



Introduction à l'intégrale de chemin et applications

Alain Comtet

Laboratoire de Physique Théorique et Modèles Statistiques
Université Paris-Sud, Orsay
&
Université Pierre et Marie Curie, Paris

27 mars 2012

Table des matières

1 Mécanique quantique	1
1.1 Définition du propagateur de Feynman	1
1.2 Expression du propagateur de la particule libre	3
1.3 Construction générale du propagateur	3
1.4 Propriétés du propagateur	6
1.5 Propagateur euclidien	9
2 Fonctions de corrélation quantiques, oscillateur harmonique	11
2.1 Expression d'éléments de matrice dans la représentation de Heisenberg	11
2.2 Etude de l'amplitude vide-vide	13
2.3 Calcul de $Z(j)$ pour l'oscillateur harmonique	16
2.4 Théorème de Wick	18
3 Méthodes semi-classiques	23
3.1 Fonction d'onde et trajectoires classiques	23
3.2 Calcul du propagateur semi-classique	24
3.3 Expression du propagateur semi-classique en dimension 1	27
3.4 Propagateur dans l'espace E	30
3.5 Effet tunnel-Etude du double puits	34
3.6 Approximation du gaz dilué	36
3.7 Calcul du déterminant : généralités	36
3.8 Evaluation du déterminant dans l'approximation du gaz dilué	37
3.9 Méthode de Laplace et méthode de la phase stationnaire	39
4 Applications à la physique des polymères	41
4.1 Modélisation d'un polymère comme marche aléatoire	41
4.2 Polymère dans un potentiel	44
4.3 Elasticité des biomolécules	46
4.3.1 Modèle gaussien discret	46
4.3.2 Modèle du ver	49
5 Introduction au mouvement Brownien	51
5.1 Histoire	51
5.1.1 Physique	51
5.1.2 Mathématiques	52
5.1.3 Théorie de la spéculation	53
5.2 Définition d'une marche aléatoire	53

5.3	Marche aléatoire sur réseau	54
5.3.1	Autre dérivation	56
5.3.2	Programme de simulation	57
5.4	Limite continue	57
5.4.1	Théorème	59
5.5	Notions de processus aléatoire	59
5.5.1	Probabilités conditionnelles	60
5.5.2	Processus de Markov	60
5.5.3	Equation de Chapman-Kolmogorov	61
5.5.4	Processus aléatoire stationnaire	61
5.5.5	Théorème de Doob	61
5.6	Exemples de processus stochastiques gaussiens	63
5.6.1	Processus de Wiener	63
5.6.2	Processus d'Ornstein-Uhlenbeck	64
5.6.3	Bruit blanc	64
5.6.4	Construction de $W(t)$ comme processus	65
6	Intégrale de Wiener et formule de Feynman Kac	67
6.1	Equation de la diffusion, formalisme opératoire	67
6.2	Mesure de Wiener	68
6.3	Mouvement brownien avec absorption-formule de Feynman-Kac	70
6.4	Formule de Feynman-Kac	71
7	Équation de Langevin et Fokker-Planck	73
7.1	Introduction	73
7.2	Représentation fonctionnelle des mesures gaussiennes	75
7.3	Lemme	76
7.4	Equation de Langevin	76
7.5	Equation de Fokker-Planck	77
7.6	Solution d'équilibre	79
7.7	Relation avec l'équation de Schrödinger en temps imaginaire	80
7.8	Propriété du hamiltonien H_+ et supersymétrie	81
7.9	Application	82
7.9.1	Processus de Wiener	82
7.9.2	Processus d'Ornstein-Uhlenbeck	83
7.9.3	Processus bistables	84
7.10	Représentation fonctionnelle de $P(x y, 0)$	85
7.11	Limite $D \rightarrow 0$, formule d'Arrhénius	86
8	Intégrale de chemin sur un espace multiplement connexe	89
8.1	Electron dans un anneau mésoscopique	89
8.2	Notions d'homotopie	90
8.3	Intégrale de chemin sur un espace multiplement connexe	91
8.4	Effet Bohm-Aharonov	92
8.4.1	Généralités	92
8.4.2	Explication simplifiée	93
8.4.3	Ligne de flux magnétique	94

9	Statistiques quantiques	97
9.1	Rappel : problème à une particule	97
9.2	Problème à n particules	98
9.3	Calcul de la fonction de partition bosonique	100
9.4	Discussion qualitative des trajectoires	101
9.5	Bornes sur les fonctions de partition	104

Chapitre 1

Formulation de la mécanique quantique par l'intégrale de chemin

Sommaire

1.1	Définition du propagateur de Feynman	1
1.2	Expression du propagateur de la particule libre	3
1.3	Construction générale du propagateur	3
1.4	Propriétés du propagateur	6
1.5	Propagateur euclidien	9

1.1 Définition du propagateur de Feynman

Dans la représentation de Schrödinger, l'évolution dans le temps des états est gouvernée par l'équation :

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

qui s'intègre dans le cas particulier d'un hamiltonien indépendant du temps :

$$| \psi(t') \rangle = \exp -\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t' - t) | \psi(t) \rangle$$

Considérons par exemple le cas d'une particule dans un potentiel. Le hamiltonien s'écrit

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

Dans la représentation $\{\hat{q}\}$ l'équation d'évolution devient

$$\langle \vec{q}' | \psi(t') \rangle = \langle \vec{q}' | \exp -\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t' - t) | \psi(t) \rangle$$

$$= \int d^d \vec{q} \langle \vec{q}' | \exp -\frac{i}{\hbar} \widehat{H} (t' - t) | \vec{q} \rangle \langle \vec{q} | \psi (t) \rangle$$

soit encore

$$\psi (\vec{q}', t') = \int K (\vec{q}' t' | \vec{q} t) \psi (\vec{q}, t) d^d \vec{q}$$

- Le propagateur $K (\vec{q}' t' | \vec{q} t) \equiv \langle \vec{q}' | \exp -\frac{i}{\hbar} \widehat{H} (t' - t) | \vec{q} \rangle$ permet d'évaluer l'amplitude de transition entre les deux états. Prenons un état initial localisé en \vec{q}_o

$$\begin{aligned} \psi (\vec{q}, t_o) &= \delta (\vec{q} - \vec{q}_o) \\ \psi (\vec{q}', t') &= K (\vec{q}' t' | \vec{q}_o t_o) \end{aligned}$$

donne l'amplitude de probabilité de trouver la particule en \vec{q}' à l'instant t' sachant qu'elle était en \vec{q}_o à l'instant t_o .

- Le propagateur est la solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{dK}{dt'} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{q}'} + V (\vec{q}') \right] K$$

qui satisfait la condition initiale

$$\lim_{t' \rightarrow t} K (\vec{q}' t' | \vec{q} t) = \langle \vec{q}' | \vec{q} \rangle = \delta^d (\vec{q}' - \vec{q})$$

- On observe que dans la représentation de Heisenberg cette amplitude peut encore s'écrire $\langle \vec{q}' t' | \vec{q} t \rangle$ où les kets $|\vec{q} t \rangle$ et $|\vec{q}' t' \rangle$ sont états propres de l'opérateur de position $\hat{q}(\tau)$ aux temps $\tau = t$ et $\tau = t'$

Preuve : Dans la représentation de Heisenberg les vecteurs d'état sont indépendants du temps, en revanche les observables \widehat{O}_H évoluent selon

$$\widehat{O}_H = \exp \frac{i}{\hbar} \widehat{H} (t - t_o) \widehat{O} \exp -\frac{i}{\hbar} \widehat{H} (t - t_o)$$

où \widehat{O} est l'observable correspondante de la représentation de Schrödinger. Les vecteurs d'états entre les deux représentations sont reliés par

$$|\psi_H \rangle = \exp \frac{i}{\hbar} \widehat{H} (t - t_o) |\psi_S \rangle$$

Donc $|\vec{q} t \rangle = \exp \frac{i}{\hbar} \widehat{H} (t - t_o) |\vec{q} \rangle$ est état propre de l'opérateur de position $\hat{q}_H(t)$.

Par conséquent :

$$\langle \vec{q}' t' | = \langle \vec{q}' | \exp -\frac{i}{\hbar} \widehat{H} (t' - t_o)$$

et

$$\langle \vec{q}' t' | \vec{q} t \rangle = \langle \vec{q}' | \exp -\frac{i}{\hbar} \widehat{H} (t' - t) | \vec{q} \rangle$$

1.2 Expression du propagateur de la particule libre

Insérons deux fois la relation de fermeture $\int |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| d^d \vec{p} = 1$ ainsi que l'identité

$$\langle \vec{q} | \vec{p} \rangle = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{d}{2}} \exp \frac{i}{\hbar} \vec{q} \vec{p}$$

Le propagateur correspondant s'écrit :

$$\begin{aligned} K_o(\vec{q}'t' | \vec{q}t) &= \int d^d \vec{p} d^d \vec{p}' \langle \vec{q}' | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \exp -\frac{i\vec{p}'^2}{2m\hbar} (t' - t) | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{q} \rangle \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^d \int d^d \vec{p} d^d \vec{p}' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\vec{q}' \vec{p}' - \vec{q} \vec{p}) - \frac{i\vec{p}'^2}{2m\hbar} (t' - t) \right\} \delta(\vec{p}' - \vec{p}) \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^d \int d^d \vec{p} \exp \left[\frac{i\vec{p}}{\hbar} (\vec{q}' - \vec{q}) - \frac{i\vec{p}^2}{2m\hbar} (t' - t) \right] \end{aligned}$$

L'exposant peut encore s'écrire :

$$-\frac{i}{2m\hbar} (t' - t) \left\{ \left[\vec{p} - \frac{m(\vec{q}' - \vec{q})}{t' - t} \right]^2 - \frac{m^2 (\vec{q}' - \vec{q})^2}{(t' - t)^2} \right\}$$

En intégrant sur \vec{p} on obtient :

$$K_o(\vec{q}'t' | \vec{q}t) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^d \left[\frac{2\pi m\hbar}{i(t' - t)} \right]^{\frac{d}{2}} \exp \frac{im(\vec{q}' - \vec{q})^2}{2\hbar(t' - t)}$$

$$\boxed{K_o(\vec{q}'t' | \vec{q}t) = \left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t' - t)} \right]^{\frac{d}{2}} \exp \frac{im(\vec{q}' - \vec{q})^2}{2\hbar(t' - t)}}$$

Nous observons que l'argument de l'exponentielle est de la forme $\frac{iS}{\hbar}$ où S est l'action calculée le long de la trajectoire classique :

$$\vec{q}(\tau) = \vec{q} + \frac{\tau - t}{t' - t} (\vec{q}' - \vec{q})$$

1.3 Construction générale du propagateur

Elle s'appuie sur la formule de Trotter :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left[e^{\frac{t}{n} A} e^{\frac{t}{n} B} \right]^n = e^{t(A+B)}$$

dont on sait donner une formulation mathématiquement satisfaisante (A et B étant des matrices ou bien des opérateurs bornés sur un espace de Banach).

Posons $A = \frac{1}{\hbar} \hat{H}_o$ $B = \frac{1}{\hbar} \hat{V}$ et $t = -iT$. On obtient

$$\langle \vec{q}' | e^{-\frac{iT}{\hbar} (\hat{H}_o + \hat{V})} | \vec{q} \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \vec{q}' | \left(e^{-\frac{iT \hat{H}_o}{n\hbar}} e^{-\frac{iT \hat{V}}{n\hbar}} \right)^n | \vec{q} \rangle$$

Nous allons insérer dans cette expression $n - 1$ états intermédiaires. Il nous faut donc calculer

$$\begin{aligned} & \langle \vec{q}_i | \exp -i \frac{T \hat{H}_o}{n \hbar} \exp -i \frac{T \hat{V}}{n \hbar} | \vec{q}_{i+1} \rangle = \\ & \int d\vec{q} \langle \vec{q}_i | \exp -\frac{iT \hat{H}_o}{n \hbar} | \vec{q} \rangle \langle \vec{q} | \exp -\frac{iT \hat{V}}{n \hbar} | \vec{q}_{i+1} \rangle = \\ & \langle \vec{q}_i | \exp -\frac{iT \hat{H}_o}{n \hbar} | \vec{q}_{i+1} \rangle \exp -\frac{iT}{n\hbar} V(\vec{q}_{i+1}) \end{aligned}$$

En remplaçant le 1er terme par le propagateur libre on peut réécrire cet élément de matrice sous la forme :

$$\left(\frac{m}{2\pi i \hbar \frac{T}{n}} \right)^{\frac{d}{2}} \exp \frac{im (\vec{q}_i - \vec{q}_{i+1})^2}{2\hbar \frac{T}{n}} \exp -\frac{iT}{n} \frac{V(\vec{q}_{i+1})}{\hbar}$$

Nous pouvons ainsi exprimer le propagateur sous forme d' une intégrale multiple

$$\begin{aligned} & \langle \vec{q}' | e^{-i \frac{T}{\hbar} (\hat{H}_o + \hat{V})} | \vec{q} \rangle = \\ & \lim_{n \rightarrow \infty} \int \langle \vec{q}' | \exp -\frac{iT \hat{H}_o}{n \hbar} \exp -\frac{iT \hat{V}}{n \hbar} | \vec{q}_1 \rangle \langle \vec{q}_1 | \dots \dots \dots \\ & \dots \dots \dots \langle \vec{q}_{n-1} | \exp -\frac{iT \hat{H}_o}{n \hbar} \exp -\frac{iT \hat{V}}{n \hbar} | \vec{q} \rangle d\vec{q}_1 \dots d\vec{q}_{n-1} \end{aligned}$$

Il est commode de rebaptiser les variables $\vec{q}' = \vec{q}_o$ et $\vec{q} = \vec{q}_n$. On obtient après passage à la limite $n \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} & \langle \vec{q}' | \exp -\frac{iT}{\hbar} \hat{H} | \vec{q} \rangle = \\ & \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \frac{T}{n}} \right)^{\frac{nd}{2}} \int \exp \frac{i}{\hbar} S(\vec{q}_o, \vec{q}_1 \dots \vec{q}_n) d\vec{q}_1 \dots d\vec{q}_{n-1} \end{aligned}$$

où

$$S(\vec{q}_o, \dots \vec{q}_n) = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{m}{2\frac{T}{n}} (\vec{q}_i - \vec{q}_{i+1})^2 - \frac{T}{n} V(\vec{q}_{i+1})$$

Dans la limite $n \rightarrow \infty$, cette somme discrète constitue une discrétisation plausible de l'intégrale

$$S(\vec{q}', \vec{q}) = \int_t^{t'} \left[\frac{m}{2} (\dot{\vec{q}}(\tau))^2 - V(\vec{q}(\tau)) \right] d\tau \quad (1.1)$$

En effet, posons

$$\dot{\vec{q}}_{i+1} = \frac{\vec{q}_i - \vec{q}_{i+1}}{\frac{T}{n}} \quad (1.2)$$

Il vient :

$$S(\vec{q}_0, \vec{q}_1 \dots \vec{q}_n) = \sum_{i=0}^{n-1} \left[\frac{m}{2} \dot{\vec{q}}_{i+1}^2 - V(\vec{q}_{i+1}) \right] \frac{T}{n}$$

Cette écriture est purement formelle car rien ne prouve que cette somme ait effectivement une limite au sens de Riemann. Il faudrait pour celà que les chemins sur lesquels on intègre soient dérivables. On s'attend en fait à ce que les chemins qui donnent une contribution dominante soient ceux pour lesquels :

$$\exp \frac{im}{2\hbar} \frac{(\vec{q}_i - \vec{q}_{i+1})^2}{\frac{T}{n}} \sim 1$$

soit

$$(\vec{q}_i - \vec{q}_{i+1})^2 \sim 2 \frac{\hbar}{m} \frac{T}{n}$$

d'où $(\Delta \vec{q})^2 \sim \Delta t$. L'intégrale précédente semble donc concentrée sur des trajectoires non différentiables.

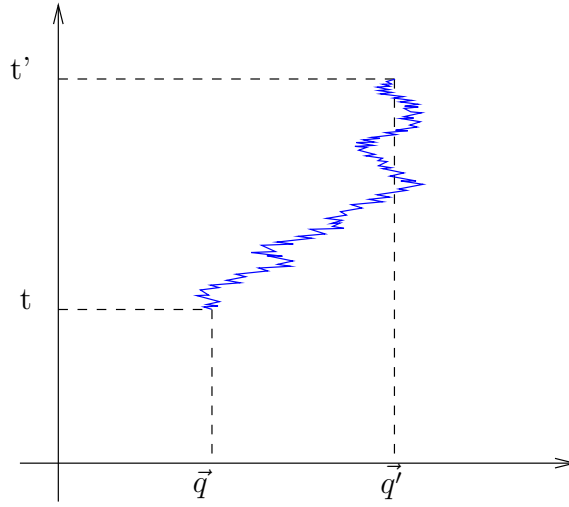
Oubliant pour l'instant ces subtilités, nous définissons formellement la mesure de Feynman en posant

$$\mathcal{D}\vec{q}(\tau) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \frac{T}{n}} \right)^{n \frac{d}{2}} d\vec{q}_1 \dots d\vec{q}_{n-1}$$

Nous obtenons ainsi l'expression fonctionnelle du propagateur :

$$\boxed{K(\vec{q}'t' | \vec{q}t) = \int \mathcal{D}\vec{q}(\tau) \exp \frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} \left(\frac{m}{2} \dot{\vec{q}}^2(\tau) - V(\vec{q}(\tau)) \right) d\tau}$$

Le propagateur $K(\vec{q}'t' | \vec{q}t)$ fait donc intervenir une somme infinie sur tous les chemins reliant les points \vec{q} et \vec{q}' . Chaque terme de cette somme est donné par une phase proportionnelle à l'action classique.



1.4 Propriétés du propagateur

1. Nous avons adopté la notation $K(\vec{q}'t'|\vec{q}t)$ pour faire le lien avec la représentation des éléments de matrice $\langle \vec{q}'t'|\vec{q}t \rangle$ dans le point de vue de Heisenberg. L'invariance par translation dans le temps implique que K ne dépend que de la différence $t' - t$

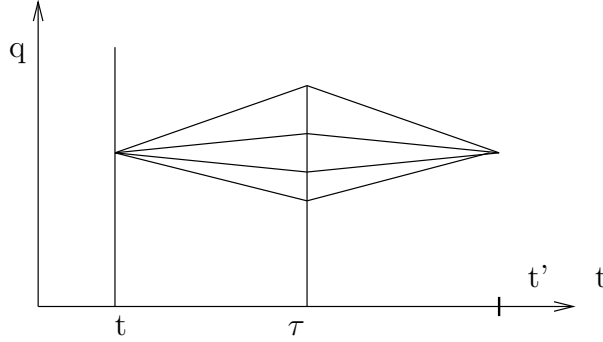
$$K(\vec{q}', t' + \tau | \vec{q}, t + \tau) = K(\vec{q}'t'|\vec{q}t)$$

2. L'insertion de l'identité $\int |\vec{q}_1\rangle \langle \vec{q}_1| d\vec{q}_1 = 1$ dans l'élément de matrice conduit aux relations suivantes

$$\begin{aligned} K(\vec{q}'t'|\vec{q}t) &= \langle \vec{q}' | \exp -\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t' - t) | \vec{q} \rangle \\ &= \int \langle \vec{q}' | \exp -\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t' - \tau) | \vec{q}_1 \rangle \langle \vec{q}_1 | \exp -\frac{i}{\hbar} \hat{H} (\tau - t) | \vec{q} \rangle d\vec{q}_1 \end{aligned}$$

$$= \int K(\vec{q}'t'|\vec{q}_1\tau) K(\vec{q}_1\tau|\vec{q}t) d\vec{q}_1$$

$$\boxed{K(\vec{q}'t'|\vec{q}t) = \int d\vec{q}_1 K(\vec{q}'t'|\vec{q}_1\tau) K(\vec{q}_1\tau|\vec{q}t)} \quad (1.3)$$



En termes physiques cette équation exprime le principe de Huygens de l'optique ondulatoire.

Dans la théorie de processus stochastiques l'équation (1.3) est l'équation de Chapman Kolmogorov.

(Pour donner un sens plus précis à cette correspondance, il faudrait pouvoir interpréter K comme une probabilité de transition et non pas comme une amplitude de probabilité)

3. Dans ce qui précède, nous avons supposé que l'état initial ainsi que l'état final sont états propres de l'opérateur de position.

Pour des états initiaux et finaux quelconques décrits respectivement par $\psi_i(q)$ et $\psi_f(q)$ la probabilité de transition s'écrit :

$$\int \psi_f^*(\vec{q}', t') K(\vec{q}' t' | \vec{q} t) \psi_i(\vec{q}, t) d^n \vec{q} d^n \vec{q}'$$

4. La connaissance du propagateur nous permet d'accéder au spectre du hamiltonien. Pour un spectre discret il vient :

$$\begin{aligned} K(\vec{q}' t' | \vec{q} t) &= \langle \vec{q}' | e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t'-t)} | \vec{q} \rangle \\ &= \sum_n \langle \vec{q}' | n \rangle \langle n | e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t'-t)} | n \rangle \langle n | \vec{q} \rangle \\ &= \sum_n \psi_n(\vec{q}') \psi_n^*(\vec{q}) \exp -\frac{iE_n(t'-t)}{\hbar} \end{aligned}$$

Posons $\vec{q}' = \vec{q}$ et intégrons sur \vec{q} on obtient

$$\phi(t' - t) = \int d\vec{q} K(\vec{q} t' | \vec{q} t) = \sum_n \exp -\frac{iE_n(t' - t)}{\hbar}$$

La transformée de Fourier de $\phi(t)$

$$\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty \phi(t) e^{\frac{it}{\hbar}(E+i\epsilon)} dt = \sum_n \frac{1}{E_n - E - i\epsilon}$$

est la trace de la résolvante

$$G(z) = \frac{1}{H - z}$$

On a

$$\text{Trace } G(E + i\epsilon) = \sum_n \frac{1}{E_n - E - i\epsilon}$$

Les pôles de $G(z)$ donnent les états liés du système. On en déduit la densité d'état

$$\rho(E) = \text{Im} \frac{1}{\pi} \text{Trace } G(E + i\epsilon) = \sum_n \delta(E_n - E)$$

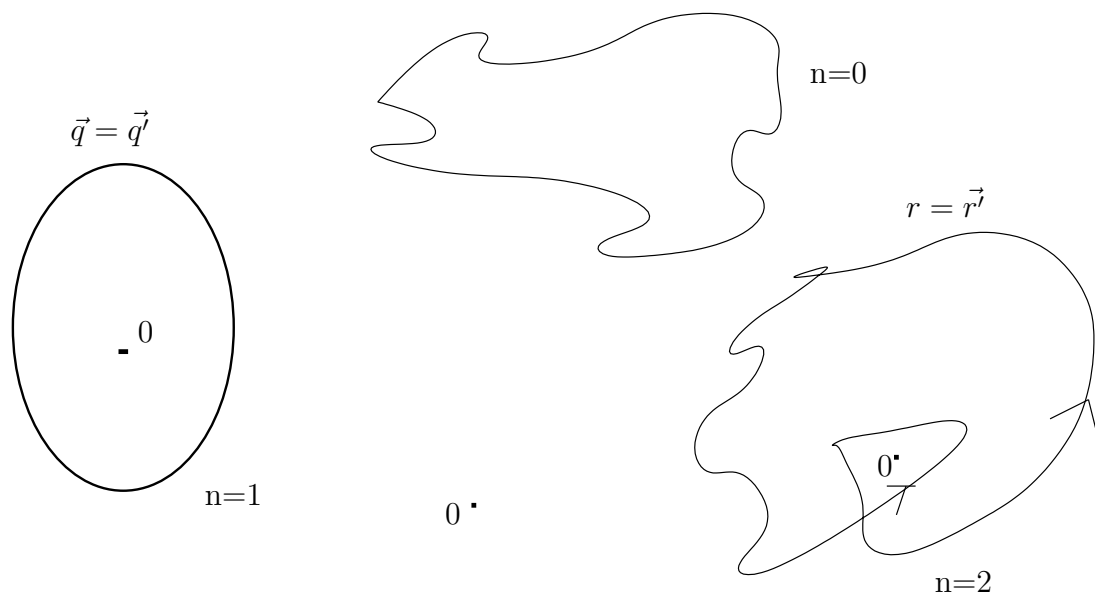
5. Considérations topologiques

Reprenons l'expression du propagateur

$$K(\vec{q}'t'|\vec{q}t) = \int \mathcal{D}\vec{q}(\tau) \exp \frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} \mathcal{L}d\tau$$

Si l'espace de configuration $\{\vec{q}(t)\}$ noté (C) est multiplement connexe, nous verrons qu'il sera utile de distinguer les chemins appartenant à des classes d'homotopie distinctes.

Par exemple si $(C) = R_2/\{O\}$ les chemins fermés sont étiquetés par un entier $n \in \mathbb{Z}$ qui représente le nombre de tours effectués par la trajectoire autour du point O .



Le propagateur sera donné par l'expression suivante :

$$K(\vec{q}'t'|\vec{q}t) = \sum_{g \in \pi_1(C)} \chi(g) \int \mathcal{D}\vec{q}(\tau) \exp \frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} \mathcal{L}d\tau$$

Pour satisfaire la loi de composition des propagateurs

$$K(\vec{q}'t'|\vec{q}t) = \int K(\vec{q}'t'|\vec{q}''t'') K(\vec{q}''t''|\vec{q}t) dq''$$

les facteurs de phase doivent satisfaire la relation $\chi(g)\chi(h) = \chi(g \circ h)$
 Cette relation exprime que les χ forment une représentation unitaire unidimensionnelle du groupe d'homotopie $\pi_1(C)$

exemple :

$$(C) = S_1, R_2 / \{O\}, \quad \chi = e^{in\theta}$$

1.5 Propagateur euclidien

La physique statistique des systèmes quantiques à l'équilibre fait intervenir la fonction de partition

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= \text{Trace } e^{-\beta H} \\ &= \int d\vec{q} \langle \vec{q} | e^{-\beta H} | \vec{q} \rangle \end{aligned}$$

ainsi que l'opérateur densité $\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$ dont les éléments de matrice s'écrivent

$$\rho(\vec{q}, \vec{q}') = \frac{1}{Z} \sum_n \psi_n(\vec{q}') \psi_n^*(\vec{q}) \exp -\beta E_n$$

Montrons comment exprimer ces quantités sous forme d'intégrale fonctionnelle. Un calcul en tout point similaire au calcul précédent permet d'écrire le propagateur euclidien en dimension d'espace $d = 1$.

$$\langle q' | \exp -\frac{tH}{\hbar} | q \rangle = \int_{\substack{q(t)=q' \\ q(0)=q}} \mathcal{D}^{\mathcal{E}} q(\tau) \exp -\frac{1}{\hbar} \int_0^t H(q, \dot{q}) d\tau$$

où

$$H(q, \dot{q}) = \frac{m\dot{q}^2}{2} + V(q)$$

est le hamiltonien classique et $\mathcal{D}^{\mathcal{E}} q(\tau)$ une certaine mesure "euclidienne" sur les chemins. En posant $t = \beta\hbar$ il vient

$$\langle q' | \exp -\beta H | q \rangle = \int_{\substack{q(t)=q' \\ q(0)=q}} \mathcal{D}^{\mathcal{E}} q(\tau) \exp -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} H(q, \dot{q}) d\tau$$

Par conséquent la fonction de partition quantique

$$Z(\beta) = \int dq \langle q | e^{-\beta H} | q \rangle$$

s'obtient en intégrant sur toutes les trajectoires fermées parcourues dans le temps $\beta\hbar = \frac{\hbar}{kT}$. Dans ce cadre on peut maintenant donner un sens

mathématique précis aux différents objets que nous avons rencontrés jusque là. Posons pour simplifier $\hbar = m = 1$. Un chemin quelconque $q(\tau)$ issu de l'origine peut être représenté sous forme d'une série de Fourier

$$q(\tau) = \sqrt{\beta} \left(\xi_0 \frac{\tau}{\beta} + \sqrt{2} \sum_{n=1}^{\infty} \xi_n \frac{\sin(n\pi\tau/\beta)}{n\pi} \right)$$

En utilisant les propriétés d'orthogonalité des fonctions $f_n(\tau) = \cos n\pi\tau/\beta$ on peut réécrire le terme cinétique sous la forme

$$\frac{1}{2} \int_0^\beta \dot{q}^2(\tau) d\tau = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \xi_n^2$$

C'est l'identité de Parseval. Convenons de définir la mesure euclidienne $\mathcal{D}^{\mathcal{E}}q(\tau)$ par la formule

$$\mathcal{D}^{\mathcal{E}}q(\tau) \exp -\frac{1}{2} \int_0^\beta \dot{q}^2(\tau) d\tau = \prod_{n=0}^{\infty} \frac{d\xi_n}{\sqrt{2\pi}} \exp -\frac{\xi_n^2}{2}$$

Le propagateur d'une particule libre ($H_0 = \frac{1}{2}p^2$) peut ainsi s'écrire

$$\langle q | e^{-\beta H_0} | 0 \rangle = \int \prod_{n=0}^{\infty} \frac{d\xi_n}{\sqrt{2\pi}} \exp -\frac{\xi_n^2}{2} \delta(q - q(\beta))$$

En séparant les intégrales sur ξ_0 et ξ_n on obtient

$$\langle q | e^{-\beta H_0} | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} \exp -\frac{q^2}{2\beta}$$

qui est le résultat attendu pour le propagateur libre euclidien. Cette observation nous invite à construire une mesure de probabilité sur les chemins. Pour cela nous introduisons un ensemble infini de variables aléatoires gaussiennes indépendantes ξ_n telles que $E(\xi_n) = 0$, $E(\xi_n^2) = 1$. La trajectoire représentée par la série de Fourier aléatoire $q(\tau)$ est la trajectoire d'un processus stochastique tel que

$$E(q(\tau)q(\tau')) = \frac{\tau\tau'}{\beta} + 2\beta \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2\pi^2} \sin(n\pi\tau/\beta) \sin(n\pi\tau'/\beta)$$

où E désigne l'espérance mathématique par rapport à la mesure produit définie plus haut. Le calcul donne

$$E(q(\tau)q(\tau')) = \min(\tau, \tau')$$

Cette fonction de corrélation définit le processus de Wiener, processus à trajectoires continues mais non dérivables. La formule exprimant $q(\tau)$ comme une série de Fourier aléatoire est due à Paley et Wiener.

Chapitre 2

Fonctions de corrélation quantiques, oscillateur harmonique

Sommaire

2.1	Expression d'éléments de matrice dans la représentation de Heisenberg	11
2.2	Etude de l'amplitude vide-vide	13
2.3	Calcul de $Z(j)$ pour l'oscillateur harmonique . . .	16
2.4	Théorème de Wick	18

2.1 Expression d'éléments de matrice dans la représentation de Heisenberg

On se propose d'évaluer l'élément de matrice d'un opérateur diagonal, soit par exemple $\langle q't' | \hat{q}(t_1) | qt \rangle$. prenons pour simplifier une description dans laquelle $t = 0$ est l'instant de référence, donc :

$$\hat{q}(t_1) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t_1} \hat{q} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t_1}$$
$$|qt \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |q \rangle$$

d'où

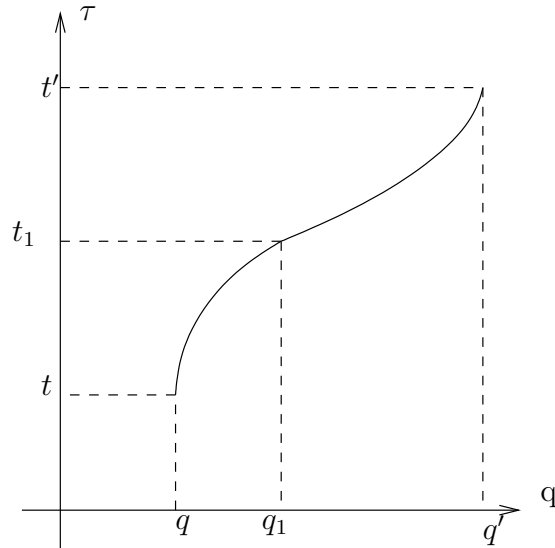
$$\langle q't' | \hat{q}(t_1) \rangle = \langle q' | e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t'-t_1)} \hat{q} e^{\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t'-t_1)} | q \rangle$$

Insérant des états intermédiaires et faisant apparaître les propagateurs, on peut réécrire cette expression

$$\int K(q't' | q_1 t_1) q_1 K(q_1 t_1 | qt) dq_1$$

En terme d'intégrale fonctionnelle $K(q't' | q_1 t_1)$ est donnée par une intégrale sur tous les chemins tels que $q(t') = q'$; $q(t_1) = q_1$ de même $K(q_1 t_1 | qt)$ est donné

par une intégrale sur les chemins tels que $q(t_1) = q_1$; $q(t) = q$. Puisque le point q_1 est arbitraire, réunissant ces 2 chemins, on intégrera sur tous les chemins $q(\tau)$ tels que $q(t) = q$; $q(t') = q'$
 q_1 définit un point intermédiaire d'une nouvelle discrétion



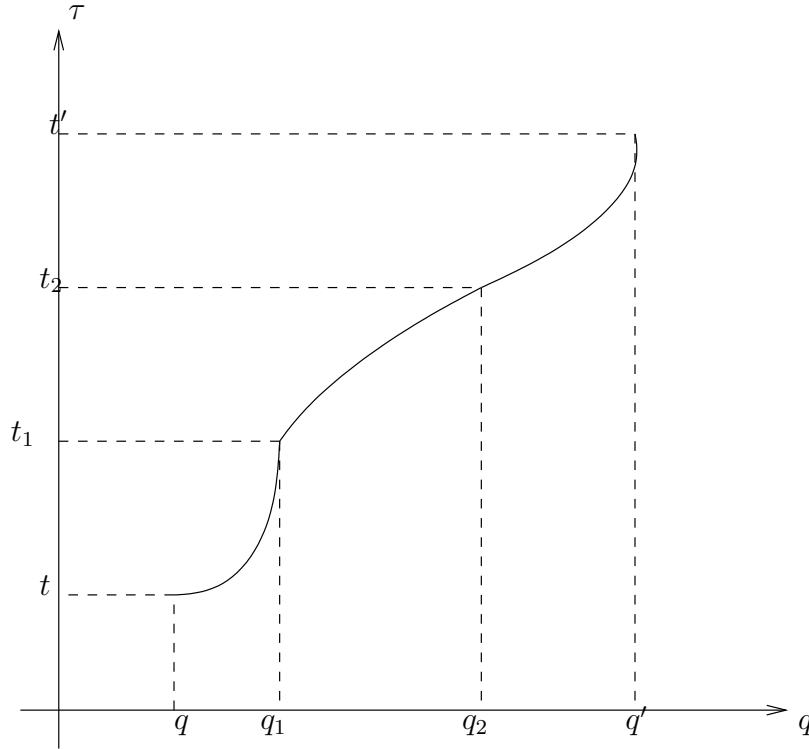
Si nous réécrivons les deux propagateurs en terme d'une intégrale fonctionnelle, l'action totale étant additive il vient :

$$\langle q't' | \hat{q}(t_1) | qt \rangle = \int \mathcal{D}q(\tau) q(t_1) \exp \frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} \mathcal{L}(q, \dot{q}, \tau) d\tau$$

Essayons maintenant d'évaluer :

$$\langle q't' | \mathcal{T} \hat{q}(t_2) \hat{q}(t_1) | qt \rangle$$

Il convient cette fois ci de découper le chemin en trois chemins élémentaires ordonnés dans le temps.



Pour $t_2 > t_1$ il vient

$$\langle q't' | \hat{q}(t_2) \hat{q}(t_1) | qt \rangle = \int \mathcal{D}q(\tau) q(t_2) q(t_1) \exp \frac{iS}{\hbar}$$

Si $t_2 < t_1$ on rangera les opérateurs dans l'ordre chronologique

$$\langle q't' | \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) | qt \rangle = \int \mathcal{D}q(\tau) q(t_1) q(t_2) \exp \frac{iS}{\hbar}$$

D'où la formule générale :

$$\langle q't' | \mathcal{T} \hat{q}(t_2) \hat{q}(t_1) | qt \rangle = \int \mathcal{D}q(\tau) q(t_2) q(t_1) \exp \frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} \mathcal{L}(q, \dot{q}, \tau) d\tau$$

2.2 Etude de l'amplitude vide-vide

On s'intéresse plus particulièrement aux valeurs moyennes dans le vide (c'est à dire dans l'état fondamental) de \mathcal{T} produits d'opérateurs. Ce sont les fonctions de Green. Montrons comment accéder à $\langle \Omega | \mathcal{T} \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) | \Omega \rangle$ en partant de

$$\langle q't' | \mathcal{T} \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) | qt \rangle$$

Supposons que $t_1 > t_2$. Insérant des états intermédiaires il vient :

$$\langle q't' | \mathcal{T} \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) | qt \rangle =$$

$$\sum_{n,m} \langle q't'|n \rangle \langle n|\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)|m \rangle \langle m|qt \rangle$$

les états intermédiaires sont états propres du hamiltonien \hat{H} tels que $\hat{H}|n \rangle = E_n|n \rangle$.

L'expression ci dessous peut encore s'écrire :

$$\sum_{n,m} \psi_n(q') \psi_m^*(q) e^{\frac{i}{\hbar}(E_m t - E_n t')} \langle n|\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)|m \rangle$$

Posons $t = -i\tau$ et $t' = -i\tau'$ et prenons la limite $\frac{\tau \rightarrow -\infty}{\tau' \rightarrow +\infty}$ Il vient :

$$\sum_{n,m} \psi_n(q') \psi_m^*(q) e^{\frac{1}{\hbar}(E_m \tau - E_n \tau')} \langle n|\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)|m \rangle$$

$$\rightarrow \psi_0^*(q') \psi_0(q) e^{-\frac{E_0}{\hbar}(\tau' - \tau)} \langle \Omega|\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)|\Omega \rangle$$

en effet seul le fondamental contribue dans cette limite.

De même

$$\langle q't'|qt \rangle \rightarrow \psi_0^*(q') \psi_0(q) e^{-\frac{E_0}{\hbar}(\tau' - \tau)}$$

D'où l'expression des fonctions de Green

$$\langle \Omega|T\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)|\Omega \rangle = \lim_{\substack{t' \rightarrow -i\infty \\ t \rightarrow +i\infty}} \frac{\langle q't'|T\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)|qt \rangle}{\langle q't'|qt \rangle}$$

Fonctionnelle génératrice

Couplons le système à une force extérieure $j(\tau)$ dépendant du temps

$$\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L}_f = \mathcal{L} + \hbar q(\tau) j(\tau)$$

Par conséquent l'amplitude prend la forme

$$\langle q't'|qt \rangle^{(j)} = \int \mathcal{D}q(\tau) \exp i \int_t^{t'} \left[\frac{1}{\hbar} \mathcal{L} + q(\tau) j(\tau) \right] d\tau$$

En dérivant par rapport à $j(\tau)$

$$\frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta j(t_1)} \langle q't'|qt \rangle^{(j)} \Big|_{j=0} = \langle q't'|\hat{q}(t_1)|qt \rangle$$

pour $t < t_1 < t'$

De même en dérivant deux fois :

$$\left(\frac{1}{i}\right)^2 \frac{\delta}{\delta j(t_1)} \frac{\delta}{\delta j(t_2)} \langle q't'|qt \rangle^{(j)} \Big|_{j=0} = \langle q't'|T\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)|qt \rangle$$

La formule précédente donnant l'amplitude $\langle \Omega | T \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) | \Omega \rangle$ prend la forme :

$$\langle \Omega | T \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) | \Omega \rangle = \frac{1}{Z(0)} \frac{\delta}{\delta j(t_1) \delta j(t_2)} Z(j)$$

où $Z(j) = \lim_{\substack{t' \rightarrow -i\infty \\ t \rightarrow +i\infty}} \langle q' t' | q t \rangle^{(j)}$.

Cette écriture, en grande partie symbolique nous invite à effectuer une continuation analytique au niveau de l'intégrale fonctionnelle elle même (passage en temps imaginaire).

Considérons

$$\begin{aligned} \langle q' t_2 | q t_1 \rangle &= \langle q' | e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t_2-t_1)} | q \rangle \\ &= \int \mathcal{D}q(\tau) \exp \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(q, \dot{q}) d\tau \end{aligned}$$

posons $t_2 = i\tau_2$ $t_1 = -i\tau_1$ $\tau = -i\tau'$

$$q' | e^{-\frac{\hat{H}}{\hbar}(\tau_2-\tau_1)} | q \rangle = \int \mathcal{D}q(\tau') \exp \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \tilde{\mathcal{L}}(q, \dot{q}) d\tau'$$

avec $\tilde{\mathcal{L}}(q, \dot{q}) = -\frac{m}{2}\dot{q}^2 - V(q) = -H(q, \dot{q})$ le passage en temps imaginaire transforme le lagrangien en le hamiltonien .

$$\langle q' | e^{-\frac{1}{\hbar}\hat{H}(\tau_2-\tau_1)} | q \rangle = \int \mathcal{D}q(\tau) \exp -\frac{1}{\hbar} \int_{\tau=\tau_1}^{\tau=\tau_2} H(q, \dot{q}) d\tau$$

la limite $\tau_2 \rightarrow \infty$ $\tau_1 \rightarrow -\infty$ fait apparaître.

$$\int \mathcal{D}q(\tau) \exp -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} H(q, \dot{q}) d\tau$$

La formule précédente exprime que la fonction à deux points $\langle \Omega | T \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) | \Omega \rangle$ est la continuation analytique ($t_1 = -i\tau_1, t_2 = -i\tau_2$) de

$$\boxed{\frac{\int \mathcal{D}q(\tau) q(\tau_1) q(\tau_2) \exp -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} H(q, \dot{q}) d\tau}{\int \mathcal{D}q(\tau) \exp -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} H(q, \dot{q}) d\tau}}$$

On peut donner une forme plus compacte à cette dernière expression en introduisant la fonctionnelle génératrice euclidienne :

$$Z(j) = \int \mathcal{D}q(\tau) \exp \left[- \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\hbar} H(q, \dot{q}) - \int_{-\infty}^{+\infty} j(\tau) q(\tau) d\tau \right]$$

qui décrit le couplage du système à une source classique dépendant du temps. La dérivation fonctionnelle par rapport à la source fait apparaître les valeurs moyennes recherchées.

$$\langle \Omega | T \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) | \Omega \rangle = \text{continuation analytique de } \frac{\delta^2}{\delta j(\tau_1) \delta j(\tau_2)} \frac{Z(j)}{Z(0)} \Big|_{j=0}$$

Nous allons illustrer cette approche en traitant en détail le problème de l'oscillateur harmonique.

Remarque : le signe du terme de source est parfois $+ \int j(\tau) q(\tau) d\tau$

2.3 Calcul de $Z(j)$ pour l'oscillateur harmonique

Considérons le hamiltonien :

$$H(q, \dot{q}) = \frac{m\dot{q}^2}{2} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}$$

On considère la fonctionnelle génératrice ($\hbar = 1$)

$$Z(j) = \int \mathcal{D}q(\tau) \exp - \int d\tau [H(q, \dot{q}) + j(\tau) q(\tau)]$$

Après intégration par partie, l'exponentielle s'écrit :

$$\exp - \int d\tau \left\{ q(\tau) \left[-\frac{m}{2} \frac{d^2}{d\tau^2} + \frac{m\omega^2}{2} \right] q(\tau) + j(\tau) q(\tau) \right\}$$

Une discrétion de cette intégrale nous conduirait à une expression de la forme.

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \tilde{q}_1 A_{ij} q_j + \tilde{j}_i q_i$$

où A est une matrice symétrique. Pour diagonaliser cette forme quadratique on pose

$$q = Q - A^{-1} j \\ \tilde{q} = \tilde{Q} - \tilde{j} \tilde{A}^{-1} = \tilde{Q} - \tilde{j} A^{-1}$$

D'où

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \tilde{Q} A Q - \frac{1}{2} \tilde{j} A^{-1} j$$

Par extension le changement de variable fonctionnel

$$q = Q - A^{-1} j$$

donnera

$$Z(j) = \exp \frac{1}{2} \int d\tau d\tau' \tilde{j}(\tau) A^{-1}(\tau', \tau) j(\tau) \\ \int \mathcal{D}Q(\tau) \exp - \int d\tau \left[\frac{m}{2} \dot{Q}^2 + \frac{m}{2} \omega^2 Q^2 \right]$$

Soit encore

$$Z(j) = Z(0) \exp \frac{1}{2} \int d\tau d\tau' \tilde{j}(\tau') A^{-1}(\tau', \tau) j(\tau)$$

Reste à calculer $A^{-1}(\tau', \tau)$

Par définition $AA^{-1} = 1$ soit $\left(-m \frac{d^2}{d\tau^2} + m\omega^2\right) A^{-1}(\tau', \tau) = \delta(\tau' - \tau)$

En passant aux transformées de Fourier il vient

$$\begin{aligned} A^{-1}(\tau', \tau) &= \frac{1}{2\pi m} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{ik(\tau-\tau')}}{k^2 + \omega^2} \\ &= \frac{1}{2m\omega} e^{-\omega|\tau-\tau'|} \end{aligned}$$

Le calcul précédent nous enseigne que

$\langle \Omega | T \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) | \Omega \rangle =$ continuation analytique

$$\frac{\delta^2}{\delta j(\tau_1) \delta j(\tau_2)} \frac{Z(j)}{Z(0)} \Big|_{j=0} = A^{-1}(\tau_1 - \tau_2)$$

Vérifions que $A^{-1}(\tau_1, \tau_2) = \frac{1}{2m\omega} e^{-\omega|\tau_1-\tau_2|}$ est bien la continuation en temps imaginaire du propagateur de l'oscillateur harmonique.

Il nous donc évaluer explicitement

$$\langle \Omega | T \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) | \Omega \rangle$$

Pour l'oscillateur harmonique le hamiltonien s'écrit :

$$\tilde{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{q}^2$$

Pour $t_1 > t_2$ il vient

$$\begin{aligned} &\langle \Omega | T \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) | \Omega \rangle = \\ &\langle \Omega | e^{i\hat{H}t_1} \hat{q} e^{-i\hat{H}t_1} e^{i\hat{H}t_2} \hat{q} e^{-i\hat{H}t_2} | \Omega \rangle = \\ &e^{iE_o(t_1-t_2)} \sum_n |\langle \Omega | \hat{q} | n \rangle|^2 e^{-iE_n(t_1-t_2)} \end{aligned}$$

Pour l'oscillateur harmonique le seul élément de matrice non nul est celui qui connecte l'état fondamental $|\Omega\rangle$ au premier état excité.

Les fonctions d'onde correspondantes s'écrivent

$$\begin{aligned} \langle q | \Omega \rangle &= \psi_o(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp -\frac{m\omega}{2} q^2 \\ \psi_1(q) &= \sqrt{2m\omega} q \psi_o \end{aligned}$$

$$\text{D'où } \langle \Omega | \hat{q} | n \rangle = \int_{-\infty}^{-\infty} \underbrace{\psi_0(q) q \psi_1(q)}_{\frac{1}{\sqrt{2m\omega}} \psi_1} dq = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}}$$

Par conséquent

$$\langle \Omega | T\hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) | \Omega \rangle = \frac{1}{2m\omega} e^{-i\omega(t_1-t_2)} \text{ pour } t_1 > t_2$$

De façon générale on obtient

$$\begin{aligned} \langle \Omega | T\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2) | \Omega \rangle &= \frac{1}{2m\omega} \left\{ e^{-i\omega(t_1-t_2)}\theta(t_1-t_2) + e^{-i\omega(t_2-t_1)}\theta(t_2-t_1) \right\} \\ &= \frac{1}{2m\omega} e^{-i\omega|t_1-t_2|} \end{aligned}$$

Si dans cette formule on pose $t = -i\tau$ on obtient $\frac{1}{2m\omega} e^{-\omega|\tau_1-\tau_2|}$ qui est bien l'expression obtenue pour $A^{-1}(\tau_1, \tau_2)$ par la méthode fonctionnelle.

Remarques

1. le calcul en temps imaginaire fournit des expressions mathématiquement saines : opérateurs elliptiques du type $-\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2$ pour l'oscillateur harmonique. La continuation analytique fournit ensuite automatiquement la prescription de Feynmann.
2. les fonctions de Green $\langle \Omega | T\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2) | \Omega \rangle$ contiennent de l'information sur le spectre du hamiltonien. En effet $\langle \Omega | T\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2) | \Omega \rangle = e^{iE_0(t_1-t_2)} \sum_n \langle \Omega | \hat{q} | n \rangle | e^{-iE_n(t_1-t_2)}$ pour $t_1 > t_2$. Le comportement pour $t \rightarrow \infty$ des fonctions de Green euclidiennes contrôle l'énergie du premier état excité (relativement au fondamental).

$$\langle \Omega | T\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2) | \Omega \rangle \rightarrow \frac{1}{2m\omega} e^{-\omega|\tau_1-\tau_2|}$$

pour $|\tau_1 - \tau_2| \rightarrow \infty$ avec une décroissance exponentielle donnée par

$$E_1 - E_0 = \frac{3}{2}\omega - \frac{1}{2}\omega = \omega$$

2.4 Théorème de Wick

Supposons pour simplifier que A est une matrice $n \times n$ d'éléments A_{ij} . Le courant j est un vecteur à n composantes $j_1 \dots j_n$. La fonctionnelle génératrice s'écrit

$$\begin{aligned} Z(j_1, \dots, j_n) &= \int \prod_i dq_i \exp -\frac{1}{2} \tilde{q} A q - \tilde{j} q \\ &\simeq \frac{1}{\sqrt{\det A}} \exp \frac{1}{2} \tilde{j} A^{-1} j \end{aligned}$$

Considérons une fonction de Green à p points

$$\langle q_{i1} \dots q_{ip} \rangle = \frac{1}{Z(0)} \int \prod_i dq_i q_{i1} \dots q_{ip} \exp -\frac{1}{2} \tilde{q} A q$$

Par parité les fonctions de Green d'ordre impair sont nulles. Montrons que celles d'ordre pair s'expriment en terme de la fonction à deux points

$$\begin{aligned} \langle q_{i1}q_{i2} \rangle &= \frac{1}{Z(0)} \int \prod_i dq_i q_{i1}q_{i2} \exp -\frac{1}{2}\tilde{q}Aq \\ &= \frac{1}{Z(0)} \frac{\partial^2 Z(j)}{\partial j_{i1}\partial j_{i2}} \Big|_{j=0} = (A^{-1})_{i1i2} \end{aligned}$$

La fonction à quatre points s'écrit

$$\begin{aligned} \langle q_{i1}q_{i2}q_{i3}q_{i4} \rangle &= \frac{1}{Z(0)} \frac{\partial^2}{\partial j_{i1}\partial j_{i2}\partial j_{i3}\partial j_{i4}} \left[\exp \frac{1}{2}\tilde{j}A^{-1}j \right]_{j=0} \\ &= (A^{-1})_{i1i2}(A^{-1})_{i3i4} + (A^{-1})_{i1i3}(A^{-1})_{i2i4} + (A^{-1})_{i1i4}(A^{-1})_{i2i3} \\ &= \langle q_{i1}q_{i2} \rangle \langle q_{i3}q_{i4} \rangle + \langle q_{i1}q_{i3} \rangle \langle q_{i2}q_{i4} \rangle + \langle q_{i1}q_{i4} \rangle \langle q_{i2}q_{i3} \rangle \end{aligned}$$

On retrouve ainsi le théorème de Wick comme une propriété élémentaire des intégrales gaussiennes. Elle se généralise aux intégrales fonctionnelles.

Exemple : oscillateur

$$Z(j) = Z(0) \exp \frac{1}{2} \int d\tau_1 d\tau_2 j(\tau_1) A^{-1}(\tau_1\tau_2) j(\tau_2)$$

$$\begin{aligned} \langle \Omega | Tq(\tau_1)q(\tau_2) | \Omega \rangle &= \frac{1}{Z(0)} \frac{\delta^2 Z(j)}{\delta j(\tau_1)\delta j(\tau_2)} \\ &= A^{-1}(\tau_1, \tau_2) \\ &= \frac{1}{2m\omega} e^{-\omega|\tau_1-\tau_2|} \end{aligned}$$

Les fonctions de Green à 4 points sont données par le théorème de Wick

$$\begin{aligned} \langle \Omega | Tq(\tau_1)q(\tau_2)q(\tau_3)q(\tau_4) | \Omega \rangle &= \\ \langle \Omega | Tq(\tau_1)q(\tau_2) | \Omega \rangle \langle \Omega | Tq(\tau_3)q(\tau_4) | \Omega \rangle &+ \\ + \langle \Omega | Tq(\tau_1)q(\tau_3) | \Omega \rangle \langle \Omega | Tq(\tau_2)q(\tau_4) | \Omega \rangle &+ \\ + \langle \Omega | Tq(\tau_1)q(\tau_4) | \Omega \rangle \langle \Omega | Tq(\tau_2)q(\tau_3) | \Omega \rangle & \end{aligned}$$

Application : calcul perturbatif de fonctionnelles non gaussiennes

$$\int \prod_{i=1}^n dq_i \exp - \left[\frac{1}{2}\tilde{q}Aq + \lambda V(q) \right] = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \lambda^k \int \prod_{i=1}^n dq_i V(q)^k \exp -\frac{1}{2}\tilde{q}Aq$$

chaque terme se calcule grâce au théorème de Wick.

Remarque

Autre dérivation de $Z(j)$

Introduisons les fonctions propres (réelles) de l'opérateur

$$A = -m \frac{d^2}{dt^2} + m\omega^2$$

$$Aq_n(t) = \epsilon_n q_n(t)$$

On a une base de fonctions propres orthogonales

$$\int_{-\infty}^{+\infty} q_n(t) q_m(t) dt = \delta_{nm}$$

Développons sur cette base une fonction $q(t)$ quelconque ainsi que $j(t)$

$$q(t) = \sum c_n q_n(t)$$

$$j(t) = \sum j_n q_n(t)$$

Nous voulons évaluer

$$Z(j) = \int \mathcal{D}q(t) e^{\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{m}{2} \dot{q}^2 + \frac{m\omega^2}{2} q^2 - \int j(t)q(t) \right)}$$

On peut montrer que

$$\mathcal{D}q(t) = N \prod_{n=-\infty}^{+\infty} dc_n$$

$$Z(j) = N \int \prod dc_n e^{-\xi}$$

$$\begin{aligned} \xi &= \int \frac{1}{2} q(t) A q(t) + j(t) q(t) = \frac{1}{2} \sum c_n^2 \epsilon_n + j_n c_n \\ &= \sum \frac{\epsilon_n}{2} \left[c_n^2 + \frac{2j_n c_n}{\epsilon_n} \right] \\ &= \sum \frac{\epsilon_n}{2} \left[\left(c_n + \frac{j_n}{\epsilon_n} \right)^2 - \frac{j_n^2}{\epsilon_n^2} \right] \\ &= - \sum \frac{j_n^2}{2\epsilon_n} + \sum \frac{\epsilon_n}{2} \left(c_n + \frac{j_n}{\epsilon_n} \right)^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Z(j) &= N \exp + \sum_n \frac{j_n^2}{2\epsilon_n} \prod_{n=-\infty}^{n=+\infty} \int \exp - \sum \frac{\epsilon_n}{2} \left(c_n + \frac{j_n}{\epsilon_n} \right)^2 dc_n \\ &= N \exp \sum_n \frac{j_n^2}{2\epsilon_n} \prod_{n=-\infty}^{+\infty} \int dc_n \exp - \frac{\epsilon_n}{2} c_n^2 \\ &= Z(0) \exp \sum_n \frac{j_n^2}{2\epsilon_n} \end{aligned}$$

Montrons que

$$\sum_n \frac{j_n^2}{2\epsilon_n} = \frac{1}{2} \int d\tau d\tau' j(\tau) A^{-1}(\tau, \tau') j(\tau')$$

$$\text{où } A^{-1}(\tau, \tau') = \sum \frac{q_n(\tau) q_n(\tau')}{\epsilon_n} \text{ satisfait}$$

$$AA^{-1} = \delta(\tau - \tau')$$

$$\frac{1}{2} \int j(\tau) A^{-1}(\tau, \tau') j(\tau') = \sum \frac{j_n^2}{2\epsilon_n}$$

Chapitre 3

Méthodes semi-classiques

Sommaire

3.1	Fonction d'onde et trajectoires classiques	23
3.2	Calcul du propagateur semi-classique	24
3.3	Expression du propagateur semi-classique en dimension 1	27
3.4	Propagateur dans l'espace E	30
3.5	Effet tunnel-Etude du double puits	34
3.6	Approximation du gaz dilué	36
3.7	Calcul du déterminant : généralités	36
3.8	Evaluation du déterminant dans l'approximation du gaz dilué	37
3.9	Méthode de Laplace et méthode de la phase stationnaire	39

Le qualificatif semi-classique désigne tous les phénomènes de transition entre la mécanique quantique et la mécanique classique. L'échelle caractéristique des phénomènes quantiques est donnée par la constante de Planck \hbar . Lorsque les actions mises en jeu sont grandes devant \hbar on s'attend à ce que les équations quantiques se réduisent aux équations classiques. A première vue le problème semble analogue à celui du passage de la mécanique relativiste à la mécanique non relativiste, passage qui se fait simplement en prenant la limite $c \rightarrow \infty$. La difficulté du problème vient de ce qu'il ne suffit pas de poser $\hbar = 0$ dans les équations classiques. La limite $\hbar = 0$ est hautement singulière ; pour l'analyser il faut mettre en oeuvre des méthodes asymptotiques telles que la méthode de la phase stationnaire ou la méthode de Laplace que nous rappelons en appendice.

3.1 Fonction d'onde et trajectoires classiques

Le passage de l'optique ondulatoire, théorie décrite par les équations de Maxwell, à l'optique géométrique dans laquelle les entités de base sont les rayons lumineux peut être réalisé par la méthode eikonale.

En écrivant une composante quelconque du champ électromagnétique sous la forme

$$E = ae^{i\psi}$$

On montre que les rayons lumineux sont les trajectoires orthogonales aux surfaces d'onde $\psi = cste$. Ils sont définis par la relation $\vec{k} = \vec{\nabla}\psi$, de même la pulsation est donnée par $\omega = -\frac{\partial\psi}{\partial t}$. La limite de l'optique géométrique, λ petit devant les dimensions caractéristiques d des instruments d'optique, implique que la phase varie de façon appréciable sur une distance d'ordre d . Par conséquent l'eikonale ψ est une quantité grande.

Pour transposer cette méthode à la mécanique quantique on pose :

$$\psi = ae^{\frac{iS}{\hbar}}$$

où $S \gg \hbar$

En reportant cette expression dans l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + V(\vec{x})\psi$$

On obtient le système d'équations aux dérivées partielles

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla}S)^2 + V(\vec{x}) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a}{a} \quad (3.1)$$

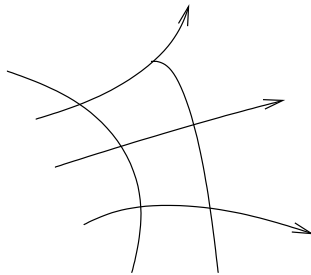
$$\frac{\partial}{\partial t} a^2 + \text{div} \left(a^2 \frac{\vec{\nabla}S}{m} \right) = 0 \quad (3.2)$$

Si on néglige le membre de droite de l'équation (1), on reconnaît l'équation de Hamilton-Jacobi satisfaite par l'action classique S .

L'équation (2) s'interprète comme une équation de continuité pour la densité

$$\rho = |\psi|^2 = a^2 \text{ et le courant classique } \vec{j} = \rho \vec{v} \text{ où } \vec{v} = \frac{\vec{\text{grad}}S}{m} = \frac{\vec{p}}{m}.$$

Par conséquent quand \hbar est petit on peut décrire le système en terme d'un flot de particules transportées le long des trajectoires classiques perpendiculairement aux surfaces d'ondes $S = cste$.



3.2 Calcul du propagateur semi-classique

On se propose de calculer le propagateur en dimension d'espace $d=1$

$$\langle q' | e^{-\frac{i\hat{H}(t'-t)}{\hbar}} | q \rangle = \int \mathcal{D}q(\tau) \exp \frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} d\tau \left[\frac{m}{2} \dot{q}^2(\tau) - V(q(\tau)) \right]$$

dans la limite $\hbar \rightarrow 0$.

La méthode de la phase stationnaire nous invite à rechercher les solutions $q_c(\tau)$ qui rendent stationnaire l'action classique

$$S_c \{q(\tau)\} = \int_t^{t'} d\tau \left[\frac{m}{2} \dot{q}^2(\tau) - V(q(\tau)) \right]$$

avec les conditions aux limites $\{q(t) = q, q(t') = q'\}$.

Ces solutions définissent les trajectoires classiques $q_c(\tau)$, solutions de l'équation du mouvement

$$m \frac{d^2}{dt^2} q_c(\tau) = -\frac{\partial V}{\partial q}(q_c(\tau))$$

L'approximation semi-classique consiste à développer l'action autour de $q_c(\tau)$ en posant

$$q(\tau) = q_c(\tau) + \sqrt{\hbar} \eta(\tau)$$

avec $\eta(t) = \eta(t') = 0$.

En se limitant aux termes quadratiques il vient

$$S \{q(\tau)\} = S \{q_c(\tau)\} + \hbar \int_t^{t'} d\tau \left[\frac{m}{2} \dot{\eta}^2 - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial q^2}(q_c) \eta^2 \right] + O(\hbar^3)$$

Nous poserons désormais $S_c = S \{q_c(\tau)\}$. A cet ordre le propagateur s'écrit

$$\langle q' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t'-t)} | q \rangle = e^{i \frac{S_c}{\hbar}} \int \mathcal{D}\eta(\tau) \exp \frac{i}{2} \int_t^{t'} \eta(\tau) M \eta(\tau) d\tau$$

où $M = -m \frac{d^2}{d\tau^2} - \frac{\partial^2 V}{\partial q^2}(q_c(\tau))$ est un opérateur différentiel de type Sturm-Liouville.

On est donc ramené à calculer une intégrale fonctionnelle gaussienne associée à l'opérateur de Sturm-Liouville M . Soit $\{\phi_n(\tau)\}$ un ensemble complet de fonctions propres de M vérifiant les conditions aux limites $\phi_n(t) = \phi_n(t') = 0$. Elles vérifient

$$M \phi_n(\tau) = \lambda_n \phi_n(\tau)$$

ainsi que les relations d'orthogonalité

$$\int_t^{t'} \phi_n(\tau) \phi_m(\tau) d\tau = \delta_{nm}$$

On peut développer la fluctuation autour de la trajectoire classique sur cette base de fonctions

$$\eta(\tau) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(\tau)$$

Nous pouvons définir la mesure $\mathcal{D}\eta(\tau)$ par l'expression

$$\mathcal{D}\eta(\tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N dc_n$$

Le terme exponentiel s'écrit

$$\int_t^{t'} \eta(\tau) M \eta(\tau) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n c_n^2$$

Par conséquent

$$\int \mathcal{D}\eta(\tau) \exp \frac{i}{2} \int_t^{t'} \eta(\tau) M \eta(\tau) d\tau =$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dc_n \exp \frac{i}{2} \lambda_n c_n^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_n}} e^{\frac{i\pi}{4}}$$

où nous avons supposé toutes les valeurs propres positives.

Pour se débarrasser du facteur de normalisation, on pourra évaluer le rapport de 2 intégrales fonctionnelles

$$\frac{\int \mathcal{D}\eta(\tau) \exp \frac{i}{2} \int_t^{t'} \eta(\tau) M \eta(\tau) d\tau}{\int \mathcal{D}\eta(\tau) \exp \frac{i}{2} \int_t^{t'} \eta(\tau) M_o \eta(\tau) d\tau} = \prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{\lambda_n^{(o)}}{\lambda_n}}$$

Lorsque le produit infini converge, on peut ainsi définir le déterminant de l'opérateur M

$$\det M \equiv \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n}{\lambda_n^{(o)}}$$

Application : propagateur de l'oscillateur harmonique

$$V(q) = \frac{m\omega^2}{2} q^2$$

Par conséquent

$$M = -m \frac{d^2}{d\tau^2} - \frac{\partial^2 V}{\partial q^2} = -m \frac{d^2}{d\tau^2} - m\omega^2$$

Fonctions propres

$$\phi_n(\tau) = \sin \frac{n\pi(\tau - t)}{t' - t}, n > 0$$

Valeurs propres

$$\lambda_n = +m \left[\frac{n^2 \pi^2}{(t' - t)^2} - \omega^2 \right]$$

Pour $t' - t < \frac{\pi}{\omega} = \frac{T}{2}$ où T est la période du mouvement on remarque que toutes les valeurs propres sont positives.

En choisissant comme opérateur de référence $M_o = -m \frac{d^2}{d\tau^2}$ avec les mêmes conditions aux limites $\eta(t) = \eta(t') = 0$ il vient

$$\det M = \prod_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda_n}{\lambda_n^{(o)}} = \prod_{n>0} \left[\frac{n^2 \pi^2 - \omega^2 (t' - t)^2}{n^2 \pi^2} \right]$$

$$= \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\omega^2 (t' - t)^2}{n^2 \pi^2} \right)$$

3.3. EXPRESSION DU PROPAGATEUR SEMI-CLASSIQUE EN DIMENSION 127

En utilisant la formule d'Euler

$$\frac{\sin \pi x}{\pi x} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{x^2}{n^2}\right)$$

Il vient

$$\det M = \frac{\sin \omega (t' - t)}{\omega (t' - t)}$$

Pour fixer les normalisations, remarquons que l'opérateur M_o intervient dans le calcul du propagateur d'une particule libre.

Au chapitre 1 nous avons montré que

$$\langle q' | \exp -\frac{i\hat{H}_o}{\hbar} (t' - t) | q \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t' - t)}} \exp i \frac{S_o}{\hbar}$$

Dans l'approximation semi-classique on a

$$\frac{\langle q' | \exp -\frac{i\hat{H}}{\hbar} (t' - t) | q \rangle}{\langle q' | \exp -\frac{i\hat{H}_o}{\hbar} (t' - t) | q \rangle} = \frac{1}{\sqrt{\det M}} \exp \frac{i}{\hbar} (S_c - S_o)$$

Par conséquent

$$\begin{aligned} \langle q' | \exp -\frac{i\hat{H}}{\hbar} (t' - t) | q \rangle &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t' - t)}} \sqrt{\frac{\omega (t' - t)}{\sin \omega (t' - t)}} \exp i \frac{S_c}{\hbar} \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega (t' - t)}} \exp i \frac{S_c}{\hbar} \end{aligned}$$

où

$$S_c = \frac{m\omega}{2 \sin \omega (t' - t)} [(q'^2 + q^2) \cos \omega (t' - t) - 2qq']$$

Exercices

1. Utiliser l'expression du propagateur pour calculer l'énergie et la fonction d'onde de l'état fondamental
2. Montrer que la fonction de partition de l'oscillateur harmonique s'écrit

$$\text{Trace} \exp -\beta H = \frac{1}{2 \sinh \frac{\omega \beta \hbar}{2}}$$

3.3 Expression du propagateur semi-classique en dimension 1

Une extension du formalisme précédent permet de calculer le propagateur semi-classique pour un potentiel arbitraire. La formule finale, établie par Van-Vleck

en 1928 s'écrit

$$\langle q't'|qt \rangle = \sum \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar}} \exp -\frac{iM\pi}{2} \left| -\frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'} \right|^{\frac{1}{2}} \exp \frac{i}{\hbar} S(q, q', t' - t)$$

où $M \in \mathbb{N}$ est le nombre de points conjugués, c'est le nombre de points de la trajectoire où l'approximation semi-classique est mise en défaut ($M=2$ lors d'une réflexion sur un mur avec condition de Dirichlet). Le signe somme signifie qu'il faut sommer sur toutes les trajectoires classiques.

Exercice :

1. vérifier cette formule dans le cas de l'oscillateur harmonique
2. méthode des images

Remarques :

La formule de Van-Vleck cesse d'être valable lorsque le préfacteur de la formule de Van-Vleck $\frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'}$ tend vers l'infini.

Pour dégager la signification physique de cette condition, il est intéressant de réécrire ce préfacteur en utilisant le formalisme de Hamilton-Jacobi.

Considérons le mouvement d'une particule classique avec les conditions initiales $q(t_0) = q_0$, $p(t_0) = p_0$.
Sa position au temps t est

$$q_1(t) \equiv q(q_0, p_0, t)$$

Exprimons l'impulsion initiale en fonction de l'action S , on a

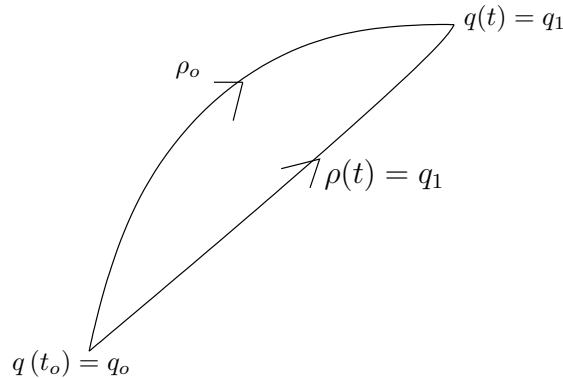
$$p_0 = -\frac{\partial S}{\partial q_0}$$

Par conséquent

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q_0 \partial q_1} = -\frac{\partial p_0}{\partial q_1}$$

La divergence de $\frac{\partial^2 S}{\partial q_0 \partial q_1}$ implique que $\frac{\partial q_1}{\partial p_0} = 0$.

Cette condition exprime le fait qu'une petite variation de l'impulsion initiale n'affecte pas le point final. Il existe dans ce cas une infinité de trajectoires classiques reliant q_0 et q_1 dans le temps t .



3.3. EXPRESSION DU PROPAGATEUR SEMI-CLASSIQUE EN DIMENSION 129

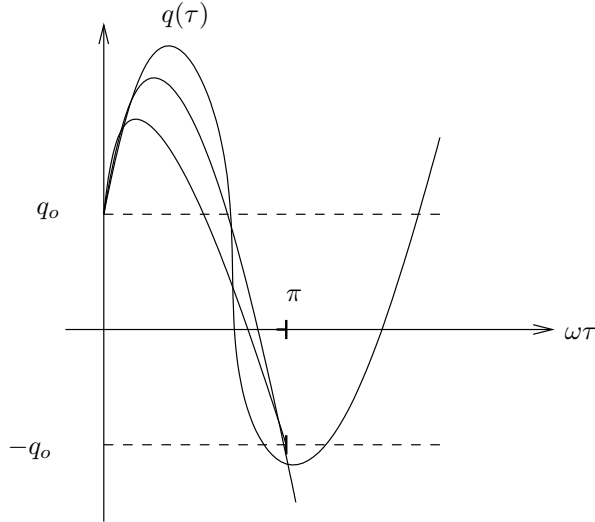
Illustration : oscillateur harmonique

La trajectoire classique satisfaisant $q(t_0) = q_0$ et $q(t_1) = q_1$ s'écrit $q(\tau) = a \cos \omega(\tau - t_0) + b \sin \omega(\tau - t_0)$ $0 \leq \tau < t$ où

$$a = q_0$$

$$b = \frac{q_1 - q_0 \cos \omega(t_1 - t_0)}{\sin \omega(t_1 - t_0)}$$

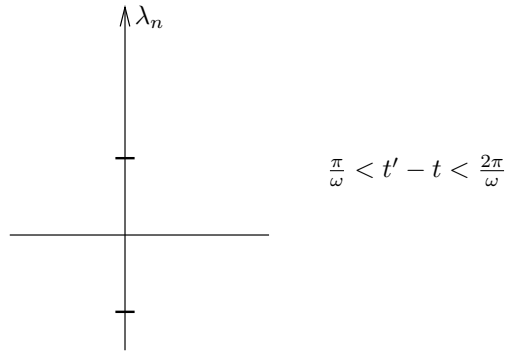
Pour $\omega(t_1 - t_0) = n\pi$, b n'est pas défini sauf si $q_1 = (-1)^n q_0$. Il existe alors une infinité de trajectoires connectant q_0 et q_1 .



Pour comprendre le rôle joué par ces points singuliers dans l'approche fonctionnelle, revenons à l'expression des valeurs propres de l'opérateur de fluctuation

$$\lambda_n = m \left[\frac{n^2 \pi^2}{(t' - t)^2} - \omega^2 \right]$$

Si $|t - t'| \omega = n\pi$, la n ème valeur propre de cet opérateur devient nulle. Par conséquent $\frac{1}{\sqrt{\det}} = \infty$, l'approximation semi-classique cesse d'être valable car l'action n'est plus une fonctionnelle quadratique dans la perturbation δq . Dans le cas de l'oscillateur harmonique on franchit pour la première fois un point conjugué pour $n = 1$ soit $(t' - t) = \frac{\pi}{\omega}$. Dès que $t' - t > \frac{\pi}{\omega}$ il apparaît une valeur propre négative dans le spectre des fluctuations.

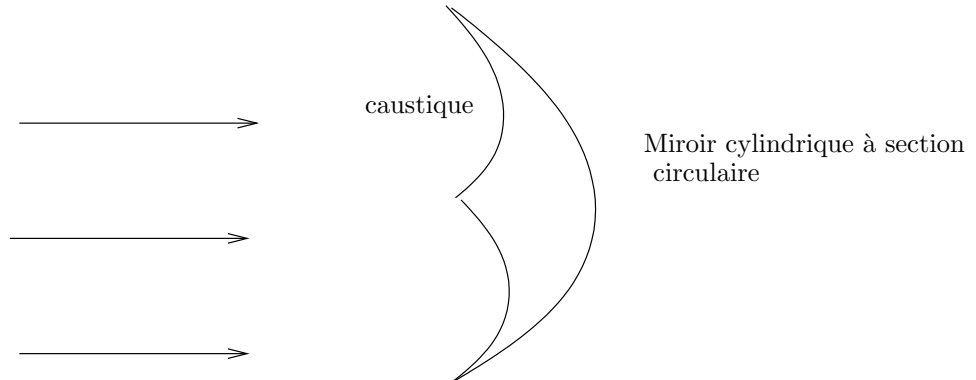


par conséquent le *det* change de signe donc

$$\frac{1}{\sqrt{\det}} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{-\det}} = e^{-i\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{\det}}$$

Il va donc apparaître une phase supplémentaire dans le propagateur. Si on franchit M points conjugués on obtient la phase $\exp -i\frac{M\pi}{2}$.

Remarque : en dimension supérieure l'ensemble des points conjugués définit une surface appelé caustique. En optique, la caustique est la surface qui sépare la région sombre de la région éclairée. On peut la définir géométriquement comme l'enveloppe des rayons lumineux réfléchis par un miroir. Sur la caustique l'éclairage est donc maximum puisqu'il y a une accumulation de rayons.



Notons que l'optique géométrique prédit un éclairage discontinu à la traversée d'une caustique. Dans le cadre de l'optique ondulatoire, on peut calculer l'intensité lumineuse de part et d'autre de la caustique. Elle s'exprime en terme de fonctions d'Airy qui jouent un rôle important dans la description de l'arc en ciel.

3.4 Propagateur dans l'espace E

On considère la résolvante $G(E) = \frac{1}{H-E}$. Ses éléments de matrice sont des fonctions méromorphes de E admettant pour pôles les valeurs propres de H dans le cas d'un spectre discret.

Nous nous proposons de calculer le propagateur "dans l'espace E"

$$G(q, q', E) = \langle q' | \frac{1}{H-E} | q \rangle$$

Il s'exprime à partir du propagateur de Feynman

$$G(q, q', E) = -\frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty d\tau K(q' \tau | q 0) \exp \frac{iE\tau}{\hbar}$$

intégrale convergente pour $E = E_0 + i\epsilon$ avec $\epsilon > 0$.

Partons de la formule de Van Vleck en traitant le terme exponentiel par la méthode de la phase stationnaire

$$G(q, q', E) = -\frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar}} \exp -\frac{iM\pi}{2} \sqrt{-\frac{\partial^2 S_c}{\partial q \partial q'}} \int_0^\infty d\tau \exp +\frac{i}{\hbar} [S_c(q, q', \tau) + E\tau]$$

La phase est stationnaire pour

$$E = -\frac{\partial}{\partial \tau} S_c(q, q', \tau) |_{\tau=t}$$

Par conséquent E peut s'interpréter comme l'énergie d'une particule décrivant la trajectoire classique connectant les points q et q' dans le temps t . Posons $A(t) = S_c(q, q', t) + Et$ où t est une fonction implicite de E déterminée par la condition de stationnarité précédente. Il vient

$$G = -\frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar}} \exp -\frac{iM\pi}{2} \sqrt{-\frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'}} e^{i\frac{A(t)}{\hbar}} \int_0^\infty d\tau \exp \frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial \tau^2} |_{\tau=t} (\tau - t)^2$$

En utilisant $H = pq - \mathcal{L}$ nous pouvons réécrire $A(t)$ sous la forme

$$A(t) = \int_0^t (E + \mathcal{L}) d\tau = \int_q^{q'} p dq$$

L'intégrale sur τ donne, à une phase près, $\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\frac{\partial^2 S}{\partial \tau^2}}}$. Par conséquent

$$G \sim \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{\frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'}}{\frac{\partial^2 S}{\partial \tau^2}}} \exp i \int p dq$$

Posons $W(q, q', E) = \int p dq = S + Et$ et réexprimons le facteur préexponentiel en fonction de $E = -\frac{\partial}{\partial t} S(q, q', t)$.

On a

$$\frac{\partial W}{\partial E}(q, q', E) = t \quad \frac{\partial W}{\partial q}(q, q', E) = \frac{\partial S}{\partial q}(q, q', t)$$

Donc

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'} = \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial q'}(q, q', E) + \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial E} \frac{\partial E}{\partial q'}$$

$$= \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial q'}(q, q', E) - \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial E} \frac{\partial^2 S}{\partial t \partial q'}$$

Or

$$\frac{\partial S}{\partial q'} = \frac{\partial W}{\partial q'}$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t \partial q'} = \frac{\partial^2 W}{\partial q' \partial E} \frac{\partial E}{\partial t} = - \frac{\partial^2 W}{\partial q' \partial E} \frac{\partial^2 S}{\partial t^2}$$

Par conséquent

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'} = \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial q'} + \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial E} \frac{\partial^2 W}{\partial q' \partial E} \frac{\partial^2 S}{\partial t^2}$$

$$\frac{\frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'}}{\frac{\partial^2 S}{\partial t^2}} = \frac{\frac{\partial^2 W}{\partial q \partial q'}}{\frac{\partial^2 S}{\partial t^2}} + \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial E} \frac{\partial^2 W}{\partial q' \partial E}$$

En utilisant $\frac{\partial S}{\partial t} = -E$ il vient

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} = - \frac{\partial E}{\partial t} = - \frac{1}{\frac{\partial^2 W}{\partial E^2}}$$

Par conséquent

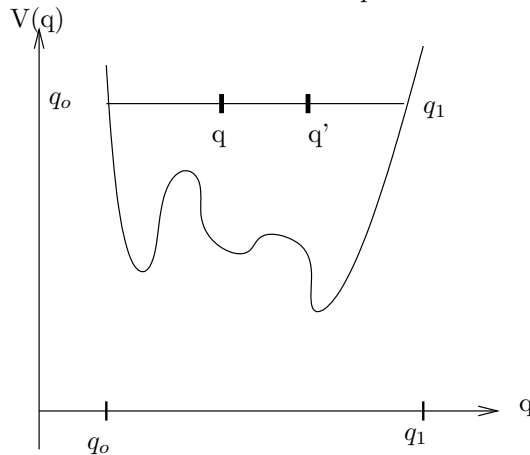
$$\frac{\frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'}}{\frac{\partial^2 S}{\partial t^2}} = - \frac{\partial^2 W}{\partial E^2} \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial q'} + \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial E} \frac{\partial^2 W}{\partial q' \partial E}$$

Nous obtenons ainsi l'expression finale du propagateur à une phase près

$$G(q, q', E) \sim \sum \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{\partial^2 W}{\partial q \partial E} \frac{\partial^2 W}{\partial q' \partial E} - \frac{\partial^2 W}{\partial E^2} \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial q'}} \exp i \frac{W}{\hbar}$$

Application : formule BKW

Considérons le mouvement d'une particule dans le puit de potentiel suivant



L'ensemble des trajectoires allant de q à q' est constitué de la trajectoire "directe" qq' , de la trajectoire réfléchie sur les points q_0, q_1 , ainsi que toutes ses répétitions.

La fonction de Green $G(q, q', E)$ s'obtient en sommant sur toutes ces trajectoires classiques.

Pour une trajectoire se réfléchissant n fois, le terme exponentiel s'écrit

$$\begin{aligned} W_n &= \int_q^{q'} p dq + nW \\ &= \int_q^{q'} p dq + n \oint p dq \end{aligned}$$

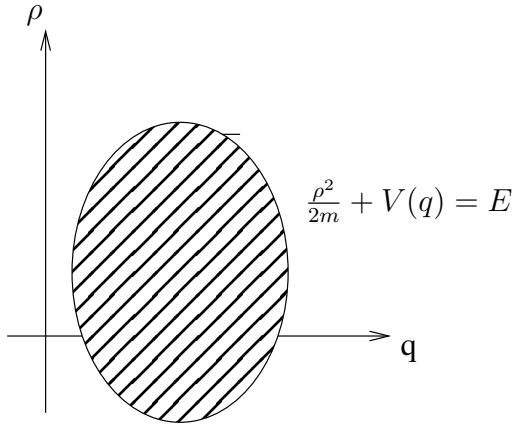
En admettant qu'il apparait une phase supplémentaire de $\frac{\pi}{2}$ à chaque réflexion, il vient

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[\frac{in}{\hbar} \oint p dq + in\pi \right] = \frac{1}{1 + \exp \frac{i}{\hbar} \oint p dq}$$

Les pôles de G sont donc donnés par la condition de quantification *BKW*.

$$\boxed{\oint p dq = 2 \left(k + \frac{1}{2} \right) \pi \hbar}$$

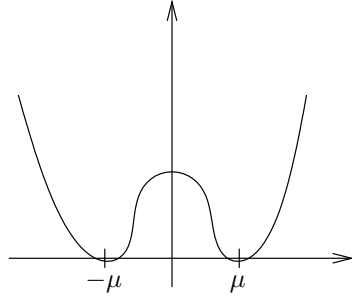
Par conséquent l'énergie du système ne peut prendre que des valeurs discrètes, celles pour lesquelles l'aire de l'espace de phase enclose par la trajectoire classique est un multiple demi entier de $2\pi\hbar$.



3.5 Effet tunnel-Etude du double puits

$$V(q) = \frac{1}{4}(q^2 - \mu^2)^2$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + V(q)$$



On se propose de calculer

$$\langle -\mu, \frac{T}{2} | \mu, -\frac{T}{2} \rangle = \langle -\mu | e^{-\frac{T H}{\hbar}} | \mu \rangle \text{ dans la limite } T \rightarrow \infty$$

Ecrivons les états propres de H comme des combinaisons linéaires d'états localisés dans chacun des puits

$$\psi_1(q) = \frac{\psi_o(q - \mu) + \psi_o(q + \mu)}{\sqrt{2}} \text{ énergie } E_o - \Delta E$$

$$\psi_2(q) = \frac{\psi_o(q - \mu) - \psi_o(q + \mu)}{\sqrt{2}} \text{ énergie } E_o + \Delta E$$

Si à l'instant initial la particule est localisée dans le puits de droite

$$\psi_o(q - \mu) = \frac{\psi_1(q) + \psi_2(q)}{\sqrt{2}}$$

A l'instant T le système sera dans l'état

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1(q) e^{-T(\frac{E_o - \Delta E}{\hbar})} + \psi_2(q) e^{-T(\frac{E_o + \Delta E}{\hbar})} \right)$$

Par conséquent

$$\begin{aligned} \langle -\mu | e^{-\frac{T H}{\hbar}} | \mu \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_o(q + \mu) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1(q) e^{-T(\frac{E_o - \Delta E}{\hbar})} + \psi_2(q) e^{-T(\frac{E_o + \Delta E}{\hbar})} \right) \\ &= e^{-\frac{E_o T}{\hbar}} sh \frac{T \Delta E}{\hbar} \end{aligned}$$

$$\boxed{\lim_{T \rightarrow \infty} \langle -\mu | e^{-\frac{T H}{\hbar}} | \mu \rangle = e^{-\frac{E_o T}{\hbar}} sh \frac{T \Delta E}{\hbar}}$$

Par l'intégrale fonctionnelle on voit que

$$\langle -\mu | e^{-\frac{T\mathcal{H}}{\hbar}} | \mu \rangle = \int \mathcal{D}q \exp -\frac{1}{\hbar} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \left[\frac{m\dot{q}^2}{2} + V(q) \right] d\tau$$

L'équation du mouvement $m\ddot{q} = \frac{\partial V}{\partial q}$, décrit le mouvement d'une particule dans le potentiel $-V(q)$.

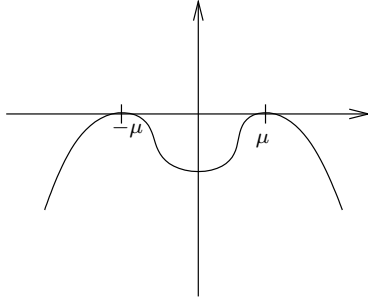
Pour simplifier posons $m=1$, les équations du mouvement deviennent

$$\ddot{q} = q(q^2 - \mu^2)$$

On a l'intégrale première $\frac{1}{2}\dot{q}^2 = V(q) + E$. Pour construire des solutions d'action finie il faut que pour $q = \mu$ la vitesse $\dot{q} = 0$, par conséquent $E = 0$. Les solutions s'écrivent

$$q(\tau) = \pm \mu \operatorname{th} \frac{\mu(\tau - \tau_0)}{\sqrt{2}}$$

On dispose donc d'une famille à un paramètre de solutions d'action finie qui interpolent entre $\pm\mu$



L'action euclidienne s'écrit

$$S_E = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\dot{q}^2}{2} + V(q) \right] d\tau = \int_{-\infty}^{+\infty} 2V(q) d\tau$$

En utilisant $d\tau = \frac{dq}{\sqrt{2V(q)}}$ nous obtenons

$$S_E = \int_{-\mu}^{+\mu} \sqrt{2V(q)} dq$$

Problème : calcul du déterminant des petites fluctuations

$$\det \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial q^2} \right) = \prod_n \epsilon_n$$

$$\left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial q^2} \right) \mathcal{X}_n(\tau) = \epsilon_n \mathcal{X}_n(\tau)$$

Difficulté : il existe une valeur propre nulle puisque la solution classique satisfait

$$\ddot{q}_c = \frac{\partial V}{\partial q} \Big|_{q_{cl}} \Rightarrow \ddot{q}_c = \frac{\partial^2 V}{\partial q^2} \dot{q}_c$$

Par conséquent $\mathcal{X}_o(\tau) = \dot{q}_c(\tau)$ est le fondamental de H (solution sans noeud) donc $\det = 0$.

Ce mode nul reflète l'invariance par translation. Si $q(\tau)$ est solution, $q(\tau - \tau_o)$ est encore solution $\forall \tau_o$. Par conséquent il ne faut pas calculer le déterminant dans tout l'espace fonctionnel, mais il faut calculer séparément la contribution venant de la coordonnée collective (centre de masse de l'instanton).

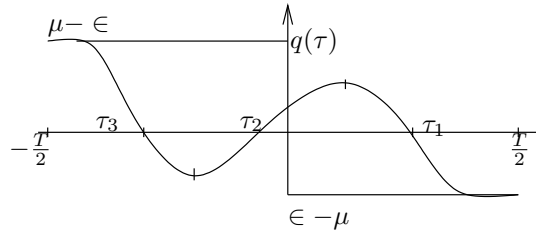
3.6 Approximation du gaz dilué

Pour pouvoir utiliser la formule

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \langle -\mu | e^{-\frac{T\hat{H}}{\hbar}} | \mu \rangle = e^{-\frac{E_o T}{\hbar}} sh \frac{T \Delta E}{\hbar}$$

Il faut garder T fini dans l'intégrale de chemin et ne prendre la limite $T \rightarrow \infty$ qu'à la fin du calcul. Or la solution classique obtenue n'est strictement valable que pour $T \rightarrow \infty$.

Pour contourner cette difficulté on imagine que la particule ne part pas de $+\mu$ à $-\infty$ mais de $\mu - \epsilon$ avec une énergie $V(\mu - \epsilon) \sim 0$ pour $t = -\frac{T}{2}$. Elle décrit la trajectoire approchée suivante



constituée d'un antiinstanton, d'un instanton et d'un antiinstanton. Les points $\tau_3 < \tau_2 < \tau_1$ sont les centres des instantons sur lesquels on doit intégrer (coordonnées collectives).

3.7 Calcul du déterminant : généralités

$$\langle q_f | e^{-\frac{T\hat{H}}{\hbar}} | q_i \rangle = \int \mathcal{D}q(\tau) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_o^t [\frac{m}{2} \dot{q}^2 + V(q)] d\tau}$$

La méthode de Laplace donne

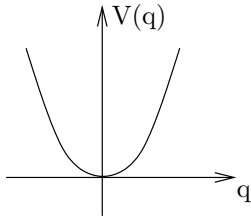
$$\langle q_f | e^{-\frac{T\hat{H}}{\hbar}} | q_i \rangle = e^{-\frac{S_c}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{\det \left(-m \frac{d^2}{dt^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial q^2} \right)}}$$

La solution stationnaire est donnée par $m\ddot{q} = \frac{\partial V}{\partial q}$ équation du mouvement d'une particule de masse m dans le potentiel $-V$

$$E = +\frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q) \text{ est une intégrale première}$$

Exemple d'un puit isolé

3.8. EVALUATION DU DÉTERMINANT DANS L'APPROXIMATION DU GAZ DILUÉ³⁷



Calculons $\langle q = 0 | e^{-\frac{TH}{\hbar}} | q = 0 \rangle$ dans la limite $\hbar \rightarrow 0$. Les équations du mouvement donnent une trajectoire classique unique connectant $q = 0$ à $q = 0$ dans le temps T . Elle s'écrit

$$q(t) = 0 \Rightarrow \dot{q}(t) = 0 \Rightarrow S = 0$$

$$\langle q = 0 | e^{-\frac{TH}{\hbar}} | q = 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\det \left(-m \frac{d^2}{dt^2} + m\omega^2 \right)}} e^{-\frac{S}{\hbar}}$$

où $m\omega^2 = \frac{\partial^2 V}{\partial q^2}$

Nous avons déjà rencontré ce déterminant dans l'étude de l'oscillateur harmonique

$$\langle q | \exp -\frac{iH(t' - t)}{\hbar} | q \rangle = \exp -\frac{i\pi}{4} \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sin \omega(t' - t)}}$$

posant $t' - t = -iT$; $\sin \omega(t' - t) = \frac{sh\omega T}{i}$

$$\langle q | \exp -\frac{TH}{\hbar} | q \rangle = \exp -\frac{i\pi}{4} \sqrt{\frac{im\omega}{2\pi\hbar sh\omega T}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar sh\omega T}}$$

Dans la limite $T \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} \langle q = 0 | e^{-\frac{TH}{\hbar}} | q = 0 \rangle &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \\ &= \psi_0^2(0) e^{-\frac{TE_0}{\hbar}} \end{aligned}$$

Ce résultat est bien en accord avec les formules classiques

$$\psi_0(q) |_{q=0} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} ; E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$\text{en effet } \psi_0(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \exp -\frac{1}{2} \frac{m\omega q^2}{\hbar}$$

3.8 Evaluation du déterminant dans l'approximation du gaz dilué

L'opérateur de fluctuation s'écrit

$$M = -\frac{d^2}{d\tau^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial q^2} |_{q=q_c}$$

avec

$$V(q) = \frac{1}{4}(q^2 - \mu^2)^2$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial q^2} = 3q^2 - \mu^2$$

Les solutions instanton (ou antiinstanton) sont

$$q_c = \pm \mu \operatorname{th} \frac{\mu}{\sqrt{2}}(\tau - \tau_o)$$

Donc

$$\frac{\partial^2 V}{\partial q^2} = 2\mu^2 - \frac{3\mu^2}{ch^2 \frac{\mu}{\sqrt{2}}(\tau - \tau_o)}$$

Le terme constant

$$\frac{\partial^2 V}{\partial q^2} = 2\mu^2$$

décrit les fluctuations quadratiques au voisinage du minima $|q| = \mu$.

On a dans ce cas

$$\sqrt{\frac{1}{\det M}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar sh\omega T}} \rightarrow \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{E_o T}{\hbar}}$$

où $E_o = \frac{\hbar\omega}{2}$ est l'énergie du fondamental d'un puit isolé.

En présence d'une configuration diluée constituée de n instantons/antiinstantons on aura

$$\frac{1}{\sqrt{\det M}} = K^n e^{-\frac{E_o T}{\hbar}}$$

où K est une constante calculable en terme de la solution classique.

Intégrant sur les coordonnées collectives τ_1, τ_2, \dots on aura

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}q(\tau) \exp -\frac{1}{\hbar} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \left[\frac{\dot{q}^2}{2} + V(q) \right] d\tau &= e^{-\frac{E_o T}{\hbar}} \\ \sum_{\text{impairs}}^{\infty} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau_1 \int_{-\frac{T}{2}}^{\tau_1} d\tau_2 \int_{-\frac{T}{2}}^{\tau_{n-1}} d\tau_n \left(K e^{-\frac{S_o}{\hbar}} \right)^n \\ &= e^{-\frac{E_o T}{\hbar}} \sum_{\text{impairs}}^{\infty} \frac{T^n}{n!} \left(K e^{-\frac{S_o}{\hbar}} \right)^n = e^{-\frac{E_o T}{\hbar}} sh \left(K T e^{-\frac{S_o}{\hbar}} \right) \end{aligned}$$

En comparant avec la formule initiale

$$\langle -\mu | e^{-\frac{T H}{\hbar}} | \mu \rangle = e^{-\frac{E_o T}{\hbar}} sh \frac{T \Delta E}{\hbar}$$

on obtient

$$\Delta E = K \hbar \exp -\frac{1}{\hbar} \int_{-\mu}^{\mu} dq \sqrt{2V(q)}$$

3.9 Méthode de Laplace et méthode de la phase stationnaire

- Méthode de Laplace (voir Copson p 39)
Soit $g(x)$ et $h(x)$ deux fonctions réelles continues définies sur l'intervalle fini ou semi infini $a < x \leq b$ telles que
 1. $g(x) e^{th(x)}$ est absolument intégrable sur l'intervalle $\forall t > 0$.
 2. $h(x)$ a un maximum dans l'intervalle $[a, b]$ pour $x = a$ tel que $h'(a) = 0$ $h''(a) < 0$ et le maximum de $h(x)$ dans tout sous intervalle fermé de $[a, b]$ est strictement inférieur à $h(\infty)$.
 3. $h''(x)$ est continu.
Alors pour $t \rightarrow \infty$ on a $\int_a^b g(x) e^{th(x)} \sim g(a) e^{th(a)} \sqrt{\frac{\pi}{-2th''(a)}}$.
- Généralisation : elle permet de traiter des intégrales de la forme $\int_a^b g(x) e^{th(x)} dx$ dans la limite $t \rightarrow \infty$. On suppose que $h(x)$ a un maximum unique en $S\Sigma[a, b]$. En divisant l'intervalle $[a, b]$ en deux intervalles $[a, c]$ et $[c, b]$ on se ramène au cas précédent.

exemple : la fonction $\Gamma(t)$ et la formule de Stirling

$$\Gamma(t+1) = \int_0^\infty e^{-x} x^t dx$$

posons $x = tu$

$$\begin{aligned} \Gamma(t+1) &= \int_0^\infty e^{-tu} t^{t+1} u^t du \\ &= t^{t+1} \int_0^\infty e^{t[\log u - u]} du \end{aligned}$$

la fonction $h(u) = \log u - u$ a un maximum pour $u = 1$. Sur chaque intervalle $[1, \infty]$ [01] on obtient la même contribution $e^{-t} \sqrt{\frac{\pi}{2t}}$.

D'où

$$\Gamma(t \rightarrow \infty) \sim t \rightarrow \infty \sqrt{2\pi} t^{t+\frac{1}{2}} e^{-t}$$

- Méthode de la phase stationnaire
Si $h(x)$ a un point stationnaire pour $c \in [a, b]$
 1. $h''(c) > 0$

$$I = \int_a^b g(x) e^{ith(x)} dx = \sqrt{\frac{2\pi}{th''(c)}} e^{ith(c) + \frac{i\pi}{4}} + o\left(\frac{1}{t}\right)$$

2. $h''(c) < 0$

$$I = \int_a^b g(x) e^{ith(x)} dx = \sqrt{-\frac{2\pi}{th''(c)}} e^{ith(c) + \frac{i\pi}{4}} + o\left(\frac{1}{t}\right)$$

Chapitre 4

Applications à la physique des polymères

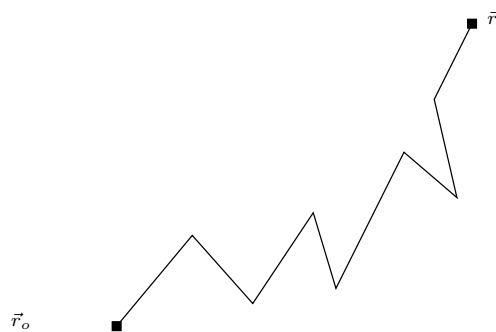
Sommaire

4.1	Modélisation d'un polymère comme marche aléatoire	41
4.2	Polymère dans un potentiel	44
4.3	Elasticité des biomolécules	46
4.3.1	Modèle gaussien discret	46
4.3.2	Modèle du ver	49

4.1 Modélisation d'un polymère comme marche aléatoire

Un polymère idéal est constitué d'une chaîne de monomères identiques sans interactions. On peut le modéliser comme un ensemble de N batonnets librement articulés dont l'orientation relative est distribuée de façon uniforme.

Supposons qu'une des extrémités de la chaîne reste fixée en \vec{r}_0 . Selon les orientations relatives des différents monomères, il existe un grand nombre de configurations de longueur Nb dont l'autre extrémité occupe la position $r_N^{\vec{r}} = \vec{r}$. On se propose de calculer la distribution de probabilité de l'extrémité du polymère.



Hypothèse :

- La position \vec{r}_j du monomère j ne dépend que de celle du monomère précédent.

On se propose de calculer la distribution de probabilité $P_N(\vec{r} | \vec{r}_0)$ de l'extrémité \vec{r} d'un polymère fixé en \vec{r}_0 .

Probabilité de transition

$$P(\vec{r}_j - \vec{r}_{j-1}) = \frac{1}{4\pi b^2} \delta(|\vec{r}_j - \vec{r}_{j-1}| - b)$$

Partons de la récurrence

$$P_N(\vec{r} | \vec{r}_0) = \int P(\vec{r} - \vec{r}') P_{N-1}(\vec{r}' | \vec{r}_0) d^3 \vec{r}'$$

Posons

$$\Gamma_N(\vec{k}) = \int P_N(\vec{r} | \vec{r}_0) e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3 \vec{r}$$

Soit $\lambda(\vec{k})$ la fonction de structure

$$\lambda(\vec{k}) := \int d^3 \vec{r} e^{i\vec{k}\vec{r}} \frac{1}{4\pi b^2} \delta(|\vec{r}| - b) = \frac{\sin kb}{kb}$$

La solution de la récurrence donne

$$\Gamma_N(\vec{k}) = \Gamma_{N-1}(\vec{k}) \lambda(\vec{k})$$

Conditions initiales

$$\begin{aligned} \Gamma_0(\vec{k}) &= \int P_0(\vec{r} | \vec{r}_0) e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3 \vec{r} \\ &= \int \delta^3(\vec{r} - \vec{r}_0) e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3 \vec{r} = e^{i\vec{k}\vec{r}_0} \end{aligned}$$

Il vient

$$\Gamma_N(\vec{k}) = [\lambda(\vec{k})]^N e^{i\vec{k}\vec{r}_0}$$

Par conséquent

$$P_N(\vec{r} | \vec{r}_0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}_0)} \left(\frac{\sin kb}{kb}\right)^N d^3 \vec{k}$$

Analysons le comportement de longues chaînes dans la limite d'échelle $N \rightarrow \infty, b \rightarrow 0, Nb^2$ fixé.

A k fixé on obtient

$$\left(\frac{\sin kb}{kb}\right)^N = \exp N \log \left(1 - \frac{(kb)^2}{6}\right) \sim \exp -\frac{N (kb)^2}{6}$$

4.1. MODÉLISATION D'UN POLYMÈRE COMME MARCHE ALÉATOIRE 43

Posons $\frac{Nb^2}{3} = s$, il vient

$$\begin{aligned} P[\vec{r}(s) = \vec{r} \mid \vec{r}(0) = \vec{r}_0] &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}_0) - \frac{sk^2}{2}} d^3\vec{k} \\ &= \left(\frac{1}{2\pi s}\right)^{\frac{3}{2}} \exp -\frac{1}{2s} (\vec{r} - \vec{r}_0)^2 \end{aligned}$$

La convergence vers une distribution gaussienne résulte du théorème de la limite centrale. Le polymère idéal définit une marche aléatoire $\vec{R}_{j+1} = \vec{R}_j + \vec{b}$. Cette marche aléatoire converge, dans la limite d'échelle considérée, vers un mouvement brownien dont nous venons de calculer la probabilité de transition.

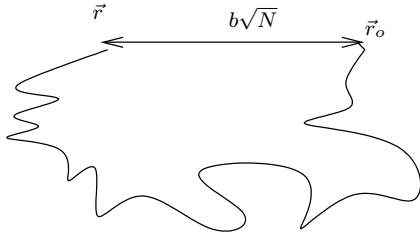
Remarques :

1. La distance quadratique moyenne bout à bout entre les extrémités du polymère est donnée par

$$\langle (\vec{r}(s) - \vec{r}(0))^2 \rangle = Nb^2 = 3s$$

La longueur totale du polymère est infinie dans la limite continue en effet

$$\left. \begin{array}{l} Nb^2 \text{ fini} \\ b \rightarrow 0 \end{array} \right\} \Rightarrow Nb \rightarrow \infty$$



2. Dans la limite continue $P[\vec{r}(s) = \vec{r} \mid \vec{r}(0) = \vec{r}_0]$ est solution de

$$\frac{\partial P}{\partial s} = \frac{1}{2} \Delta P \text{ avec } \lim_{s \rightarrow 0} P[\vec{r}(s) = \vec{r} \mid \vec{r}(0) = \vec{r}_0] = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$$

Par conséquent P coïncide avec le propagateur euclidien et peut donc être représentée par l'intégrale de chemin

$$P[\vec{r}(s) = \vec{r} \mid \vec{r}(0) = \vec{r}_0] = \int_{\vec{r}(0)=\vec{r}_0}^{\vec{r}(s)=\vec{r}} \mathcal{D}\vec{r}(\tau) \exp -\frac{1}{2} \int_0^s \left(\frac{d\vec{r}}{d\tau}\right)^2 d\tau$$

Cette expression permet d'interpréter la variable s comme l'abscisse curviligne le long du polymère (bien que dimensionnellement $s \sim b^2$).

3. Dans un polymère physique, les monomères interagissent entre eux et il existe des contraintes d'autoévitement de sorte que

$$\langle [\vec{r}(s) - \vec{r}(0)]^2 \rangle \sim N^{2\nu} b^2$$

où l'exposant ν est donné avec une bonne approximation par la formule de Flory ($d \leq 4$)

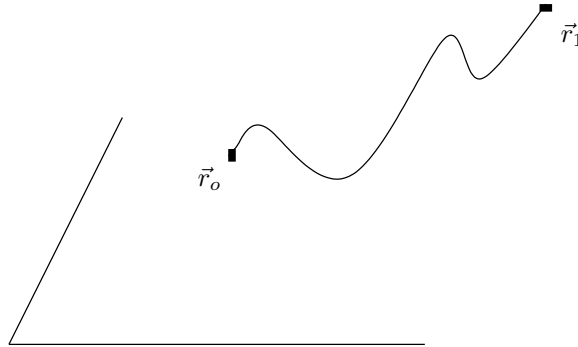
$$\nu = \frac{3}{d+2}$$

- Pour $d = 1$ $\nu = 1$ $r \sim N$ en effet un polymère autoévitant unidimensionnel est complètement étiré.
- Pour $d = 4$ $\nu = \frac{3}{6} = \frac{1}{2}$ $r^2 \sim N$
On retrouve un système diffusif car l'interaction est non pertinente pour $d \geq 4$.

4.2 Polymère dans un potentiel

On considère un polymère en présence d'une surface solide. Par exemple un polymère en solution au voisinage d'une paroi. On suppose que chaque monomère interagit avec la paroi par un potentiel $U(\vec{r})$.

Configuration typique



Le poids statistique attaché à une chaîne d'extrémités fixées \vec{r}_0, \vec{r}_1 peut se calculer en supposant le système à l'équilibre à température $T = \frac{1}{k\beta}$.

$$\frac{1}{\mathbb{Z}} \int \mathcal{D}\vec{r}(s) \delta[\vec{r}(0) - \vec{r}_0] \delta[\vec{r}(t) - \vec{r}_1] \exp - \int_0^t \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\vec{r}}{ds} \right)^2 + \beta U(\vec{r}(s)) \right] ds$$

Le numérateur peut s'écrire

$$\langle \vec{r}_1 | e^{-tH} | \vec{r}_0 \rangle \text{ où } H = -\frac{1}{2}\Delta + \beta U$$

\mathbb{Z} est un facteur de normalisation

$$\mathbb{Z} = \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \langle \vec{r}_1 | e^{-tH} | \vec{r}_0 \rangle$$

Afin de caractériser l'extension spatiale du polymère, calculons la distance quadratique moyenne entre les extrémités

$$R^2(t) = \langle [\vec{r}(t) - \vec{r}(0)]^2 \rangle$$

$$R^2(t) = \frac{\int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 (\vec{r}_0 - \vec{r}_1)^2 \langle \vec{r}_0 | e^{-tH} | \vec{r}_1 \rangle}{\int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \langle \vec{r}_0 | e^{-tH} | \vec{r}_1 \rangle}$$

Développons en fonctions propres

$$\langle \vec{r}_0 | e^{-tH} | \vec{r}_1 \rangle = \sum \psi_n(\vec{r}_0) \psi_n(\vec{r}_1) e^{-tE_n}$$

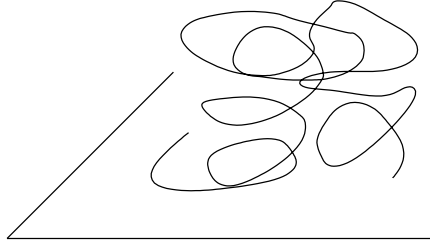
- A basse température $\beta \rightarrow \infty$, si le potentiel d'interaction avec la paroi est attractif on aura un état lié (sous certaines conditions). En ne retenant que cette contribution on obtient

$$R^2(t) \simeq \frac{\int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 (\vec{r}_0 - \vec{r}_1)^2 \psi_0(\vec{r}_0) \psi_0(\vec{r}_1) e^{-tE_0}}{\int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \psi_0(\vec{r}_0) \psi_0(\vec{r}_1) e^{-tE_0}}$$

$$= \frac{\int d\vec{r}_0 \vec{r}_0^2 \psi_0(\vec{r}_0) \int d\vec{r}_1 \psi_0(\vec{r}_1) + \int d\vec{r}_1 \vec{r}_1^2 \psi_0(\vec{r}_1) \int d\vec{r}_0 \psi_0(\vec{r}_0)}{\int d\vec{r}_0 \psi_0(\vec{r}_0) \int d\vec{r}_1 \psi_0(\vec{r}_1)}$$

le terme croisé disparaît car $\int d\vec{r}_0 \vec{r}_0 \psi_0(\vec{r}_0) = 0$ si $\psi_0(\vec{r}_0)$ est à symétrie radiale donc $R^2(t)$ tend vers une constante indépendante de t .

Le polymère est dans une phase localisée



- A haute température $\beta \rightarrow 0$, on peut remplacer $\langle \vec{r}_1 | e^{-tH} | \vec{r}_0 \rangle$ par le propagateur libre, par conséquent

$$R^2(t) = \frac{\int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \exp\left(-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_0)^2}{2t}\right) (\vec{r}_1 - \vec{r}_0)^2}{\int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \exp\left(-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_0)^2}{2t}\right)}$$

En introduisant le centre de masse

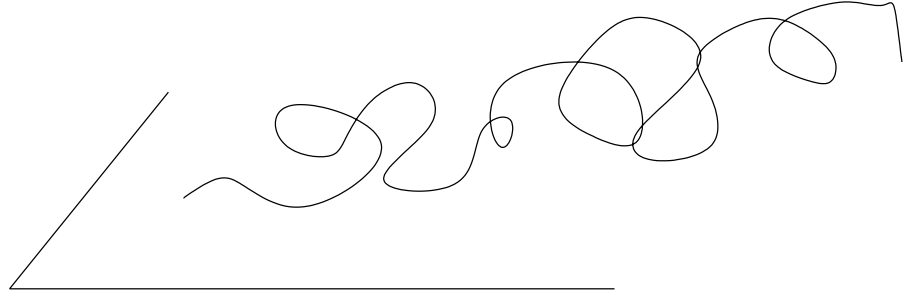
$$\vec{R} = \frac{\vec{r}_0 + \vec{r}_1}{2} \text{ et la variable relative } \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_0$$

il vient

$$R^2(t) = \frac{\int d\vec{r} \vec{r}^2 \exp\left(-\frac{\vec{r}^2}{2t}\right)}{\int d\vec{r} \exp\left(-\frac{\vec{r}^2}{2t}\right)} = \sqrt{3t}$$

On a donc

$$\sqrt{\langle R^2 \rangle} = \sqrt{3t} = b\sqrt{N} \rightarrow \infty$$



Ceci suggère l'existence d'une transition de délocalisation pour une température critique $T = T_c$. Question : comment se comporte $R^2(t)$ au voisinage de $T = T_c$?

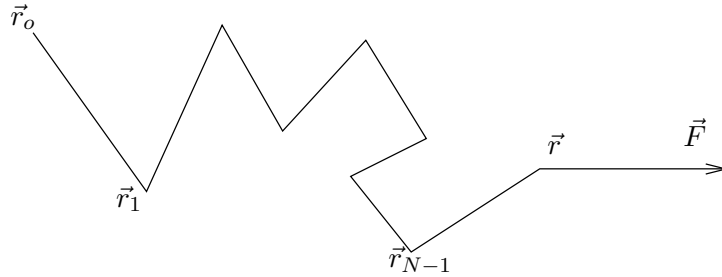
4.3 Elasticité des biomolécules

4.3.1 Modèle gaussien discret

Revenons au modèle discret de N monomères de longueur b pour lequel nous avons écrit la probabilité d'une configuration sous la forme

$$P_N(\vec{r} | \vec{r}_0) = \int P(\vec{r} - \vec{r}_{N-1})P(\vec{r}_{N-1} - \vec{r}_{N-2}) \dots P(\vec{r}_1 - \vec{r}_0) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_{N-1}$$

Cette expression traduit l'indépendance statistique des différents éléments de la chaîne



On suppose la chaîne attachée au point \vec{r}_0 à l'une de ses extrémités et soumise à une force \vec{F} constante s'exerçant sur l'extrémité $\vec{r} = \vec{r}_N$. Dans l'ensemble canonique le poids statistique d'une configuration peut donc s'écrire

$$e^{-\beta U(\vec{r})} P(\vec{r} - \vec{r}_{N-1})P(\vec{r}_{N-1} - \vec{r}_{N-2}) \dots P(\vec{r}_1 - \vec{r}_0)$$

où $U(\vec{r}) = -\vec{F}(\vec{r} - \vec{r}_0)$ est l'énergie potentielle (travail de la force \vec{F}). Ecrivons $U(\vec{r})$ sous la forme

$$U(\vec{r}) = -\vec{F} \sum_{i=1}^N (\vec{r}_i - \vec{r}_{i-1})$$

Par conséquent la fonction de partition canonique pourra se mettre sous la forme

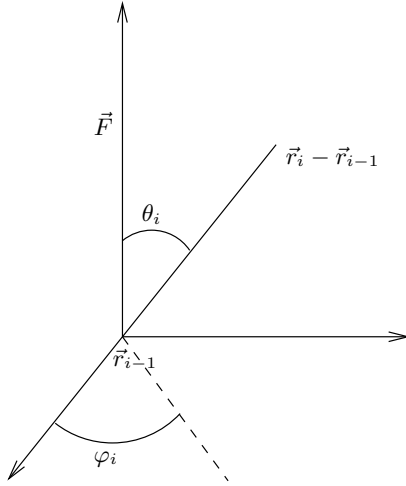
$$\mathbb{Z} = \int \prod_{i=1}^N e^{\beta \vec{F} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_{i-1})} P(\vec{r}_i - \vec{r}_{i-1}) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N$$

On intègre sur toutes les variables, y compris l'extrémité \vec{r} du polymère.

Dans le modèle de N maillons rigides on a

$$P(\vec{r}_i - \vec{r}_{i-1}) = \frac{1}{4\pi b^2} \delta(|\vec{r}_i - \vec{r}_{i-1}| - b)$$

L'intégration va se factoriser en une partie radiale triviale et une partie angulaire. Le i ème maillon sera repéré par ses angles (θ_i, φ_i) par rapport à la direction de la force.



Par conséquent

$$\mathbb{Z} \sim \int \exp \sum_{i=1}^N \beta F b \cos \theta_i \prod_{i=1}^N \sin \theta_i d\theta_i d\varphi_i$$

La fonction de partition se factorise sous la forme

$$\mathbb{Z} = \left[2\pi \int_{-1}^{+1} e^{\beta F b u} du \right]^N = \left[\frac{4\pi sh \beta F b}{\beta F b} \right]^N$$

Nous en déduisons l'énergie libre

$$\mathcal{F} = -NkT \log \mathbb{Z} = -NkT [\log sh \beta F b - \log \beta F b]$$

et l'élongation de la chaîne

$$\begin{aligned} l &= -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial F} = NkT \left[\beta b \coth \beta F b - \frac{1}{F} \right] \\ &= Nb \left[\coth \beta F b - \frac{1}{\beta F b} \right] \\ &= Nb \mathcal{L}(x) \end{aligned}$$

où $\mathcal{L}(x) = \coth x - \frac{1}{x}$ est la fonction de Langevin

Discussion : L'élongation est fonction du paramètre sans dimension $x = \beta Fb = \frac{Fb}{kT}$

- pour $x \rightarrow \infty$ (force infinie ou température nulle) on obtient $l = Nb$. Tous les maillons s'orientent dans le sens de la force donnant ainsi à la chaîne sa longueur maximale
- pour $x \rightarrow 0$ $\mathcal{L}(x) \simeq \frac{x}{3}$. A petite force ou haute température on a

$$l = \frac{Nb^2 F}{3kT}$$

On retrouve ainsi une loi linéaire avec un module d'élasticité proportionnel à la température. C'est un comportement entropique qui traduit le fait que le modèle repose essentiellement sur un comptage de configurations.

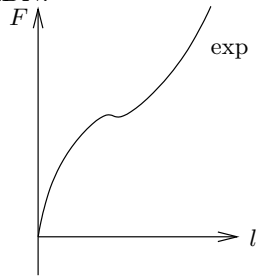
Expériences avec l'ADN

(voir Marko JF, Siggia ED, Science, 265,505-508,1995)

L'expression précédente $\frac{l}{Nb} = \frac{bF}{3kT}$ fait apparaître une force typique $F_0 = \frac{kT}{b}$ qui est du bon ordre de grandeur à condition de prendre pour b non pas la distance entre bases ($b = 3,37 \text{ \AA}$) mais une distance effective 10^3 \AA . Il vient

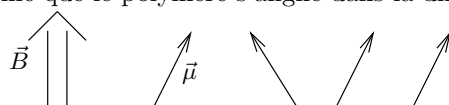
$$F_0 = \underbrace{\frac{1}{40}}_{\frac{1}{40} eV} \times 1,6 \times 10^{-19} \times \frac{1}{10^3 \times 10^{-10}} = 4 \times 10^{-14} N$$

L'accord avec la courbe expérimentale n'est pas satisfaisant. Il convient donc de recourir à un autre modèle prenant en compte les propriétés d'élasticité de l'ADN.



Analogie avec le paramagnétisme

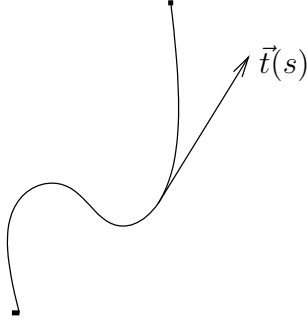
$H = -\vec{\mu}\vec{B}$ décrit le couplage d'un moment magnétique à un champ extérieur. Les moments magnétiques tendent à s'aligner dans la direction du champ, de même que le polymère s'aligne dans la direction de la force.



4.3.2 Modèle du ver

On modélise l'ADN comme un polymère semi-flexible. L'énergie élastique d'une configuration de longueur l est

$$E = \frac{B}{2} \int_0^l \left(\frac{\partial \vec{t}}{\partial s} \right)^2 ds - \int_0^l \vec{F} \vec{t} ds$$



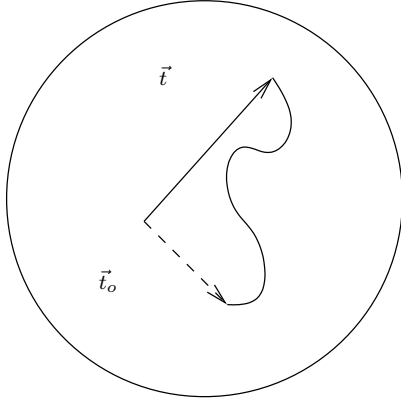
où \vec{t} est le vecteur tangent le long de la chaîne. Le premier terme représente une énergie de courbure $\left(\frac{d\vec{t}}{ds} = \frac{\vec{n}}{R} \right)$ et le second une énergie élastique de déformation

$$\vec{t} = \frac{d\vec{r}}{ds} \Rightarrow \vec{F} \vec{t} ds = \vec{F} d\vec{r}$$

La fonction de partition est donnée par l'intégrale de chemin

$$\mathbb{Z} = \int \mathcal{D}\vec{t} \exp -\beta E$$

$\mathcal{D}\vec{t}$ décrit la mesure des chemins tracés sur la sphère unité issus du point $\vec{t}_0 = \vec{t}(s=0)$ et arrivant au point $\vec{t} = \vec{t}(s=l)$



Paramétrisant le vecteur \vec{t} sous la forme $(\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta)$ on obtient

$$\beta E = \frac{\beta B}{2} \int_0^l \left(\dot{\theta}^2 + \sin^2\theta \dot{\varphi}^2 \right) ds - \int_0^l \beta F \cos\theta ds$$

Le premier terme représente le lagrangien d'une particule de masse $m = \beta B$ se déplaçant sur la sphère S_2 . Le hamiltonien associé est

$$H_0 = -\frac{1}{2m} \Delta_2 = -\frac{1}{2\beta B} \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]$$

Le second terme peut s'interpréter comme un couplage dipolaire. Le hamiltonien complet s'écrit donc

$$H = -\frac{1}{2B\beta}\Delta - \beta F \cos \theta = \frac{\vec{L}^2}{2B\beta} - \beta F \cos \theta$$

où \vec{L} est l'opérateur de moment cinétique orbital. Par conséquent le poids statistique d'un chemin de longueur l s'écrit

$$P(l, \vec{t} | 0, \vec{t}_0) \sim \langle \vec{t} | \exp -H l | \vec{t}_0 \rangle$$

$$Hl = \frac{l}{\beta B} \left[-\frac{1}{2}\Delta - \beta^2 BF \cos \theta \right]$$

$\beta B = \xi$ a les dimensions d'une longueur appelée longueur de persistance

$$Hl = \frac{l}{\xi} \left[-\frac{1}{2}\Delta - \frac{F\xi}{kT} \cos \theta \right]$$

En l'absence de force extérieure

$$P(l, \vec{t} | 0, \vec{t}_0) \sim \langle \vec{t} | \exp -\frac{l}{2\xi}\Delta | \vec{t}_0 \rangle$$

- état fondamental de fonction d'onde Y_0^0 et d'énergie nulle
- premier état excité Y_1^m d'énergie $L(L+1) = 2$

Pour une chaîne de longueur l telle que \vec{t}_0/\vec{k}

$$P(l, \vec{t} | 0, \vec{t}_0) \sim \frac{1}{4\pi} + \frac{3}{4\pi} \cos \theta \exp -\frac{l}{\xi}$$

Pour l'ADN la longueur de persistance $\xi \sim 500\text{\AA}$ est beaucoup plus grande que la distance entre bases. C'est cette propriété qui permet de décrire l'ADN comme un modèle élastique continu.

Chapitre 5

Introduction au mouvement Brownien

Sommaire

5.1	Histoire	51
5.1.1	Physique	51
5.1.2	Mathématiques	52
5.1.3	Théorie de la spéculation	53
5.2	Définition d'une marche aléatoire	53
5.3	Marche aléatoire sur réseau	54
5.3.1	Autre dérivation	56
5.3.2	Programme de simulation	57
5.4	Limite continue	57
5.4.1	Théorème	59
5.5	Notions de processus aléatoire	59
5.5.1	Probabilités conditionnelles	60
5.5.2	Processus de Markov	60
5.5.3	Equation de Chapman-Kolmogorov	61
5.5.4	Processus aléatoire stationnaire	61
5.5.5	Théorème de Doob	61
5.6	Exemples de processus stochastiques gaussiens	63
5.6.1	Processus de Wiener	63
5.6.2	Processus d'Ornstein-Uhlenbeck	64
5.6.3	Bruit blanc	64
5.6.4	Construction de $W(t)$ comme processus	65

5.1 Histoire

5.1.1 Physique

1827 : L'histoire du mouvement brownien commence avec les observations du botaniste anglais Georges Brown. En observant de fines particules en suspension dans l'eau il constate qu'elles sont animées d'un mouvement irrégulier et

incessant.

Tout au long du 19^{ème} siècle plusieurs physiciens vont chercher à comprendre l'origine du phénomène. Une explication plausible repose sur "l'hypothèse" moléculaire, les nombreux chocs entre la particule et les molécules environnantes seraient la cause du mouvement observé.

1905 : Einstein donne une description théorique du phénomène. En utilisant la mécanique statistique, il calcule la densité de probabilité d'observer la particule au point x . En dimension 1

$$f(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp -\frac{x^2}{4Dt}$$

Il en déduit que l'écart quadratique moyen $\langle x^2(t) \rangle$ croît linéairement avec le temps t .

$$\langle x^2(t) \rangle = 2Dt$$

Pour des particules sphériques de rayon a , il utilise la relation de Stokes donnant le coefficient de friction η en fonction de la viscosité du fluide et en déduit le coefficient de diffusion $D = \frac{kT}{6\pi\eta a}$

1909 : Jean Perrin réalise des expériences qui permettent de mesurer D et d'en déduire $k = \frac{R}{N}$, d'où la détermination du nombre d'Avogadro $N = 6,02 \cdot 10^{23}$ et une confirmation de "l'hypothèse moléculaire". En France cette "hypothèse moléculaire" avait un certain nombre de détracteurs influents parmi lesquels Marcellin Berthelot qui était considéré comme le pape de la chimie. —> Prix Nobel Jean Perrin (1926).

5.1.2 Mathématiques

En 1827 quand Brown publie ses travaux, les mathématiciens manipulent les fonctions, les dérivent, les développent en série. La notion de fonction analytique commence à voir le jour (eq de Cauchy Riemann 1814). Cependant les seules fonctions qui font l'objet d'étude sont des fonctions régulières.

En 1872 Weierstrass exhibe une fonction continue non dérivable

$$f(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a^n \sin(b^n t)$$

$$0 < a < 1 < ab$$

Ces objets sont alors considérés comme des "monstres" par les mathématiciens (Hermite). Le mouvement brownien a joué le rôle de monstre auprès des mathématiciens selon la parabole de Benoît Mandelbrot.

"L'histoire des sciences regorge de sorciers et de contes de fées. Un sorcier crée un monstre non par besoin ni par malice mais simplement pour se prouver que la bête n'était point inconcevable. Le monstre lâché, les paysans lui refusent l'entrée de leur village, car ses traits les effraient autant qu'ils forcent leur incrédulité. Et puis un jour une fée leur ouvre les yeux, le monstre est honnête homme et tout prêt à les servir. On s'y habitue, on finit même par le trouver beau".

Le mouvement brownien comme nous le verrons plus loin est effectivement un monstre puisqu'il s'agit d'un processus continu mais non dérivable. Sur l'intervalle $[0,1]$ il peut être construit comme la série de Fourier aléatoire :

$$x(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \sqrt{2}}{n\pi} \sin(n\pi t)$$

dans laquelle les c_n sont des variables aléatoires gaussiennes *i i d.*

→ Les travaux de Wiener (1923) marquent le démarrage de la théorie des processus stochastiques. La théorie des probabilités acquiert un véritable statut mathématique, le mouvement brownien devient un honnête homme.

→ Travaux de Paul Lévy

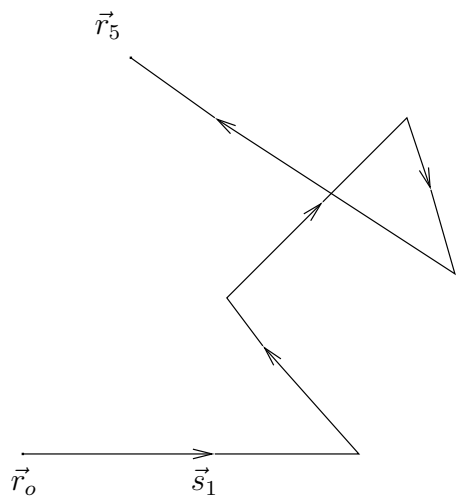
5.1.3 Théorie de la spéculation

Bachelier soutient en 1900 une thèse de doctorat intitulée " Théorie de la spéculation" dans laquelle il présente une application du calcul des probabilités aux opérations boursières. Il montre que, dans un marché idéal, la valeur d'une action à l'instant t peut être décrite comme un processus à accroissement indépendants et homogènes dont les trajectoires sont continues. C'est la première théorie mathématique du mouvement brownien

5.2 Définition d'une marche aléatoire

Considérons une particule dans l'espace euclidien \mathbb{R}^d . Soit \vec{r}_0 sa position initiale à l'instant t_0 . A des temps ultérieurs t_1, t_2, \dots, t_n elle subit des sauts $\vec{s}_1, \vec{s}_2, \dots, \vec{s}_n$ de sorte qu' au temps t_n sa position est

$$\vec{r}_n = \vec{r}_0 + \sum_{k=1}^n \vec{s}_k$$



Ce processus définit une marche aléatoire si les sauts successifs $\{\vec{s}_k\}$ sont des variables aléatoires **indépendantes** distribuées selon la même loi.

$$p(\vec{s})d\vec{s} = Prob\{\vec{s} < \vec{s}_k < \vec{s} + d\vec{s}\}$$

On définit l'**état** du système par la position \vec{r} de la particule au bout de n sauts. Problème : calculer la probabilité de la position finale de la particule au bout de n sauts.

$$P_n(\vec{r})d\vec{r} = Prob\{\vec{r} < \vec{r}_n < \vec{r} + d\vec{r}\}$$

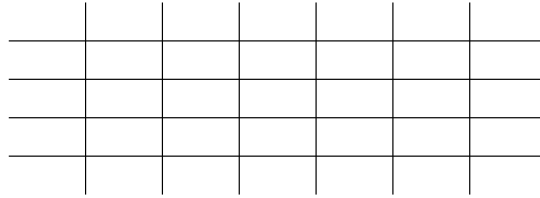
Les déplacements \vec{s}_k étant indépendants, la position \vec{r}_n ne dépend pas de toute l'histoire du processus mais seulement de la position de la particule lors du dernier saut. On a $\vec{r}_n = \vec{r}_{n-1} + \vec{s}_n$

Ceci constitue un exemple de processus de Markov.

L'état du système peut être soit continu (comme dans l'exemple ci dessus), soit discret. C'est notamment le cas des marches aléatoires sur réseau que nous allons maintenant discuter.

5.3 Marche aléatoire sur réseau

On considère un réseau hypercubique de dimension d consistant de sites repérés par un vecteur $\vec{r} = (r_1, r_2, \dots, r_d) \in \mathbb{Z}^d$. Chaque site est relié à ses plus proches voisins par un lien



On considère une particule partant du point \vec{r}_0 . A chaque itération, la particule saute d'un site \vec{l} au site $\vec{r} = \vec{l} + \vec{s}$ avec une probabilité

$$p(\vec{s}) = p(\vec{r} - \vec{l})$$

Désignant par $P_n(\vec{r}|\vec{r}_0)$ la probabilité que la particule soit au site \vec{r} au bout de n sauts sachant qu'elle est partie du point \vec{r}_0 , la propriété de Markov nous donne la récurrence

$$P_{n+1}(\vec{r}|\vec{r}_0) = \sum_{\vec{l}} p(\vec{r} - \vec{l}) P_n(\vec{l}|\vec{r}_0)$$

avec

$$P_0(\vec{r}|\vec{r}_0) = \delta_{\vec{r},\vec{r}_0}$$

normalisation

$$\sum_{\vec{r}} P_n(\vec{r}|\vec{r}_0) = 1$$

Considérons pour commencer le cas d'un réseau unidimensionnel

$$P_{n+1}(r|r_0) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} p(r-l) P_n(l|r_0)$$

$$P_0(r|r_0) = \delta_{r,r_0}$$

Il est commode de faire une analyse de Fourier de cette récurrence. Introduisons la série de Fourier

$$\lambda(\theta) = \sum_{r=-\infty}^{+\infty} p(r) e^{ir\theta}$$

appelée fonction de structure

$$\begin{cases} \sum p(r) = 1 \\ \Rightarrow \lambda(0) = 1 \end{cases}$$

La fonction génératrice

$$\Gamma_n(\theta, r_0) = \sum_{r=-\infty}^{+\infty} P_n(r|r_0) e^{ir\theta}$$

satisfait la récurrence

$$\begin{aligned} \Gamma_{n+1}(\theta, r_0) &= \sum_{r=-\infty}^{+\infty} P_{n+1}(r|r_0) e^{ir\theta} \\ &= \sum_{r,l} p(r-l) P_n(l|r_0) e^{ir\theta} \\ &= \sum_{r,l} p(r-l) P_n(l|r_0) e^{i(r-l)\theta} e^{il\theta} \\ &= \Gamma_n(\theta, r_0) \lambda(\theta) \end{aligned}$$

La condition initiale $P_0(r|r_0) = \delta_{r,r_0}$ donne $\Gamma_0(\theta, r_0) = e^{ir_0\theta}$ donc

$$\Gamma_n(\theta, r_0) = \lambda^n(\theta) e^{ir_0\theta}$$

d'où

$$\begin{aligned} P_n(r|r_0) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \exp -ir\theta \Gamma_n(\theta, r_0) d\theta \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \exp -i(r-r_0)\theta \lambda^n(\theta) d\theta \end{aligned}$$

Puisque $P_n(r|r_0)$ ne dépend que de $r-r_0$ on a

$$P_n(r|r_0) = P_n(r-r_0|0) = P_n(r-r_0)$$

$$\boxed{P_n(r) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ir\theta} \lambda^n(\theta) d\theta}$$

Cette formule se généralise trivialement au cas d'un réseau \mathbb{Z}^d

$$P_n(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int e^{-i\vec{r}\vec{\theta}} [\lambda(\vec{\theta})]^n d\vec{\theta}$$

Exemples

1. Marche aléatoire symétrique sur \mathbb{Z}

$$p(1) = p(-1) = \frac{1}{2}$$

$$\lambda(\theta) = \frac{1}{2} (e^{i\theta} + e^{-i\theta}) = \cos \theta$$

$$P_n(r) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (\cos \theta)^n e^{-ir\theta} d\theta$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (\cos \theta)^n \cos r\theta d\theta$$

On retrouve la distribution binomiale

$$P_n(r) = 2^{-n} \frac{n!}{\left(\frac{n+r}{2}\right)! \left(\frac{n-r}{2}\right)!}$$

2. Marche aléatoire symétrique sur \mathbb{Z}^2

$$p(1, 0) = p(0, 1) = p(0, -1) = p(-1, 0) = \frac{1}{4}$$

$$\lambda(\theta_1, \theta_2) = \frac{1}{4} [e^{i\theta_1} + e^{-i\theta_1} + e^{i\theta_2} + e^{-i\theta_2}]$$

$$= \frac{1}{2} [\cos\theta_1 + \cos\theta_2]$$

5.3.1 Autre dérivation

La relation

$$\vec{r}_n = \vec{r}_0 + \vec{s}_1 + \vec{s}_2 + \dots + \vec{s}_n$$

permet de calculer la fonction caractéristique de la variable aléatoire $\vec{r} = \vec{r}_n - \vec{r}_0$ en l'exprimant comme une somme de variables aléatoires indépendantes

$$\mathbb{E} \left(e^{i\vec{\theta}\vec{r}} \right) = \mathbb{E} \left(e^{i\vec{\theta}(\vec{s}_1 + \dots + \vec{s}_n)} \right) = \left[e^{i\vec{\theta}\vec{s}} \right]^n$$

$$= [\lambda(\vec{\theta})]^n$$

Donc

$$\int e^{i\vec{\theta}\vec{r}} P_n(\vec{r}) d\vec{r} = [\lambda(\vec{\theta})]^n$$

$$P_n(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int e^{-i\vec{\theta}\vec{r}} [\lambda(\vec{\theta})]^n d\vec{\theta}$$

5.3.2 Programme de simulation

Voir le site suivant : www.math.utah.edu

Questions typiques que l'on aimerait résoudre :

- quelle est la probabilité que le marcheur revienne à son point de départ.
- combien de sites distincts visite t-il en un temps N ?
- est-ce qu'un chemin typique s'intersecte ?
- distribution de probabilité de l'éloignement maximum ?
- temps moyen passé en un point donné ?
- influence d'une perturbation ?

5.4 Limite continue

L'idée de faire un zoom temporel et spatial d'une marche aléatoire discrète permet de définir une limite continue non triviale. Cette idée est développée en détail dans les cours de physique statistique (liens entre mécanique statistique et théorie des champs). L'intérêt principal de cette limite continue est de montrer le caractère universel du processus obtenu - indépendance par rapport au réseau hexagonal, cubique... Ce caractère universel est bien entendu une conséquence du théorème limite central.

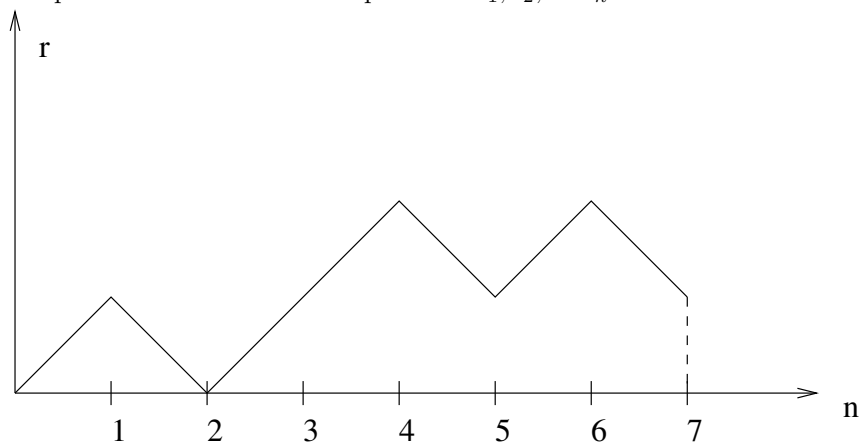
Dans le cas particulier d'une marche aléatoire sur \mathbb{Z} , nous venons de montrer

$$\mathbb{E} \left(e^{i\theta(r_n - r_0)} \right) = [\lambda(\theta)]^n$$

Supposons pour simplifier que la marche aléatoire soit issue de 0.

$$\mathbb{E} \left(e^{i\theta r_n} \right) = \lambda(\theta)^n$$

Considérons une longue marche aléatoire de longueur n issue de 0, elle est définie par les positions successives de la particule r_1, r_2, \dots, r_n

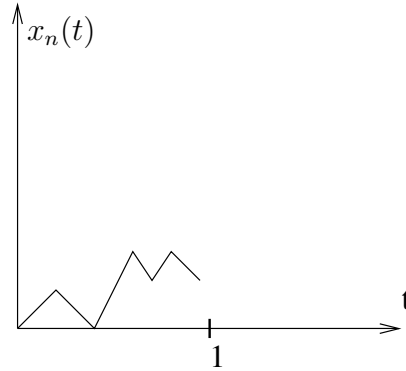


Effectuons un changement d'échelle, à la fois sur n pour se ramener à l'intervalle $[0,1]$, et en espace pour que les points restent à distance finie quand $n \rightarrow \infty$. On pose

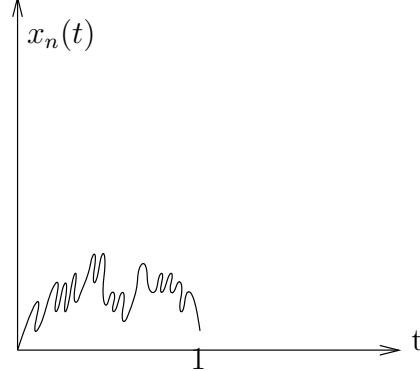
$$x_n(t) \equiv \frac{r_{[nt]}}{\sqrt{n}}$$

où t prend des valeurs discrètes $\frac{1}{n}, \frac{2}{n}, \dots, 1$. Il est sous entendu que l'on peut étendre la fonction $x_n(t)$ pour tout $t \in [0, 1]$ par interpolation linéaire.

Exemple : $n = 7$ devient



$n = 100$ aura l'allure suivante



Etude du processus aléatoire $x_n(t)$

$$\mathbb{E} \left(e^{i\theta x_n(t)} \right) = \mathbb{E} \left(e^{\frac{i\theta}{\sqrt{n}} r_{[nt]}} \right) = \left[\lambda \left(\frac{\theta}{\sqrt{n}} \right) \right]^{[nt]}$$

Exemple d'une marche aléatoire symétrique sur \mathbb{Z}

$$p(1) = p(-1) = \frac{1}{2}$$

$$\lambda(\theta) = \cos \theta$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E} \left(e^{i\theta x_n(t)} \right) = \left(1 - \frac{\theta^2}{2n} + O \left(\frac{1}{n^2} \right) \right)^{nt} = e^{-\frac{\theta^2 t}{2}}$$

Par conséquent $x_n(t)$ converge vers une variable aléatoire $X(t)$ de loi

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} e^{-\frac{x^2}{2t}}$$

Preuve :

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\theta x - \frac{x^2}{2t}} dx = e^{-\frac{\theta^2 t}{2}}$$

5.4.1 Théorème

Le processus discret $x_n(t)$ converge en loi lorsque $n \rightarrow \infty$ vers un processus aléatoire continu $X(t)$ caractérisé par les trois propriétés

- $X(0) = 0$
- $\forall 0 < t_1 < t_2 < t_3 < \dots < t_n$ l'accroissement $X(t_n) - X(t_{n-1})$ est indépendant de $X(t_1), X(t_2) \dots X(t_{n-1})$.
- $\forall t_2 > t_1$ l'accroissement $Y = X(t_2) - X(t_1)$ suit une loi gaussienne centrée de variance $t = t_2 - t_1$ et de densité

$$P(y, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp -\frac{y^2}{2t}$$

On en déduit que la distribution de probabilité de la loi jointe

$$\{X(t_1), \dots, X(t_n)\} \text{ où } 0 < t_1 < t_2 \dots < t_n$$

est donnée par

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi t_1}} \exp -\frac{x_1^2}{2t_1} \frac{1}{\sqrt{2\pi(t_2 - t_1)}} \exp -\frac{(x_2 - x_1)^2}{2(t_2 - t_1)} \dots$$

Dans la suite nous réintroduisons la constante de diffusion en posant

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp -\frac{x^2}{4Dt}$$

on vérifie que P est solution de l'équation de diffusion

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}$$

avec condition initiale

$$P(x, t) \underset{t \rightarrow 0}{=} \delta(x)$$

5.5 Notions de processus aléatoire

Un processus est défini par une famille infinie de variables aléatoires $\{X(t)\}$ indexées par une variable temporelle $t \in \mathbb{R}$. On le caractérise par une hiérarchie de distributions jointes

$$\{X(t_1), X(t_2), \dots, X(t_n)\} \quad t_1 < t_2 < \dots < t_n$$

$$P(x_1 < X(t_1) < x_1 + dx_1, \dots, x_n < X(t_n) < x_n + dx_n) \equiv$$

$$P_n(x_1 t_1, x_2 t_2, \dots, x_n t_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n$$

Elles satisfont manifestement les conditions

1. positivité $P_n \geq 0$
2. normalisation $\int P_n dx_1 \dots dx_n = 1$
3. compatibilité

$$\int P_n dx_j = P_{n-1}(x_1 t_1, \dots, x_{j-1} t_{j-1}, x_{j+1} t_{j+1}, \dots, x_n t_n)$$

5.5.1 Probabilités conditionnelles

On définit la probabilité conditionnelle que $X(t_2) = x_2$ à dx_2 près sachant que $X(t_1) = x_1$.

$$P(x_2 t_2 | x_1 t_1) = \frac{P_2(x_1 t_1, x_2 t_2)}{P_1(x_1 t_1)}$$

en intégrant sur x_2

$$\begin{aligned} \int P_2(x_1 t_1, x_2 t_2) dx_2 &= P_1(x_1 t_1) \int P(x_2 t_2 | x_1 t_1) dx_2 \\ &= P_1(x_1 t_1) \quad \text{donc} \end{aligned}$$

$$\int P(x_2 t_2 | x_1 t_1) dx_2 = 1$$

Généralisation

$$P(x_{k+1} t_{k+1}, \dots, x_n t_n | x_1 t_1 \dots x_k t_k) = \frac{P_n(x_1 t_1, \dots, x_n t_n)}{P_k(x_1 t_1, \dots, x_k t_k)}$$

5.5.2 Processus de Markov

Il est caractérisé par la condition $\forall t_1 < t_2 \dots < t_n$

$$P(x_n t_n | x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1}) = P(x_n t_n | x_{n-1} t_{n-1})$$

P est appelée probabilité de transition.

Un processus de Markov est donc entièrement caractérisé par les deux fonctions

$$P_1(x_1 t_1) \text{ et } P(x_2 t_2 | x_1 t_1)$$

Il suffit donc de connaître la loi de probabilité initiale et la probabilité de transition.

Exemple

$$\begin{aligned} P_3(x_1 t_1, x_2 t_2, x_3 t_3) &= P_2(x_1 t_1, x_2 t_2) P(x_3 t_3 | x_1 t_1, x_2 t_2) \\ &= P(x_2 t_2 | x_1 t_1) P_1(x_1 t_1) P(x_3 t_3 | x_1 t_1, x_2 t_2) \\ &= P(x_2 t_2 | x_1 t_1) P_1(x_1 t_1) P(x_3 t_3 | x_2 t_2) \end{aligned}$$

En poursuivant cet algorithme on peut construire toutes les P_n .

5.5.3 Equation de Chapman-Kolmogorov

Intégrons l'équation précédente sur x_2 , on obtient

$$P_2(x_1t_1, x_3t_3) = P_1(x_1t_1) \int P(x_2t_2 | x_1t_1)P(x_3t_3 | x_2t_2)dx_2$$

En divisant par $P_1(x_1t_1)$ on obtient l'équation de Chapman-Kolmogorov

$$P(x_3t_3 | x_1t_1) = \int P(x_3t_3 | x_2t_2)P(x_2t_2 | x_1t_1)dx_2$$

Par conséquent pour se donner un processus de Markov, il faut se donner deux fonctions

$$P_1(x_1t_1) \text{ et } P(x_2t_2 | x_1t_1)$$

Celles-ci ne sont pas indépendantes

1. $P_1(x_2t_2) = \int P(x_2t_2 | x_1t_1)P_1(x_1t_1)dx_1$
2. P doit satisfaire Chapman-Kolmogorov

5.5.4 Processus aléatoire stationnaire

Un processus aléatoire est stationnaire si sa loi temporelle est invariante par translation :

$$P_n(x_1t_1, \dots, x_nt_n) = P_n(x_1t_1 + \tau, \dots, x_nt_n + \tau)$$

En particulier

$$P_1(x_1t_1) = P_1(x_1) \text{ est indépendant du temps}$$

5.5.5 Théorème de Doob

"Un processus aléatoire gaussien stationnaire est markovien si et seulement si sa fonction d'autocorrélation est exponentielle"

- Exprimons que $X(t)$ est un processus stationnaire. La probabilité de transition $P(x_2t_2 | x_1t_1)$ ne dépend que de $t_2 - t_1$. On pose $P(x_2t_1 + t | x_1t_1) = P_t(x_2 | x_1)$. Elle satisfait l'équation de CK

$$P_{t+t'}(x_3 | x_1) = \int P_{t'}(x_3 | x_2)P_t(x_2 | x_1)dx_2$$

- Exprimons que $X(t)$ est un processus gaussien. Les probabilités P_n sont donc de la forme

$$P_n \sim N \exp -\frac{1}{2}x_i x_j A_{ij}(t_1, \dots, t_n)$$

Par conséquent

$$P_t(x_2 | x_1) = D \exp -\frac{1}{2}(A x_1^2 + 2B x_1 x_2 + C x_2^2)$$

où A, B, C, D sont des fonctions de t . En particulier, en utilisant la stationnarité

$$P_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp -\frac{x^2}{2}$$

La normalisation

$$\int P_t(x_2 | x_1) dx_2 = 1 \text{ donne } D = \sqrt{\frac{A}{2\pi}}, \quad C = \frac{B^2}{A}$$

L'équation de consistance

$$P_1(x_2) = \int P_t(x_2 | x_1) P_1(x_1) dx_1 \text{ donne } B^2 = A(A - 1)$$

- Exprimons maintenant la fonction de corrélation

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(x(t_1)x(t_2)) &= \int x_1 x_2 P_2(x_1 t_1, x_2 t_2) dx_1 dx_2 \\ &= \int x_1 x_2 P_1(x_1 t_1) P(x_2 t_2 | x_1 t_1) dx_1 dx_2 \\ &= \int x_1 x_2 P_1(x_1) P_{t_2-t_1}(x_2 | x_1) dx_1 dx_2 \end{aligned}$$

Posons $C(t) = \mathbb{E}(x(0) x(t))$

Il vient

$$C(t) = \int x_1 x_2 P_1(x_1) P_t(x_2 | x_1) dx_1 dx_2$$

avec $A = (1 - C^2)^{-1}$

Par conséquent

$$P_t(x_2 | x_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1 - C^2)}} \exp -\frac{(x_2 - Cx_1)^2}{2(1 - C^2)}$$

En utilisant l'équation CK

$$P_{t+t'}(x_3 | x_1) = \int P_{t'}(x_3 | x_2) P_t(x_2 | x_1) dx_2$$

on obtient l'équation fonctionnelle

$$C(t+t') = C(t)C(t') \quad t, t' > 0$$

dont la solution est $C(t) = \exp -\gamma t$. On obtient ainsi le processus d'Ornstein-Uhlenbeck

$$P_t(x_2 | x_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1 - \exp -2\gamma t)}} \exp -\frac{(x_2 - e^{-\gamma t} x_1)^2}{2(1 - e^{-2\gamma t})}$$

5.6 Exemples de processus stochastiques gaussiens

5.6.1 Processus de Wiener

Le mouvement brownien issu de l'origine $X(0) = 0$, appelé processus de Wiener est caractérisé par

$$P(x_2 t_2 | x_1 t_1) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t_2 - t_1)}} \exp -\frac{1}{4D} \frac{(x_2 - x_1)^2}{t_2 - t_1}$$

$$P_1(x_1 t_1) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t_1}} \exp -\frac{x_1^2}{4D t_1}$$

$P_1(x_1 t_1)$ dépend de $t_1 \Rightarrow$ il s'agit donc d'un processus non stationnaire. Calculons la fonction de corrélation notée indifféremment $\langle x(t_2)x(t_1) \rangle$ ou $\mathbb{E}(x(t_2)x(t_1))$

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(x(t_2)x(t_1)) &= \int dx_2 dx_1 x_2 x_1 P_2(x_2 t_2, x_1 t_1) \\ &= \int dx_2 dx_1 x_2 x_1 P(x_2 t_2 | x_1 t_1) P_1(x_1 t_1) \\ &= \int dx_2 dx_1 x_2 x_1 \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t_2 - t_1)}} \frac{1}{\sqrt{4\pi D t_1}} \end{aligned}$$

$$\exp -\frac{1}{4D} \frac{(x_2 - x_1)^2}{t_2 - t_1} - \frac{x_1^2}{4D t_1}$$

Il s'agit d'un processus gaussien décrit par la matrice

$$A = \frac{1}{2D} \begin{bmatrix} \frac{t_2}{t_1(t_2 - t_1)} & -\frac{1}{t_2 - t_1} \\ -\frac{1}{t_2 - t_1} & \frac{1}{t_2 - t_1} \end{bmatrix}$$

dont l'inverse

$$A^{-1} = 2D \begin{bmatrix} t_1 & t_1 \\ t_1 & t_2 \end{bmatrix}$$

nous permet de calculer la covariance.

Pour $t_2 > t_1$ on obtient $\mathbb{E}(x(t_2)x(t_1)) = 2D t_1$.

La formule générale s'écrit

$$\boxed{\mathbb{E}(x(t_2)x(t_1)) = 2D \min(t_1, t_2)}$$

1. On vérifie que le processus n'est pas stationnaire puisque sa covariance ne dépend pas seulement de la différence des temps.
2. Montrons que les trajectoires ne sont pas différentiables.

Pour cela considérons

$$\begin{aligned} \text{Prob} \left[\frac{|X(t+h) - X(t)|}{h} > k \right] &= \frac{2}{\sqrt{4\pi Dh}} \int_{kh}^{\infty} \exp -\frac{x^2}{4Dh} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi D}} \int_{k\sqrt{h}}^{\infty} \exp -\frac{y^2}{4D} dy \end{aligned}$$

$\forall k > 0$, pour tout $h \rightarrow 0$ cette quantité tend vers 1. Par conséquent $\forall k$, la différence $\frac{|X(t+h) - X(t)|}{h} > k$ avec probabilité 1.

5.6.2 Processus d'Ornstein-Uhlenbeck

$$P(x_2 t_2 | x_1 t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1 - e^{-2\gamma(t_2 - t_1)})}} \exp -\frac{(x_2 - x_1 e^{-\gamma(t_2 - t_1)})^2}{2(1 - e^{-2\gamma(t_2 - t_1)})}$$

$$P_1(x_1, t_1) = P_1(x_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp -\frac{x_1^2}{2}$$

Fonction de corrélation

$$\mathbb{E}(x(t_2)x(t_1)) = e^{-\gamma(t_2 - t_1)}$$

$\frac{1}{\gamma}$ est le temps de corrélation.

5.6.3 Bruit blanc

C'est une idéalisation d'un processus dont le temps de corrélation tend vers 0.

$$\mathbb{E}(\eta(t_2)\eta(t_1)) = \delta(t_2 - t_1)$$

Montrons comment relier formellement le bruit blanc au processus de Wiener $W(t)$.

$$W(t) = \sqrt{2D} \int_0^t \eta(\tau) d\tau$$

satisfait

$$W(0) = 0$$

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(W(t)W(t')) &= 2D \int_0^{t'} d\tau' \int_0^t d\tau \delta(\tau - \tau') \\ &= 2D \int_0^{t'} d\tau' \theta(t - \tau') \\ &= 2D \int_0^{\min(t, t')} d\tau' = 2D \min(t, t') \end{aligned}$$

$W(t)$ est donc un processus de Wiener. Montrons de même comment construire le processus d'Ornstein-Uhlenbeck $Y(t)$ à partir d'un bruit blanc.

$$Y(t) = \int_{-\infty}^t d\tau e^{-\gamma(t-\tau)} \eta(\tau)$$

satisfait

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(Y(t) Y(t')) &= \int_{-\infty}^t d\tau e^{-\gamma(t-\tau)} \int_{-\infty}^{t'} d\tau' e^{-\gamma(t'-\tau')} \delta(\tau - \tau') \\ &= \int_{-\infty}^t d\tau e^{-\gamma(t-\tau)} \int_{-\infty}^{\min(t,t')} d\tau' e^{-\gamma(t'-\tau')} \theta(t' - \tau) \\ &= e^{-\gamma(t+t')} \int_{-\infty}^{\min(t,t')} d\tau e^{2\gamma\tau} \\ &= e^{-\gamma(t+t')} \frac{1}{2\gamma} e^{2\gamma \min(t,t')} \end{aligned}$$

or $t + t' - 2 \min(t, t') = |t - t'|$
 donc $\mathbb{E}(Y(t) Y(t')) = \frac{1}{2\gamma} e^{-\gamma|t-t'|}$.

Par conséquent $Y(t)$ est le processus d'Ornstein-Uhlenbeck discuté précédemment.

Remarque : la condition initiale est renvoyée à l'infini $Y(-\infty) = 0$.

5.6.4 Construction de $W(t)$ comme processus

Considérons l'ensemble des fonctions $f \in L^2[0, 1]$ défini par

$$\int_0^1 f^2(t) dt < \infty$$

Toute fonction $f \in L^2$ peut être décomposée sur une base $\{f_n\}$ telle que

$$\int_0^1 f_n(t) f_m(t) dt = \delta_{nm}$$

$$f(t) = \sum c_n f_n(t)$$

$$\text{où } c_n = \int_0^1 f_n(t) f(t) dt$$

Supposons que les c_n soient des variables aléatoires gaussiennes *iid*

$$\mathbb{E}(c_n) = 0 \quad \mathbb{E}(c_n c_m) = \delta_{nm}$$

Considérons

$$W(t) = \sum_n c_n \int_0^t f_n(s) ds$$

Montrons que $W(t)$ est un brownien issu de l'origine.

Preuve :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[W(t)W(t')] &= \sum_{n,m} \mathbb{E}(c_n c_m) \int_0^t f_n(s) ds \int_0^{t'} f_m(u) du \\ &= \sum_n \int_0^t f_n(s) ds \int_0^{t'} f_n(u) du\end{aligned}$$

En utilisant la relation de fermeture

$$\sum_n f_n(s)f_n(u) = \delta(s-u)$$

Il vient

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[W(t)W(t')] &= \int_0^t ds \int_0^{t'} du \delta(s-u) \\ &= \int_0^t ds \int_0^{t'} \delta(s-u) du \\ &= \int_0^t ds \theta(t'-s) = \min(t, t')\end{aligned}$$

$$\mathbb{E}[W(t)W(t')] = \min(t, t')$$

Chapitre 6

Intégrale de Wiener et formule de Feynman Kac

Sommaire

6.1	Equation de la diffusion, formalisme opératoirel .	67
6.2	Mesure de Wiener	68
6.3	Mouvement brownien avec absorption-formule de Feynman-Kac	70
6.4	Formule de Feynman-Kac	71

6.1 Equation de la diffusion, formalisme opératoirel

Nous avons montré dans le cours précédent que le processus de Wiener issu de l'origine est caractérisé par sa probabilité de transition.

$$P(x|t|x_0t_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t-t_0)}} \exp -\frac{(x-x_0)^2}{4D(t-t_0)}$$
$$\text{et } P_1(x|t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp -\frac{x^2}{4Dt}$$

On vérifie facilement que $P(x|t|x_0t_0)$ est la solution de l'équation aux dérivées partielles

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}$$

qui satisfait la condition initiale

$$\lim_{t \rightarrow t_0} P(x|t|x_0t_0) = \delta(x-x_0).$$

Ceci nous suggère d'introduire un formalisme opératoirel. Posons

$$H_o = -D \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Considérons l'équation d'évolution

$$\frac{\partial}{\partial t} U_o(t, t_o) = -H_o U_o(t, t_o)$$

dont la solution s'écrit $U_o(t, t_o) = e^{-H_o(t-t_o)}$ $t \geq t_o$.

La probabilité de transition $P(xt|x_0t_0)$ peut s'écrire comme le noyau de l'opérateur U

$$P(xt|x_0t_0) = \langle x | e^{-H_o(t-t_o)} | x_0 \rangle$$

où nous avons adopté la notation de Dirac.

L'équation de Chapman Kolmogorov

$$\int dx_1 P(xt|x_1t_1) P(x_1t_1|x_0t_0) = P(xt|x_0t_0)$$

s'écrit

$$\int dx_1 \langle x | e^{-H_o(t-t_1)} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-H_o(t_1-t_0)} | x_0 \rangle = \langle x | e^{-H_o(t-t_0)} | x_0 \rangle$$

En utilisant la relation de "fermeture" nous voyons que l'équation de Chapman-Kolmogorov est équivalente à la relation opératorielle

$$e^{-H_o(t-t_1)} e^{-H_o(t_1-t_0)} = e^{-H_o(t-t_0)}$$

Les opérateurs e^{-tH} définissent une loi de semi-groupe

6.2 Mesure de Wiener

(voir I.M. Gelfand et A.M. Yaglom, Journal of Mathematical Physics, volume 1, 1960 p 48-69 et Ph. Martin, initiation à l'intégrale fonctionnelle)

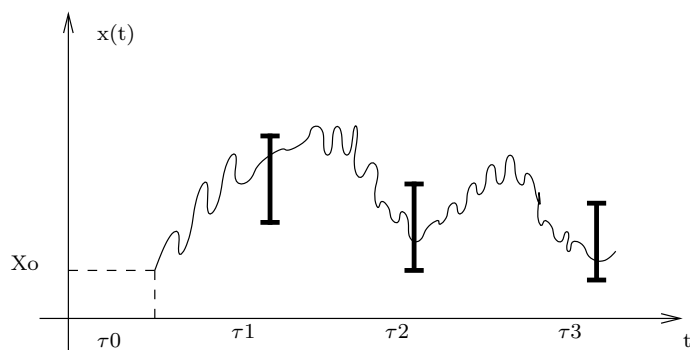
Puisque la trajectoire $x(\tau)$ d'une particule brownienne est aléatoire, il est naturel de se poser les questions suivantes

- Comment définir la probabilité d'un chemin ?
- Comment calculer la valeur moyenne d'une fonctionnelle $F[x(\tau)]$ sur les chemins browniens ?

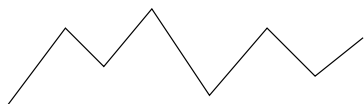
Considérons l'ensemble des trajectoires issues de x_0 en τ_0 et astreintes à traverser les portes $[x_1, x_1 + dx_1], \dots, [x_n, x_n + dx_n]$ aux temps respectifs τ_1, \dots, τ_n

$$x_1 < x(\tau_1) < x_1 + dx_1$$

$$x_n < x(\tau_n) < x_n + dx_n$$



cf confirmation d'un polymère



Pour calculer la probabilité de cet événement nous pouvons utiliser le caractère Markovien du processus

$$\begin{aligned} P(x_1\tau_1, \dots, x_n\tau_n | x_0\tau_0) &= \frac{P(x_0\tau_0, x_1\tau_1, \dots, x_n\tau_n)}{P_1(x_0\tau_0)} \\ &= P(x_n\tau_n | x_{n-1}\tau_{n-1}) \dots P(x_1\tau_1 | x_0\tau_0) \end{aligned}$$

On peut ainsi définir une mesure attachée à cette classe particulière de chemins issus de x_0 .

$$d\mu[x(\tau)] \equiv P[x_1\tau_1, \dots, x_n\tau_n | x_0\tau_0] dx_1 \dots dx_n$$

Nous aimerions donner un sens à la valeur moyenne de la fonctionnelle $F[x(\tau)]$

$$\int F[x(\tau)] d\mu[x(\tau)]$$

Pour cela considérons une fonctionnelle qui ne dépend du chemin que par l'intermédiaire d'un nombre fini de points

$$F[x(\tau)] \equiv F[x(\tau_1), x(\tau_{n-1}), \dots, x(\tau_n)]$$

La valeur moyenne de cette fonctionnelle s'écrit

$$\int_{x_0, \tau_0} d\mu[x(\tau)] F[x(\tau)] = \int dx_1 \dots dx_n P[x_1\tau_1, \dots, x_n\tau_n | x_0\tau_0] F[x_1, x_2, \dots, x_n]$$

La mesure de probabilité attachée aux chemins browniens issus de x_0 s'appelle mesure de Wiener.

Dans le cas où le point final $x(\tau) = x$ est prescrit on introduit la mesure de Wiener conditionnelle en intégrant sur tous les points sauf le dernier.

$$\int_{x_0, \tau_0}^{x\tau} d\mu[x(\sigma)] F[x(\sigma)] = \int dx_1 \dots dx_n P[x_1\tau_1, x_2\tau_2 \dots x_n\tau_n, x\tau | x_0\tau_0] F[x_1, \dots, x_n]$$

$$= \int dx_1 \dots dx_n P[x\tau | x_n \tau_n] \dots P[x_1 \tau_1 | x_0 \tau_0] F[x_1, \dots, x_n]$$

On a la relation

$$\int_{x_0 \tau_0} d\mu[x(\tau)] F[x(\tau)] = \int dx \int_{x_0 \tau_0}^{x\tau} d\mu[x(\tau)] F[x(\tau)]$$

Exemple : considérons les valeurs moyennes de browniens issus de l'origine

$$\mathbb{E}[x(\tau_1)] = \int_{0,0} d\mu[x(\tau)] x(\tau_1) = \int dx_1 x_1 P(x_1 \tau_1 | 00) = 0$$

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[x(\tau_1)x(\tau_2)] &= \int_{0,0} d\mu[x(\tau)] x(\tau_1)x(\tau_2) \\ &= \int dx_1 dx_2 P(x_2 \tau_2 | x_1 \tau_1) P(x_1 \tau_1 | 00) x_1 x_2 \end{aligned}$$

d'après le calcul du chapitre précédent on a

$$\mathbb{E}[x(\tau_1)x(\tau_2)] = 2D \min(\tau_1, \tau_2)$$

6.3 Mouvement brownien avec absorption-formule de Feynman-Kac

Nous nous proposons de calculer l'espérance par rapport à la mesure de Wiener de la fonctionnelle $\exp - \int_{\tau_0}^{\tau} d\sigma \Omega[x(\sigma)]$. Pour cela il est commode d'interpréter $\Omega(x)$ comme une probabilité d'absorption au point x . Supposons que la particule ait une probabilité par unité de temps $\Omega(x) > 0$ d'être absorbée au point x . Divisons l'intervalle $[\tau_0, \tau]$ en $n + 1$ sous intervalles de longueur $\epsilon = \frac{\tau - \tau_0}{n+1}$.

Posons

$$\tau_k = \tau_0 + k\epsilon \quad k = 0, \dots, n, \tau_{n+1} = \tau$$

La probabilité que la particule ne soit pas absorbée le long d'une trajectoire donnée $x(\sigma) \quad \tau_0 \leq \sigma \leq \tau$ est

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{k=0}^n (1 - \epsilon \Omega(x(\tau_k))) = \lim_{n \rightarrow \infty} \exp - \epsilon \sum_{k=0}^n \Omega(x(\tau_k)) = \exp - \int_{\tau_0}^{\tau} d\sigma \Omega[x(\sigma)]$$

Par conséquent la probabilité $P_{\Omega}(x\tau | x_0 \tau_0)$ de trouver la particule en x au temps τ est

$$\begin{aligned} P_{\Omega}(x\tau | x_0 \tau_0) &= \int_{x_0 \tau_0}^{x\tau} d\mu[x(\sigma)] \exp - \int_{\tau_0}^{\tau} d\sigma \Omega[x(\sigma)] \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{x_0 \tau_0}^{x\tau} d\mu \exp - \epsilon \sum_{k=0}^n \Omega(x(\tau_k)) \end{aligned}$$

Pour calculer P_Ω revenons à l'approximation discrète. Le poids de probabilité attaché à la subdivision précédente est

$$\begin{aligned} & P(x\tau \mid x_n\tau_n) \dots P(x_2\tau_2 \mid x_1\tau_1)P(x_1\tau_1 \mid x_0\tau_0)dx_1 \dots dx_n \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{4\pi D\epsilon}} \right)^{n+1} \prod_{k=1}^n dx_k \exp -\frac{1}{4D\epsilon} \sum_{k=0}^n (x_{k+1} - x_k)^2 \end{aligned}$$

On peut réécrire cette expression sous une forme suggestive "à la Feynman"

$$\begin{aligned} &= \left(\frac{1}{\sqrt{4\pi D\epsilon}} \right)^{n+1} \prod_{k=1}^n dx_k \exp -\frac{\epsilon}{4D} \sum_0^n \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\epsilon} \right)^2 \\ &= \mathcal{D}x(\sigma) \exp -\frac{1}{4D} \int_{\tau_0}^\tau \left(\frac{dx}{d\sigma} \right)^2 d\sigma \end{aligned}$$

Par conséquent nous pouvons écrire P_Ω sous deux formes équivalentes

$$\begin{aligned} P_\Omega(x\tau \mid x_0\tau_0) &= \int_{x_0\tau_0}^{x\tau} \mathcal{D}x(\sigma) \exp -\int_{\tau_0}^\tau d\sigma \left\{ \frac{1}{4D} \left(\frac{dx}{d\sigma} \right)^2 + \Omega[x(\sigma)] \right\} \\ &= \int_{x_0\tau_0}^{x\tau} d\mu[x(\sigma)] \exp -\int_{\tau_0}^\tau d\sigma \Omega[x(\sigma)] \end{aligned}$$

6.4 Formule de Feynman-Kac

Montrons que P_Ω est la solution fondamentale de l'équation aux dérivées partielles

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} P_\Omega(x\tau \mid x_0\tau_0) &= D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_\Omega(x\tau \mid x_0\tau_0) - \Omega(x)P_\Omega(x\tau \mid x_0\tau_0) \\ \lim_{\tau \rightarrow \tau_0} P_\Omega(x\tau \mid x_0\tau_0) &= \delta(x - x_0) \end{aligned}$$

Démonstration : revenons à l'expression discrète

$$\begin{aligned} & \int_{x_0\tau_0}^{x\tau} d\mu[x(\tau)] \exp -\epsilon \sum_{k=0}^n \Omega(x(\tau_k)) = \\ & \int dx_1 \dots dx_n < x \mid e^{-H_0\epsilon} \mid x_n > e^{-\epsilon\Omega(x_n)} \\ & \quad < x_n \mid e^{-H_0\epsilon} \mid x_{n-1} > e^{-\epsilon\Omega(x_{n-1})} \\ & \quad < x_1 \mid e^{-H_0\epsilon} \mid x_0 > e^{-\epsilon\Omega(x_0)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int dx_1 \dots dx_n \langle x | e^{-\epsilon H_o} e^{-\epsilon \Omega} | x_n \rangle \\
&\quad \langle x_n | e^{-\epsilon H_o} e^{-\epsilon \Omega} | x_{n-1} \rangle \\
&\quad \langle x_1 | e^{-\epsilon H_o} e^{-\epsilon \Omega} | x_0 \rangle
\end{aligned}$$

où Ω représente maintenant un opérateur qui agit multiplicativement. En utilisant la relation de fermeture on obtient

$$\begin{aligned}
&\langle x | (e^{-\epsilon H_o} e^{-\epsilon \Omega})^{n+1} | x_0 \rangle \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \langle x | \left[\exp -\frac{(\tau - \tau_o) H_o}{n+1} \exp -\frac{(\tau - \tau_o) \Omega}{n+1} \right]^{n+1} | x_0 \rangle
\end{aligned}$$

La formule de Trotter

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\exp \frac{A}{n} \exp \frac{B}{n} \right)^n = \exp(A + B)$$

donne

$$\begin{aligned}
P_\Omega(x\tau | x_0\tau_0) &= \langle x | \exp -(\tau - \tau_o)(H_o + \Omega) | x_0 \rangle \\
&= \langle x | U(\tau, \tau_o) | x_0 \rangle
\end{aligned}$$

On fait ainsi apparaître le propagateur de Feynman

$$\langle x | \exp -(\tau - \tau_o)(H_o + \Omega) | x_0 \rangle$$

qui satisfait l'équation aux dérivées partielles.

$$\frac{\partial}{\partial \tau} P_\Omega(x\tau | x_0\tau_0) = \left[D \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \Omega(x) \right] P_\Omega(x\tau | x_0\tau_0)$$

ou encore

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} P_\Omega(x\tau | x_0\tau_0) = H P_\Omega(x\tau | x_0\tau_0)$$

avec $H = -D \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \Omega(x)$.

$\Omega(x)$ qui était défini comme une probabilité par unité de temps pour la particule d'être absorbée s'interprète donc comme un potentiel en mécanique quantique.

Résumé

$$P(x\tau | x_0\tau_0) = \int_{x_0\tau_0}^{x\tau} d\mu [x(\sigma)] \exp - \int_{\tau_0}^{\tau} d\sigma \Omega [x(\sigma)]$$

est solution de l'équation

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P - \Omega(x) P$$

Chapitre 7

Équation de Langevin et Fokker-Planck

Sommaire

7.1	Introduction	73
7.2	Représentation fonctionnelle des mesures gaussiennes	75
7.3	Lemme	76
7.4	Equation de Langevin	76
7.5	Equation de Fokker-Planck	77
7.6	Solution d'équilibre	79
7.7	Relation avec l'équation de Schrödinger en temps imaginaire	80
7.8	Propriété du hamiltonien H_+ et supersymétrie . .	81
7.9	Application	82
7.9.1	Processus de Wiener	82
7.9.2	Processus d'Ornstein-Uhlenbeck	83
7.9.3	Processus bistables	84
7.10	Représentation fonctionnelle de $P(x y, 0)$	85
7.11	Limite $D \rightarrow 0$, formule d'Arrhénius	86

7.1 Introduction

De nombreux phénomènes peuvent être décrits de façon phénoménologique par l'équation de Langevin

$$\frac{dx_i}{dt} = \phi_i(x) + \eta_i(t) \quad i = 1 \dots N$$

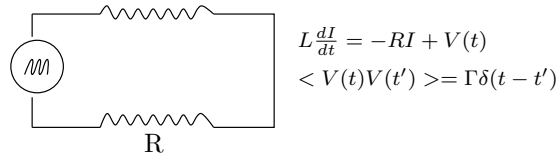
où les x_i sont des variables macroscopiques représentant par exemple une densité de charge, de matière, les ϕ_i sont des forces de dérive telles que des gradients de température, de concentration, des champs électriques ou gravitationnels. $\eta_i(t)$ est un bruit gaussien

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = 2 \delta_{ij} \delta(t - t')$$

1. P. Langevin, C.R. Acad.Sci 146, 530 (1908)
Mouvement d'une particule dans un fluide

$$m \frac{d\vec{V}}{dt} = -\gamma \vec{V} + \vec{\eta}(t)$$

2. Circuit électrique



3. Grande diversité de phénomènes décrits dans ce cadre (systèmes déterministes perturbés par un bruit)

Nous avons déjà rencontré l'équation de Langevin sous forme intégrée dans deux cas particuliers

1. $x(t) = \int_0^t \sqrt{2D} \eta(\tau) d\tau$ est un processus dont la fonction de corrélation

$$\langle x(t) x(t') \rangle = 2D \min(t - t')$$

est celle du processus de Wiener qui satisfait l'équation différentielle stochastique :

$$dx(t) = \sqrt{2D} \eta(t) dt$$

Probabilité de transition :

$$P(x \ t | x_0 0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp -\frac{(x - x_0)^2}{4Dt}$$

2. $x(t) = \sqrt{2\gamma D} \int_{-\infty}^t d\tau e^{-\gamma(t-\tau)} \eta(\tau) d\tau$

a pour fonction de corrélation

$$\langle x(t)x(t') \rangle = D e^{-\gamma(t-t')}$$

Ceci définit le processus d'Ornstein Uhlenbeck de probabilité de transition.

$$P(x \ t | x_0 t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D(1 - e^{-2\gamma t})}} \exp -\frac{(x - x_0 e^{-\gamma t})^2}{2D(1 - e^{-2\gamma t})}$$

Le processus est solution de l'équation différentielle stochastique

$$dx(t) = \sqrt{2\gamma D} \eta(t) dt - \gamma x(t) dt$$

ou encore

$$\dot{x}(t) = -\gamma x(t) + \sqrt{2\gamma D} \eta(t)$$

7.2 Représentation fonctionnelle des mesures gaussiennes

La loi de distribution multinormale

$$P(x) = \frac{\sqrt{\det A}}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \exp -\frac{1}{2} \tilde{x} A x$$

est caractérisée par une matrice de covariance

$$\langle x_i x_j \rangle = A_{ij}^{-1}$$

On a donc

$$A_{ik} \langle x_k x_l \rangle = \delta_{il}$$

A un processus Gaussien de densité

$$P(x(\tau)) \sim \exp -\frac{1}{2} \int x(\tau) A(\tau, \tau') x(\tau') d\tau d\tau'$$

correspond une fonction de corrélation $\langle x(\tau)x(\tau') \rangle = C(\tau, \tau')$ telle que

$$\int A(\tau, \tau'') C(\tau'', \tau') d\tau'' = \delta(\tau - \tau')$$

Exemples

1) Le processus de Wiener est caractérisé par

$$A(\tau, \tau') = -\frac{1}{2D} \frac{d^2}{d\tau'^2} \delta(\tau - \tau')$$

Vérification : la fonction de corrélation

$$C(\tau, \tau') = 2D \min(\tau, \tau') = D [\tau + \tau' - |\tau - \tau'|]$$

doit satisfaire

$$\int A(\tau, \tau'') C(\tau'', \tau') d\tau'' = \delta(\tau - \tau')$$

soit

$$\int -\frac{1}{2D} \frac{d^2}{d\tau'^2} \delta(\tau - \tau'') C(\tau'', \tau') d\tau'' = \delta(\tau - \tau')$$

$$-\frac{1}{2D} \frac{d^2}{d\tau'^2} C(\tau, \tau') = \delta(\tau - \tau')$$

2) Bruit blanc

$$C(\tau, \tau') = \langle \eta(\tau) \eta(\tau') \rangle = 2D \delta(\tau - \tau')$$

Donc

$$\int A(\tau, \tau'') 2D \delta(\tau'' - \tau') d\tau'' = \delta(\tau - \tau')$$

d'où

$$2DA(\tau, \tau') = \delta(\tau - \tau')$$

Par conséquent

$$P(\eta) = \exp -\frac{1}{2} \int \eta(\tau) A(\tau - \tau') \eta(\tau') d\tau d\tau'$$

$$P(\eta) = \exp -\frac{1}{4D} \int_{-\infty}^{+\infty} \eta^2(\tau) d\tau$$

7.3 Lemme

$$\langle X_i f(X) \rangle = \sum_j \langle X_i X_j \rangle \langle \frac{\partial f}{\partial X_j} \rangle$$

Le membre de droite s'écrit d'après le résultat précédent

$$(A^{-1})_{ij} \langle \frac{\partial f}{\partial X_j} \rangle = \frac{\sqrt{\det A}}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int d\vec{x} \frac{\partial f}{\partial x_j} (A^{-1})_{ij} \exp -\frac{1}{2} \tilde{x} A x$$

Intégrons par parties

$$\begin{aligned} &= + \frac{\sqrt{\det A}}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int d\vec{x} (A^{-1})_{ij} A_{jk} x_k \exp -\frac{1}{2} \tilde{x} A x f(x) \\ &= \frac{\sqrt{\det A}}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int d\vec{x} (A^{-1} A)_{ik} x_k f(x) \exp -\frac{1}{2} \tilde{x} A x \\ &= \frac{\sqrt{\det A}}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int d\vec{x} x_i f(x) \exp -\frac{1}{2} \tilde{x} A x \\ &= \langle X_i f(X) \rangle \end{aligned}$$

L'utilisation répétée de cette relation permet de montrer que les moments d'ordre pair se factorisent en un produit de moments d'ordre deux. Les moments d'ordre impair s'annulent trivialement.

7.4 Equation de Langevin

$$\dot{x} = \phi(x) + \eta(t)$$

$$\langle \eta(t) \eta(t') \rangle = 2D\delta(t - t')$$

$$\langle \eta(t) \rangle = 0$$

$$P(\eta) \mathcal{D}\eta = \exp -\frac{1}{4D} \int_{-\infty}^{+\infty} \eta^2(\tau) d\tau \mathcal{D}\eta$$

Dans la littérature mathématique l'équation s'écrit

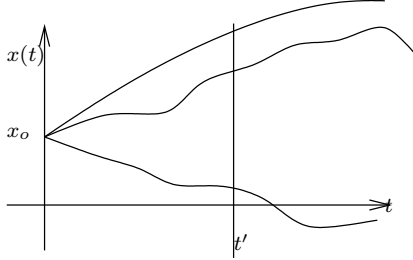
$$dx = \phi(x)dt + dW$$

en accord avec la définition du processus de Wiener

$$W = \int_0^t \eta(\tau) d\tau$$

7.5 Equation de Fokker-Planck

Pour des conditions initiales fixées $x(0) = x_0$, on se propose de calculer la valeur moyenne au temps $t > 0$ de $g(x(t))$ en effectuant une moyenne sur toutes les réalisations du processus



$$\langle g(x(t)) \rangle = \int g(x) P(x, t | x_0, 0) dx$$

Dans la suite on omettra la condition initiale en écrivant la probabilité de transition

$$P(x, t) = P(x, t | x_0, 0)$$

Par définition

$$g(x(t)) = \int g(x) \delta(x - x(t)) dx$$

Par conséquent

$$\langle g(x(t)) \rangle = \int g(x) \langle \delta(x - x(t)) \rangle dx$$

On peut donc écrire la probabilité de transition sous la forme

$$P(x, t) = \langle \delta(x - x(t)) \rangle$$

Soit

$$P(x, t) = \int \mathcal{D}\eta \delta[x(t) - x] \exp - \frac{1}{4D} \int_{-\infty}^{+\infty} \eta^2(\tau) d\tau$$

Dérivons par rapport au temps

$$\begin{aligned} \dot{P}(x, t) &= \int \mathcal{D}\eta \frac{\partial}{\partial t} \delta[x(t) - x] \exp - \frac{1}{4D} \int_{-\infty}^{+\infty} \eta^2(\tau) d\tau \\ &= \int \mathcal{D}\eta \frac{\partial}{\partial x(t)} \delta[x(t) - x] [\dot{x}(t) + \eta(t)] \exp - \frac{1}{4D} \int_{-\infty}^{+\infty} \eta^2(\tau) d\tau \\ &= \int \mathcal{D}\eta - \frac{\partial}{\partial x} \delta[x(t) - x] [\dot{x}(t) + \eta(t)] \exp - \frac{1}{4D} \int_{-\infty}^{+\infty} \eta^2(\tau) d\tau \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\partial}{\partial x} \int \mathcal{D}\eta \delta[x(t) - x] [\phi(x(t) + \eta(t)) \exp -\frac{1}{4D} \int \eta^2(\tau) d\tau \\
&= -\frac{\partial}{\partial x} [\phi(x)P(x, t)] - \frac{\partial}{\partial x} \int \mathcal{D}\eta \delta[x(t) - x] \eta(t) \exp -\frac{1}{4D} \int \eta^2(\tau) d\tau \\
&= -\frac{\partial}{\partial x} [\phi(x)P(x, t)] - \frac{\partial}{\partial x} \langle \eta(t) \delta[x(t) - x] \rangle
\end{aligned}$$

Dans le cas d'une distribution multinormale on a la relation

$$\langle x_i f(x) \rangle = \sum_j \langle x_i x_j \rangle \langle \frac{\partial f}{\partial x_j} \rangle$$

Cette relation s'étend à des processus gaussiens continus

$$\langle \eta(t) f[\eta] \rangle = \int \langle \eta(t) \eta(t') \rangle \langle \frac{\delta f}{\delta \eta(t')} \rangle dt'$$

En particulier

$$\begin{aligned}
\langle \eta(t) \delta[x(t) - x] \rangle &= \int \langle \eta(t) \eta(t') \rangle \langle \frac{\delta \delta[x(t) - x]}{\delta \eta(t')} \rangle dt' \\
&= 2D \int \delta(t - t') \langle \frac{\delta}{\delta \eta(t')} \delta[x(t) - x] \rangle dt' \\
&= 2D \langle \frac{\delta}{\delta \eta(t)} \delta[x(t) - x] \rangle \\
&= 2D \langle \frac{\delta x(t)}{\delta \eta(t)} \frac{\delta}{\delta x(t)} \delta[x(t) - x] \rangle \\
&= -2D \langle \frac{\delta x(t)}{\delta \eta(t)} \frac{\partial}{\partial x} \delta[x(t) - x] \rangle \\
&= -2D \frac{\partial}{\partial x} \langle \frac{\delta x(t)}{\delta \eta(t)} \delta[x(t) - x] \rangle
\end{aligned}$$

Intégrons formellement l'équation de Langevin en posant

$$x(t) = x(0) + \int_0^t \phi[x(\tau)] d\tau + \int_0^t \eta(\tau) d\tau$$

La dérivée fonctionnelle s'écrit donc

$$\frac{\delta x(t)}{\delta \eta(t')} = \int_0^t \frac{\delta \phi[x(\tau)]}{\delta \eta(t')} d\tau + \underbrace{\int_0^t \delta(\tau - t') d\tau}_{\theta(t-t')}$$

La première contribution se simplifie en observant que l'équation de Langevin est **causale** : $x(\tau)$ ne dépend de $\eta(t')$ que si $t' < \tau$.

Cette contribution s'écrit donc :

$$\int_{t'}^t \frac{\delta[\phi(x(\tau))]}{\delta \eta(t')} d\tau$$

Elle tend vers 0 pour $t \rightarrow t'$.

Par conséquent $\frac{\delta x(t)}{\delta \eta(t)} = 0 + \theta(0)$.

Il faut poser $\theta(0) = \frac{1}{2}$. Pour nous en convaincre, prenons un bruit avec une corrélation finie

$$\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = 2D f(t-t')$$

où $f(t)$ est une fonction paire telle que $\int_{-\infty}^{+\infty} f(t)dt = 1$.

Les équations deviennent :

$$\langle \eta(t)f(\eta) \rangle = 2D \int f(t-t'') \left\langle \frac{\delta f}{\delta \eta(t'')} \right\rangle dt''$$

Si $f(\eta) = \delta[x(t) - x]$ on obtient :

$$\left\langle \frac{\delta}{\delta \eta(t'')} \delta[x(t) - x] \right\rangle = -\frac{\partial}{\partial x} \left\langle \frac{\delta x(t)}{\delta \eta(t'')} \delta[x(t) - x] \right\rangle$$

$$\frac{\delta x(t)}{\delta \eta(t'')} = \theta(t-t'') + \text{contribution qui s'annule pour } t \rightarrow t''$$

$$\langle \eta(t)f(\eta) \rangle = -2D \frac{\partial}{\partial x} \int f(t-t'')\theta(t-t'')dt'' P(x, t)$$

Or

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(t-t'')\theta(t-t'')dt'' = \int_{-\infty}^0 f(t)dt = \frac{1}{2}$$

D'où le résultat final

$$\langle \eta(t)\delta[x(t) - x] \rangle = -D \frac{\partial}{\partial x} P(x, t)$$

Par conséquent P satisfait l'équation de Fokker-Planck

$$\boxed{\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} [\phi(x)P(x, t)]}$$

7.6 Solution d'équilibre

Pour discuter l'approche à l'équilibre, il est commode d'introduire "le potentiel" dont dérive la "force" $\phi(x)$.

$$\phi(x) = -\frac{\partial}{\partial x} U(x)$$

En dimension 1, une force dérive toujours d'un potentiel. En dimension supérieure $\phi_i(x_j)$ doit satisfaire les conditions d'intégrabilité

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial x_j} = \frac{\partial \phi_j}{\partial x_i}$$

Dans le cas d'une force linéaire $\phi_i = L_{ij}x_j$ on obtient $L_{ij} = L_{ji}$. Ce sont les relations de réciprocité d'Onsager.

Revenons à la dimension 1, l'équation de Fokker-Planck s'écrit

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D \frac{\partial P}{\partial x} + P \frac{\partial U}{\partial x} \right]$$

Une solution d'équilibre, indépendante du temps satisfait à $\frac{\partial P}{\partial t} = 0$ soit

$$D \frac{\partial P}{\partial x} + P \frac{\partial U}{\partial x} = -J$$

où J est une constante qui s'interprète comme le courant de diffusion.

Si $J = 0$, il vient $P_{eq} = \exp -\frac{U(x)}{D}$

Cette solution d'équilibre n'existe que si $\int P_{eq}(x)dx < \infty$

exemple : dans un champ de pesanteur $U(x) = kx$ on a une solution normalisable sur $[a, \infty[$ mais pas sur $] -\infty, +\infty[$ pour des raisons physiques évidentes



Des solutions avec courant peuvent intervenir dans des situations où il y a un gradient de concentration

$$\begin{array}{ccc} & P_0 > P_1 & \\ \left| \right. & \xrightarrow{J} & \left. \right| \\ P_0 & & P_1 \end{array}$$

7.7 Relation avec l'équation de Schrödinger en temps imaginaire

Montrons comment faire apparaître un opérateur autoadjoint en posant

$$P(x, t) = \exp -\frac{U(x)}{2D} \psi(x, t)$$

Il vient

$$\begin{aligned} DP' + PU' &= D \left[-\frac{U'}{2D} \psi + \psi' \right] \exp -\frac{U(x)}{2D} + PU' \\ &= \left[+\frac{U'}{2} \psi + D\psi' \right] \exp -\frac{U(x)}{2D} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} (DP' + PU') &= \left[+\frac{U''}{2} \psi + \frac{U'}{2} \psi' + D\psi'' \right] \exp -\frac{U(x)}{2D} - \frac{U'}{2D} \left[+\frac{U'}{2} \psi + D\psi' \right] \exp -\frac{U(x)}{2D} \\ &= \left[\left(+\frac{U''}{2} - \frac{U'^2}{4D} \right) \psi + D\psi'' \right] \exp -\frac{U(x)}{2D} \end{aligned}$$

Soit

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -D\psi'' + \left(\frac{U'^2}{4D} - \frac{U''}{2} \right) \psi = H_+ \psi \\ -\frac{\partial P}{\partial t} &= LP \\ -\frac{\partial \psi}{\partial t} &= H_+ \psi \end{aligned}$$

$$H_+ = -D \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{U'^2}{4D} - \frac{U''}{2}$$

$$L = \exp -\frac{U}{2D} H_+ \exp \frac{U}{2D}$$

7.8 Propriété du hamiltonien H_+ et supersymétrie

Exprimons H_+ en terme des opérateurs différentiels du premier ordre

$$\begin{aligned} Q &= \sqrt{D} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2\sqrt{D}} \frac{\partial U}{\partial x} \\ Q^+ &= -\sqrt{D} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2\sqrt{D}} \frac{\partial U}{\partial x} \end{aligned}$$

On vérifie que $H_+ = Q^+ Q$

Conséquences :

1. H_+ est défini positif

$$\langle n | Q^+ Q | n \rangle = \| Q | n \rangle \|^2 \geq 0$$

2. fondamental $Q | 0 \rangle = 0$

$$\psi_0(x) = \exp -\frac{U(x)}{2D} \text{ est un état propre d'énergie nulle associé à } P_{eq}(x).$$

Exprimons la probabilité de transition solution de

$$\begin{cases} \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [D \frac{\partial P}{\partial x} + P \frac{\partial U}{\partial x}] \\ \lim_{t \rightarrow 0} P(x, t | y, 0) = \delta(x - y) \end{cases}$$

en terme des fonctions propres de H_+

$$P(x, t | y, 0) = \frac{\psi_0(x)}{\psi_0(y)} \sum_n \psi_n(x) \psi_n(y) e^{-E_n t}$$

Comportements limites $t \rightarrow \infty \quad P(x|y, 0) \rightarrow \frac{\psi_0(x)}{\psi_0(y)} \psi_0(x) \psi_0(y) = \psi_0^2(x) = \exp -\frac{U(x)}{D}$
 $t \rightarrow 0 \quad P(x|y, 0) \rightarrow \frac{\psi_0(x)}{\psi_0(y)} \delta(x - y) = \delta(x - y)$

Approche à l'équilibre : elle est décrite par le spectre de relaxation constitué de l'ensemble des $E_n (n \geq 1)$. En pratique, on s'intéresse essentiellement à la première valeur propre non nulle E_1 .

On pose :

$$H_+ = Q^+Q = -D \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left[\frac{1}{4D} \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right]$$

$$H_- = QQ^+ = -D \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left[\frac{1}{4D} \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right]$$

Soit ψ_n un état propre de H_+

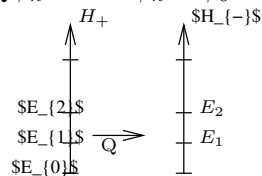
$$H_+ \psi_n = E_n \psi_n$$

$$Q^+ Q \psi_n = E_n \psi_n$$

Agissant avec Q il vient :

$$QQ^+ Q \psi_n = E_n Q \psi_n$$

Si $Q \psi_n \neq 0$ on en déduit que $Q \psi_n$ est un état propre de H_- .
 Si $Q \psi_n = 0 \Rightarrow \psi_n = \psi_0$ est l'état fondamental de H_+



On en déduit que la partie positive du spectre de H_+ coïncide avec celui de H_- . Seul le fondamental de H_+ n'est pas apparié.

Remarque : on passe de H_+ à H_- en changeant le signe de la force $\frac{\partial U}{\partial x} \rightarrow -\frac{\partial U}{\partial x}$, ce qui suggère que cette symétrie est reliée au renversement du sens du temps.

7.9 Application

7.9.1 Processus de Wiener

$$\dot{x} = \sqrt{2D} \eta(t)$$

$$U(x) = 0 \quad H_+ = -D \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Spectre continu donné par $\psi_k(x) = e^{ikx} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

$$H_+ \psi_k(x) = D k^2 \psi_k(x)$$

$$\begin{aligned} P(x \ t | y \ 0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk \psi_k(x) \psi_k^*(y) e^{-Dk^2 t} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int e^{ik(x-y) - Dk^2 t} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp -\frac{(x-y)^2}{4Dt} \end{aligned}$$

Il n'y a pas de solution d'équilibre

7.9.2 Processus d'Ornstein-Uhlenbeck

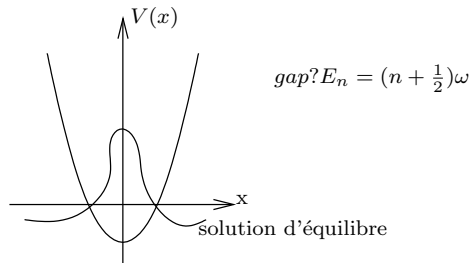
$$\dot{x} = -kx + \sqrt{2D} \eta(t)$$

$$\phi(x) = -kx = -\frac{\partial}{\partial x} U(x)$$

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} \implies P_{eq}(x) = \exp -\frac{kx^2}{2}$$

La relaxation vers l'équilibre est décrite par le hamiltonien

$$H_+ = -D \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{U'^2}{4D} - \frac{U''}{2} = -D \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{k^2 x^2}{4D} - \frac{k}{2}$$



Pour retrouver la correspondance habituelle avec l'opérateur de Schrödinger il faut poser

$$\frac{p^2}{2m} = D p^2 \implies D = \frac{1}{2m} \implies m = \frac{1}{2D}$$

$$\frac{m\omega^2 x^2}{2} = \frac{k^2 x^2}{4D} \implies \frac{1}{2D} \frac{\omega^2}{2} x^2 = \frac{k^2 x^2}{4D} \implies \omega = k$$

On en déduit les valeurs propres

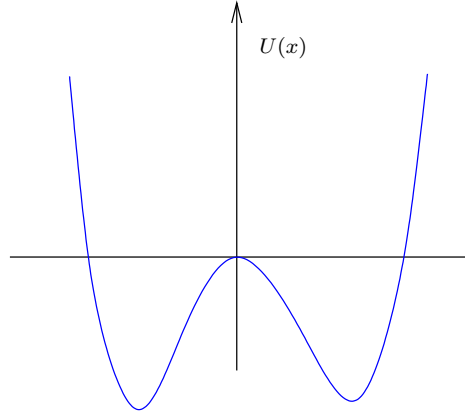
$$E_n = (n + \frac{1}{2})k - \frac{k}{2} = nk$$

et le temps de relaxation

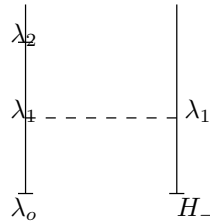
$$\tau = \frac{1}{k}$$

7.9.3 Processus bistables

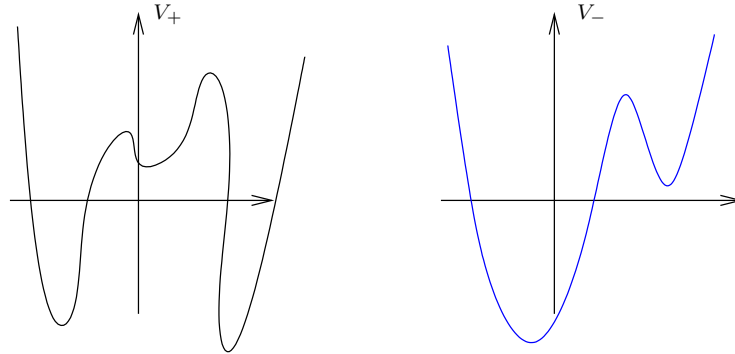
Il s'agit d'étudier la relaxation lente vers l'équilibre en présence d'un potentiel bistable du type



Pour $D \rightarrow 0$ soit $T \rightarrow 0$ on s'attend à observer une relaxation très lente. Cette relaxation est gouvernée par une valeur propre λ_1 très petite. Pour la calculer il est commode d'utiliser la correspondance $H_+ \rightarrow H_-$.



Le fondamental de H_- a une énergie λ_1 qui peut être évaluée par une méthode variationnelle. De plus on est très souvent dans une situation où le partenaire supersymétrique a un seul minimum.

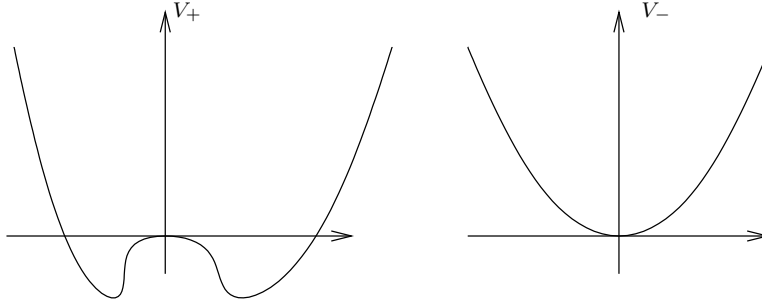


Considérons l'exemple suivant (Bernstein et al. PRL 52,1933,(1984)) correspondant à un cas critique $U(x) = \frac{x^4}{4}$

Exemple : posons $D = 1 \quad U'(x) = x^3$

$$H_+ = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{4}x^6 - \frac{3}{2}x^2$$

$$H_- = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{4} x^6 + \frac{3}{2} x^2$$



Méthode variationnelle pour H_- en prenant les fonctions d'essai

$$\psi_{-1} = \exp -\frac{1}{2} \alpha_1 x^2$$

$$\psi_{-2} = x \exp -\frac{1}{2} \alpha_2 x^2$$

donne

$$\lambda_1 \leq 1,38$$

$$\lambda_2 \leq 4,51$$

à comparer avec les valeurs "exactes" obtenues par diagonalisation d'une matrice 100x100

$$\lambda_1 = 1,37 \quad \lambda_2 = 4,45$$

7.10 Représentation fonctionnelle de $P(x t|y 0)$

L'expression de la probabilité de transition en terme du hamiltonien H_+ nous suggère de l'écrire sous forme d'intégrale fonctionnelle

$$P(x t|y 0) = \frac{\psi_o(x)}{\psi_o(y)} \sum_n \psi_n(x) \psi_n(y) e^{-E_n t}$$

Le membre de droite peut s'écrire

$$\psi_o(x) \langle x | e^{-tH_+} | y \rangle \psi_o^{-1}(y)$$

$$\begin{aligned} \text{avec } H_+ &= -D \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{1}{4D} \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 \\ &= -D \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \Omega(x) \end{aligned}$$

En utilisant la formule de Feynman Kac, il vient

$$P(x t|y 0) = \frac{\psi_0(x)}{\psi_0(y)} \int_{y_0}^{x_t} dW \exp - \int_0^t d\tau \left[\frac{1}{4D} \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right]$$

$$= \exp -\frac{1}{2D} [U(x) - U(y)] \int_{y_0}^{xt} dW \exp - \int_0^t d\tau \left[\frac{1}{4D} \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right]$$

Revenons à la mesure de Feynman en posant

$$-\frac{1}{2D} [U(x) - U(y)] = -\frac{1}{2D} \int_0^t \dot{x} \frac{\partial U}{\partial x} d\tau$$

$$dW = \mathcal{D}x \exp -\frac{1}{4D} \int \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 d\tau$$

Il vient

$$P(x t|y 0) = \int \mathcal{D}x(\tau) \exp - \int_0^t \mathcal{L} d\tau$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{1}{4D} \dot{x}^2 + \frac{1}{2D} \dot{x} \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{1}{4D} \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \\ &= \frac{1}{4D} \left[\dot{x}^2 + 2\dot{x} \frac{\partial U}{\partial x} + \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 \right] - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \\ &= \frac{1}{4D} \left[\dot{x} + \frac{\partial U}{\partial x} \right]^2 - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \end{aligned}$$

$$P(x t|y 0) = \int \mathcal{D}x(\tau) \exp - \left[\frac{1}{4D} \int_0^t \left(\dot{x} + \frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{2} \int_0^t \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right]$$

Cette expression suggère de traiter D comme un petit paramètre au même titre que \hbar . La méthode du col nous invite à rechercher les solutions qui rendent stationnaires le premier terme. Les solutions d'action nulle $\dot{x} = -\frac{\partial U}{\partial x}$ ne sont autres que les solutions des équations du mouvement déterministe! Mais ce ne sont pas les bonnes solutions. En traitant le deuxième terme comme une perturbation on peut retrouver aisément certains résultats classiques voir Onsager-Machlup, Phys Rev 37, 405 (31) et Phys Rev 38, 2265 (31).

7.11 Limite $D \rightarrow 0$, formule d'Arrhénius

On néglige le terme en $\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$ qui est d'ordre 1.

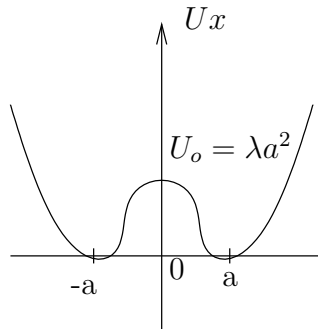
Il reste

$$P(x t|y 0) \simeq \int \mathcal{D}x(\tau) \exp -\frac{1}{4D} \int_0^t \left(\dot{x} + \frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 d\tau$$

dans la limite $D \rightarrow 0$ l'intégrale est dominée par les trajectoires qui minimisent

$$\int_0^t \left(\dot{x} + \frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 = \int_0^t \left[\dot{x}^2 + \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 \right] d\tau + 2(U[x] - U[y])$$

Supposons que $U(x) = \lambda(x^2 - a^2)^2$



Calculons $P(0, t | -a, 0)$ dans la limite $t \rightarrow \infty$. Cette quantité donne la probabilité de remonter la barrière de potentiel sous l'effet d'une fluctuation.

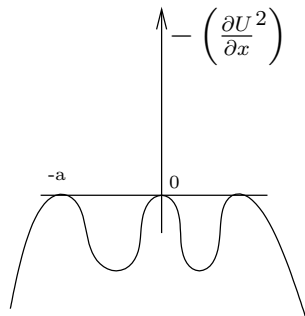
Cherchons les solutions classiques d'action $S = \int_0^t [\dot{x}^2 + (\frac{\partial^2 U}{\partial x})^2] d\tau$

L'équation du mouvement

$$2\ddot{x} = 2 \frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \text{ donne le mouvement dans le potentiel } -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2$$

$$2\ddot{x} \dot{x} = 2\dot{x} \frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial \dot{x}^2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2$$



$$\dot{x}^2 - \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 = E = 0 \Rightarrow \boxed{\dot{x} = + \frac{\partial U}{\partial x} > 0} \text{ à comparer à l'équation déterministe de signe opposé!}$$

Donc

$$\begin{aligned} S &= 2 \int_0^\infty [\dot{x}^2 + (\frac{\partial U}{\partial x})^2] d\tau = 2 \int_0^\infty \dot{x}^2 d\tau \\ &= 2 \int_0^\infty \dot{x} \frac{\partial U}{\partial x} d\tau = 2 \int_0^\infty \frac{\partial U}{\partial x} d\tau = 2[U(0) - U(-a)] \end{aligned}$$

En regroupant les termes on obtient

$$\begin{aligned}
 S &= \frac{1}{4D} \left[\int_0^t \left[\dot{x}^2 + \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 \right] d\tau + 2(U(x) - U(y)) \right] \\
 &= \frac{1}{4D} \left\{ \int_0^\infty \left[\dot{x}^2 + \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 \right] d\tau + 2[U(0) - U(-a)] \right\} \\
 &= \frac{1}{4D} [4[U(0) - U(-a)]] = 4 \frac{U_0}{D}
 \end{aligned}$$

où U_0 est la hauteur de la barrière. D'où la formule d'Arrhénius

$$P \sim \exp - \frac{U_0}{D} = \exp - \frac{U_0}{kT}$$

Chapitre 8

Intégrale de chemin sur un espace multiplement connexe

Sommaire

8.1	Electron dans un anneau mésoscopique	89
8.2	Notions d'homotopie	90
8.3	Intégrale de chemin sur un espace multiplement connexe	91
8.4	Effet Bohm-Aharonov	92
8.4.1	Généralités	92
8.4.2	Explication simplifiée	93
8.4.3	Ligne de flux magnétique	94

8.1 Electron dans un anneau mésoscopique

Considérons un système physique unidimensionnel dont l'espace de configuration C est un cercle.

Exemples : rotateur plan, électron dans un anneau mésoscopique

Il est décrit par une coordonnée généralisée $\varphi(t)$ qui satisfait $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ avec identification des points 0 et 2π .

Partant du lagrangien du rotateur plan

$$\mathcal{L} = \frac{I}{2} \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2$$

nous nous proposons d'évaluer le propagateur de Feynman $K(\varphi' t' | \varphi t)$. Nous devons pour cela prendre en compte tous les chemins reliant φ et φ' . L'ensemble de ces chemins $\{\varphi_n(\tau)\}$ est indexé par un entier n qui est le nombre d'enroulements du chemin, nombre de fois où la particule a entouré l'origine.

Essayons de relier le problème classique au problème quantique.

Les fonctions d'onde du rotateur s'écrivent

$$\psi_n(\varphi, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(in\varphi - \frac{in^2 t}{2I}\right), \quad n \in \mathbb{Z}$$

Par conséquent le propagateur peut s'écrire

$$\begin{aligned} K(\varphi' t' | \varphi t) &= \sum_n \psi_n(\varphi', t') \psi_n^*(\varphi, t) \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_n \exp\left[in(\varphi' - \varphi) - \frac{in^2(t' - t)}{2I}\right] \end{aligned}$$

En utilisant la formule de Poisson

$$\sum_n f(n) = \sum_n \hat{f}(2\pi n)$$

où \hat{f} est la transformée de Fourier

$$\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} f(x) dx$$

On obtient une expression équivalente du propagateur

$$K(\varphi' t' | \varphi t) = \sqrt{\frac{I}{2\pi i(t' - t)}} \sum_n e^{\frac{i I (\varphi' - \varphi + 2\pi n)^2}{2(t' - t)}}$$

L'argument de l'exponentielle

$$S_n = \frac{I(\varphi' - \varphi + 2\pi n)^2}{2(t' - t)}$$

s'interprète comme l'action classique associée à un chemin $\varphi_n(\tau)$ de nombre d'enroulement n . Chaque propagateur partiel peut être interprété comme un propagateur libre sur l'espace de recouvrement universel de C qui est \mathbb{R} . Le point φ' a une infinité de préimages $p^{-1}(\varphi') = \varphi' + 2\pi n$.

8.2 Notions d'homotopie

Soit C un espace topologique. On munit l'ensemble des chemins fermés (ou dont les extrémités sont fixées) d'une loi de composition qui consiste à recoller les chemins. Deux chemins déformables l'un dans l'autre seront considérés comme équivalents. On montre que les classes d'équivalence de chemins forment un groupe appelé groupe fondamental.

Définitions :

8.3. INTÉGRALE DE CHEMIN SUR UN ESPACE MULTIPLEMENT CONNEXE 91

1. un chemin d'extrémités x et y est une application continue $f : I \rightarrow C$ de l'intervalle $I = [0 \leq t \leq 1]$ dans C telle que $f(0) = x$, $f(1) = y$
2. un chemin est dit fermé si $x = y$
3. loi de composition interne des chemins

$f : I \rightarrow C$ d'extrémités x et y
 $g : I \rightarrow C$ d'extrémités y et z

$f \circ g$ est défini par l'application

$$f \circ g(t) = f(2t) \text{ pour } 0 \leq t \leq \frac{1}{2}$$

$$f \circ g(t) = g(2t - 1) \text{ pour } \frac{1}{2} \leq t \leq 1$$

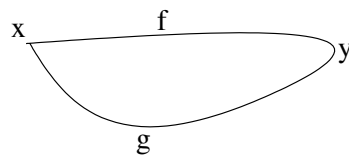
4. deux chemins $f : I \rightarrow C$ et $g : I \rightarrow C$ de mêmes extrémités x et y sont homotopes s'il existe une application continue $\varphi : J \rightarrow C$ où $J = \{0 \leq t, u \leq 1\}$ telle que

$$\varphi(t, 0) = f(t)$$

$$\varphi(t, 1) = g(t)$$

$$\varphi(0, u) = x$$

$$\varphi(1, u) = y$$



L'ensemble des chemins fermés issus de x considérés à une homotopie près forme un groupe pour la loi de composition des chemins. Ce groupe, appelé groupe fondamental, est noté $\pi_1(C, x)$. On montre que le point de base x peut être choisi arbitrairement.

Exemples :

- C est le cercle S_1 :

$$\pi_1(S_1) = \pi_1(SO(2)) = \mathbb{Z}$$

- C est une sphère avec p anses :

le groupe fondamental est un groupe à $2p$ générateurs. Exemple : le tore $p = 1$

8.3 Intégrale de chemin sur un espace multiplement connexe

Soit C un espace de configuration multiplement connexe et $\pi_1(C)$ son groupe fondamental. Pour définir le propagateur $K(\vec{q}'t' | \vec{q}t)$ sur (C) on commence par regrouper les chemins déformables les uns dans les autres, c'est à dire les chemins appartenant à une même classe d'homotopie g . On définit ainsi un propagateur partiel

$$\int_{\vec{q}(t)=\vec{q}}^{\vec{q}(t')=\vec{q}'} \mathcal{D}\vec{q}(\tau) \exp i \frac{S}{\hbar}$$

On somme ensuite ces différentes contributions avec des phases $\chi(g) \in \mathbb{C}$ où g étiquette les différentes classes d'équivalence de chemins.

$$K(\vec{q}'t' | \vec{q}t) = \sum_{g \in \pi_1(C)} \chi(g) \int_{\vec{q}(t)=\vec{q}}^{\vec{q}(t')=\vec{q}'} \mathcal{D}\vec{q}(\tau) \exp i \frac{S}{\hbar}$$

En utilisant le principe de superposition on montre que les phases doivent satisfaire

$$\chi(g) \chi(h) = \chi(g \circ h)$$

Les nombres complexes $\chi(g)$ de module $|\chi(g)| = 1$ forment une représentation unitaire de dimension 1 de $\pi_1(C)$. Ce sont les caractères de ce groupe.

Seule la physique permet de fixer ces phases. Dans le cas d'une particule chargée couplée à une ligne magnétique traversée par un flux ϕ nous montrons que

$$\chi(g) = e^{ie \frac{\phi}{\hbar} n}$$

8.4 Effet Bohm-Aharonov

8.4.1 Généralités

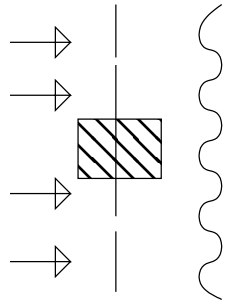
En physique classique, les champs \vec{E} et \vec{B} agissent sur les particules chargées en créant une force

$$\vec{F} = q (\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B})$$

En l'absence de champ, aucune force ne s'exerce sur la particule. Il ne peut donc y avoir d'effet physique pour une particule se déplaçant dans une région où $\vec{E} = \vec{B} = 0$.

Aharonov et Bohm ont imaginé une expérience de pensée montrant que ces considérations cessaient d'être vraies en physique quantique.

L'expérience est une variante de celle des trous d'Young dans laquelle on introduit un champ magnétique localisé dans une région située entre les fentes.

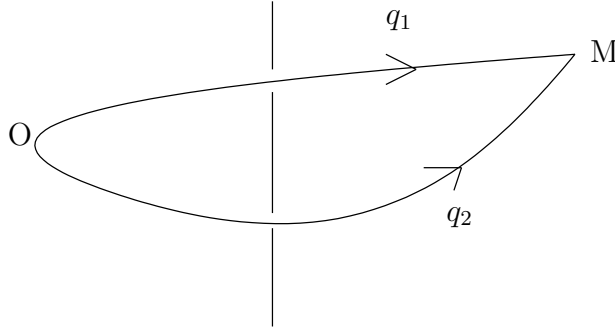


Dans le dispositif expérimental (H. Batelaan et A. Tonomura, *Physics Today*, Septembre 2009), on s'arrange au moyen d'un blindage pour que les particules ne pénètrent pas dans la région hachurée.

L'expérience montre que les franges d'interférence se déplacent lorsqu'on applique le champ \vec{B} , résultat paradoxal en physique classique. Les particules ne pouvant pénétrer dans la région hachurée, aucun effet physique ne devrait apparaître.

8.4.2 Explication simplifiée

Considérons deux chemins $\vec{q}_1(t)$ et $\vec{q}_2(t)$ issus du même point, passant respectivement par chacune des fentes et arrivant au même point M



L'amplitude totale est $e^{\frac{iS(q_1)}{\hbar}} + e^{\frac{iS(q_2)}{\hbar}}$

$$= e^{\frac{iS(q_1)}{\hbar}} \left[1 + e^{\frac{i}{\hbar}[S(q_2) - S(q_1)]} \right]$$

Ces deux chemins interfèrent de façon constructive si $S(q_2) - S(q_1) = 2n\pi\hbar$. Etudions comment ce résultat est affecté par la présence du champ $\vec{B} = \text{rot}\vec{A}$.

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}) \rightarrow \mathcal{L}(q, \dot{q}) + e\vec{A}\vec{\dot{q}}$$

par conséquent l'action S_1 devient

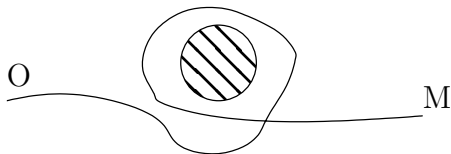
$$\begin{aligned} S_1 &\rightarrow S_1 + e \int \vec{A}(\vec{q}_1) \vec{v}_1 dt \\ &= S_1 + e \int \vec{A}(\vec{q}_1) d\vec{q}_1 \end{aligned}$$

De même

$$S_2 \rightarrow S_2 + e \int \vec{A}(\vec{q}_2) d\vec{q}_2$$

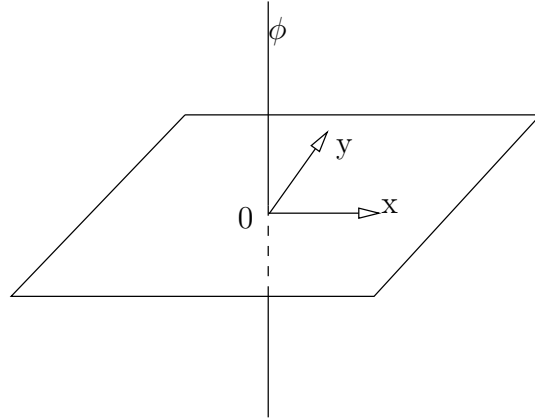
Donc $S_2 - S_1 \rightarrow S_2 - S_1 + e \oint \vec{A}(q) d\vec{q}$, intégrale prise le long du chemin fermé $q_1^{-1} \circ q_2$. Il apparaît par conséquent une phase supplémentaire $\frac{e}{\hbar} \int \vec{A} d\vec{q} = \frac{e\phi}{\hbar}$ et par conséquent une modification des franges d'interférences (sauf si $\frac{e\phi}{\hbar} = 2n\pi$).

Problème : ne faut-t-il pas inclure d'autres chemins ?



Le paragraphe suivant analyse de façon détaillée les différentes classes de trajectoires qui interviennent dans ce problème.

8.4.3 Ligne de flux magnétique



On décrit le problème en terme des coordonnées polaires $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ et θ . Le potentiel vecteur associé à la ligne de flux peut s'écrire

$$\vec{A} = \left(-\frac{Ky}{r^2}, \frac{Kx}{r^2} \right) = \left(-\frac{K \sin\theta}{r}, \frac{K \cos\theta}{r} \right) = K \vec{\nabla}\theta$$

En dehors de l'origine on a $\vec{B} = \text{rot}\vec{A} = 0$. Pour un lacet quelconque entourant le point O on a $\Phi = \oint \vec{A}d\vec{r} = 2\pi K$. On en déduit que la ligne porte le flux magnétique $\phi = 2\pi K$. L'ensemble des chemins (C) d'extrémités \vec{q} et \vec{q}' peut être indexé par un entier $n \in \mathbb{Z}$ tel que

$$\int_c A_\mu dx^\mu = K (\theta' - \theta + 2\pi n)$$

En présence d'un champ magnétique, la formule de Feynman-Kac peut s'écrire sous la forme

$$\langle \vec{r}' | e^{-\beta H} | \vec{r} \rangle = \int \mathcal{D}\vec{r}(\tau) \exp - \int_0^\beta \left(\frac{m\dot{\vec{r}}^2}{2} - ie\vec{A}\dot{\vec{r}} \right) d\tau$$

L'origine du facteur i se retrouve facilement en partant de l'expression du Lagrangien d'une particule de charge e et de masse m plongée dans un champ magnétique.

$$\mathcal{L} = \frac{m\dot{\vec{r}}^2}{2} + e\vec{A}\dot{\vec{r}}$$

Le hamiltonien correspondant s'écrit

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A})^2$$

Etudions les fonctions d'onde et le spectre de H lorsque \vec{A} est le potentiel vecteur précédent.

Dans la jauge $\text{div}\vec{A} = 0$ le hamiltonien s'écrit

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2m} \left(-\Delta - 2e\vec{A}\vec{p} + e^2\vec{A}^2 \right) \\
&= \frac{1}{2m} \left(-\Delta - \frac{2eK}{ir^2} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{e^2K^2}{r^2} \right) \\
&= \frac{1}{2m} \left[-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} - ieK \right)^2 \right]
\end{aligned}$$

Pour simplifier les calculs posons $m = e = 1$. Nous allons calculer le propagateur $\langle \vec{r}' | e^{-\beta H} | \vec{r} \rangle$ et montrer explicitement qu'il s'écrit comme une somme de propagateurs partiels associés à chaque classe d'homotopie.

Les solutions de $H\psi = E\psi$ régulières à l'origine sont $\psi_{E,m} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} J_\nu \left(r\sqrt{2E} \right) e^{im\theta}$ où $E \in \mathbb{R}^+$, $m \in \mathbb{Z}$ et $\nu = |m - K|$.

Elles satisfont la relation de fermeture

$$\sum_m \int_0^\infty dE \psi_{E,m}(\vec{r}') \psi_{E,m}^*(\vec{r}) = \delta(\vec{r}' - \vec{r})$$

Par conséquent

$$\begin{aligned}
\langle \vec{r}' | e^{-\beta H} | \vec{r} \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dE e^{-\beta E} \sum_m J_\nu \left(r\sqrt{2E} \right) J_\nu \left(r'\sqrt{2E} \right) e^{im(\theta' - \theta)} \\
&= \frac{1}{2\pi\beta} \sum_{-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta' - \theta)} I_\nu \left(\frac{rr'}{\beta} \right) \exp - \frac{(r^2 + r'^2)}{2\beta}
\end{aligned}$$

Reprenons l'expression de l'intégrale de chemin

$$\langle \vec{r}' | e^{-\beta H} | \vec{r} \rangle = \int \mathcal{D}\vec{r}(\tau) \exp - \int_0^\beta \left(\frac{m\dot{\vec{r}}^2}{2} - ie\vec{A}\dot{\vec{r}} \right) d\tau$$

Pour un chemin de nombre d'enroulement n nous pouvons écrire

$$\exp i \int_0^\beta \vec{A}\dot{\vec{r}} d\tau = \exp ieK (\theta' - \theta + 2\pi n)$$

Par conséquent le propagateur doit s'écrire sous la forme

$$\langle \vec{r}' | e^{-\beta H} | \vec{r} \rangle = \sum_n \exp ieK (\theta' - \theta + 2\pi n) \mu_n$$

où μ_n est un propagateur partiel associé à la classe d'homotopie n . En utilisant la formule de Poisson on montre que

$$\mu_n = \frac{1}{2\pi\beta} \exp - \frac{(r^2 + r'^2)}{2\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp it (\theta' - \theta + 2n\pi) I_{|t|} \left(\frac{rr'}{\beta} \right)$$

On vérifie que le propagateur est, comme il se doit, une fonction monovaluée (sous la transformation $\theta' \rightarrow (\theta' + 2\pi)$). En l'absence de flux magnétique $K = 0$, on vérifie que

$$\langle \vec{r}' | e^{-\beta H} | \vec{r} \rangle = \frac{1}{2\pi\beta} \exp - \frac{(r^2 + r'^2)}{2\beta} \sum_m e^{im(\theta' - \theta)} I_{|m|} \left(\frac{rr'}{\beta} \right)$$

On retrouve comme il se doit le propagateur libre.

Plus généralement pour eK entier, par conséquent pour un flux magnétique quantifié

$$\langle \vec{r}' | e^{-\beta H} | \vec{r} \rangle = \exp ieK (\theta' - \theta) \langle \vec{r}' | e^{-\beta H_0} | \vec{r} \rangle$$

Le seul effet du champ est donc d'introduire un facteur de phase global alors que dans le cas non quantifié chaque propagateur partiel est pondéré par une phase non triviale.

Remarques : la condition $eK = n$ se réécrit en terme du flux magnétique

$$\phi = \frac{2\pi n}{e} = n\phi_0$$

où $\phi_0 = \frac{2\pi}{e}$ est le quantum de flux élémentaire. Dans les unités physiques habituelles

$$\phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{e}$$

La section efficace de diffusion

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = \frac{\sin^2(\pi\alpha)}{2\pi \cos^2(\theta/2)}$$

s'annule lorsque $\alpha = \phi/\phi_0$ est entier c'est à dire lorsque la ligne magnétique porte un flux quantifié.

Chapitre 9

Statistiques quantiques

Sommaire

9.1	Rappel : problème à une particule	97
9.2	Problème à n particules	98
9.3	Calcul de la fonction de partition bosonique . . .	100
9.4	Discussion qualitative des trajectoires	101
9.5	Bornes sur les fonctions de partition	104

9.1 Rappel : problème à une particule

$$\begin{aligned}\mathbb{Z}(\beta) &= \text{Trace } e^{-\beta H} \\ &= \int dq \langle q | e^{-\beta H} | q \rangle\end{aligned}$$

$$\text{or } \langle q' | \exp -\frac{tH}{\hbar} | q \rangle = \int_{\substack{q(t)=q' \\ q(0)=q}} \mathcal{D}q(\tau) \exp -\frac{1}{\hbar} \int_0^t H(q, \dot{q}) d\tau$$

Posons $t = \beta\hbar$

$$\langle q' | \exp -\beta H | q \rangle = \int_{\substack{q(\beta\hbar)=q' \\ q(0)=q}} \mathcal{D}q(\tau) \exp -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} H(q, \dot{q}) d\tau$$

Ainsi

$$\mathbb{Z}(\beta) = \int dq \int_{\substack{q(0)=q \\ q(\beta\hbar)=q}} \mathcal{D}q(\tau) \exp -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} H(q, \dot{q}) d\tau$$

Il faut donc intégrer sur toutes les trajectoires fermées de période $\beta\hbar = \frac{\hbar}{kT}$

9.2 Problème à n particules

Pour un système de n bosons identiques, on écrira

$$\mathbb{Z}(n, \beta) = \frac{1}{n!} \sum_{\sigma \in S_n} \int dq_1 \dots dq_n \langle q_{\sigma_1} \dots q_{\sigma_n} | e^{-\beta H} | q_1 \dots q_n \rangle$$

Soit sous une forme plus compacte

$$\mathbb{Z}(n, \beta) = \frac{1}{n!} \sum_{\sigma \in S_n} \int dq \langle \sigma q | e^{-\beta H} | q \rangle$$

Montrons que l'intégrale de configuration est la même pour les deux permutations appartenant à la même classe de conjugaison, ce sont des permutations π et σ telles que $\pi = r\sigma r^{-1}$.

$$\int dq \langle \sigma q | e^{-\beta H} | q \rangle = \int dq \langle \pi q | e^{-\beta H} | q \rangle$$

Preuve :

L'élément de matrice densité de $e^{-\beta H}$ est invariant par permutation par conséquent

$$\langle \pi q | e^{-\beta H} | q \rangle = \langle r^{-1}\pi q | e^{-\beta H} | r^{-1}q \rangle$$

or $r^{-1}\pi = \sigma r^{-1}$ donc

$$\langle \pi q | e^{-\beta H} | q \rangle = \langle \sigma r^{-1}q | e^{-\beta H} | r^{-1}q \rangle$$

Prenons comme élément d'intégration la variable

$$q' = r^{-1}q$$

Il vient

$$\int dq \langle \pi q | e^{-\beta H} | q \rangle = \int dq' \langle \sigma q' | e^{-\beta H} | q' \rangle$$

Par conséquent dans la somme

$$\sum_{\sigma \in S_n} \frac{1}{n!} \int dq \langle \sigma q | e^{-\beta H} | q \rangle$$

On pourra regrouper toutes les permutations appartenant à la même classe de conjugaison de S_n . On est ramené à faire une somme sur les classes de conjugaison \mathcal{P} de permutations.

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{P}} \frac{1}{n!} C(\sigma) \int dq \langle \sigma q | e^{-\beta H} | q \rangle$$

Pour poursuivre le calcul nous utilisons les propriétés suivantes

1. Toute permutation σ_n peut se décomposer en produit de permutations cycliques

exemple :

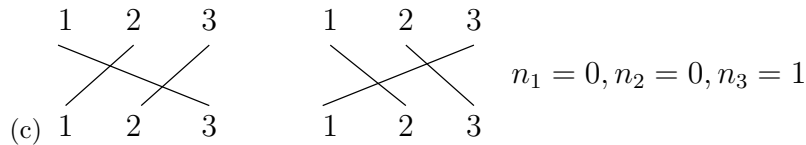
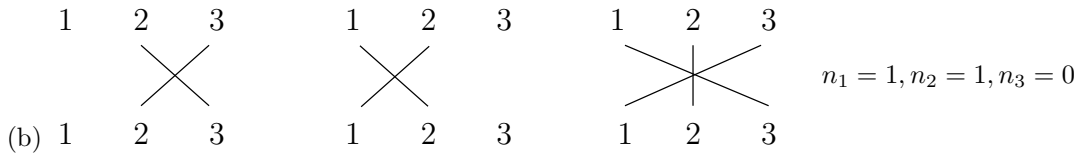
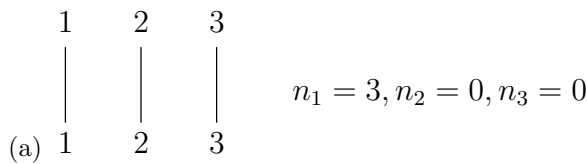
$$\sigma_7 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ 4 & 2 & 7 & 1 & 3 & 6 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 7 & 5 \\ 7 & 5 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6 \\ 6 \end{pmatrix}$$

Cette décomposition permet de réécrire σ_7 comme le produit de quatre permutations cycliques avec deux cycles de longueur 1, un cycle de longueur 2 et un cycle de longueur 3.

De façon générale on pourra décomposer (de façon non unique) σ_n en un produit de n_1 cycles de longueur 1, n_2 cycles de longueur 2 et n_s cycles de longueur s avec $\sum sn_s = n$

2. Deux permutations quelconques τ_n et $\pi_n = r\tau_n r^{-1}$ appartenant à la même classe admettent la même décomposition en cycles. Par conséquent les classes de conjugaison peuvent être indexées par une suite d'entiers (n_1, n_2, \dots, n_s)

exemple (énumération des classes de σ_3) :



3. Calcul du nombre de permutations appartenant à la classe de conjugaison $(n_1, n_2, n_3, \dots, n_s)$ avec $\sum sn_s = n$.

Il nous faut donc calculer le nombre de partitions de n en n_1, n_2, \dots, n_s parties de longueurs respectives $(1, 2, 3, \dots, s)$.

On obtient

$$C(n_1, n_2, \dots, n_s) = \frac{n!}{\prod_s n_s! \prod_s s^{n_s}}$$

Le premier terme du dénominateur $\prod_s n_s!$ prend en compte des échanges de cycles de même longueur, le second terme prend en compte les permutations cycliques à l'intérieur d'un cycle de longueur s .

4. Munis de ces propriétés, la somme sur les configurations se ramène au calcul de l'intégrale sur des échanges cycliques de s éléments.

exemple :

$$\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_s \rightarrow (\vec{q}_2, \dots, \vec{q}_1)$$

et supposons pour simplifier que le hamiltonien est séparable

$$\begin{aligned} & \langle \vec{q}_2, \dots, \vec{q}_1 | \exp -\beta H | \vec{q}_1, \dots, \vec{q}_s \rangle \\ &= \int_{\vec{q}_1, 0}^{\vec{q}_2, \beta \hbar} \mathcal{D}\vec{q}_1 \dots \int_{\vec{q}_s, 0}^{\vec{q}_1, \beta \hbar} \mathcal{D}\vec{q}_s \exp -\frac{m}{2\hbar} \int_0^{\beta \hbar} \sum_{i=1}^s \left(\frac{dq_i}{d\tau} \right)^2 + \int_0^{\beta \hbar} \sum_{i=1}^s W(q_i(\tau)) d\tau \\ &= K(\vec{q}_2, \beta \hbar | \vec{q}_1, 0) K(\vec{q}_3, \beta \hbar | \vec{q}_2, 0) \dots K(\vec{q}_1, \beta \hbar | \vec{q}_s, 0) \end{aligned}$$

Où

$$K(\vec{q}_1, \beta \hbar | \vec{q}_s, 0) = \sum_n \psi_n(\vec{q}_1) \psi_n(\vec{q}_s)^* \exp -\beta E_n$$

Après intégration nous obtenons

$$\int \sum_{i=1}^n d^3 \vec{q}_i \langle \vec{q}_2, \dots, \vec{q}_1 | \exp -\beta H_n | \vec{q}_1, \dots, \vec{q}_s \rangle = \sum_n \exp -\beta s E_n \equiv f_s$$

Il est clair que n'importe quelle autre permutation cyclique de s éléments conduirait au même résultat.

9.3 Calcul de la fonction de partition bosonique

(voir R.P. Feynman, Statistical Mechanics, a set of lectures, p 63)

$$\begin{aligned} \mathbb{Z}(\beta) &= \sum \frac{1}{n!} C(\sigma) \int dq \langle \sigma q | e^{-\beta H} | q \rangle \\ &= \sum_{\{n_s\}} \frac{1}{\prod_s n_s! \prod_s s^{n_s}} \int dq \langle \sigma q | e^{-\beta H} | q \rangle \end{aligned}$$

Dans le cas d'un hamiltonien séparable on obtient

$$\begin{aligned} \mathbb{Z}(\beta) &= \sum_{\{n_s\}} \frac{1}{\prod_s n_s! \prod_s s^{n_s}} \prod_s (f_s)^{n_s} \\ &= \sum_{\{n_s\}} \prod_s \frac{1}{n_s!} \left(\frac{f_s}{s} \right)^{n_s} \end{aligned}$$

La somme est prise sur toutes les configurations telles que $\sum sn_s = n$.
 Pour lever cette contrainte et disposer d'une formule explicite il est commode de travailler dans l'ensemble grand canonique.

$$\Xi(z, \beta) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n \mathbb{Z}(\beta)$$

où $n = \sum sn_s$ d'où

$$\begin{aligned} \Xi &= \sum_{\{n_s\}} \prod_{s=1}^{\infty} \frac{1}{n_s!} \left(\frac{f_s}{s} z^s \right)^{n_s} \\ &= \prod_{s=1}^{\infty} \sum_{n_s=0}^{\infty} \frac{1}{n_s!} \left(\frac{f_s}{s} z^s \right)^{n_s} \\ &= \prod_{s=1}^{\infty} \exp \frac{f_s}{s} z^s = \exp \sum_{s=1}^{\infty} \frac{f_s}{s} z^s \end{aligned}$$

Calculons l'argument de l'exponentielle

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{f_s}{s} z^s &= \sum_{s=1}^{\infty} \sum_n \frac{z^s \exp -\beta s E_n}{s} \\ &= \sum_n \sum_{s=1}^{\infty} \frac{(z \exp -\beta E_n)^s}{s} \\ &= - \sum_n \log(1 - z \exp -\beta E_n) \end{aligned}$$

d'où

$$\Xi_B(z, \beta) = \prod_n (1 - z e^{-\beta E_n})^{-1}$$

Equation d'état

$$\frac{pV}{kT} = \log \Xi_B = - \sum_n \log(1 - z e^{-\beta E_n})$$

Pour un ensemble de fermions indépendants on obtiendrait

$$\Xi_F = \prod_n (1 + z e^{-\beta E_n})$$

9.4 Discussion qualitative des trajectoires

- Extension typique des trajectoires

Réécrivons l'intégrale de chemin en prenant comme variable d'intégration

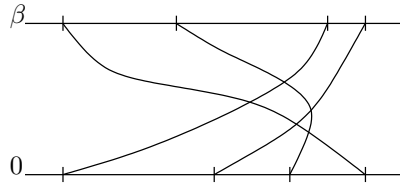
$$t = \frac{\hbar}{m} \tau$$

Le terme d'action devient

$$\begin{aligned} & \frac{m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \sum_i \left(\frac{d\vec{q}_i}{d\tau} \right)^2 d\tau + \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \sum_i W(\vec{q}_i(\tau)) d\tau \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{\frac{\beta\hbar^2}{m}} \sum_i \left(\frac{d\vec{q}_i}{dt} \right)^2 dt + \frac{m}{\hbar^2} \int_0^{\frac{\beta\hbar^2}{m}} \sum_i W(\vec{q}_i(\tau)) d\tau \end{aligned}$$

Le terme cinétique décrit n mouvements browniens indépendants sur l'intervalle temporel $t = \frac{\beta\hbar^2}{m}$. L'extension typique L des trajectoires est telle que $\langle L^2 \rangle \sim \frac{\beta\hbar^2}{m}$ donc $L \sim \hbar \sqrt{\frac{\beta}{m}}$.
Comparons l'extension typique L à la distance moyenne d entre particules. Pour une densité fixée on a $d \sim \rho^{-\frac{1}{3}}$.

- Estimation de la température critique T_c .
Si $L \gg d$, on s'attend à ce que les effets quantiques dominent car les échanges de particules deviennent significatifs



$L \geq d$ définit une échelle de température $T < T_c$ telle que $\hbar \sqrt{\frac{\beta c}{m}} = \rho^{-\frac{1}{3}}$

$$\text{soit } T_c = \frac{\hbar^2 \rho^{\frac{2}{3}}}{k m}$$

qui est de l'ordre de la température de dégénérescence d'un gaz de Bose.

Dans la limite de haute température, seuls les chemins de petite longueur vont contribuer. On s'attend donc à ce qu'il n'y ait pas d'échanges de particules. Seule la permutation identique va contribuer

$$\begin{aligned} & \langle q_1 \dots q_n | e^{-\beta H} | q_1 \dots q_n \rangle \\ & \sim \exp -\beta \sum W(\vec{q}_i) \int \mathcal{D}q(\tau) \exp -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \sum_i \left(\frac{d\vec{q}_i}{d\tau} \right)^2 d\tau \\ & = \exp -\beta \sum W(q_i) K_0(q, \beta\hbar | q, 0)^n \\ & = \exp -\beta \sum W(q_i) \left(\frac{m}{2\pi\hbar\beta\hbar} \right)^{\frac{3n}{2}} \end{aligned}$$

Donc

$$Z = \frac{1}{n!} \int d\vec{q}_1 \dots d\vec{q}_n \exp -\beta \sum_{i=1}^n W(q_i) \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{\frac{3n}{2}}$$

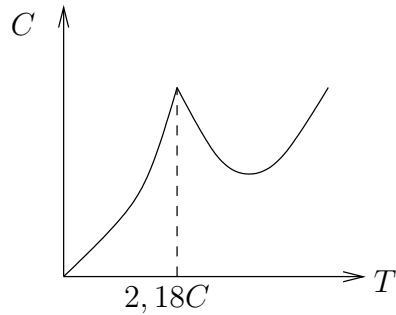
On retrouve ainsi l'expression de la fonction de partition classique dans l'approximation de Maxwell-Boltzmann. L'approximation s'appuie sur le fait que

les trajets se font en un temps très court $\sim \beta\hbar$. Les particules ne peuvent pas faire d'excursions lointaines.

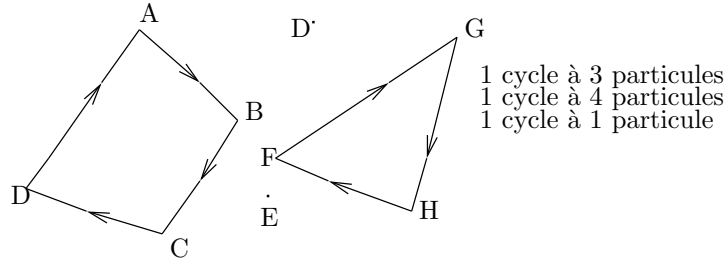
Vérification

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3n}} \int d^n p d^n q e^{-\beta\left[\frac{p^2}{2m} + V(q)\right]} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3n}} \left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{\frac{3n}{2}} \left[\int e^{-\beta V(q)} dq\right]^n \\ &= \left(\frac{2m\pi}{4\pi^2\hbar^2\beta}\right)^{\frac{3n}{2}} \left[\int e^{-\beta V(q)} d^3q\right]^n \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{\frac{3n}{2}} \left[\int e^{-\beta V(q)} d^3q\right]^n \end{aligned}$$

Application : étude de la transition λ dans He^4



Les effets quantiques interviennent s'il y a des échanges de particules. On peut visualiser en dessinant les cycles correspondants



Chaque cycle est associé à un polygone particulier dont le poids statistique est

$$\left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \exp -\frac{m}{2\hbar^2\beta} \sum (q_i - q_{\sigma_i})^2$$

Feynman suppose les atomes distribués uniformément ainsi

$$Z \sim \sum_P \exp -\frac{mn(\rho)d^2}{2\hbar^2\beta}$$

où la somme porte sur tous les polygones ayant $n(\rho)$ côtés.

Voir Feynman, Phys Rev D 91 (1953) et Statistical Mechanics chap 11 p 343
D.M. Ceperley, Path integrals in the theory of condensed Helium, Rev. Mod. Phys. 67,279 (1995).

9.5 Bornes sur les fonctions de partition

On peut rendre rigoureuses les considérations précédentes en reprenant l'expression de $Z(\beta)$

$$Z(\beta) = \int d\vec{q} \langle \vec{q} | e^{-\beta H} | \vec{q} \rangle$$

où

$$\langle \vec{q} | e^{-\beta H} | \vec{q} \rangle = \int_{\vec{q}(0)=\vec{q}}^{\vec{q}(\beta\hbar)=\vec{q}} \mathcal{D}\vec{q}(\tau) \exp -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left(\frac{m}{2} \dot{\vec{q}}^2(\tau) + V(\vec{q}(\tau)) \right) d\tau$$

Posons $\vec{q}(\tau) = \vec{q} + \vec{\eta}(\tau)$ avec $\vec{\eta}(0) = \vec{\eta}(\beta\hbar) = \vec{0}$ (pont brownien)

$$\langle \vec{q} | e^{-\beta H} | \vec{q} \rangle = \int_{\vec{\eta}(0)=\vec{0}}^{\vec{\eta}(\beta\hbar)=\vec{0}} \mathcal{D}\vec{\eta}(\tau) \exp -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left(\frac{m}{2} \dot{\vec{\eta}}^2(\tau) + V(\vec{q} + \vec{\eta}(\tau)) \right) d\tau$$

Utilisons l'inégalité de Jensen. Pour toute fonction convexe

$$f\left(\sum \alpha_i u_i\right) \leq \sum \alpha_i f(u_i)$$

Application

$$\exp \frac{1}{s} \int_0^s g(u) du \leq \frac{1}{s} \int_0^s \exp g(u) du$$

Par conséquent

$$\exp -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} V(\vec{q} + \vec{\eta}(\tau)) d\tau = \exp -\frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \beta V(\vec{q} + \vec{\eta}(\tau)) d\tau \leq \frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \exp -\beta V(\vec{q} + \vec{\eta}(\tau)) d\tau$$

Insérons cette inégalité dans l'expression de $Z(\beta)$ et intervertissons les intégrations. Intégrant d'abord sur \vec{q} on voit apparaître

$$\int d\vec{q} \exp -\beta V(\vec{q} + \vec{\eta}(\tau)) = \int d\vec{q} \exp -\beta V(\vec{q})$$

d'où

$$Z(\beta) \leq \frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \int_{\vec{\eta}(0)=\vec{\eta}(\beta\hbar)} \mathcal{D}\vec{\eta}(\tau) \exp -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \frac{m}{2} \dot{\vec{\eta}}^2 d\tau \int d\vec{q} \exp -\beta V(\vec{q})$$

La première intégrale fonctionnelle s'obtient en partant du propagateur d'une particule libre. On obtient

$$Z(\beta) \leq \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{\frac{d}{2}} \int d\vec{q} \exp -\beta V(\vec{q})$$

On reconnaît dans le membre de droite la fonction de partition classique

$$Z_c(\beta) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int d^d p d^d q e^{-\beta\left(\frac{p^2}{2m} + V(\vec{q})\right)}$$

D'où l'inégalité

$$\boxed{Z(\beta) \leq Z_c(\beta)}$$

Voir K. Symanzik J.M.P. 6 (1965) 1155 et C. Thompson J.M.P. 6 (1965) 11812
Equation fonctionnelle satisfaite par la résolvante

Application à la construction des états liés
 calculons pour $E \in \mathbb{C} - [0, \infty[$

$$\begin{aligned} (E - H_o) [G(E) - G_o] &= (E - H_o) G(E) - 1 \\ &= (E - H_o - V + V) G(E) - 1 \\ &= (E - H) G(E) + V G(E) - 1 \\ &= V G(E) \end{aligned}$$

D'où l'équation fonctionnelle

$$\boxed{G(E) = G_o + G_o V G(E)}$$

Par itération il vient

$$G(E) = G_o + G_o V G_o + G_o V G_o V G_o + \dots$$

Application : montrer que à une dimension tout potentiel attractif donne un état lié.

Il vient pour le calcul de G_o

$$\langle x | G_o(E) | x' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{\psi_k(x')^* \psi_k(x)}{E - E_k}$$

$$\text{on a } \psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Pour $E = - |E| < 0$ il vient

$$\begin{aligned} \langle x | G_o(E) | x' \rangle &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ik(x-x')}}{|E| + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} dk \\ &= -\frac{m}{\pi \hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ik(x-x')}}{k^2 + \frac{2m|E|}{\hbar^2}} dk \end{aligned}$$


Cauchy donne

$$\langle x' | G_o(E) | x \rangle = -\frac{m}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|E|}} \exp -\sqrt{+\frac{2m|E|}{\hbar^2}} |x - x'|$$

Donc pour $E < 0$ la résolvante admet le développement

$$\langle x' | G(E) | x \rangle = -\frac{m}{\hbar^2 k_0} \exp -k_0 |x-x'| + \left(-\frac{m}{\hbar^2 k_0}\right)^2 \int \exp -k_0 |x'-x''| V(x'') \exp -k_0 |x''-x|$$

Nous allons considérer un puit très peu attractif



$$V(x)$$

par conséquent on s'attend à ce que l'état lié s'il existe soit proche de $E = 0$ donc $k_0 \sim 0$. Ne gardant que les termes les plus singuliers il vient

$$\begin{aligned} \langle x' | G(E) | x \rangle &= -\frac{m}{\hbar^2 k_0} + \left(-\frac{m}{\hbar^2 k_0}\right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} V(x'') dx'' + \dots \\ &= -\frac{m}{\hbar^2 k_0} \frac{1}{1 + \frac{m}{\hbar^2 k_0} \int_{-\infty}^{+\infty} V(x'') dx''} \end{aligned}$$

qui présente un pôle pour

$$k_0 = -\frac{m}{\hbar^2} \int V(x'') dx''$$

D'où l'énergie de l'état lié

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} k_0^2 = -\frac{m}{2\hbar^2} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} V(x) dx \right)^2$$

- En dimension 2, le même argument permet de montrer que tout potentiel attractif donne un état lié d'énergie exponentiellement petite

$$E_0 = -\frac{2\pi}{e^2 \gamma} \frac{\hbar^2}{m \Omega_0} \exp -\frac{2\pi \hbar^2}{m V_0 \Omega_0} \text{ pour } V_0 \rightarrow 0$$

dans le cas d'un potentiel circulaire de profondeur $-|V_0|$.
 $\gamma = 0,577$ est la constante d'Euler.

- En dimension 3, la profondeur du puit doit excéder une certaine valeur critique pour qu'il puisse apparaître un état lié.