Mécanique quantique avancée

2001

Mécanique quantique avancée : TD n^o 1
Introduction mathématique
Octobre 2001

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

1 Formules de base

1. Vérifier les formules suivantes :

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

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

2. Montrer également

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

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

3. Montrer que, pour tout vecteur $\mathbf{x}$, 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

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

avec

$$[dx] \equiv \frac{dx_1 \cdots dx_n}{\int_{R^n} dx_1 \cdots dx_n \exp\left(-\frac{1}{2}\,{}^t\mathbf{x}A\mathbf{x}\right)} = \frac{dx_1 \cdots dx_n}{I_n(A,0)} \quad (3)$$

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 $\langle x_{k_1} x_{k_2} x_{k_3} x_{k_4} \rangle = {A^{-1}}_{k_1,k_2}\, {A^{-1}}_{k_3,k_4} + {A^{-1}}_{k_1,k_3}\, {A^{-1}}_{k_2,k_4} + {A^{-1}}_{k_1,k_4}\, {A^{-1}}_{k_2,k_3}$.

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

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

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 Application

Soient deux variables aléatoires x, y corrélées dont on suppose la loi de probabilité gaussienne. On trouve cinq valeurs moyennes suivantes :

$$\langle x \rangle = 0 \;\; \langle y \rangle = 0 \;\; \langle x^2 \rangle = 3 \;\; \langle xy \rangle = 1 \;\; \langle y^2 \rangle = 2 \tag{5}$$

En déduire les valeurs moyennes $\langle x^4 \rangle$, $\langle x^3 y \rangle$, $\langle x^2 y^2 \rangle$, $\langle x y^3 \rangle$, $\langle y^4 \rangle$.

Quelle est la distribution gaussienne qui conduit à ces valeurs ?

5 Perturbation

Montrer :

$$\int [dx] \, \exp\left(-\frac{1}{2}\,{}^t\mathbf{x}A\mathbf{x} - \lambda V(\mathbf{x})\right) = \exp\left(-\lambda V\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{b}}\right)\right) \left(\exp\left(\frac{1}{2}\,{}^t\mathbf{b}A^{-1}\mathbf{b}\right)\right)\Big|_{\mathbf{b}=\mathbf{0}} \tag{6}$$

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

6 La transformée de Fourier

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

$$\tilde{f}(k) = \int_R dx \, \exp(ikx)\, f(x) \tag{7}$$

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

$$(f * g)(x) \equiv \int_R dy \; g(x-y) f(y) \tag{8}$$

   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.

7 Une relation utile

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

Mécanique quantique avancée : TD n^o 2
L'oscillateur harmonique par l'intégrale de chemin
Octobre 2001

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 $f(t)$:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} - qf(t) \ . \tag{9}$$

On a alors, en temps imaginaire,

$$\langle q''|U(t'',t')|q'\rangle = \int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''} \mathcal{D}q \ \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\, S[q]\right) \tag{10}$$

avec l'action Euclidienne

$$S[q] = \int_{t'}^{t''} dt \ \left(\frac{m\dot{q}^2}{2} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} - qf(t)\right) \ . \tag{11}$$

Montrer que l'opérateur d'évolution en temps réel dévient (10) si l'on transforme $t \to -i\tau$.

Comment peut-on interpreter $Z = \mathrm{Tr}e^{-\beta H}$?

1 Première méthode

1.1 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

$$q(t) = q_{cl}(t) + r(t) \tag{12}$$

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

   L'action (20) 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 (10). Pour ce faire on va extraire la contribution de la trajectoire classique. Montrer

$$\langle q''|U(t'',t')|q'\rangle = \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_0[q_{cl}]\right) \ I \tag{13}$$

   et expliciter I.

4. Que represente I ?

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

1.2 Résultats pour l'oscillateur harmonique forcé

1. Résoudre l'équation différentielle trouvée en 1.1.2a 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 :

$$\begin{aligned} S[q_{cl}] &= \frac{m\omega}{2\sinh(\omega(t''-t'))}\left((q'^2+q''^2)\ \cosh(\omega(t''-t')) - 2q'q''\right) - \int_{t'}^{t''} du\ L(u)f(u) \\ &\quad -\frac{1}{2}\int_{t'}^{t''} dudv\ K(u,v)f(u)f(v)\ . \end{aligned} \tag{14}$$

3. L'élément de matrice (10) 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

$$\frac{\sinh x}{x} = \prod_{n>0}\left(1+\left(\frac{x}{\pi n}\right)^2\right)\ . \tag{15}$$

4. En déduire l'élément de matrice

$$\langle q''|U(t'',t')|q'\rangle = N\sqrt{\frac{\omega(t''-t')}{\sinh(\omega(t''-t'))}}\ \exp\left(-\frac{1}{\hbar}S[q_c]\right)\ . \tag{16}$$

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 :

$$\langle q''|U(t'',t')|q'\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\omega(t''-t'))}}\ \exp\left(-\frac{1}{\hbar}S[q_{cl}]\right)\ . \tag{17}$$

7. Prouver que l'élément de matrice (10) vérifie l'équation de Schrödinger.

2 Deuxième méthode*

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

$$\langle q''|U(t'',t')|q'\rangle = \lim_{n\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{n/2}\int\prod_{k=1}^{n-1} dq_k \exp(-\frac{1}{\hbar}S[q,\epsilon]) \tag{18}$$

avec

$$S[q,\epsilon] = \sum_{k=1}^{n}\frac{m(q_k-q_{k-1})^2}{2\epsilon} + \frac{m\epsilon\omega^2}{2}\left(\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)^2\ , \tag{19}$$

$q_0 = q'$ et $q_n = q''$. On posera $\hbar = 1$ dans la suite. Le facteur $\left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{n/2}$ tient compte de la normalisation de la mesure d'intégration.

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

2. Calculer $K^{a,b} * K^{a',b'}$. Est-ce qu'on trouve la forme (11) ?

3. Une paramétrisation utile pour pouvoir "iterer" le produit 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 $\epsilon\to 0$.

Mécanique quantique avancé e : TD n^o 3
La théorie de perturbation
Octobre 2000

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

$$S[q] = \int_{t'}^{t''} dt \, \left(\frac{m\dot{q}^2}{2} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} + V(q) \right) \, . \tag{20}$$

Dans cette exemple, on prendra :

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

et par commodité $m = \omega = 1$. Soit U_λ l'opé rateur d'é volution du problè me avec $V \neq 0$, U_f celui de l'oscillateur ($V = 0$) calculé au TD 2 avec une force externe f, et $U_0 = U_{f=0}$.

1. Montrer que :

$$\langle q''|U_\lambda(t'',t')|q'\rangle = \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \, V\left(\hbar \frac{\delta}{\delta f(t)} \right) \right] \langle q''|U_f(t'',t')|q'\rangle \Big|_{f=0} \tag{21}$$

2. Puis

$$\begin{aligned} \langle q''|U_\lambda(t'',t')|q'\rangle &= \langle q''|U_0(t'',t')|q'\rangle \\ &\times \left[1 - \frac{lambda}{4!\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \, \left(L^4(t) - 6\hbar K(t,t) L^2(t) + 3\hbar^2 K^2(t,t) \right) + O(\lambda^2) \right] \end{aligned} \tag{22}$$

3. Peut-on retrouver ce ré sultat aprè s dé vé lopper 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 thé orè me de Wick montré au TD1 ?

   Aide :

   Calculer $\langle q(t)\rangle$ pour le cas $\lambda = 0$. Dans quels cas ce ré sultat est nul ? Y a-t-il une symé trie associé e ? Laquelle ?

   Calculer

$$\begin{aligned} \langle q^n\rangle &= \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} dq \, q^n \exp\left(-\frac{aq^2}{2} + bq \right) \\ N &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dq \, \exp\left(-\frac{aq^2}{2} + bq \right) \end{aligned} \tag{23}$$

   pour $n = 1, 2, 3, 4$. Construire le thé orè me de Wick.

   Calculer $\langle q^2(t)\rangle$ et la fonction de corré lation connexe à temps é gaux $\langle q^2(t)\rangle - \langle q(t)\rangle^2$ pour le cas $\lambda = 0$.

   Quelle version du thé orè me de Wick faut-il utiliser dans ce cas ? Conclure.

Mécanique quantique avancée : TD n^o 4
l'approximation semiclassique et les symétries
Octobre 2001

Le but est d'étudier le rôle des symétries dans l'intégrale fonctionnelle.

Soit un problème générique

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{q}) \tag{24}$$

avec $\mathbf{p} = (p_1, \ldots, p_N)$ et $\mathbf{q} = (q_1, \ldots, q_N)$ le moment et la coordonnée d'une particule en dimension N.

1. Calculer l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution en utilisant l'approximation semiclassique (approximation de phase stationnaire).

   Comment peut-on tenir compte des corrections quantiques d'ordre supérieur ?

2. On étudiera d'abord l'intégrale multidimensionnelle

$$I = \int d^N q \exp\left(\mathbf{q}^2 - \xi(\mathbf{q}^2)^2\right) \ . \tag{25}$$

   (a) On calculera l'intégrale dans l'approximation semiclassique où l'on remplace $\mathbf{q}$ par $\mathbf{q}_{cl} + \sqrt{\hbar}\mathbf{x}$ avec $\mathbf{q}_{cl}$ la configuration "classique" qui minimise "l'action".

   Combien de configurations classiques y a-t-il ? On choisira une configuration classique non nulle $\mathbf{q}_{cl} \neq 0$.

   Quel est le résultat de l'intégrale dans cette approximation ?

   Calculer le Hessien $\delta^2 S/\delta q_i \delta q_j$ et les valeurs propres de cette forme quadratique. Y a-t-il de "modes zéro" ? Conclure.

   (b) On calculera maintenant l'intégrale de façon plus précise. Quelle est la symétrie de l'action ? Est-elle continue ? Transformer l'intégrale avec un changement de variables suggéré par cette symétrie. Faire maintenant une approximation semiclassique. Comparer avec le résultat de la question 2a.

3. Soit l'intégrale de chemin

$$\int \mathcal{D}\vec{q} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_E[\vec{q}]\right) \tag{26}$$

   avec $S_E[\vec{q}]$ une action invariante par rapport à la transformation T.

   (a) Exprimer l'affirmation précédente sous forme d'une équation.

   (b) Considerer la configuration $\tilde{\vec{q}}$ obténue comme transformation infinitésimale de la configuration $\vec{q}$. Écrire l'exemple d'une rotation en dimension 2.

   (c) Que peut-on conclure pour le terme quadratique du développement semi-classique quand $\delta\vec{q}$ correspond à la transformation précédente ?

Mécanique quantique avancée : TD n^o 5
La méthode variationelle Octobre 2001

On cherche à trouver une expression approchée pour l'énergie de l'état fondamentale d'un système quantique générique :

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + V(\hat{q}) \ . \tag{27}$$

1. Exprimer E_o en utilisant la fonction de partition $Z(\beta)$.

2. Prouver graphiquement l'inégalité

$$\frac{1}{2}\left(e^{-x_1} + e^{-x_2}\right) \geq \exp\left(-\frac{1}{2}(x_1 + x_2)\right) \ . \tag{28}$$

   Celle-ci est un cas particulier de l'inégalité de Jenssen :

$$\int d^d x f(g(\vec{x}))\, P(\vec{x}) \geq f\left(\int d^d x g(\vec{x})\, P(\vec{x})\right) \ , \tag{29}$$

   où $f''(\vec{x}) > 0$, $g(\vec{x})$ set une fonction réel et $P(\vec{x}) \geq 0$, $\forall \vec{x}$.

3. Dans la suite on posera $\hbar = 1$. Montrer

$$Z(\beta) = \langle \exp\left[-\left(S(q) - S_0(q)\right)\right]\rangle_0 \, W_0(\beta) \tag{30}$$

   où la moyenne $\langle \ \rangle_0$ répresente une intégrale de chemin normalisée avec poids $\exp(-S_0(q))$ et $S_0(q)$ est une action à choisir. Trouver $W_0(\beta)$.

4. Borner la fonction de partition en utilisant l'inégalité de Jenssen.

5. Trouver une borne supérieure pour l'énergie du fondamentale.

6. Comment peut-on optimiser la borne ?

Mécanique quantique avancée : TD n^o 6
L'effet d'un environnement
Novembre 2001

1 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
   $$U^*(x,t_f;x',t_i)U(x'',t_f;x''',t_i) \tag{31}$$

2. On prend maintenant un système qui est composé d'un système quantique de coordonnée q ("système q") en interaction avec un autre système quantique de coordonnée Q ("système Q"). On appellera le système-Q "l'environnement". L'action du système totale est
   $$S_{\text{TOT}}[q,Q] = S_o[q] + S[Q] + S_i[q,Q]\ . \tag{32}$$
   On suppose que quand $S_i = 0$ les états des systèmes q et Q peuvent être décrits par les fonctions 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
   $$F[q,q'] = \int dQ_i dQ'_i dQ_f dQ'_f \qquad \psi_f(Q_f)\psi^*_f(Q'_f)\psi^*_i(Q_i)\psi_i(Q'_i) \times\int_{Q_i}^{Q_f}\mathcal{D}Q\int_{Q'_i}^{Q'_f}\mathcal{D}Q' e^{\frac{i}{\hbar}(S[Q]-S[Q']+S_i[q,Q]-S_i[q',Q'])}$$

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

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

2 Un système quadratique

Prenons maintenant un cas résoluble: un oscillator harmonique couplé linéairement à un autre oscillateur harmonique :
$$L[q,Q] = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 + \frac{1}{2}M\dot{Q}^2 - \frac{1}{2}M\Omega_0^2 Q^2 + \gamma qQ\ . \tag{33}$$
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 fonctions d'onde $\psi_f(Q)$. Montrer que l'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

$$F[q, q'] = \exp\left(i\Phi(q, q')\right) \tag{34}$$

avec "la phase d'influence" Φ donnée par

$$i\Phi[q, q'] = -(2\hbar M\Omega)^{-1} \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^{t} dt' \left(q(t) - q'(t)\right) \left(q(t')e^{-i\Omega(t-t')} - q'(t')e^{i\Omega(t-t')}\right) . \tag{35}$$

4. Que peut-on dire sur l'interaction 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).

Mécanique quantique avancée : TD n^o 7
Mécanique quantique et mécanique statistique
Novembre 2001

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

1 Fonction de partition de l'oscillateur quantique

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

$$Z(\beta) = TrU = \int dq \, \langle q|U(\beta\hbar/2, -\beta\hbar/2)|q\rangle \,. \tag{36}$$

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 $f = 0$.

2 Spin quantique et modèle d'Ising classique

Considerons un spin quantique avec Hamiltonien

$$H = -K\sigma_x \tag{37}$$

avec $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ les matrices de Pauli habituelles :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{38}$$

1. Calculer l'état fondamental et le premier état excité.

2. Trouver une intégrale de chemin qui répresente l'élement de matrice de l'operateur evolution $\exp(-iHt)$ ($\hbar = 1$) entre deux états propres de σ_z, $|S_a\rangle$ et $|S_b\rangle$. Utiliser un ensemble complet d'états propres de σ_z.

3. Effectuer maintenant le prolongement analytique $t = -i\tau$ et calculer la “matrice de transfer” entre deux états états propres génériques de σ_z au temps $t = k$ et $t = k+1$.

4. Écrire la fonction de partition d'un modèle de Ising classique défini sur un espace unidimensionnel Que peut-on remarquer ?

5. Faire le lien entre les fonctions de corrélations des deux problèmes.

3 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 :

$$E = \int_0^L d\tau \left[\frac{M}{2} \left(\frac{dX}{d\tau} \right)^2 + \frac{M\omega_0^2}{2} X^2 \right] \tag{39}$$

1. En utilisant le développement de Fourier de la fonction $X(\tau)$, écrire l'énergie (39) en fonction des composants de Fourier X_s.

2. Exprimer la fonction de partition comme une intégrale Gaussienne. Calculer cette intégrale.

3. L'énergie libre s'exprime comme la somme de deux termes divergents. Montrer que $\partial \ln(Z)/\partial\omega_0^2$ est donné par une série convergente.

4. Montrer l'égalité

$$\sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\omega_0^2 + (2\pi s/L)^2} = \frac{L}{4\pi i} \int_C \frac{dz}{\omega_0^2 - z^2} \coth\left(\frac{Lz}{2}\right) \tag{40}$$

   pour un bon choix du contour C.

5. Calculer l'intégrale sur le plan complexe.

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

4 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.

Mécanique quantique avancée : TD n^o 8
Le formalisme holomorphe

Novembre 2001

Le but de ce TD est de construire l'intégrale de chemin pour la représentation holomorphe de l'oscillateur harmonique quantique.

1. Montrer que les opérateurs $\partial/\partial z$ et z, agissants sur les fonctions $f(z)$ d'une variable complexe z, vérifient la même relation de commutation que les opérateurs de création et destruction a et $a^\dagger$.

2. Écrire le Hamiltonien de l'oscillateur harmonique quantique $H = \hat{p}^2/2 + \omega^2 \hat{q}^2/2$ en utilisant les opérateurs $\partial/\partial z$ et z.

3. Trouver les valeurs propres et les fonctions propres de $H_0 = H - \omega/2$.

4. Calculer $U_0 f(z) = \exp(-H_0 t) f(z)$.

5. Montrer

$$\begin{aligned} \langle z|H_0|\overline{z}\rangle &= \omega z\overline{z}\exp(z\overline{z}) && (41)\\ \langle z|U_0|\overline{z}\rangle &= \exp(\exp(-\omega t)z\overline{z}) && (42) \end{aligned}$$

6. Montrer que les fonctions propres de l'oscillateur harmonique forment une base orthogonale en utilisant la définition de produit scalaire donnée dans les notes du cours. Utiliser le théorème de Wick.

7. Calculer $\int dz \delta(z) f(z)$, où $delta = (2\pi i)^{-1} \int d\overline{z} \exp(-z\overline{z})$.

8. Montrer que $\mathcal{I}(z, \overline{z}) = \exp(z\overline{z})$ agit comme l'identité construite avec la base orthonormée issue des fonctions propres de l'oscillateur harmonique.

9. Montrer qu'un noyau $O(z, \overline{z})$ de la forme

$$O(z, \overline{z}) = \sum_{mn} O_{mn} z^m \overline{z}^n = \exp(-z\overline{z})\langle z|O|\overline{z}\rangle \qquad (43)$$

   est associé à l'opérateur $\hat{O} = \sum_{mn} O_{mn} a^{\dagger m} a^n$.

10. Montrer la propriété

$$\langle z|O_2 O_1|\overline{z}\rangle = \int \frac{dz d\overline{z}}{2\pi i} \langle z|O_2|\overline{z}'\rangle \, e^{-z'\overline{z}'} \, \langle z'|O_1|\overline{z}\rangle \qquad (44)$$

11. On utilisera le formalisme et les définitions introduites précedément pour construire une réprésentation de l'évolution de l'oscillateur harmonique par l'intégrale de chemin. Calculer $\langle z|U_0^{(1)} U_0^{(0)}|\overline{z}\rangle$ et exprimer le résultat sous la forme

$$\int \frac{dz_1 d\overline{z}_1}{2\pi i} \exp(-S_\epsilon(z_1, \overline{z}_1)) \qquad (45)$$

12. Généraliser le résultat au produit $U_0^{(n)} \dots U_0^{(1)} U_0^{(0)}$ avec $n\epsilon = t'' - t'$.

13. Exprimer ce résultat dans la limite continue, $\epsilon \to 0$, $n \to \infty$, $n\epsilon = t'' - t'$.

Mécanique quantique avancée : TD n^o 9
Les variables de Grassmann Novembre 2001

1 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 $\int d\theta_2 P$ 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. On associe une varible de Grassmann independente $\overline{\theta}$ à chaque variable θ. $\overline{\theta}$ est une variable anticommutante. Écrire la fonction $F[\overline{\theta}, \theta]$ la plus générale. Calculer $\int d\theta d\overline{\theta} F[\overline{\theta}, \theta]$.
6. On cherche à calculer le Jacobian d'un changement de variables dans l'intégration.

   Considerons le changement linéaire $\theta \to \theta' = a\theta$ et $\overline{\theta} \to \overline{\theta}' = \overline{a}\theta$, avec a un nombre complexe et $\overline{a}$ son complexe conjugué. Calculer le Jacobien associé. Comparer avec

$$\frac{\partial(\overline{\theta}, \theta)}{\partial(\overline{\theta}', \theta')} = \begin{vmatrix} \frac{\partial\overline{\theta}}{\partial\overline{\theta}'} & \frac{\partial\theta}{\partial\theta'} \\ \frac{\partial\theta}{\partial\overline{\theta}'} & \frac{\partial\theta}{\partial\theta'} \end{vmatrix} \tag{46}$$

7. Calculer l'intégrale Gaussienne

$$I(A) = \int d\theta_1 d\overline{\theta}_1 \ldots d\theta_n d\overline{\theta}_n \exp\left(\overline{\theta}_i a_{ij} \theta_j\right) \ . \tag{47}$$

2 Construction de l'intégrale de chemin

1. Calculer le produit scalaire (f, g) entre deux fonctions de θ
2. Vérifier que $\delta(\theta) = \theta = \int d\overline{\theta} \ \exp(\overline{\theta}\theta)$.
3. Montrer que le noyau de l'identité est $I(\theta, \overline{\theta}) = 1 + \theta\overline{\theta} = \exp(\theta\overline{\theta})$.
4. Montrer $\theta\frac{\partial}{\partial\theta} I(\theta, \overline{\theta}) = \theta\overline{\theta} I(\theta, \overline{\theta})$.
5. Montrer qu'on peut associer les opérateurs θ et $\frac{\partial}{\partial\theta}$ à $a^\dagger$ et a.
6. Ecrire le Hamiltonian $H = \omega a^\dagger a$ dans la nouvelle représentation. Montrer $\langle\theta|H_O|\overline{\theta}\rangle = \omega\theta\overline{\theta}$ et $\langle\theta|U_O(t)|\overline{\theta}\rangle = \exp\left(-e^{-\omega t}\overline{\theta}\theta\right)$.
7. Construire l'intégrale de chemin pour $\langle\theta|U_O(t)|\overline{\theta}\rangle$.

3 Équations stochastiques classiques

Prenons l'équation de Langevin

$$\dot{x}_i = -\frac{\partial V(\vec{x})}{\partial x_i} + \xi_i \tag{48}$$

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 ?

Mécanique quantique avancée : TD n^o 10

L'approximation semiclassique:
Instantons et passage sous une barrière

Novembre 2001

1 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 $S[x_{cl}] = -E(t'' - t') + \int_{x'}^{x''} dx \sqrt{2m(E - V(x))}$.

2 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).

7. Une autre méthode est de passer a une description de temps discret et d'utiliser la ré currence

$$p_j = \left(2 - \frac{\epsilon^2 V_j''}{m}\right) p_{j-1} - p_{j-2} \quad (49)$$

$$p_1 = 2 - \frac{\epsilon^2 V_1''}{m} \quad (50)$$

$$p_0 = 1 \quad (51)$$

entre les determinants des matrices $j \times j$.

Si on défini $\phi(t) = \epsilon p_j$, l'équation sur ϕ dévient

$$\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} + \frac{V''(x_{cl}(t))}{m}\phi(t) \quad (52)$$

avec les conditions aux bords $\phi(0) = 0$, $\dot{\phi}(0) = 1$.

8. Montrer le résultat

$$U(x'',t'';x',t') = \frac{\exp\left(i\int_{t'}^{t''} dx k(x) - i\frac{E}{\hbar}(t''-t')\right)}{\sqrt{2\pi i k(x'')k(x')\int_{x'}^{x''}\frac{dx}{(k(x))^3}}} \tag{53}$$

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

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

10. 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.

11. Vérifier que le propagateur (53) 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 ...)

2.1 Instantons

On calculera l'énergie du fondamentale d'une particule de masse $m=1$ dans un potentiel en double puits

$$V(q) = \frac{1}{g^2}\tilde{V}(x) \tag{54}$$

avec

$$\tilde{V}(x) = \frac{\omega^2}{8a^2}(x^2-a^2)^2 \qquad x = gq \tag{55}$$

1. Suivre le comportement du potentiel quand $g \to 0$.

2. Écrire la fonction de partition.

3. Établir l'équation du point col. Interpréter cette équation d'un point de vue mécanique.

4. Quelles sont les solutions stationnaires ? Calculer leurs actions.

5. Vérifier que les "instantons"

$$x = a\tanh\left(\pm\frac{\omega\tau}{\sqrt{2}}\right) \tag{56}$$

sont aussi solutions de l'équation du point col.

6. Étudier ces fonctions graphiquement.

7. Peut-on avoir une solution du point col avec un instanton isolé ?

8. On utilisera l'approximation du gaz dilué d'instantons pour estimer l'énergie du fondamentale.

   Exprimer la fonction de partition comme une série.

   Relier la contribution avec n paires instanton antiinstanton avec celle d'un seul pair et resommer cette série.

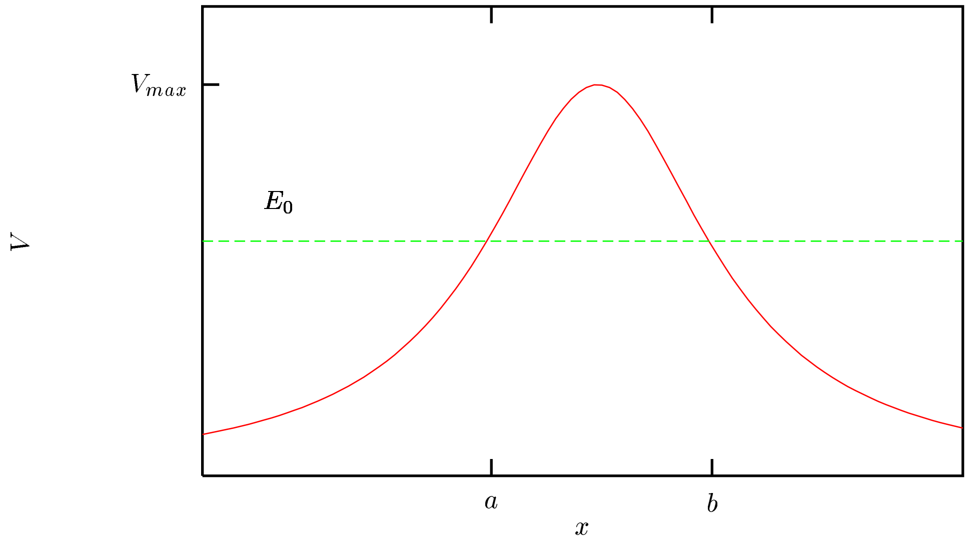

Figure 1: Barriŕe unidimensionnelle. La particule s'approche de la barrière du côté gauche, avec une énergie $E_o < V_{max}$. Les points de retournement classiques sont a et b.

2.2 Penetration d'une barriè re

Nous allons maintenant étudier, à l'aide du propagateur (53), 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 (53). On suppose que le propagateur (53) 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
$$\psi(x, t_1) = \int_0^\infty \phi(E)\, \psi_{WKB}(x, x_1, E) \tag{57}$$
où
$$\psi_{WKB}(x, x_1, E) = [k(x)]^{-1/2} \exp\left(i \int_{x_1}^x dy k(y)\right) . \tag{58}$$
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.