de rayon $n^{3/2} a_0$ (voir Fig) où

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_1 e^2} \quad (8.55)$$

est le rayon de Bohr associé au système.



— Superposons δn états circulaires $n, l=n-1, m=n-1$, n variant dans un intervalle δn autour de n_0

Si $\delta n = \sqrt{n_0}$, la variation du rayon $a_0 n^2$ du tore, de l'ordre de $a_0 n_0 \delta n \sim a_0 n_0^{3/2}$ n'est pas supérieure au rayon $a_0 n_0^{3/2}$ de la section du tore. Comme L_z et l'angle azimutal φ sont des variables conjuguées, à la dispersion $\hbar \delta n_0 = \hbar \sqrt{n_0}$ de L_z correspond une dispersion $\hbar / \hbar \sqrt{n_0} = 1/\sqrt{n_0}$ de φ et donc une extension du paquet d'ondes le long du tore égale à $a_0 n^2 \delta \varphi \sim a_0 n^{3/2}$. Finalement l'état quasiclassique formé par la superposition de $\sqrt{n_0}$ états circulaires a la même extension dans les 3 directions donné par $\sigma_1 = a_0 n^{3/2}$ (8.56)

Ce paquet d'ondes tourne à la fréquence angulaire

$$\omega_0 = \frac{e^2}{\hbar a_0 n_0^3} \quad (8.57)$$

- le paquet d'ondes de 2 a une largeur σ_2 telle que l'étalement de ce paquet d'ondes pendant $1/\omega_0$ soit négligeable devant σ_2

$$\frac{\hbar}{m_2 \sigma_2} \frac{1}{\omega_0} < \sigma_2 \quad (8.58)$$

ce qui donne, comme tenu de (8.55) et (8.57)

$$\sigma_2 > \sqrt{\frac{\hbar}{m_2 \omega_0}} = \sqrt{\frac{m_1}{m_2}} a_0 n^{3/2} \quad (8.59)$$

Nous prendrons $\sigma_2 \sim \sqrt{\frac{m_1}{m_2}} a_0 n^{3/2} \quad (8.60)$

- Reportons alors les expressions (8.56) et (8.60) de σ_1 et σ_2 dans (8.44). En utilisant $V_0'' = e^2/a_0^3 n_0^6$ puisque $V_0'' \approx e^2/D^3$ et $D = a_0 n^2$ on obtient

$$T \sim \frac{\hbar}{\frac{e^2}{a_0^3 n^6} a_0 n^{3/2} a_0 n^{3/2} \sqrt{\frac{m_1}{m_2}}} \sim \frac{1}{\omega_0} \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} \gg \frac{1}{\omega_0} \quad (8.61)$$

compte tenu de (8.53).

On voit ainsi qu'on peut construire des paquets d'ondes quasiclassiques qui peuvent tourner plusieurs fois l'un autour de l'autre avant que n'apparaissent des corrélations quantiques entre eux.

- Ordres de grandeur de σ_1 et σ_2 pour des états quasirciculaires de particules macroscopiques. D'après (8.55) et (8.56)

$$\frac{\sigma_1}{a_0} = \frac{a_0 n^{3/2}}{a_0 n^2} = \frac{1}{\sqrt{n}} = \left(\frac{a_0}{D}\right)^{1/4}, \text{ ce qui donne}$$

$$\sigma_1 = D \left(\frac{a_0}{D}\right)^{1/4} \quad (8.62)$$

Reprenons l'exemple du § 2d : $D = 10^{-2} \text{ m}$, $q_1 = -q_2 = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
 $m_1 = 10^{-9} \text{ Kg}$ (nous prendrons $m_2 = 100 m_1$).

Pour un électron (de masse $\sim 10^{-30} \text{ Kg}$), le rayon de Bohr est de l'ordre de $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$. Le rayon de Bohr pour le problème étudié ici vaut donc

$$a_0 = 10^{-10} \times \frac{10^{-30}}{10^{-9}} = 10^{-31} \text{ m}$$

de sorte que

$$\sigma_1 = 10^{-2} \left(\frac{10^{-31}}{10^{-2}}\right)^{1/4} \sim 6 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad \sigma_2 = \frac{1}{10} \sigma_1 = 6 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

Les états quasiclassiques de particules macroscopiques doivent donc avoir une longueur de cohérence initiale extraordinairement petite si l'on veut que leur interaction ne détruise pas ensuite cette cohérence spatiale.