M2 – Parcours de Physique Quantique

Intégrale de chemin – Examen

Mercredi 18 décembre 2007

Problème 1

A. Équation de Schrödinger sur $\mathbb{R}^+$

On considère le Hamiltonien $H = -\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}\mu^2$ agissant sur les fonctions $\psi(x)$ sur $\mathbb{R}^+$ avec condition de Dirichlet à l'origine $\psi(0) = 0$.

1/ Construire les états propres de H. On rappelle que la condition de normalisation pour un spectre continu est $\int_0^\infty \mathrm{d}x\, \psi_k(x)\psi_{k'}(x) = \delta(k - k')$.

2/ Exprimer le propagateur $K(x,t|y,0) = \langle\, x\,|\mathrm{e}^{-tH}|\, y\,\rangle$ en fonction du spectre.

3/ Montrer que

$$K(x,t|y,0) = \frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\mu^2 t}}{\sqrt{2\pi t}} \left(\mathrm{e}^{-\frac{(x-y)^2}{2t}} - \mathrm{e}^{-\frac{(x+y)^2}{2t}}\right) \tag{1}$$

4/ Donner une interprétation semiclassique de ce résultat.

B. Diffusion avec dérive sur $\mathbb{R}^+$

On s'intéresse à la diffusion d'une particule décrite par l'équation de Langevin

$$\dot{x}(t) = \mu + \eta(t) \tag{2}$$

où $\eta(t)$ est un bruit blanc normalisé : $\langle \eta(t)\, \eta(t') \rangle = \delta(t - t')$.

1/ Écrire l'équation de Fokker-Planck satisfaite par la probabilité conditionnelle $P(x,t|y,0)$ ainsi que l'équation de Schrödinger associée (*cf.* annexe).

2/ Si la particule touche l'origine elle est absorbée. Quelle condition satisfait $P(x,t|y,0)$?

3/ Montrer que $P(x,t|y,0) = \mathrm{e}^{\mu(x-y)}\, K(x,t|y,0)$.

4/ On note $S_y(t)$ la probabilité pour que la particule n'ait pas été absorbée au temps t. Exprimer $S_y(t)$ en fonction de la probabilité conditionnelle.

5/ Montrer que

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, P(x,t|y,0) = -\frac{1}{2}\, \frac{\partial P}{\partial x}\bigg|_{x=0} \tag{3}$$

Interpréter physiquement le membre de droite.

6/ Montrer que

$$S_y(t) \underset{t\to\infty}{\simeq} 1 - \mathrm{e}^{-2\mu y} \tag{4}$$

et commenter ce résultat.

C. Une particule diffusive et une particule balistique

On étudie le mouvement relatif de deux particules se déplaçant sur l'axe Oz. La particule 1 est issue de $x > 0$ à l'instant $\tau = 0$ puis décrit un mouvement brownien $\dot{z}_1(\tau) = \eta(\tau)$. La particule 2 décrit un mouvement balistique $z_2(\tau) = -\mu\tau$ avec $\mu > 0$.

Soit

$$\mathcal{P}(x,t) = \int_{-\mu t}^{\infty} \mathrm{d}y \int_{z_1(0)=x}^{z_1(t)=y} \mathcal{D}z_1(\tau)\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\int_0^t \mathrm{d}\tau\, \dot{z}_1^2(\tau)} \prod_\tau \theta(z_1(\tau)+\mu\tau) \tag{5}$$

où $\theta(x) = 1$ pour $x > 0$ et $\theta(x) = 0$ pour $x < 0$ est la fonction de Heaviside.

1/ Quelle est l'interprétation de $\prod_\tau \theta(z_1(\tau)+\mu\tau)$?

2/ Que représente $\mathcal{P}(x,t)$?

3/ À l'aide du changement de variable fonctionnel $z(\tau) = z_1(\tau) + \mu\tau$, trouver la relation entre $\mathcal{P}(x,t)$ et $S_x(t)$ et déduire l'expression de $\mathcal{P}(x,t)$.

Annexe :

• L'équation de Langevin $\dot{x} = \phi(x) + \sqrt{2D}\,\eta(t)$, où $\eta(t)$ est un bruit blanc normalisé $\langle \eta(t)\,\eta(t')\rangle = \delta(t-t')$, est associée à l'équation de Fokker-Planck $\partial_t P = D\partial_x^2 P - \partial_x(\phi P)$.

• La transformation $P = \sqrt{P_0}\,\psi$ où $P_0 = \exp \frac{1}{D}\int^x \phi$ conduit à $-\partial_t\psi = H\psi$ avec $H = -D\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\phi^2}{4D} + \frac{\phi'(x)}{2}$.

• Fonction de MacDonald (Bessel de seconde espèce modifiée) :

$$\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}t}{t^{3/2}}\, \mathrm{e}^{-t-\frac{z^2}{4t}} = \sqrt{\frac{8}{z}}\, K_{1/2}(z) = \frac{2\sqrt{\pi}}{z}\, \mathrm{e}^{-z} \tag{6}$$

Problème 2 : Accrochage d'un polymère

On considère un polymère constitué de $\mathcal{N}$ monomères de longueur b se déployant dans l'espace tridimensionnel. Dans la limite continue ($\mathcal{N} \to \infty$ et $b \to 0$ avec $\mathcal{N}b^2$ fixé), une configuration du polymère est repérée par un chemin $\vec{r}(\tau)$ avec $\tau \in [0,t]$ où $t = \mathcal{N}b^2/3$. Le poids statistique de la configuration $\vec{r}(\tau)$ est :

$$\mathcal{D}\vec{r}(\tau)\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\int_0^t \mathrm{d}\tau\, (\frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}\tau})^2 - \beta\int_0^t \mathrm{d}\tau\, U(\vec{r}(\tau))} \tag{7}$$

où $\int_0^t \mathrm{d}\tau\, U(\vec{r})$ est l'énergie potentielle du polymère. $\beta = 1/T$ est l'inverse de la température ($k_B = 1$).

Dans le problème nous étudions la question de l'accrochage du polymère par un puits de potentiel :

$$U(\vec{r}) = \begin{cases} -V_0 & \text{pour } ||\vec{r}|| < a \\ 0 & \text{pour } ||\vec{r}|| > a \end{cases} \tag{8}$$

1/ Soit $\mathcal{Z}_t(\vec{r}|\vec{r}_0)$ la fonction de partition du polymère ayant ses extrémités fixées. Exprimer $\mathcal{Z}_t(\vec{r}|\vec{r}_0)$ sous la forme d'une intégrale de chemin. Montrer qu'elle peut s'écrire $\mathcal{Z}_t(\vec{r}|\vec{r}_0) = \langle\, \vec{r}\,|\mathrm{e}^{-tH_\beta}|\,\vec{r}_0\,\rangle$ où l'on précisera l'expression de l'opérateur H_β.

2/ Température infinie.– Calculer $\mathcal{Z}_t(\vec{r}|\vec{r}_0)$ pour $\beta = 0$. Déduire l'expression de la fonction de partition $Z_t = \int \mathrm{d}\vec{r}\mathrm{d}\vec{r}_0\, \mathcal{Z}_t(\vec{r}|\vec{r}_0)$ (on suppose le volume fini). On introduit le rayon de giration R_t du polymère défini par :

$$R_t{}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \langle(\vec{r}-\vec{r}_0)^2\rangle \tag{9}$$

où $\langle\cdots\rangle$ est la moyenne associée à la mesure (7) pour $\vec{r}(t) = \vec{r}$ et $\vec{r}(0) = \vec{r}_0$. Calculer R_t dans la limite $\beta \to 0$ (on exprimera R_t en fonction du nombre de monomères).

3/ Condition d'accrochage.– Le spectre de l'opérateur H_β possède une partie discrète dans $\mathbb{R}^-$ et une partie continue $(\mathbb{R}^+)$: $\mathrm{Spec}(H_\beta) = \{E_n\}_{n=1,\cdots,B} \bigcup \mathbb{R}^+$. On note $\psi_n(\vec{r})$ les fonctions propres de H_β associées à la partie discrète du spectre. À quelle condition sur le nombre d'états liés B le rayon de giration tend-t-il vers une limite finie pour $t \propto \mathcal{N} \to \infty$? Il s'agit de la *condition d'accrochage*. Montrer que lorsque le polymère est accroché on a

$$R_\infty{}^2 = 2\,\frac{\int \mathrm{d}\vec{r}\,\vec{r}^{\,2}\,\psi_1(\vec{r})}{\int \mathrm{d}\vec{r}\;\psi_1(\vec{r})} \tag{10}$$

où $\psi_1(\vec{r})$ est l'état fondamental de H_β.

4/ Spectre de $\boldsymbol{H_\beta}$.– Écrire l'équation différentielle satisfaite par les $\psi_n(\vec{r})$. Montrer que l'équation de quantification pour les états invariants par rotation $\psi(\vec{r}) = \frac{1}{r}\chi(r)$ d'énergie $E = -\frac{1}{2}k^2$ est :

$$K\ \mathrm{cotg}(Ka) = -k \quad \text{avec} \quad K^2 + k^2 = K_0^2 = 2\beta V_0 \tag{11}$$

5/ Température nulle.– Que vaut la plus petite solution K_1 de (11) dans la limite $\beta \to \infty$? Déduire la fonction $\chi_1(r)$ associée à $\psi_1(\vec{r})$ et calculer R_∞ (*cf.* annexe). Commenter le résultat.

6/ Température critique.– Montrer que l'accrochage du polymère ne se produit qu'en dessous d'une température critique T_c, dont on donnera l'expression.

7/ Rayon de giration pour $\boldsymbol{T \sim T_c}$.– Si on pose $X_0 = \frac{\pi}{2\sqrt{1-\epsilon}}$ on peut montrer que la solution de $\sqrt{X_0^2 - x^2}\,\mathrm{cotg}\,\sqrt{X_0^2 - x^2} = -x$ est $x_1 \simeq 1.23\epsilon$ dans la limite $\epsilon \to 0$. Tracer l'allure de la fonction $\chi_1(r)$. En déduire que le rayon de giration diverge en loi de puissance au voisinage de la transition :

$$R_\infty \underset{T\to T_c^-}{\sim} \frac{a}{(1-T/T_c)^\eta} \tag{12}$$

Préciser la valeur de l'exposant critique η.

Annexe :

- Laplacien en coordonnées sphériques :

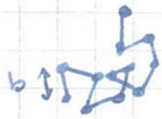
$$\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\text{sphere}} \quad \text{où} \quad \Delta_{\text{sphere}} = \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{13}$$

- $\int_0^\pi \mathrm{d}x\, x\, \sin x = \pi$ et $\int_0^\pi \mathrm{d}x\, x^3\, \sin x = \pi(\pi^2-6)$.

Ch. Texier

Accrochage d'un polymère

modèle de la chaîne de monomères indépendants



$\mathcal{N}$ monomères de longueur b (dans l'espace 3d)

à la limite continue $\begin{cases}\mathcal{N}\to\infty\\ b\to 0\end{cases}$ avec $t=\frac{\mathcal{N}b^2}{3}$ fixé, le poids d'une configuration $\vec{r}(\tau)$, $\tau\in[0,t]$, est donné par la mesure de Wiener:

$$\underbrace{\mathcal{D}\vec{r}(\tau)\; e^{-\frac{1}{2}\int_0^t d\tau\left(\frac{d\vec{r}}{d\tau}\right)^2}}_{\text{terme entropique}}\quad \underbrace{e^{-\beta\int_0^t d\tau\, U(r(\tau))}}_{\text{poids de Boltzmann } \beta=1/T}$$

nous étudions l'accrochage par le puits de potentiel:

$$U(\vec{r}) = -V_0 \quad \text{pour } \|\vec{r}\|<a$$
$$= 0 \quad \text{pour } \|\vec{r}\|>a$$

1/ $Z_t(\vec{r}|\vec{r}_0)$ = fct de partition lorsque les extrémités du polymère sont fixées

$$Z_t(\vec{r}|\vec{r}_0) = \int_{\vec{r}(0)=\vec{r}_0}^{\vec{r}(t)=\vec{r}} \mathcal{D}\vec{r}\; e^{-\frac{1}{2}\int_0^t d\tau\left(\frac{d\vec{r}}{d\tau}\right)^2-\beta\int_0^t d\tau\, U(\vec{r}(\tau))}$$

$$= \langle\vec{r}|\, e^{-tH_\beta}\,|\vec{r}_0\rangle \quad \text{où} \quad \boxed{H_\beta=-\frac{1}{2}\Delta+\beta U(\vec{r})}$$

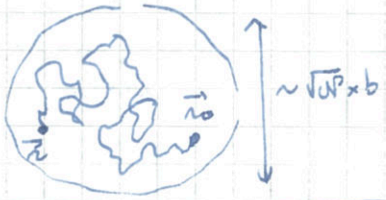
2/ **la limite $T\to\infty$** (plus précisément $\beta V_0 \ll 1$)

pour $\beta=0$ $\quad Z_t(\vec{r}|\vec{r}_0)$ est le propagateur libre $= \dfrac{1}{(2\pi t)^{3/2}}\, e^{-\frac{(\vec{r}-\vec{r}_0)^2}{2t}}$

$$Z_t = \text{fct de partition } (\forall\ \vec{r} \text{ et } \vec{r}_0) = \int d\vec{r}\, \underbrace{\int d\vec{r}_0\, Z_t(\vec{r}|\vec{r}_0)}_{1} = \text{Vol.}$$

rayon de giration: $\quad R_t^2 \overset{\text{def}}{=} \langle(\vec{r}-\vec{r}_0)^2\rangle$

$$= \frac{\int d\vec{r}\, d\vec{r}_0\, (\vec{r}-\vec{r}_0)^2\, Z_t(\vec{r}|\vec{r}_0)}{\int d\vec{r}\, d\vec{r}_0\, Z_t(\vec{r}|\vec{r}_0)} = \int d\vec{R}\, \vec{R}^2\, Z_t(\vec{R}|0) = 3t$$



$$\boxed{R_t = \sqrt{3t} = \sqrt{\mathcal{N}}\, b}$$

3/ **Condition d'accrochage**

$U(\vec{r})$ est un potentiel <0 autour de l'origine et qui s'annule à l'∞.

$$\Rightarrow \quad \text{Spec}(H_\beta) = \underbrace{\{E_n\}_{n=1,\dots,B}}_{\substack{\text{états liés}\\ E_n<0}} \cup \underbrace{\mathbb{R}^+}_{\substack{\text{états de}\\ \text{diffusion}}}$$

$$Z_t(\vec{r}|\vec{r}_0) = \langle\vec{r}|\, e^{-tH_\beta}\,|\vec{r}_0\rangle = \sum_n \psi_n(\vec{r})\,\psi_n^*(\vec{r}_0)\, e^{-tE_n}$$

(pour $E_n>0$ la somme est transformée en intégrale) si il existe $\underbrace{\text{au moins un état lié}}_{\boxed{\text{condition d'accrochage}}}$ $\Rightarrow$ $Z_t(\vec r|\vec r_0) \xrightarrow[t\to\infty]{} \psi_1(\vec r)\,\psi_1^*(\vec r_0)\,e^{-tE_1}$

où E_1 est l'état fondamental

dans ce cas
$$R_t^2 \xrightarrow[t\to\infty]{} \frac{\int d\vec r\, d\vec r_0\, (\vec r-\vec r_0)^2\, \psi_1(\vec r)\,\psi_1^*(\vec r_0)\,e^{-tE_1}}{\int d\vec r\, d\vec r_0\, \psi_1(\vec r)\,\psi_1^*(\vec r_0)\,e^{-tE_1}}$$
$$= \underbrace{\frac{\int d\vec r\, d\vec r_0\, (\vec r^{\,2} - 2\vec r\cdot\vec r_0 + \vec r_0^{\,2})\, \psi_1(\vec r)\,\psi_1^*(\vec r_0)}{\int d\vec r\, d\vec r_0\, \psi_1(\vec r)\,\psi_1^*(\vec r_0)}}_{\text{limite indépendante de } t} \equiv R_\infty^2$$

dans le pb qui nous intéresse $U(\vec r)$ est invariant par rotation

$\Rightarrow$ $\psi_1(\vec r) = $ fct de $r \times Y_0^0$ est réelle

$\int d\vec r\, \vec r\, \psi_1(\vec r) = 0$ $\rightarrow$ tue le terme $\vec r\cdot\vec r_0$

et finalement
$$\boxed{R_\infty^2 = 2\,\frac{\int d\vec r\, \vec r^{\,2}\, \psi_1(\vec r)}{\int d\vec r\, \psi_1(\vec r)}}$$

4/ étudions le spectre de H_β
$$\left[-\tfrac{1}{2}\Delta + \beta U(r)\right]\psi_n = E\,\psi_n$$

on peut chercher les ψ_n sous la forme $\frac{\chi(r)}{r}\underbrace{Y_l^m(\theta,\varphi)}_{\text{harmonique sphérique}}$

$$\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{r^2}\underbrace{\Delta_{\text{sphere}}}_{-\vec l^{\,2}\text{ : le "moment orbital"}}$$
$$\Delta_{\text{sphere}} Y_l^m = -l(l+1)\,Y_l^m$$

$$\boxed{\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + \beta U(r)\right]\chi(r) = E\,\chi(r)}$$ pb 1d avec $\boxed{\chi(0)=0}$

$\chi(r) \underset{r\to 0}{\propto} r$ (sinon $\psi \sim \frac{1}{r}$ pose pb car $\Delta\frac{1}{r} \propto \delta$)

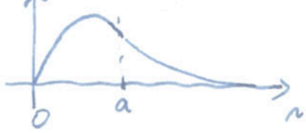
le fondamental est invariant par rotation $\rightarrow$ $\boxed{l=0}$

$$\left[+\frac{d^2}{dr^2} - 2\beta U(r)\right]\chi = k^2\,\chi(r) \quad \text{où} \quad E = -\frac{k^2}{2}$$

$\underline{r > a}$: $\chi'' = k^2\chi$ $\Rightarrow$ $\chi(r) = A\,e^{-kr}$

$\underline{r < a}$: $\chi'' = -K^2\chi$ où $K^2 + k^2 = \boxed{K_0^2 = 2\beta V_0}$

$\Rightarrow$ $\chi(r) = \sin Kr$

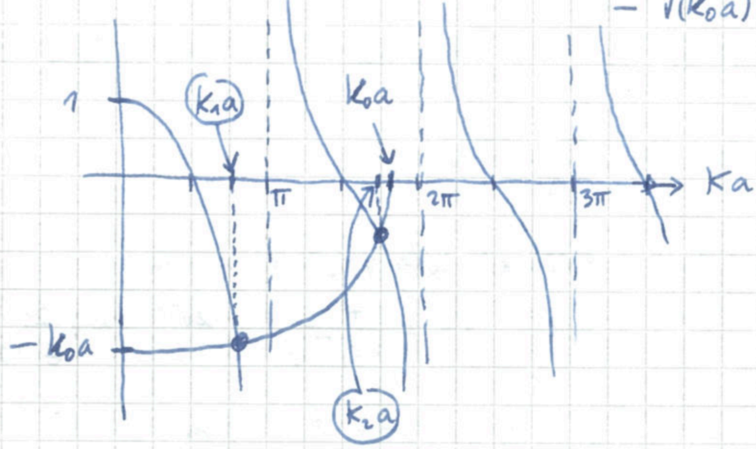


l'équation de quantification est donnée par le raccordement en a :

$$(\ln \chi)' \Big|_{a^-}^{a^+} = 0$$

(*) $\boxed{-k = K \,\mathrm{cotg}\, Ka}$ qu'on peut résoudre graphiquement.

$$-\sqrt{(k_0a)^2-(Ka)^2} = Ka \,\mathrm{cotg}\, Ka$$



$$\boxed{k_0 = \sqrt{2\beta V_0}}$$

5/ $\boxed{\text{limite } T\to 0}$ i.e. $\beta\to\infty$ et $k_0\to\infty$

les solutions de (*) sont donc $K_n \simeq n\frac{\pi}{a}$ avec $n\in\mathbb{N}^*$

(le puits ∞)

$\chi_n(r) \simeq \sin\frac{n\pi r}{a}$ pour $r<a$

$$\boxed{E_1 \simeq -\frac{1}{2}\frac{\pi^2}{a^2}} \quad \text{et} \quad \boxed{\chi_1(r) \simeq \sin\left(\frac{\pi r}{a}\right)}$$

$$R_\infty^2 \simeq 2\,\frac{\int d\vec{r}\, \vec{r}^{\,2}\, \psi_1(\vec{r})}{\int d\vec{r}\, \psi_1(\vec{r})} = 2\,\frac{\int_0^\infty dr\, r^4\, \frac{\chi_1(r)}{r}}{\int_0^\infty dr\, r^2\, \frac{\chi_1(r)}{r}} = 2\,\frac{\int_0^\infty dr\, r^3 \chi_1(r)}{\int_0^\infty dr\, r\, \chi_1(r)}$$

$$R_\infty^2 \simeq 2\,\frac{\int_0^a dr\, r^3 \sin\frac{\pi r}{a}}{\int_0^a dr\, r \sin\frac{\pi r}{a}} = 2\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \frac{\int_0^\pi dx\, x^3 \sin x}{\int_0^\pi dx\, x \sin x} = 2\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \frac{\pi(\pi^2-6)}{\pi} = a^2\left(2-\frac{12}{\pi^2}\right)$$

$$\boxed{R_\infty \underset{T\to 0}{\simeq} a \underbrace{\sqrt{2-\frac{12}{\pi^2}}}_{\sim 0.9}}$$

il était évident que $R_\infty \sim a$: le polymère est piégé au fond du puits très profond.
Pas très passionnant...

6/ température critique

on remarque qu'il n'existe pas toujours d'état lié.
Pour qu'il existe au moins un état lié il faut que $k_0 a > \frac{\pi}{2}$
Comme $k_0 \propto \sqrt{\beta}$ cela nous donne une condition sur la température

$$2\beta V_0 a^2 > \frac{\pi^2}{4} \Rightarrow \beta > \frac{\pi^2}{8a^2V_0} = \beta_c \quad \text{i.e.} \quad \boxed{T_c = \frac{8a^2V_0}{\pi^2}}$$

- pour $T<T_c$ → il existe un état lié ⇒ accrochage
- pour $T>T_c$ → pas d'état lié ⇒ pas d'accrochage.

7/ voisinage de la transition d'accrochage.

écrivons $K_0 = \sqrt{2\beta V_0} = \underbrace{\sqrt{2\beta_c V_0}}_{\frac{\pi}{2a}} \sqrt{\frac{T_c}{T}}$

introduisons $\theta = \frac{T_c - T}{T_c}$, l'écart à la température critique.

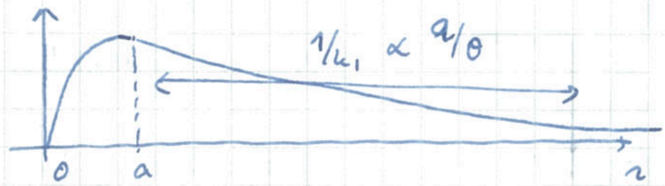
$$K_0 = \frac{\pi}{2a}\frac{1}{\sqrt{1-\theta}}$$

la solution de $\sqrt{X_0^2 - x^2}\,\mathrm{cotg}\sqrt{X_0^2 - x^2} = -x$

avec $X_0 = \frac{\pi}{2\sqrt{1-\epsilon}}$ est $x_1 \underset{\epsilon \to 0^+}{\simeq} 1{,}234\ldots\ \epsilon$

donc $\boxed{k_1 \simeq 1{,}23 \times \frac{\theta}{a} \quad \text{pour } \theta \to 0^+}$

$\left\{ \begin{array}{l} k_1 \to 0 \\ k_1 \to \frac{\pi}{2a} \end{array} \right.$ donc l'allure de $\chi_1(r)$ est:



$$R_\infty^2 = \frac{2\int_0^\infty dr\, r^3 \chi_1(r)}{\int_0^\infty dr\, r\, \chi_1(r)} \simeq \frac{2\int_0^\infty dr\, r^3 e^{-k_1 r}}{\underbrace{\int_0^\infty dr\, r\, e^{-k_1 r}}_{\text{on néglige la contribution de l'intervalle } [0,a]}} = 2\,\frac{\overbrace{\Gamma(4)}^{3! = 6}}{\Gamma(2)}\,\frac{1}{k_1^2} = \frac{12}{k_1^2}$$

$$R_\infty \simeq \frac{2\sqrt{3}}{k_1} \simeq \frac{2\sqrt{3}}{1{,}23} \times \frac{a}{\theta}$$

conclusion : $\boxed{R_\infty \underset{T \to T_c^-}{\simeq} \frac{2\sqrt{3}}{1{,}23} \times \frac{a}{1 - T/T_c}}$

$R_\infty \propto \frac{a}{(1 - T/T_c)^\nu}$ avec l'exposant critique $\underline{\nu = 1}$