Mécanique quantique avancée

1999

TD1 : Introduction mathématique

Le but de ce TD est d'établir quelques propriétés très utiles de la gaussienne.

1 Formules de base

1. Vérifier les formules suivantes :

$$\begin{aligned} I_1 \equiv \int_R dx \exp\left(-\frac{ax^2}{2}\right) &= \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \,, \\ I_n(A,0) \equiv \int_{R^n} dx_1 \cdots dx_n \exp\left(-\frac{1}{2}\,{}^t\mathbf{x}A\mathbf{x}\right) &= \frac{(2\pi)^{n/2}}{\sqrt{\det A}} \,, \end{aligned}$$

   avec $\mathbf{x}$ un vecteur réel à n composantes et A une matrice réele $n \times n$ symétrique définie positive.

2. Montrer également

$$I_n(A,\mathbf{b}) \equiv \int_{R^n} dx_1 \cdots dx_n \exp\left(-\frac{1}{2}\,{}^t\mathbf{x}A\mathbf{x} + {}^t\mathbf{b}\mathbf{x}\right) = \frac{(2\pi)^{n/2}}{\sqrt{\det A}} \exp\left(\frac{1}{2}\,{}^t\mathbf{b}A^{-1}\mathbf{b}\right) \,, \tag{1}$$

   où $\mathbf{b}$ est un autre vecteur à n composantes.

3. Montrer que la forme quadratique ${}^t\mathbf{x}A\mathbf{x}$ dévient simplement ${}^t\mathbf{x}A_s\mathbf{x}$ avec $A_s = (A + {}^tA)/2$ pour une matrice A quelconque.

2 Utilisation de sources

Montrer que les fonctions de corrélation

$$\langle x_{k_1} \cdots x_{k_l} \rangle \equiv \int [dx]\, x_{k_1} \cdots x_{k_l} \ \exp\left(-\frac{1}{2}\,{}^t\mathbf{x}A\mathbf{x}\right) \,, \tag{2}$$

avec

$$[dx] \equiv \frac{dx_1 \cdots dx_n}{\int dx_1 \cdots dx_n \exp\left(-\frac{1}{2}\,{}^t\mathbf{x}A\mathbf{x}\right)} \tag{3}$$

la mesure normalisée, peuvent être calculées comme des dérivés de l'intégrale $I_n(A,\mathbf{b})$.

Que vaut $\langle x_{k_1} x_{k_2} \rangle$?

Que vaut $\langle x_{k_1} x_{k_2} \ \cdots \ x_{k_{2\ell+1}} \rangle$?

3 Le théorème de Wick

1. Montrer $\langle x_1 x_2 x_3 x_4 \rangle = {A^{-1}}_{k_1,k_2}\ {A^{-1}}_{k_3,k_4} + {A^{-1}}_{k_1,k_3}\ {A^{-1}}_{k_2,k_4} + {A^{-1}}_{k_1,k_4}\ {A^{-1}}_{k_2,k_3}$.

2. Etablir le résultat plus général qui porte le nom de théorème de Wick :

$$\begin{aligned} \langle x_{k_1} \cdots x_{k_l} \rangle &= \sum_{\text{Pairs des } k_i} {A^{-1}}_{k_{p_1},k_{p_2}}\ {A^{-1}}_{k_{p_3},k_{p_4}}\ \cdots\ {A^{-1}}_{k_{p_{(l-1)}},k_{p_l}} \\ &= \sum_{\text{Pairs des } k_i} \langle x_{k_{p_1}} x_{k_{p_2}} \rangle\ \langle x_{k_{p_3}} x_{k_{p_4}} \rangle\ \cdots\ \langle x_{k_{p_{(l-1)}}} x_{k_{p_l}} \rangle \,. \end{aligned} \tag{4}$$

3. Comme une application simple, considérer une gaussienne à une variable et calculer $\langle x^n \rangle$ avec le théorème de Wick et directement.

4 Perturbation

Montrer :

$$\int [dx]\ \exp\left(-\frac{1}{2}\,{}^t\mathbf{x}A\mathbf{x} - \lambda V(\mathbf{x})\right) = \exp\left(-\lambda V\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{b}}\right)\right)\ \left(\exp\left(\frac{1}{2}\,{}^t\mathbf{b}A^{-1}\mathbf{b}\right)\right)\Big|_{\mathbf{b}=\mathbf{0}} \tag{5}$$

avec $V(\mathbf{x}) = V(x_1, \cdots, x_n)$ un polynôme en x_i

5 La transformée de Fourier

On définit la transformée de Fourier d'une fonction $f(x)$ selon

$$\tilde{f}(k) = \int_R dx\ \exp(ikx)\, f(x) \tag{6}$$

1. Montrer que la transformée de Fourier de la convolution de deux fonctions

$$(f * g)(x) \equiv \int_R dy\ g(x-y) f(y) \tag{7}$$

   est simplement $(f \tilde{*} g)(k) = \tilde{f}(k)\tilde{g}(k)$.

2. Vérifier que la gaussienne est stable par convolution et expliciter sa transformée de Fourier.

6 Une relation utile

Montrer $\ln\det A = \mathrm{Tr}\ln A$ avec A est une matrice diagonalisable.

TD 2 : L'oscillateur harmonique par l'intégrale de chemin

Le but est de calculer de deux manières les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution de l'oscillateur harmonique en dimension 1 : par un calcul "direct", et avec la définition de l'intégrale de chemin.

Soit le Hamiltonien de l'oscillateur harmonique avec une force extérieure dépendante du temps $f(t)$:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} - qf(t) \; . \tag{8}$$

On a alors

$$\langle q''|U(t'',t')|q'\rangle = \int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''} \mathcal{D}q \; \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\, S[q]\right) \tag{9}$$

avec l'action Euclidienne

$$S[q] = \int_{t'}^{t''} dt \; \left(\frac{m\dot{q}^2}{2} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} - qf(t)\right) \; . \tag{10}$$

7 Première méthode

7.1 Considérations générales

1. Trouver l'équation qui determine la trajectoire classique du mouvement $q_{cl}(t)$ avec les conditiones initiale $q_{cl}(t') = q'$ et finale $q_{cl}(t'') = q''$.

2. Une trajectoire générique $q(t)$ qui joint les points $q(t') = q'$ et $q(t'') = q''$ peut-être écrite comme

$$q(t) = q_{cl}(t) + r(t) \tag{11}$$

avec $r(t') = r(t'') = 0$.

L'action (19) est une fonctionnelle quadratique de q. Montrer, de façon générale, que l'action quadratique s'écrit comme une somme de deux fonctionnelles séparées $S_0[q_{cl}]$ et $S_1[r]$.

Que vaut $S_0[q_{cl}]$?

Trouver $S_1[r]$ pour l'oscillateur harmonique forcé. Qu'a cette fonctionnelle de particulier ?

3. Le but est de calculer l'élément de matrice (9). Pour ce faire on va extraire la contribution de la trajectoire classique. Montrer

$$\langle q''|U(t'',t')|q'\rangle = \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_0[q_{cl}]\right) \; I \tag{12}$$

et expliciter I.

4. Quelle type d'intégrale est I ? Donner, de façon générale, le résultat de cette intégrale.

7.2 Résultats pour l'oscillateur harmonique forcé

1. Résoudre l'équation différentielle trouvée en 1.1.1 et déterminer la trajectoire classique si $f(t) = 0$ en dehors de l'intervalle temporel $[t', t'']$.

2. Calculer l'action classique $S[q_{cl}]$ et la mettre sous la forme :

$$
\begin{aligned}
S[q_{cl}] &= \frac{m\omega}{2\sinh(\omega(t''-t'))}\left((q'^2+q''^2)\ \cosh(\omega(t''-t'))-2q'q''\right)-\int_{t'}^{t''} du\ L(u)f(u) \\
&\quad -\frac{1}{2}\int_{t'}^{t''} dudv\ K(u,v)f(u)f(v)\ . \qquad (13)
\end{aligned}
$$

3. L'élément de matrice (9) pour un problème quadratique s'éxprime en fonction du déterminant de l'operateur quadratique. Calculer ce déterminant pour l'oscillateur harmonique en séparant la contribution divergente indépendante de ω. On utilisera la formule

$$\frac{\sinh x}{x}=\prod_{n>0}\left(1+\left(\frac{x}{\pi n}\right)^2\right)\ . \qquad (14)$$

4. En déduire l'élément de matrice

$$\langle q''|U(t'',t')|q'\rangle = N\sqrt{\frac{\omega(t''-t')}{\sinh(\omega(t''-t'))}}\ \exp\left(-\frac{1}{\hbar}S[q_c]\right)\ . \qquad (15)$$

5. Lorsque $\omega\to 0$ et $f\to 0$ on doit retrouver le résultat pour une particule libre. Cela nous permet de fixer la constant N. Calculer l'élement de matrice $\langle q''|U(t'',t')|q'\rangle$ pour la particule libre $S[q]=\int_{t'}^{t''} dt\ (m\dot{q}^2)/2$ avec des techniques usuelles de la mécanique quantique et avec l'intégrale de chemin. Trouver la valeur de N.

6. Finalement, déterminer l'expression de l'élément de matrice :

$$\langle q''|U(t'',t')|q'\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\omega(t''-t'))}}\ \exp\left(-\frac{1}{\hbar}S[q_{cl}]\right)\ . \qquad (16)$$

7. Prouver que l'élément de matrice (9) vérifie l'équation de Schrödinger.

8. Vérifier que si $\omega(t''-t')\ll 1$ et $f(t)$ varie que faiblement dans l'intervalle $[t',t'']$, on retrouve le résultat d'une particule libre couplée à une force externe.

8 Deuxième méthode*

On reprend la formule de définition de l'intégrale fonctionelle. On se limite dans cette partie au cas $f=0$, pour lequel :

$$\langle q''|U(t'',t')|q'\rangle = \lim_{n\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\epsilon}\right)^{n/2}\int\prod_{k=1}^{n-1} dq_k\exp(-S[q,\epsilon]) \qquad (17)$$

avec

$$S[q,\epsilon]=\sum_{k=1}^{n}\frac{m(q_k-q_{k-1})^2}{2\epsilon}+\frac{m\epsilon\omega^2}{2}\left(\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)^2\ , \qquad (18)$$

$q_0=q'$ et $q_n=q''$. On a posé $\hbar=1$.

1. Posant

$$K^{\alpha,\beta}(q,q')=\exp\left(-\frac{a}{2}(q^2+q'^2)+bqq'\right)$$

et

$$a=\frac{m}{\epsilon}+\frac{m\omega^2\epsilon}{4}\qquad b=\frac{m}{\epsilon}-\frac{m\omega^2\epsilon}{4}\ ,$$

montrer que

$$\langle q''|U(t'',t')|q'\rangle\rangle = \lim_{n\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\epsilon}\right)^{n/2}\int\prod_{j=1}^{n-1}dq_j\ \prod_{k=1}^{n}K^{a,b}(q_k,q_{k-1}) = \lim_{n\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\epsilon}\right)^{n/2}(K^{a,b})^{*n}(q'',q')\ .$$

2. Calculer $K^{a,b} * K^{a',b'}$.

3. Une paramétrisation utile est :

$$a = \rho\frac{\cosh\theta}{\sinh\theta} \qquad b = \rho\frac{1}{\sinh\theta}$$

avec $\rho > 0$. On notera alors $K^{a,b} \equiv K^{\rho,\theta}$. Montrer

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi\epsilon}}K^{\rho,k\theta} * K^{\rho,\theta} = \sqrt{\frac{m\sinh(k\theta)\sinh(\theta)}{\epsilon\rho\sinh((k+1)\theta)}}K^{\rho,(k+1)\theta}\ .$$

4. Conclure en retrouvant l'expression de $\langle q''|U(t'',t')|q'\rangle$ (avec $f = 0$) quand $\epsilon \to 0$.

TD 3 : La théorie de perturbation

Le but de ce TD est de montrer le mécanisme de la théorie de perturbation dans le formalisme de l'intégrale de chemin. Pour l'illustrer, on considère un oscillateur perturbé par un terme anharmonique et on fait un calcul à l'ordre le plus bas. L'action Euclidienne est

$$S[q] = \int_{t'}^{t''} dt \, \left(\frac{m\dot{q}^2}{2} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} + V(q) \right) \, . \tag{19}$$

Dans cette exemple, on prendra :

$$V(q) = \frac{\lambda}{4!} q^4$$

et par commodité $m = \omega = 1$. Soit U_λ l'opérateur d'évolution du problème avec $V \neq 0$, U_f celui de l'oscillateur ($V = 0$) avec une force externe f, et $U_0 = U_{f=0}$.

1. Montrer que :

$$\langle q''|U_\lambda(t'',t')|q'\rangle = \exp\left[-\int_{t'}^{t''} dt \, V\left(\frac{\delta}{\delta f(t)} \right) \right] \langle q''|U_f(t'',t')|q'\rangle \bigg|_{f=0} \tag{20}$$

2. Puis

$$\begin{aligned} \langle q''|U_\lambda(t'',t')|q'\rangle &= \langle q''|U_0(t'',t')|q'\rangle \\ &\times \left[1 - \frac{\lambda}{4!} \int_{t'}^{t''} dt \, \left(L^4(t) + 6K(t,t)L^2(t) + 3K^2(t,t) \right) + O(\lambda^2) \right] \end{aligned} \tag{21}$$

3. Peut-on retrouver ce résultat après dévélopper l'exponentielle $\exp(\lambda/4!\, q^4)$ et calculer les deux premiers termes $O(\lambda^0)$ et $O(\lambda^1)$ avec la version simple du théorème de Wick montré au TD1 ? Aide : Calculer $\langle q(t) \rangle$ pour le cas $\lambda = 0$.

   Calculer

$$\begin{aligned} \langle q^n \rangle &= \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} dq \, q^n \exp\left(-\frac{aq^2}{2} + bq \right) \\ N &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dq \, \exp\left(-\frac{aq^2}{2} + bq \right) \end{aligned} \tag{22}$$

   pour $n = 1, 2, 3, 4$. Conclure.

TD 4 : Mécanique quantique et mécanique statistique

Le but est d'étudier le rapport entre la mécanique quantique et la mecanique statistique.

9 Fonction de partition d'un système quantique

La fonction de partition d'un système quantique en contacte avec un rservoir à température T est

$$Z(\beta) = TrU = \int dq \, \langle q|U(\beta\hbar/2, -\beta\hbar/2)|q\rangle \, . \tag{23}$$

1. Calculer $Z(\beta)$ pour l'oscillateur harmonique forcé du TD2, en prenant une force extérieure périodique de période β : $f(t+\beta\hbar) = f(t)$.

2. Retrouver l'expression $Z(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta E_n)$ avec $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$ pour l'oscillateur libre et $E_n = \hbar\omega(n+1/2) - f^2/(2m\omega^2)$ pour l'oscillateur avec une force extérieure constante $f(t) = f$.

3. Calculer l'énergie libre du cas non forcé $f = 0$.

10 Statistique d'une corde classique fermée

Prenons une corde fermée sur un plan à $D = 2$. Nous parametrisons la position le long de la corde avec une coordonnée $0 < \tau < L$ et les "déplacements transverses" par une deuxième coordonnée $X(\tau)$ avec la condition au bord périodique $X(\tau) = X(\tau + L)$.

Posons la corde dans un potentiel extérieur harmonique de façon telle que son énergie a un terme élastique et un terme associé au potentiel extérieur :

$$E = \int_0^L d\tau \left[\frac{M}{2} \left(\frac{dX}{d\tau} \right)^2 + \frac{M\omega_0^2}{2} X^2 \right] \tag{24}$$

1. En utilisant le développement de Fourier de la fonction $X(\tau)$, écrire lénergie (24) en fonction des composants de Fourier X_s.

2. Calculer la fonction de partition et l'énergie libre de la corde.

3. À quoi resemble ce résultat ? Interpreter. Discuter les dimensions des paramètres M et ω_0.

11 Marche au hasard

Considérons une marche aléatoire sur une droite. Une particule part de 0 à l'instant 0. Trouver sa probabilité de présence en x à l'instant t. Comparer au propagateur libre en temps imaginaire.

TD 5 : L'effet d'un environnement

12 Fonction d'influence

1. Prendre un système quantique décrit par une coordonnée générique x. Trouver l'amplitude de probabilité A_{mn} que le système soit dans un état de fonction d'onde $\phi_m(x)$ à l'instant t_f sachant qu'il était dans un état de fonction d'onde $\psi_n(x)$ à l'instant initial t_i.

   Écrire la probabilité de transition $P_{n\to m} = |A_{mn}|^2$ comme une intégrale multiple qui fait intervenir le produit
$$U^*(x, t_f; x', t_i)U(x'', t_f; x''', t_i) \tag{25}$$

2. On prend maintenant un système qui est composé d'un système quantique de coordonnée q ("système q") en intéraction avec un autre système quantique de coordonnée Q ("système Q"). On appelera le système-Q "l'environnement". L'action du système totale est
$$S_{\text{TOT}}[q, Q] = S_o[q] + S[Q] + S_i[q, Q] \; . \tag{26}$$

   On suppose que quand $S_i = 0$ les états des systèmes q et Q peuvent être décrits par les fonctiones d'onde $\phi_k(q)$ et $\psi_p(Q)$.

   Initialement le système q est dans un état propre de l'énergie $\phi_n(q)$ et le système Q est dans un état $\psi_i(Q)$, Écrire la probabilité pour que q aille de l'état n à l'état m pendant que Q va de l'état initial i à l'état final f.

   Montrer que cette probabilité de transition s'écrit
$$P_{ni\to mf} = \int dq_i dq_i' dq_f dq_f' \; \phi_m(q_f)\phi_m^*(q_f')\phi_n^*(q_i)\phi_n(q_i') \int_{q_i}^{q_f} \mathcal{D}q \int_{q_i'}^{q_f'} \mathcal{D}q' e^{\frac{i}{\hbar}(S_o[q]-S_o[q'])} F[q, q']$$
   avec la "fonction d'influence" $F[q, q']$ donnée par
$$\begin{aligned} F[q, q'] = \int dQ_i dQ_i' dQ_f dQ_f' \qquad & \psi_f(Q_f)\psi_f^*(Q_f')\psi_i^*(Q_i)\psi_i(Q_i') \\ & \times \int_{Q_i}^{Q_f} \mathcal{D}Q \int_{Q_i'}^{Q_f'} \mathcal{D}Q' e^{\frac{i}{\hbar}(S[Q]-S[Q']+S_i[q,Q]-S_i[q',Q'])} \end{aligned}$$

3. Imaginer qu'il y a un nombre de systèmes indépendants qui interagissent avec le système q. Quelle sera la forme de la fonction d'influence ?

4. Montrer $F^*[q, q'] = F[q', q]$.

13 Un système linéaire

Prenons maintenant un cas résoluble: un oscillator harmonique couplé linéairement à un autre oscillateur harmonique :
$$L[q, Q] = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 + \frac{1}{2}M\dot{Q}^2 - \frac{1}{2}M\Omega_0^2 Q^2 + \gamma q Q \; . \tag{27}$$

La généralisation à un ensemble d'oscillateurs harmoniques qui constitueront l'environnement est simple.

1. Si l'oscillateur Q est dans l'état fondamental à l'instant initial, donner $\psi_i(Q)$.

2. L'état final de Q est supposé être inconnu. Cela veut dire qu'on fera une somme sur toutes les fonctiones d'onde $\psi_f(Q)$. Montrer qu'on pourra remplacer $\psi_f(Q_f)\psi_f(Q'_f)$ par $\delta(Q_f - Q'_f)$ dans l'expression pour la fonction d'influence.

3. Montrer que la fonction d'influence s'écrit

$$F[q,q'] = \exp\left(i\Phi(q,q')\right) \tag{28}$$

avec "la phase d'influence" Φ donnée par

$$i\Phi[q,q'] = -(2\hbar M\Omega)^{-1} \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^{t} dt' \,(q(t) - q'(t)) \, \left(q(t')e^{-i\Omega(t-t')} - q'(t')e^{i\Omega(t-t')}\right) \; . \tag{29}$$

4. Que peut-on dire sur l'intéraction entre $q(t)$ et $q'(t)$ qui a été générée ?

5. Quelle sera la fonction d'influence si on a un ensemble d'oscillateur couplés au système q ?

6. Comment faut-il modifier ce calcul si on veut utiliser un ensemble d'oscillateurs en équilibre à température T comme environnement ?

R. P. Feynman et F. L. Vernon, Ann. Phys. **24**, 118 (1963).

TD 6 : La matrice S

14 Matrice S

Calculer la matrice S pour une particule dans un potentiel $V(x) = a\delta(x)$. (Ce type de potentiel s'utilise, par exemple, pour approximer un potentiel atomique dans l'étude de la diffusion.)

Verifier le resultat avec un calcul qui n'utilise pas les intégrales de chemin*.

15 Couplage à un champ électromagnétique

Soit une particule de masse m, charge q en presence dans un champ électromagnétique $A_\mu(\vec{r}, t) = (A_0(\vec{r}, t), \vec{A}(\vec{r}, t)$.

1. Prenons $\vec{E} = \vec{0}$ et la discretization suivante du terme d'interaction avec le champ magnétique :

$$\frac{q}{c} \sum_{j=0}^{N} \left(\frac{\vec{r}_{j+1} - \vec{r}_j}{\epsilon} \right) \vec{A} \left(\frac{\vec{r}_{j+1} + \vec{r}_j}{2} \right) \quad . \tag{30}$$

   Montrer que l'évolution de la fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ au temps $t+\epsilon$ avec le propagateur obtenu avec le formalisme de l'intégrale de chemin, coincide avec l'évolution donnée par l'équation de Schrödinger.

2. Trouver le potentiel scalaire A'_0 et le potentiel vecteur $\vec{A}'$ associés à la transformation de jauge $\mathcal{L}' = \mathcal{L} + q/c \, d\Lambda/dt$.

3. Calculer le propagateur tranformé de jauge.

4. Montrer que l'équation d'évolution pour la fonction d'onde transformée conserve la forme usuelle :

$$\psi'(\vec{r}, t) = \int d^3r_1 \; U'(\vec{r}, t; \vec{r}_1, t_1) \psi'(\vec{r}_1, t_1) \tag{31}$$

   c'est-à-dire qu'elle reste invariante sous une transformation de jauge.

TD 7 : Les variables de Grassmann

16 Proprietés générales des variables de Grassmann

1. Écrire le polynome "commutant ou Grassmann pair" plus générale en θ_1, θ_2, deux variables de Grassmann. Donner la parité des coefficients.

2. Calculer $\partial/\partial\theta_1 P$ et $\partial/\partial\theta_2 P$.

3. Calculer $\int d\theta_1 P$ et $\int d\theta_2 \theta_2 P$ et vérifier $\int d\theta_i f(\{\theta_j\}) = \partial/\partial\theta_i f(\{\theta_j\})$.

4. Soit $\Phi(\theta) \equiv a_0 + a_1\theta$. Écrire $f(\Phi)$.

5. Trouver le Jacobian du changement de variables linéaire $\theta = \theta' a + b$ dans l'intégrale $I = \int d\theta f(\theta)$. Et si le changement était $\theta = a\theta' + b$

   Pour généraliser à la transformation linéaire $\theta_i(\{\theta'_i\}) = a_{ij}\theta'_j + b_i$ avec a_{ij} des nombres réels et b_i des nombres de Grassmann, commencer par l'exemple $\int d\theta_1 d\theta_2 f(\theta_1, \theta_2)$.

6. Calculer l'intégrale Gaussienne

$$I(A) = \int d\theta_1 d\overline{\theta}_1 \ldots d\theta_n d\overline{\theta}_n \exp\left(-\overline{\theta}_i a_{ij} \theta_j\right) \ . \tag{32}$$

17 Équations stochastiques classiques

Prenons l'équation de Langevin

$$\dot{x}_i = -\frac{\partial V(\vec{x})}{\partial x_i} + \xi_i \tag{33}$$

avec ξ_i un bruit blanc Gaussien $dP(\vec{\xi}) = \prod_{i=1}^N \prod_\tau d\xi_i(\tau) \ \exp\left(-\frac{1}{4k_BT}\sum_{i=1}^N \int_0^t d\tau \ \xi_i^2(\tau)\right)$.

1. Écrire la valeur moyenne d'un observable générique $O(x)$ comme une intégrale fonctionnelle sur $\vec{\xi}$ ou bien comme une variation d'une fonctionnelle génératrice.

2. En introduisant une identité, exprimer l'intégrale fonctionnelle comme une intégrale sur $\vec{x}$.

3. Peut-on "exponentier" le determinant ? Avec quelle type de variables ?

TD 8 : L'approximation semiclassique

18 Dynamique classique

1. Soit une particule de masse m dans un potentiel $V(x)$. Montrer que l'énergie de la particule est une constante sur la trajectoire classique.

2. Trouver une expression pour l'intervale $t'' - t'$, en fonction de E, pour que la particule aille de (x', t') à (x'', t'') en suivant la trajectoire classique.

3. Montrer que l'action classique est $S[x_{cl}] = -E(t'' - t') + \int_{x'}^{x''} dx \sqrt{2m(E - V(x))}$.

19 Limite semiclassique

On va étudier la dynamique de la particule dans la "limite semiclassique" $\hbar \to 0$.

1. Discuter cette approximation. Pour quels nombres quantiques sera-t-elle justifiée ?

2. Quelle est la trajectoire qui domine l'intégrale de chemin dans cette approximation ? Justifier.

3. Écrire l'action d'une trajectoire $x_{cl} + \delta x$, avec $\delta x(t'') = \delta x(t') = 0$, jusqu'à l'ordre quadratique en δx.

4. Écrire le propagateur $U(x'', t''; x', t')$ à ce même ordre. Comparer avec l'oscillateur harmonique usuel. Si le potentiel est $V(x) = V_0 + mgx + m\omega^2 x^2/2$, que peut-on dire de cette approximation ?

5. Quel est le determinant qu'il faut calculer pour trouver U si $V(x)$ est générique ?

6. Pour calculer le determinant, on diagonalise l'opérateur avec un changement de variables astusieux. Les détails dU calcul se trouvent en S. Coleman, en *The whys of subnuclear physics*, ed. A. Zichichi (Plenum, NY, 1979) p. 805; R. Rajaraman, Phys. Rep. **21**C, 227 (1975). On trouve

$$U(x'', t''; x', t') = \frac{\exp\left(i \int_{t'}^{t''} dx k(x) - \frac{E}{\hbar}(t'' - t')\right)}{\sqrt{2\pi i k(x'') k(x') \int_{x'}^{x''} \frac{dx}{(k(x))^3}}} \tag{34}$$

   avec le moment $k(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}/\hbar$.

7. Comparer l'approximation semi-classique avec la théorie de perturbations .

8. Partons maintenant de l'équation de Schrödinger. Écrire les fonctiones d'onde $\psi_{WKB}(x)$, dans les régions accessibles classiquement, en prenant la limite semiclassique.

9. Vérifier que le propagateur (34) peut-être aussi obtenu avec l'approximation WKB usuelle.* (Aide : commencer par inserer un ensemble complet de fonctiones propres de l'énergie dans la définition de U, approximer les fonctiones propres de l'énergie dans la limite semiclassique ...)

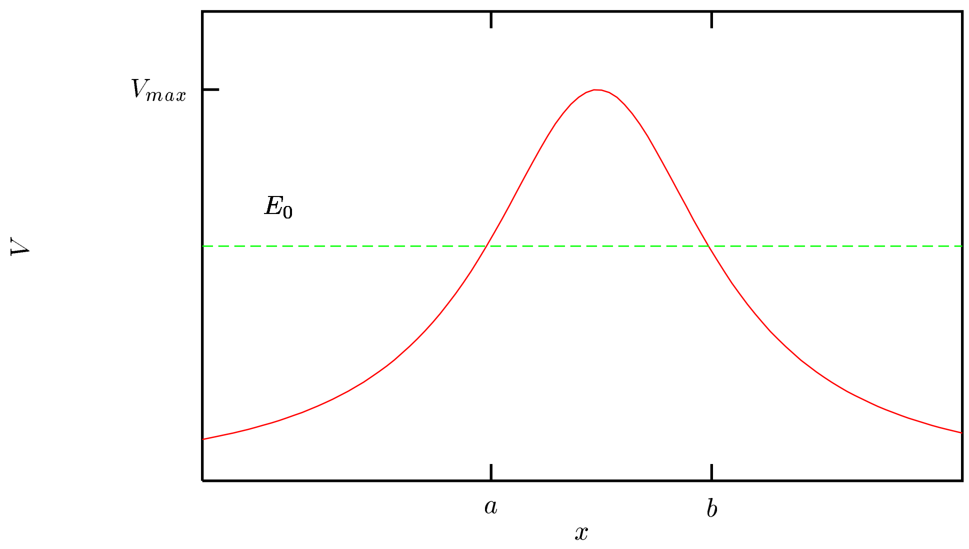

Figure 1: Barriŕe unidimensionnelle. La particule s'approche de la barrière du côté gauche, avec une énergie $E_o < V_{max}$. Les points de retournement classiques sont a et b.

19.1 Penetration d'une barrière

Nous allons maintenant étudier, à l'aide du propagateur (34), la probabilité pour que la particule passe à travers une barrière comme celle de la figure 1.

1. Montrer qu'une fonction d'onde WKB est propagée dans une autre function d'onde WKB avec (34). On suppose que le propagateur (34) peut être continué analytiquement dans les régiones interdites classiquement.

2. Si la particule incidente est localisée pret de x_1 au temps t_1, elle est décrite par le paquet d'ondes
$$\psi(x, t_1) = \int_0^\infty \phi(E)\, \psi_{WKB}(x, x_1, E) \tag{35}$$
où
$$\psi_{WKB}(x, x_1, E) = [k(x)]^{-1/2} \exp\left(i \int_{x_1}^x dy k(y)\right) . \tag{36}$$
Le poids $\phi(E)$ est concentré au tours de $0 \ll E_o \ll V_{max}$ et $\phi(E) = 0$, si $E > V_{max}$.

3. Comment peut-on calculer l'evolution temporel du paquet d'ondes ?

4. Quelle est la probabilité de transmision à travers la barrière ? Comment se compare ce résultat avec le résultat WKB ? En quoi est ce calcul plus simple ?

5. Interpréter le mouvement dans la région interdite classiquement comme un mouvement qui a lieu en temps complexe.