

TD n°2 : Oscillateur harmonique

1 Quelques petits rappels de mécanique analytique

On considère un problème unidimensionnel dont la dynamique est décrite par le lagrangien : $L(q, \dot{q}) = \frac{m}{2}\dot{q}^2 - V(q)$. L'action $S[q(t)] = \int_{t_1}^{t_2} dt L(q(t), \dot{q}(t))$ est une fonctionnelle de la trajectoire $q(t)$, $t \in [t_1, t_2]$. Si on considère une transformation infinitésimale

$$\begin{cases} t' = t + \delta t \\ q'(t') = q(t) + \delta q(t) \end{cases} \quad (1)$$

on montre que la variation de l'action $\delta S = S[q'(t')] - S[q(t)]$ est :

$$\delta S = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q - H \delta t \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right] (\delta q - \dot{q} \delta t) \quad (2)$$

où $H = \dot{q} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - L$.

1/ En déduire que l'équation d'Euler-Lagrange s'écrit

$$\frac{\delta S}{\delta q(t)} = 0 \quad \text{pour } t \in]t_1, t_2[\quad (3)$$

2/ Soit $q_c(t)$ la solution de l'équation d'Euler-Lagrange satisfaisant les conditions aux limites $q_c(t_1) = q_1$ et $q_c(t_2) = q_2$. On introduit la notation $S_{\text{cl}}(q_2, t_2 | q_1, t_1) = S[q_c(t)]$ (il s'agit d'une fonction des paramètres t_1, q_1 et t_2, q_2). Montrer que

$$\frac{\partial S_{\text{cl}}}{\partial q_2} = \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right|_{q_2} \quad (4)$$

$$\frac{\partial S_{\text{cl}}}{\partial t_2} = -H \quad (5)$$

3/ **Problème libre.**– Calculer S_{cl} pour $L = \frac{m}{2}\dot{q}^2$. Vérifier les eqs. (4,5).

4/ **Oscillateur harmonique.**– On considère le lagrangien de l'oscillateur harmonique, écrit en temps euclidien¹ $L = \frac{m}{2}(\dot{q}^2 + \omega^2 q^2)$.

a/ Construire la solution $q_c(t)$.

b/ Montrer que

$$S_{\text{cl}}(q_2, t | q_1, 0) = \frac{m\omega}{2 \operatorname{sh}(\omega t)} [\operatorname{ch}(\omega t) (q_1^2 + q_2^2) - 2 q_1 q_2] \quad (6)$$

c/ Vérifier (4,5).

¹Le passage du temps réel au temps euclidien correspond à : $t \rightarrow -it$. On a alors $L = \int dt (\frac{m}{2}\dot{x}^2 + V(x))$ et la mesure e^{iS} est remplacée par e^{-S} . Plus simplement, rendre le temps complexe consiste à renverser le potentiel.

2 Propagateur de l'oscillateur harmonique

On considère un oscillateur harmonique quantique unidimensionnel $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$. Le propagateur en temps euclidien est défini comme :

$$K(q_1, t|q_0, 0) \stackrel{\text{def}}{=} \langle q_1 | e^{-tH} | q_0 \rangle \quad (7)$$

$K(q_1, t|q_0, 0)$ pourrait être construit à partir du spectre de H , qui est bien connu, cependant nous allons le calculer en utilisant la représentation fonctionnelle :

$$K(q_1, t|q_0, 0) = \int_{q(0)=q_0}^{q(t)=q_1} \mathcal{D}q(\tau) e^{-S_0[q(\tau)]} \quad \text{où} \quad S_0[q(\tau)] = \frac{m}{2} \int_0^t d\tau [\dot{q}(\tau)^2 + \omega^2 q(\tau)^2]. \quad (8)$$

L'intégrale de chemin porte sur toutes les fonctions continues satisfaisant $q(0) = q_0$ et $q(t) = q_1$.

1/ On procède au changement de variable $q(\tau) = q_c(\tau) + \eta(\tau)$ (translation) où $\eta(\tau)$ est la nouvelle variable d'intégration et $q_c(\tau)$ est une fonction que nous choisissons de façon à satisfaire la propriété : $S_0[q_c + \eta] = S_0[q_c] + S_0[\eta] \forall \eta(\tau)$. Quelle équation doit satisfaire $q_c(\tau)$? Quelles conditions aux limites choisir pour $\eta(\tau)$?

2/ Construire $q_c(\tau)$ et calculer $S_0[q_c]$ (exercice 1).

3/ Montrer que le changement de variable dans l'intégrale fonctionnelle permet de l'écrire sous la forme $K(q_1, t|q_0, 0) = A_\omega(t) e^{-S_0[q_c]}$.

4/ Calcul du préfacteur $A_\omega(t)$. – On propose deux méthodes.

a/ Utiliser que

$$\int \mathcal{D}q(\tau) e^{-\frac{1}{2} \int_0^t d\tau d\tau' q(\tau) \mathcal{O}(\tau, \tau') q(\tau')} \sim \frac{1}{\sqrt{\det(\mathcal{O}(\tau, \tau'))}} \quad (9)$$

Identifier l'opérateur $\mathcal{O}(\tau, \tau')$ apparaissant dans $A_\omega(t)$. Spécifier sur quelles fonctions il agit et déduire son spectre.

Indication : Pour régulariser le calcul, considérer plutôt le rapport $\frac{A_\omega(t)}{A_0(t)}$.

On rappelle que $A_0(t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i}}$ et on donne $\text{sh } x = x \prod_{n=1}^{\infty} (1 + (\frac{x}{n\pi})^2)$.

b/ Autre méthode : Rappeler la relation entre le propagateur $K(q, t|q', 0)$ et la fonction de partition $\mathcal{Z}_t = \sum_n e^{-tE_n}$, où $\{E_n\}$ désigne le spectre de valeurs propres de H . Déduire $A_\omega(t)$.

5/ Vérifier que le préfacteur $A_\omega(t)$ coïncide avec $[-\frac{1}{2\pi} \frac{\partial^2 S_0[q_c]}{\partial q_1 \partial q_2}]^{1/2}$ (c'est le résultat semiclassique, exact ici car l'action est quadratique).

3 Fonction de corrélation de l'oscillateur harmonique

Nous calculons la fonction de corrélation $C(\tau_1, \tau_2) \stackrel{\text{def}}{=} \langle q(\tau_1)q(\tau_2) \rangle$ d'un oscillateur harmonique quantique. La moyenne est définie comme une moyenne sur les chemins périodiques :

$$\langle \dots \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{N} \int_{q(0)=q(t)} \mathcal{D}q(\tau) \dots e^{-S_0[q]} \quad (10)$$

où \mathcal{N} est une constante de normalisation. $S_0[q]$ est l'action classique de la trajectoire. Pour reprendre la notation de l'exercice précédent : $\int_{q(0)=q(t)} \mathcal{D}q(\tau) \dots \stackrel{\text{def}}{=} \int dq \int_{q(0)=q}^{q(t)=q} \mathcal{D}q(\tau) \dots$

1/ Dans quel contexte cette définition est-il pertinente ?

2/ Calculer la constante de normalisation \mathcal{N} .

3/ Montrer que, pour $\tau_{12} = \tau_1 - \tau_2 > 0$, la fonction de corrélation s'exprime à l'aide du propagateur comme :

$$C(\tau_1, \tau_2) = \mathcal{N} \int dq_1 dq_2 q_1 q_2 \langle q_1 | e^{-\tau_{12}H} | q_2 \rangle \langle q_2 | e^{-(t-\tau_{12})H} | q_1 \rangle \quad (11)$$

$$= \mathcal{N} \text{Tr} \left\{ e^{-t\hat{H}} \hat{q}(\tau_1) \hat{q}(\tau_2) \right\} \quad \text{où} \quad \hat{q}(\tau) \stackrel{\text{def}}{=} e^{\tau\hat{H}} \hat{q} e^{-\tau\hat{H}} \quad (12)$$

où la trace porte sur l'espace de Hilbert de l'oscillateur harmonique quantique. Calculer explicitement $C(\tau_1, \tau_2)$.

Indication : On rappelle que $K(q_1, t|q_0, 0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \text{sh}(\omega t)}} \exp -\frac{m\omega}{2 \text{sh}(\omega t)} [\text{ch}(\omega t) (q_1^2 + q_0^2) - 2 q_1 q_0]$.

4/ Tracer l'allure de $C(\tau_1, \tau_2)$ en fonction de $\tau_{12} = \tau_1 - \tau_2$; deux remarques utiles pour cela : (i) par définition de la moyenne (10), la fonction de corrélation est symétrique ; (ii) Puisque la moyenne porte sur des chemins périodiques, le résultat obtenu doit être périodisé.

5/ Analyser $\langle [q(\tau + \epsilon) - q(\tau)]^2 \rangle$ dans la limite $\epsilon \rightarrow 0$. Que peut-on en conclure sur la nature des courbes qui apportent les contributions dominantes à l'intégrale $\int \mathcal{D}q \dots e^{-S_0[q]}$?

Remarque : Les propriétés de la question 4 découlent de la forme de l'action $S_0[q]$; il ne s'agit pas d'une propriété de l'intégrale $\int \mathcal{D}q \dots$. Pour s'en convaincre : quelles seront les propriétés des chemins dominant dans $\int \mathcal{D}q e^{-\int d\tau \dot{q}^2}$?

6/ Dédurre l'expression de la fonctionnelle génératrice (sans calcul)

$$\mathcal{Z}_t[b] \stackrel{\text{def}}{=} \int_{q(t/2)=q(-t/2)} \mathcal{D}q(\tau) e^{-S_0[q] + \int d\tau b(\tau)q(\tau)} . \quad (13)$$

4 Fonctionnelle génératrice (facultatif)

Nous calculons plus directement la fonctionnelle génératrice introduite dans l'exercice précédent (question 5), par la méthode de l'exercice 2. On doit donc calculer une intégrale du type de celle de l'exercice 2, lorsqu'un terme décrivant le couplage d'une "source extérieure" $b(\tau)$ avec $q(\tau)$ est introduit :

$$\mathcal{Z}_t[b] = \int_{q(t/2)=q(-t/2)} \mathcal{D}q(\tau) e^{-\tilde{S}[q,b]} \quad \text{où} \quad \tilde{S}[q,b] = S_0[q] - \int_{-t/2}^{t/2} d\tau b(\tau)q(\tau) \quad (14)$$

où l'intégrale fonctionnelle porte sur toutes les fonctions périodiques sur $[-t/2, t/2]$ (i.e. $\int_{q(t/2)=q(-t/2)} \mathcal{D}q(\tau) \cdots \equiv \int dq \int_{q(-t/2)=q}^{q(t/2)=q} \mathcal{D}q(\tau) \cdots$)

1/ Déduire la valeur de $\mathcal{Z}_t[0]$ de l'exercice 2.

2/Fonctionnelle génératrice.— On suit la même logique que dans l'exercice 2.

a/ On cherche le changement de variable $q = q_c + \eta$, où la fonction q_c est choisie de telle sorte que :

$$\tilde{S}[q_c + \eta, b] = \tilde{S}[q_c, b] + S_0[\eta] \quad \forall \eta(\tau). \quad (15)$$

Montrer que q_c peut s'écrire comme $q_c(\tau) = \int d\tau' C(\tau - \tau')b(\tau')$. Quelles conditions doivent satisfaire $q_c(\tau)$ et $\eta(\tau)$ (et donc également $C(\tau)$) ?

b/ Nous calculons la fonction $C(\tau)$ solution de $(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2)C(\tau) = \frac{1}{m}\delta(\tau)$ sur $[-t/2, t/2]$ satisfaisant les conditions aux limites $C(t/2) = C(-t/2)$ et $\dot{C}(t/2) = \dot{C}(-t/2)$.

méthode 1 : analyse de Fourier.— Quelle est la base de fonctions propres de l'opérateur $-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2$ satisfaisant les conditions aux limites périodiques ? Déduire $C(\tau)$.

Indication : on donne $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos n\pi x}{a^2 + (n\pi)^2} = \frac{\text{ch } a(1-|x|)}{2a \text{ sh } a} - \frac{1}{2a^2}$ pour $|x| < 1$.

méthode 2 : Résoudre $(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2)\tilde{C}(\tau) = \frac{1}{m}\delta(\tau)$ sur \mathbb{R} . Pour cela on résout l'équation homogène $(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2)\tilde{C}(\tau) = 0$ sur \mathbb{R}^{-*} puis sur \mathbb{R}^{+*} . Montrer que l'effet du Dirac est d'imposer les conditions de raccordement $\tilde{C}(0^-) = \tilde{C}(0^+)$ et $-\dot{\tilde{C}}(0^+) + \dot{\tilde{C}}(0^-) = \frac{1}{m}$.

Justifier que $C(\tau) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \tilde{C}(\tau + nt)$. Déduire $C(\tau)$.

méthode 3 : Résoudre l'équation homogène $(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2)C(\tau) = 0$ sur $[-t/2, 0[$ puis sur $]0, +t/2]$. Imposer les conditions de raccordement et déduire que

$$C(\tau) = \frac{\text{ch } \omega(t/2 - |\tau|)}{2m\omega \text{ sh}(\omega t/2)} \quad \text{pour } \tau \in [-t/2, t/2] \quad (16)$$

Tracer la fonction.

c/ Déduire que

$$\mathcal{Z}_t[b] = \mathcal{Z}_t[0] \exp \frac{1}{2} \int_{-t/2}^{t/2} d\tau d\tau' b(\tau)C(\tau - \tau')b(\tau'). \quad (17)$$

3/ Fonction de corrélation.— On reprend l'exercice 3 à l'envers : déduire de l'expression de la fonctionnelle génératrice la fonction de corrélation $\langle q(\tau_1)q(\tau_2) \rangle$ où la moyenne a été définie dans l'exercice précédent $\langle \cdots \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\mathcal{Z}_t[0]} \int_{q(t/2)=q(-t/2)} \mathcal{D}q(\tau) \cdots e^{-S_0[q]}$.

5 Un modèle d'interaction avec un environnement

Dans de nombreuses situations physiques on est amené à considérer que le système d'intérêt est couplé à un autre système, appelé en général "environnement", possédant un grand nombre de degrés de liberté. Un exemple d'une telle situation est l'étude d'un atome couplé au champ électromagnétique. Bien souvent la dynamique de l'environnement n'est pas l'objet du problème; dans ce cas, l'intégrale de chemin permet, par intégration, de faire "disparaître" les degrés de liberté de l'environnement, ce qui conduit à une action effective pour le système seul.

Nous nous intéressons dans cet exercice à un système décrit par le lagrangien $L_{\text{sys}} = \frac{m}{2}\dot{q}^2 + V(q)$. Le système est couplé à un ensemble d'oscillateurs harmoniques dont le lagrangien est : $L_{\text{env}} = \sum_i (\frac{1}{2}\dot{\chi}_i^2 + \frac{1}{2}\omega_i^2\chi_i^2)$. Le lagrangien décrivant le couplage est choisi de la forme

$$L_{\text{int}} = -q \sum_i g_i \chi_i \quad (18)$$

où les g_i sont des constantes de couplage. La fonction de partition du système global est donc :

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}q(\tau) \prod_i \mathcal{D}\chi_i(\tau) e^{-S[q; \{\chi_i\}]} \quad \text{où} \quad S[q, \{\chi_i\}] = \int_0^t d\tau (L_{\text{sys}} + L_{\text{env}} + L_{\text{int}}) \quad (19)$$

où l'intégrale fonctionnelle porte sur les fonctions périodiques sur $[0, t]$.

1/ Quelle modification de la fonction de partition permettrait d'étudier les propriétés de q ?

2/ Montrer que l'intégration sur les variables de l'environnement conduit à la forme :

$$\mathcal{Z} = \int_{q(0)=q(t)} \mathcal{D}q(\tau) e^{-S_{\text{eff}}[q]} \quad (20)$$

où

$$S_{\text{eff}}[q] = \int_0^t d\tau L_{\text{sys}} - \frac{1}{2} \int_0^t d\tau d\tau' q(\tau) \alpha(\tau - \tau') q(\tau') \quad (21)$$

Donner l'expression de la fonction $\alpha(\tau)$ en terme de la fonction de Green calculée dans l'exercice 3.

3/ Dédurre l'équation du mouvement $\frac{\delta S_{\text{eff}}}{\delta q} = 0$. En admettant que la fonction $\alpha(\tau)$ est étroite devant les autres temps gouvernant la dynamique, comment interpréter le terme en dépendant ?

Une variante assez courante du modèle consiste à choisir le couplage en procédant à la substitution $\chi_i \rightarrow \chi_i - \frac{g_i}{\omega_i^2}q$ dans L_{env} . L'intérêt de cette forme (qui contient un terme q^2 supplémentaire par rapport au modèle discuté dans l'exercice) est que l'action $L_{\text{env}} + L_{\text{int}} = \sum_i [\frac{1}{2}\dot{\chi}_i^2 + \frac{1}{2}\omega_i^2(\chi_i - \frac{g_i}{\omega_i^2}q)^2]$ peut être rendue invariante par translation pour le choix de couplage $g_i = \omega_i^2$. L'action effective prend la forme $S_{\text{eff}}[q] = \int_0^t d\tau L_{\text{sys}} + \frac{1}{4} \int_0^t d\tau d\tau' \alpha(\tau - \tau') (q(\tau) - q(\tau'))^2$. Bien que l'étude d'un système couplé à un bain d'oscillateurs est plus ancien, ce modèle est appelé modèle de Caldeira-Leggett. A. O. Caldeira & A. J. Leggett, *Quantum tunnelling in a dissipative system*, Ann. Phys. (N.Y.) **149** (1983) 374. On peut en trouver une analyse dans cet article et dans de nombreux ouvrages².

²On trouvera une présentation très claire dans G.-L. Ingold, *Path integrals and their application to dissipative quantum systems*, in *Coherent Evolution in Noisy Environments*, A. Buchleitner & K. Hornberger (eds.), Lecture Notes in Physics, Vol. 611, Springer, 2002 (also available as preprint cond-mat/0208026).