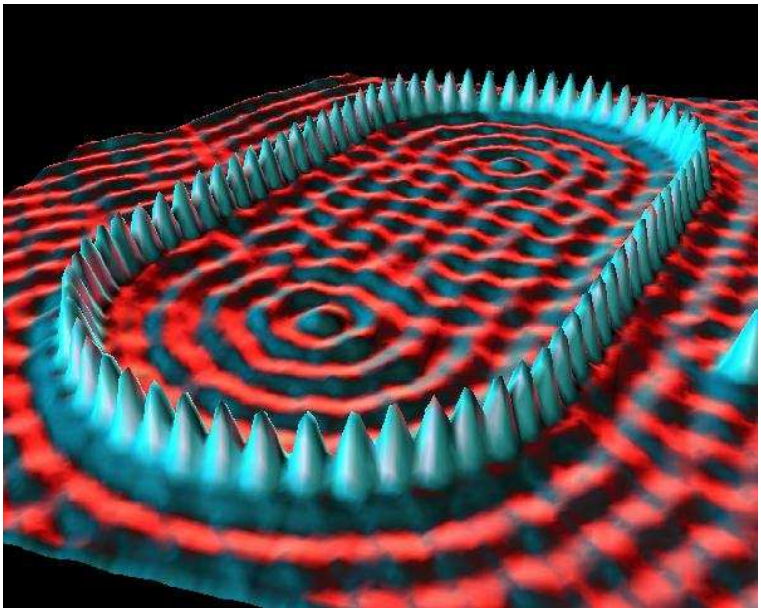
Université de Franche-Comté - UFR Sciences et Techniques - Département de Physique
Master de Physique 1ère année

# Mécanique Quantique
# Travaux Dirigés



# TD 1: Systèmes quantiques de dimension finie

**Exercice 1.1- Atome à 2 niveaux dans l'approximation RWA à un photon**
On considère un atome initialement dans son état fondamental, qui est mis en interaction avec un champ laser d'amplitude $\mathcal{E}$, de phase $\varphi$ et de fréquence $\omega$ ($\vec{E}(t) = \vec{\mathcal{E}} \cos(\omega t + \varphi)$). On suppose que la fréquence du champ est quasi-accordée sur la transition entre l'état fondamental et le premier état excité (i.e. $\hbar\omega \simeq E_2 - E_1$, $E_i$ étant l'énergie du $i$-ème état de l'atome libre). On suppose de plus que l'intensité du champ rend les processus multiphotoniques très peu probables. On peut alors considérer que seuls l'état fondamental $|1\rangle$ et le premier état excité $|2\rangle$ interviennent dans le problème (les autres états sont supposés inaccessibles). Dans ces conditions, l'espace des états de l'atome est $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ (avec $(|1\rangle, |2\rangle)$ pour base canonique). L'opérateur Hamiltonien de l'atome avec le champ laser est dans l'approximation d'onde tournante (*approximation RWA* : on se place dans le "référentiel qui tourne avec les oscillations du champ") la matrice :

$$H = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Omega e^{\imath\varphi} \\ \Omega e^{-\imath\varphi} & 2\Delta \end{pmatrix}$$

dans la base $(|1\rangle, |2\rangle)$ et où $\Delta = E_2 - E_1 - \hbar\omega$ ($\Delta$ est appelé **detuning**, c'est l'écart entre l'énergie de transition du fondamental vers l'excité et l'énergie d'un photon) ; $\Omega = |\langle 1|\vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{E}}|2\rangle|$ ($\vec{\mu}$ étant le moment dipolaire électrique de l'atome). $H$ est l'observable énergie relative de l'atome habillé par le champ.

1. Calculer les expressions des énergies relatives $E_\pm$ que peut présenter l'atome en présence du champ laser. Tracer les fonctions $E_\pm$ en fonction du detuning $\Delta$ (avec $\Omega \neq 0$ fixé).
2. Calculer les expressions des états d'énergie associés, que l'on notera $|\pm(\Omega, \Delta)\rangle$ (et on les choisira normés).
3. Étudier les cas particuliers $\Delta = \pm r$ avec $r = \sqrt{\Omega^2 + \Delta^2}$.
4. On suppose qu'à $t = 0$ l'atome était dans son état fondamental libre $|1>= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. On allume brutalement le champ si bien qu'il reste dans cet état. On mesure alors l'énergie du système. Quelles sont les résultats possibles de la mesure ? Quelles sont les probabilités pour que ces résultats surviennent ?
5. On suppose qu'à un instant ultérieur $t_*$ l'état du système est $\psi_* = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+(\Omega, \Delta)\rangle - |-(\Omega, \Delta)\rangle)$. On coupe alors brutalement le champ et on mesure l'énergie relative du système habillé. On trouve pour résultat $0$ (i.e. énergie de l'atome nu égale à $E_1$). Quelle était la probabilité pour que cela survienne ?

.

**Exercice 1.2- Qubit**
La miniaturisation de la microélectronique (fondée sur les semi-conducteurs) atteindra bientôt une échelle où les effets quantiques vont empêcher un fonctionnement normal des composants. Schématiquement, un bit d'information classique a une valeur de 0 si le courant ne passe pas, et de 1 s'il passe. Mais lorsque ce courant ne sera plus constitué que de quelques électrons, l'effet tunnel viendra rendre la distinction entre 0 et 1 impossible. C'est pourquoi les chercheurs veulent remplacer la microélectronique par une nouvelle technologie fondée sur les lois quantiques (information quantique, spintronique,...). Concrètement, le bit classique sera remplacé par un système quantique à deux niveaux (comme un spin), que l'on appelle **qubit**. L'espace de Hilbert d'un qubit est donc $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, avec pour base canonique $(|\uparrow\rangle \equiv |0\rangle; |\downarrow\rangle \equiv |1\rangle)$. On introduit les 3 observables suivantes du qubit (appelées matrices de Pauli) :

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\imath \\ \imath & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

1. Vérifier que $\sigma_1$ et $\sigma_2$ ne commutent pas. En déduire les relations d'incertitudes de Heisenberg sur les mesures successives de $\sigma_1$ et de $\sigma_2$.
2. Même question pour $\sigma_1$ et $\sigma_3$.
3. Soit $Q$ l'opérateur modélisant la valeur du qubit (mesure retournant $0$ si l'état du qubit est $|0\rangle$ et $1$ si l'état du qubit est $|1\rangle$). Écrire $Q$ en fonction des matrices de Pauli et de la matrice identité.
4. On suppose que le qubit est dans l'état $\psi \propto |0\rangle - 2\imath|1\rangle$. Après avoir normalisé $\psi$, trouver la probabilité pour que la mesure du qubit donne pour résultat $1$, puis la moyenne des résultats possibles de la mesure du qubit $\langle Q\rangle_\psi$, la dispersion de ces mesures $\Delta Q_\psi$, ainsi que $\langle \sigma_1\rangle_\psi$ et $\Delta\sigma_{1\psi}$.
5. Soit $\alpha \in [0, 2\pi]$. On introduit l'opérateur de rotation d'angle $\alpha$ autour de l'axe 1 du qubit
$$U_\alpha = e^{\imath\alpha\sigma_1} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(\imath\alpha)^n}{n!}\sigma_1^n$$
Montrer que $U_\alpha$ est unitaire.
6. Démontrer que $\forall p \in \mathbb{N}$, $\sigma_1^{2p} = 1$ et que $\sigma_1^{2p+1} = \sigma_1$ ($1$ étant un abus de notation pour désigner la matrice identité).
7. En déduire que
$$U_\alpha = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \imath\sin\alpha \\ \imath\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}$$
8. Le qubit étant initialement dans l'état $|0\rangle$, quel est l'état de celui-ci après qu'on l'ait tourné d'un angle $\alpha$ autour de l'axe 1 ? Quelle est alors la probabilité de retrouver la valeur $0$ si on mesure le qubit ?
9. Quelle doit être la valeur de $\alpha$ pour que $U_\alpha$ réalise l'opération logique `NOT`, i.e. $U_\alpha|0\rangle \propto |1\rangle$ et $U_\alpha|1\rangle \propto |0\rangle$ ?
10. On considère l'opérateur unitaire $V_{\alpha,\beta}$ consistant à tourner le qubit d'un angle $\alpha \ll 1$ autour de l'axe 1, puis de le tourner d'un angle $\beta \ll 1$ autour de l'axe 2. Chercher une approximation (du second ordre) de l'observable $\Sigma_{\alpha,\beta}$ telle que $V_{\alpha,\beta} = e^{\imath\Sigma_{\alpha,\beta}}$.
11. Si l'on commence par la rotation autour de l'axe 2 avant celle autour de l'axe 1, a t-on le même opérateur $V_{\alpha,\beta}$ ?

.

**Exercice 1.3- Condition de cocycle sur le transport dans un réseau fermé à 3 sites**
On considère une quasiparticule vivant dans un réseau ne présentant que 3 sites. On note $\phi_i$ l'état de la quasiparticule lorsqu'elle se trouve dans le site $i$. L'espace des états de la quasiparticule est donc $\mathcal{H} = \mathbb{C}^3$ avec $(\phi_i)_{i=1,2,3}$ pour base canonique. Les trois sites sont disposés en triangle ($1 \to 2 \to 3 \to 1$).

1. Trouver les expressions des opérateurs de transformation $U_n$ ($n = -2, -1, 0, 1, 2$) qui déplacent la quasiparticule de $n$ sites dans le sens direct.
2. Que peut-on dire de $U_n^\dagger$ ?
3. Le transport de la quasiparticule de site en site dans le sens direct est donné par l'opérateur $T$ tel que
$$T\phi_1 = e^{\imath\varphi_{12}}\phi_2 \qquad T\phi_2 = e^{\imath\varphi_{23}}\phi_3 \qquad T\phi_3 = e^{\imath\varphi_{31}}\phi_1$$
avec $\varphi_{ij} = \varphi_{ji} \in [0, 2\pi]$ la phase acquise lors du transport. À quelle condition sur les phases acquises lors des transports, les transports $i \to j \to k$ et $i \to k$ ($\forall i, j, k \in \{1, 2, 3\}$) sont-ils équivalents ? Cette condition est appelée *condition de cocycle*.

.

Université de Franche-Comté - UFR Sciences et Techniques - Département de Physique
Master de Physique 1ère année - Mécanique Quantique

# TD 2: Systèmes quantiques de dimension infinie

### Exercice 2.1- Oscillateur harmonique

On considère un oscillateur harmonique quantique de masse $m$ et de fréquence $\omega$ ; espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R}, dx)$ et Hamiltonien :

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

avec $\hat{p} = -\imath\hbar\frac{d}{dx}$. On rappelle que l'on définit les opérateurs de création et d'annihilation de quantum d'énergie par

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{\imath}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}$$

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{\imath}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}$$

et que

$$H = \hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}\right)$$

On rappelle enfin, que les états propres de $H$ sont $(|n\rangle)_{n\in\mathbb{N}}$ (qui consituent une base orthonormée de $L^2(\mathbb{R}, dx)$) avec

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad , \quad a|0\rangle = 0 \qquad ; \quad a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

$$\langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n(\sqrt{\hbar^{-1}m\omega}x)$$

avec $H_n$ les polynômes de Hermite.

1. Montrer que $[a, a^+] = 1$, $[\hat{N}, a] = -a$ et $[\hat{N}, a^+] = a^+$ (avec $\hat{N} = a^+a$).
2. Montrer que $a$ et $a^+$ ne sont pas des opérateurs bornés et donner leurs domaines maximaux.
3. Montrer que l'opérateur
$$\Phi_\alpha = e^{\alpha a^+ - \alpha^* a} \qquad \alpha \in \mathbb{C}$$
est borné.
4. Calculer l'expression de $|\alpha\rangle = \Phi_\alpha|0\rangle$ sur la base $(|n\rangle)_{n\in\mathbb{N}}$.
5. Montrer que $|\alpha\rangle$ est vecteur propre de $a$. $\mathrm{Sp}(a) = ?$

.

### Exercice 2.2- Particule sur un cercle

On considère une particule vivant sur un cercle $S^1$ ; d'espace de Hilbert $L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$.

1. Montrer que l'opérateur impulsion $\hat{p} = -\imath\frac{d}{d\theta}$ est autoadjoint.
2. On considère les opérateurs
$$a = e^{-\imath\theta}\sqrt{-\imath\frac{d}{d\theta}} \qquad a^+ = \sqrt{-\imath\frac{d}{d\theta}}e^{\imath\theta}$$
Donner les domaines maximaux de $a$ et $a^+$.
3. Montrer que $[a, a^+] = 1$.

4. $a^+a = \hat{p}$ ?

.

**Exercice 2.3- Particule sur un axe, un demi-axe ou un segment**
On considère l'observable impulsion $\hat{p} = -\imath\hbar\frac{d}{dx}$ d'une particule de masse $m$ sur une droite dans les 3 cas suivants :

① particule libre : $\mathcal{H}_1 = L^2(\mathbb{R}, dx)$ et $\mathrm{Dom}_1\hat{p} = \{\psi \in \mathcal{H}_1 \cap \mathcal{C}^1 | \psi' \in \mathcal{H}_1\}$ ;

② particule derrière un mur infini de potentiel : $\mathcal{H}_2 = L^2([0, +\infty[, dx)$ et $\mathrm{Dom}_2\hat{p} = \{\psi \in \mathcal{H}_2 \cap \mathcal{C}^1 | \psi' \in \mathcal{H}_2, \psi(0) = 0\}$ ;

③ particule dans une boîte : $\mathcal{H}_3 = L^2([0, \ell], dx)$ et $\mathrm{Dom}_3\hat{p} = \{\psi \in \mathcal{H}_3 \cap \mathcal{C}^1 | \psi' \in \mathcal{H}_3, \psi(0) = \psi(\ell) = 0\}$ ;

④ particule dans un cristal 1D : $\mathcal{H}_3 = L^2([0, \ell], dx)$ et $\mathrm{Dom}_4\hat{p} = \{\psi \in \mathcal{H}_3 \cap \mathcal{C}^1 | \psi' \in \mathcal{H}_3, \psi(0) = \psi(\ell) \neq 0\}$ .

1. $\hat{p}$ est-il hermitien, autoadjoint ? On discutera les quatre cas.
2. Trouver le spectre $\mathrm{Sp}(\hat{p})$ dans les quatre cas, ainsi que les états propres associés.

.

**Exercice 2.4- Puits carré de potentiel**
On considère une particule de masse $m$ sur une demi-droite, d'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^+, dx)$ et d'Hamiltonien

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

avec

$$V(x) = \begin{cases} -E_0 & \text{si } x \leq \ell \\ 0 & \text{si } x > \ell \end{cases}$$

$H$ est défini sur le domaine :

$$\mathrm{Dom}(H) = \{\psi \in \mathcal{H} \cap \mathcal{C}^2 | \psi'' \in \mathcal{H}, \psi(0) = 0\}$$

1. Montrer que $H$ est autoadjoint.
2. Calculer $\mathrm{Sp}_{pp}(H)$ et $\mathrm{Sp}_{cont}(H)$ dans le cas où $\hbar^{-1}\sqrt{2mE_0}\ell \leq \frac{\pi}{2}$.
3. Discuter du cas où $\hbar^{-1}\sqrt{2mE_0}\ell > \frac{\pi}{2}$.

.

# TD 3: Dynamique quantique

**Exercice 3.1- Interaction d'atomes à 2 niveaux**

On considère deux atomes discernables l'un de l'autre à 2 niveaux d'énergie. L'espace de Hilbert du système est $\mathcal{H} = \mathbb{C}^4$ avec pour base canonique $(|ij\rangle)_{i,j=1,2}$ ($|ij\rangle$ est l'état pour lequel l'atome 1 est dans l'état $i$ et l'atome 2 dans l'état $j$). Lorsque les atomes sont loin l'un de l'autre (pas d'interaction entre eux) l'Hamiltonien du système est

$$H_0 = \begin{pmatrix} e_1 & 0 \\ 0 & e_2 \end{pmatrix} \otimes 1 + 1 \otimes \begin{pmatrix} e_1 & 0 \\ 0 & e_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2e_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e_1 + e_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e_1 + e_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2e_2 \end{pmatrix}$$

Lorsque les atomes sont très près l'un de l'autre, l'Hamiltonien du système avec leur interaction mutelle est

$$H = H_0 + V_{int}$$

avec l'opérateur d'interaction

$$V_{int} = \mu|12\rangle\langle 21| + \mu|21\rangle\langle 12| = \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

1. Montrer qu'une matrice de la forme $M = \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix}$ a pour valeurs propres $(a-b, a+b)$ et pour base propre $\left( \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right)$.
2. Déduire de la question précédente l'expression de $e^{-\imath\hbar^{-1}Mt}$.
3. En déduire $U(t,0)$ l'opérateur d'évolution du système de 2 atomes dans la base $(|ij\rangle)_{i,j}$.
4. En déduire $\psi(t)$ si $\psi(0) = |12\rangle$.
5. En déduire la probabilité de survie de l'état initial au cours du temps.

.

**Exercice 3.2- Changements de référentiels et de jauge**

On considère une particule de masse $m$ dans l'espace d'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, dxdydz) = L^2(\mathbb{R}^+, dr) \otimes L^2(S^2, \frac{d\theta d\varphi}{4\pi})$. L'Hamiltonien de la particule est

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2mr^2}L^2 + V(r,t)$$

où $V(r,t)$ est le potentiel auquel est soumis la particule, et $\vec{L}$ est l'opérateur moment cinétique.

1. On considère $t \mapsto W(t) \in \mathcal{U}(\mathcal{H})$ un opérateur unitaire dérivable par rapport $t$. Soit $\psi(t) \in \mathcal{H}$ une fonction d'onde de la particule solution de l'équation de Schrödinger. Soit $\tilde{\psi}(t) = W(t)\psi(t)$ la fonction transformée. Montrer que $\tilde{\psi}(t)$ est solution de

$$\imath\hbar\frac{d\tilde{\psi}}{dt} = \tilde{H}(t)\tilde{\psi}(t)$$

avec $\tilde{H}(t)$ l'Hamiltonien transformé qui est à déterminer.

2. a. On pose $W(t) = e^{-\imath\hbar^{-1}\vec{\Theta}(t)\cdot\vec{L}}$ avec $t \mapsto \Theta_i(t) \in [0, 2\pi]$ fonctions dérivables ($i = x, y$ ou $z$). La transformation $W$ est alors l'équivalent quantique d'un changement d'un référentiel galiléen vers un référentiel en rotation de vecteur rotation instantané $\vec{\Omega}(t) = \frac{d\vec{\Theta}(t)}{dt}$. Discuter de l'expression de $\tilde{H}(t)$ dans ce cas.

   *On admettra que l'on peut prouver par récurrence que pour tout opérateur $A(t)$ on a :*

$$\frac{dA^n}{dt} = n\dot{A}A^{n-1} + \sum_{p=2}^{n} \frac{n!}{(n-p)!p!} A^{(p-1)} A^{n-p}$$

   *où $n \in \mathbb{N}$ et*

$$A^{(1)} = [A, \dot{A}] \qquad A^{(p)} = [A, A^{(p-1)}] = [A, ..., [A, [A, \dot{A}]]...] = \mathrm{ad}_A^p[\dot{A}]$$

   *($\mathrm{ad}_B(A) = [B, A]$)*

   b. On choisit l'axe $z$ tel que $\vec{\Theta}(t) = \vartheta(t)\vec{e}_z$. On pose

$$\psi(r, \theta, \varphi; t) = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{lm}(r, t) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

   où $Y_{lm}$ sont les harmoniques sphériques, et $c_{lm}(t) \in L^2(\mathbb{R}^+, dr)$. Donner les expressions de $\tilde{H}(t)$ et $\tilde{\psi}(t)$.

3. On pose $W(t) = e^{-\imath\hbar^{-1}\chi(r,t)}$ avec $(r, t) \mapsto \chi(r, t)$ une fonction dérivable. Donner l'expression de $\tilde{H}(t)$ dans ce cas. Interpréter.

.

**Exercice 3.3- Atome à 2 niveaux soumis à une impulsion laser**

On considère l'Hamiltonien d'un atome à deux niveaux en interaction avec un champ laser, décrit par l'approximation RWA à un photon :

$$H(t) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Omega(t) \\ \Omega(t) & 2\Delta(t) \end{pmatrix}$$

où $\Delta(t) = E_2 - E_1 - \hbar\omega(t)$ est le detuning ($\omega(t)$ est la fréquence modulée du champ) et $\Omega(t) = |\langle 1|\vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{E}}(t)|2\rangle|$ est le couplage induit par le champ ($\mathcal{E}(t)$ est l'amplitude modulée du champ laser et $\vec{\mu}$ est le moment dipolaire électrique de l'atome).

Le champ laser est une impulsion gaussienne avec glissage de fréquence :

$$\Omega(t) = \Omega_0 e^{-\frac{(t-T/2)^2}{2\tau^2}}$$

$$\Delta(t) = \Delta_0 + \delta_1(t - T/2)$$

où $\Omega_0$, $\tau$, $\Delta_0$ et $\delta_1$ sont des constantes positives. $T$ est la durée de l'interaction et on suppose que $T \geq 10\tau$. À $t = 0$ l'atome est dans l'état $|\psi(t = 0)\rangle = |2\rangle$.

1. On note $|\pm, t\rangle$ les états propres instantanés de $H(t)$. Montrer que $|\psi(t = 0)\rangle \simeq |+, 0\rangle$.
2. On voudrait qu'au cours de l'évolution, la fonction d'onde reste quasiment entièrement projetée sur $|+, t\rangle$, i.e. $|\langle +, t|\psi(t)\rangle|^2 \simeq 1$ ($\forall t \in [0, T]$). À quelle(s) condition(s) sur les paramètres de l'impulsion laser peut-on s'assurer de cela ?
3. Quelle est alors l'état du système à la fin de l'interaction $|\psi(T)\rangle$ ?

.

**Exercice 3.4- Évolution d'un système à Lagrangien séparable**
On considère un système quantique d'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}, dx)$, d'Hamiltonien $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ et de Lagrangien classique $L(\dot{x}, x)$. On décide d'écrire toute trajectoire sous la forme

$$x(t) = x_{cl}(t) + \delta x(t)$$

où $x_{cl}(t)$ est la trajectoire suivie par le système classique équivalent au système quantique (trajectoire solution des équations de Lagrange), et où $\delta x$ est la déviation à la trajectoire classique ($\delta x(0) = \delta x(t_f) = 0$, $t_f$ étant l'instant final considéré).

1. Montrer que

$$L(\dot{x}, x) = L(\dot{x}_{cl}, x_{cl}) + L_{02}(\dot{x}_{cl}, x_{cl})\delta x^2 + 2L_{11}(\dot{x}_{cl}, x_{cl})\delta x \delta\dot{x} + L_{20}(\dot{x}_{cl}, x_{cl})\delta\dot{x}^2 + \mathcal{O}(\delta x^3)$$

   où $L_{20}$, $L_{11}$ et $L_{02}$ sont des fonctionnelles à déterminer. Lorsque le reste d'ordre 3 est rigoureusement nul $\forall \delta x$, on dit que le Lagrangien est séparable. C'est dans ce cas que l'on se place dans la suite de l'exercice.

2. En déduire que le propagateur du système est de la forme

$$G(x, t_f; x_0, 0) = A(t_f)e^{\imath\hbar^{-1}S(x_{cl})}$$

   avec

$$A(t_f) = \oint_{(0,0)}^{(0,t_f)} e^{\imath\hbar^{-1}\int_0^{t_f} F dt}\mathcal{D}[\delta x(t)]$$

   avec $F$ une fonctionnelle à déterminer.

3. Montrer que l'oscillateur harmonique est un système à Lagrangien séparable. Que dire de $A(t_f)$ et de $G(x, t_f; x_0, 0)$ dans ce cas ?

4. On suppose qu'à $t = 0$ le système est dans l'état $\psi_0 \in \mathcal{H}$. Donner l'expression de $\psi(x, t)$ en fonction de $A(t)$, $S(x_{cl})$ et $\psi_0(x)$.

.

# TD 4: Seconde quantification

**Exercice 4.1- Les opérateurs de champ**

Soit un système de bosons indiscernables d'espace de Fock $\mathcal{F}_+(\mathcal{H})$ avec $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, dxdydz)$. L'Hamiltonien d'un boson libre et seul est $H$ (supposé autoadjoint et borné) avec pour états propres normés $(\phi_i)_{i=1,\dots,+\infty}$ (on supposera $\mathrm{Sp}_{cont}(H) = \varnothing$). On choisit cette base propre comme base canonique de la seconde quantification. Un point de $\mathbb{R}^3$ sera désigné par un vecteur position $\vec{r}$. On appelle opérateur "champ de bosons", l'opérateur sur $\mathcal{F}_+(\mathcal{H})$ défini par

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{+\infty} \phi_i(\vec{r}) a_i$$

où $\phi_i(\vec{r}) \in \mathbb{C}$ est considéré comme un nombre.

1. Vérifier les relations de commutation suivantes :

$$[\Psi(\vec{r}), \Psi^\dagger(\vec{r}')] = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$
$$[\Psi(\vec{r}), \Psi(\vec{r}')] = 0$$

2. Soit $|\vec{r}\rangle$ l'état définit par

$$|\vec{r}\rangle = \Psi^\dagger(\vec{r})|0\rangle$$

Comment peut-on interpréter l'état $|\vec{r}\rangle$ ? En déduire l'interprétation de $\Psi^\dagger(\vec{r})$ et de $\Psi(\vec{r})$.

3. Quelle est l'interprétation de l'état

$$|\vec{r}_1, ..., \vec{r}_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \Psi^\dagger(\vec{r}_1) ... \Psi^\dagger(\vec{r}_n)|0\rangle$$

4. Soit l'opérateur $P(\vec{r}) = \Psi^\dagger(\vec{r})\Psi(\vec{r})$. Calculer $\langle n_1 n_2 ... n_p | P(\vec{r}) | n_1 n_2 ... n_p\rangle$ ($n_i \in \mathbb{N}$, $p \in \mathbb{N}$). Quelle est l'interprétation de l'opérateur $P$ ?

.

**Exercice 4.2- Matrices densités d'équilibre thermodynamique**

On considère un gaz parfait de bosons ou de fermions d'espace de Fock $\mathcal{F}_\pm(\mathcal{H})$. Chaque particule a pour Hamiltonien

$$H = \sum_{i=1}^{\infty} \hbar\omega_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$$

où $(\phi_i)_{i=1,\dots,+\infty}$ est la base propre de $\mathcal{H}$ qui sera considérée comme la base canonique orthonormée de la seconde quantification. On introduit l'opérateur densité :

$$\rho = \frac{e^{-\beta(d\Gamma(H) - \mu N)}}{\Xi}$$

où $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ($k_B$ constante de Boltzmann et $T$ température du gaz), $d\Gamma(H)$ est l'Hamiltonien de seconde quantification, $\mu$ est le potentiel chimique, $N$ est l'opérateur

$$N = \sum_{i=1}^{+\infty} a_i^+ a_i \quad ou \quad \sum_{i=1}^{+\infty} c_i^+ c_i$$

et $\Xi = \mathrm{tr} e^{-\beta(d\Gamma(H) - \mu N)}$.

Calculer l'expression de $\Xi$ et la moyenne $\mathrm{tr}(\rho a_i^+ a)$ (ou $\mathrm{tr}(\rho c_i^+ c_i)$) dans les deux cas (bosons et fermions).