

Université  
de Liège



Faculté des sciences  
Département de physique

# Dynamique quantique dissipative et application à la superradiance

François Damanet

Travail de fin d'études présenté  
dans le cadre de l'obtention du grade de  
**Maître en sciences physiques**

Année académique 2011–2012

# Remerciements

*Avant toute chose, je tiens à témoigner mes plus sincères remerciements à mon promoteur Monsieur J. Martin, dont la rigueur, la disponibilité permanente et l'encadrement exceptionnel apporté tout au long de l'année m'ont permis de réaliser ce mémoire dans les meilleures conditions.*

*Je tiens également à remercier MM. Thierry Bastin, Stéphane Dorbolo et Peter Schlagheck d'avoir accepté de constituer le comité de lecture de ce travail de fin d'études. Je leur souhaite une lecture aussi agréable que possible.*

*Merci encore à ma famille pour le soutien qu'elle m'apporte depuis toujours.*

*Enfin, à Justine, merci pour tout.*

# Table des matières

<b>Tables des matières</b>	<b>i</b>
<b>Liste des figures</b>	<b>iv</b>
<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 Opérateur densité</b>	<b>4</b>
1.1 Postulats de la physique quantique . . . . .	4
1.1.1 Espace des états . . . . .	4
1.1.2 Évolution temporelle . . . . .	5
1.1.3 Mesures . . . . .	5
1.1.4 Systèmes composites . . . . .	7
1.2 États purs et états mixtes . . . . .	7
1.2.1 Exemple d'un état pur . . . . .	8
1.2.2 Exemples d'états mixtes . . . . .	8
1.3 Opérateur densité . . . . .	10
1.3.1 Opérateur densité pour un état pur . . . . .	11
1.3.2 Opérateur densité pour un état mixte . . . . .	12
1.4 Reformulation des postulats de la physique quantique . . . . .	15
1.4.1 Retour sur les exemples d'états mixtes . . . . .	17
1.5 Systèmes composites et trace partielle . . . . .	17
1.6 Cohérence et opérateur densité . . . . .	19

<b>2</b>	<b>Équations maîtresses des systèmes quantiques dissipatifs</b>	<b>21</b>
2.1	Modélisation des systèmes quantiques dissipatifs . . . . .	21
2.2	Dérivation d'une équation maîtresse dans la limite du couplage faible . . . . .	23
2.2.1	Introduction . . . . .	23
2.2.2	Limite du couplage faible . . . . .	24
2.2.3	Approximation de Born . . . . .	25
2.2.4	Approximation de Markov . . . . .	25
2.2.5	Justification de l'approximation de Born-Markov . . . . .	27
2.2.6	Décomposition de Schmidt de l'hamiltonien d'interaction . . . . .	31
2.2.7	Fonction de corrélations de l'environnement . . . . .	34
2.2.8	Approximation séculaire . . . . .	36
2.2.9	Forme standard de l'équation maîtresse . . . . .	37
<b>3</b>	<b>Équation maîtresse en optique quantique</b>	<b>40</b>
3.1	Définition du système $S$ . . . . .	40
3.1.1	Cas d'un atome . . . . .	40
3.1.2	Cas d'un ensemble d'atomes . . . . .	42
3.2	Définition de l'environnement $B$ . . . . .	42
3.3	Hamiltonien d'interaction « atomes + champ » . . . . .	44
3.3.1	Opérateurs de saut quantique pour un atome . . . . .	45
3.3.2	Opérateurs de saut quantique pour un ensemble d'atomes . . . . .	46
3.4	Équation maîtresse markovienne en optique quantique . . . . .	47
3.4.1	Fonction de corrélations de l'environnement . . . . .	48
3.4.2	Tenseur de corrélations spectrales . . . . .	50
3.4.3	Hamiltonien de déplacement de Lamb, dissipateur et équation maîtresse . . . . .	51
3.4.4	Domaine de validité des approximations . . . . .	52
<b>4</b>	<b>Phénomène de superradiance</b>	<b>54</b>
4.1	Émission spontanée par un atome . . . . .	54
4.2	Dynamique dissipative d'un ensemble d'atomes . . . . .	58

---

4.2.1	Émission spontanée collective résultant du dissipateur et superradiance . . . .	58
4.2.2	Interactions dipolaires résultant de l'hamiltonien de déplacement de Lamb . .	63
4.2.3	Effets des interactions dipolaires sur le phénomène de superradiance . . . . .	68
<b>Conclusion</b>		<b>72</b>
<b>Annexes</b>		<b>74</b>
<b>A Schéma d'interaction</b>		<b>75</b>
<b>B Justification de l'hypothèse (2.14)</b>		<b>76</b>
<b>C Calcul de l'intégrale (3.38)</b>		<b>78</b>
<b>D Code Mathematica</b>		<b>80</b>
<b>Bibliographie</b>		<b>86</b>

# Liste des figures

2.1	Espaces d'Hilbert . . . . .	22
2.2	Granulation de l'échelle de temps . . . . .	30
3.1	Niveaux d'énergie d'un atome . . . . .	41
3.2	Niveaux d'énergie d'un système composé de deux atomes . . . . .	46
3.3	Système de coordonnées . . . . .	49
3.4	Fonctions de Bessel sphériques . . . . .	50
4.1	Décroissance de l'état excité d'un atome par émission spontanée . . . . .	57
4.2	Niveaux d'énergie des $N + 1$ états de la base symétrique . . . . .	60
4.3	Taux d'énergie rayonnée par un ensemble d'atomes dans le régime superradiant . . . . .	64
4.4	Configuration de trois atomes non-invariante par permutation . . . . .	66
4.5	Configuration de trois atomes invariante par permutation . . . . .	67
4.6	Configurations de deux distributions atomiques invariantes par permutation . . . . .	68
4.7	Distribution aléatoire de $N = 6$ atomes . . . . .	69
4.8	Taux d'énergie rayonnée par un ensemble d'atomes avec effets dipolaires dans le régime superradiant . . . . .	71

# Introduction

L'équation de Schrödinger a initialement été introduite dans le but de décrire des systèmes quantiques hamiltoniens, qui sont fermés et dont l'énergie est conservée. Cependant, en pratique, tous les systèmes sur lesquels nous effectuons des mesures sont en contact avec l'environnement (le champ électromagnétique ambiant par exemple). Ils peuvent dans ce cas échanger de l'énergie avec ce dernier et entrent dans la classe des systèmes dissipatifs dont l'évolution est le siège de processus irréversibles. Outre la dissipation d'énergie, qui apparaît déjà en mécanique classique, le couplage d'un système quantique avec son environnement est à l'origine du phénomène de *décohérence*, qui correspond à la destruction au cours du temps d'une *superposition cohérente d'états*. Ce phénomène est largement responsable de la transition du monde quantique au monde classique [1]. La notion de cohérence, qui est par exemple nécessaire à l'observation d'interférences dans l'expérience des fentes d'Young, apparaît comme un concept essentiel qu'il est nécessaire de préciser. Son origine prend sa source dans le principe de superposition, qui est sans conteste l'un des principes les plus importants de la physique quantique. Il stipule que si un système physique peut être préparé dans un état  $|a\rangle$  ou dans un état  $|b\rangle$ , alors le système peut également accéder aux états

$$|\psi\rangle = \alpha|a\rangle + \beta|b\rangle \quad \text{avec} \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \quad (1)$$

qui portent le nom de superpositions *cohérentes* d'états [2]. Le principe de superposition autorise un objet microscopique isolé comme un atome d'hydrogène à se trouver dans l'état  $|1s\rangle$ ,  $|2s\rangle$ , ou  $(|1s\rangle + |2s\rangle)/\sqrt{2}$ . De manière équivalente, un système est dit être dans une superposition cohérente d'états lorsque la phase relative entre chaque état de la superposition est connue [3].

Lorsqu'un objet microscopique est couplé à son environnement, la description physique de l'état de l'objet est beaucoup plus complexe. En effet, l'état du système total « objet + environnement » est de la forme

$$\sum_{i,j} c_{ij} |\psi_i^{\text{objet}}\rangle \otimes |\psi_j^{\text{envir.}}\rangle, \quad (2)$$

et il n'est en général pas possible d'associer un vecteur d'état unique à l'objet microscopique qui soit capable de rendre compte de toutes les propriétés physiques de celui-ci. L'objet microscopique constitue un système quantique dissipatif, ou système ouvert, dont la description requiert l'utilisation d'un nouvel outil, l'opérateur densité, auquel nous consacrons le premier chapitre de ce mémoire.

De plus, l'intrication est à l'origine de corrélations non-classiques entre l'objet et son environnement qui modifient les propriétés de cohérences de ce premier. L'état de l'objet microscopique subit au cours du temps le phénomène de *décohérence*. Ce phénomène omniprésent s'avère nuisible dans de nombreuses applications, dont le traitement quantique de l'information qui représente un des enjeux majeurs de notre époque. Dans ce domaine, la décohérence constitue en effet une source d'erreurs dans le fonctionnement d'algorithmes quantiques qui exploitent les superpositions d'états. L'étude

des sous-espaces insensibles à la décohérence (*Decoherence Free Subspaces* - DFS) apparaît dans ce contexte comme une voie de recherche prometteuse [4, 5].

La dynamique irréversible des systèmes quantiques dissipatifs est extrêmement bien décrite par une équation maîtresse quantique. Ce type d'équations régit l'évolution temporelle de l'opérateur densité d'un tel système et leur dérivation complète est le sujet du chapitre 2. Cette approche permet de décrire de manière très générale l'évolution et la relaxation d'un système dissipatif vers l'équilibre. Elle s'applique dans des contextes variés, comme en optique quantique où sont étudiés des phénomènes allant de l'émission spontanée d'un photon par un atome excité aux pertes de rayonnement électromagnétique au travers des miroirs d'une cavité optique. Un ensemble d'atomes en interaction avec le champ électromagnétique ambiant constitue un exemple type de système quantique dissipatif souvent rencontré en pratique, notamment dans le contexte de l'information quantique où les atomes servent de support à l'unité fondamentale d'information quantique (le qubit). Il est dès lors important de comprendre et de pouvoir prédire l'évolution des systèmes « atomes + champ », que nous abordons au chapitre 3. Nous nous focaliserons sur l'étude d'un phénomène collectif connu sous le nom de superradiance. Ce phénomène, prédit pour la première fois par R. Dicke [6], a lieu lorsque les atomes sont confinés dans une région de l'espace de dimension largement inférieure à la longueur d'onde de la transition atomique excitée. Il correspond à une émission collective de photons beaucoup plus rapide que l'émission spontanée ordinaire qui, elle, suit une loi exponentielle. La décroissance des populations des états excités du système atomique s'accélère suite à une mise en phase des dipôles atomiques et donne lieu à un pulse d'énergie rayonnée. La superradiance est toutefois altérée lorsque la distribution atomique n'est pas symétrique par permutation à cause des interactions dipolaires entre atomes [7, 8], dont nous étudions l'impact au dernier chapitre.

Ce travail de fin d'études constitue, d'une part, une synthèse originale de résultats concernant la dynamique des systèmes quantiques dissipatifs, en particulier dans le domaine de l'optique quantique, et, d'autre part, un travail de recherche concernant l'influence des interactions dipôle-dipôle sur le phénomène de superradiance. Les systèmes quantiques dissipatifs étant largement répandus car issus d'un concept très général, leur étude est un sujet de recherches particulièrement vaste et important. Nous détaillons ci-dessous le contenu de chacun des chapitres de ce travail.

Au premier chapitre, nous introduisons la notion d'opérateur densité qui permet de remédier au problème de la caractérisation des états d'un système physique couplé à son environnement. Nous démontrons ses principales propriétés et nous reformulons les postulats de la physique quantique en termes de celui-ci. Ce chapitre fournit tous les outils utiles à la description des systèmes quantiques ouverts.

Au second chapitre, nous modélisons en toute généralité l'évolution temporelle d'un système quantique en interaction avec un environnement. À cet égard, le système dissipatif est vu comme un sous-système d'un système hamiltonien plus grand englobant l'environnement. Nous dérivons intégralement le formalisme général des équations maîtresses pour l'opérateur densité [9–11], en attachant une attention particulière aux diverses hypothèses et approximations employées habituellement ainsi qu'à leur domaine de validité respectif. L'approximation de Born-Markov, donnant lieu à l'élimination des effets de mémoire, et l'approximation séculaire sont utilisées et discutées en détails.

Au troisième chapitre, nous partons de la forme la plus générale de l'équation maîtresse markovienne obtenue au chapitre précédent et l'explicitons au cas d'un ensemble d'atomes couplés au champ électromagnétique. Nous identifions dans ce but les atomes au système dissipatif et le champ électromagnétique ambiant à l'environnement. L'hamiltonien d'interaction est pris dans l'approximation dipolaire électrique et le champ électromagnétique est traité quantiquement et considéré

initialement dans l'état du vide.

Enfin, au quatrième chapitre, nous étudions la dynamique dissipative d'un ensemble d'atomes excités et couplés au champ électromagnétique ambiant sur base de l'équation maîtresse obtenue au chapitre 3. Nous discutons en détails le phénomène de superradiance [12] et examinons l'impact sur ce phénomène des interactions dipolaires entre atomes.

# Chapitre 1

## Opérateur densité

En physique quantique, l'état d'un système physique est généralement décrit par un vecteur ket, appelé *vecteur d'état*, appartenant à un espace d'Hilbert. Dans le cadre de l'étude des systèmes quantiques ouverts, il s'avère nécessaire d'introduire un nouvel outil pour caractériser leur état : l'opérateur densité ou opérateur statistique [13].

Dans ce chapitre, nous énonçons les postulats de la physique quantique de manière traditionnelle, c'est-à-dire en termes de fonctions d'onde. Ensuite, nous définissons les deux grands types d'états — états purs et états mixtes — qui caractérisent n'importe quel système physique et nous en donnons des exemples concrets. Nous verrons qu'un état mixte ne correspond pas à un vecteur d'état et que la formulation des postulats de la physique quantique que nous présentons initialement n'est pas adaptée pour le décrire. Nous introduisons alors l'opérateur densité pour remédier à ce problème et nous discutons ses principales propriétés. Enfin, nous énonçons les postulats de la physique quantique en termes d'opérateurs densité.

### 1.1 Postulats de la physique quantique

Dans cette section, nous énonçons les postulats de la physique quantique d'après [13, 14], qui constituent la base de la théorie quantique.

#### 1.1.1 Espace des états

Le premier postulat définit les objets mathématiques associés à tout système physique isolé.

**Postulat 1**

À tout système physique isolé est associé un espace d'Hilbert  $\mathcal{H}$  défini sur le corps des complexes appelé *espace des états*. À tout instant  $t$ , l'état du système physique est complètement déterminé par la donnée d'un vecteur normé  $|\psi(t)\rangle$  appelé *vecteur d'état* ou *fonction d'onde*, appartenant à l'espace des états.

### 1.1.2 Évolution temporelle

Les bases de la description d'un système physique étant posées, il faut établir comment un système physique isolé évolue au cours du temps.

**Postulat 2**

L'évolution temporelle d'un vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  d'un système physique isolé est décrite par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H|\psi(t)\rangle, \quad (1.1)$$

où  $\hbar$  est la constante de Planck et  $H$  l'opérateur hermitique hamiltonien du système. Puisque le système est isolé, l'hamiltonien  $H$  est indépendant du temps.

### Évolution en termes d'opérateur unitaire

Nous pouvons formuler le deuxième postulat d'une autre manière. En effet, soit  $|\psi(t_1)\rangle$  la fonction d'onde au temps initial  $t_1$  et  $|\psi(t_2)\rangle$  la fonction d'onde au temps final  $t_2$ . L'évolution du système est alors décrite par un opérateur unitaire  $U$  qui ne dépend que de l'intervalle de temps entre les instants initial et final  $t_1$  et  $t_2$

$$|\psi(t_2)\rangle = U(t_2 - t_1)|\psi(t_1)\rangle. \quad (1.2)$$

Notons que l'unitarité imposée à l'opérateur  $U(t_2 - t_1)$  traduit la conservation de la norme de la fonction d'onde. La connexion avec le point de vue hamiltonien se fait aisément : soit  $|\psi(t_1)\rangle$  l'état initial du système physique, la solution  $|\psi(t_2)\rangle$  de l'équation de Schrödinger est donnée par

$$|\psi(t_2)\rangle = e^{-iH(t_2-t_1)/\hbar}|\psi(t_1)\rangle. \quad (1.3)$$

Ainsi, nous en déduisons l'expression de  $U(t_2 - t_1)$

$$U(t_2 - t_1) = e^{-iH(t_2-t_1)/\hbar} \quad (1.4)$$

### 1.1.3 Mesures

Le deuxième postulat nous renseigne sur l'évolution au cours du temps d'un système physique isolé. Cependant, pour obtenir des informations sur un système physique, il faut interagir avec celui-ci en effectuant une mesure. Durant ce processus, un système n'est plus isolé et son évolution n'est plus nécessairement unitaire. Le troisième postulat fournit une description des effets d'une mesure sur un système physique.

**Postulat 3**

Toute opération de mesure sur un système physique est décrite par un ensemble d'opérateurs  $\{M_k\}$  appelés *opérateurs de mesures* agissant dans l'espace des états, où  $k$  désigne les résultats de mesures possibles. Les opérateurs de mesures satisfont la *relation de complétude*

$$\sum_k M_k^\dagger M_k = \mathbb{1} \quad (1.5)$$

où  $\mathbb{1}$  est l'opérateur identité.

Si  $|\psi\rangle$  est l'état du système juste avant la mesure, alors la probabilité d'obtenir le résultat de mesure  $m$  est donnée par

$$p(m) = \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle. \quad (1.6)$$

Si le résultat de mesure  $m$  est obtenu, alors l'état du système juste après la mesure est donné par

$$|\psi'\rangle = \frac{M_m |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle}}. \quad (1.7)$$

Notons que la relation de complétude exprime le fait que la somme des probabilités sur tous les résultats de mesures possibles vaut 1,

$$\sum_k p(k) = \sum_k \langle \psi | M_k^\dagger M_k | \psi \rangle = \langle \psi | \sum_k M_k^\dagger M_k | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1. \quad (1.8)$$

**Mesures projectives**

Le troisième postulat énoncé ici est très général car il décrit n'importe quel type de mesures. Cependant, il est souvent question dans la pratique d'un type de mesures particulier que sont les *mesures projectives*. En effet, dans la pratique, on s'intéresse à la mesure de grandeurs physiques représentées par des opérateurs hermitiques, appelés *observables*, agissant dans l'espace des états du système physique observé. Les opérateurs hermitiques ont la propriété de posséder une *décomposition spectrale*<sup>1</sup>

$$A = \sum_k a_k \mathcal{P}_k, \quad (1.9)$$

où  $\mathcal{P}_k$  est le *projecteur*<sup>2</sup> sur le sous-espace propre associé à la valeur propre  $a_k$ . Il est possible de particulariser le troisième postulat au cas des mesures projectives en imposant aux opérateurs de mesures  $M_k$  non seulement de satisfaire à la relation de complétude mais aussi d'être des projecteurs orthogonaux, c'est-à-dire des opérateurs hermitiques vérifiant  $M_k M_{k'} = M_k \delta_{k,k'}$ . Dans ce cas,  $M_k = \mathcal{P}_k$  et les opérateurs  $M_k$  correspondent aux projecteurs orthogonaux associés à une observable avec pour seuls résultats de mesures possibles les valeurs propres<sup>3</sup> de cette observable. C'est sous cette forme particulière qu'on trouve généralement le troisième postulat dans la littérature.

1. En réalité, tout opérateur *normal* possède une décomposition spectrale (un opérateur normal  $N$  est un opérateur qui commute avec son adjoint  $N^\dagger$ ). Un opérateur hermitique  $A$  est un opérateur normal qui vérifie  $A = A^\dagger$ .

2. Un projecteur  $\mathcal{P}_k$  est un opérateur linéaire, hermitique, et tel que  $\mathcal{P}_k^2 = \mathcal{P}_k$ .

3. Le caractère hermitique imposé aux observables assure le caractère réel des résultats de mesures. En effet, les opérateurs hermitiques ont des valeurs propres réelles de sorte que la mesure d'une grandeur physique, représentée par une observable, donne toujours un résultat à valeur réelle.

**Postulat 3'**

Toute opération de mesure d'une observable sur un système physique est décrite par un opérateur hermitique  $A$  agissant dans l'espace des états. L'observable  $A$  possède une décomposition spectrale

$$A = \sum_k a_k \mathcal{P}_k, \quad (1.10)$$

où  $\mathcal{P}_k$  est le *projecteur* sur le sous-espace propre associé à la valeur propre  $a_k$ . Les projecteurs satisfont la *relation de fermeture*

$$\sum_k \mathcal{P}_k = \mathbb{1}. \quad (1.11)$$

Si  $|\psi\rangle$  est l'état du système juste avant la mesure, alors la probabilité d'obtenir le résultat de mesure  $a_m$  est donnée par

$$p(a_m) = \langle \psi | \mathcal{P}_m | \psi \rangle. \quad (1.12)$$

Si le résultat de mesure  $a_m$  est obtenu, alors l'état du système juste après la mesure est donné par

$$|\psi'\rangle = \frac{\mathcal{P}_m |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \mathcal{P}_m | \psi \rangle}}. \quad (1.13)$$

**1.1.4 Systèmes composites**

Dans certains cas, il est intéressant de décrire l'état d'un système composé de plusieurs systèmes physiques distincts, appelé système composite, notamment dans le cadre de l'étude des systèmes ouverts qui sont constitués d'un système principal et d'un environnement. Le quatrième postulat décrit comment il convient de construire l'espace des états et le vecteur d'état du système composite à partir de ceux de ces composants.

**Postulat 4**

Soient  $\mathcal{H}_1, \dots, \mathcal{H}_N$ , les espaces des états de  $N$  systèmes physiques formant un système composite. L'espace des états  $\mathcal{H}$  du système composite est donné par l'espace produit tensoriel des espaces des états de ces composants

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N. \quad (1.14)$$

De plus, si les systèmes ont été préparés dans les états  $|\psi_i\rangle$  ( $i = 1, \dots, N$ ), alors l'état du système composite est donné par le vecteur produit tensoriel

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle \quad (1.15)$$

**1.2 États purs et états mixtes**

Des postulats de la physique quantique découle qu'il est possible de préparer un système physique donné dans un état décrit par un vecteur  $|\psi\rangle$  de l'espace d'Hilbert. La connaissance de  $|\psi\rangle$  permet

alors de calculer les probabilités de tous les résultats possibles d'une opération de mesure donnée et fournit une information complète sur l'état du système physique. De tels états sont appelés *états purs*. La lumière polarisée en est un exemple.

Il s'avère que dans de nombreux cas, nous ne disposons pas d'une connaissance complète de l'état du système physique : un certain flou le caractérise<sup>4</sup>. Ce manque d'information a pour conséquence qu'il n'est pas possible d'associer sans ambiguïté un unique vecteur d'état au système physique. Au mieux, nous disposons d'une distribution de probabilités qui permet de savoir avec quelle probabilité le système physique se trouve dans tel ou tel état. Nous avons affaire à un mélange statistique d'états. De tels états sont appelés *états mixtes*.

Les exemples suivants permettent de mieux appréhender la distinction entre états purs et états mixtes [2]. Nous donnerons une définition plus formelle de ces états lorsque nous introduirons l'opérateur densité.

### 1.2.1 Exemple d'un état pur

#### A. Lumière polarisée

Considérons un faisceau de lumière polarisée de vecteur d'onde  $\mathbf{k} = k\mathbf{e}_z$ , de sorte que la lumière se propage le long de l'axe  $z$  et que le vecteur polarisation appartienne au plan  $xy$ . Il est possible de caractériser l'ensemble des photons de ce faisceau lumineux par un état pur. En d'autres mots, il est possible de le décrire par un vecteur ket appartenant à un espace d'Hilbert. En effet, soit un espace d'Hilbert à deux dimensions et une base de cet espace formée par les deux états orthonormés  $|\epsilon_x\rangle$  et  $|\epsilon_y\rangle$  correspondant respectivement à des photons de polarisation linéaire selon  $x$  et selon  $y$ . Nous affirmons que le vecteur d'état de polarisation  $|\epsilon\rangle$  caractérisant le faisceau de lumière polarisée est nécessairement une combinaison linéaire de ces deux vecteurs

$$|\epsilon\rangle = c_1|\epsilon_x\rangle + c_2|\epsilon_y\rangle, \quad (1.16)$$

avec  $c_1$  et  $c_2$  des coefficients complexes tels que  $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ . En effet, il est possible de construire toutes les polarisations possibles de lumière grâce à cette description. Le cas du faisceau polarisé linéairement correspond à des coefficients  $c_1$  et  $c_2$  réels tandis qu'un faisceau polarisé elliptiquement correspond à des coefficients déphasés l'un par rapport à l'autre (d'un quart de période pour une polarisation circulaire). Ainsi, dans tous les cas, la lumière polarisée peut être représentée par un vecteur d'état.

### 1.2.2 Exemples d'états mixtes

#### B. Lumière non-polarisée

Considérons à présent le cas d'un faisceau de lumière naturelle, non-polarisée. Expérimentalement, si une lame à retard d'épaisseur quelconque, suivie d'un polariseur linéaire d'axe orienté de manière quelconque, sont placés dans la trajectoire de la lumière, 50% de celle-ci est transmise dans tous les

---

4. De manière plus précise, un tel système physique est un système pour lequel toutes les quantités physiques associées à un ECOG n'ont pas été mesurées.

cas de figure possibles. Est-il possible de caractériser cette lumière naturelle par un vecteur d'état  $|\epsilon\rangle$ ? La réponse est non. En effet,

- supposons  $|\epsilon\rangle = c_1|\epsilon_x\rangle + c_2|\epsilon_y\rangle$  avec  $c_1$  et  $c_2$  réels. Dans ce cas,  $|\epsilon\rangle$  correspond à une lumière polarisée linéairement selon la direction  $c_1\mathbf{e}_x + c_2\mathbf{e}_y$ . Un polariseur linéaire devant le faisceau de lumière laissera passer une lumière d'intensité variable selon l'orientation de l'axe du polariseur, ce qui n'est pas en accord avec l'expérience.
- supposons alors  $|\epsilon\rangle = c_1|\epsilon_x\rangle + c_2|\epsilon_y\rangle$  avec  $c_1$  et  $c_2$  complexes. Dans ce cas, une lame à retard d'épaisseur judicieusement choisie pour éliminer la différence de phase entre les coefficients  $c_1$  et  $c_2$  nous ramène au cas précédent : en plaçant un polariseur linéaire à la suite de la lame à retard, nous obtenons une lumière d'intensité variable selon l'orientation de l'axe du polariseur.

Ainsi, la lumière non-polarisée ne peut pas être décrite par un vecteur d'état puisqu'il n'est pas possible d'en associer un qui soit capable de prédire une intensité lumineuse identique pour chaque orientation d'un polariseur. La lumière non-polarisée ne correspond pas à un état pur.

### C. Faisceau d'atomes d'argent dans une expérience de Stern-Gerlach

Un autre exemple d'état impur correspond au cas d'un faisceau d'atomes de spin  $\frac{1}{2}$  orientés de manière quelconque, comme par exemple un faisceau d'atomes d'argent sortant d'un four utilisé dans une expérience de Stern-Gerlach. Supposons qu'il se propage dans la direction  $z$ . Pour effectuer une mesure de l'orientation des spins atomiques, nous pouvons utiliser un dispositif faisant office de « polariseur » appelé filtre de Stern-Gerlach. Un gradient de champ magnétique selon un axe  $w$ , appartenant au plan  $xy$ , permet de séparer le faisceau en deux parties dans le plan défini par l'axe  $w$  et la direction du faisceau atomique. Ensuite, un autre gradient de champ magnétique recombine les deux faisceaux. En plaçant un obstacle devant un des deux faisceaux avant la recombinaison, il est possible de filtrer une des orientations (« up »  $|\uparrow\rangle$  ou « down »  $|\downarrow\rangle$ ) de spin.

Expérimentalement, si un filtre de Stern-Gerlach bloquant les spins  $|\uparrow\rangle$  ou  $|\downarrow\rangle$  d'axe  $w$  est placé dans la trajectoire du faisceau d'atomes, 50% des atomes sont transmis quelque soit l'axe  $w$  choisi. Cela signifie que la valeur moyenne de l'opérateur de spin<sup>5</sup>  $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$  projeté sur une direction quelconque de l'espace définie par le vecteur unitaire est nulle, soit  $\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{u} \rangle = 0$ . Il n'est pas possible de trouver un vecteur d'état qui satisfasse à cette relation, car la forme la plus générale de l'état d'un spin  $1/2$ , à un facteur de phase globale près, est donnée par

$$|\psi_{\theta,\varphi}\rangle = e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2) |\uparrow_z\rangle + e^{i\varphi/2} \sin(\theta/2) |\downarrow_z\rangle, \quad (1.17)$$

et nous pouvons aisément vérifier que ce vecteur est état propre de  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{u}_{\theta,\varphi}$  de la valeur propre  $+\frac{\hbar}{2}$ , où  $\mathbf{u}_{\theta,\varphi}$  est le vecteur unitaire défini par les angles polaires  $\theta$  et  $\varphi$

$$\mathbf{u}_{\theta,\varphi} = (\cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi \sin \theta, \cos \theta). \quad (1.18)$$

En effet,

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{u}_{\theta,\varphi} |\psi_{\theta,\varphi}\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{+i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2) \\ e^{+i\varphi/2} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} |\psi_{\theta,\varphi}\rangle$$

5. Dans la base formée des deux états  $|\uparrow_z\rangle$  et  $|\downarrow_z\rangle$ , une représentation de l'opérateur de spin est donnée par les matrices de Pauli  $\sigma_i$  (avec  $i = x, y, z$ )

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i,$$

avec

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

et par conséquent, nous avons

$$\langle \psi_{\theta, \varphi} | \mathbf{S} \cdot \mathbf{u}_{\theta, \varphi} | \psi_{\theta, \varphi} \rangle = \frac{\hbar}{2}. \quad (1.19)$$

Ce calcul signifie qu'un spin  $1/2$  « pointe » toujours dans une direction, de la même manière qu'un faisceau de lumière polarisée possède des propriétés anisotropes dans le plan transverse à sa direction de propagation.

## D. États intriqués

Soient deux systèmes physiques auxquels sont associés les espaces d'Hilbert  $\mathcal{H}_A$  et  $\mathcal{H}_B$  de dimensions  $d_A$  et  $d_B$  et leur base respective  $\{|\phi_i^A\rangle\}$  et  $\{|\phi_j^B\rangle\}$ . Considérons qu'ils constituent un système composite ; dans ce cas, l'état le plus général de  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  s'écrit

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{d_A} \sum_{j=1}^{d_B} c_{ij} |\phi_i^A \otimes \phi_j^B\rangle. \quad (1.20)$$

Cet état ne se met en général pas sous la forme d'un produit tensoriel d'états, sauf si  $c_{ij}$  se factorise sous la forme  $a_i b_j$ . Ainsi, le vecteur d'état d'un système composite est en général intriqué, ce qui signifie qu'il est impossible de décrire l'un des sous-systèmes indépendamment de l'autre. Si nous nous intéressons ou que nous n'avons accès qu'au système  $A$ , en tant qu'observateur de  $A$ , nous ne pouvons réaliser de mesures que sur les seules observables de  $A$ . Or, pour avoir une connaissance complète de ce sous-système, il nous faudrait, d'après les postulats de la physique quantique, disposer d'un vecteur d'état décrivant  $A$ , ce qui est impossible étant donné que ce sous-système est intriqué avec le sous-système  $B$ .

En conclusion, l'état d'un sous-système d'un système composite dans un état intriqué constitue à nouveau un exemple d'état mixte. Il est impossible d'associer univoquement un vecteur d'état à l'un des sous-systèmes parce que nous ne disposons pas de suffisamment d'information : le sous-système est lié aux autres mais l'observateur n'a pas conscience de cette dépendance. L'observateur doit avoir accès à l'espace des états du système composite total pour disposer de toute l'information.

Les exemples abordés montrent qu'il est impossible de décrire tous les systèmes quantiques au moyen d'un vecteur d'état. Dans la section suivante, nous introduisons un outil étant à même de décrire l'état le plus général d'un système quantique, l'opérateur densité.

## 1.3 Opérateur densité

Afin de décrire l'état le plus général d'un système quantique, nous passons d'une description en termes de vecteur d'état à une description en termes d'*opérateur densité* ou *opérateur statistique* [2, 14]. Nous commençons par définir ce nouvel objet en adoptant une approche physique, en termes de mélange statistique d'un ensemble de vecteurs d'état. Nous démontrons ses principales propriétés dans le cas des états purs et des états mixtes et nous généralisons sa définition en se détachant de la notion de vecteur d'état.

### 1.3.1 Opérateur densité pour un état pur

Soit un système physique décrit à l'instant  $t$  par le vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$ . Nous définissons l'opérateur densité  $\rho(t)$  par

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|. \quad (1.21)$$

Nous écrirons  $\rho$  à la place de  $\rho(t)$  à chaque fois que l'instant  $t$  dont il est question importe peu. Dans le cas d'un état pur, l'opérateur densité correspond simplement au projecteur sur l'état  $|\psi\rangle$ .

#### Propriétés

De cette définition, nous déduisons les propriétés suivantes :

1.  $\rho$  est un opérateur hermitique :  $\rho^\dagger = \rho$ .

En effet :  $\rho^\dagger = (|\psi\rangle\langle\psi|)^\dagger = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho$ .

2.  $\rho$  est un opérateur positif<sup>6</sup> :  $\langle\phi|\rho|\phi\rangle \geq 0, \forall|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ .

En effet :  $\forall|\phi\rangle \in \mathcal{H}, \langle\phi|\rho|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = |\langle\phi|\psi\rangle|^2 \geq 0$ .

3.  $\text{tr}(\rho) = 1$ .

En effet : soit  $\{|\phi_i\rangle\}$  ( $i = 1, \dots, d$ ) une base orthonormée de  $\mathcal{H}$  de dimension  $d$  et  $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^d c_i |\phi_i\rangle$  la décomposition de  $|\psi\rangle$  dans cette base, avec  $\sum_{i=1}^d |c_i|^2 = 1$ . Nous avons

$$\text{tr}(\rho) = \sum_{i=1}^d \langle\phi_i|\rho|\phi_i\rangle = \sum_{i,j=1}^d c_j c_j^* \underbrace{\langle\phi_i|\phi_j\rangle}_{\delta_{ij}} \underbrace{\langle\phi_j|\phi_i\rangle}_{\delta_{ji}} = \sum_{i=1}^d |c_i|^2 = 1.$$

4.  $\text{tr}(\rho A) = \langle\psi|A|\psi\rangle = \langle A \rangle_\psi$  pour tout opérateur  $A$ .

En effet,

$$\text{tr}(\rho A) = \sum_{i=1}^d \langle\phi_i|\psi\rangle\langle\psi|A|\phi_i\rangle = \sum_{i=1}^d \langle\psi|A|\phi_i\rangle\langle\phi_i|\psi\rangle = \langle\psi|A \left( \underbrace{\sum_{i=1}^d |\phi_i\rangle\langle\phi_i|}_{\mathbb{1}} \right) |\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle. \quad (1.22)$$

où nous avons fait usage de la relation de fermeture  $\sum_{i=1}^d |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \mathbb{1}$ .

5.  $\text{tr}(\rho^2) = 1$ .

En effet, puisque  $\rho^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho$ , le résultat découle de 3.

La formulation de l'état d'un système physique en termes d'opérateur densité n'a pas réellement d'avantages dans le cas des états purs, mis à part qu'elle fait disparaître la phase globale  $e^{i\varphi}$  d'un vecteur d'état, qui n'a pas de signification physique.

---

6. Notons que la propriété 1 découle de la propriété 2 puisque tout opérateur positif est hermitique. En effet, décomposons  $\rho$  en ses parties hermitique  $B = (\rho + \rho^\dagger)/2$  et anti-hermitique  $C = (\rho - \rho^\dagger)/2$

$$\rho = B + C.$$

Nous avons,  $\forall|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ ,

$$\begin{aligned} \langle\phi|B\phi\rangle &= \langle B\phi|\phi\rangle^* = \langle\phi|B^\dagger\phi\rangle^* = \langle\phi|B\phi\rangle^*, \\ \langle\phi|C\phi\rangle &= \langle C\phi|\phi\rangle^* = \langle\phi|C^\dagger\phi\rangle^* = -\langle\phi|C\phi\rangle^*. \end{aligned}$$

ce qui montre que  $\langle\phi|B\phi\rangle$  et  $\langle\phi|C\phi\rangle$  sont respectivement des réel et imaginaire purs. Comme  $\rho$  est un opérateur positif,  $\langle\phi|\rho|\phi\rangle = \langle\phi|B\phi\rangle + \langle\phi|C\phi\rangle \geq 0, \forall|\phi\rangle \in \mathcal{H}$  et donc  $\langle\phi|C\phi\rangle = 0, \forall|\phi\rangle$ . Par conséquent,  $C = 0$  et  $\rho$  est hermitique.

### 1.3.2 Opérateur densité pour un état mixte

Comme nous l'avons vu dans la section 1.2, il est impossible d'associer sans ambiguïté un vecteur d'état unique à un état mixte, par manque d'information sur la préparation du système physique. Il est cependant possible de lui associer un opérateur densité si nous disposons d'une distribution de probabilité  $p_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ), donnant la probabilité de trouver le système physique dans un des  $n$  états purs  $|\psi_i\rangle$ . En effet, pour un tel état mixte, l'opérateur densité est défini comme une somme convexe de projecteurs  $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$  dont les états  $|\psi_i\rangle$  ne sont pas nécessairement orthogonaux deux à deux ( $\langle\psi_i|\psi_j\rangle \neq \delta_{ij}$ )

$$\rho = \sum_{i=1}^n p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad \text{avec} \quad \sum_{i=1}^n p_i = 1 \quad \text{et} \quad p_i \geq 0 \quad \forall i \quad (1.23)$$

Un état mixte apparaît donc comme un mélange statistique d'états purs. Notons qu'un état pur n'est qu'un cas particulier d'état mixte pour lequel il n'y a qu'une seule probabilité  $p_i$  non-nulle et égale à 1. Remarquons encore que le nombre de termes  $n$  de la représentation de  $\rho$  peut être différent de  $d$ , la dimension de l'espace d'Hilbert. Nous reviendrons sur ce point dans la suite.

#### Propriétés

Les propriétés 1 à 4 de l'opérateur densité d'un état pur sont toujours d'application dans le cas d'un état mixte. En effet, soit  $\rho = \sum_{i=1}^n p_i \rho_i$  avec  $\rho_i = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ ,  $\sum_{i=1}^n p_i = 1$  et  $p_i \geq 0$ . Défini de cette manière,  $\rho_i$  représente l'opérateur densité associé à l'état pur  $|\psi_i\rangle$ . Nous pouvons par conséquent appliquer les propriétés 1 à 4 de l'opérateur densité d'un état pur aux  $\rho_i$  et invoquer la linéarité de l'opération  $\dagger$ , du produit scalaire et de la trace. Par conséquent,

1.  $\rho$  est un opérateur hermitique :  $\rho^\dagger = \rho$ .
2.  $\rho$  est un opérateur positif :  $\langle\phi|\rho|\phi\rangle \geq 0$ ,  $\forall|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ .
3.  $\text{tr}(\rho) = 1$ .
4.  $\text{tr}(\rho A) = \sum_{i=1}^n p_i \langle\psi_i|A|\psi_i\rangle$  pour tout opérateur  $A$ .

Seule la cinquième propriété diffère par rapport au cas de l'opérateur densité d'un état pur.

5.  $0 \leq \text{tr}(\rho^2) \leq 1$ .

En effet : soit  $\{|i\rangle\}$  ( $i = 1, \dots, d$ ) une base orthonormée de  $\mathcal{H}$  de dimension  $d$  formée de vecteurs propres  $|i\rangle$  de  $\rho$  de valeurs propres respectives  $\lambda_i$ . Comme la trace est indépendante du choix de la base utilisée, nous avons le résultat annoncé si  $0 \leq \text{tr}(\rho^2) \leq 1$  dans cette base. Or,

$$\text{tr}(\rho^2) = \sum_{i=1}^d \langle i|\rho\rho|i\rangle = \sum_{i=1}^d \langle\lambda_i|\rho\lambda_i|i\rangle = \sum_{i=1}^d \lambda_i^2 \geq 0. \quad (1.24)$$

De plus,

$$\sum_{i=1}^d \lambda_i^2 \leq \sum_{i=1}^d \lambda_i = 1, \quad (1.25)$$

car les valeurs propres de  $\rho$  sont telles que  $\lambda_i \in [0, 1]$  puisque  $\rho$  est un opérateur positif de trace unité. Par conséquent,  $0 \leq \text{tr}(\rho^2) \leq 1$ .

Cette propriété est intéressante car elle permet de distinguer un état pur d'un état mixte et permet de « mesurer » le degré de mélange d'un état mixte au moyen de la *pureté*  $\text{tr}(\rho^2)$  [15].

Jusqu'à présent, nous avons introduit l'opérateur densité en l'interprétant comme une somme convexe de projecteurs sur des états purs  $|\psi_i\rangle$  avec pour poids les probabilités  $p_i$  de trouver le système dans ces états  $|\psi_i\rangle$ . Il est possible d'établir une caractérisation intrinsèque des opérateurs densité sans invoquer la notion de vecteur d'état. Le théorème suivant établit les propriétés que doit posséder un opérateur pour être qualifié d'opérateur densité.

### Caractérisation des opérateurs densité

Un opérateur  $\rho$  est un opérateur densité associé à un ensemble d'états purs  $\{|\psi_i\rangle\}$  et à un ensemble de probabilités  $\{p_i\}$  (i.e.  $\sum_{i=1}^n p_i = 1$  et  $p_i \geq 0 \forall i$ ), que nous notons  $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ , si et seulement si

- $\rho$  est un opérateur positif,
- $\text{tr}(\rho) = 1$ .

En effet, partons d'un opérateur densité  $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ . D'après les propriétés 1 et 2,  $\rho$  est un opérateur positif de trace unité. Supposons maintenant que  $\rho$  soit un opérateur positif de trace unité. Puisqu'il est positif, il est également hermitique et admet donc une décomposition spectrale

$$\rho = \sum_{i=1}^d \lambda_i |i\rangle\langle i| \quad (1.26)$$

où les vecteurs  $|i\rangle$  sont  $d$  vecteurs propres relatifs aux valeurs propres  $\lambda_i$ . Les vecteurs propres  $|i\rangle$  sont normés et ceux d'entre eux qui sont relatifs à des valeurs propres différentes sont orthogonaux deux à deux, car  $\rho$  est un opérateur hermitique. Notons cependant qu'il est toujours possible d'appliquer une transformation unitaire à  $\rho$  pour que tous ses vecteurs propres soient orthogonaux deux à deux. Comme  $\rho$  est un opérateur positif, nous avons

$$\lambda_i = \langle i|\rho|i\rangle \geq 0, \quad (1.27)$$

et ses valeurs propres sont positives ou nulles. Enfin, comme  $\rho$  est de trace unité,

$$\sum_{i=1}^d \lambda_i = 1, \quad (1.28)$$

et les valeurs propres  $\lambda_i$  de  $\rho$  peuvent être interprétées comme des probabilités. Au final, nous pouvons associer à un système physique l'opérateur densité

$$\rho = \sum_{i=1}^d \lambda_i |i\rangle\langle i| \quad \text{avec} \quad \sum_{i=1}^d \lambda_i = 1 \quad \text{et} \quad \lambda_i \geq 0 \quad \forall i. \quad (1.29)$$

caractérisé par l'ensemble  $\{\lambda_i, |i\rangle\}$ .

En conclusion, ce théorème établit que tout opérateur positif de trace unité est un opérateur densité. Dans la suite, nous utiliserons ce critère pour vérifier que certains opérateurs correspondent bien à des opérateurs densité.

La démonstration de ce théorème fait intervenir la décomposition spectrale de l'opérateur  $\rho$  et montre que celle-ci correspond à une représentation de  $\rho$  particulière où les états purs  $|\psi_i\rangle$  de (1.23) sont orthonormés. Autrement dit, les valeurs propres et les vecteurs propres de  $\rho$  sont clairement mis en évidence pour peu que les états purs soient judicieusement choisis. Cela montre également que la représentation de  $\rho$  n'est pas unique. La section suivante discute ce propos.

### Non-unicité de la représentation d'un opérateur densité

Si un opérateur densité est univoquement associé à un ensemble d'états  $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ , l'inverse n'est pas vrai. En effet, il est possible que deux ensembles d'états  $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$  et  $\{p'_i, |\psi'_i\rangle\}$  correspondent au même opérateur densité. C'est notamment le cas lorsque  $\rho$  possède une ou plusieurs valeurs propres dégénérées, comme en témoigne l'exemple suivant.

**États de Bell.** Considérons deux qubits<sup>7</sup> [14], auxquels sont associés les espaces d'Hilbert  $\mathcal{H}_1$  et  $\mathcal{H}_2$ , et formant un système composite dont l'état appartient à un espace d'Hilbert  $\mathcal{H}$  de dimension  $2 \times 2 = 4$ . Supposons que le système physique soit décrit par l'opérateur densité

$$\rho = \frac{1}{2}|0 \otimes 0\rangle\langle 0 \otimes 0| + \frac{1}{2}|1 \otimes 1\rangle\langle 1 \otimes 1| = \frac{1}{2}|00\rangle\langle 00| + \frac{1}{2}|11\rangle\langle 11|. \quad (1.30)$$

Dans la base de  $\mathcal{H}$  formée des vecteurs  $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ , l'opérateur  $\rho$  s'écrit

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (1.31)$$

Il en ressort directement qu'il est positif et de trace unité. D'après le théorème précédent,  $\rho$  est par conséquent un opérateur densité. Ses valeurs propres sont 0 et 1/2 (doublement dégénérées). Dans chacun des deux sous-espaces propres associés à ces valeurs propres, nous pouvons effectuer des combinaisons linéaires des vecteurs propres pour en former de nouveaux. De cette manière, nous pouvons générer les états suivants, appelés *états de Bell*

$$|\phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle) \quad (1.32)$$

$$|\psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle) \quad (1.33)$$

et récrire  $\rho$  sous la forme

$$\rho = \frac{1}{2}|\phi^+\rangle\langle\phi^+| + \frac{1}{2}|\phi^-\rangle\langle\phi^-|. \quad (1.34)$$

En effet, en utilisant (1.32), nous avons

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{2}|\phi^+\rangle\langle\phi^+| + \frac{1}{2}|\phi^-\rangle\langle\phi^-| \\ &= \frac{1}{4}(|00\rangle\langle 00| + |00\rangle\langle 11| + |11\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|) + \frac{1}{4}(|00\rangle\langle 00| - |00\rangle\langle 11| - |11\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|) \\ &= \frac{1}{2}|00\rangle\langle 00| + \frac{1}{2}|11\rangle\langle 11|, \end{aligned}$$

ce qui montre bien que la représentation de  $\rho$  n'est pas unique. En d'autres mots, il n'est pas possible de savoir si le système a été préparé avec une probabilité 1/2 dans l'état  $|00\rangle$  et une probabilité 1/2 dans l'état  $|11\rangle$  ou avec une probabilité 1/2 dans l'un des deux états de Bell  $|\phi^+\rangle$  et  $|\phi^-\rangle$ . On dit qu'il y a non-unicité de la préparation.

---

7. Un qubit est un système physique décrit par un vecteur d'état appartenant à un espace d'Hilbert de dimension 2. Les états d'un tel système sont généralement représentés dans une base des vecteurs  $|0\rangle$  et  $|1\rangle$ , par analogie aux états possibles d'un bit classique. Contrairement à celui-ci, le qubit n'est pas restreint aux états  $|0\rangle$  et  $|1\rangle$  mais peut se trouver dans toutes les superpositions possibles de ces deux états, à condition que le vecteur d'état soit de la forme  $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$  avec  $a, b \in \mathbb{C}$  et  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ .

## 1.4 Reformulation des postulats de la physique quantique

Nous pouvons désormais reformuler les postulats de la physique quantique en termes d'opérateur densité.

### Postulat 1

À tout système physique isolé est associé un espace d'Hilbert  $\mathcal{H}$  défini sur le corps des complexes, appelé *espace des états*. À tout instant  $t$ , l'état du système physique est complètement déterminé par la donnée d'un opérateur densité  $\rho(t)$  positif et de trace unité, agissant dans l'espace des états.

### Postulat 2

L'évolution temporelle de l'opérateur densité  $\rho(t)$  d'un système physique isolé est décrite par l'équation de Liouville-von Neumann

$$i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} = [H, \rho(t)] \quad (1.35)$$

où  $\hbar$  est la constante de Planck et  $H$  l'opérateur hermitique hamiltonien du système isolé.

En effet, l'équation de Liouville-von Neumann (1.35) découle de (1.1) puisque

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} &= i\hbar \frac{d}{dt} \left( \sum_{i=1}^n p_i |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)| \right) \\ &= i\hbar \sum_{i=1}^n p_i \frac{d|\psi_i(t)\rangle}{dt} \langle \psi_i(t)| + i\hbar \sum_{i=1}^n p_i |\psi_i(t)\rangle \frac{d\langle \psi_i(t)|}{dt} \\ &= H \sum_{i=1}^n p_i |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)| - \sum_{i=1}^n p_i |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)| H \\ &= [H, \rho(t)] \end{aligned}$$

**Postulat 3**

Toute opération de mesure sur un système physique est décrite par un ensemble d'opérateurs  $\{M_k\}$  appelés *opérateurs de mesures* agissant dans l'espace des états, où  $k$  désigne les résultats de mesures possibles. Les opérateurs de mesures satisfont à la *relation de complétude*

$$\sum_k M_k^\dagger M_k = \mathbb{1}. \quad (1.36)$$

Si  $\rho$  est l'état du système juste avant la mesure, la probabilité d'obtenir le résultat de mesure  $m$  est donnée par

$$p(m) = \text{tr}(\rho M_m^\dagger M_m). \quad (1.37)$$

Si le résultat de mesure  $m$  est obtenu, l'état du système juste après la mesure est donné par

$$\rho' = \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{\text{tr}(\rho M_m^\dagger M_m)}. \quad (1.38)$$

Dans ce postulat, l'équation (1.37) a été obtenue comme suit : si le système est initialement dans l'état  $|\psi_i\rangle$ , alors la probabilité d'obtenir le résultat de mesure  $m$  est donné par  $p(m|i) = \langle \psi_i | M_m^\dagger M_m | \psi_i \rangle = \text{tr}(|\psi_i\rangle\langle \psi_i | M_m^\dagger M_m)$  par application directe de la propriété 4 de l'opérateur densité (l'état du système est l'état pur  $\rho_i = |\psi_i\rangle\langle \psi_i|$ ). En utilisant la formule de statistique des probabilités totales, nous avons

$$p(m) = \sum_{i=1}^n p(m|i)p_i = \sum_{i=1}^n \text{tr}(|\psi_i\rangle\langle \psi_i | M_m^\dagger M_m) p_i = \text{tr}(\rho M_m^\dagger M_m), \quad (1.39)$$

par linéarité de la trace. L'équation (1.38) a quant à elle été obtenue en considérant que, si le résultat de mesure  $m$  est obtenu, alors l'état du système juste après la mesure est donné par (1.7), dont nous rappelons la forme ci-dessous

$$|\psi_i^m\rangle = \frac{M_m |\psi_i\rangle}{\sqrt{\langle \psi_i | M_m^\dagger M_m | \psi_i \rangle}}. \quad (1.40)$$

L'opérateur densité correspondant est

$$\rho_m = \sum_{i=1}^n p(i|m) |\psi_i^m\rangle\langle \psi_i^m| = \sum_{i=1}^n p(i|m) \frac{M_m |\psi_i\rangle\langle \psi_i | M_m^\dagger}{\langle \psi_i | M_m^\dagger M_m | \psi_i \rangle} = \frac{M_m (\sum_{i=1}^n p_i |\psi_i\rangle\langle \psi_i |) M_m^\dagger}{p(m)} \quad (1.41)$$

où nous avons utilisé la formule de Bayes  $p(i|m) = p(m|i)p(i)/p(m)$  et  $p(m|i) = \langle \psi_i | M_m^\dagger M_m | \psi_i \rangle$ . Au vu de la définition de l'opérateur densité (1.23), nous obtenons donc l'équation (1.38).

**Postulat 4**

Soient  $\mathcal{H}_1, \dots, \mathcal{H}_N$ , les espaces des états de  $N$  systèmes physiques formant un système composite. L'espace des états  $\mathcal{H}$  du système composite est donné par l'espace produit tensoriel des espaces des états de ses composants

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N \quad (1.42)$$

De plus, si les systèmes ont été préparés dans les états  $\rho_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ), alors l'état du système composite est donné par l'opérateur densité

$$\rho = \rho_1 \otimes \dots \otimes \rho_N \quad (1.43)$$

### 1.4.1 Retour sur les exemples d'états mixtes

Les postulats de la physique quantique ayant été reformulés en termes d'opérateur densité, nous pouvons désormais revenir sur les exemples d'états mixtes examinés précédemment dans la section 1.2.2, à savoir le faisceau de lumière non polarisée et le faisceau d'atomes d'argent sortant d'un four. La description de l'état d'un sous-système issu d'un système composite se trouvant a priori dans un état intriqué (1.20) fait l'objet de la section suivante.

L'opérateur densité proportionnel à l'identité,

$$\rho_{\text{id}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (1.44)$$

permet de décrire les deux situations envisagées. Dans le cas du faisceau d'atomes d'argent, en utilisant la propriété 4 de l'opérateur densité d'un état mixte, la valeur moyenne de  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{u}$  est donnée, pour tout  $\mathbf{u}$ , par

$$\text{tr}(\rho_{\text{id}} \mathbf{S} \cdot \mathbf{u}) = \frac{1}{2} \text{tr} \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} = 0. \quad (1.45)$$

Les sous-systèmes issus d'un système composite peuvent être décrits à l'aide de la *trace partielle* que nous définissons dans la section suivante.

## 1.5 Systèmes composites et trace partielle

Une des applications majeures de l'opérateur densité réside dans la description de sous-systèmes issus d'un système composite. L'exemple D (voir section 1.2.2) a en effet mis en évidence les limitations de la formulation en termes de vecteurs d'état de la physique quantique. L'opérateur densité et l'opération de *trace partielle* sur celui-ci offre une solution élégante à ce problème.

Soient deux systèmes physiques dont  $\mathcal{H}_A$  et  $\mathcal{H}_B$  sont les espaces d'Hilbert associés, de dimensions  $d_A$  et  $d_B$  et de bases  $\{|\phi_i^A\rangle\}$  et  $\{|\phi_j^B\rangle\}$  ( $i = 1, \dots, d_A$  et  $j = 1, \dots, d_B$ ). Ces deux systèmes mis ensemble forment un système composite dont l'état est décrit par l'opérateur densité  $\rho$  agissant dans l'espace des états  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  de dimension  $d = d_A \times d_B$ .

L'opérateur densité du sous-système  $A$ , appelé opérateur densité *réduit*, est donné en fonction de l'opérateur densité du système total par

$$\rho_A = \text{tr}_B(\rho) \quad (1.46)$$

où  $\text{tr}_B$  représente l'opération de *trace partielle sur le système B*, définie pour tout opérateur  $O$  agissant sur  $\mathcal{H}$  et pour toute base orthonormée  $\{|\phi_j^B\rangle\}$  de  $\mathcal{H}_B$  par

$$\text{tr}_B(O) = \sum_{j=1}^{d_B} \langle \phi_j^B | O | \phi_j^B \rangle = O_A, \quad (1.47)$$

avec  $O_A$  un opérateur agissant sur  $\mathcal{H}_A$ . On vérifie aisément que l'opérateur  $\rho_A$  est bel et bien un opérateur densité car

– il est de trace unité,

En effet,  $\text{tr}_A(\rho_A) = \text{tr}_A(\text{tr}_B(\rho)) = \text{tr}(\rho) = 1$  ;

– et il est positif.

En effet :  $\langle \psi_A | \rho_A | \psi_A \rangle = \langle \psi_A | \text{tr}_B(\rho) | \psi_A \rangle = \sum_{j=1}^{d_B} \langle \psi_A \otimes \phi_j^B | \rho | \psi_A \otimes \phi_j^B \rangle \geq 0, \forall |\psi_A\rangle \in \mathcal{H}_A$ .

Cependant, nous pouvons légitimement nous demander pourquoi l'opérateur densité du sous-système  $A$  doit nécessairement être obtenu comme la trace partielle de l'opérateur densité du système total. En réalité, il s'agit de l'unique opération donnant une description adéquate des quantités observables d'un sous-système physique issu d'un système composite. En d'autres mots, la seule opération  $f$ , s'appliquant sur les opérateurs densité  $\rho$  agissant sur  $\mathcal{H}$  vers les opérateurs densité  $\rho_A$  agissant sur  $\mathcal{H}_A$ , qui décrit correctement les observables d'un sous-système est  $f(\rho) = \text{tr}_B(\rho)$ . Nous entendons par là que pour tout observable  $M_A$  de  $A$  et un dispositif pour la mesurer, l'observable  $M$  de  $A + B$  correspondant aux mêmes mesures mais réalisées sur  $A + B$  doit être donnée par

$$M = M_A \otimes \mathbb{1}_B. \quad (1.48)$$

Partant de ce fait, nous devons obtenir les mêmes statistiques de mesures selon que  $M$  soit mesuré sur  $A + B$  dans l'état  $\rho$  ou que  $M_A$  le soit sur  $A$  dans l'état  $\rho_A = f(\rho)$ . En particulier, les valeurs moyennes des observables  $M$  et  $M_A$  doivent être identiques,

$$\text{tr}_A(M_A \rho_A) = \text{tr}(M \rho) \quad \text{ou encore} \quad \text{tr}_A(M_A f(\rho)) = \text{tr}((M_A \otimes \mathbb{1}_B) \rho). \quad (1.49)$$

Nous allons à présent démontrer que  $f(\rho) = \text{tr}_B(\rho)$ . Dans ce but, introduisons *l'espace de Liouville*.

**Espace de Liouville.** À tout espace d'Hilbert  $\mathcal{H}$ , nous associons l'espace d'Hilbert-Schmidt comme l'espace des opérateurs  $O$  agissant sur  $\mathcal{H}$  tel que  $\text{tr}(O^\dagger O)$  soit fini. En définissant sur cet espace le produit scalaire entre deux opérateurs  $O$  et  $P$  par

$$(O, P) = \text{tr}(O^\dagger P), \quad (1.50)$$

l'espace des opérateurs d'Hilbert-Schmidt devient un espace d'Hilbert, appelé *espace de Liouville*. Considérons une base orthonormée d'opérateurs  $\{A_i\}$  de cet espace. La relation d'orthogonalité entre les  $A_i$  et la décomposition d'un opérateur  $O$  quelconque de norme finie<sup>8</sup> agissant sur  $\mathcal{H}$  sont données par

$$(A_i, A_j) = \delta_{ij} \quad (1.51)$$

$$O = \sum_{i=1}^{d_A^2} (A_i, O) A_i \quad (1.52)$$

Supposons que le sous-système  $A$  issu du système composite soit associé à un espace de Liouville, avec comme base orthonormée un ensemble d'opérateurs hermitiques  $\{A_i\}$  agissant sur  $\mathcal{H}_A$ . Il s'ensuit que  $f(\rho)$  et  $\text{tr}_B(\rho)$  se décomposent dans la base des  $\{A_i\}$  selon (1.52) comme

$$f(\rho) = \sum_{i=1}^{d_A^2} (A_i, f(\rho)) A_i = \sum_{i=1}^{d_A^2} \text{tr}_A(A_i f(\rho)) A_i \quad (1.53)$$

$$\text{tr}_B(\rho) = \sum_{i=1}^{d_A^2} (A_i, \text{tr}_B(\rho)) A_i = \sum_{i=1}^{d_A^2} \text{tr}_A(A_i \text{tr}_B(\rho)) A_i \quad (1.54)$$

---

8. pour lequel  $\text{tr}(O^\dagger O)$  est fini.

En imposant la relation (1.49) sur la décomposition (1.53) de  $f(\rho)$ , nous obtenons

$$f(\rho) = \sum_{i=1}^{d_A^2} \text{tr}((A_i \otimes \mathbb{1}_B)\rho) A_i = \sum_{i=1}^{d_A^2} \text{tr}_A(\text{tr}_B((A_i \otimes \mathbb{1}_B)\rho)) A_i = \sum_{i=1}^{d_A^2} \text{tr}_A(A_i \text{tr}_B(\rho)) A_i, \quad (1.55)$$

où nous avons utilisé le fait que  $\text{tr}(\cdot) = \text{tr}_A(\text{tr}_B(\cdot))$  et que la trace partielle sur  $B$  n'a aucune influence sur les opérateurs  $A_i$  qui n'agissent que dans  $\mathcal{H}_A$ . Nous constatons alors que la décomposition (1.55) de  $f(\rho)$  est identique à la décomposition (1.54) de la trace partielle sur  $B$  de  $\rho$ . Comme la décomposition est unique,  $f(\rho) = \text{tr}_B(\rho)$ . En conclusion, la fonction  $f(\rho)$  est nécessairement donnée par la trace partielle de  $\rho$  sur le sous-système  $B$ .

## 1.6 Cohérence et opérateur densité

Pour terminer ce chapitre, introduisons de manière plus précise la notion de cohérence discutée dans l'introduction de ce mémoire dans le contexte des opérateurs densité.

La cohérence a été définie comme la connaissance des phases relatives entre les différentes composantes d'une superposition d'états [3], telle que

$$|\psi\rangle = \frac{\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (1.56)$$

La connaissance des phases relatives est équivalente à la connaissance des coefficients  $\alpha$  et  $\beta$  de cette superposition. Lorsqu'un système est incohérent,  $\alpha$  et  $\beta$  sont inconnus de sorte qu'il est impossible d'associer un vecteur d'état unique au système, évoquant de ce fait la notion d'état mixte. Soit l'état

$$|\psi\rangle = \frac{|a\rangle + e^{i\varphi}|b\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (1.57)$$

où  $\varphi$  représente la phase relative entre les deux états  $|a\rangle$  et  $|b\rangle$  de la superposition quantique. L'opérateur densité  $\rho$  correspondant est donné par

$$\rho = \frac{1}{2} (|a\rangle + e^{i\varphi}|b\rangle)(\langle a| + e^{-i\varphi}\langle b|), \quad (1.58)$$

et a pour représentation matricielle

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 1 \end{pmatrix} \quad (1.59)$$

dans la base formée par  $|a\rangle$  et  $|b\rangle$ . Considérons à présent que la phase relative  $\varphi$  entre les états  $|a\rangle$  et  $|b\rangle$  soit totalement inconnue. Il convient alors de moyennner  $\varphi$  en pondérant uniformément toutes les valeurs possibles, de sorte que

$$\rho = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 1 \end{pmatrix} d\varphi = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (1.60)$$

Nous constatons que les éléments non-diagonaux de l'opérateur densité deviennent nuls. Il s'agit d'une constatation générale : les états totalement incohérents sont caractérisés par un opérateur densité dont les éléments non-diagonaux sont nuls. Notons que les exemples d'états mixtes B et

C rentrent dans cette catégorie (voir équation (1.44)). Les éléments non-diagonaux de l'opérateur densité sont appelés *cohérences* pour cette raison, et ses éléments diagonaux sont appelés *populations*. Nous verrons dans la suite et en particulier dans le chapitre 4 que le phénomène de décohérence due au couplage d'un système avec son environnement correspond à la décroissance des cohérences au cours du temps.

## Chapitre 2

# Équations maîtresses des systèmes quantiques dissipatifs

En physique quantique, l'évolution temporelle d'un système physique isolé est connue dès lors que son hamiltonien et son état initial sont connus. Par contre, les postulats de la physique quantique ne disent rien quant à l'évolution d'un système physique non-isolé, en interaction avec l'environnement. De tels systèmes, appelés systèmes quantiques ouverts ou dissipatifs, sont pourtant très courants : un atome en interaction avec le champ électromagnétique ambiant en est un exemple.

Dans la première section de ce chapitre, nous modélisons les systèmes quantiques dissipatifs. Ensuite, dans la section suivante (section 2.2), nous dérivons intégralement une équation maîtresse markovienne décrivant l'évolution de leur état au cours du temps. Au cours de la dérivation, nous réalisons les approximations couramment rencontrées dans la littérature, à savoir l'approximation de Born (section 2.2.3), l'approximation de Markov (section 2.2.4) et l'approximation séculaire (section 2.2.8). Nous justifions en détail les deux premières approximations dans la section 2.2.5.

### 2.1 Modélisation des systèmes quantiques dissipatifs

L'idée générale pour décrire un système quantique dissipatif  $S$  est de considérer celui-ci comme faisant partie d'un système plus grand mais isolé, qui contient  $S$  et l'environnement  $B$  avec lequel il interagit. Supposons que le système dissipatif soit décrit à l'instant initial  $t_0$  par un opérateur densité  $\rho_S(t_0)$  agissant sur un espace d'Hilbert  $\mathcal{H}_S$  de dimension  $d_S$ . Le système physique  $S$  est en interaction avec un environnement<sup>1</sup>  $B$  décrit à l'instant initial par un opérateur densité  $\rho_B(t_0)$  agissant sur un espace d'Hilbert  $\mathcal{H}_B$  de dimension  $d_B$ , pouvant être très grande, voire infinie. L'ensemble, formé du système  $S$  et de son environnement  $B$ , constitue un système composite, décrit à l'instant initial par un opérateur densité  $\rho(t_0)$  agissant sur l'espace d'Hilbert produit tensoriel  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$  de dimension  $d = d_S \times d_B$ . La figure 2.1 représente schématiquement les espaces du système et de son environnement.

---

1. La notation  $B$  adoptée fait référence à un « bain ». D'autres notations sont couramment utilisées dans la littérature, comme  $E$  pour environnement ou  $R$  pour réservoir. En effet, dans la suite, nous identifions l'environnement au champ électromagnétique quantifié qui constitue un bain thermique.

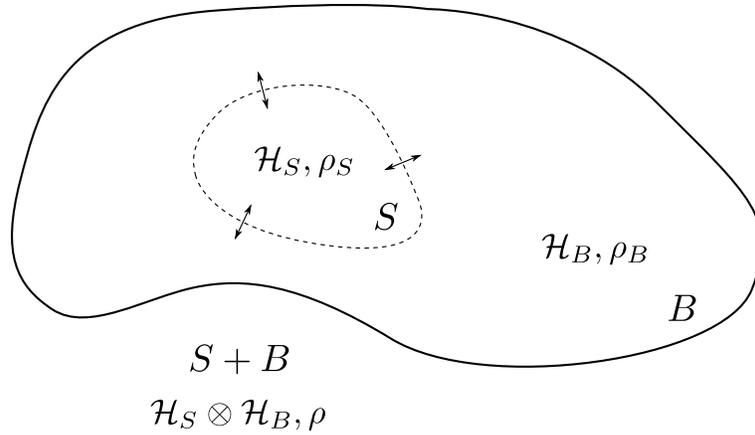


FIGURE 2.1 – Représentation des espaces d’Hilbert du système  $S$ , de son environnement  $B$  et de l’ensemble  $S + B$ . Le système  $S$  est en interaction avec l’environnement  $B$ .

Notons que l’état du système composite au temps  $t$  peut toujours s’écrire sous la forme

$$\rho(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_B(t) + \rho_{\text{corr}}(t) \quad (2.1)$$

mettant en évidence les corrélations qui apparaissent suite à l’interaction du système avec son environnement. Le système composite étant isolé, nous pouvons connaître son état à tout temps  $t$  :

– soit à partir de l’opérateur d’évolution unitaire  $U(t - t_0)$

$$\rho(t_0) \rightarrow \rho(t) = U(t - t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t - t_0) \quad (2.2)$$

– soit à partir de l’équation d’évolution de Liouville-von Neumann (1.35)

$$i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} = [H, \rho(t)], \quad (2.3)$$

où  $H$  est l’hamiltonien du système composite,

$$H = H_S \otimes \mathbb{1}_B + \mathbb{1}_S \otimes H_B + H_{\text{int}}, \quad (2.4)$$

avec  $H_S$ ,  $H_B$  et  $H_{\text{int}}$  respectivement les hamiltoniens du système libre, de l’environnement et de l’interaction entre ces deux parties. Les opérateurs  $\mathbb{1}_S$  et  $\mathbb{1}_B$  sont les opérateurs identités sur les espaces d’Hilbert  $\mathcal{H}_S$  et  $\mathcal{H}_B$ .

Connaissant l’évolution temporelle du système total, nous pouvons déterminer l’évolution du système quantique dissipatif  $S$ . En effet, il s’avère couramment que nous sommes intéressé uniquement par l’évolution du sous-système  $S$  et que l’étude de l’évolution du sous-système  $B$  n’est pas pertinente. Dans la pratique, le sous-système  $B$  possède un très grand nombre de degrés de liberté et est généralement difficilement accessible par mesures. Nous n’avons souvent ni d’influence ni de contrôle sur ce sous-système [11].

## 2.2 Dérivation d'une équation maîtresse dans la limite du couplage faible

### 2.2.1 Introduction

Une *équation maîtresse* est une équation d'évolution pour l'opérateur densité réduit  $\rho_S(t)$  d'un système  $S$  qui interagit avec un autre système  $B$ , généralement beaucoup plus grand [16]. La dérivation d'une équation maîtresse pour  $\rho_S(t)$  se divise en deux étapes :

1. En premier lieu, il convient d'extraire l'évolution de  $\rho_S(t)$  de l'équation d'évolution du système total (2.3). D'après (1.46), l'état du système  $S$  au temps  $t$  est donné par

$$\rho_S(t) = \text{tr}_B(\rho(t)). \quad (2.5)$$

Ainsi, en effectuant la trace partielle de l'équation (2.3), nous obtenons l'équation d'évolution

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \text{tr}_B([H, \rho(t)]). \quad (2.6)$$

Le membre de droite de (2.6) fait encore intervenir l'opérateur densité  $\rho(t)$  du système composite, alors que le but est d'obtenir une équation pour l'opérateur densité réduit  $\rho_S(t)$  du système uniquement. Il existe différentes approches pour parvenir à ce résultat.

2. En deuxième lieu, il s'agit de s'assurer que l'équation maîtresse obtenue préserve les propriétés des opérateurs densité — à savoir la positivité et la norme — pour tout temps  $t$ . Dans le cas contraire, l'équation ne peut être valable.

Il existe essentiellement deux approches pour atteindre le but fixé : une basée sur des considérations mathématiques et une autre reposant sur une théorie physique microscopique. Ces deux approches sont complémentaires.

La première approche, mathématique, est extrêmement importante d'un point de vue fondamental car elle donne les conditions formelles que doit remplir toute équation maîtresse, obtenue à partir de l'évolution de l'opérateur densité du système composite total (2.3), pour préserver les propriétés requises de l'opérateur densité. Cependant, cette approche ne donne aucune information physique ; c'est pourquoi nous ne la présenterons pas directement dans ce mémoire. Nous retiendrons seulement un résultat de première importance : il a été démontré [17] qu'une équation d'évolution pour l'opérateur densité réduit  $\rho_S(t)$  est une équation maîtresse valable si et seulement si elle peut se mettre sous la forme dite *standard*

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [H_S + H_{LS}, \rho_S(t)] + \sum_{i,j=1}^{d_S^2-1} a_{ij} \left( F_i \rho_S(t) F_j^\dagger - \frac{1}{2} \{ F_j^\dagger F_i, \rho_S(t) \} \right). \quad (2.7)$$

Le premier terme décrit l'évolution unitaire du système  $S$ . L'opérateur  $H_{LS}$  est un opérateur hermitique qui, nous le verrons, commute avec  $H_S$  de sorte qu'il constitue une constante du mouvement. Le second terme, appelé *dissipateur*, décrit son évolution irréversible. Dans ce dissipateur,  $\{ \cdot, \cdot \}$  désigne l'anti-commutateur, et les opérateurs  $F_i$ , en nombre  $d_S^2 - 1$ , forment avec l'opérateur identité une base de l'espace de Liouville (introduit au chapitre 1) des opérateurs densités sur  $\mathcal{H}_S$ . Enfin, les coefficients  $a_{ij}$  définissent une matrice positive. L'utilité de ce résultat paraîtra plus clair dans la suite.

La deuxième approche, physique, utilise des approximations qui s'accompagnent de leur domaine de validité. Elle est donc spécifique au problème considéré. En pratique, nous considérons couramment une situation physique pour laquelle la nature de l'interaction est connue. Le but est d'obtenir une équation maîtresse pour  $\rho_S(t)$ , à partir de l'évolution de l'opérateur densité du système composite total (2.3), et sur base de la connaissance de cette interaction. Pour cette raison, cette deuxième approche est parfois qualifiée de *microscopique* (voir référence [11] page 125, par exemple). Bien qu'étant physique et donc plus proche de ce que nous recherchons, cette approche est moins formelle et rigoureuse que l'approche mathématique. En effet, même s'il est possible d'aboutir à une équation d'évolution pour  $\rho_S(t)$ , il est nettement plus difficile de montrer que l'équation obtenue préserve les propriétés requises de l'opérateur densité réduit. Néanmoins, grâce aux résultats de la première approche, nous savons que si nous parvenons à dériver une équation d'évolution pour  $\rho_S(t)$  de la forme standard (2.7) sur base d'arguments microscopiques, elle préservera automatiquement les propriétés requises de l'opérateur densité et constituera une équation maîtresse. Ceci met en exergue la complémentarité des deux approches.

### 2.2.2 Limite du couplage faible

Dans cette section, nous étudions en détail la dérivation d'une équation maîtresse pour  $\rho_S(t)$  sur base d'arguments microscopiques, en nous basant sur les travaux [11, 16, 18, 19]. Nous considérons un couplage faible entre l'environnement et le système, à la base de certaines approximations simplificatrices, comme cela a été réalisé pour la première fois par Davies [9, 10].

Il est commode dans la suite de travailler en schéma d'interaction que nous rappelons dans l'annexe A. L'opérateur densité du système composite en schéma d'interaction  $\rho_I(t)$  s'obtient à partir de l'opérateur densité du système composite  $\rho(t)$  exprimé en schéma de Schrödinger par

$$\rho_I(t) = e^{iH_0t/\hbar} \rho(t) e^{-iH_0t/\hbar}, \quad (2.8)$$

où  $H_0 = H_S \otimes \mathbb{1}_B + \mathbb{1}_S \otimes H_B$  est l'hamiltonien libre. De la même manière, l'opérateur hamiltonien d'interaction  $H_{\text{int}}$  se transforme en

$$H_{\text{int},I}(t) = e^{iH_0t/\hbar} H_{\text{int}} e^{-iH_0t/\hbar}. \quad (2.9)$$

Ainsi, l'équation (2.3) s'écrit, en schéma d'interaction,

$$i\hbar \frac{d\rho_I(t)}{dt} = [H_{\text{int},I}(t), \rho_I(t)]. \quad (2.10)$$

Ceci montre que l'opérateur densité du système composite ne dépend plus temporellement que de l'hamiltonien d'interaction  $H_{\text{int},I}(t)$ . En intégrant formellement cette équation, nous obtenons

$$\rho_I(t) = \rho_I(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t [H_{\text{int},I}(t'), \rho_I(t')] dt'. \quad (2.11)$$

Nous effectuons ensuite un développement en série qui consiste à insérer l'équation (2.11) dans (2.10) de manière itérative. Après une itération et en prenant la trace partielle sur l'environnement de chacun des deux membres, nous obtenons une équation exacte pour  $\rho_{S,I}(t)$  du deuxième ordre en l'hamiltonien d'interaction

$$\frac{d\rho_{S,I}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \text{tr}_B ([H_{\text{int},I}(t), \rho_I(0)]) - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t \text{tr}_B ([H_{\text{int},I}(t), [H_{\text{int},I}(t'), \rho_I(t')]]) dt'. \quad (2.12)$$

Les approximations de Born et de Markov qui suivent vont permettre de simplifier cette équation intégral-différentielle non-locale dans le temps. Dans le but d'alléger les notations des opérateurs densité, nous omettons dorénavant les indices  $I$  désignant le schéma d'interaction.

### 2.2.3 Approximation de Born

La première approximation consiste à considérer que

- le système  $S$  interagit très peu avec l'environnement  $B$  de sorte que l'état de l'environnement  $\rho_B$  est très peu influencé par l'interaction. Notons que cela sous-entend que l'environnement doit posséder un très grand nombre de degrés de liberté, c'est-à-dire un espace d'Hilbert  $\mathcal{H}_B$  de très grande dimension  $d_B$ ,
- l'environnement est stationnaire<sup>2</sup>.

Cette approximation, que nous justifions par la suite, est connue sous le nom d'*approximation de Born*. Nous pouvons ainsi écrire, pour tout temps  $t$ , que l'état du système composite total se factorise sous la forme d'un produit tensoriel

$$\rho(t) \approx \rho_S(t) \otimes \rho_B \quad (2.13)$$

ce qui revient à négliger le terme de corrélation  $\rho_{\text{corr}}(t)$  dans (2.1). Notons d'ores et déjà que cela n'implique pas que l'environnement ne ressent pas l'influence du système  $S$  : sa modification ne sera en réalité pas perceptible sur l'évolution de  $S$ . Cependant, à ce stade de la dérivation de l'équation maîtresse, ce propos n'est pas encore justifié. C'est l'approximation suivante, l'approximation markovienne, qui en donnera le sens.

En outre, nous considérons que

$$\text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t), \rho_S(0) \otimes \rho_B]) = 0. \quad (2.14)$$

Il ne s'agit pas d'une approximation mais plutôt d'une simplification non-restrictive car il est toujours possible d'absorber des termes dans l'hamiltonien  $H_S$  afin d'annuler la valeur moyenne de l'hamiltonien d'interaction dans l'état de l'environnement. Ceci revient en réalité à déplacer les niveaux d'énergie de  $H_S$  d'une quantité dépendante de l'état de l'environnement  $\rho_B$ . Nous reviendrons sur ce point plus tard ainsi que dans l'annexe B qui contient la démonstration explicite. L'équation (2.12) devient dans l'approximation de Born (2.13) et tenant compte de (2.14)

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t \text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t), [H_{\text{int}}(t'), \rho_S(t') \otimes \rho_B]]) dt'. \quad (2.15)$$

### 2.2.4 Approximation de Markov

Nous effectuons à présent sans restriction le changement de variable  $t' \rightarrow t - t'$  dans l'équation (2.15) pour aboutir à

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t \text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t), [H_{\text{int}}(t - t'), \rho_S(t - t') \otimes \rho_B]]) dt'. \quad (2.16)$$

---

2. L'état de l'environnement est stationnaire si  $[H_B, \rho_B] = 0$ , auquel cas  $\rho_B$  ne dépend pas du temps et  $\rho_B(t) = \rho_B(0) \equiv \rho_B$ .

L'approximation de Markov consiste à éliminer tous les effets de mémoire de l'équation (2.16). C'est la limite du couplage faible qui justifie cette approximation. Pour le comprendre, récrivons l'hamiltonien d'interaction sous la forme

$$H_{\text{int}}(t) = \alpha V(t) \quad (2.17)$$

où  $V(t)$  contient la dépendance temporelle de l'interaction et  $\alpha$  donne l'intensité du couplage. Sous cette forme, nous pouvons discuter explicitement les implications de la limite du couplage faible dans l'équation (2.16), en particulier, l'élimination des effets de mémoire. L'équation (2.16) se réécrit en vertu de (2.17) sous la forme

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{\alpha^2}{\hbar^2} \int_0^t \text{tr}_B ([V(t), [V(t-t'), \rho_S(t-t') \otimes \rho_B]]) dt'. \quad (2.18)$$

Cette équation doit être valable en particulier dans la limite du couplage faible, lorsque  $\alpha$  tend vers zéro. Cependant, dans une telle limite, les variations de  $\rho_S(t)$  tendent également vers zéro, au vu de (2.18). En effectuant le changement de variable  $t'' = \alpha^2 t'$  dans l'intégrale, nous obtenons

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\alpha^2 t} \text{tr}_B ([V(t), [V(t-t''/\alpha^2), \rho_S(t-t''/\alpha^2) \otimes \rho_B]]) dt''. \quad (2.19)$$

Nous constatons alors que pour observer la dynamique du système, il est nécessaire d'étendre le domaine d'intégration jusque l'infini [18]. Le problème est que dans une telle situation, il faut s'assurer que l'intégrale ne diverge pas. Pour ce faire, il faut que l'intégrand disparaisse suffisamment vite pour  $t''$  plus grand qu'un certain temps caractéristique  $\tau_B$ , qui est défini de manière générale comme le temps typique nécessaire à l'environnement pour oublier l'information venant du système. En particulier, cela implique que les fonctions  $\text{tr}_B ([V(t), [V(t-t''), \rho_B]])$  ne doivent pas être périodiques, ce qui requiert que le nombre de degrés de liberté de l'environnement soit rigoureusement infini. Si ce n'était pas le cas, il existerait un temps de récurrence et l'intégrale ne serait pas finie. Nous verrons par la suite que  $\tau_B$  correspond au temps typique de décroissance de la *fonction de corrélations de l'environnement*, qui est contenue dans le terme  $\text{tr}_B ([V(t), [V(t-t''), \rho_S(t-t'') \otimes \rho_B]])$ . De plus, puisque  $\rho_S(t)$  varie très lentement dans la limite où  $\alpha$  tend vers zéro, nous pouvons le considérer comme étant approximativement constant pendant un laps de temps de largeur  $\tau_B$  autour de  $t'' = 0$ . Ainsi, en effectuant le changement de variable inverse afin de retrouver la variable  $t'$  et en tenant compte de la discussion précédente, nous obtenons

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{\alpha^2}{\hbar^2} \int_0^\infty \text{tr}_B ([V(t), [V(t-t'), \rho_S(t) \otimes \rho_B]]) dt'. \quad (2.20)$$

En conclusion, l'équation (2.20) est locale en temps car l'état du système au temps  $t$  ne dépend plus de ses valeurs à des temps antérieurs. L'équation maîtresse est alors qualifiée de *markovienne* car elle ne comporte plus d'effets de mémoire.

Les arguments quelque peu informels utilisés ici ont permis de montrer que l'élimination des effets de mémoire peut être vue en tant que conséquence de l'hypothèse d'un couplage faible. La démonstration rigoureuse a été obtenue par Davies [9, 10]. Finalement, n'ayant plus l'utilité de la décomposition (2.17) de  $H_{\text{int}}(t)$ , nous écrivons

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty \text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t), [H_{\text{int}}(t-t'), \rho_S(t) \otimes \rho_B]]) dt'. \quad (2.21)$$

Les approximations réalisées jusqu'à présent sont regroupées sous l'appellation d'*approximation de Born-Markov*. La section suivante fournit l'unique condition qui justifie cette approximation.

### 2.2.5 Justification de l'approximation de Born-Markov

Nous avons déjà introduit le temps typique  $\tau_B$  au bout duquel les corrélations dans l'environnement suite au couplage avec le système disparaissent. Dans le cas d'un environnement identifié à un gaz de particules,  $\tau_B$  est donné par le temps typique entre deux collisions [20]. Nous introduisons maintenant un autre temps typique  $\tau_R$  ( $R$  pour relaxation) défini comme le temps typique de relaxation du système due à l'interaction avec son environnement.

Supposons que la condition suivante soit satisfaite

$$\boxed{\tau_R \gg \tau_B} \quad (2.22)$$

En d'autres termes, nous imposons l'existence de deux échelles de temps : l'une, petite, caractérisant la décroissance des corrélations dans l'environnement, et l'autre, plus grande, définie par le temps typique de relaxation du système due à l'interaction. Ce temps typique  $\tau_R$  représente le temps moyen après lequel un processus d'interaction a une grande chance de se réaliser, tandis que le temps typique  $\tau_B$  représente la durée moyenne du processus [21]. Par exemple, pour un système et un environnement identifié respectivement à un atome et au champ électromagnétique, le processus d'interaction en question peut être une absorption ou une émission de photon. Nous affirmons que (2.22) est l'unique condition de l'approximation de Born-Markov.

Dans le but de le montrer, il est d'abord utile d'établir un lien entre  $\tau_R$  et l'intensité du couplage  $\alpha$  introduit en (2.17) [16]. En effet, l'application de l'inégalité temporelle d'Heisenberg<sup>3</sup> fournit directement

$$\alpha\tau_R \sim \hbar \quad \Leftrightarrow \quad \tau_R \sim \frac{\hbar}{\alpha} \quad (2.23)$$

La condition (2.22) se réécrit alors

$$\frac{\alpha\tau_B}{\hbar} \ll 1. \quad (2.24)$$

### Justification de l'approximation de Markov

Montrons à présent que la condition (2.22) justifie l'hypothèse de couplage faible [16,18]. Nous aurons ainsi la justification de l'approximation de Markov. Dans ce but, revenons sur le développement en

---

3. Soit l'hamiltonien  $H$  d'un système physique et  $A$  une observable quelconque indépendante du temps. Nous avons

$$\Delta A \Delta H \geq \frac{1}{2} |\langle [A, H] \rangle| \quad \text{et} \quad \frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle,$$

où  $\Delta A$  et  $\Delta H \equiv \Delta E$  sont les écarts quadratiques des opérateurs  $A$  et  $H$ . En définissant  $\Delta t$  comme étant le temps typique nécessaire pour que la valeur moyenne  $\langle A \rangle$  évolue de  $\Delta A$

$$\frac{1}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta A} \left| \frac{d\langle A \rangle}{dt} \right|,$$

nous obtenons l'inégalité d'Heisenberg temporelle

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}.$$

série de l'équation (2.10),

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t), \rho(0)]) + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t dt' \text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t), [H_{\text{int}}(t'), \rho(0)]]) \\ &\quad + \frac{1}{(i\hbar)^3} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t), [H_{\text{int}}(t'), [H_{\text{int}}(t''), \rho(t'')]]) \end{aligned} \quad (2.25)$$

Dans cette équation, chaque terme est d'un ordre plus élevé en l'hamiltonien d'interaction. L'approximation de Born-Markov consiste à se limiter au deuxième ordre en  $H_{\text{int}}$ , c'est-à-dire à tronquer le développement en série en remplaçant  $\rho(t')$  par  $\rho(t)$  dans le terme du deuxième ordre en  $H_{\text{int}}$ . De plus, nous avons considéré sans perte de généralité que le premier terme est nul (voir (2.14)) ce qui nous amène à

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t dt' \text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t), [H_{\text{int}}(t'), \rho(t)]]) , \quad (2.26)$$

que nous pouvons récrire sous la forme

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt' \text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t), [H_{\text{int}}(t-t'), \rho_S(t) \otimes \rho_B]]) dt' \quad (2.27)$$

Le membre de droite de (2.27) est du deuxième ordre en l'hamiltonien d'interaction et sera noté par la suite  $\left(\frac{d\rho_S(t)}{dt}\right)_2$ . D'après le développement précédent, ce terme donne la contribution principale à l'évolution de l'opérateur densité du système  $S$ . Ceci est évidemment valable à condition que les ordres suivants du développement en série soient d'un ordre de grandeur inférieur. Comparons dans ce but  $\left(\frac{d\rho_S(t)}{dt}\right)_2$  avec  $\left(\frac{d\rho_S(t)}{dt}\right)_3$ . L'ordre de grandeur de  $\left(\frac{d\rho_S(t)}{dt}\right)_2$  s'évalue en considérant

$$\text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t), [H_{\text{int}}(t-t'), \rho_S(t) \otimes \rho_B]]) \sim \alpha^2 \rho_S \text{tr}_B (\rho_B) = \alpha^2 \rho_S, \quad (2.28)$$

où  $\rho_S$  est l'ordre de grandeur de  $\rho_S(t)$ . Ensuite, puisque la contribution principale de l'intégrale dans (2.27) provient d'un intervalle de temps de longueur  $\tau_B$ , nous obtenons

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} \sim \frac{\tau_B \alpha^2 \rho_S}{\hbar^2}. \quad (2.29)$$

Par ailleurs, de par la définition même de  $\tau_R$ , nous devons avoir

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} \sim \frac{\rho_S}{\tau_R}, \quad (2.30)$$

ce qui montre que

$$\frac{1}{\tau_R} \sim \frac{\tau_B \alpha^2}{\hbar^2}. \quad (2.31)$$

Le terme du troisième ordre en l'hamiltonien d'interaction est quant à lui de l'ordre de

$$\left(\frac{d\rho_S(t)}{dt}\right)_3 \sim \frac{\tau_B^2 \alpha^3 \rho_S}{\hbar^3}, \quad (2.32)$$

et est proportionnel à  $\tau_B^2$  car la seconde variable de temps qui intervient dans la nouvelle intégrale du développement en série est majorée par celle de l'ordre précédent, de sorte qu'elle est typiquement de l'ordre de  $\tau_B$  également. En utilisant successivement (2.31) et (2.24), nous obtenons

$$\left(\frac{d\rho_S(t)}{dt}\right)_3 \sim \frac{\tau_B^2 \alpha^3 \rho_S}{\hbar^3} \sim \frac{\tau_B \alpha}{\hbar} \frac{\rho_S}{\tau_R} \ll \frac{\rho_S}{\tau_R} \sim \left(\frac{d\rho_S(t)}{dt}\right)_2 \sim \frac{d\rho_S(t)}{dt}, \quad (2.33)$$

ce qui montre sans ambiguïté que le troisième ordre est négligeable vis-à-vis du deuxième ordre, qui donne dès lors la contribution principale à l'évolution de  $\rho_S(t)$ . En conclusion, la condition (2.24) justifie pleinement le traitement perturbatif adopté et par conséquent l'hypothèse de couplage faible. Au vu des arguments utilisés précédemment, l'approximation de Markov est dès lors justifiée.

### Justification de l'approximation de Born

Il ne nous reste plus qu'à justifier l'approximation de Born, qui consiste à considérer que  $\rho_{\text{corr}}(t)$  dans (2.1) est négligeable (voir approximation de Born (2.13)) [16]. Montrons dans ce but que les termes issus de  $\rho_{\text{corr}}(t)$  sont négligeables vis-à-vis des termes issus de  $\rho_S(t) \otimes \rho_B$ . Intégrons tout d'abord l'équation (2.12) sur un intervalle de temps  $\Delta t = t - t_0 = t$  largement plus grand que  $\tau_B$ . Nous avons

$$\begin{aligned} \Delta \rho_S &= \rho_S(\Delta t) - \rho_S(0) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\Delta t} \text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t'), \rho(0)]) dt' - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{t'} \text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t'), [H_{\text{int}}(t''), \rho(t'')]]) dt''. \end{aligned}$$

Le terme du premier ordre en l'hamiltonien d'interaction s'écrit explicitement

$$-\frac{i}{\hbar} \int_0^{\Delta t} \text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t'), \rho_S(0) \otimes \rho_B]) dt' - \frac{i}{\hbar} \int_0^{\Delta t} \text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t'), \rho_{\text{corr}}(0)]) dt'. \quad (2.34)$$

La première contribution peut être annulée, comme annoncé précédemment (voir (2.14)). La seconde contribution contient la fonction de corrélations de l'environnement. Comme cette fonction s'amortit en un temps de l'ordre de  $\tau_B$  et que nous avons choisi un intervalle de temps  $\Delta t \gg \tau_B$ , les corrélations qui ont influencé l'état  $\rho$  en  $t = 0$  ne peuvent avoir d'influence sur l'état  $\rho_S$  en  $\Delta t$ . Autrement dit, les contributions que  $\rho_{\text{corr}}(0)$  apportent aux variations de  $\rho_S(t)$  sont négligeables. Par conséquent, le terme  $\frac{i}{\hbar} \int_0^{\Delta t} dt' \text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t'), \rho_{\text{corr}}(0)]) dt'$  peut être considéré comme insignifiant.

Considérons maintenant le terme du second ordre en l'hamiltonien d'interaction, qui s'écrit explicitement

$$\begin{aligned} &-\frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{t'} \text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t'), [H_{\text{int}}(t''), \rho_S(t'') \otimes \rho_B]]) dt'' \\ &-\frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{t'} \text{tr}_B ([H_{\text{int}}(t'), [H_{\text{int}}(t''), \rho_{\text{corr}}(t'')]]) dt''. \end{aligned}$$

La première contribution est de l'ordre de

$$\frac{\tau_B \alpha^2 \rho_S \Delta t}{\hbar^2}, \quad (2.35)$$

et la deuxième contribution est de l'ordre de

$$\frac{\tau_B^2 \alpha^2 \rho_S}{\hbar^2}, \quad (2.36)$$

pour les mêmes raisons que citées précédemment : la fonction de corrélations s'amortissant en un temps typique donné par  $\tau_B$ , les corrélations ne peuvent avoir d'influence sur  $\rho_S(t)$  que pendant l'intervalle de temps  $[\Delta t - \tau_B, \Delta t]$ , de largeur  $\tau_B$ . Comme  $\Delta t \gg \tau_B$ , nous avons bien le résultat annoncé stipulant que les termes contenant  $\rho_{\text{corr}}$  peuvent être négligés. L'approximation de Born-Markov est par conséquent pleinement justifiée.

## Échelle de temps granulée

Nous profitons des arguments utilisés dans cette section pour discuter une particularité de l'équation maîtresse markovienne (2.21), à savoir le fait qu'elle ne décrit pas l'évolution du système sur une échelle de temps complètement continue, mais sur une échelle de temps granulée (*coarse-grained time scale*) par pas de  $\Delta t \gg \tau_B$  [3, 11, 13, 16, 18]. La figure 2.2 illustre ce propos. En effet, l'équation

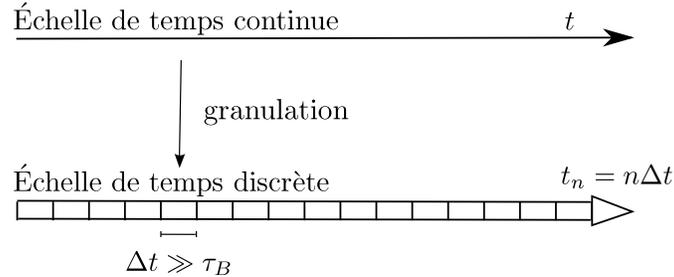


FIGURE 2.2 – Représentation des échelles de temps. La première, avant l'approximation de Markov, est continue. La deuxième, par contre, est discrète : le temps évolue par pas de  $\Delta t$  avec  $\tau_R \gg \Delta t \gg \tau_B$ .

maîtresse ne dit rien sur l'évolution du système pendant un temps de l'ordre de  $\tau_B$ . Les effets de mémoire sont ignorés car non-résolus<sup>4</sup>. En réalité, les fluctuations non-markoviennes, bien présentes sur un intervalle de temps de l'ordre de  $\tau_B$ , sont moyennées sur l'incrément de temps  $\Delta t$  et donnent des contributions nulles [11].

Il est possible de comprendre intuitivement la condition (2.22) d'applicabilité de l'approximation de Born-Markov sur base de l'hypothèse d'une échelle de temps granulée. En effet, l'approximation de Markov permet d'éliminer les effets de mémoire en discrétisant le temps par pas de  $\Delta t \gg \tau_B$ . Par conséquent, pour que l'équation (2.21) donne une équation différentielle valable, il faut que le temps typique d'évolution du système en interaction soit suffisamment grand par rapport à l'incrément de temps  $\Delta t$ , de sorte que l'échelle de temps paraisse continue, même après granulation. Autrement dit, le temps typique  $\tau_R$  nécessaire au système en interaction avec l'environnement pour évoluer significativement doit être bien plus grand que l'incrément de temps  $\Delta t$  :  $\tau_R \gg \Delta t$ . Or, puisque  $\Delta t \gg \tau_B$ , nous avons évidemment

$$\tau_R \gg \Delta t \gg \tau_B. \quad (2.37)$$

Par conséquent, si cette condition est satisfaite, l'échelle de temps  $t_n = n\Delta t$  sur laquelle est considérée l'évolution du système en interaction semble continue. Il n'est plus nécessaire de faire référence à l'incrément de temps  $\Delta t$  qui n'intervient plus au niveau des équations et nous retenons seulement

$$\boxed{\tau_R \gg \tau_B} \quad (2.38)$$

Nous retrouvons l'unique condition (2.22) d'applicabilité de l'approximation de Born-Markov.

Il s'avère que l'équation (2.21) ne garantit pas toujours la positivité de  $\rho_S$ . En d'autres termes, il n'est pas toujours possible de la mettre sous la forme standard (2.7) [22]. Pour remédier à ce problème, nous allons effectuer une dernière approximation : l'approximation séculaire. Néanmoins,

4. de la même manière qu'un appareil photo ne possédant pas suffisamment de pixels est incapable de voir certains détails.

avant cela, il est commode de récrire l'équation maîtresse sous une autre forme en introduisant la décomposition de l'hamiltonien d'interaction  $H_{\text{int}}$  sur la base des opérateurs propres de l'hamiltonien  $H_S$  du système dont nous préciserons la nature dans la suite. C'est la *décomposition de Schmidt* d'un opérateur, que nous démontrons ci-dessous.

## 2.2.6 Décomposition de Schmidt de l'hamiltonien d'interaction

La décomposition de Schmidt est une décomposition particulière d'un vecteur ket ou d'un opérateur agissant sur l'espace d'Hilbert d'un système composite qui possède un nombre de composantes réduit par rapport au nombre d'éléments a priori nécessaire [3, 23]. On rencontre couramment dans la littérature la décomposition de Schmidt d'un vecteur ket, tandis que celle d'un opérateur est rarement mentionnée. C'est pourquoi nous la présentons ci-dessous.

**Décomposition de Schmidt d'un opérateur.** Soient deux espaces d'Hilbert  $\mathcal{H}_A$  et  $\mathcal{H}_B$  de dimensions  $d_A$  et  $d_B$ . Nous avons vu au chapitre 1, section 1.5, que nous pouvions associer à un espace d'Hilbert  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  un espace de Liouville des opérateurs, de sorte que tout opérateur  $O$  agissant sur  $\mathcal{H}$  possède une décomposition (1.52) de la forme

$$O = \sum_{i=1}^{d_A^2} \sum_{j=1}^{d_B^2} (O_i^A \otimes O_j^B, O) O_i^A \otimes O_j^B = \sum_{i=1}^{d_A^2} \sum_{j=1}^{d_B^2} c_{ij} O_i^A \otimes O_j^B, \quad (2.39)$$

où les opérateurs  $O_i^A$  et  $O_j^B$  agissant respectivement sur  $\mathcal{H}_A$  et sur  $\mathcal{H}_B$  forment une base orthonormée au sens de (1.51) de leur espace respectif. Montrons qu'il est toujours possible d'écrire l'opérateur  $O$  sous la forme

$$O = \sum_{k=1}^{r(O)} \sqrt{p_k} A_k \otimes B_k, \quad (2.40)$$

où les nouveaux opérateurs  $A_k$  et  $B_k$  sont orthonormés et où  $\{p_k\}$  sont des probabilités (dont les racines sont appelées *coefficients de Schmidt*) vérifiant  $\sum_{k=1}^{r(O)} p_k = 1$  et  $p_k \geq 0 \forall k$ . Le *nombre de Schmidt*  $r(O)$  n'est autre que le rang de la matrice complexe  $C$  de dimension  $d_A^2 \times d_B^2$  définie par les  $c_{ij}$  et est donc au plus égal à  $\min\{d_A^2, d_B^2\}$ . Nous considérons dans la suite  $d_A < d_B$  sans pertes de généralités. La décomposition (2.40) porte le nom de *décomposition de Schmidt*.

En effet, il est toujours possible de diagonaliser la matrice  $C$  par deux matrices unitaires  $U$  et  $V$ . C'est la décomposition en valeurs singulières de  $C$  [24],

$$C = UDV \quad (2.41)$$

avec  $U$  et  $V$  des matrices unitaires de dimension  $d_A^2 \times r(O)$  et  $r(O) \times d_B^2$  et  $D$  une matrice diagonale de dimension  $r(O) \times r(O)$  dont les valeurs propres  $d_{kk}$  sont telles que  $d_{kk} \equiv \sqrt{p_k} \geq 0$ . L'opérateur  $O$  s'écrit donc au moyen de cette décomposition comme

$$O = \sum_{i=1}^{d_A^2} \sum_{j=1}^{d_B^2} \sum_{k=1}^{r(O)} u_{ik} v_{kj} \sqrt{p_k} O_i^A \otimes O_j^B = \sum_{k=1}^{r(O)} \sqrt{p_k} A_k \otimes B_k, \quad (2.42)$$

avec  $A_k = \sum_{i=1}^{d_A^2} u_{ik} O_i^A$  et  $B_k = \sum_{j=1}^{d_B^2} v_{kj} O_j^B$ , ce qui correspond exactement à la décomposition (2.40). Les

nouveaux opérateurs  $A_k$  sont bien orthonormés deux à deux puisque nous avons, au vu de (1.50),

$$(A_k, A_l) = \text{tr}_A (A_k^\dagger A_l) = \text{tr}_A \left( \sum_{i=1}^{d_A^2} (u_{ik} O_i^A)^\dagger \sum_{j=1}^{d_A^2} u_{jl} O_j^A \right) = \sum_{i,j=1}^{d_A^2} u_{ki}^* u_{jl} \underbrace{\text{tr}_A ((O_i^A)^\dagger O_j^A)}_{\delta_{ij}} = \delta_{kl}, \quad (2.43)$$

car les opérateurs  $O_i^A$  forment une base orthonormée de l'espace de Liouville de  $\mathcal{H}_A$  et que la matrice  $U$  est unitaire. Nous pouvons montrer de la même manière que les opérateurs  $B_k$  sont également orthogonaux.

**Décomposition de Schmidt d'un vecteur ket.** Soient deux systèmes physiques auxquels sont associés les espaces d'Hilbert  $\mathcal{H}_A$  et  $\mathcal{H}_B$  de dimensions  $d_A$  et  $d_B$  et leur base orthonormée respective  $\{|\phi_i^A\rangle\}$  et  $\{|\phi_j^B\rangle\}$ . Considérons qu'ils constituent un système composite. La décomposition de Schmidt est également d'application dans le cas des vecteurs kets. Nous savons déjà, d'après (1.20), qu'un état de  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  s'écrit

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{d_A} \sum_{j=1}^{d_B} c_{ij} |\phi_i^A\rangle \otimes |\phi_j^B\rangle, \quad (2.44)$$

Les coefficients  $c_{ij}$  ci-dessus ont exactement la même forme que ceux de la décomposition (2.39), de sorte que la démonstration réalisée dans le cas d'un opérateur peut être adaptée au cas d'un vecteur. Il est en effet possible d'effectuer une décomposition en valeurs singulières de la matrice complexe  $C$  de dimension  $d_A \times d_B$  de manière similaire au cas précédent et d'obtenir

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{r(\psi)} \sqrt{p_k} |v_k^A\rangle \otimes |v_k^B\rangle \quad (2.45)$$

avec  $\{|v_k^A\rangle\} \in \mathcal{H}_A$  et  $\{|v_k^B\rangle\} \in \mathcal{H}_B$  des vecteurs orthonormés,  $\{p_k\}$  des probabilités et  $r(\psi)$  le *nombre de Schmidt* qui est cette fois au plus égal à  $\min\{d_A, d_B\}$ .

La décomposition de Schmidt démontrée, appliquons-la à l'hamiltonien d'interaction en utilisant une base particulière formée par les opérateurs propres de  $H_S$ , définis ci-dessous [11]. Nous repassons par commodité en schéma de Schrödinger. L'hamiltonien d'interaction  $H_{\text{int}}$  agit dans l'espace d'Hilbert  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$ . Il peut par conséquent se décomposer de manière générale comme

$$H_{\text{int}} = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \otimes B_{\alpha} = \sum_{\alpha} A_{\alpha}^{\dagger} \otimes B_{\alpha}^{\dagger}, \quad (2.46)$$

avec  $A_{\alpha}$  et  $B_{\alpha}$  agissant respectivement sur  $\mathcal{H}_S$  et  $\mathcal{H}_B$ , que nous pouvons choisir hermitique, puisque l'hamiltonien doit l'être [16]. Cette décomposition correspond à une décomposition de Schmidt, donné en (2.40), de sorte que le nombre d'opérateurs  $A_{\alpha}$  et  $B_{\alpha}$  peut toujours être choisi au plus égal à  $d_S^2$ .

Supposons que le spectre de l'hamiltonien du système  $H_S$  soit discret. Dans la suite, ce sera toujours le cas et il n'est donc pas nécessaire de généraliser à des systèmes possédant un continuum de degrés de liberté. Soient  $E_n$  les valeurs propres de l'hamiltonien  $H_S$  et  $\mathcal{P}(E_n)$  les projecteurs sur les sous-espaces propres relatifs aux valeurs propres  $E_n$ , donnés par

$$\mathcal{P}(E_n) = \sum_{i=1}^{g(E_n)} |\phi_i^n\rangle \langle \phi_i^n|, \quad (2.47)$$

avec  $g(E_n)$  le degré de dégénérescence de la valeur propre  $E_n$  et  $|\phi_i^n\rangle$  les vecteurs propres associés à la valeur propre  $E_n$ , c'est-à-dire tels que

$$H_S |\phi_i^n\rangle = E_n |\phi_i^n\rangle. \quad (2.48)$$

En définissant les opérateurs

$$A_\alpha(\omega) = \sum_{E_n - E_m = \hbar\omega} \mathcal{P}(E_m) A_\alpha \mathcal{P}(E_n), \quad (2.49)$$

où  $\hbar\omega$  parcourt toutes les différences d'énergie possibles, nous avons

$$[H_S, A_\alpha(\omega)] = -\hbar\omega A_\alpha(\omega) \quad (2.50)$$

$$[H_S, A_\alpha^\dagger(\omega)] = +\hbar\omega A_\alpha^\dagger(\omega). \quad (2.51)$$

Les opérateurs  $A_\alpha(\omega)$  et  $A_\alpha^\dagger(\omega)$ , appartenant à l'espace de Liouville défini sur  $\mathcal{H}_S$ , sont appelés *opérateurs propres* du superopérateur<sup>5</sup>  $[H_S, \cdot]$  de valeurs propres respectives  $-\hbar\omega$  et  $\hbar\omega$ . Notons que puisque  $|\phi_i^n\rangle$  est un vecteur propre de valeur propre  $E_n$ , nous avons, d'après (2.50)

$$\begin{aligned} H_S A_\alpha(\omega) |\phi_i^n\rangle - A_\alpha(\omega) H_S |\phi_i^n\rangle &= -\hbar\omega A_\alpha(\omega) |\phi_i^n\rangle \\ \Leftrightarrow H_S A_\alpha(\omega) |\phi_i^n\rangle - E_n A_\alpha(\omega) |\phi_i^n\rangle &= -\hbar\omega A_\alpha(\omega) |\phi_i^n\rangle \\ \Leftrightarrow H_S A_\alpha(\omega) |\phi_i^n\rangle &= (E_n - \hbar\omega) A_\alpha(\omega) |\phi_i^n\rangle. \end{aligned}$$

$A_\alpha(\omega) |\phi_i^n\rangle$  est donc un vecteur propre de  $H_S$  de la valeur propre  $E_n - \hbar\omega$ . En d'autres mots, l'opérateur  $A_\alpha(\omega)$  est un opérateur d'annihilation qui enlève une énergie  $\hbar\omega$ . Nous pouvons montrer de la même manière que  $A_\alpha^\dagger(\omega)$  est un opérateur de création qui ajoute une énergie  $\hbar\omega$ .

Ces opérateurs possèdent quelques propriétés importantes pour la suite.

1.  $H_S$  commute avec  $A_\alpha^\dagger(\omega) A_\alpha(\omega)$ .

En effet,

$$\left[ H_S, A_\alpha^\dagger(\omega) A_\alpha(\omega) \right] = \left[ H_S, A_\alpha^\dagger(\omega) \right] A_\alpha(\omega) + A_\alpha^\dagger(\omega) \left[ H_S, A_\alpha(\omega) \right] = 0, \quad (2.52)$$

en vertu des relations de commutation (2.50) et (2.51).

2.  $A_\alpha^\dagger(\omega) = A_\alpha(-\omega)$

$$\begin{aligned} A_\alpha^\dagger(\omega) &= \left( \sum_{E_n - E_m = \hbar\omega} \mathcal{P}(E_m) A_\alpha \mathcal{P}(E_n) \right)^\dagger \\ &= \sum_{E_n - E_m = \hbar\omega} \mathcal{P}(E_n) A_\alpha \mathcal{P}(E_m) = A_\alpha(-\omega). \end{aligned}$$

3. Enfin, en sommant sur toutes les différences d'énergie et en utilisant la relation de complétude, nous obtenons

$$\sum_{\hbar\omega} A_\alpha(\omega) = \sum_{\hbar\omega} \left( \sum_{E_n - E_m = \hbar\omega} \mathcal{P}(E_m) A_\alpha \mathcal{P}(E_n) \right) = \sum_{E_n, E_m} \mathcal{P}(E_m) A_\alpha \mathcal{P}(E_n) = A_\alpha. \quad (2.53)$$

---

5. Un superopérateur est simplement une application ayant comme argument des opérateurs et qui rend des opérateurs.

Cette dernière propriété est particulièrement importante parce qu'elle permet d'écrire l'hamiltonien d'interaction sur la base des opérateurs propres de  $H_S$ , comme désiré. En effet, l'hamiltonien d'interaction en schéma de Schrödinger est alors donné par

$$\boxed{H_{\text{int}} = \sum_{\alpha, \hbar\omega} A_{\alpha}(\omega) \otimes B_{\alpha}} \quad (2.54)$$

À présent, nous repassons en schéma d'interaction afin d'insérer l'expression de l'hamiltonien d'interaction dans l'équation maîtresse (2.21). Il faut pour ce faire transférer la dépendance temporelle liée aux hamiltoniens libres du système et de l'environnement aux opérateurs propres  $A_{\alpha}(\omega)$  de  $H_S$  et aux opérateurs  $B_{\alpha}$  comme suit<sup>6</sup>

$$\begin{aligned} A_{\alpha}(t) &= e^{iH_S t/\hbar} A_{\alpha}(\omega) e^{-iH_S t/\hbar} = e^{-i\omega t} A_{\alpha}(\omega) \\ B_{\alpha}(t) &= e^{iH_B t/\hbar} B_{\alpha} e^{-iH_B t/\hbar} \end{aligned}$$

Nous avons dès lors

$$H_{\text{int}} \rightarrow e^{iH_0 t/\hbar} H_{\text{int}} e^{-iH_0 t/\hbar} = \sum_{\alpha, \hbar\omega} e^{-i\omega t} A_{\alpha}(\omega) \otimes B_{\alpha}(t), \quad (2.55)$$

et l'hamiltonien d'interaction en schéma d'interaction s'écrit

$$\boxed{H_{\text{int}}(t) = \sum_{\alpha, \hbar\omega} e^{-i\omega t} A_{\alpha}(\omega) \otimes B_{\alpha}(t)} \quad (2.56)$$

qui est exactement la forme recherchée de  $H_{\text{int}}$ , en schéma d'interaction.

Nous pouvons maintenant revenir sur la supposition (2.14), à savoir  $\text{tr}_B([H_{\text{int}}(t), \rho_S(0) \otimes \rho_B]) = 0$ . En effet, la décomposition (2.56) de l'hamiltonien d'interaction ci-dessus permet de développer plus en détails l'argument évoqué précédemment. Ce développement étant assez fastidieux, nous le reléguons dans l'annexe B.

## 2.2.7 Fonction de corrélations de l'environnement

La décomposition (2.56) de l'hamiltonien d'interaction en une somme de produits tensoriels entre les opérateurs  $A_{\alpha}(\omega)$  et  $B_{\alpha}(t)$  permet de faire apparaître dans l'équation maîtresse (2.21) la fonction

6. En effet, pour des opérateurs  $S$  et  $A$  quelconques, nous avons [25]

$$e^S A e^{-S} = \sum_n \frac{A^{(n)}}{n!},$$

avec

$$A^{(n)} = [S, A^{(n-1)}] \quad \text{et} \quad A^{(0)} = A.$$

En posant  $A = A_{\alpha}(\omega)$ ,  $S = iH_S t/\hbar$  et en vertu de (2.50), nous avons

$$A^{(n)} = \left(-\frac{i}{\hbar}\omega t\right)^n A_{\alpha}(\omega) \quad \text{et} \quad A^{(0)} = A_{\alpha}(\omega),$$

et par conséquent le résultat énoncé.

de corrélations de l'environnement dont nous avons défini le temps typique de décroissance  $\tau_B$ . Pour ce faire, nous développons les commutateurs de l'équation maîtresse (2.21), de sorte à obtenir

$$\begin{aligned}
& \frac{d\rho_S(t)}{dt} \\
&= -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt' \text{tr}_B \left( [H_{\text{int}}(t), [H_{\text{int}}(t-t'), \rho_S(t) \otimes \rho_B]] \right) \\
&= -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt' \text{tr}_B \left( H_{\text{int}}(t) H_{\text{int}}(t-t') \rho_S(t) \otimes \rho_B - H_{\text{int}}(t) \rho_S(t) \otimes \rho_B H_{\text{int}}(t-t') \right. \\
&\quad \left. - H_{\text{int}}(t-t') \rho_S(t) \otimes \rho_B H_{\text{int}}(t) + \rho_S(t) \otimes \rho_B H_{\text{int}}(t-t') H_{\text{int}}(t) \right) \\
&= \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt' \text{tr}_B \left( H_{\text{int}}(t-t') \rho_S(t) \otimes \rho_B H_{\text{int}}(t) - H_{\text{int}}(t) H_{\text{int}}(t-t') \rho_S(t) \otimes \rho_B \right) + \text{h.c.}
\end{aligned}$$

où h.c. désigne l'hermitique conjugué. Ensuite, en insérant l'expression (2.56) de l'hamiltonien d'interaction nous avons

$$\begin{aligned}
& \sum_{\hbar\omega, \hbar\omega'} \sum_{\alpha, \alpha'} \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt' \text{tr}_B \left( e^{-i\omega(t-t')} A_\alpha(\omega) \otimes B_\alpha(t-t') \rho_S(t) \otimes \rho_B e^{i\omega't} A_{\alpha'}^\dagger(\omega') \otimes B_{\alpha'}^\dagger(t) \right. \\
&\quad \left. - e^{i\omega t} A_\alpha^\dagger(\omega) \otimes B_\alpha^\dagger(t) e^{-i\omega'(t-t')} A_{\alpha'}(\omega') \otimes B_{\alpha'}(t-t') \rho_S(t) \otimes \rho_B \right) + \text{h.c.} \\
&= \sum_{\hbar\omega, \hbar\omega'} \sum_{\alpha, \alpha'} e^{-i(\omega'-\omega)t} \underbrace{\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt' e^{i\omega t'} \text{tr}_B \left( B_\alpha(t-t') \rho_B B_{\alpha'}^\dagger(t) \right)}_{\equiv \Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)} \\
&\quad \times \left( A_\alpha(\omega) \rho_S(t) A_{\alpha'}^\dagger(\omega') - A_\alpha^\dagger(\omega) A_{\alpha'}(\omega') \rho_S(t) \right) + \text{h.c.} \tag{2.57}
\end{aligned}$$

où  $\Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$  est la *tenseur de corrélations spectrales*

$$\Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) \equiv \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt' e^{i\omega t'} G_{\alpha\alpha'}(t, t-t') = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt' e^{i\omega t'} \text{tr}_B \left( B_{\alpha'}^\dagger(t) B_\alpha(t-t') \rho_B \right), \tag{2.58}$$

qui est à un facteur  $\hbar^2$  près la demi-transformée de Fourier de la *fonction de corrélations de l'environnement* à laquelle nous avons associé le temps typique de décroissance  $\tau_B$  et que nous définissons par

$$G_{\alpha\alpha'}(t, t-t') \equiv \text{tr}_B \left( B_{\alpha'}^\dagger(t) B_\alpha(t-t') \rho_B \right) = \langle B_{\alpha'}^\dagger(t) B_\alpha(t-t') \rangle_B, \tag{2.59}$$

où la dernière égalité a lieu au vu de la définition de la valeur moyenne d'un opérateur donnée dans la section 1.3.2. Il s'avère que cette fonction ne dépend que de la différence de ses arguments. En effet, en écrivant explicitement le schéma d'interaction, nous avons

$$\begin{aligned}
G_{\alpha\alpha'}(t_1, t_2) &= \langle B_\alpha^\dagger(t_1) B_{\alpha'}(t_2) \rangle_B \\
&= \text{tr}_B \left( e^{iH_B t_1/\hbar} B_\alpha^\dagger e^{-iH_B t_1/\hbar} e^{iH_B t_2/\hbar} B_{\alpha'} e^{-iH_B t_2/\hbar} \rho_B \right) \\
&= \text{tr}_B \left( e^{iH_B t_1/\hbar} B_\alpha^\dagger e^{-iH_B(t_1-t_2)/\hbar} B_{\alpha'} e^{-iH_B t_2/\hbar} \rho_B \right) \\
&= \text{tr}_B \left( e^{iH_B(t_1-t_2)/\hbar} B_\alpha^\dagger e^{-iH_B(t_1-t_2)/\hbar} B_{\alpha'} \rho_B \right) \\
&= \langle B_\alpha^\dagger(t_1-t_2) B_{\alpha'}(0) \rangle_B \\
&\equiv G_{\alpha\alpha'}(t_1-t_2), \tag{2.60}
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé le fait que  $\rho_B$  est un état stationnaire de l'environnement, c'est-à-dire  $[H_B, \rho_B] = 0$ , et le fait que la trace est cyclique. Nous avons donc  $G_{\alpha\alpha'}(t, t-t') = G_{\alpha\alpha'}(t')$ , ce qui montre que la fonction de corrélations de l'environnement intervenant dans la définition du tenseur de corrélations spectrales ne dépend que de l'intervalle de temps  $t'$ . Nous retiendrons donc la forme de la fonction de corrélations de l'environnement suivante

$$G_{\alpha\alpha'}(t) = \langle B_\alpha^\dagger(t) B_{\alpha'}(0) \rangle_B \quad (2.61)$$

Le tenseur de corrélations spectrales  $\Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$  peut dès lors s'écrire

$$\Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} e^{i\omega t'} G_{\alpha\alpha'}(t') dt' = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} e^{i\omega t'} \langle B_\alpha^\dagger(t') B_{\alpha'}(0) \rangle_B dt' \quad (2.62)$$

ce qui montre qu'il est également indépendant du temps  $t'$ .

La fonction de corrélations de l'environnement étant définie, nous pouvons définir plus précisément le temps caractéristique  $\tau_B$ , qui est le temps typique de décroissance de cette fonction. Puisque l'hamiltonien  $H_B$  et l'opérateur densité  $\rho_B$  commutent, il existe une base commune de vecteurs propres  $|z\rangle$ . En calculant la trace partielle intervenant dans la définition de la fonction de corrélations dans cette base et en utilisant la relation de complétude, nous avons

$$\begin{aligned} G_{\alpha\alpha'}(t') &= \text{tr}_B \left( e^{iH_B t'/\hbar} B_\alpha^\dagger e^{-iH_B t'/\hbar} B_{\alpha'} \rho_B \right) \\ &= \sum_{z, z'} \langle z | e^{iH_B t'/\hbar} B_\alpha^\dagger e^{-iH_B t'/\hbar} | z' \rangle \langle z' | B_{\alpha'} \rho_B | z \rangle \\ &= \sum_{z, z'} \langle z | e^{i\omega_z t'} B_\alpha^\dagger e^{-i\omega_{z'} t'} | z' \rangle \langle z' | B_{\alpha'} \lambda_B(z) | z \rangle \\ &= \sum_{z, z'} \lambda_B(z) e^{i(\omega_z - \omega_{z'}) t'} \langle z | B_\alpha^\dagger | z' \rangle \langle z' | B_{\alpha'} | z \rangle \end{aligned}$$

où  $\lambda_B(z)$  sont les valeurs propres de  $\rho_B$  de vecteurs propres  $|z\rangle$  et  $\omega_z$  sont les fréquences propres de l'hamiltonien  $H_B$  données par  $H_B |z\rangle = \hbar\omega_z |z\rangle$ . Nous voyons donc que la fonction de corrélations de l'environnement peut s'écrire sous la forme d'une superposition de fonctions qui oscillent à la fréquence  $\omega_z - \omega_{z'}$ . Puisque le réservoir est supposé très grand, les fréquences sont très peu espacées. Dans la limite où l'environnement est représenté par un espace d'Hilbert de dimension infinie, les fréquences forment un quasi-continuum. Lorsque le temps  $t'$  est suffisamment grand, les fonctions interfèrent destructivement et la fonction de corrélations tend vers zéro très rapidement. Le temps typique de décroissance est défini en considérant que pour  $t' > \tau_B$ , les corrélations peuvent être négligées.

## 2.2.8 Approximation séculaire

L'équation (2.57), comme nous l'avons déjà mentionné, ne garantit pas toujours la positivité de  $\rho_S$ . C'est la raison pour laquelle nous devons effectuer une autre approximation, appelée approximation séculaire ou de l'onde tournante (*rotating wave approximation* - RWA) et qui est valable dans

---

7. Il est possible que  $\Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$  soit également indépendant du temps en envisageant des états  $\rho_B$  non-stationnaires vis-à-vis de la dynamique de l'environnement. C'est le cas notamment si l'environnement représente un état du vide comprimé (*squeezed vacuum state*).

de nombreux cas, notamment en optique quantique. Cette approximation consiste à moyenner les oscillations rapides qui apparaissent dans l'équation maîtresse (2.57).

Nous allons simplifier l'équation (2.57) en utilisant cette approximation. Nous notons  $\tau_S$  le temps typique nécessaire au système libre, c'est-à-dire sans interaction avec l'environnement, pour évoluer de manière significative. Ce temps  $\tau_S$  est défini à partir de l'inverse des différences de fréquences propres  $|\omega - \omega'|$  données par les différences d'énergie entre les valeurs propres de l'hamiltonien  $H_S$ . En effet, si un processus est susceptible de faire passer l'état du système d'une énergie  $\hbar\omega$  à  $\hbar\omega'$  ou vice-versa lorsque le système est isolé, cela se fait nécessairement pendant un temps typique donné par  $\tau_S = |\omega - \omega'|^{-1}$ . Comme cette différence de fréquence intervient dans l'équation (2.57) dans le terme  $e^{i(\omega - \omega')t}$ , il est possible de comparer le temps  $\tau_S$  avec le temps  $t$ , ou plutôt le temps de relaxation typique  $\tau_R$  nécessaire au système en interaction avec l'environnement pour évoluer de manière significative. Lorsque  $\tau_S \ll \tau_R$ , l'exponentielle oscille très rapidement pendant un temps typique d'évolution  $\tau_R$  du système en interaction. L'approximation séculaire consiste à négliger les termes pour lesquels l'exponentielle oscille très rapidement, c'est-à-dire les termes<sup>8</sup> où  $\omega \neq \omega'$ , puisque lorsque  $\omega = \omega'$ , nous avons  $e^{i(\omega - \omega')t} = 1$ . En optique quantique, la condition  $\tau_S \ll \tau_R$  est presque toujours réalisée (voir chapitre 3) et l'approximation séculaire est d'application.

En résumé, la condition d'applicabilité de l'approximation séculaire est

$$\boxed{\tau_S \ll \tau_R} \quad (2.63)$$

Si cette condition est vérifiée, nous pouvons simplifier l'équation (2.57) et écrire

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \sum_{\hbar\omega, \alpha, \alpha'} \Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) \left( A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t) \right) + \text{h.c.}, \quad (2.64)$$

où la somme sur  $\hbar\omega'$  a disparue.

### 2.2.9 Forme standard de l'équation maîtresse

Il ne nous reste plus qu'à écrire l'équation (2.64) sous la forme standard (2.7) afin de vérifier que l'évolution de l'opérateur densité réduit  $\rho_S(t)$  conserve sa trace et sa positivité. En particulier, nous allons décomposer le membre de droite de l'équation maîtresse en deux termes : l'un comparable à un opérateur d'évolution hamiltonien et l'autre qui donne la partie dissipative de la dynamique. Dans ce but, nous décomposons le tenseur de corrélations spectrales  $\Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$ , qui est la demi-transformée de Fourier de la fonction de corrélations de l'environnement, comme suit

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) &= \frac{1}{2} \underbrace{\left( \Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) + \Gamma_{\alpha'\alpha}^*(\omega) \right)}_{\equiv \gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)} + i \underbrace{\left( \frac{1}{2i} (\Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) - \Gamma_{\alpha'\alpha}^*(\omega)) \right)}_{\equiv S_{\alpha\alpha'}(\omega)} \\ &= \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) + i S_{\alpha\alpha'}(\omega). \end{aligned} \quad (2.65)$$

De cette façon,  $\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$  est défini comme la transformée de Fourier de la fonction de corrélations de l'environnement

$$\boxed{\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t'} \langle B_{\alpha}^{\dagger}(t) B_{\alpha'}(t - t') \rangle_B dt'} \quad (2.66)$$

8. Ces termes sont dits *non-séculaires*.

tandis que la quantité  $S_{\alpha\alpha'}(\omega)$  est définie par

$$S_{\alpha\alpha'}(\omega) = \frac{1}{2i} (\Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) - \Gamma_{\alpha'\alpha}^*(\omega)) \quad (2.67)$$

Notons que  $S_{\alpha\alpha'}(\omega)$  est hermitique, au vu de sa définition. La transformée de Fourier  $\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$  de la fonction de corrélations de l'environnement est quant à elle une matrice hermitique définie positive. Cette dernière propriété requiert pour être démontrée des mathématiques avancées et nous invitons le lecteur intéressé à se référer à la bibliographie pour la démonstration [26, 27].

Les quantités  $\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$  et  $S_{\alpha\alpha'}(\omega)$  définies, nous pouvons décomposer le membre de droite de l'équation maîtresse (2.64) comme annoncé. D'abord, en explicitant les termes hermitiques conjugués l'un de l'autre, nous avons

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} &= \sum_{\hbar\omega, \alpha, \alpha'} \left( \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) + i S_{\alpha\alpha'}(\omega) \right) \left( A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t) \right) \\ &\quad + \sum_{\hbar\omega, \alpha, \alpha'} \left( \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\alpha'}^*(\omega) - i S_{\alpha\alpha'}^*(\omega) \right) \left( A_{\alpha}(\omega) \rho_S(t) A_{\alpha'}^{\dagger}(\omega) - \rho_S(t) A_{\alpha'}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha}(\omega) \right). \end{aligned}$$

Ensuite, en échangeant les indices  $\alpha$  et  $\alpha'$  dans la seconde somme, nous obtenons

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} &= \sum_{\hbar\omega, \alpha, \alpha'} \left( \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) + i S_{\alpha\alpha'}(\omega) \right) \left( A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t) \right) \\ &\quad + \sum_{\hbar\omega, \alpha, \alpha'} \left( \frac{1}{2} \underbrace{\gamma_{\alpha'\alpha}^*(\omega)}_{=\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)} - i \underbrace{S_{\alpha'\alpha}^*(\omega)}_{=S_{\alpha\alpha'}(\omega)} \right) \left( A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \rho_S(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha'}(\omega) \right) \\ &= \sum_{\hbar\omega, \alpha, \alpha'} \gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) \left( A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t) - \frac{1}{2} \rho_S(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha'}(\omega) \right) \\ &\quad + i \sum_{\hbar\omega, \alpha, \alpha'} S_{\alpha\alpha'}(\omega) \left( -A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t) + \rho_S(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha'}(\omega) \right) \\ &= \sum_{\hbar\omega, \alpha, \alpha'} \gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) \left( A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha'}(\omega), \rho_S(t) \right\} \right) \\ &\quad - i \sum_{\hbar\omega, \alpha, \alpha'} S_{\alpha\alpha'}(\omega) \left[ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha'}(\omega), \rho_S(t) \right]. \end{aligned}$$

Finalement, l'équation maîtresse markovienne régissant l'évolution temporelle de  $\rho_S(t)$  s'écrit

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H_{LS}, \rho_S(t)] + \mathcal{D}(\rho_S(t)) \quad (2.68)$$

et où  $H_{LS}$  est l'*hamiltonien de déplacement de Lamb* (*Lamb-shift hamiltonian*) donné par

$$H_{LS} = \sum_{\hbar\omega} \sum_{\alpha\alpha'} \hbar S_{\alpha\alpha'}(\omega) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha'}(\omega) \quad (2.69)$$

et  $\mathcal{D}(\rho_S(t))$  est le *dissipateur*

$$\mathcal{D}(\rho_S(t)) = \sum_{\hbar\omega} \sum_{\alpha\alpha'} \gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) \left( A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha'}(\omega), \rho_S(t) \right\} \right) \quad (2.70)$$

L'opérateur  $H_{LS}$  donne une contribution hamiltonienne à la dynamique du système en interaction. Il commute avec l'hamiltonien  $H_S$  du système libre, en vertu de (2.52),

$$[H_S, H_{LS}] = \sum_{\hbar\omega} \sum_{\alpha\alpha'} \hbar S_{\alpha\alpha'}(\omega) \left[ H_S, A_\alpha^\dagger(\omega) A_{\alpha'}(\omega) \right] = 0. \quad (2.71)$$

Le dissipateur (2.70) est un superopérateur qui transforme l'état du système  $\rho_S(t)$  de manière irréversible. Ce terme traduit l'évolution du système suite aux échanges d'énergie avec l'environnement  $B$ .

L'équation (2.68) est une équation maîtresse très générale qui peut être associée à la forme standard (2.7). Cependant, il est toujours possible de diagonaliser  $\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$ , la transformée de Fourier de la fonction de corrélations de l'environnement, car ses coefficients définissent une matrice positive  $\gamma(\omega)$ , comme cela peut être démontré avec le théorème de Bochner [26,27]. La matrice  $\gamma(\omega)$  est donc diagonalisable par une matrice unitaire  $U$ ,

$$U\gamma(\omega)U^\dagger = \text{diag}(\gamma_1, \gamma_2, \dots), \quad (2.72)$$

et nous pouvons écrire la transformation entre les opérateurs  $A_\alpha(\omega)$  et les nouveaux opérateurs  $\tilde{A}_\alpha(\omega)$  comme suit

$$A_\alpha(\omega) = \sum_{\beta} U_{\beta\alpha} \tilde{A}_\beta(\omega). \quad (2.73)$$

Nous obtenons alors une forme particulière de la forme standard (2.7), appelée *forme de Linblad* du dissipateur (2.70), en omettant délibérément le  $\tilde{\cdot}$  des opérateurs  $\tilde{A}_\alpha(\omega)$  afin de ne pas surcharger les notations

$$\mathcal{D}(\rho_S(t)) = \sum_{\hbar\omega} \sum_{\alpha} \gamma_\alpha(\omega) \left( A_\alpha(\omega) \rho_S(t) A_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ A_\alpha^\dagger(\omega) A_\alpha(\omega), \rho_S(t) \right\} \right). \quad (2.74)$$

Les opérateurs  $A_\alpha(\omega)$  de cette équation portent le nom d'*opérateurs de Linblad*, du nom de leur découvreur [28], tandis que ceux de l'équation (2.68) sont parfois appelés *opérateurs de sauts quantiques*.

Pour terminer cette section, nous revenons sur la forme des équations maîtresses (2.68) et (2.7),

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \mathcal{L}(\rho_S(t)) \quad \text{avec} \quad \mathcal{L}(\cdot) = -\frac{i}{\hbar} [H_{LS}, \cdot] + \mathcal{D}(\cdot), \quad (2.75)$$

Le super-opérateur d'évolution  $\mathcal{L}$ , appelé Liouvillien, peut être interprété comme le générateur d'un semi-groupe quantique dynamique à un seul paramètre, le temps [11,26]. Notons que les éléments d'un semi-groupe ne possèdent pas d'inverse, contrairement au cas des groupes, de sorte que l'évolution du système entre  $t_1$  et  $t_2$  ne peut être inversée dans le but d'obtenir celle entre  $t_2$  et  $t_1$ , ce qui traduit bien le caractère irréversible de l'évolution d'un système quantique dissipatif. L'interprétation de l'évolution d'un tel système par le biais des semi-groupes quantiques fournit à l'étude de leur dynamique un formalisme mathématique solide sur lequel s'est développé un grand nombre de résultats rigoureux [26].

## Chapitre 3

# Équation maîtresse en optique quantique

Dans ce chapitre, nous appliquons le formalisme général développé au chapitre précédent à l'optique quantique. Nous considérons que le système total est désormais composé

- d'un ensemble de  $N$  systèmes à deux niveaux, formant le sous-système  $S$ , et
- du champ électromagnétique constituant l'environnement  $B$  de  $S$ .

Le but de cette section est de particulariser l'équation maîtresse markovienne (2.68) à cette situation. À cet effet, nous décrivons successivement (dans les sections 3.1, 3.2 et 3.3) le système, son environnement et l'interaction entre ces deux parties, de manière à obtenir les formes spécifiques que prennent les opérateurs qui interviennent dans l'équation maîtresse. Ensuite, nous dérivons la forme de l'équation maîtresse obtenue dans ce cadre (section 3.4). Sa résolution fait l'objet du chapitre suivant.

### 3.1 Définition du système $S$

Le système  $S$  que nous envisageons est formé de  $N$  systèmes à deux niveaux. Les exemples de tels systèmes sont nombreux : atomes, ions, spin  $1/2$ , photons, . . . . De plus, l'étude des systèmes à deux niveaux est particulièrement importante car ceux-ci peuvent servir de support à l'unité fondamentale d'information quantique : le qubit. Dans ce travail, nous considérons un ensemble de  $N$  atomes identiques et immobiles, c'est-à-dire dont seuls les degrés de liberté internes sont pris en compte. Nous traitons en premier lieu le cas  $N = 1$  où le système n'est constitué que d'un seul atome.

#### 3.1.1 Cas d'un atome

Soit  $\mathcal{H}$  l'espace d'Hilbert de l'atome et  $H$  son hamiltonien dont les états propres sont  $|g\rangle$  et  $|e\rangle$  (pour *ground state* et *excited state*). Nous choisissons de travailler dans la base des ces états propres de sorte que

$$|e\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |g\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Par un choix approprié de l'échelle d'énergie, nous avons

$$H|g\rangle = -\frac{\hbar\omega_0}{2}|g\rangle \quad H|e\rangle = \frac{\hbar\omega_0}{2}|e\rangle, \quad (3.2)$$

où  $\hbar\omega_0$  est la différence d'énergie entre les deux niveaux atomiques  $|g\rangle$  et  $|e\rangle$  d'énergie  $E_g = -\frac{1}{2}\hbar\omega_0$  et  $E_e = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ . Nous pouvons alors écrire

$$H = \frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z, \quad (3.3)$$

où  $\sigma_z$  est le troisième opérateur de Pauli<sup>1</sup> de l'atome. La figure 3.1 représente schématiquement les deux niveaux d'énergie de l'atome.

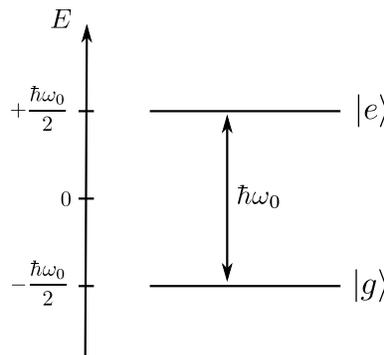


FIGURE 3.1 – Représentation et notation des niveaux d'énergie d'un atome.

Il est utile d'introduire pour la suite l'opérateur hermitique moment dipolaire électrique  $\mathbf{D}$  de l'atome défini par

$$\mathbf{D} = -e \sum_i \mathbf{r}_i, \quad (3.4)$$

où  $e$  est la charge élémentaire et  $\mathbf{r}_i$  la position du  $i$ -ème électron atomique. Celui-ci ne possède<sup>2</sup> que deux éléments de matrices non-nuls correspondant aux deux transitions dipolaires électriques possibles :  $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$  et  $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$ . Nous notons  $\mathbf{d}$  l'élément de matrice de transition  $\mathbf{d} = \langle g|\mathbf{D}|e\rangle = \langle e|\mathbf{D}|g\rangle^*$ . Dans la suite, nous supposons cet élément de transition réel sans perte de généralité. En effet, il est toujours possible d'absorber la phase de  $\mathbf{d}$  dans un des états atomiques puisqu'un changement de phase global n'a aucune conséquence physique. Nous avons donc

$$\mathbf{D} = \mathbf{d}|e\rangle\langle g| + \mathbf{d}|g\rangle\langle e| = \mathbf{d}(\sigma_- + \sigma_+) = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{d} \\ \mathbf{d} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

Nous pouvons vérifier que cet opérateur provoque bien les transitions attendues lorsque qu'il agit

1. Dans la base des états propres de  $H$ , les opérateurs de Pauli sont définis par

$$\begin{aligned} \sigma_x &= |e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e| & \sigma_y &= -i|e\rangle\langle g| + i|g\rangle\langle e| & \sigma_z &= |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g| \\ \sigma_+ &= \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) = |e\rangle\langle g| & \sigma_- &= \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y) = |g\rangle\langle e| \end{aligned}$$

2. En effet, les éléments de matrices donnés par  $\langle g|\mathbf{D}|g\rangle$  et  $\langle e|\mathbf{D}|e\rangle$  sont nuls car les états atomiques sont de parité bien définie.

sur les états  $|g\rangle$  et  $|e\rangle$

$$\mathbf{D}|e\rangle = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{d} \\ \mathbf{d} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{d}|g\rangle \quad (3.6)$$

$$\mathbf{D}|g\rangle = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{d} \\ \mathbf{d} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \mathbf{d}|e\rangle. \quad (3.7)$$

### 3.1.2 Cas d'un ensemble d'atomes

L'ensemble des atomes identiques est décrit par un hamiltonien  $H_S$  et un opérateur moment dipolaire électrique  $\mathbf{D}$  donnés respectivement par la somme des hamiltoniens atomiques  $H_i$  et par la somme des opérateurs moments dipolaires électriques atomiques  $\mathbf{D}_i$  introduits précédemment, où  $i = 1, \dots, N$  est un indice repérant chacun des atomes. Cependant, il est nécessaire de prolonger l'action des opérateurs  $H_i$  et  $\mathbf{D}_i$ , opérant tous deux sur  $\mathcal{H}_i$ , sur l'espace d'Hilbert  $\mathcal{H}_S$  du système total. Explicitement, chaque opérateur  $H_i$  et chaque opérateur  $\mathbf{D}_i$  est prolongé comme suit

$$\tilde{H}_i = \mathbb{1}_2^{(1)} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}_2^{(i-1)} \otimes H_i \otimes \mathbb{1}_2^{(i+1)} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}_2^{(N)} \quad (3.8)$$

$$\tilde{D}_i = \mathbb{1}_2^{(1)} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}_2^{(i-1)} \otimes \mathbf{D}_i \otimes \mathbb{1}_2^{(i+1)} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}_2^{(N)}, \quad (3.9)$$

où  $\mathbb{1}_2^{(i)}$  désigne l'opérateur identité opérant sur l'espace d'Hilbert de l'atome  $i$ , de dimension  $2 \times 2$ . Néanmoins, pour simplifier les notations, nous identifions dans la suite  $\tilde{O}_i$  à  $O_i$  pour tout opérateur  $O_i$  lorsqu'aucune confusion n'est possible. Il convient de retenir que les opérateurs avec un indice  $i$  n'agissent que dans le sous-espace relatif à l'atome  $i$ .

Au final, l'hamiltonien  $H_S$  et l'opérateur moment dipolaire électrique  $\mathbf{D}$  du système total sont donnés par

$$H_S = \sum_{i=1}^N H_i = \frac{\hbar\omega_0}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_z^{(i)} \quad (3.10)$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{d} \sum_{i=1}^N \left( \sigma_-^{(i)} + \sigma_+^{(i)} \right). \quad (3.11)$$

## 3.2 Définition de l'environnement $B$

Le champ électromagnétique libre, traité quantiquement, est identifié à l'environnement et son hamiltonien est donné par

$$H_B = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1,2} \hbar\omega_k a_\lambda^\dagger(\mathbf{k}) a_\lambda(\mathbf{k}), \quad (3.12)$$

où nous avons soustrait à cette expression la contribution infinie du vide [11]. Les opérateurs  $a_\lambda^\dagger(\mathbf{k})$  et  $a_\lambda(\mathbf{k})$  sont les opérateurs de création et d'annihilation des modes d'énergie  $\hbar\omega_k$ , de vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  et de polarisation transverse  $\lambda$  définies par le vecteur unitaire  $\mathbf{e}_\lambda(\mathbf{k})$ . La pulsation  $\omega_k$  et le nombre d'onde  $k$  sont reliés par la relation de dispersion  $\omega_k = c|\mathbf{k}| = ck$ . Notons que le champ électromagnétique a été décomposé en série de Fourier dans une boîte de volume  $V$  que nous ferons tendre vers l'infini par la suite.

Les vecteurs unitaires de polarisation satisfont aux relations<sup>3</sup>

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_\lambda(\mathbf{k}) = 0 \quad (3.13)$$

$$\mathbf{e}_\lambda(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{e}'_{\lambda'}(\mathbf{k}) = \delta_{\lambda\lambda'} \quad (3.14)$$

$$\sum_{\lambda=1,2} (\mathbf{e}_\lambda(\mathbf{k}))_m (\mathbf{e}_\lambda(\mathbf{k}))_n = \delta_{mn} - \frac{k_m k_n}{k^2} \quad (3.15)$$

valables  $\forall \mathbf{k}$ ,  $\forall m, n = x, y, z$  et  $\forall \lambda, \lambda' = 1, 2$ . Les relations de commutation pour  $a_\lambda^\dagger(\mathbf{k})$  et  $a_\lambda(\mathbf{k})$  sont  $\forall \mathbf{k}, \mathbf{k}', \lambda, \lambda'$

$$[a_\lambda(\mathbf{k}), a_{\lambda'}(\mathbf{k}')] = [a_\lambda^\dagger(\mathbf{k}), a_{\lambda'}^\dagger(\mathbf{k}')] = 0$$

$$[a_\lambda(\mathbf{k}), a_{\lambda'}^\dagger(\mathbf{k}')] = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

Nous ferons également l'hypothèse que l'environnement est à l'équilibre thermique à la température  $T$ , de sorte que l'état du champ est décrit par un opérateur densité  $\rho_B$  donné par

$$\rho_B = \frac{\exp(-\beta H_B)}{Z_B} = \frac{\exp(-\beta H_B)}{\text{tr}_B(\exp(-\beta H_B))} \quad (3.16)$$

où  $\beta = 1/k_B T$  (avec  $k_B$  la constante de Boltzmann) et  $Z_B$  est la fonction de partition de l'environnement. Cette dernière peut se calculer dans la base des états de Fock  $|n_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1), \dots, n_{\lambda_i}(\mathbf{k}_i), \dots\rangle$ , où  $n_{\lambda_i}(\mathbf{k}_i)$  représente le nombre de photons d'impulsion  $\mathbf{k}_i$  et de polarisation  $\lambda_i$ . Pour évaluer la trace partielle sur l'environnement, il est nécessaire de sommer sur tous les états possibles : pour chaque impulsion  $\mathbf{k}_i$ , il convient de sommer sur les deux polarisations et sur tous les nombres de photons  $n_{\lambda_i}(\mathbf{k}_i)$  possibles, allant de 0 à  $+\infty$ . Explicitement, nous avons

$$\begin{aligned} & \text{tr}_B(\exp(-\beta H_B)) \\ &= \sum_{\lambda_1} \sum_{n_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1)} \cdots \sum_{\lambda_i} \sum_{n_{\lambda_i}(\mathbf{k}_i)} \cdots \langle n_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1), \dots, n_{\lambda_i}(\mathbf{k}_i), \dots | \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-\beta H_B)^n}{n!} | n_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1), \dots, n_{\lambda_i}(\mathbf{k}_i), \dots \rangle. \end{aligned}$$

---

3. La première relation exprime la transversalité du champ tandis que la seconde exprime l'orthonormalité des vecteurs de polarisations de sorte que l'ensemble des vecteurs  $\mathbf{e}_1(\mathbf{k})$ ,  $\mathbf{e}_2(\mathbf{k})$  et  $\mathbf{k}/k$  forme une base orthonormée.

La troisième relation donne l'expression de la composante  $mn$  du projecteur dans l'espace orthogonal au vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ , que nous notons  $\mathcal{P}_{\perp \mathbf{k}}$ . En effet, en adoptant la notation

$$|e_\lambda\rangle \equiv \mathbf{e}_\lambda(\mathbf{k}) \quad \text{et} \quad |e_3\rangle \equiv \mathbf{e}_3(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}}{k},$$

le projecteur dans l'espace à trois dimensions s'écrit  $\mathcal{P} = \mathbb{1}_3 = \mathcal{P}_{\perp \mathbf{k}} + \mathcal{P}_{\parallel \mathbf{k}} = \sum_{\lambda=1,2} |e_\lambda\rangle \langle e_\lambda| + |e_3\rangle \langle e_3|$ , puisque les vecteurs  $|e_\lambda\rangle$  et  $|e_3\rangle$  sont orthonormés vu (3.13) et (3.14). Nous avons donc

$$\mathbb{1}_3 = \sum_{\lambda=1,2} |e_\lambda\rangle \langle e_\lambda| + |e_3\rangle \langle e_3| \Leftrightarrow \sum_{\lambda=1,2} |e_\lambda\rangle \langle e_\lambda| = \mathbb{1}_3 - |e_3\rangle \langle e_3|.$$

En passant aux composantes en projetant cette équation sur  $\langle m| \cdot |n\rangle$  où  $|m\rangle$  et  $|n\rangle$  sont des vecteurs orthonormés, et en revenant à la notation vectorielle, nous obtenons la relation (3.15).

L'application de l'opérateur hamiltonien  $H_B$  sur les états de Fock donne

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-\beta H_B)^n}{n!} |n_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1), \dots, n_{\lambda_i}(\mathbf{k}_i), \dots\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\left(-\beta \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\lambda'} \hbar\omega_{\mathbf{k}'} a_{\lambda'}^\dagger(\mathbf{k}') a_{\lambda'}(\mathbf{k}')\right)^n}{n!} |n_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1), \dots, n_{\lambda_i}(\mathbf{k}_i), \dots\rangle \\
&= \exp\left(-\beta \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\lambda'} \hbar\omega_{\mathbf{k}'} n_{\lambda'}(\mathbf{k}')\right) |n_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1), \dots, n_{\lambda_i}(\mathbf{k}_i), \dots\rangle,
\end{aligned}$$

de sorte que la fonction de partition devient

$$\begin{aligned}
\text{tr}_B(\exp(-\beta H_B)) &= \sum_{\lambda_1} \sum_{n_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1)} \cdots \sum_{\lambda_i} \sum_{n_{\lambda_i}(\mathbf{k}_i)} \cdots \exp\left(-\beta \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\lambda'} \hbar\omega_{\mathbf{k}'} n_{\lambda'}(\mathbf{k}')\right) \\
&= \sum_{\lambda_1} \sum_{n_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1)} \cdots \sum_{\lambda_i} \sum_{n_{\lambda_i}(\mathbf{k}_i)} \cdots \prod_{\mathbf{k}'} \prod_{\lambda'} \exp(-\beta \hbar\omega_{\mathbf{k}'} n_{\lambda'}(\mathbf{k}')) \\
&= \prod_{\mathbf{k}} \prod_{\lambda} \sum_{n_{\lambda}(\mathbf{k})=0}^{+\infty} \exp(-\beta \hbar\omega_{\mathbf{k}} n_{\lambda}(\mathbf{k})) \\
&= \prod_{\mathbf{k}} \prod_{\lambda} \frac{1}{(1 - \exp(-\beta \hbar\omega_{\mathbf{k}}))}.
\end{aligned}$$

L'état de l'environnement est alors donné par

$$\begin{aligned}
\rho_B &= \frac{\exp\left(-\beta \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\lambda'} \hbar\omega_{\mathbf{k}'} a_{\lambda'}^\dagger(\mathbf{k}') a_{\lambda'}(\mathbf{k}')\right)}{\prod_{\mathbf{k}} \prod_{\lambda} \frac{1}{(1 - \exp(-\beta \hbar\omega_{\mathbf{k}}))}} \\
&= \frac{\prod_{\mathbf{k}'} \prod_{\lambda'} \exp\left(-\beta \hbar\omega_{\mathbf{k}'} a_{\lambda'}^\dagger(\mathbf{k}') a_{\lambda'}(\mathbf{k}')\right)}{\prod_{\mathbf{k}} \prod_{\lambda} \frac{1}{(1 - \exp(-\beta \hbar\omega_{\mathbf{k}}))}} \\
&= \prod_{\mathbf{k}} \prod_{\lambda} (1 - \exp(-\beta \hbar\omega_{\mathbf{k}})) \exp\left(-\beta \hbar\omega_{\mathbf{k}} a_{\lambda}^\dagger(\mathbf{k}) a_{\lambda}(\mathbf{k})\right).
\end{aligned}$$

### 3.3 Hamiltonien d'interaction « atomes + champ »

L'hamiltonien d'interaction qui intervient dans l'expression  $H = H_S + H_B + H_{\text{int}}$  tient compte de l'interaction entre les atomes et le champ électromagnétique. Lorsque la longueur d'onde du rayonnement électromagnétique est grande comparée à la taille des atomes, qui est typiquement de l'ordre de  $10^{-10}$  m, il est justifié d'ignorer les variations du champ électromagnétique à l'échelle atomique : c'est l'approximation dipolaire [25]. Celle-ci est valable lorsque la fréquence du rayonnement  $\nu = c/\lambda$  est bien plus faible que  $10^{18}$  Hz, ce qui est le cas des fréquences optiques (de l'ordre de  $10^{14} - 10^{15}$  Hz). Pour un système composé de  $N$  atomes, nous pouvons montrer que l'hamiltonien d'interaction s'écrit dans le cadre de l'approximation dipolaire électrique comme

$$H_{\text{int}} = - \sum_{i=1}^N \mathbf{D}_i \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_i), \quad (3.17)$$

où  $\mathbf{D}_i$  est l'opérateur moment dipolaire électrique de l'atome  $i$  et  $\mathbf{E}(\mathbf{r}_i)$  est l'opérateur champ électrique de l'environnement  $B$  évalué à la position  $\mathbf{r}_i$ , où l'indice  $i = 1, \dots, N$  repère chacun des  $N$  atomes. L'opérateur  $\mathbf{E}(\mathbf{r}_i)$  est donné par [25],

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_i) = i \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1,2} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2\epsilon_0 V}} \mathbf{e}_{\lambda}(\mathbf{k}) \left( a_{\lambda}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} - a_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \right). \quad (3.18)$$

L'opérateur moment dipolaire électrique  $\mathbf{D}$  du système  $S$  est d'après (3.11) la somme des opérateurs dipolaires électriques  $\mathbf{D}_i$  des atomes individuels

$$\mathbf{D} = \sum_{i=1}^N \mathbf{D}_i = \mathbf{d} \sum_{i=1}^N \left( \sigma_{-}^{(i)} + \sigma_{+}^{(i)} \right). \quad (3.19)$$

Nous pouvons donc récrire l'hamiltonien d'interaction (3.17) sous la forme (2.46),

$$H_{\text{int}} = -\mathbf{d} \sum_{i=1}^N \left( \sigma_{-}^{(i)} + \sigma_{+}^{(i)} \right) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_i) = \sum_{i=1}^N \underbrace{\left( \sigma_{-}^{(i)} + \sigma_{+}^{(i)} \right)}_{\equiv A_i} \underbrace{\left( -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_i) \right)}_{\equiv B_i} = \sum_{i=1}^N A_i \otimes B_i, \quad (3.20)$$

où les opérateurs  $A_i$  et  $B_i$  agissent respectivement dans  $\mathcal{H}_S$  et  $\mathcal{H}_B$ . L'indice  $i$  correspond donc à l'indice  $\alpha$  utilisé dans l'expression (2.46). Afin d'utiliser la forme générale de l'équation maîtresse markovienne (2.68) obtenue précédemment, il est maintenant nécessaire de décomposer l'hamiltonien d'interaction sur la base des opérateurs propres du superopérateur  $[H_S, \cdot]$ . Ces opérateurs propres, appelés également opérateurs de saut quantique, sont donnés par (2.49), que nous rappelons ci-dessous

$$A_{\alpha}(\omega) = \sum_{E_n - E_m = \hbar\omega} \mathcal{P}(E_m) A_{\alpha} \mathcal{P}(E_n). \quad (3.21)$$

Nous les calculons d'abord dans le cas d'un atome.

### 3.3.1 Opérateurs de saut quantique pour un atome

Puisque l'hamiltonien du système  $S$  se décompose comme  $H_S = \sum_{i=1}^N H_i$ , il est naturel de chercher dans un premier temps les opérateurs propres du superopérateur  $[H_i, \cdot]$  correspondant au cas d'un système composé d'un unique atome  $i$ . Les deux énergies de l'hamiltonien  $H_i$  sont  $E_g$  et  $E_e$  de sorte qu'il n'est possible d'obtenir que deux différences d'énergie distinctes :  $E_e - E_g = \hbar\omega_0$  et  $E_g - E_e = -\hbar\omega_0$ . L'opérateur de saut quantique  $A_i(\omega_0)$  correspondant à la différence d'énergie  $E_e - E_g = \hbar\omega_0$  est

$$A_i(\omega_0) = \mathcal{P}_i(E_g) \left( \sigma_{-}^{(i)} + \sigma_{+}^{(i)} \right) \mathcal{P}_i(E_e) = |g_i\rangle\langle g_i| \left( \sigma_{-}^{(i)} + \sigma_{+}^{(i)} \right) |e_i\rangle\langle e_i| = |g_i\rangle\langle g_i| g_i |e_i\rangle\langle e_i| = \sigma_{-}^{(i)}. \quad (3.22)$$

En faisant de même pour l'autre différence d'énergie, nous obtenons finalement les deux opérateurs de saut quantique

$$A_i(\omega_0) = \sigma_{-}^{(i)} \quad (3.23)$$

$$A_i(-\omega_0) = \sigma_{+}^{(i)} \quad (3.24)$$

Remarquons que nous avons bien  $A_i^{\dagger}(\omega_0) = A_i(-\omega_0)$  ainsi que  $[H_i, A_i(\omega_0)] = -\hbar\omega_0 A_i(\omega_0)$  et  $[H_i, A_i^{\dagger}(\omega_0)] = +\hbar\omega_0 (A_i(\omega_0))^{\dagger}$ , au vu des relations (2.50) et (2.51). Nous vérifions encore que la

somme des opérateurs de saut quantique d'indice  $i$  correspond à l'opérateur  $A_i$ , comme cela est spécifié par la relation (2.53)

$$\sum_{\omega=\pm\omega_0} A_i(\omega) = (\sigma_-^{(i)} + \sigma_+^{(i)}) = A_i. \quad (3.25)$$

### 3.3.2 Opérateurs de saut quantique pour un ensemble d'atomes

La généralisation au cas d'un ensemble de  $N$  atomes donne un résultat similaire mais le calcul des opérateurs propres mérite une attention particulière. En effet, comme l'hamiltonien  $H_S$  du système  $S$  possède plus de deux niveaux d'énergies, il est a priori possible d'avoir des opérateurs de saut quantique provoquant des différences d'énergie plus grandes que  $\hbar\omega_0$  (comme par exemple  $2\hbar\omega_0$ ). Cependant, il n'en est rien, comme en témoigne l'exemple suivant. Considérons le cas d'un système composé de deux atomes et utilisons la notation  $\tilde{\cdot}$  pour préciser qu'un opérateur agit dans l'espace d'Hilbert du système  $S$  afin d'éviter toute confusion. L'hamiltonien d'interaction (3.20) s'écrit

$$H_{\text{int}} = \sum_{i=1}^N \tilde{A}_i \otimes B_i \quad (3.26)$$

où  $\tilde{A}_i$  est le prolongement de l'opérateur  $A_i = \sigma_-^{(i)} + \sigma_+^{(i)}$  dans l'espace  $\mathcal{H}_S$ ,

$$\tilde{A}_i = \mathbb{1}_2^{(1)} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}_2^{(i-1)} \otimes (\sigma_-^{(i)} + \sigma_+^{(i)}) \otimes \mathbb{1}_2^{(i+1)} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}_2^{(N)}. \quad (3.27)$$

L'hamiltonien  $H_S$  du système a pour valeurs propres  $E_+ = \hbar\omega_0$ ,  $E_0 = 0$  ( $2\times$ ) et  $E_- = -\hbar\omega_0$  avec pour états propres respectifs  $|e_1e_2\rangle \equiv |ee\rangle$ ,  $|eg\rangle$  et  $|ge\rangle$ , et enfin  $|gg\rangle$ . La figure 3.2 représente les niveaux d'énergie du système.

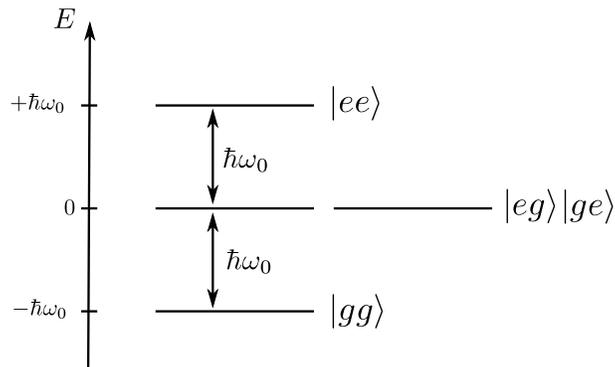


FIGURE 3.2 – Représentation des niveaux d'énergie de  $H_S$  pour un système de deux atomes.

Au vu de (2.49), nous sommes en droit de rechercher l'opérateur propre  $\tilde{A}_i(2\omega_0)$ , relatif à la différence d'énergie  $E_+ - E_- = 2\hbar\omega_0$ . Physiquement, cela correspond à la situation où les deux atomes, initialement dans l'état excité, émettent un photon simultanément. Il s'avère que  $\tilde{A}_i(2\omega_0)$  est nul. En effet, pour  $\tilde{A}_1(2\omega_0)$ , nous avons

$$\begin{aligned} \tilde{A}_1(2\omega_0) &= \mathcal{P}(E_-)\tilde{A}_1\mathcal{P}(E_+) \\ &= |gg\rangle\langle gg| \left( \sigma_-^{(1)} \otimes \mathbb{1}_2^{(2)} + \sigma_+^{(1)} \otimes \mathbb{1}_2^{(2)} \right) |ee\rangle\langle ee| \\ &= |gg\rangle\langle gg|ge\rangle\langle ee| = 0, \end{aligned}$$

et un calcul similaire pour  $\tilde{A}_2(2\omega_0)$  donne également 0. Cet exemple montre que dans le cadre de l'approximation de couplage faible, il est impossible d'avoir des opérateurs de saut quantique provoquant un changement d'énergie plus important que  $\pm\hbar\omega_0$ . Les seuls opérateurs de saut quantique du système  $S$  sont ceux qui ne font intervenir qu'une transition d'énergie  $\pm\hbar\omega_0$ . L'opérateur  $\tilde{A}_1(\omega_0)$  se calcule comme suit

$$\begin{aligned}
\tilde{A}_1(\omega_0) &= \mathcal{P}(E_0)\tilde{A}_1\mathcal{P}(E_+) + \mathcal{P}(E_-)\tilde{A}_1\mathcal{P}(E_0) \\
&= (|eg\rangle\langle eg| + |ge\rangle\langle ge|) \left( \sigma_-^{(1)} \otimes \mathbb{1}_2^{(2)} + \sigma_+^{(1)} \otimes \mathbb{1}_2^{(2)} \right) |ee\rangle\langle ee| \\
&\quad + |gg\rangle\langle gg| \left( \sigma_-^{(1)} \otimes \mathbb{1}_2^{(2)} + \sigma_+^{(1)} \otimes \mathbb{1}_2^{(2)} \right) (|eg\rangle\langle eg| + |ge\rangle\langle ge|) \\
&= |ge\rangle\langle ee| + |gg\rangle\langle eg| \\
&= |g\rangle\langle e| \otimes (|e\rangle\langle e| + |g\rangle\langle g|) \\
&= A_1(\omega_0) \otimes \mathbb{1}_2^{(2)}.
\end{aligned}$$

Un calcul similaire pour  $\tilde{A}_2(\omega_0)$  donne  $\mathbb{1}_2^{(1)} \otimes A_2(\omega_0)$ . L'opérateur de saut quantique  $\tilde{A}_i(\omega_0)$  est donc naturellement donné par le prolongement des opérateurs  $A_i(\omega_0)$  dérivé dans le cas d'un atome, ce qui justifie pleinement l'utilisation du symbole  $\tilde{\cdot}$ . L'opérateur  $\tilde{A}_i(-\omega_0)$  s'obtient de manière similaire. Ainsi, pour un nombre quelconque  $N$  d'atomes, nous avons

$$\boxed{\tilde{A}_i(\omega_0) = \mathbb{1}_2^{(1)} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}_2^{(i-1)} \otimes \sigma_-^{(i)} \otimes \mathbb{1}_2^{(i+1)} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}_2^{(N)}} \quad (3.28)$$

$$\boxed{\tilde{A}_i(-\omega_0) = \mathbb{1}_2^{(1)} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}_2^{(i-1)} \otimes \sigma_+^{(i)} \otimes \mathbb{1}_2^{(i+1)} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}_2^{(N)}} \quad (3.29)$$

Comme spécifié précédemment, nous n'écrivons plus le  $\tilde{\cdot}$  des opérateurs  $\tilde{A}_i(\omega_0)$  et  $\tilde{A}_i(-\omega_0)$ . Selon le contexte,  $A_i(\pm\omega_0)$  agit dans  $\mathcal{H}_S$  ou dans  $\mathcal{H}_i$ . Dans tous les cas, les opérateurs avec un indice  $i$  n'influencent que l'état de l'atome  $i$ .

Finalement, la décomposition de l'hamiltonien d'interaction  $H_{\text{int}}(t)$  en schéma d'interaction et en termes d'opérateurs de saut quantique (opérateurs propres du superopérateur  $[H_S, \cdot]$ ) est donnée par

$$H_{\text{int}}(t) = \sum_{i=1}^N \sum_{\omega=\pm\omega_0} A_i(t) \otimes B_i(t) = \sum_{i=1}^N \left( \sigma_-^{(i)} e^{-i\omega_0 t} + \sigma_+^{(i)} e^{i\omega_0 t} \right) \otimes (-\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t)) \quad (3.30)$$

que nous pouvons comparer à l'équation (2.56), dont nous rappelons l'expression ci-dessous

$$H_{\text{int}}(t) = \sum_{\alpha} \sum_{\omega} e^{-i\omega t} A_{\alpha}(\omega) \otimes B_{\alpha}(t). \quad (3.31)$$

### 3.4 Équation maîtresse markovienne en optique quantique

Après avoir explicité les formes que prennent le système, l'environnement et l'hamiltonien d'interaction dans le cadre de l'optique quantique, nous écrivons dans cette section l'équation maîtresse (2.68) régissant l'évolution du système uniquement. Dans ce but, nous calculons successivement la fonction de corrélations de l'environnement (2.61) et le tenseur de corrélations spectrales (2.62) qui, une fois décomposé en partie réelle et partie imaginaire, permet de déduire l'hamiltonien de déplacement de Lamb (2.69) et le dissipateur (2.70) qui déterminent entièrement l'équation maîtresse (2.68).

### 3.4.1 Fonction de corrélations de l'environnement

Nous commençons par calculer la fonction de corrélations de l'environnement (2.61), dont nous rappelons ici l'expression, et qui ne dépend que de l'intervalle de temps écoulé  $\tau$  puisque l'environnement est considéré stationnaire (voir approximation de Born, section 2.2.3)

$$G_{\alpha\alpha'}(\tau) = \langle B_{\alpha}^{\dagger}(\tau)B_{\alpha'}(0) \rangle_B$$

Dans le cas qui nous occupe, nous avons

$$G_{ij}(\tau) = \langle \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, \tau) \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_j, 0) \rangle_B \quad (3.32)$$

puisque l'opérateur  $\mathbf{E}(\mathbf{r}_i, \tau)$  est hermitique et que l'élément de matrice  $\mathbf{d}$  peut toujours être choisi réel. En utilisant l'expression (3.18) de l'opérateur champ électrique et en développant, nous obtenons

$$\begin{aligned} G_{ij}(\tau) = & - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\lambda, \lambda'} \frac{\hbar \sqrt{\omega_k \omega_{k'}}}{2\epsilon_0 V} \mathbf{d} \cdot \mathbf{e}_{\lambda}(\mathbf{k}) \mathbf{d} \cdot \mathbf{e}_{\lambda'}(\mathbf{k}') \\ & \left[ \langle a_{\lambda}(\mathbf{k}) a_{\lambda'}(\mathbf{k}') \rangle_B e^{i(\omega_{k'}\tau + \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j))} - \langle a_{\lambda}(\mathbf{k}) a_{\lambda'}^{\dagger}(\mathbf{k}') \rangle_B e^{-i(\omega_{k'}\tau - \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j))} \right. \\ & \left. - \langle a_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{k}) a_{\lambda'}(\mathbf{k}') \rangle_B e^{i(\omega_{k'}\tau - \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j))} + \langle a_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{k}) a_{\lambda'}^{\dagger}(\mathbf{k}') \rangle_B e^{-i(\omega_{k'}\tau + \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j))} \right], \end{aligned}$$

À l'équilibre thermique, les valeurs moyennes des opérateurs de création et d'annihilation sont données par [25]

$$\begin{aligned} \langle a_{\lambda}(\mathbf{k}) a_{\lambda'}(\mathbf{k}') \rangle_B &= \langle a_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{k}) a_{\lambda'}^{\dagger}(\mathbf{k}') \rangle_B = 0 \\ \langle a_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{k}) a_{\lambda'}(\mathbf{k}') \rangle_B &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} N(\omega_k) \\ \langle a_{\lambda}(\mathbf{k}) a_{\lambda'}^{\dagger}(\mathbf{k}') \rangle_B &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} (\mathbb{1}_B)_B + \langle a_{\lambda'}^{\dagger}(\mathbf{k}') a_{\lambda}(\mathbf{k}) \rangle_B \\ &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} (1 + N(\omega_k)), \end{aligned}$$

où  $N(\omega_k)$  est la distribution de Planck

$$N(\omega_k) = \frac{1}{\exp(\beta \hbar \omega_k) - 1}, \quad (3.33)$$

qui donne le nombre moyen de photons d'énergie  $\hbar\omega_k$  pour un environnement à la température  $T$ . Comme nous nous focalisons dans la suite sur le domaine optique, nous pouvons négliger les effets thermiques et posons dès à présent  $T = 0$ , de sorte que  $N(\omega_k) = 0$ . En effet, à température ambiante ( $T \approx 300$  K) et pour des fréquences de l'ordre de  $10^{15}$  Hz, nous avons  $N(\omega_k) \sim 10^{-35}$ . La fonction de corrélations de l'environnement devient alors

$$G_{ij}(\tau) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar \omega_k}{2\epsilon_0 V} \sum_{m, n=x, y, z} d_m d_n \underbrace{\left( \sum_{\lambda} (\mathbf{e}_{\lambda}(\mathbf{k}))_m (\mathbf{e}_{\lambda}(\mathbf{k}))_n \right)}_{\left( \delta_{mn} - \frac{k_m k_n}{k^2} \right) \text{ vu (3.15)}} e^{-i(\omega_k \tau - \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j))} \quad (3.34)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar \omega_k}{2\epsilon_0 V} \left( d^2 - \frac{(\mathbf{d} \cdot \mathbf{k})^2}{k^2} \right) e^{-i(\omega_k \tau - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij})} \quad (3.35)$$

où nous avons développé les produits scalaires et défini  $d = |\mathbf{d}|$  et  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ . En passant à la limite continue

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \longrightarrow \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{1}{(2\pi)^3 c^3} \int_0^{+\infty} d\omega_k \omega_k^2 \int d\Omega, \quad (3.36)$$

nous obtenons finalement

$$G_{ij}(\tau) = \frac{\hbar}{16\pi^3 \epsilon_0 c^3} \int_0^{+\infty} d\omega_k \omega_k^3 \int d\Omega \left( d^2 - \frac{(\mathbf{d} \cdot \mathbf{k})^2}{k^2} \right) e^{-i(\omega_k \tau - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij})} \quad (3.37)$$

La fonction de corrélations de l'environnement contient une intégrale sur l'angle solide  $\Omega$ , que nous noterons par la suite indifféremment  $\Omega_{ij}(\omega_k)$  ou  $\Omega_{ij}(k)$ , puisque  $\omega_k = ck$ , et définie par

$$d^2 \Omega_{ij}(\omega_k) = \int d\Omega \left( |\mathbf{d}|^2 - \frac{(\mathbf{d} \cdot \mathbf{k})^2}{k^2} \right) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij}}. \quad (3.38)$$

Pour la calculer, nous considérons le système de coordonnées représenté sur la figure 3.3 tel que les composantes des vecteurs  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{r}_{ij}$  et  $\mathbf{d}$  soient données par

$$\begin{cases} k_x = k \cos \varphi \sin \theta \\ k_y = k \sin \varphi \sin \theta \\ k_z = k \cos \theta \end{cases} \quad \begin{cases} (\mathbf{r}_{ij})_x = r_{ij} \sin \alpha_{ij} \\ (\mathbf{r}_{ij})_y = 0 \\ (\mathbf{r}_{ij})_z = r_{ij} \cos \alpha_{ij} \end{cases} \quad \begin{cases} d_x = 0 \\ d_y = 0 \\ d_z = d \end{cases} \quad (3.39)$$

où  $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$ . Dans ce système de coordonnées, l'intégrale angulaire s'écrit

$$\Omega_{ij}(k) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \overbrace{\sin \theta (1 - \cos^2 \theta)}^{= \sin^3 \theta} e^{ikr_{ij}(\cos \varphi \sin \theta \sin \alpha_{ij} + \cos \theta \cos \alpha_{ij})}. \quad (3.40)$$

Le calcul de cette intégrale, exposé en annexe C, donne

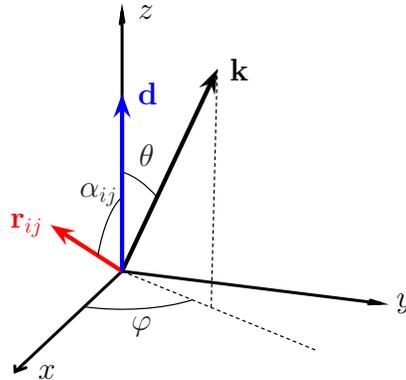


FIGURE 3.3 – Système de coordonnées représentant les vecteurs  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{r}_{ij}$  et  $\mathbf{d}$ .

$$\Omega_{ij}(k) = \frac{8\pi}{3} [j_0(kr_{ij}) + j_2(kr_{ij})P_2^0(\cos \alpha_{ij})], \quad (3.41)$$

où  $j_0(kr_{ij})$  et  $j_2(kr_{ij})$  sont les fonctions de Bessel sphériques d'ordre 0 et 2

$$j_0(kr_{ij}) = \frac{\sin(kr_{ij})}{kr_{ij}} \quad (3.42)$$

$$j_2(kr_{ij}) = \left( \frac{3}{(kr_{ij})^3} - \frac{1}{kr_{ij}} \right) \sin(kr_{ij}) - \frac{3}{(kr_{ij})^2} \cos(kr_{ij}) \quad (3.43)$$

et où  $P_2^0(\cos \alpha_{ij})$  est la fonction de Legendre

$$P_2^0(\cos \alpha_{ij}) = \frac{1}{2} (3 \cos^2 \alpha_{ij} - 1). \quad (3.44)$$

Les fonctions de Bessel sphériques sont représentées sur la figure 3.4. Afin de ne pas surcharger les notations, nous notons souvent par la suite  $\Omega_{ij}(k)$  plutôt que son expression complète (3.41).

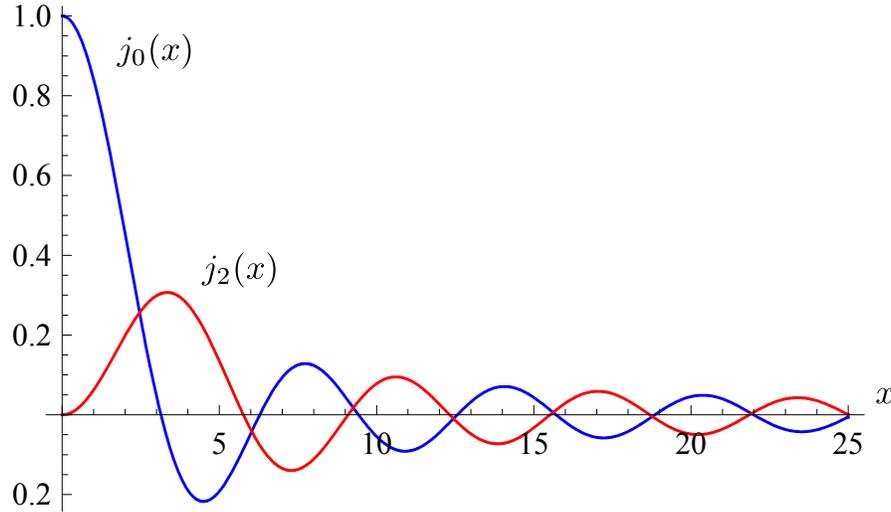


FIGURE 3.4 – Représentation des fonctions de Bessel sphériques  $j_0(x)$  et  $j_2(x)$ . Les deux fonctions tendent respectivement vers 1 et 0 lorsque  $x$  tend vers 0 et toutes deux tendent vers 0 lorsque  $x \rightarrow \infty$ .

### 3.4.2 Tenseur de corrélations spectrales

À partir de la fonction de corrélations de l'environnement, nous pouvons calculer le tenseur de corrélations spectrales donné par l'équation (2.62). Nous avons

$$\Gamma_{ij}(\omega) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} dt' e^{i\omega t'} G_{ij}(t') = \frac{d^2}{16\pi^3 \hbar \epsilon_0 c^3} \int_0^{+\infty} d\omega_k \omega_k^3 \int_0^{+\infty} dt' e^{-i(\omega_k - \omega)t'} \Omega_{ij}(\omega_k) \quad (3.45)$$

L'intégration temporelle donne<sup>4</sup>

$$\int_0^{+\infty} dt' e^{-i(\omega_k - \omega)t'} = \pi \delta(\omega_k - \omega) - i \text{v.p.} \left( \frac{1}{\omega_k - \omega} \right) \quad (3.47)$$

où  $\text{v.p.} \left( \frac{1}{\omega_k - \omega} \right)$  représente la distribution valeur principale de Cauchy [29], qui est définie par son action sur toute fonction  $f$  infiniment continûment dérivable et à support borné comme

$$\text{v.p.} \left( \frac{1}{\omega_k - \omega} \right) (f) \equiv \text{v.p.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(\omega_k)}{\omega_k - \omega} d\omega_k = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \int_{-\infty}^{\omega - \epsilon} + \int_{\omega + \epsilon}^{+\infty} \right) \frac{f(\omega_k)}{\omega_k - \omega} d\omega_k, \quad (3.48)$$

4. La démonstration de (3.47) fait appel au célèbre théorème de Sokhotsky [29]

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = \mp i\pi \delta(x) + \text{v.p.} \left( \frac{1}{x} \right). \quad (3.46)$$

de sorte que le tenseur de corrélations spectrales devient

$$\Gamma_{ij}(\omega) = \frac{d^2}{16\pi^3\hbar\epsilon_0c^3} \left( \int_0^{+\infty} d\omega_k \omega_k^3 \pi \delta(\omega_k - \omega) \Omega_{ij}(\omega_k) - i \text{v.p.} \int_0^{+\infty} d\omega_k \frac{\omega_k^3}{\omega_k - \omega} \Omega_{ij}(\omega_k) \right) \quad (3.49)$$

Nous décomposons le tenseur en une partie réelle et une partie imaginaire afin de retrouver la forme  $\Gamma_{ij}(\omega) = \frac{1}{2}\gamma_{ij}(\omega) + iS_{ij}(\omega)$  donnée en (2.65). Ce faisant, nous obtenons

$$\Gamma_{ij}(\omega) = \frac{1}{2} \underbrace{\frac{d^2}{8\pi^2\hbar\epsilon_0c^3} \int_0^{+\infty} d\omega_k \delta(\omega_k - \omega) \omega_k^3 \Omega_{ij}(\omega_k)}_{\equiv \gamma_{ij}(\omega)} + i \underbrace{\left( \frac{d^2}{16\pi^3\hbar\epsilon_0c^3} \text{v.p.} \int_0^{+\infty} d\omega_k \frac{\omega_k^3}{\omega - \omega_k} \Omega_{ij}(\omega_k) \right)}_{\equiv S_{ij}(\omega)} \quad (3.50)$$

où  $\gamma_{ij}(\omega)$  est la transformée de Fourier de la fonction de corrélations de l'environnement

$$\gamma_{ij}(\omega) = \frac{d^2\omega^3}{8\pi^2\hbar\epsilon_0c^3} \Omega_{ij}(\omega), \quad (3.51)$$

qui intervient dans l'expression (2.70) du dissipateur  $\mathcal{D}(\cdot)$ , et où la quantité  $S_{ij}(\omega)$  est donnée par

$$S_{ij}(\omega) = \frac{d^2}{16\pi^3\hbar\epsilon_0c^3} \text{v.p.} \int_0^{+\infty} d\omega_k \frac{\omega_k^3}{\omega - \omega_k} \Omega_{ij}(\omega_k), \quad (3.52)$$

et contribue, quant à elle, à l'expression (2.69) de l'hamiltonien  $H_{LS}$  qui fournit une évolution unitaire à  $\rho_S(t)$  en plus de celle donnée par l'hamiltonien libre  $H_S$  du système. Nous noterons que dans l'expression (3.38) de l'angle solide intervenant dans  $\gamma_{ij}(\omega)$  ne se manifestent que les pulsations  $\omega$  puisque la fonction delta de Dirac limite l'influence du champ électromagnétique aux photons résonants d'énergie  $\hbar\omega$ .

### 3.4.3 Hamiltonien de déplacement de Lamb, dissipateur et équation maîtresse

Nous pouvons à présent calculer l'hamiltonien  $H_{LS}$  ainsi que la dissipateur  $\mathcal{D}(\cdot)$ . Le premier s'écrit d'après (2.69) comme

$$H_{LS} = \sum_{\hbar\omega} \sum_{\alpha, \alpha'} \hbar S_{\alpha\alpha'}(\omega) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha'}(\omega), \quad (3.53)$$

ce qui donne directement

$$H_{LS} = \sum_{i,j=1}^N \hbar \left( S_{ij}(\omega_0) \sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(j)} + S_{ij}(-\omega_0) \sigma_-^{(i)} \sigma_+^{(j)} \right) \quad (3.54)$$

Le dissipateur est donné quant à lui par (2.70),

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\rho_S) &= \sum_{\omega=\pm\omega_0} \sum_{i,j=1}^N \gamma_{ij}(\omega) \left( A_j(\omega) \rho_S A_i^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ A_i^{\dagger}(\omega) A_j(\omega), \rho_S \right\} \right) \\ &= \sum_{i,j=1}^N \frac{d^2}{8\pi^2\hbar\epsilon_0c^3} \int_0^{+\infty} d\omega_k \Omega_{ij}(\omega_k) \omega_k^3 \\ &\quad \left[ \delta(\omega_k - \omega_0) \left( \sigma_-^{(j)} \rho_S \sigma_+^{(i)} - \frac{1}{2} \left\{ \sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(j)}, \rho_S \right\} \right) + \delta(\omega_k + \omega_0) \left( \sigma_+^{(j)} \rho_S \sigma_-^{(i)} - \frac{1}{2} \left\{ \sigma_-^{(i)} \sigma_+^{(j)}, \rho_S \right\} \right) \right]. \end{aligned}$$

Le second terme du dissipateur est nul puisque l'argument de la fonction delta  $\delta(\omega_k + \omega_0)$  est strictement positif dans le domaine d'intégration. Ainsi, nous obtenons

$$\mathcal{D}(\rho_S) = \sum_{i,j=1}^N \frac{d^2\omega_0^3}{8\pi^2\hbar\epsilon_0c^3} \Omega_{ij}(k_0) \left( \sigma_-^{(j)} \rho_S \sigma_+^{(i)} - \frac{1}{2} \{ \sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(j)}, \rho_S \} \right) \quad (3.55)$$

L'hamiltonien de déplacement de Lamb et le dissipateur donnent lieu à l'équation maîtresse

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H_{LS}, \rho_S(t)] + \mathcal{D}(\rho_S(t)) \quad (3.56)$$

de la forme (2.68).

### 3.4.4 Domaine de validité des approximations

Pour aboutir à l'équation maîtresse (3.56), il a fallu recourir à l'approximation de Born-Markov et à l'approximation séculaire, dont nous rappelons les conditions d'applicabilité dans le tableau ci-dessous

Approximation	Condition
Born-Markov	$\tau_R \gg \tau_B$ (eq. (2.22))
séculaire	$\tau_R \gg \tau_S$ (eq. (2.63))

Il s'avère que ces conditions sont bien vérifiées dans le cas qui nous occupe. Pour le montrer, nous évaluons successivement les ordres de grandeur des différents temps caractéristiques  $\tau_R$ ,  $\tau_S$  et  $\tau_B$ .

**Ordre de grandeur de  $\tau_R$ .** Le temps typique d'évolution du système dû à l'interaction,  $\tau_R$ , est donné par l'ordre de grandeur de l'inverse du facteur  $\gamma_{ij}(\omega)$ , la transformée de Fourier de la fonction de corrélations de l'environnement, qui apparaît dans l'expression (3.55) du dissipateur. L'ordre de grandeur de  $\gamma_{ij}(\omega)$  peut être majoré comme suit

$$\gamma_{ij}(\omega) = \frac{d^2\omega^3}{8\pi^2\hbar\epsilon_0c^3} \Omega_{ij}(\omega) < \frac{d^2\omega^3}{3\pi\hbar\epsilon_0c^3} \quad (3.57)$$

car l'angle solide  $\Omega_{ij}$  donné en (3.41) est majoré par  $\frac{8\pi}{3}$ . Nous pouvons facilement nous en convaincre grâce à la figure 3.4. Comme le dissipateur ne fait intervenir que la fréquence  $\omega_0$ , l'ordre de grandeur de  $\gamma_{ij}(\omega)$  est

$$\gamma_{ij}(\omega) \sim \gamma_0 \equiv \frac{d^2\omega_0^3}{3\pi\hbar\epsilon_0c^3}, \quad (3.58)$$

où  $\gamma_0$  correspond au taux d'émission spontanée d'un atome dans le vide, comme nous le verrons dans la section 4.1. Par conséquent,

$$\tau_R \sim \frac{1}{\gamma_0} \quad (3.59)$$

Dans le domaine optique, où les fréquences sont de l'ordre de  $10^{15}$  Hz,  $\gamma_0$  est typiquement de l'ordre de  $10^7 - 10^9$  Hz ( $d \sim er$ , où  $r$  est la taille typique de l'atome, qui se mesure en angström), de sorte que  $\tau_R$  est de l'ordre de  $10^{-9} - 10^{-7}$  s.

**Ordre de grandeur de  $\tau_S$ .** La valeur du temps typique nécessaire au système libre pour évoluer de manière significative dépend de l'hamiltonien  $H_S$ . Puisque nous considérons des systèmes à deux niveaux d'énergie séparés de  $\hbar\omega_0$ , nous avons

$$\tau_S \sim \frac{1}{\omega_0}. \quad (3.60)$$

Pour des transitions atomiques dans le domaine optique,  $\omega_0 \sim 10^{15}$  Hz de sorte que le temps typique  $\tau_S$  du système est de l'ordre de  $10^{-15}$  s.

**Ordre de grandeur de  $\tau_B$ .** La valeur du temps typique de décroissance de la fonction de corrélations de l'environnement est donnée par l'inverse d'une fréquence de transition typique  $\omega_B$  du réservoir (voir section 2.2.7) [11, 16]. Il est également possible de montrer que ce temps typique est donné par la largeur spectrale du champ électrique de l'environnement [21]. Comme nous avons pris le champ électromagnétique dans l'état du vide, cette largeur est infinie. L'existence du couplage entre le système de fréquence propre  $\omega_0$  et l'environnement nous permet d'écrire  $\omega_B \simeq \omega_0$  et par conséquent

$$\tau_B \lesssim 10^{-15} \text{ s}. \quad (3.61)$$

Le tableau suivant synthétise la discussion précédente. Le temps de relaxation  $\tau_R$  du système est largement plus grand que les deux autres temps typiques. L'approximation de Born-Markov et l'approximation séculaire sont dès lors justifiées.

$\tau_R$	$\tau_S$	$\tau_B$
$\frac{3\pi\hbar\epsilon_0 c^3}{\omega_0^3 d^2}$	$\frac{1}{\omega_0}$	$\frac{1}{\omega_B}$
$\sim 10^{-9} - 10^{-7} \text{ s}$	$\sim 10^{-15} \text{ s}$	$\sim 10^{-15} \text{ s}$

## Chapitre 4

# Phénomène de superradiance

Dans ce chapitre, nous résolvons l'équation maîtresse dérivée au chapitre 3 dans deux régimes distincts. Nous commençons dans la section 4.1 par étudier la dynamique d'un système composé d'un atome unique en interaction avec le champ électromagnétique ambiant afin notamment de mettre en évidence le phénomène d'émission spontanée. Nous résolvons ensuite dans la section 4.2 l'équation maîtresse pour un ensemble d'atomes couplés au champ électromagnétique. Nous mettons en évidence un phénomène d'émission collective de photons, la superradiance et nous étudions l'influence de l'hamiltonien de déplacement de Lamb (3.54) sur ce phénomène.

### 4.1 Émission spontanée par un atome

Dans un premier temps, il est intéressant de remarquer que lorsque le système n'est composé que d'un atome, l'angle solide  $\Omega_{ij}(k)$  donné en (3.41) ne dépend pas de  $k$ . En effet, en présence d'un seul atome,  $i = j = 1$ , de sorte que  $r_{11} = 0$ . Par conséquent,

$$\Omega_{11}(k) = \frac{8\pi}{3} \left[ \underbrace{j_0(0)}_{=1} + \underbrace{j_2(0)}_{=0} P_2^0(0) \right] = \frac{8\pi}{3}. \quad (4.1)$$

L'hamiltonien de déplacement de Lamb (3.54) est dans ce cas donné par

$$H_{LS} = \hbar \left( S_{11}(\omega_0) \sigma_+^{(1)} \sigma_-^{(1)} + S_{11}(-\omega_0) \sigma_-^{(1)} \sigma_+^{(1)} \right) \equiv \hbar \left( S(\omega_0) \sigma_+ \sigma_- + S(-\omega_0) \sigma_- \sigma_+ \right). \quad (4.2)$$

Il est commode de le décomposer dans l'espace de Liouville associé à  $\mathcal{H}_S$  introduit dans la section 1.5. Nous choisissons la base des opérateurs de dimension  $2 \times 2$  formée par les opérateurs de Pauli et l'opérateur unité que nous notons  $\bar{\sigma}_i$ , avec  $i = 0, x, y, z$ , tel que

$$\bar{\sigma}_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{cases} \mathbb{1} & \text{si } i = 0 \\ \sigma_i & \text{si } i = x, y \text{ ou } z \end{cases} \quad (4.3)$$

Les opérateurs de base  $\bar{\sigma}_i$  forment une base orthonormée au sens de (1.51) puisque  $\text{tr}(\bar{\sigma}_i^\dagger \bar{\sigma}_j) = \delta_{ij}$  et l'hamiltonien de déplacement de Lamb se décompose dans cette base comme

$$H_{LS} = \sum_i \text{tr}(\bar{\sigma}_i^\dagger H_{LS}) \bar{\sigma}_i \quad (4.4)$$

$$= \frac{1}{2} \hbar (S(\omega_0) + S(-\omega_0)) \mathbb{1} + \frac{1}{2} \hbar (S(\omega_0) - S(-\omega_0)) \sigma_z. \quad (4.5)$$

La première contribution de  $H_{LS}$  à la dynamique du système atomique est proportionnelle à l'identité et ne doit donc pas être prise en considération, puisque tout opérateur commute avec l'identité. Nous écrirons pour cette raison l'hamiltonien de déplacement de Lamb sans cette contribution, en gardant toutefois la même notation pour  $H_{LS}$  par soucis de simplicité. La deuxième contribution est par contre proportionnelle à  $\sigma_z$ , tout comme l'hamiltonien du système  $H_S$  donné en (3.3). Par conséquent, l'hamiltonien  $H_{LS}$  déplace les niveaux atomiques  $E_g$  et  $E_e$ . Dans la suite, nous écrirons  $H_{LS}$  comme suit

$$H_{LS} = \Delta E_{LS} \sigma_z. \quad (4.6)$$

Il s'avère que le calcul direct des déplacements  $\Delta E_{LS}$  donne lieu à des divergences [11, 12, 21]. Celles-ci peuvent toutefois être absorbées dans des constantes physiques grâce à la procédure de renormalisation de la théorie quantique des champs de manière à rendre les déplacements en énergie occasionnés finis. Nous ne rentrerons pas dans les détails de cette méthode dans ce travail car cela ne concerne pas directement l'étude de la dynamique dissipative que nous réalisons. Formellement, il suffit de considérer une redéfinition de la fréquence atomique  $\omega_0$ . Néanmoins, même sans réaliser cela, les déplacements en énergie occasionnés sont faibles de sorte que les négliger constitue une excellente approximation.

Le dissipateur (3.55) est donné, pour un atome unique, par

$$\mathcal{D}(\rho_S(t)) = \gamma_0 \left( \sigma_- \rho_S(t) \sigma_+ - \frac{1}{2} \sigma_+ \sigma_- \rho_S(t) - \frac{1}{2} \rho_S(t) \sigma_+ \sigma_- \right). \quad (4.7)$$

Ainsi, l'équation maîtresse (3.56) est

$$\boxed{\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \gamma_0 \left( \sigma_- \rho_S(t) \sigma_+ - \frac{1}{2} \sigma_+ \sigma_- \rho_S(t) - \frac{1}{2} \rho_S(t) \sigma_+ \sigma_- \right)} \quad (4.8)$$

Dans le but de résoudre cette équation, nous décomposons l'opérateur densité  $\rho_S(t)$  du système dans la base (4.3) des opérateurs  $\bar{\sigma}_i$

$$\rho_S(t) = \sum_i \text{tr}(\bar{\sigma}_i^\dagger \rho_S(t)) \bar{\sigma}_i = \frac{1}{2} (\mathbb{1} + \langle \sigma_x \rangle \sigma_x + \langle \sigma_y \rangle \sigma_y + \langle \sigma_z \rangle \sigma_z), \quad (4.9)$$

avec  $\langle \sigma_i(t) \rangle = \text{tr}(\rho_S(t) \sigma_i)$  (où  $i = x, y, z$ ) les valeurs moyennes (réelles) des opérateurs de Pauli. Ainsi, nous avons

$$\rho_S(t) = \frac{1}{2} (\mathbb{1} + \langle \boldsymbol{\sigma}(t) \rangle \boldsymbol{\sigma}(t)) \quad (4.10)$$

où  $\langle \boldsymbol{\sigma}(t) \rangle = (\langle \sigma_x(t) \rangle, \langle \sigma_y(t) \rangle, \langle \sigma_z(t) \rangle)$  est appelé *vecteur de Bloch*. Sous cette forme, l'équation maîtresse mène à une équation différentielle pour chacune des composantes de  $\rho_S(t)$  sur les opérateurs de Pauli. Montrons-le dans le cas de l'opérateur de Pauli  $\sigma_x$  en effectuant la trace du produit de l'équation maîtresse avec celui-ci

$$\underbrace{\text{tr} \left( \frac{d\rho_S(t)}{dt} \sigma_x \right)}_{\frac{d}{dt} \langle \sigma_x(t) \rangle} = \text{tr} \left( \gamma_0 \left( \sigma_- \rho_S(t) \sigma_+ - \frac{1}{2} \sigma_+ \sigma_- \rho_S(t) - \frac{1}{2} \rho_S(t) \sigma_+ \sigma_- \right) \sigma_x \right). \quad (4.11)$$

En développant le second membre et en utilisant la propriété cyclique de la trace, nous obtenons

$$\frac{d\langle\sigma_x(t)\rangle}{dt} = -\frac{\gamma_0}{2} \text{tr}(\rho_S(t)\sigma_- + \rho_S(t)\sigma_+). \quad (4.12)$$

Ensuite, de par la décomposition de l'opérateur densité (4.10), nous avons

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\sigma_x(t)\rangle}{dt} &= -\frac{\gamma_0}{2} \text{tr}\left(\frac{1}{2}(\mathbb{1} + \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle\boldsymbol{\sigma}(t))\sigma_- + \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \langle\boldsymbol{\sigma}(t)\rangle\boldsymbol{\sigma})\sigma_+\right) \\ &= -\frac{\gamma_0}{4} \text{tr}\left(\langle\sigma_x(t)\rangle|e\rangle\langle e| - i\langle\sigma_y(t)\rangle|e\rangle\langle e| - \langle\sigma_z(t)\rangle|g\rangle\langle e| \right. \\ &\quad \left. + \langle\sigma_x(t)\rangle|g\rangle\langle g| + i\langle\sigma_y(t)\rangle|g\rangle\langle g| + \langle\sigma_z(t)\rangle|e\rangle\langle g|\right) \\ &= -\frac{\gamma_0}{2} \langle\sigma_x(t)\rangle. \end{aligned}$$

En effectuant les mêmes calculs pour les opérateurs  $\sigma_y$  et  $\sigma_z$  nous obtenons finalement les équations différentielles ordinaires à coefficients constants suivantes

$$\frac{d\langle\sigma_x(t)\rangle}{dt} = -\frac{\gamma_0}{2} \langle\sigma_x(t)\rangle \quad (4.13)$$

$$\frac{d\langle\sigma_y(t)\rangle}{dt} = -\frac{\gamma_0}{2} \langle\sigma_y(t)\rangle \quad (4.14)$$

$$\frac{d\langle\sigma_z(t)\rangle}{dt} = -\gamma_0 (\langle\sigma_z(t)\rangle + 1). \quad (4.15)$$

dont les solutions générales sont données par

$$\langle\sigma_x(t)\rangle = \langle\sigma_x(0)\rangle e^{-\gamma_0 t/2} \quad (4.16)$$

$$\langle\sigma_y(t)\rangle = \langle\sigma_y(0)\rangle e^{-\gamma_0 t/2} \quad (4.17)$$

$$\langle\sigma_z(t)\rangle = (\langle\sigma_z(0)\rangle + 1)e^{-\gamma_0 t} - 1. \quad (4.18)$$

La solution générale de l'équation maîtresse (4.8) est donc finalement donnée par

$$\rho_S(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} ((\langle\sigma_z(0)\rangle + 1)e^{-\gamma_0 t} & \langle\sigma_-(0)\rangle e^{-\gamma_0 t/2} \\ \langle\sigma_+(0)\rangle e^{-\gamma_0 t/2} & 2 - ((\langle\sigma_z(0)\rangle + 1)e^{-\gamma_0 t} \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

### Atome excité

Pour un atome initialement dans l'état excité, nous avons

$$\rho_S(0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} \langle\sigma_x(0)\rangle = 0 \\ \langle\sigma_y(0)\rangle = 0 \\ \langle\sigma_z(0)\rangle = 1 \end{cases} \quad (4.20)$$

de sorte que

$$\rho_S(t) = \begin{pmatrix} e^{-\gamma_0 t} & 0 \\ 0 & 1 - e^{-\gamma_0 t} \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

Nous illustrons sur la figure 4.1 la décroissance de la population de l'état excité au cours du temps. Nous constatons qu'au fil du temps, la population de l'état excité  $\langle e|\rho_S(t)|e\rangle = e^{-\gamma_0 t}$  diminue exponentiellement au profit de la population de l'état fondamental  $\langle g|\rho_S(t)|g\rangle$ . Cette désexcitation n'est autre que l'émission spontanée qui provient du couplage de l'atome avec le réservoir constitué par le champ électromagnétique. Même à température nulle pour laquelle le champ électromagnétique est dans son état fondamental, ce phénomène se produit. Le taux de désexcitation  $\gamma_0$  n'est autre que le coefficient d'Einstein de l'émission spontanée.

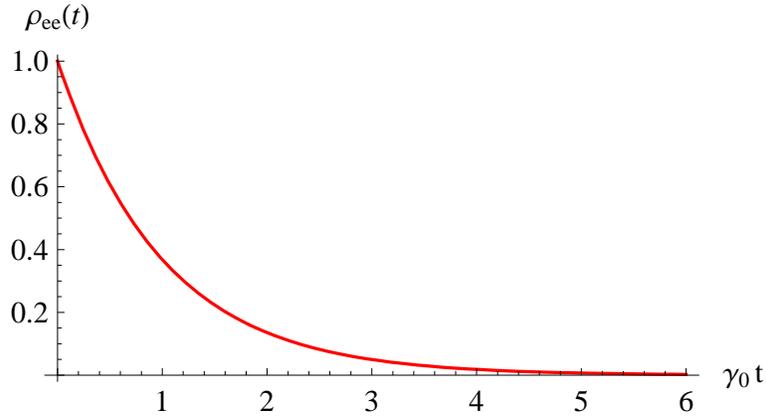


FIGURE 4.1 – Décroissance de la population de l'état excité d'un système initialement dans cet état en unité de  $\gamma_0$  donné en (3.58).

### Atome dans une superposition cohérente des états $|g\rangle$ et $|e\rangle$

Si l'atome est initialement dans une superposition cohérente des états  $|g\rangle$  et  $|e\rangle$ , dont la forme la plus générale s'écrit

$$|\psi(0)\rangle = \cos(\theta/2)|g\rangle e^{i\varphi} + \sin(\theta/2)|e\rangle, \quad (4.22)$$

avec  $0 \leq \theta \leq \pi$  et  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ , l'opérateur densité possède des éléments non-diagonaux dans la base  $\{|g\rangle, |e\rangle\}$

$$\rho_S(0) = \begin{pmatrix} \sin^2(\frac{\theta}{2}) & \cos(\frac{\theta}{2}) \sin(\frac{\theta}{2}) e^{i\varphi} \\ \cos(\frac{\theta}{2}) \sin(\frac{\theta}{2}) e^{-i\varphi} & \cos^2(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} \langle \sigma_x(0) \rangle = \cos(\frac{\theta}{2}) \sin(\frac{\theta}{2}) \cos(\varphi) \\ \langle \sigma_y(0) \rangle = -\cos(\frac{\theta}{2}) \sin(\frac{\theta}{2}) \sin(\varphi) \\ \langle \sigma_z(0) \rangle = 2 \sin^2(\frac{\theta}{2}) - 1. \end{cases} \quad (4.23)$$

La solution (4.19) s'écrit dans ce cas

$$\rho_S(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 \sin^2(\frac{\theta}{2}) e^{-\gamma_0 t} & \cos(\frac{\theta}{2}) \sin(\frac{\theta}{2}) e^{i\varphi} e^{-\gamma_0 t/2} \\ \cos(\frac{\theta}{2}) \sin(\frac{\theta}{2}) e^{-i\varphi} e^{-\gamma_0 t/2} & 2 - 2 \sin^2(\frac{\theta}{2}) e^{-\gamma_0 t} \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

Nous pouvons voir que toutes les cohérences, données par les éléments non-diagonaux de l'opérateur densité, décroissent au cours du temps et finissent par disparaître complètement avec un temps de relaxation double de celui de la population de l'état excité. C'est l'effet de décohérence, discuté dans

la section 1.6, dont l'origine est le couplage du système à l'environnement et qui provient du dissipateur. De manière plus précise, tout système en interaction possède un certain nombre d'états stables appelés *pointer states* [1] vers lesquels celui-ci évolue. La décohérence détruit les superpositions de ces états au cours du temps et ce d'autant plus vite que l'interaction avec l'environnement est forte ou que le système est de grande taille [11]. C'est notamment une des raisons pour laquelle nous n'observons pas de superposition d'états à l'échelle macroscopique.

## 4.2 Dynamique dissipative d'un ensemble d'atomes

Dans cette section, nous présentons la résolution de l'équation maîtresse pour un ensemble de  $N$  atomes. Il s'avère dans cette situation que l'hamiltonien de déplacement de Lamb  $H_{LS}$  contient des termes supplémentaires par rapport à ceux nécessitant une renormalisation et dont les effets peuvent s'avérer importants. Comme ce traitement est assez délicat, nous commençons par analyser le dissipateur en ignorant dans un premier temps la contribution de l'hamiltonien de déplacement de Lamb et nous résolvons l'équation maîtresse correspondante. Ceci nous permettra de mettre en évidence le phénomène d'émission collective de photons, la superradiance. Ensuite, nous ajouterons le terme en  $H_{LS}$  et nous montrerons qu'il décrit les interactions dipôles-dipôles entre atomes qui peuvent, selon la symétrie de permutation de la distribution atomique, induire des déphasages nuisibles au phénomène de superradiance. Nous présentons dans la dernière section nos résultats numériques concernant les effets de ce couplage sur le phénomène de superradiance.

### 4.2.1 Émission spontanée collective résultant du dissipateur et superradiance

Nous nous restreignons dans un premier temps à une équation maîtresse pour laquelle l'évolution de l'opérateur densité du système est déterminée uniquement par le dissipateur. Celle-ci est donnée d'après (3.41), (3.55) et (3.56) par

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \sum_{i,j=1}^N \gamma_0 [j_0(k_0 r_{ij}) + j_2(k_0 r_{ij}) P_2^0(\cos \alpha_{ij})] \left( \sigma_-^{(j)} \rho_S(t) \sigma_+^{(i)} - \frac{1}{2} \left\{ \sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(j)}, \rho_S(t) \right\} \right) \quad (4.25)$$

Même en l'absence de l'hamiltonien de déplacement de Lamb, cette équation différentielle pour  $\rho_S(t)$  est extrêmement difficile à résoudre. Cette équation pour l'opérateur densité correspond en réalité à un système de  $2^N \times 2^N$  équations différentielles linéaires couplées, correspondant au nombre d'éléments de matrice de  $\rho_S(t)$ . Pour  $N$  assez grand, le nombre d'équations croît donc comme  $2^{2N}$ . À titre d'exemple, pour un système composé de  $N = 10$  atomes, cela fait déjà plus de  $10^6$  équations.

Deux régimes intéressants sont cependant plus simples à traiter. En effet, le problème que nous étudions comporte deux longueurs caractéristiques<sup>1</sup> : la longueur d'onde  $\lambda_0 = 2\pi/k_0$  du rayonnement émis par les atomes et la taille typique  $r$  de la distribution atomique. Le produit  $k_0 r_{ij}$  pour ( $i \neq j$ ) est dès lors donné, en ordre de grandeur, par  $r/\lambda_0$ . Lorsque la valeur de ce rapport est très grande ou très petite devant 1, des simplifications permettant de résoudre l'équation maîtresse apparaissent.

1. Nous passons ici sous silence la nature quantique du mouvement atomique.

**Atomes distants :**  $r/\lambda_0 \gg 1 \Leftrightarrow k_0 r \gg 1$

Lorsque la longueur d'onde du rayonnement  $\lambda_0 = 2\pi/k_0 = 2\pi c/\omega_0$  émis par les atomes est bien plus petite que la taille typique  $r$  de la distribution atomique, ou de manière équivalente, que les atomes sont suffisamment espacés par rapport à la longueur d'onde du rayonnement, nous pouvons simplifier l'équation maîtresse (4.25). En effet, pour  $r \gg \lambda_0 \Leftrightarrow k_0 r \gg 1$ , l'angle solide  $\Omega_{ij}(k_0)$  contenant les fonctions de Bessel et de Legendre devient (voir figure 3.4)

$$\Omega_{ij}(k_0) = \frac{8\pi}{3} \left[ \underbrace{j_0(k_0 r_{ij})}_{\rightarrow \delta_{ij}} + \underbrace{j_2(k_0 r_{ij})}_{\rightarrow 0} P_2^0(\cos \alpha_{ij}) \right] \rightarrow \frac{8\pi}{3} \delta_{ij} \quad \text{pour} \quad k_0 r \rightarrow +\infty, \quad (4.26)$$

puisque  $r_{ii} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_i| = 0 \forall i$ . Dans ce régime, l'équation maîtresse devient

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \sum_{i=1}^N \gamma_0 \left( \sigma_-^{(i)} \rho_S(t) \sigma_+^{(i)} - \frac{1}{2} \left\{ \sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(i)}, \rho_S(t) \right\} \right). \quad (4.27)$$

Cette équation maîtresse est similaire à l'équation (4.8) décrivant la dynamique de relaxation d'un atome unique. Nous en déduisons que, lorsque les atomes sont suffisamment éloignés les uns des autres, l'ensemble se comporte comme  $N$  atomes indépendants, de sorte que nous retrouvons le comportement examiné dans la section 4.1. Les atomes émettent spontanément des photons et ce de manière indépendante.

**Régime superradiant :**  $r/\lambda_0 \ll 1 \Leftrightarrow k_0 r \ll 1$

L'autre cas limite s'obtient lorsque la longueur d'onde du rayonnement  $\lambda_0$  est largement plus grande que la taille typique  $r$  de la distribution atomique. C'est la situation que nous allons étudier en détails et qui conduit au phénomène de superradiance. Mathématiquement, si  $r \ll \lambda_0$ , le terme contenant les fonctions de Bessel et de Legendre devient

$$\Omega_{ij}(k_0) = \frac{8\pi}{3} \left[ \underbrace{j_0(k_0 r_{ij})}_{\rightarrow 1} + \underbrace{j_2(k_0 r_{ij})}_{\rightarrow 0} P_2^0(\cos \alpha_{ij}) \right] \rightarrow \frac{8\pi}{3} \quad \text{pour} \quad k_0 r \rightarrow 0. \quad (4.28)$$

L'équation maîtresse prend alors la forme simplifiée

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \gamma_0 \left( \sigma_-^{(j)} \rho_S(t) \sigma_+^{(i)} - \frac{1}{2} \left\{ \sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(j)}, \rho_S(t) \right\} \right). \quad (4.29)$$

Cette équation a de remarquable le fait qu'elle est symétrique par permutation des atomes. En effet, le membre de droite de l'équation maîtresse ci-dessus peut se récrire comme

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N A_{ij} \quad \text{avec} \quad A_{ij} = \gamma_0 \left( \sigma_-^{(j)} \rho_S(t) \sigma_+^{(i)} - \frac{1}{2} \left\{ \sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(j)}, \rho_S(t) \right\} \right). \quad (4.30)$$

Une transposition quelconque de deux atomes agissant sur l'opérateur  $A_{ij}$  correspond à une transposition de deux termes des sommes sur  $i$  et  $j$  car le préfacteur  $\gamma_0$  dans (4.30) ne dépend pas de  $i$  et  $j$ . Or, toute permutation peut être écrite sous la forme d'un produit de permutations de deux éléments.

Ainsi, l'équation maîtresse (4.29) est invariante par permutation. Intuitivement, nous pouvons comprendre cette invariance en remarquant que lorsque  $r/\lambda_0 \ll 1$ , lors d'un processus d'émission ou d'absorption de photon, il est impossible de savoir où le phénomène a eu lieu au sein de la distribution atomique, qui est de taille bien inférieure à la longueur d'onde du rayonnement.

Nous supposons dorénavant que l'état initial du système correspond à la situation où tous les atomes sont dans l'état excité  $|e\rangle$

$$|\psi(0)\rangle = |ee \dots e\rangle. \quad (4.31)$$

L'état initial du système est dès lors symétrique par permutation des atomes et puisque le dissipateur  $\mathcal{D}(\rho_S)$  l'est également, la solution de l'équation (4.29) sera elle-même invariante par permutation. Ceci a pour conséquence que les seuls états accessibles au système lors de son évolution sont les états symétriques, qui sont en nombre réduit par rapport à l'ensemble des états de  $\mathcal{H}$ . En effet, pour un ensemble de  $N$  systèmes à deux niveaux, il existe une base de  $N + 1$  états symétriques seulement, à comparer avec le nombre total d'états  $2^N$ . Ils sont construits grâce au symétriseur  $\mathcal{S}$  défini par

$$\mathcal{S} = \frac{1}{N!} \sum_p \mathcal{P}_p, \quad (4.32)$$

où  $p$  court sur l'ensemble des permutations possibles des  $N$  atomes et où  $\mathcal{P}_p$  désigne l'une d'entre elles, que nous faisons agir successivement sur les états  $|ee \dots e\rangle, |ge \dots e\rangle, \dots, |gg \dots g\rangle$ , et qu'il convient ensuite de normer. Par exemple, l'état symétrique dont  $N - 1$  atomes sont dans l'état excité et dont un seul atome est dans l'état fondamental s'obtient à partir de

$$\mathcal{S}|gee \dots e\rangle \propto (|gee \dots e\rangle + |ege \dots e\rangle + \dots + |eee \dots ge\rangle + |eee \dots eg\rangle). \quad (4.33)$$

La figure 4.2(a) représente les niveaux d'énergie des  $N + 1$  états symétriques. Grâce à la symétrie

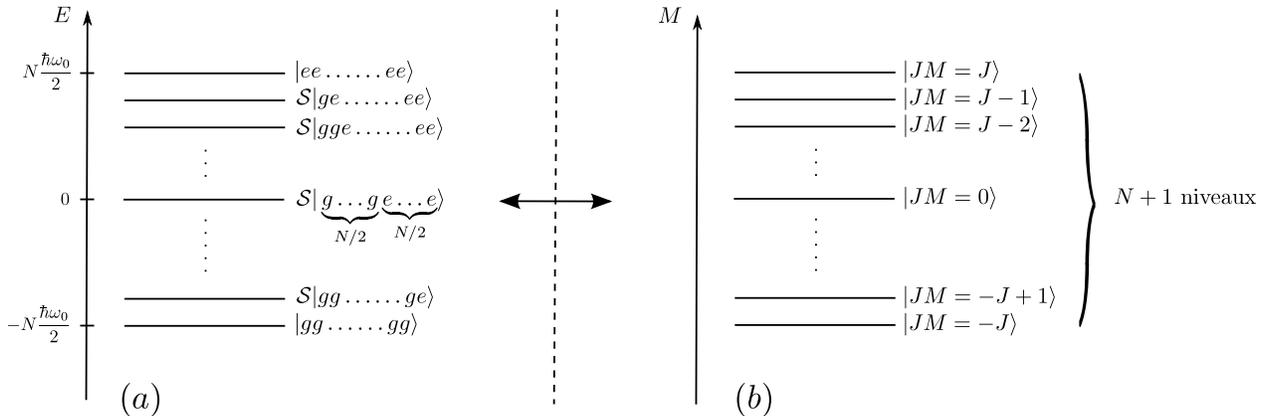


FIGURE 4.2 – (a) Représentation des niveaux d'énergie des  $N + 1$  états symétriques construits à l'aide du symétriseur. (b) Représentation des états  $|JM\rangle$ . L'ensemble de la figure montre la correspondance entre les états atomiques et les états de spins  $|JM\rangle$ .

du problème, l'évolution du système se fera uniquement dans le sous-espace symétrique de l'espace d'Hilbert du système. Pour décrire cette évolution, il est commode d'associer à chaque atome  $i$  un spin fictif  $1/2$  représenté par l'opérateur  $\sigma^{(i)}$  [30]. En effet, il s'avère que le système, composé d'un ensemble de  $N$  atomes à deux niveaux et invariant par permutation, est isomorphe à une superposition symétrique de  $N$  spins  $1/2$  auquel est associé l'opérateur de spin collectif  $\mathbf{J}$

$$\mathbf{J} = \sum_{i=1}^N \sigma^{(i)}, \quad (4.34)$$

donné par la somme des opérateurs de Pauli des atomes individuels. Il est par conséquent possible de décrire le système par le biais du spin collectif dont le nombre quantique de moment angulaire  $J$  doit être égal à  $N/2$  car l'isomorphisme entre les deux points de vue ne peut être réalisé que si les états accessibles dans chaque cas sont en correspondance une à une. En particulier, le nombre d'états doit être égal dans les deux points de vue. Or, pour  $J = N/2$ , le nombre quantique  $M$  peut prendre les valeurs comprises entre  $-J$  et  $J$ , c'est-à-dire  $2J + 1 = N + 1$  valeurs donnant lieu à  $N + 1$  états symétriques de spin notés  $|JM\rangle$  appelés également états de Dicke [6]. Formellement, nous pouvons construire les états  $|JM\rangle$  à partir de l'état initial (4.31) comme suit

$$|JM\rangle = \sqrt{\frac{(J+M)!}{N!(J-M)!}} J_-^{J-M} |ee\dots e\rangle, \quad (4.35)$$

où  $J_{\pm}$  sont les opérateurs d'échelle de spin collectif définis par

$$J_{\pm} = \sum_{i=1}^N \sigma_{\pm}^{(i)}, \quad (4.36)$$

et où le facteur devant  $J_-$  dans (4.35) assure la normalisation de l'état  $|JM\rangle$ . La figure 4.2 représente le lien entre les états des deux représentations, atomique et de spin.

Les états  $|JM\rangle$  sont états propres des opérateurs  $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$  et  $J_z$  de valeurs propres  $J(J+1)$  et  $M$

$$J^2|JM\rangle = J(J+1)|JM\rangle, \quad (4.37)$$

$$J_z|JM\rangle = M|JM\rangle, \quad (4.38)$$

et vérifient

$$J_{\pm}|JM\rangle = \sqrt{J(J+1) - M(M\pm 1)}|JM\pm 1\rangle. \quad (4.39)$$

L'équation maîtresse (4.29) se réécrit en vertu des opérateurs de spin collectif comme

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \gamma_0 \left( J_- \rho_S(t) J_+ - \frac{1}{2} \{ J_+ J_-, \rho_S(t) \} \right). \quad (4.40)$$

Nous avons désormais une équation maîtresse plus simple à résoudre. Comparée à (4.25), nous pouvons nous restreindre cette fois à un opérateur densité de dimension  $(N+1) \times (N+1)$  au lieu de  $2^N \times 2^N$ . Pour  $N = 10$ , il suffit de résoudre 121 équations au lieu des  $10^6$  équations du cas général.

En projetant l'équation (4.40) sur les états  $|JM\rangle$ , nous obtenons

$$\frac{d\rho_M(t)}{dt} = \gamma_0 \left[ \underbrace{J(J+1) - M(M+1)}_{(J-M)(J+M+1)} \right] \rho_{M+1}(t) - \gamma_0 \left[ \underbrace{J(J+1) - M(M-1)}_{(J+M)(J-M+1)} \right] \rho_M(t), \quad (4.41)$$

où  $\rho_M(t) \equiv \langle JM | \rho_S(t) | JM \rangle$  représente la population de l'état  $|JM\rangle$ . L'ensemble des  $2J+1$  équations (4.41) décrit une cascade d'émission qui, partant de l'état  $|JJ\rangle$  (éq. (4.31)), fait successivement passer le système par les états symétriques  $|JM\rangle$  avec  $M = J-1, J-2, \dots$ , pour aboutir, quand  $t \rightarrow +\infty$ , à l'état  $|J-J\rangle$ . Le facteur devant le terme  $\rho_M(t)$  représente le *taux d'émission spontanée collectif*

$$\Gamma_M = \gamma_0 (J+M)(J-M+1). \quad (4.42)$$

Celui-ci augmente au fur et à mesure du processus, atteint un maximum<sup>2</sup> en  $M = 0$  puis décroît vers 0 lorsque  $M = -J$ , comme illustré ci-dessous sur l'ensemble d'équations (4.41) récrit explicitement

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{d\rho_J(t)}{dt} = -\gamma_0 2J \rho_J(t) & \Gamma_M = [N \times 1]\gamma_0 \\ \frac{d\rho_{J-1}(t)}{dt} = \gamma_0 2J \rho_J(t) - \gamma_0(4J-2) \rho_{J-1}(t) & \Gamma_M = [(N-1) \times 2]\gamma_0 \\ \frac{d\rho_{J-2}(t)}{dt} = \gamma_0(4J-2) \rho_{J-1}(t) - \gamma_0(6J-6) \rho_{J-2}(t) & \Gamma_M = [(N-2) \times 3]\gamma_0 \\ \dots & \\ \frac{d\rho_0(t)}{dt} = \gamma_0 J(J+1) \rho_1(t) - \gamma_0 J(J+1) \rho_0(t) & \Gamma_M = [N/2 \times (N/2+1)]\gamma_0 \\ \dots & \\ \frac{d\rho_{-J+2}(t)}{dt} = \gamma_0(6J-6) \rho_{-J+3}(t) - \gamma_0(4J-2) \rho_{-J+2}(t) & \Gamma_M = [2 \times (N-1)]\gamma_0 \\ \frac{d\rho_{-J+1}(t)}{dt} = \gamma_0(4J-2) \rho_{-J+2}(t) - \gamma_0 2J \rho_{-J+1}(t) & \Gamma_M = [1 \times N]\gamma_0 \\ \frac{d\rho_{-J}(t)}{dt} = \gamma_0 2J \rho_{-J+1}(t) & \Gamma_M = 0. \end{array} \right. \quad (4.43)$$

Notons que le taux d'émission spontanée collectif  $\Gamma_M$  (éq. (4.42)) est proportionnel au nombre d'atomes dans l'état excité (donné par  $(J+M)$ ) et au nombre d'atomes dans l'état fondamental augmenté d'une unité (donné par  $(J-M+1)$ ). Ceci explique la valeur maximale pour  $M = 0$ , proportionnelle à  $N^2$ .

Nous pouvons en outre comprendre l'accélération de la cascade radiative comme suit : initialement, il n'y a aucune corrélation entre les atomes qui se trouvent dans l'état  $|ee\dots e\rangle$ . Le premier photon peut être émis par n'importe quel atome, de sorte qu'après émission, le système se retrouve dans l'état  $|J = N/2, M = N/2 - 1\rangle = (|gee\dots ee\rangle + |ege\dots ee\rangle + \dots + |eee\dots eg\rangle)/\sqrt{N}$ . La valeur moyenne de chaque moment dipolaire reste nulle dans ce cas, mais des corrélations entre les dipôles se manifestent : une cohérence de phase apparaît entre les oscillations et explique l'accélération de l'émission [12]. Nous présentons explicitement pour  $N = 2$  ce phénomène. Avant émission, les valeurs moyennes des opérateurs dipolaires, dont l'expression est donnée en (3.9), ainsi que les corrélations, sont bien nulles

$$\langle ee|\mathbf{D}_1|ee\rangle = \langle ee|\mathbf{D}_2|ee\rangle = 0 \quad (4.44)$$

$$\langle ee|\mathbf{D}_1\mathbf{D}_2|ee\rangle = 0. \quad (4.45)$$

Après émission d'un photon, nous avons par contre

$$\frac{1}{2}(\langle eg| + \langle ge|)\mathbf{D}_1(|eg\rangle + |ge\rangle) = \frac{1}{2}(\langle eg| + \langle ge|)\mathbf{D}_2(|eg\rangle + |ge\rangle) = 0 \quad (4.46)$$

$$\frac{1}{2}(\langle eg| + \langle ge|)\mathbf{D}_1\mathbf{D}_2(|eg\rangle + |ge\rangle) = \mathbf{d}^2, \quad (4.47)$$

que nous pouvons interpréter comme une oscillation en phase des dipôles atomiques.

Nous avons résolu de manière exacte le système d'équations différentielles (4.43) à l'aide de Mathematica. La solution s'écrit sous la forme d'une combinaison linéaire d'exponentielles. Connaissant

---

2. Lorsque  $N$  est pair, la valeur maximale du taux d'émission spontanée collective est en  $M = 0$ . Lorsque  $N$  est impair, la valeur maximale est en  $M = 1/2$ . Nous choisissons  $N$  pair par simplification.

$\rho_M(t)$  pour tout  $t$ , nous avons ensuite calculé le taux d'énergie rayonnée  $I(t)$  par le système. Celui-ci est défini par

$$I(t) = -\frac{d}{dt}\langle H_S \rangle = -\frac{d}{dt}\text{tr}_S(H_S \rho_S(t)) \quad (4.48)$$

où nous avons utilisé l'expression de la valeur moyenne d'un opérateur donné dans la section 1.3.2. En récrivant l'hamiltonien du système (3.10) en fonction de l'opérateur de spin collectif  $J_z$  comme

$$H_S = \frac{\hbar\omega_0}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_z^{(i)} = \frac{\hbar\omega_0}{2} J_z, \quad (4.49)$$

et en sachant que les états  $|JM\rangle$  sont vecteurs propres de la valeur propre  $M$  de  $J_z$  au vu de (4.38), nous avons

$$I(t) = -\frac{d}{dt} \sum_{M=-J}^J \langle JM | \frac{\hbar\omega_0}{2} J_z \rho_S(t) | JM \rangle = -\frac{\hbar\omega_0}{2} \sum_{M=-J}^J M \frac{d\rho_M(t)}{dt}. \quad (4.50)$$

Ainsi, à l'aide de l'équation (4.41) et de ses solutions générales, nous pouvons obtenir l'expression exacte de  $I(t)$ . Les graphiques sur la figure 4.3 représentent  $I(t)$  pour différents nombres d'atomes,  $N = 2, 4, 8$  et  $16$ . Nous comparons à chaque fois  $I(t)$  avec le taux d'énergie rayonnée par des atomes indépendants car distants ( $r/\lambda_0 \gg 1$ ). Pour des atomes très proches ( $r/\lambda_0 \ll 1$ ), nous constatons la formation d'un pulse d'énergie d'autant plus intense ( $I_{max} \propto N^2$ ) et étroit (largeur  $\propto 1/N$ ) que le nombre d'atomes  $N$  est grand. Ce phénomène porte le nom de superradiance.

## 4.2.2 Interactions dipolaires résultant de l'hamiltonien de déplacement de Lamb

Nous étudions ici la dynamique résultant de l'hamiltonien de déplacement de Lamb sur un temps court devant le temps typique de relaxation de la superradiance, ce qui nous permet de négliger pour l'instant l'effet du dissipateur dans l'équation maîtresse (3.56). Nous devons donc résoudre l'équation

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{i,j=1}^N \left[ \hbar \left( S_{ij}(\omega_0) \sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(j)} + S_{ij}(-\omega_0) \sigma_-^{(i)} \sigma_+^{(j)} \right), \rho_S(t) \right]. \quad (4.51)$$

L'hamiltonien de déplacement de Lamb (3.54) se divise en deux parties :

- Les termes pour lesquels  $i = j$  donnent la même contribution que dans le cas d'un atome unique (voir section 4.1). Comme précédemment, chacun de ces  $N$  termes peut donc être intégré à l'hamiltonien de chaque atome en tant que renormalisation de la fréquence propre atomique  $\omega_0$ .
- Les termes pour lesquels  $i \neq j$  sont par contre une nouvelle contribution traduisant les interactions dipolaires par le biais d'échange de photons virtuels<sup>3</sup> [12]. Nous montrons dans cette section que ces termes peuvent induire des déphasages entre les moments dipolaires atomiques et connecter le système à des états de plus basses symétries, rendant l'étude du phénomène de superradiance beaucoup plus complexe que celle réalisée dans le sous-espace symétrique de  $\mathcal{H}_S$  dans la section 4.2.1.

Nous décomposons dès lors  $H_{LS}$  en ces deux contributions

$$H_{LS} = \tilde{H}_{LS} + \Delta_{LS} \quad \text{avec} \quad \Delta_{LS} = \sum_{i=1}^N \Delta E_{LS} \sigma_z^{(i)}, \quad (4.52)$$

---

3. Des particules virtuelles sont des particules qui ne sont pas accessibles expérimentalement.

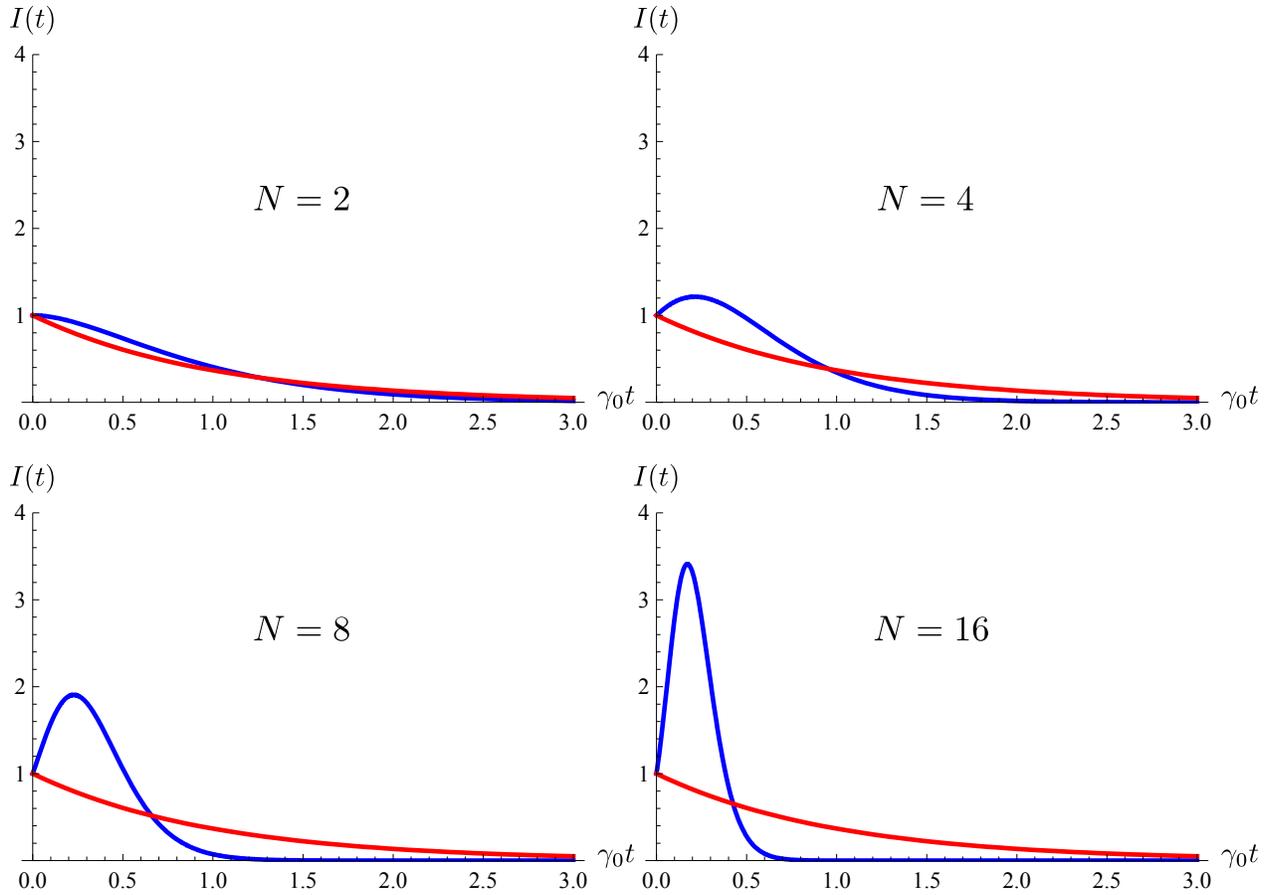


FIGURE 4.3 – En bleu : taux d'énergie rayonnée (normalisé par  $N\hbar\omega_0/2$ ) par la distribution atomique pour  $N = 2, 4, 8$  et  $16$ . En rouge : taux dans le cas  $r/\lambda_0 \gg 1$  correspondant à  $N$  émissions spontanées indépendantes. Dans le régime superradiant, nous constatons la formation d'un pulse d'énergie d'autant plus intense et étroit que le nombre d'atomes  $N$  est grand.

où  $\tilde{H}_{LS}$  est l'hamiltonien de déplacement de Lamb sans la partie donnant lieu à la renormalisation de la fréquence propre atomique que nous notons  $\Delta_{LS}$  et qui est simplement la généralisation de (4.6) au cas de  $N$  atomes. Dans le régime superradiant,  $k_0 r \ll 1$  ( $r/\lambda_0 \ll 1$ ) et  $\tilde{H}_{LS}$  peut être récrit [12,31] comme

$$\tilde{H}_{LS} = \sum_{j>i}^N \frac{d^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}^3} (1 - 3 \cos^2 \alpha_{ij}) \left( \sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(j)} + \sigma_-^{(i)} \sigma_+^{(j)} \right), \quad (4.53)$$

avec  $\alpha_{ij}$  l'angle entre  $\mathbf{d}$  et  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$  (voir figure 3.3). L'équation maîtresse (4.51) devient donc

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{j>i}^N \left[ \frac{d^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}^3} (1 - 3 \cos^2 \alpha_{ij}) \left( \sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(j)} + \sigma_-^{(i)} \sigma_+^{(j)} \right), \rho_S(t) \right]. \quad (4.54)$$

Nous décomposons  $\tilde{H}_{LS}$  comme suit

$$\tilde{H}_{LS} = \sum_{i,j=1}^N \hbar V_{ij} \quad \text{avec} \quad \hbar V_{ij} \equiv \frac{d^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}^3} (1 - 3 \cos^2 \alpha_{ij}), \quad (4.55)$$

où  $\hbar V_{ij}$  représente le couplage dipôle-dipôle en  $1/r_{ij}^3$  entre les atomes  $i$  et  $j$ . Bien que faible à longue distance au vu de la dépendance en  $1/r_{ij}^3$ , cette interaction ne peut cependant pas être négligée dans le régime superradiant où  $k_0 r \ll 1$ . En effet, si nous comparons le taux  $\gamma_0$  donné en (3.58) et le taux  $V_{ij}$  défini ci-dessus, nous obtenons

$$\frac{V_{ij}}{\gamma_0} \sim \left( \frac{1}{k_0 r} \right)^3 \quad (4.56)$$

de sorte que l'interaction dipolaire ne peut être négligée dans le régime superradiant. Nous allons dans la section 4.2.3 analyser l'effet des interactions dipolaires qui peuvent dans certaines situations nuire à ce phénomène. En effet, nous avons vu que lorsque la taille de la distribution atomique est bien plus petite que la longueur d'onde du rayonnement, le dissipateur est symétrique par permutation des atomes de sorte que l'évolution du système se déroule dans le sous-espace symétrique de  $\mathcal{H}_S$  et conduit à la superradiance. Lorsqu'on considère, en plus du dissipateur, l'hamiltonien de déplacement de Lamb, la condition  $r/\lambda_0 \ll 1$  ne suffit plus pour avoir la symétrie de permutation. Il faut en plus que la distribution atomique soit elle-même invariante par permutation. En résumé, pour obtenir la symétrie de permutation du liouvillien (défini en (2.75))

$$\mathcal{L}(\cdot) = -\frac{i}{\hbar} \left[ \tilde{H}_{LS}, \cdot \right] + \mathcal{D}(\cdot), \quad (4.57)$$

il faut que la distribution atomique soit invariante par permutation. Pour mieux le comprendre, les deux sections suivantes examinent successivement les cas d'une distribution non-invariante et invariante par permutation et leurs conséquences.

### Distribution atomique non-invariante par permutation

Comme annoncé plus haut, l'hamiltonien de déplacement de Lamb peut induire une évolution non-symétrique malgré le fait que la taille de la distribution atomique soit bien plus petite que la longueur d'onde du rayonnement. Montrons qu'en l'absence d'une telle symétrie de permutation, le phénomène de superradiance peut être altéré. Nous envisageons le cas  $N = 3$  où les atomes sont distribués de manière triangulaire comme sur la figure 4.4. Nous considérons dans cet exemple  $r_{12} \ll r_{23}, r_{13}$  de sorte que le couplage  $V_{12}$  soit largement supérieur aux deux autres, à savoir  $V_{13}$  et  $V_{23}$ . De cette manière, nous avons

$$\tilde{H}_{LS} = \sum_{j>i}^N \hbar V_{ij} \left( \sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(j)} + \sigma_-^{(i)} \sigma_+^{(j)} \right) \quad (4.58)$$

$$\approx \hbar V_{12} \left( \sigma_+^{(1)} \sigma_-^{(2)} + \sigma_-^{(1)} \sigma_+^{(2)} \right) \quad (4.59)$$

$$= \hbar V_{12} \left( \left( |e_1\rangle\langle g_1| \otimes \mathbb{1}_2^{(2)} \otimes \mathbb{1}_2^{(3)} \right) \left( \mathbb{1}_2^{(1)} \otimes |g_2\rangle\langle e_2| \otimes \mathbb{1}_2^{(3)} \right) \right) \quad (4.60)$$

$$+ \left( |g_1\rangle\langle e_1| \otimes \mathbb{1}_2^{(2)} \otimes \mathbb{1}_2^{(3)} \right) \left( \mathbb{1}_2^{(1)} \otimes |e_2\rangle\langle g_2| \otimes \mathbb{1}_2^{(3)} \right) \quad (4.61)$$

$$= \hbar V_{12} (|ege\rangle\langle gee| + |egg\rangle\langle geg| + |gee\rangle\langle ege| + |geg\rangle\langle egg|) \quad (4.62)$$

de sorte que dans le sous-espace des états  $|eeg\rangle, |ege\rangle, |gee\rangle$ ,  $\tilde{H}_{LS}$  prend la forme

$$\tilde{H}_{LS} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hbar V_{12} \\ 0 & \hbar V_{12} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.63)$$

Les vecteurs propres de cet hamiltonien sont notés  $|v_n\rangle$  avec  $n = 1, 2, 3$  et sont respectivement donnés par  $|eeg\rangle$ ,  $(|gee\rangle + |ege\rangle)/\sqrt{2}$  et  $(|gee\rangle - |ege\rangle)/\sqrt{2}$  de valeurs propres respectives  $v_n = 0$ ,  $\hbar V_{12}$  et  $-\hbar V_{12}$ . Ainsi, supposons que le système, initialement dans l'état  $|eee\rangle$ , émette un photon et se retrouve dans l'état symétrique

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|gee\rangle + |ege\rangle + |eeg\rangle). \quad (4.64)$$

À cause du couplage dipôle-dipôle, le système évolue sur un temps  $\tau \ll 1/\gamma_0$ , durant lequel la décroissance radiative n'a pas le temps d'agir, et son état est donné par

$$|\psi(\tau)\rangle = \sum_{n=1,2,3} \langle v_n | \psi(0) \rangle e^{-iv_n\tau/\hbar} |v_n\rangle \quad (4.65)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}}(e^{-iV_{12}\tau}|gee\rangle + e^{-iV_{12}\tau}|ege\rangle + |eeg\rangle), \quad (4.66)$$

Le déphasage apparu dans l'état du système ci-dessus peut être très important pendant le temps  $\tau$  lorsque  $k_0 r \ll 1$ , au vu de (4.56). Ainsi, avant que le processus radiatif n'ait lieu, des déphasages importants et non-identiques pour les différentes composantes ont largement le temps d'apparaître et induisent une perte de symétrie des états du système. Autrement dit, les interactions dipolaires non-symétriques connectent les états  $|JM\rangle$  à des états de plus faible symétrie caractérisés par de plus petites valeurs du nombre quantique de moment cinétique  $J$ . L'évolution du système ne peut plus s'effectuer uniquement dans le sous-espace-symétrique de  $\mathcal{H}_S$ . Des analyses plus complètes montrent que la superradiance est altérée dans de telles situations (voir section 4.2.3). Par exemple, pour une distribution d'atomes uniformément répartis dans une sphère, la superradiance disparaît au milieu de la cascade, lorsque  $M = 0$  [8]. D'autres situations ont été étudiées dans la référence [7].

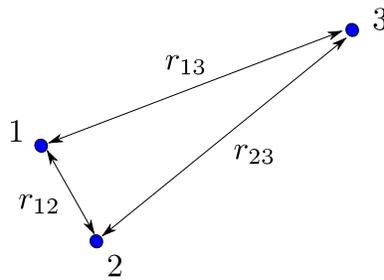


FIGURE 4.4 – Configuration de trois atomes non-invariante par permutation telle que considérée dans le texte, caractérisée par  $r_{12} \ll r_{23}, r_{13}$  de sorte que seul le couplage  $V_{12}$  soit significatif.

### Distribution atomique invariante par permutation

Nous reprenons l'exemple précédent afin de montrer que l'étude de phénomène de superradiance réalisée dans la section 4.2.1 reste valable malgré la présence des interactions dipolaires lorsque

la distribution atomique est invariante par permutation. Nous considérons à nouveau trois atomes distribués aux sommets d'un triangle équilatéral tel que  $r_{12} = r_{23} = r_{13}$  (voir figure 4.5) de sorte que les couplages soient tels que  $V_{12} = V_{13} = V_{23} = V$ . Dans le sous-espace des états  $|eeg\rangle$ ,  $|ege\rangle$  et  $|gee\rangle$ ,  $\tilde{H}_{LS}$  prend la forme

$$\tilde{H}_{LS} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & V & V \\ V & 0 & V \\ V & V & 0 \end{pmatrix} \quad (4.67)$$

Les vecteurs propres de cette matrice notés  $|v_n\rangle$  sont  $-(|eeg\rangle + |gee\rangle)/\sqrt{2}$ ,  $-(|eeg\rangle + |ege\rangle)/\sqrt{2}$  et  $(|eeg\rangle + |ege\rangle + |gee\rangle)/\sqrt{3}$  et ont pour valeurs propres  $v_n = -\hbar V$ ,  $-\hbar V$  et  $2\hbar V$ . Partant de la fonction d'onde

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|gee\rangle + |ege\rangle + |eeg\rangle), \quad (4.68)$$

le couplage dipôle-dipôle transforme l'état du système après un temps  $\tau$  en

$$|\psi(\tau)\rangle = \sum_{n=1,2,3} \langle v_n|\psi(0)\rangle e^{-iv_n\tau/\hbar} |v_n\rangle \quad (4.69)$$

$$= \frac{e^{-2iV\tau}}{\sqrt{3}}(|gee\rangle + |ege\rangle + |eeg\rangle), \quad (4.70)$$

ce qui ne change pas l'état physique du système, puisque celui-ci est défini à une phase globale près. Ainsi, l'état du système reste symétrique, malgré les interactions dipolaires. Les dipôles atomiques évoluent en phase.

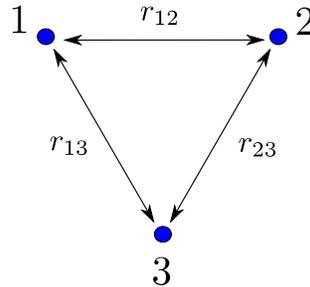


FIGURE 4.5 – Configuration de trois atomes invariante par permutation. Tous les couplages dipolaires sont identiques.

En conclusion de ces deux sections, l'étude du phénomène de superradiance réalisée dans la section 4.2.1 reste valable lorsque la distribution atomique est invariante par permutation, car dans ce cas les interactions dipolaires donnent lieu à un changement de phase global de l'état symétrique du système. Pour un ensemble de  $N$  atomes, où  $N$  est arbitraire, il existe au moins trois configurations qui donnent lieu à une symétrie de permutation. Deux d'entre elles sont illustrées sur la figure 4.6 : elles consistent en un ou deux anneaux formés par les atomes [7]. La troisième situation est celle où les atomes sont tous à la même position, comme c'est le cas dans un condensat de Bose-Einstein. Pourtant, celle-ci semble irréalisable au vu de la divergence de l'hamiltonien de déplacement de Lamb (4.53) lorsque  $k_0 r_{ij}$  tend vers 0. Cette divergence n'est en réalité qu'apparente. En effet, dans une telle limite, il est nécessaire de tenir compte des propriétés quantiques du mouvement atomique. Dans le cas d'un traitement quantique, l'interaction dipolaire doit être évaluée au moyen des fonctions

d'onde atomiques et la valeur du couplage prend alors une valeur finie [32]. Cependant, ce traitement sort du cadre de ce mémoire.

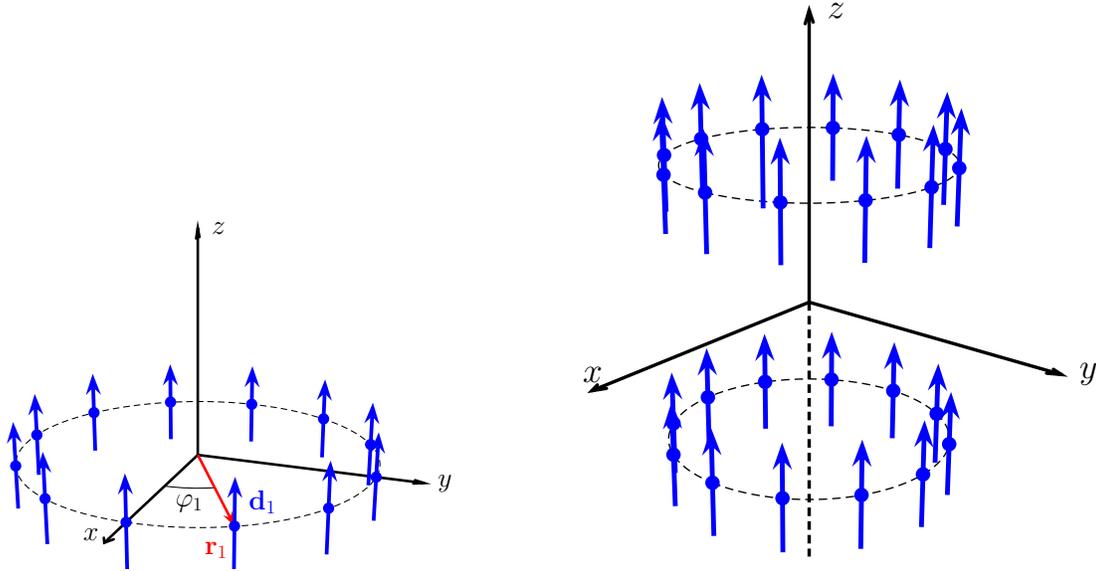


FIGURE 4.6 – Configurations de deux distributions atomiques invariantes par permutation. Les atomes sont disposés circulairement sur un ou deux anneaux, de sorte qu'ils possèdent tous le même environnement.

### 4.2.3 Effets des interactions dipolaires sur le phénomène de superradiance

La section précédente a mis en évidence l'impact des interactions dipolaires sur la symétrie des états lorsque la distribution atomique n'est pas invariante par permutation en étudiant le cas de trois atomes. Afin de quantifier les effets de ces interactions sur le phénomène de superradiance, nous avons résolu numériquement à l'aide de Mathematica l'équation maîtresse dans le régime superradiant prenant en compte les effets du dissipateur ainsi que ceux de l'hamiltonien de déplacement de Lamb

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \left[ \tilde{H}_{LS}, \rho_S(t) \right] + \gamma_0 \left( J_- \rho_S(t) J_+ - \frac{1}{2} \{ J_+ J_-, \rho_S(t) \} \right), \quad (4.71)$$

où  $\tilde{H}_{LS}$  est donné par

$$\tilde{H}_{LS} = \sum_{j>i}^N \frac{d^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}^3} (1 - 3 \cos^2 \alpha_{ij}) \left( \sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(j)} + \sigma_-^{(i)} \sigma_+^{(j)} \right). \quad (4.72)$$

Dans cette section, nous présentons le résultat de nos calculs numériques pour les intensités rayonnées par une distribution atomique de 6 atomes pour différentes valeurs du couplage dipôle-dipôle et nous les comparons avec le cas d'atomes distants ( $r/\lambda_0 \gg 1$ ) et celui des atomes proches ( $r/\lambda_0 \ll 1$ ) lorsque leurs distributions donnent lieu à une symétrie de permutation du liouvillien (4.57).

Pour résoudre l'équation maîtresse, nous avons généré aléatoirement une centaine de distributions atomiques comme celle illustrée sur la figure 4.7. Ensuite, pour chaque réalisation, nous avons calculé l'ensemble des distances inter-atomiques  $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ . Nous avons alors normalisé toutes les

distances en les divisant par la plus petite d'entre elles, de sorte qu'elles soient toutes plus grandes ou égales à 1. Nous avons par ailleurs calculé les valeurs des cosinus des angles  $\alpha_{ij}$  entre les moments dipolaires atomiques  $\mathbf{d}$  et les vecteurs  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ . Pour ce faire, nous avons considéré que tous les atomes ont un moment dipolaire  $\mathbf{d}$  orienté selon l'axe  $z$ . Ainsi, nous avons pu déterminer le facteur

$$F_{ij} \equiv \frac{1}{r_{ij}^3} (1 - 3 \cos^2 \alpha_{ij}) \quad (4.73)$$

intervenant dans l'expression de l'hamiltonien de déplacement de Lamb (4.72). Nous avons alors

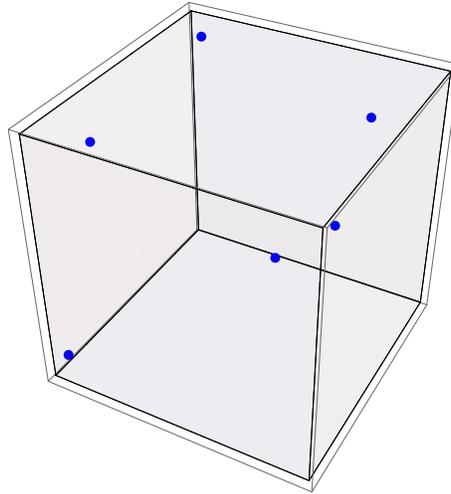


FIGURE 4.7 – Réalisation d'une distribution atomique de  $N = 6$  atomes.

implémenté l'équation maîtresse

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -i \left[ \sum_{j>i}^N V F_{ij} \left( \sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(j)} + \sigma_-^{(i)} \sigma_+^{(j)} \right), \rho_S(t) \right] + \gamma_0 \left( J_- \rho_S(t) J_+ - \frac{1}{2} \{ J_+ J_-, \rho_S(t) \} \right) \quad (4.74)$$

où  $V$  traduit le taux de relaxation par couplage dipolaire (qui a un facteur  $\hbar$  près, donne l'intensité du couplage dipolaire). Nous nous sommes assuré que les valeurs de  $V$  choisies soient telles que l'hypothèse  $k_0 r \ll 1$  du régime superradiant soit en bonne approximation satisfaite, au moyen de la relation (4.56), écrite avec tous les facteurs (excepté le facteur angulaire)

$$\frac{V_{ij}}{\gamma_0} = \frac{V}{r_{ij}^3 \gamma_0} = \frac{3}{4} \left( \frac{1}{k_0 r_{ij}} \right)^3. \quad (4.75)$$

Cette équation montre que les intensités de couplage élevées garantissent  $k_0 r \ll 1$  et par conséquent que l'expression du dissipateur en termes des opérateurs de spin collectif dans l'équation maîtresse (4.74) est valable. Cependant, les capacités numériques ne nous ont pas permis d'explorer des intensités de couplage trop élevées et donc des valeurs de  $k_0 r$  très faibles. Une solution aurait consisté à insérer l'expression du dissipateur exact (3.55). Néanmoins, l'équation maîtresse correspondante ne permet plus d'étudier la seule influence des interactions dipolaires sur le phénomène de superradiance, car entre en jeu celle de l'écart par rapport à la symétrie de permutation dans le dissipateur. De plus, la résolution d'une telle équation est numériquement beaucoup plus lourde. Par conséquent, nous nous sommes focalisé sur l'équation maîtresse (4.74) et l'avons résolue pour différentes valeurs de  $V$ . Nous présentons notre code Mathematica complet dans l'annexe D. Le tableau 4.1 reprend

$V/\gamma_0$	20	30	50	70	100	150	200
$k_0r$	0.33	0.29	0.24	0.22	0.19	0.17	0.15

TABLE 4.1 – Correspondances entre les valeurs de  $V/\gamma_0$  et celles de  $k_0r$ .

les valeurs de  $V$  utilisées dans nos simulations et les valeurs de  $k_0r$  correspondantes. Les solutions de l'équation maîtresse obtenues, nous avons calculé le taux d'énergie rayonnée (4.48) par la distribution atomique. Ces résultats sont représentés sur la figure 4.8 pour  $V/\gamma_0 = 20, 70$  et  $200$ . Nous avons mis en évidence pour la première fois une loi de puissance reliant la valeur maximale du taux d'énergie rayonnée à l'intensité du couplage dipolaire  $V$  (voir partie supérieure droite de la figure 4.8)

$$H \approx H_0 \left( \frac{V}{\gamma_0} \right)^{-\beta} \quad \text{avec} \quad H_0 = 12.905 \quad \text{et} \quad \beta = 0.766. \quad (4.76)$$

Nous constatons que le phénomène de superradiance est grandement affecté et que les courbes de taux d'énergie rayonnée tendent vers celles du cas d'atomes distants. Les résultats présentés permettent de conclure que le phénomène de superradiance est altéré de manière significative dès lors que la distribution atomique n'est pas symétrique par permutation, ce qui quantifie les résultats de [12] et corrobore les résultats de [7, 8].

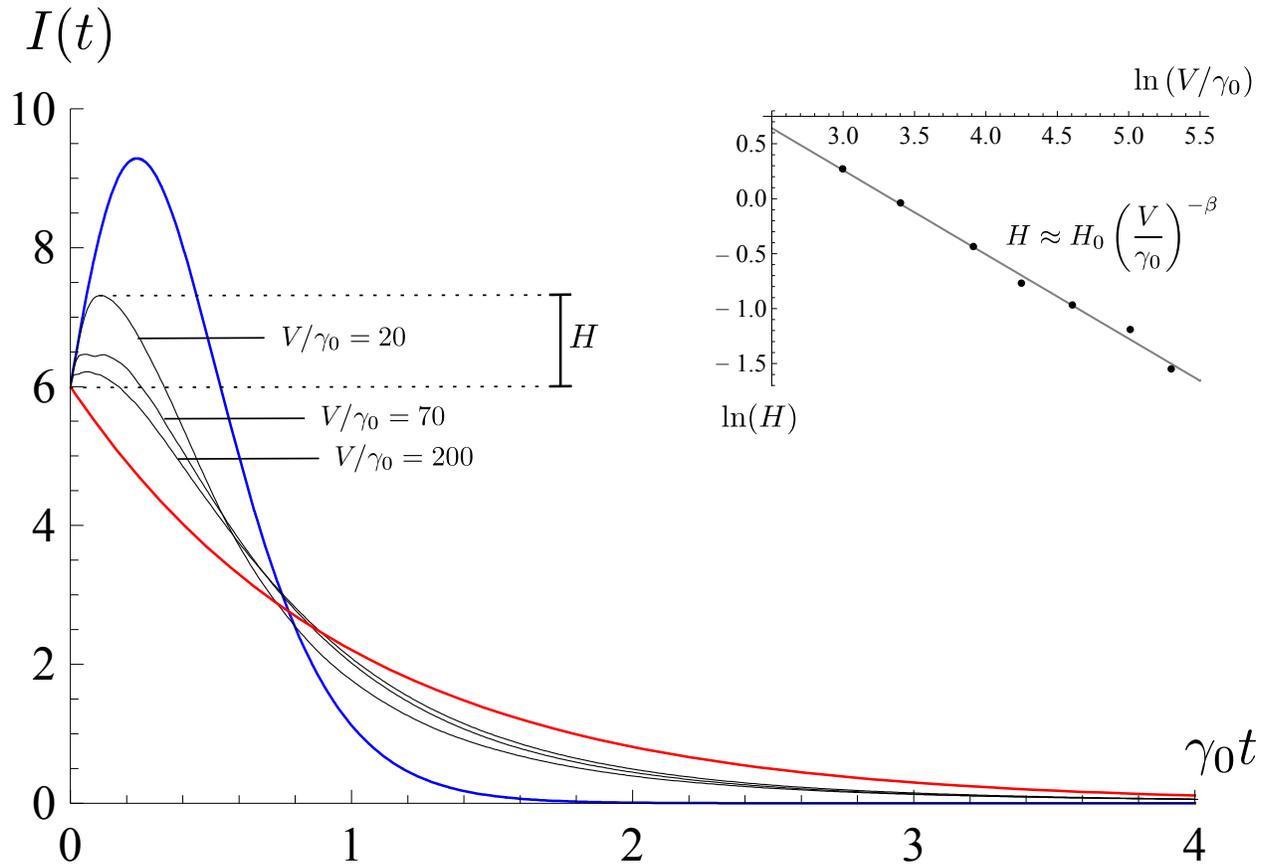


FIGURE 4.8 – En bleu : taux d'énergie rayonnée  $I(t)$  (normalisé par  $\hbar\omega_0/2$ ) par une distribution de 6 atomes symétrique par permutation, ou, de manière équivalente, sans couplage dipolaire. En rouge :  $I(t)$  dans le cas  $r/\lambda_0 \gg 1$  correspondant à  $N$  émissions spontanées indépendantes. En noir :  $I(t)$  avec interaction dipolaires pour  $V/\gamma_0 = 20, 70$  et  $200$ . Les courbes noires s'insèrent entre le régime superradiant, lorsque la distribution atomique est symétrique par permutation, et le régime des atomes distants. Plus le couplage est fort, plus le phénomène de superradiance est affecté. Le second graphique représente la loi de puissance que nous avons mise en évidence reliant la hauteur  $H$  du pic superradiant, mesuré à partir du taux d'énergie rayonnée en  $t = 0$ , et  $V/\gamma_0$ . Nous avons représenté la hauteur du pic  $H$  correspondant à la valeur  $V/\gamma_0 = 20$ .

# Conclusion

Dans ce travail de fin d'études, nous avons réalisé une synthèse originale de la théorie des équations maîtresses développée dans le but de rendre compte de la dynamique des systèmes quantiques dissipatifs. Nous l'avons ensuite appliquée à l'étude du phénomène d'émission collective de lumière, la superradiance, et avons examiné plus particulièrement les effets des interactions dipolaires sur celui-ci.

Au chapitre 1, nous avons introduit l'opérateur densité et avons montré qu'il est à même de décrire l'état d'un système ouvert. Nous avons démontré ses principales propriétés et avons reformulé les postulats de la physique quantique en termes d'opérateurs densité. Nous avons introduit et démontré l'intérêt de l'opération de trace partielle dans l'étude des systèmes composites.

Au chapitre 2, nous avons modélisé un système quantique dissipatif comme un sous-système d'un système hamiltonien plus grand englobant l'environnement. Cette modélisation a servi de point de départ pour la dérivation d'une équation maîtresse markovienne décrivant la dynamique du système dissipatif uniquement. Nous avons établi le domaine de validité des approximations de Born-Markov et séculaire réalisées au cours de la dérivation. Nous avons aussi présenté une démonstration de la décomposition de Schmidt de l'hamiltonien d'interaction, inexistante dans la littérature.

Au chapitre 3, nous avons particularisé le formalisme des équations maîtresses à un système couramment rencontré en optique quantique et formé d'un ensemble d'atomes couplés au champ électromagnétique dans l'état du vide. Nous avons déterminé l'expression des opérateurs de saut quantique et avons calculé la fonction de corrélations de l'environnement dans l'approximation dipolaire électrique. Ceci nous a permis d'établir la forme explicite de l'hamiltonien de déplacement de Lamb et du dissipateur intervenant dans l'équation maîtresse. Nous avons montré que les approximations réalisées au chapitre 2 sont parfaitement justifiées en optique quantique.

Enfin, au chapitre 4, nous avons résolu analytiquement et numériquement l'équation maîtresse obtenue précédemment dans différents régimes. Nous avons tout d'abord mis en évidence le phénomène d'émission spontanée d'un atome unique. Nous avons ensuite étudié le phénomène de superradiance qui se manifeste lorsqu'un ensemble d'atomes est confiné dans une région de l'espace de dimension largement inférieure à la longueur d'onde de la transition atomique excitée. Nous avons quantifié, par simulations numériques, les effets du couplage dipolaire entre atomes sur le phénomène de superradiance et avons montré que cette interaction altère sensiblement le taux d'énergie rayonnée. Nous avons mis en évidence une loi de puissance reliant la valeur maximale du taux d'énergie rayonnée par les atomes à l'intensité du couplage dipolaire.

Dans ce travail de fin d'études, nous avons, comme beaucoup d'auteurs [11, 12], traité le mouvement des atomes classiquement. Il s'avère toutefois qu'en présence d'atomes froids, caractérisés par de très

faibles vitesses, les effets de recul liés à l'émission de photons peuvent jouer un rôle considérable, rendant de ce fait nécessaire le traitement quantique du mouvement de leur centre de masse. Par conséquent, une extension naturelle de ce mémoire consiste à établir, suivant les mêmes étapes qu'exposées aux chapitres 2 et 3, la forme générale de l'équation maîtresse décrivant la dynamique dissipative d'une assemblée d'atomes *froids piégés* rayonnant de la lumière, en incluant les effets de recul. L'étude de ce système fait apparaître, en plus de la taille typique de la distribution atomique et de la longueur d'onde du rayonnement émis, une longueur caractéristique supplémentaire : l'extension du paquet d'onde atomique. Il en découle une grande variété de régimes à explorer, dans lesquels l'indiscernabilité des atomes ne peut plus être ignorée. L'influence de la statistique des atomes pourrait dès lors constituer un sujet d'étude intéressant. Des études ont déjà été réalisées dans ce sens et ont permis de mettre en évidence des phénomènes inédits tels que le blocage de l'émission spontanée d'atomes fermioniques piégés dans un réseau optique [33]. Notons néanmoins qu'à ce jour, les travaux sur le sujet font systématiquement appel à un développement perturbatif par rapport au paramètre de Lamb-Dicke caractérisant l'intensité des effets de reculs, ce qui réduit considérablement leur champ d'application. Une approche non-perturbative en fonction de ce paramètre manque encore à ce jour.

# Annexes

# Annexe A

## Schéma d'interaction

En schéma d'interaction, la dépendance temporelle est partagée entre les opérateurs et les états : les opérateurs évoluent au cours du temps selon l'hamiltonien libre et les états évoluent au cours du temps selon l'hamiltonien d'interaction. Si l'hamiltonien total du système composite se décompose comme  $H = H_S \otimes \mathbb{1}_B + \mathbb{1}_S \otimes H_B + H_{\text{int}}$ , où  $H_S$  et  $H_B$  sont respectivement les hamiltoniens du système libre et de l'environnement et  $H_{\text{int}}$  l'hamiltonien d'interaction, alors l'évolution libre d'un temps nul au temps  $t$  est décrite par un opérateur unitaire de la forme (1.4)

$$U(t) = e^{-iH_0 t/\hbar}, \quad (\text{A.1})$$

où  $H_0 = H_S \otimes \mathbb{1}_B + \mathbb{1}_S \otimes H_B$  est l'hamiltonien d'évolution libre. Nous définissons la fonction d'onde en schéma d'interaction  $|\psi_I(t)\rangle$  comme

$$|\psi_I(t)\rangle = U^\dagger(t)|\psi(t)\rangle, \quad (\text{A.2})$$

de manière à ce que la fonction d'onde  $|\psi_I(t)\rangle$  n'évolue plus que sous l'interaction. Nous vérifions facilement que cette fonction d'onde satisfait l'équation de Schrödinger en schéma d'interaction

$$i\hbar \frac{d|\psi_I(t)\rangle}{dt} = H_{\text{int},I}(t)|\psi_I(t)\rangle \quad (\text{A.3})$$

avec

$$H_{\text{int},I}(t) = U^\dagger(t)H_{\text{int}}U(t) = e^{iH_0 t/\hbar}H_{\text{int}}e^{-iH_0 t/\hbar}. \quad (\text{A.4})$$

Autrement dit, le schéma d'interaction consiste à « enlever » la dépendance temporelle des états due aux hamiltoniens libres  $H_S$  et  $H_B$  et à la transférer aux opérateurs  $O$  de manière à préserver leurs valeurs moyennes

$$\langle \psi(t)|O|\psi(t)\rangle = \langle \psi(t)|U(t)U^\dagger(t)OU(t)U^\dagger(t)|\psi(t)\rangle = \langle \psi_I(t)|O_I(t)|\psi_I(t)\rangle. \quad (\text{A.5})$$

En résumé, pour toute fonction d'onde  $|\psi(t)\rangle$  et tout opérateur  $O$ , nous avons les relations suivantes

Schéma de Schrödinger	Schéma d'interaction
$ \psi(t)\rangle$	$ \psi_I(t)\rangle = U^\dagger(t) \psi(t)\rangle$
$O$	$O_I(t) = U^\dagger(t)OU(t)$
$i\hbar \frac{d \psi(t)\rangle}{dt} = H \psi(t)\rangle$	$i\hbar \frac{d \psi_I(t)\rangle}{dt} = H_{\text{int},I}(t) \psi_I(t)\rangle$

## Annexe B

### Justification de l'hypothèse (2.14)

Nous justifions dans cette annexe l'hypothèse (2.14), que nous rappelons ci-dessous

$$\mathrm{tr}_B([H_{\mathrm{int}}(t), \rho_S(0) \otimes \rho_B]) = 0. \quad (\text{B.1})$$

Elle se réécrit en vertu de (2.56) comme

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}_B([H_{\mathrm{int}}(t), \rho_S(0) \otimes \rho_B]) &= \sum_{\alpha, \hbar\omega} \mathrm{tr}_B([e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega) \otimes B_\alpha(t), \rho_S(0) \otimes \rho_B]) \\ &= \sum_{\alpha, \hbar\omega} (e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega) \rho_S(0) \mathrm{tr}_B[B_\alpha(t) \rho_B] - \rho_S(0) e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega) \mathrm{tr}_B[\rho_B B_\alpha(t)]) \\ &= \sum_{\alpha, \hbar\omega} (e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega) \rho_S(0) - \rho_S(0) e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega)) \mathrm{tr}_B[B_\alpha(t) \rho_B] \end{aligned}$$

Puisque les opérateurs  $A_\alpha(\omega)$  et  $\rho_S(0)$  ne commutent pas nécessairement, il faut que la quantité  $\mathrm{tr}_B(B_\alpha(t) \rho_B) = \langle B_\alpha(t) \rangle_B$  soit nulle  $\forall \alpha$  pour que la supposition (B.1) soit vérifiée. Peut-on s'arranger pour que ce soit le cas? La réponse est oui. L'idée est la suivante : supposons que l'hamiltonien d'interaction soit

$$H'_{\mathrm{int}}(t) = \sum_{\alpha, \hbar\omega} e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega) \otimes B'_\alpha(t) = \sum_{\alpha, \hbar\omega} e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega) \otimes (B_\alpha(t) - \langle B_\alpha(t) \rangle_B) \quad (\text{B.2})$$

avec  $B'_\alpha(t)$  qui est tel que  $\mathrm{tr}_B(B'_\alpha(t) \rho_B) = 0$ . Nous avons

$$H'_{\mathrm{int}}(t) = H_{\mathrm{int}}(t) - \langle H_{\mathrm{int}}(t) \rangle_B \otimes \mathbb{1}_B \quad (\text{B.3})$$

et par construction

$$\langle H'_{\mathrm{int}}(t) \rangle_B = \langle H_{\mathrm{int}}(t) \rangle_B - \langle H_{\mathrm{int}}(t) \rangle_B = 0,$$

quelque soit la valeur de  $\langle B_\alpha(t) \rangle_B$ . Si nous pouvons utiliser  $H'_{\mathrm{int}}(t)$  à la place de  $H_{\mathrm{int}}(t)$ , la supposition (B.1) est justifiée. En faisant apparaître cet hamiltonien d'interaction dans l'expression de l'hamiltonien total en schéma d'interaction et en réarrangeant les termes, nous obtenons

$$\begin{aligned} H(t) &= H_S \otimes \mathbb{1}_B + \mathbb{1}_S \otimes H_B + H_{\mathrm{int}}(t) \\ &= H_S \otimes \mathbb{1}_B + \mathbb{1}_S \otimes H_B + H'_{\mathrm{int}}(t) + \langle H_{\mathrm{int}}(t) \rangle_B \otimes \mathbb{1}_B \\ &= (H_S + \langle H_{\mathrm{int}}(t) \rangle_B) \otimes \mathbb{1}_B + \mathbb{1}_S \otimes H_B + H'_{\mathrm{int}}(t). \end{aligned}$$

L'expression ci-dessus montre qu'il est possible d'obtenir un hamiltonien d'interaction  $H'_{\text{int}}(t)$ , dont la valeur moyenne dans l'état de l'environnement est nulle en ajoutant à  $H_S$  le terme

$$\langle H_{\text{int}}(t) \rangle_B = \sum_{\alpha, \hbar\omega} \langle B_\alpha(t) \rangle_B (e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega)), \quad (\text{B.4})$$

qui s'écrit en schéma de Schrödinger comme

$$\langle H_{\text{int}} \rangle_B = \sum_{\alpha, \hbar\omega} \langle B_\alpha \rangle_B A_\alpha(\omega). \quad (\text{B.5})$$

Étant donné que les opérateurs  $A_\alpha(\omega)$  sont des opérateurs d'annihilation qui enlèvent une énergie  $\hbar\omega$  à  $H_S$ , le terme ajouté ne fait que déplacer les niveaux d'énergie de  $H_S$  d'une quantité fonction de  $\omega$  et de l'état du bain  $\rho_B$ . L'hypothèse (B.1) est donc fondée dès lors que les nouveaux niveaux d'énergie de  $H_S$  sont utilisés. C'est l'approche que nous avons adoptée dans ce travail.

## Annexe C

### Calcul de l'intégrale (3.38)

Dans cette annexe, nous calculons l'intégrale angulaire (3.38),

$$\Omega_{ij}(\omega_k) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta (1 - \cos^2 \theta) e^{ikr_{ij}(\cos \varphi \sin \theta \sin \alpha_{ij} + \cos \theta \cos \alpha_{ij})}. \quad (\text{C.1})$$

à partir d'un résultat plus général obtenu par Neves et al. [34]. L'intégrale portant sur l'angle  $\varphi$  donne la fonction de Bessel  $J_0(kr_{ij} \sin \theta \sin \alpha_{ij})$  à un facteur  $2\pi$  près

$$\int_0^{2\pi} d\varphi e^{ikr_{ij} \cos \varphi \sin \theta \sin \alpha_{ij}} = 2\pi J_0(kr_{ij} \sin \theta \sin \alpha_{ij}), \quad (\text{C.2})$$

de sorte que  $\Omega_{ij}(\omega_k)$  se récrit

$$\Omega_{ij}(\omega_k) = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin^3 \theta J_0(kr_{ij} \sin \theta \sin \alpha_{ij}) e^{ikr_{ij} \cos \theta \cos \alpha_{ij}}. \quad (\text{C.3})$$

Le résultat de cette intégrale peut être trouvé en utilisant la formule générale [34] valable pour  $R \geq 0$

$$\boxed{\int_0^\pi d\theta \sin \theta e^{iR \cos \alpha_{ij} \cos \theta} P_n^m(\cos \theta) J_m(R \sin \alpha_{ij} \sin \theta) = 2i^{n-m} P_n^m(\cos \alpha_{ij}) j_n(R)} \quad (\text{C.4})$$

où  $P_n^m(x)$  est la fonction de Legendre

$$P_n^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) \quad (\text{C.5})$$

associée au polynôme de Legendre  $P_n(x)$

$$P_n(x) = \frac{1}{n! 2^n} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n, \quad (\text{C.6})$$

et où  $j_n(x)$  est la fonction de Bessel sphérique d'ordre  $n$  définie par

$$j_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{n+1/2}(x). \quad (\text{C.7})$$

Pour pouvoir utiliser le résultat (C.4), il est nécessaire de décomposer  $\sin^3 \theta = \sin \theta (1 - \cos^2 \theta)$  intervenant dans l'expression de  $\Omega_{ij}(\omega_k)$  en une somme de fonctions de Legendre. Il suffit en effet de remarquer que

$$(1 - \cos^2 \theta) = \frac{2}{3} \left[ P_0^0(\cos \theta) - P_2^0(\cos \theta) \right], \quad (\text{C.8})$$

puisque  $P_2^0(x) = (3x^2 - 1)/2$  et  $P_0^0(x) = 1$  de sorte que l'intégrale angulaire, au vu de (C.4), est donnée par

$$\Omega_{ij}(\omega_k) = \frac{4\pi}{3} \int_0^\pi d\theta \sin \theta e^{ikr_{ij} \cos \theta \cos \alpha_{ij}} \left[ P_0^0(\cos \theta) - P_2^0(\cos \theta) \right] J_0(kr_{ij} \sin \theta \sin \alpha_{ij}) \quad (\text{C.9})$$

$$= \frac{4\pi}{3} \left[ 2i^0 P_0^0(\cos \alpha_{ij}) j_0(kr_{ij}) - 2i^{2-0} P_2^0(\cos \alpha_{ij}) j_2(kr_{ij}) \right] \quad (\text{C.10})$$

$$= \frac{8\pi}{3} \left[ j_0(kr_{ij}) + j_2(kr_{ij}) P_2^0(\cos \alpha_{ij}) \right], \quad (\text{C.11})$$

avec

$$j_0(kr_{ij}) = \frac{\sin\left(\frac{\omega_k}{c} r_{ij}\right)}{\frac{\omega_k}{c} r_{ij}} \quad (\text{C.12})$$

$$j_2(kr_{ij}) = \left( \frac{3}{\left(\frac{\omega_k}{c} r_{ij}\right)^3} - \frac{1}{\frac{\omega_k}{c} r_{ij}} \right) \sin\left(\frac{\omega_k}{c} r_{ij}\right) - \frac{3}{\left(\frac{\omega_k}{c} r_{ij}\right)^2} \cos\left(\frac{\omega_k}{c} r_{ij}\right) \quad (\text{C.13})$$

$$P_2^0(\cos \alpha_{ij}) = \frac{1}{2} (3 \cos^2(\alpha_{ij}) - 1) \quad (\text{C.14})$$

## Annexe D

# Code Mathematica

Dans cette annexe, nous présentons le notebook Mathematica intitulé « Superradiance avec interaction dipolaire » qui contient le code que nous avons implémenté pour la résolution de l'équation maîtresse exposée au chapitre 4.

Dans la section « Définitions » du notebook, nous définissons les représentations matricielles des opérateurs nécessaires tels que les opérateurs de Pauli, de spin collectif, ..., ainsi que le liouvillien de l'équation maîtresse (4.74). La section suivante est consacrée à la résolution de cette équation maîtresse pour un nombre donné de réalisations de la distribution atomique. Nous y calculons le taux d'énergie rayonnée (voir équation (4.48)) moyenné sur l'ensemble des réalisations. Les deux sections suivantes, « Régime-superradiant : résolution de l'équation maîtresse sans couplage dipolaire dans la base  $|JM\rangle$  » et « Atomes distants : émissions spontanées indépendantes », traitent de la résolution des équations (4.40) et (4.27) correspondant aux deux régimes résultant de la seule dynamique du dissipateur (sans couplage dipolaire), afin d'obtenir à nouveau le taux d'énergie rayonnée. Enfin, nous comparons les différents taux d'énergie calculés dans la dernière section.

## Superradiance avec interaction dipolaire

### Définitions

```
(* opérateurs de Pauli à un atome *)
PauliX = {{0, 1}, {1, 0}};
PauliY = {{0, -i}, {i, 0}};
PauliZ = {{1, 0}, {0, -1}};
PauliP = (PauliX + i PauliY) / 2;
PauliM = (PauliX - i PauliY) / 2;

(* operateur identité à un atome *)
Id2 = IdentityMatrix[2];

(* nombre d'atomes *)
n = 6;

(* Prolongements des opérateurs de Pauli dans
l'espace d'Hilbert total du système de n atomes *)
σZ = Table[KroneckerProduct@@Table[If[i == j, PauliZ, Id2], {j, n}], {i, n}];
σP = Table[KroneckerProduct@@Table[If[i == j, PauliP, Id2], {j, n}], {i, n}];
σM = Table[KroneckerProduct@@Table[If[i == j, PauliM, Id2], {j, n}], {i, n}];

(* operateurs de moment cinétique collectif *)
JP = Sum[σP[[i]], {i, 1, n}];
JM = Sum[σM[[i]], {i, 1, n}];
JZ = Sum[σZ[[i]], {i, 1, n}];

(* Hamiltonien et dimension du système S avec ħ=1 et ω₀=1 *)
HS =  $\frac{1}{2}$  JZ;
dimHS = 2n;

(* Matrice densité réduite du système en schéma d'interaction *)
ρS = Table[ρ{i,j}[t], {i, dimHS}, {j, dimHS}];
vρS = Flatten[ρS];

(* Facteur de symétrie de la distribution atomique *)
F = Table[f{i,j}, {i, n}, {j, n}];

(* Hamiltonien de Lamb-Shift avec V l'intensité du couplage dipôle-dipôle *)
HLS = Sum[Sum[V F[[i, j]] (σP[[i]] . σM[[j]] + σM[[i]] . σP[[j]]), {j, i + 1, n}], {i, 1, n}];

(* Liouvillien *)
LρS = Simplify[i (HLS . ρS - ρS . HLS) + γ (JM . ρS . JP -  $\frac{1}{2}$  JP . JM . ρS -  $\frac{1}{2}$  ρS . JP . JM)];
vLρS = Flatten[LρS];
```

## 2 | Superradiance avec interaction dipolaire.nb

**Régime superradiant : résolution de l'équation maîtresse avec couplage dipolaire**

```

(* Coefficient d'Einstein de l'émission spontanée *)
γ0 = 1.0;

(* Intensité du couplage dipôle-dipôle *)
V0 = 10.0;

(* Taille typique de la distribution atomique *)
L = 1.;

(* Nombre de réalisation de la distribution atomique *)
nr = 100;

(* Liste des nr intensités calculées *)
MatInt = Table[0, {k, 1, nr}];

(* Moment dipolaire électrique atomique *)
dipmoment = {0, 0, 1};

For[k = 1, k ≤ nr, k++,

  (* Position des n atomes dans la boîte cubique de côté L *)
  positions = Table[RandomReal[{0, L}], {i, n}, {j, 3}];
  (*Print[Graphics3D[{PointSize[Large],Blue,Point[positions]},
    {Gray, Opacity[.05],Cuboid[{0,0,0},{L,L,L}],PlotRange→All,Boxed→True}]]; *)

  (* Matrice des vecteurs rij = ri - rj *)
  r = Table[{positions[[i, 1]] - positions[[j, 1]], positions[[i, 2]] - positions[[j, 2]],
    positions[[i, 3]] - positions[[j, 3]]}, {i, n}, {j, n}];

  (* Distance inter-atomique *)
  d = Table[Norm[r[[i]][[j]]], {i, n}, {j, n}];

  (* Normalisation des distances inter-atomiques par rapport à la plus grande distance *)
  max = L2;

  For[i = 1, i ≤ n, i++,
    For[j = 1, j ≤ n, j++, If[d[[i, j]] ≥ max && d[[i, j]] ≠ 0, max = d[[i, j]]
    ];
  ];

  dnorm = Table[ $\frac{d[[i, j]]}{max}$ , {i, n}, {j, n}];

  (* Calcul du facteur de symétrie *)
  F0 = Table[If[i ≠ j,  $\frac{1}{dnorm[[i, j]]^3} \left( 1 - 3 \frac{(r[[i]][[j]].dipmoment)^2}{r[[i]][[j]].r[[i]][[j]]} \right)$ , 0], {i, n}, {j, n}];

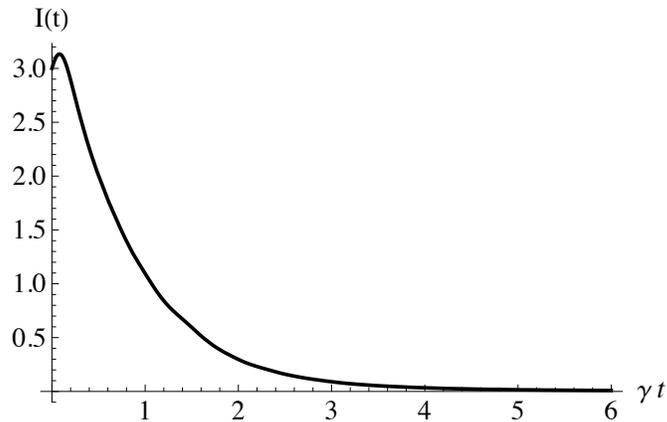
  (* Résolution de l'équation maîtresse avec conditions initiales ρij =
    δi1δj1 correspondant à l'état initial |ψ⟩ = |e e e ... e⟩ *)
  sol = NDSolve[Table[D[vρS[[i]], t] == vLρS[[i]] /. V → V0 /. γ → γ0 /.
    Thread[Flatten[F] → Flatten[F0]], {i, 1, Length[vρS]}] ~Join~ Table[
    (vρS[[i]] /. t → 0) == KroneckerDelta[i, 1], {i, 1, Length[vρS]}], vρS, {t, 0, 6}];

  (* Calcul de l'intensité rayonnée pour la réalisation k *)
  MatInt[[k]] = -D[Tr[HS.Flatten[ρS /. sol, 1]], t];

  (* Compteur *)
  If[Mod[k, 11] == 0, Print[k]];
]

```

```
(* Intensité rayonnée moyennée sur l'ensemble des réalisations *)  
Int[t] =  $\frac{\text{Sum}[\text{MatInt}[[k]], \{k, 1, \text{nr}\}]}{\text{nr}}$ ;  
graph = Plot[Evaluate[Int[t]], {t, 0, 6}, PlotRange -> All,  
  PlotStyle -> {Black, Thick}, AxesLabel -> { $\gamma t$ , "I(t)"}, LabelStyle -> {FontSize -> 15}]
```



```
datatab = Table[{i / 100.0, Re[Evaluate[Int[t]] /. t -> i / 100.0]}, {i, 0, 600}];  
Export[NotebookDirectory[] <> "Intensity_n6_V10_nr100.dat", datatab];
```

## 4 | Superradiance avec interaction dipolaire.nb

### Régime superradiant : résolution de l'équation maîtresse sans couplage dipolaire dans la base $|JM\rangle$

```
(* Nombre quantique de moment cinétique total
collectif J pour un état complètement symétrique *)
J = n / 2;

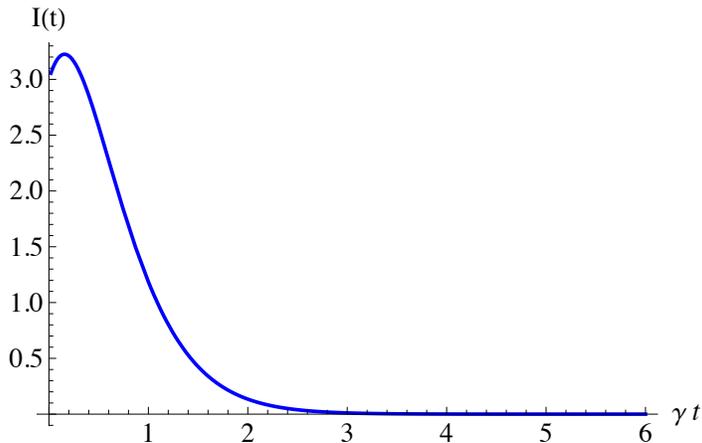
(* Liste des 2J+1 éléments de matrices  $\rho_{JM}(t)$  *)
 $\rho_{JM} = \text{Table}[\rho_{\{M\}}[t], \{M, -J, J\}];$ 

(* Liste des équations différentielles pour les éléments de matrices  $\rho_{JM}(t)$  *)
B = Table[If[M  $\neq$  J,
  {D[ $\rho_{JM}[[M+J+1]]$ , t] == - $\gamma$  (J+M) (J-M+1)  $\rho_{JM}[[M+J+1]]$  +
   $\gamma$  (J-M) (J+M+1)  $\rho_{JM}[[M+J+1+1]]$ , ( $\rho_{\{M\}}[t] /. t \rightarrow 0$ ) == 0},
  {D[ $\rho_{JM}[[M+J+1]]$ , t] == - $\gamma$  (J+M) (J-M+1)  $\rho_{JM}[[M+J+1]]$ , ( $\rho_{\{M\}}[t] /. t \rightarrow 0$ ) == 1}],
  {M, -J, J}];

(* Résolution des équations différentielles *)
U = DSolve[B, Table[ $\rho_{\{M\}}[t]$ , {M, -J, J}], t];

(* Calcul de l'intensité rayonnée *)
IntJM[t] =
  (-Sum[If[M  $\neq$  J, (M (- $\gamma$  (J+M) (J-M+1)  $\rho_{\{M\}}[t]$  +  $\gamma$  (J-M) (J+M+1)  $\rho_{\{M+1\}}[t]$ )) /. U,
  (M (- $\gamma$  (J+M) (J-M+1)  $\rho_{\{M\}}[t]$ )) /. U], {M, -J, J}] /.  $\gamma \rightarrow \gamma 0$ ][[1]];

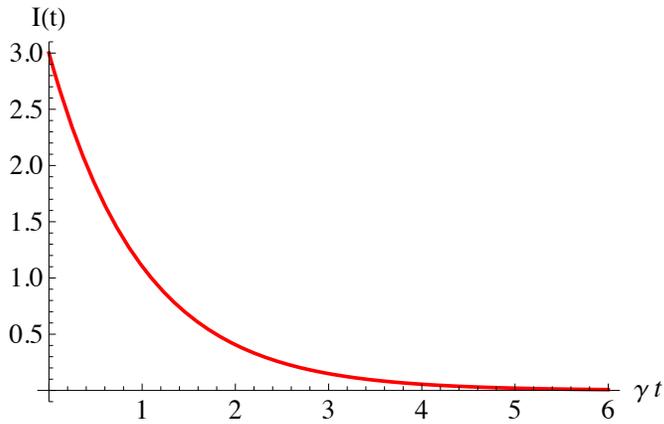
(* Graphique de l'intensité rayonnée *)
graphJM = Plot[Evaluate[IntJM[t]], {t, 0.02, 6}, PlotRange  $\rightarrow$  All,
  PlotStyle  $\rightarrow$  {Blue, Thick}, AxesLabel  $\rightarrow$  { $\gamma t$ , "I(t)"}, LabelStyle  $\rightarrow$  {FontSize  $\rightarrow$  15}]
```



### Atomes distants : émissions spontanées indépendantes

(\* Graphique de l'intensité rayonnée \*)

```
graphSpont = Plot[n γ Exp[-γ t] /. γ → γ0, {t, 0, 6}, PlotRange → All,
  PlotStyle → {Red, Thick}, AxesLabel → {γ t, "I(t)"}, LabelStyle → {FontSize → 15}]
```



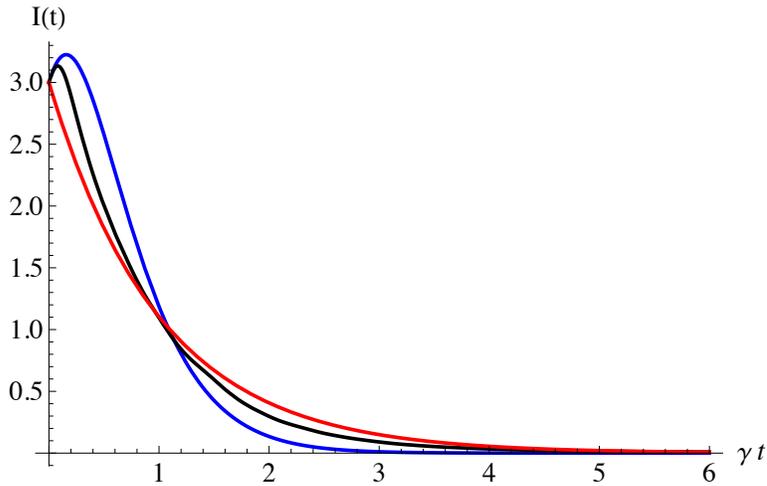
### Comparaison des intensités rayonnées

(\* Régime superradiant avec couplage dipolaire non-symétrique (noir)

Régime superradiant avec couplage dipolaire symétrique (bleu)

Atomes distants : émissions spontanées indépendantes (rouge) \*)

```
Show[{graphJM, graph, graphSpont}]
```



# Bibliographie

- [1] W. H. Zurek, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 715 (2003).
- [2] J. Dalibard, *Cohérence quantique et dissipation*, Formation Interuniversitaire de Physique (2006).
- [3] J. Preskill, *Lecture Notes for Physics 219 : Quantum Computation*, California Institute of Technology (2011).  
[http://www.theory.caltech.edu/~preskill/ph219/ph219\\_2011](http://www.theory.caltech.edu/~preskill/ph219/ph219_2011)
- [4] D. A. Lidar & K. B. Whaley, *Decoherence Free-Subspaces and Subsystems*, Springer (2003).
- [5] A. Beige, D. Braun & P. L. Knight, *New J. Phys.* **2**, 22 (2000).
- [6] R. H. Dicke, *Phys. Rev.* **93**, 99 (1954).
- [7] B. Coffey & R. Friedberg, *Phys. Rev. A* **17**, 1033 (1978).
- [8] F. Friedberg & S. R. Hartmann, *Phys. Rev. A* **10**, 1728 (1974).
- [9] E. B. Davies, *Commun. Math. Phys.* **48**, 119 (1974).
- [10] E. B. Davies, *Math. Ann.* **219**, 147 (1976).
- [11] H.-P. Breuer & F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press (2006).
- [12] M. Gross & S. Haroche, *Superradiance - An Essay on the Theory of Collective Spontaneous Emission*, *Phys. Rep.* **93**, 301 (1982).
- [13] M. Le Bellac, *Physique quantique, 2e édition*, CNRS Éditions (2007).
- [14] M. A. Nielsen & I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press (2000).
- [15] G. M. A. Paris, *The modern tools of quantum mechanics*, arXiv :1110.6815v1 (2011).
- [16] S. Kryszewski & J. Czechowska-Kryszk, *Master equation – tutorial approach*, arXiv :0801.1757v1 (2008).
- [17] V. Gorini, A. Kossakowski & E. C. G. Sudarshan, *J. Math. Phys.* **17**, 821 (1976).
- [18] A. Rivas, A. Douglas K. Plato, S. F. Huelga & M. B. Plenio, *New J. Phys.* **12**, 113032 (2010).
- [19] A. Fisher, *Lectures Notes on Open Quantum Systems*, University College London (2004).
- [20] K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications*, Springer (1996).
- [21] C. Cohen-Tannoudji, D. Guéry-Odelin, *Advances in Atomic Physics : An Overview*, World Scientific (2011).
- [22] R. Dumcke & H. Spohn, *Z. Phys. B* **34**, 419 (1979).
- [23] I. Bengtsson & K. Życzkowski, *Geometry of Quantum States*, Cambridge University Press (2006).

- 
- [24] G. Strang, *Introduction to Linear Algebra, 4th edition*, Wellesley - Cambridge Press (2009).
- [25] R. R. Puri, *Mathematical Methods of Quantum Optics*, Springer (2001).
- [26] R. Alicki & K. Lendi, *Lect. Notes. Phys.* **717**, Springer (2007).
- [27] A. Pinkus, *Journal d'Analyse Math.* **94**, 293 (2004).
- [28] G. Linblad, *Commun. Math. Phys.* **48**, 119 (1976).
- [29] W. Appel, *Mathematics for Physics and Physicists*, Princeton University Press (2008).
- [30] Y. Yamamoto, *Lectures Notes for AP387 : Quantum Optics and Measurements*, Stanford University (2011).  
<http://www.stanford.edu/~rsasaki/AP387/textslides.html>
- [31] G. S. Agarwal, *Quantum statistical theories of spontaneous emission and their relation to other approaches*, Springer Tracts In Modern Physics **70**, 1 (1974).
- [32] D. H. J. O'Dell, S. Giovanazzi & C. Eberlein, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 25 (2004).
- [33] R. M. Sandner, M. Müller, A. J. Daley & P. Zoller, *Phys. Rev. A* **84**, 043825 (2011).
- [34] A. A. R. Neves L. A. Padilha, A. Fontes, E. Rodriguez C. H. B. Cruz L. C. Barbosa & C. L. Cesar, *J. Phys. A : Math. Gen.* **39**, 293 (2006).