

Mémoire

Auteur : Dengis, Simon

Promoteur(s) : Schlagheck, Peter

Faculté : Faculté des Sciences

Diplôme : Master en sciences physiques, à finalité approfondie

Année académique : 2021-2022

URI/URL : <http://hdl.handle.net/2268.2/14790>

Avertissement à l'attention des usagers :

Tous les documents placés en accès ouvert sur le site le site MatheO sont protégés par le droit d'auteur. Conformément aux principes énoncés par la "Budapest Open Access Initiative"(BOAI, 2002), l'utilisateur du site peut lire, télécharger, copier, transmettre, imprimer, chercher ou faire un lien vers le texte intégral de ces documents, les disséquer pour les indexer, s'en servir de données pour un logiciel, ou s'en servir à toute autre fin légale (ou prévue par la réglementation relative au droit d'auteur). Toute utilisation du document à des fins commerciales est strictement interdite.

Par ailleurs, l'utilisateur s'engage à respecter les droits moraux de l'auteur, principalement le droit à l'intégrité de l'oeuvre et le droit de paternité et ce dans toute utilisation que l'utilisateur entreprend. Ainsi, à titre d'exemple, lorsqu'il reproduira un document par extrait ou dans son intégralité, l'utilisateur citera de manière complète les sources telles que mentionnées ci-dessus. Toute utilisation non explicitement autorisée ci-avant (telle que par exemple, la modification du document ou son résumé) nécessite l'autorisation préalable et expresse des auteurs ou de leurs ayants droit.



FACULTÉ DES SCIENCES - DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

Théorie semiclassique des gaz d'atomes ultrafroids bosoniques

SIMON DENGIS

Promoteur : Prof. Peter Schlagheck

*Mémoire présenté dans le cadre de l'obtention du grade de **Master en sciences physiques***

Année académique 2021-2022

J'espère donc que vous accepterez la Nature telle qu'Elle est : absurde.

Richard P. Feynman

Table des matières

Remerciements	6
Introduction	8
I La mécanique quantique à plusieurs corps	10
1.1 Description d'un système de N particules indiscernables	10
1.1.1 L'espace à N corps	10
1.1.2 Le postulat de symétrie	11
1.1.3 L'espace de Fock	13
1.2 Mécanique quantique statistique	16
1.2.1 La condensation de Bose-Einstein	16
1.2.2 L'équation de Gross-Pitaevskii	21
1.2.3 Modèle de Bose-Hubbard	22
2 Les intégrales de chemin de Feynman	26
2.1 Le principe de moindre action	26
2.1.1 Formalisme hamiltonien	27
2.2 Le propagateur de Feynman	27
2.2.1 Définition d'un propagateur	27
2.2.2 Exemple de la particule libre	29
2.3 Application à l'hamiltonien de Bose-Hubbard	30
2.4 Fonctions de Green et propagateurs	33
3 La mécanique quantique dans l'espace des phases	36
3.1 Représentation dans l'espace des phases	36
3.1.1 Mécanique classique	36
3.1.2 Mécanique quantique	39
3.2 La fonction de Wigner	41
4 Le propagateur de Van Vleck-Gutzwiller	44
4.1 Approximation de la phase stationnaire	44
4.1.1 Second ordre	46
4.1.2 Troisième ordre	49
4.1.3 Quatrième ordre	52
4.2 Approximation diagonale	55
5 Conclusion	58
A Formule de Baker-Campbell-Hausdorff	60

B Théorème de Liouville	61
Bibliographie	62

Remerciements

Nous sommes le 10 juin 2022, il ne me reste que quelques jours pour clôturer ce mémoire. Ce moment, entre satisfaction et inquiétude, me paraît opportun pour prendre quelques minutes afin de remercier l'ensemble des personnes qui m'ont accompagné dans le voyage académique parcouru ces dernières années.

Premièrement, j'aimerais remercier mon promoteur le Professeur Peter Schlagheck pour sa disponibilité sans faille et sa gentillesse à tout épreuve. Merci pour vos conseils et votre rigueur scientifique qui m'ont permis de mener ce travail à terme tout en appréciant chaque instant de sa confection. Je remercie par la même occasion les Professeurs Matthieu Verstraete, John Martin et Geoffroy Lumay, d'avoir accepté de constituer mon comité de lecture. J'espère pouvoir réussir à vous partager tout le plaisir que j'ai eu à rédiger ce manuscrit.

Mes études n'auraient pas été aussi agréables sans la présence de tous ceux qui m'ont entouré au fil des années. Je remercie donc Emilien Schroeder d'être là depuis le début, Youri Noville pour les cafés partagés autour de discussions toujours fertiles, Thomas Gerard pour son écoute lors des moments difficiles et Dorian Nguyen pour sa bonne humeur constante. Et parce que sans lui ces dernières années auraient probablement été bien grises, je remercie tout particulièrement Mathéo Léonard pour tout ce qu'il est et tout ce qu'il a pu m'apporter.

Je remercie mes parents d'avoir toujours cru en moi sans conditions, et ce même lorsque mes études semblaient perdues d'avance. Je remercie ma mère Isabelle Polain pour cette discussion nocturne d'octobre 2013, sans laquelle ce mémoire n'existerait pas. Je remercie mon père Daniel Dengis pour son soutien indéfectible, sans lequel ce mémoire n'existerait pas.

Enfin, je remercie le lecteur de son intérêt et lui souhaite un agréable moment en ma compagnie littéraire.

Introduction

Il faut environ 6 heures et 30 minutes de trajet en voiture pour relier Liège à Genève. Si vous voulez faire une escale à Paris, rajoutez 2 heures et vous pourrez contempler Notre-Dame sous le ciel bleu français. Durant cet intervalle, un photon émis lors de l'absorption d'un proton par un atome de carbone 13 présent dans notre Soleil aurait eu environ 64 fois le temps de parcourir les 150 millions de kilomètres nous séparant. Il est indéniable que la lumière paraît bien plus rapide qu'une Ford Fiesta se frayant péniblement un chemin sur l'autoroute française. N'est-ce là qu'une question de vitesse relative ? Si elle accélère pendant assez longtemps, la Ford pourrait-elle rattraper ou même dépasser le grain de lumière ? À priori, cela semblerait compliqué : le photon, lui, ne semble point faire d'escale touristique. Sa trajectoire paraît optimale, réfléchie et calculée au centimètre près. En 1662, Pierre de Fermat publie son mémoire *Synthèses pour les réfractions* [1] où il détaille le principe le plus probable selon lui suivi par la lumière. Dans une lettre à M. De la Chambre au sujet de la dioptrique, il écrit le 1 janvier 1662 :

« La nature agit toujours par les moyens les plus aisés, c'est-à-dire ou par les lignes les plus courtes, lorsqu'elles n'emportent pas plus de temps, ou en tout cas par le temps le plus court, afin d'acourcir son travail et de venir plus tôt à bout de son opération. »

L'idée d'une optimisation de la trajectoire par la nature fut reprise par Maupertius en 1744 qui énonce alors le principe suivant [2] :

« Lorsqu'il arrive quelque changement dans la nature, la quantité d'action, nécessaire pour ce changement, est la plus petite qui soit possible. »

Il ne s'agit alors que de considérations métaphysiques voulant donner une explication rationnelle à un phénomène semblant nous dépasser. Il ne faudra attendre que quelques mois de plus pour que Leonhard Euler ne publie un formalisme encore utilisé aujourd'hui. Il définit l'action comme étant l'intégrale de l'impulsion p le long des coordonnées q [2]. Le *principe de moindre action* ne manquait alors que d'une généralisation pour tout système, qui fut effectuée par Joseph-Louis Lagrange en 1760 dans le cadre de la mécanique lagrangienne, puis complétée par William Rowan Hamilton en 1834 en appliquant ce principe variationnel au lagrangien [3]. Avec ces derniers travaux, le principe de moindre action pouvait alors être utilisé pour dériver la mécanique Newtonienne et donc la quasi-totalité de la physique du 19ème siècle.

Le début du 20ème siècle fut marqué par l'apparition d'un nouveau formalisme de l'infiniment petit : la mécanique quantique. Cette dernière fut développée afin d'apporter des solutions à diverses incohérences de la physique newtonienne. De l'effet photoélectrique au rayonnement du corps noir, le formalisme quantique a permis d'expliquer ces anomalies par de nouvelles interprétations de la nature. L'énergie est alors discrétisée tandis que la notion de déterminisme absolu disparaît progressivement au profit d'une approche probabiliste. Les lois de Newton sont remplacées par l'équation de Schrödinger comme pilier principal de la théorie. Formulée en 1925, cette dernière décrit l'évolution de la fonction d'onde d'une particule massive non relativiste dans un potentiel dépendant du temps. La mécanique quantique permettra de décrire qualitativement le monde atomique et subatomique, jusqu'à l'équation de Dirac décrivant un électron relativiste. Parallèlement à l'élaboration d'une théorie quantique d'une particule isolée, l'approche statistique d'un système composé

d'un grand nombre de corps connaît ses prémices au travers des premières théories quantiques statistiques. D'abord théorisés par Albert Einstein en 1925, les condensats de Bose-Einstein (BEC) sont des états de la matière ne pouvant être décrit que par un formalisme probabiliste et découlant de la statistique d'un ensemble de nombreux bosons.

La condensation de Bose-Einstein semblait au départ n'être qu'un détail mathématique résultat du fait que les bosons n'obéissent pas au principe d'exclusion de Pauli. Cependant, en 1938, les physiciens Kapitsa, Allen et Misener vont mettre en évidence un nouvel état de l'hélium lorsque ce dernier atteint la température de 2.17°K : l'état Superfluide [5]. Fritz London va alors directement relier ce nouvel état à une condensation d'une partie des atomes d'hélium. Cependant, les atomes interagissant fortement entre-eux, seule une petite proportion des atomes avaient condensé. Il faudra attendre 1995 pour qu'enfin la synthèse d'un BEC d'atomes alcalins ultrafroids interagissant peu soit réalisé et que commence réellement l'intérêt théorique et expérimental pour ce nouvel état quantique [6]. L'avantage des atomes alcalins est qu'ils permettent un piégeage par champ magnétique dans un potentiel quadratique[7]. Les condensats de bosons sont donc désormais une réalité expérimentale qui peut continuer à être explorée. En l'occurrence, plusieurs méthodes stochastiques peuvent être utilisées afin de décrire la dynamique d'un BEC [8] [9], en particulier la Truncated Wigner Approximation (TWA), qui permet de représenter l'évolution de l'espace des phases d'un BEC, tout en prenant en compte le bruit quantique des fluctuations statistiques.

Est-ce que la mécanique quantique possède un principe sous-jacent, similaire au principe de moindre action ? Encore mieux, est-il possible de réexprimer ce formalisme à partir de la mécanique lagrangienne ? C'est précisément le sujet de thèse de Richard P. Feynman, considéré par beaucoup comme un des plus grands physiciens du 20ème siècle [4]. Dans son ouvrage publié en 1942, il développe une nouvelle manière de faire de la physique quantique : le formalisme des *intégrales de chemin*, se basant sur le principe de moindre action. La prouesse de Feynman fut d'ouvrir la porte à l'expression de l'infiniment petit par cette hypothèse simple et pourtant très fondamentale. La théorie quantique des champs fut par la suite développée sur ce principe, en construisant l'action à partir des symétries du système à étudier. En particulier, le formalisme des intégrales de Feynman permet de représenter les trajectoires autorisées pour un système quantique par la fonction de Wigner, une distribution de quasi-probabilité dans l'espace des phases.

Plan du mémoire

L'objectif de ce travail est de particulariser l'approche semiclassique à un ensemble de bosons interagissant entre eux, et de mettre en évidence le comportement des paramètres du système. Pour ce faire, nous détaillerons dans le premier chapitre la théorie de la mécanique quantique à plusieurs corps. Nous discuterons des conséquences de la mécanique quantique statistique et des conditions nécessaires pour former un condensat de Bose-Einstein. Le chapitre 2 développera le formalisme des intégrales de chemin de Feynman dans le cadre de la mécanique quantique. Ce développement sera appliqué à un système particulier dit de Bose-Hubbard, caractérisant un système de N bosons ultrafroids piégés dans un réseau optique. La théorie semiclassique permettant d'atteindre la TWA sera présentée dans le chapitre 3, et une étude approfondie sur la validité des approximations effectuées sera faite dans le chapitre 4. En effet, bien que l'approche semiclassique soit déjà établie pour un système sans interaction, nous ne savons pas encore comment se comporte les paramètres lorsque ces dernières sont prises en compte. Enfin, le cinquième et dernier chapitre de ce mémoire discutera des résultats obtenus et des perspectives possibles de l'approche semiclassique développée tout au long du manuscrit.

Chapitre I

La mécanique quantique à plusieurs corps

Dans ce chapitre, le formalisme quantique à N corps sera développé. D'abord de manière purement théorique à travers la notion d'espace de Fock, puis de manière probabiliste avec la généralisation statistique de la mécanique quantique. L'application de ce formalisme à un système de N bosons permettra de mettre en évidence le phénomène de Condensation de Bose-Einstein, et sa particularisation sur réseau optique. Les développements suivants sont principalement basés sur les cours du Prof. P. Schlagheck [10]

I.1 Description d'un système de N particules indiscernables

I.1.1 L'espace à N corps

Soit un système de N particules indiscernables, c'est à dire présentant les mêmes caractéristiques intrinsèques : la même masse, le même spin et les mêmes comportements lorsqu'une force extérieure est appliquée. L'état du système à tout instant t est donné par la connaissance de la *fonction d'onde* ψ qui lui est associée. Si on note ξ_i les coordonnées individuelles de la particule i située à la position \mathbf{r}_i et dotée d'un spin σ_i tel que $\sigma_i \in I \subset \mathbb{Z}$, la fonction d'onde du système s'écrit

$$\psi \equiv \psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N). \quad (I.1)$$

Cette fonction contient toute l'information du système. La densité de probabilité de mesurer la particule 1 à la position \mathbf{r}_1 avec le spin σ_1 , la particule 2 à la position \mathbf{r}_2 avec le spin σ_2 , etc est donnée par $|\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)|^2$. La condition de normalisation impose que la probabilité totale soit égale à 1, autrement dit la particule doit se trouver quelque part dans l'espace. Toute fonction voulant prétendre à décrire un système physique doit donc vérifier

$$\int d\xi_1 \dots \int d\xi_N |\psi(\xi_1 \dots \xi_N)| = 1, \quad (I.2)$$

où l'intégration sur ξ signifie que l'on somme sur les états de spin et que l'on intègre sur \mathbb{R}^3 . L'espace des états d'un système correspond à l'ensemble des fonctions d'onde pouvant représenter l'état dudit système. Afin de le définir pour un système à N particules, il est nécessaire d'introduire celui d'une seule particule. On définit alors un espace de Hilbert \mathcal{H}_1 à 1 corps comme étant l'ensemble des fonctions d'onde de carré intégrable

$$\mathcal{H}_1 = \left\{ \psi : \mathbb{R}^3 \times I \rightarrow \mathbb{C}, \xi \equiv (\mathbf{r}, \sigma) \mapsto \psi(\xi) \equiv \psi(\mathbf{r}, \sigma) \text{ avec } \int d\xi |\psi(\xi)|^2 \leq \infty \right\}. \quad (I.3)$$

Cet espace vectoriel possède une base orthonormée que l'on note $\mathcal{B}_1 = (|\phi_0\rangle, |\phi_1\rangle, \dots)$ composée des fonctions d'onde ϕ_k de \mathcal{H}_1 telles que

$$\langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle = \int d\xi \langle \phi_k | \xi \rangle \langle \xi | \phi_{k'} \rangle = \int d\xi \phi_k^*(\xi) \phi_{k'}(\xi) = \delta_{kk'}. \quad (I.4)$$

Dans cette base, on peut représenter les opérateurs agissant dans \mathcal{H}_1 comme suit :

$$A = \sum_{kk'} A_{kk'} |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \text{ avec } A_{kk'} = \langle \phi_k | A | \phi_{k'} \rangle. \quad (I.5)$$

L'espace de Hilbert \mathcal{H}_N décrivant l'état du système à N particules est le produit tensoriel des N espaces à 1 particule,

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1 \times \dots \times \mathcal{H}_1. \quad (I.6)$$

Une base de cet espace est \mathcal{B}_N composée des N bases à 1 état : $\mathcal{B}_N = (|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \dots, \phi_{k_N}\rangle)_{k_1, \dots, k_N \in \mathbb{N}_0}$. On définit la notion d'*opérateur total* \hat{A} , agissant dans \mathcal{H}_N comme suit :

$$\hat{A} |\phi_{k_1}\rangle |\phi_{k_2}\rangle \dots |\phi_{k_N}\rangle = |A\phi_{k_1}\rangle |\phi_{k_2}\rangle \dots |\phi_{k_N}\rangle + |\phi_{k_1}\rangle |A\phi_{k_2}\rangle \dots |\phi_{k_N}\rangle + \dots \quad (I.7)$$

On peut le représenter dans la base à N -corps grâce à la représentation (I.5)

$$\hat{A} = \sum_{k_1=0}^{\infty} \dots \sum_{k_N=0}^{\infty} \sum_{n=1}^N \sum_{k'=0}^{\infty} A_{k_n, k'_n} |\phi_{k_1} \dots \phi_{k_n} \dots \phi_{k_N}\rangle \langle \phi_{k_1} \dots \phi_{k'_n} \dots \phi_{k_N}|. \quad (I.8)$$

Ce formalisme à N -corps est suffisant pour réexprimer les opérateurs d'énergie cinétique ou de potentiel. La notion d'opérateur total apparaît dans la mesure où nous sommes en présence d'un système de N particules indiscernables. Parler individuellement de chaque composant n'aurait pas grand sens, étant donné qu'il est impossible physiquement d'étiqueter chaque élément d'un système de composants identiques.

I.1.2 Le postulat de symétrie

Il est courant en physique moderne de tirer profit des *symétries* d'un système. La plupart du temps, on s'évitera les discussions infécondes au sujet de contributions n'ayant aucun impact sur l'étude du système, et quelques fois on découvre un principe sous-jacent physiquement très riche. Dans le cas d'un ensemble de particules indiscernables, une symétrie directe est l'invariance du système par permutation d'éléments. En effet, s'il est impossible de placer une étiquette sur un boson parmi plusieurs millions, échanger sa position avec celle de l'un de ses voisins n'aura absolument aucun impact sur le système. Ce constat se nomme le **postulat de symétrie** qui impose de considérer chaque particule de manière identique. L'état du système se doit donc d'être invariant par permutation d'élément. Pour un système physique de N particules indiscernables décrit par un hamiltonien \hat{H} , cette condition s'exprime par l'invariance temporelle de la fonction d'onde lorsqu'un échange de composant est effectué. On définit alors l'opérateur de transposition $\Pi_{nn'}$ pour tout $n, n' \in 1, \dots, N$, agissant sur \mathcal{H}_N , comme étant l'opérateur permutant 2 variables de ψ :

$$\hat{\Pi}_{nn'} \psi(\xi_1, \dots, \xi_n, \dots, \xi_{n'}, \dots, \xi_N) = \psi(\xi_1, \dots, \xi_{n'}, \dots, \xi_n, \dots, \xi_N). \quad (I.9)$$

Cet opérateur étant hermitien et unitaire, ses valeurs propres sont ± 1 . Dès lors, ses fonctions propres sont soit symétriques, soit antisymétriques sous permutation de coordonnées ξ . La condition d'invariance impose $[\hat{H}, \hat{\Pi}_{nn'}] = 0$, mais comme les transpositions ne commutent pas forcément, on exige que les fonctions propres de $\hat{\Pi}_{nn'}$ soient toutes entièrement **symétriques** ou entièrement **antisymétriques**. On définit dès lors les sous-espaces vectoriels \mathcal{H}_N^{\pm} accueillant les fonctions d'ondes symétriques (+) ou antisymétriques (−).

Il est important de se rendre compte de la puissance du dernier développement. Sous de simples considérations logiques sur la symétrie du système, nous avons découpé l'espace des états permis du système en 2 sous-espaces mutuellement disjoints (si l'on exclut de la discussion l'état nul). Plus fort encore, comme l'hamiltonien d'un système est l'opérateur régissant son évolution temporelle¹, la condition $[\hat{H}, \hat{\Pi}_{nn'}] = 0$

1. Dans la représentation d'Heisenberg, l'équation d'évolution d'une observable \hat{A} est $\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}$. Un opérateur ne dépendant pas explicitement du temps et qui commute avec \hat{H} est donc un invariant temporel.

nous enseigne qu'un état propre symétrique ou antisymétrique le restera pour tout temps. Il convient donc de nommer ces deux types d'états : on nommera **bosons** les états symétriques, et **fermions** les antisymétriques. L'espace d'Hilbert des états du système global est ainsi séparé en deux sous-espaces définis comme suit :

$$\mathcal{H}_N^\pm = \left\{ \psi \in \mathcal{H}_N : \hat{\Pi}_{nn'} \psi = \pm \psi \text{ pour tout } n, n' = 1, \dots, N \right\}. \quad (\text{I.10})$$

La figure (I.1) donne une intuition visuelle de l'espace des états d'un système de particules indiscernables.

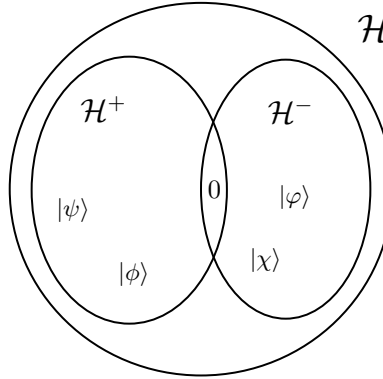


FIGURE I.1 – Représentation schématique de l'espace de Hilbert et de ses deux sous-espaces. Le seul élément commun de \mathcal{H}^+ et \mathcal{H}^- est le vecteur nul 0 .

On construit alors une base pour chaque sous-espace en respectant la symétrie intrinsèque à ces derniers. Pour ce faire, considérons premièrement le cas $N = 2$ particules. L'espace de Hilbert \mathcal{H}_2 est engendré par la base $\mathcal{B}_2 = (|\phi_{k_1} \phi_{k_2}\rangle)_{k_1, k_2 \in \mathbb{N}_0}$. En imposant la condition de symétrie ou d'antisymétrie, on obtient les états de base suivants :

$$|\phi_{k_1 k_2}^\pm\rangle = \mathcal{A}_{k_1, k_2}^\pm (|\phi_{k_1} \phi_{k_2}\rangle \pm |\phi_{k_2} \phi_{k_1}\rangle). \quad (\text{I.11})$$

Avant même de déterminer la constante de normalisation \mathcal{A} , on remarque une condition supplémentaire sur les états antisymétriques. Supposons que les deux particules fermioniques soient dans le même état quantique :

$$|\phi_{k_1 k_1}^-\rangle = \mathcal{A}_{k_1, k_1}^- (|\phi_{k_1} \phi_{k_1}\rangle - |\phi_{k_1} \phi_{k_1}\rangle) = 0. \quad (\text{I.12})$$

La fonction d'onde de deux fermions dans le même état quantique est nulle. Ce résultat, appelé **principe d'exclusion de Pauli**, est très fondamental. Nous avons maintenant, en plus d'une différence de symétrie entre les bosons et les fermions, une propriété les différenciant sans équivoque. En imposant la condition de normalisation $\langle \phi_{k_1 k_2}^\pm | \phi_{k'_1 k'_2}^\pm \rangle = \delta_{k_1, k'_1} \delta_{k_2, k'_2}$, la constante de \mathcal{A} est déterminée : $\mathcal{A}_{k_1, k_2}^+ = 1/2$ pour les états bosoniques où $k_1 = k_2$ et $\mathcal{A}_{k_1, k_2}^- = 1/\sqrt{2}$ pour les autres états, en particulier les fermioniques. Nos vecteurs de base orthogonaux et normalisés ont donc la forme suivante :

$$|\phi_{k_1 k_2}^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\phi_{k_1} \phi_{k_2}\rangle \pm |\phi_{k_2} \phi_{k_1}\rangle), \quad (\text{I.13})$$

$$|\phi_{kk}^+\rangle = |\phi_k \phi_k\rangle. \quad (\text{I.14})$$

Respectivement pour $k_1 > k_2$ et $k_1 = k_2$. Afin de généraliser pour le cas $N > 2$ particules, il est nécessaire d'effectuer un comptage des différentes permutations des états. On définit l'ensemble des permutations dont les éléments associent à un ensemble d'entiers un autre ensemble d'entiers. Formellement, on définit

$$\Pi_N = \left\{ \pi : \{1, \dots, N\} \rightarrow \{1, \dots, N\}, n \mapsto \pi(n) \text{ avec la propriété :} \right. \quad (\text{I.15})$$

$$\pi(n) = \pi(n') \text{ si et seulement si } n = n' \text{ pour tout } n, n' = 1, \dots, N \left. \right\}. \quad (\text{I.16})$$

Cet ensemble est constitué de $N!$ différentes manières de permuter les entiers jusque N . Afin de paramétrer le signe de la permutation, on écrira $(\pm 1)^\pi$ qui vaudra 1 si π est une permutation paire, ou -1 si π est une permutation impaire. Ainsi, comptant le nombre de fois où l'état $|\phi_k\rangle$ apparaît grâce au facteur n_k , on peut finalement définir les états de base normalisés de l'espace \mathcal{H}_N^\pm :

$$|\phi_{k_1 \dots k_N}^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{k=0}^\infty n_k!}} \sum_{\pi \in \Pi_N} (\pm 1)^\pi |\phi_{k_{\pi(1)}} \dots \phi_{k_{\pi(N)}}\rangle. \quad (1.17)$$

Nous sommes maintenant en mesure d'exprimer tout état de notre système quantique à N corps en fonction d'états de base orthonormés. A chaque particule, nous associons un état $|\phi_k\rangle$ d'énergie bien définie et l'état global du système est décrit par la donnée des états de chaque particule. Comme les états accessibles des différents corps du système sont quantifiés, on parle de **première quantification**. La démarche ici présentée pour donner un formalisme général à la mécanique quantique à N particules n'est pas fondamentalement différente de si nous étions dans le cas d'un corps isolé. Nous allons maintenant voir une manière de représenter l'état d'un système composite, qui s'avèrera être beaucoup plus pratique pour la manipulation des opérateurs agissant sur l'espace global.

1.1.3 L'espace de Fock

Dans la section précédente, nous avons assigné à chaque particule i l'état $|\phi_{k_i}\rangle$ dans lequel elle se trouve. Dans la **seconde quantification**, nous allons assigner à chaque état le nombre de particules n_k se trouvant dans ce dernier. En introduisant une nouvelle notation pour la base \mathcal{B}_N^\pm de la forme

$$|\phi_{k_1 \dots k_N}^\pm\rangle \equiv |n_0, n_1, n_2, \dots\rangle_\pm. \quad (1.18)$$

On exprime cette fois la base des états de \mathcal{H}_N^\pm en fonction du nombre de particules k dans chaque état $|\phi_k\rangle$. Un état $|n_0, n_1, n_2, \dots\rangle$ sera nommé **état de Fock**. Nous pouvons alors définir l'espace dans lequel vivent tous ces états, l'**espace de Fock**

$$\mathcal{H}^\pm = \bigoplus_{N=0}^\infty \mathcal{H}_N^\pm = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2^\pm \oplus \mathcal{H}_3^\pm \oplus \dots, \quad (1.19)$$

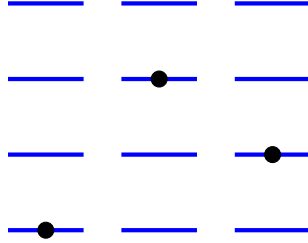
comme la somme directe des espaces individuels \mathcal{H}_N^\pm . L'espace de Fock est donc engendré par l'union des bases individuelles $\mathcal{B}^\pm = \bigcup_{N=0}^\infty \mathcal{B}_N^\pm$, où

$$\mathcal{B}_N^\pm = \left(|n_0, n_1, n_2, \dots\rangle_\pm : \sum_{k=0}^\infty n_k = N \right). \quad (1.20)$$

Les n_k appartiendront à \mathbb{N}_0 pour des états bosoniques ou à $\{0, 1\}$ pour des fermions. Par exemple, à gauche de la figure (1.2), on représente les particules 1, 2, 3 respectivement dans les états 1, 3 et 2. Dans la seconde quantification, on classera plutôt selon le nombre de particules dans chaque état. Dans la partie de droite de la figure (1.2), nous avons trois particules dans l'état 1, zéro dans le deuxième, une dans le 3ème et le 5ème, et enfin deux dans les états 4 et 6.

Première quantification

$$|1, 3, 2\rangle$$



Seconde quantification

$$|3, 0, 1, 2, 1, 2\rangle$$

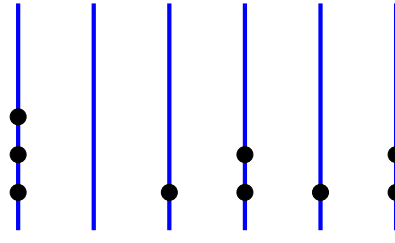


FIGURE I.2 – Représentation schématique des différents formalismes.

Une discussion plus poussée peut-être présentée pour l'espace \mathcal{H}_0 ne contenant aucune particule. On nomme l'unique état vivant dans cet espace l'état du vide, que l'on note

$$|-\rangle \equiv |0\rangle \equiv |0, 0, 0, \dots\rangle \in \mathcal{B}_0, \quad (I.21)$$

qu'il faut absolument différencier de l'état nul 0. Il s'agit de l'état physique dont l'énergie propre est la plus basse, en aucun cas un simple espace vide. En électrodynamique quantique (et plus généralement en théorie quantique des champs), on montre que le vide est en fait rempli de fluctuations quantiques se caractérisant par des valeurs non nulles du champ électromagnétique local [11]. Des paires de particules-antiparticules peuvent surgir du néant, à condition de s'annihiler en un temps inférieur à leur temps de vie. Une approche intuitive de cette notion de "particules virtuelles" peut se faire au travers du principe d'incertitude d'Heisenberg :

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar, \quad (I.22)$$

où ΔE et Δt sont les incertitudes sur l'énergie et le temps de vie d'une particule. Ainsi, il est autorisé d'avoir une création d'énergie semblant violer sa conservation, à condition que cela se fasse sous une certaine durée.

L'avantage de l'espace de Fock réside dans l'introduction des opérateurs de **création et d'annihilation** \hat{a}_k^\dagger et \hat{a}_k , définis par leurs actions sur les états de Fock :

$$\hat{a}_k |n_0, n_1, n_2, \dots\rangle_+ = \sqrt{n_k} |n_0, n_1, n_2, \dots, n_k - 1, \dots\rangle_+, \quad (I.23)$$

$$\hat{a}_k^\dagger |n_0, n_1, n_2, \dots\rangle_+ = \sqrt{n_k + 1} |n_0, n_1, n_2, \dots, n_k + 1, \dots\rangle_+, \quad (I.24)$$

pour tout état bosonique $|n_0, n_1, n_2, \dots\rangle_+ \in \mathcal{B}^+$, et

$$\hat{a}_k |n_0, n_1, n_2, \dots\rangle_- = (-1)^{n_0 + \dots + n_{k-1}} n_k |n_0, n_1, n_2, \dots, n_k - 1, \dots\rangle_+, \quad (I.25)$$

$$\hat{a}_k^\dagger |n_0, n_1, n_2, \dots\rangle_- = (-1)^{n_0 + \dots + n_{k-1}} n_k (n_k - 1) |n_0, n_1, n_2, \dots, n_k + 1, \dots\rangle_-, \quad (I.26)$$

pour tout état fermionique $|n_0, n_1, n_2, \dots\rangle_- \in \mathcal{B}^-$. Nous pouvons directement réexprimer tout état de Fock comme un produit d'opérateurs de création :

$$|n_0, n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n_k!}} \left(\hat{a}_k^\dagger \right)^{n_k} |0\rangle. \quad (I.27)$$

On distingue assez facilement le rôle de chaque opérateur : \hat{a}_k annihile une particule dans l'état $|\phi_k\rangle$ et \hat{a}_k^\dagger crée une particule dans l'état $|\phi_k\rangle$. De par la définition des $\hat{a}_k, \hat{a}_k^\dagger$, il est clair que ces derniers ne commutent pas. En effet, les opérateurs de création et d'annihilation suivront l'algèbre dite bosonique,

$$\begin{cases} [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'} \\ [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger] = 0, \end{cases}$$

ou l'algèbre dite fermionique,

$$\begin{cases} \{\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'} \\ \{\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}\} = \{\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger\} = 0, \end{cases}$$

selon la particule que l'on veut créer ou annihiler. Ces deux algèbres sont de natures fondamentalement différentes et il est possible de tirer quelques résultats intéressants sur les fermions. Premièrement, on peut réécrire explicitement l'anticommutateur et obtenir $\{\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger\} = \hat{a}_k \hat{a}_{k'}^\dagger + \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k = \{\hat{a}_{k'}^\dagger, \hat{a}_k\}$. Il est clair qu'inverser l'ordre des deux opérateurs n'a aucun impact sur l'algèbre de ces derniers. Ainsi, en prenant l'exemple d'électrons dans un solide, créer un e^- ou créer un e^+ (c'est à dire annihiler un électron ou créer un **trou**²) ne change rien à la physique. Le principe d'exclusion de Pauli peut aussi se retrouver assez facilement en remarquant que l'on ne peut pas créer deux particules fermioniques dans le même état quantique car la fonction d'onde de deux fermions dans un même état $|\phi_k\rangle$ est nulle $\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2} \{\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k^\dagger\} |0\rangle = 0$. Enfin, on retrouve bien la propriété définissant les états fermioniques : $\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_p^\dagger |0\rangle = -\hat{a}_p^\dagger \hat{a}_k^\dagger |0\rangle$, à savoir que la fonction d'onde est antisymétrique par permutation de particules (ici, nous avons permuté un fermion dans l'état $|\phi_k\rangle$ avec un fermion dans l'état $|\phi_p\rangle$).

Le formalisme de Fock va nous permettre de représenter plus facilement les opérateurs grâce à l'opérateur de projection $\hat{P}_{kk'} = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$. On aura donc, pour un opérateur $A : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1$,

$$\hat{A} = \sum_{k,k'=0}^{\infty} A_{kk'} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'}, \quad (1.28)$$

avec $A_{kk'} = \langle \phi_k | A | \phi_{k'} \rangle$. L'opérateur $\hat{n}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$ nous rend le *nombre d'occupation* de l'état k , que l'on peut sommer sur le nombre d'états afin d'obtenir l'opérateur du nombre total de particules $\hat{N} = \sum_k \hat{n}_k$.

Il sera utile plus tard de pouvoir définir des opérateurs pouvant créer ou annihiler des particules à des positions bien précises. Pour ce faire, on introduit des **opérateurs de champ** $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ et $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ au travers des relations suivantes :

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_{k=0}^{\infty} \langle \mathbf{r} | \phi_k \rangle \hat{a}_k \quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{k=0}^{\infty} \langle \mathbf{r} | \phi_k \rangle^* \hat{a}_k^\dagger, \quad (1.29)$$

qui peuvent également être utilisées afin de représenter des opérateurs en réexprimant \hat{a}_k et \hat{a}_k^\dagger en fonction de ces derniers.

2. On peut montrer qu'un trou e^+ sera créé par l'opérateur \hat{a}_k et annihilé par \hat{a}_k^\dagger .

I.2 Mécanique quantique statistique

Jusqu'ici, nous avons décrit mathématiquement les états pouvant correspondre à un système de N particules au moyen des états de Fock. Nous allons voir dans cette section que la notion de condensat de Bose-Einstein émerge naturellement de l'étude d'un système pouvant échanger de l'énergie et des particules avec un réservoir externe. En physique statistique, un tel système est décrit au moyen de l'ensemble Grand-Canonique.

I.2.1 La condensation de Bose-Einstein

En 1925, Albert Einstein mis en évidence une transition de phase théorique d'un gaz classique à un état encore jamais observé alors qu'il étudiait les propriétés statistiques d'un gaz parfait monoatomique [12]. Dans cette nouvelle phase que l'on nommera condensat de Bose-Einstein, l'ensemble des atomes s'accumule dans l'état de plus basse énergie lorsque la température chute. La réalisation expérimentale de cet état de la matière rapporta le prix Nobel à Eric A. Cornell, Wolfgang Ketterle et Carl E. Wieman en 2001 [13]. Une vision intuitive d'un condensat de Bose-Einstein peut être donnée en réfléchissant en termes d'échelles caractéristiques. Supposons un gaz de N particules bosoniques confinés dans un volume L^3 . Si les particules n'interagissent pas, deux longueurs caractéristiques seulement interviennent dans la description du système : la distance inter-atomique $l = L/N^{1/3}$ et la longueur d'onde de de Broglie $\lambda_B = h/p$, avec h la constante de Planck et p l'impulsion de chaque particule. Lorsque la température chute, l'impulsion p des particules décroît de même ; la longueur d'onde associée à chaque particule s'étend de plus en plus jusqu'à dépasser la distance inter-atomique et recouvrir totalement le volume autorisé. Le système n'est plus que composé d'une grande onde de matière : un condensat de Bose-Einstein. Une représentation visuelle particulièrement pertinente peut aider à la compréhension du phénomène, ainsi le lecteur curieux sera invité à regarder la vidéo sur ce sujet du groupe *La physique autrement* de l'université Paris-Sud [14].

Plus formellement, nous allons présenter la condensation de Bose-Einstein (BEC) dans le cas d'un gaz parfait sans interaction. L'hamiltonien d'un tel gaz est donné, en seconde quantification, par

$$\hat{H} = \sum_{k=0}^{\infty} E_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k. \quad (1.30)$$

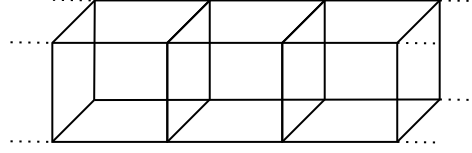
Chaque particule se trouve dans un état $|\phi_k\rangle$ d'énergie E_k . Considérer que le système est sans interaction revient à dire que l'ensemble de ses composants se trouvent dans des états propres de l'hamiltonien qui sont indépendants entre-eux, mais connectés au même réservoir extérieur. Les particules vont donc peupler les états selon une certaine distribution, appelée distribution de **Bose-Einstein** dans le cas d'un gaz de bosons. La valeur moyenne du nombre de particules sera la somme des nombres de particules associés à chaque état $|\phi_k\rangle$:

$$\overline{\langle \hat{N} \rangle} = \sum_{k=0}^{\infty} \overline{\langle \hat{n}_k \rangle} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(E_k - \mu)} - 1}, \quad (1.31)$$

où $\beta = \frac{1}{k_B T}$ et μ est le potentiel chimique du système, correspondant à la variation d'énergie relative à la variation du nombre de particules du système. Regardons maintenant les conséquences d'une telle distribution sur un gaz de bosons libres ou piégés dans un potentiel.

Le gaz de Bose dans l'espace libre

Considérons un gaz de particules bosoniques sans interaction dans un cube à D dimensions, de longueur L et avec des conditions de bord périodiques.



On suppose que le gaz est en contact avec un réservoir à la température $T = 1/k_B\beta$. Un tel système est décrit par un ensemble d'hamiltoniens à un corps du type

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2}, \quad (1.32)$$

dont les fonctions propres sont des ondes planes normalisées par le volume de la boîte dans laquelle on travaille : $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$, où $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$, $\mathbf{k} = (2\pi/L)\mathbf{l}$ avec $\mathbf{l} \in \mathbb{Z}^D$. On trouve directement les valeurs propres associées à ces états propres : $E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$. La moyenne statistique du nombre de particules du système est donnée par l'équation (1.31). Si l'on suppose que les termes varient peu d'un mode \mathbf{k} à un autre, on peut passer à la limite continue :

$$\overline{\langle \hat{N} \rangle} = \int d^D l \frac{1}{e^{\beta(E_l - \mu)} - 1}. \quad (1.33)$$

En remplaçant E_l par son expression en termes des vecteurs d'onde \mathbf{k} , on identifie la solution d'une série géométrique $\frac{a}{1-q} = \sum_{k=1}^{\infty} a q^k$ et on a

$$\overline{\langle \hat{N} \rangle} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^D} \sum_{l=1}^{\infty} \left(\frac{2\pi m}{l\beta} \right)^{D/2} e^{l\beta\mu}. \quad (1.34)$$

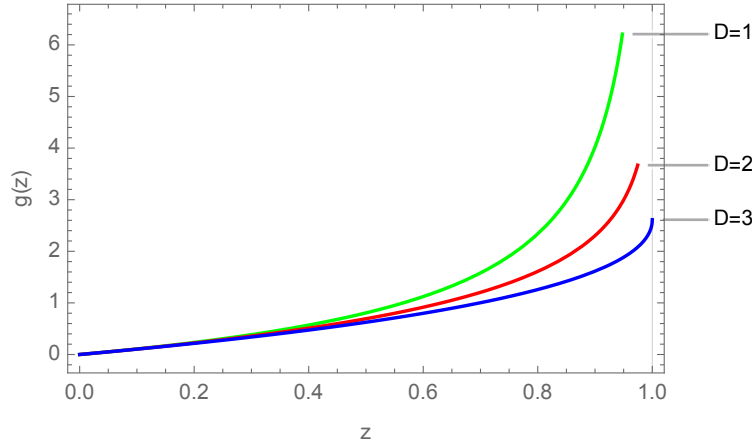
On va réécrire cette équation en fonction de la **longueur d'onde de de Broglie** $\lambda_T = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$ et de la **fonction de Bose** :

$$g_p(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^p}, \quad (1.35)$$

ce qui nous donne une description de la densité de particules en termes de la fonction g :

$$\overline{\langle \hat{N} \rangle} = \frac{V}{\lambda_T^D} g_{\frac{D}{2}}(e^{\beta\mu}) = \bar{n}V. \quad (1.36)$$

Le comportement de la fonction de Bose est représenté sur la figure (1.3).

FIGURE 1.3 – Fonction de Bose pour $D=1,2,3$.

On remarque que la fonction de Bose (1.35) diverge pour $D=1,2$ mais pas pour $D=3$! Lorsque z tend vers 1, la fonction tend vers une constante qui est en fait la valeur de la fonction Zeta de Riemann évaluée en $3/2$: $\xi(3/2) = \sum_l \frac{1}{l^{3/2}} = 2.612$. Comme $z = \beta\mu$, il existe une température critique T_c à laquelle il se passe quelque chose de particulier. En réexprimant la longueur d'onde λ_T en fonction de la température critique, on met en évidence sa valeur :

$$k_B T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left(\frac{\bar{n}}{\xi(3/2)} \right). \quad (1.37)$$

Maintenant que l'on sait à quelle température il y a une transition, on peut regarder précisément la valeur moyenne du nombre de particules du système. En reprenant l'équation (1.31) et en séparant l'état fondamental de la somme, on a

$$\overline{\langle \hat{N} \rangle} = \frac{1}{e^{\beta(E_0 - \mu)} - 1} + \sum_{l \neq (0,0,0)} \frac{1}{e^{\beta(E_l - \mu)} - 1}. \quad (1.38)$$

L'énergie de l'état fondamental E_0 peut être fixée à 0, et pour une température suffisamment basse, on peut développer l'exponentielle en série : $e^{-\beta\mu} \approx 1 - \beta\mu$. La somme du deuxième terme peut être approchée par une intégrale que l'on a déjà résolu et dont la solution est présente dans l'équation (1.36). On a cette fois un nouveau terme qui vient contribuer à la distribution des particules,

$$\overline{\langle \hat{N} \rangle} = -\frac{k_B T}{\mu} + \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(e^{\beta\mu}). \quad (1.39)$$

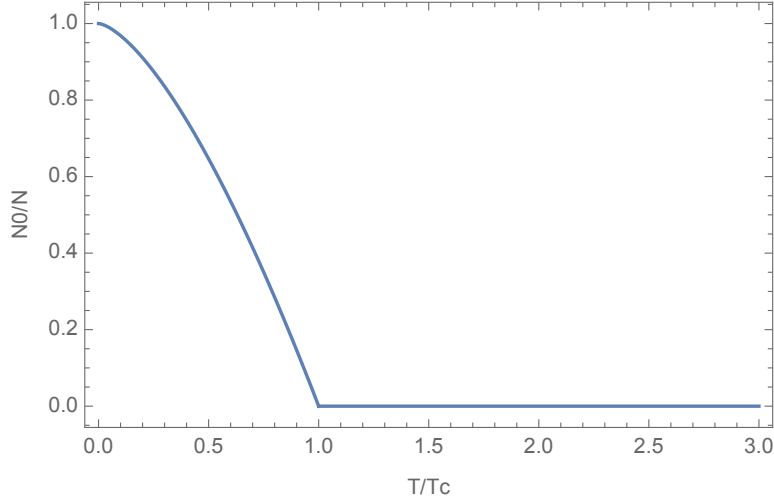
Pour $e^{\beta\mu} \approx 1$, on retrouve la fonction Zeta de Riemann. En notant respectivement le premier et le deuxième terme comme le nombre de particules N_0 dans l'état fondamental et celui dans les états excités, on obtient :

$$\overline{\langle \hat{N} \rangle} = N_0 + \frac{V}{\lambda_T^3} \xi(3/2), \quad (1.40)$$

et en réexprimant $\xi(3/2)$ grâce à l'équation (1.37), on a finalement :

$$\frac{N_0}{V} = \bar{n} \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right]. \quad (1.41)$$

La fonction (1.41) est représentée dans la figure (1.4), et l'on remarque qu'une transition de phase du second ordre est bel et bien présente lors du passage à la température critique. En dessous de T_c , les atomes s'accumulent dans l'état fondamental : un condensat de Bose-Einstein se forme.

FIGURE 1.4 – Population de l'état fondamental en fonction du rapport T/T_c

Le gaz de Bose dans un piège harmonique

En pratique, les particules ne sont pas libres mais piégées dans des potentiels. Nous allons voir ce qui va changer lorsque l'on considère un potentiel de confinement harmonique de la forme $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m \sum_{j=1}^D \omega_j^2 \mathbf{r}_j^2$. Dans ce cas, l'hamiltonien décrivant le système est :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + V(\mathbf{r}), \quad (1.42)$$

et les valeurs propres associées aux états propres de \hat{H} sont bien connues : $E_{n_j} = \sum_{j=2}^{\infty} \hbar \omega_j (n_j + 1/2)$, pour $n_j = n_1, \dots, n_D, \in \mathbb{N}_0$. Pour pouvoir suivre les mêmes développements que dans le cas libre, on doit supposer que l'écart entre deux niveaux d'énergie est bien plus petit que l'énergie thermique : $\hbar \omega_j \ll k_B T$. Dans ce cas, on va pouvoir passer de la somme à une intégrale exactement comme dans le cas précédent. Cependant, cette fois le potentiel chimique μ va être perturbé par le piège extérieur. Ce dernier se voit être légèrement modifié d'une quantité correspondant aux modes du piège :

$$\tilde{\mu} = \mu - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{2} \hbar \omega_j. \quad (1.43)$$

De là, la fonction de Bose (1.3) convergera vers une valeur finie pour $D = 2$ et $D = 3$. La condensation de Bose-Einstein est alors aussi réalisable en deux dimensions. La température critique dépend alors de D ,

$$k_B T_c = \hbar \bar{\omega} \left(\frac{N}{\xi(D)} \right)^{1/D}, \quad (1.44)$$

où $\bar{\omega} = (\omega_0, \dots, \omega_D)^{1/D}$ est la moyenne géométrique des fréquences du piège. Avec les valeurs $\xi(2) = \frac{\pi^2}{6}$ et $\xi(3) = 1.202$. Ainsi, il est possible de réaliser un BEC dans un piège harmonique qui peut être formé en laboratoire.

Le condensat sur réseau optique

Maintenant que la notion de condensat de Bose-Einstein est établie, la question à se poser est de savoir comment stabiliser, isoler et manipuler un tel état de la matière. On peut catégoriser les pièges en fonction du principe qu'ils utilisent : on parlera ainsi de pièges magnétiques lorsque les atomes sont contraints à une

trajectoire guidée par l'interaction entre leur moment magnétique et un champ magnétique externe. On peut citer le piège de Ioffe-Pritchard dans lequel le condensat est capturé entre deux bobines Helmholtz générant un champ magnétique grâce au courant électrique les parcourant [17]. Les configurations de piège peuvent aussi être réalisées grâce à l'interaction entre un atome et un champ électromagnétique, qui va capturer le condensat entre deux niveaux d'énergie dont la transition correspond à la fréquence du laser. Un tel système est appelé piège optique et peut être réalisé à l'aide d'un faisceau laser. Une généralisation possible est l'utilisation de plusieurs faisceaux : il est alors concevable de créer un **réseau optique** si les différents rayons sont de même longueur d'onde [16]. Un potentiel périodique est donc appliqué au condensat qui se retrouve capturé au sein des ondes stationnaires des lasers interférents (Fig.1.5).

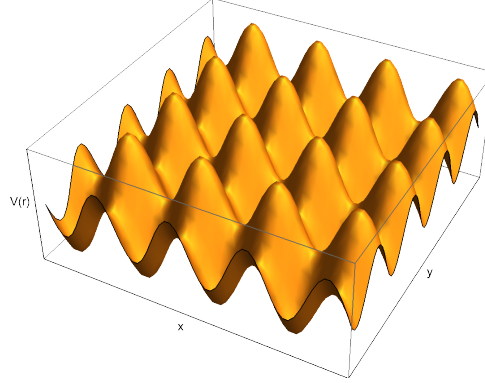


FIGURE 1.5 – Représentation schématique d'un piège optique 3D.

Critère de Penrose–Onsager

Afin de caractériser définitivement le processus de condensation, nous allons définir un paramètre d'ordre valable même en cas d'interactions entre particules. On définit la matrice de densité à un corps par $n_{kk'} = \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'} \rangle$. Cette matrice est hermitique, définie positive et sa trace nous donne le nombre total de particules du système. Lorsque les particules n'interagissent pas entre elles, la condensation sera réalisée lorsqu'un grand nombre d'atomes se trouve dans l'état fondamental. Si il existe des interactions entre les atomes, les états propres de l'hamiltonien sont différents et l'état de plus basse énergie n'est plus le même. Ainsi, on peut établir un critère de condensation :

Un condensat de Bose-Einstein est réalisé si :
la matrice $n_{kk'}$ possède un vecteur propre $(V_k)_{k \in \mathbb{N}_0}$ dont la valeur propre associée N_0 est **macroscopiquement grande**.

On aura donc un BEC s'il existe un état propre de la matrice densité dont la population est particulièrement grande par rapport au nombre total de particules N . Le paramètre d'ordre est alors la fonction d'onde du condensat définie par :

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \sqrt{N_0} \sum_{k=0}^{\infty} V_k \phi_k(\mathbf{r}). \quad (1.45)$$

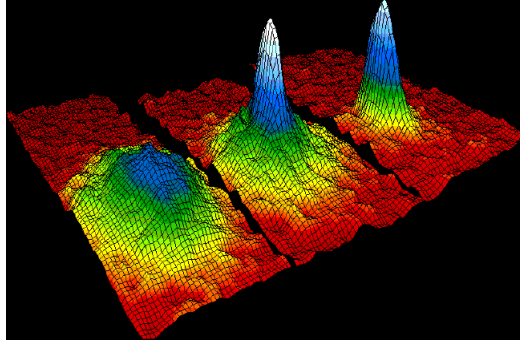


FIGURE I.6 – Distribution des vitesses d'un gaz de rubidium. De gauche à droite, les atomes se placent dans un seul et même état quantique.[15]

I.2.2 L'équation de Gross-Pitaevskii

Jusqu'à maintenant, nous n'avons discuté que de systèmes dans lesquels les atomes n'interagissaient pas entre eux. On a pu voir que lorsque que la température tend vers zéro degré, les particules s'accumulent dans l'état fondamental. Si l'on considère que nous sommes en présence d'un gaz dilué, on peut modéliser l'interaction inter-atomique comme un contact. La théorie de la diffusion nous apprend qu'une telle interaction prend la forme d'un potentiel à deux corps $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, où $g = 4\pi\hbar^2 a_s/m$ caractérise la force et le signe de l'interaction au travers de la *s-wave scattering length* a_s . Comme la température est basse, l'énergie cinétique des atomes est faible, et se limiter à une interaction de contact est raisonnable.

Ainsi, l'hamiltonien décrivant un gaz dilué de N atomes bosoniques confinés dans une piège $V(\mathbf{r})$ interagissant par le potentiel d'interaction à 2 corps $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ est

$$\begin{aligned} \hat{H} = \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + V(\mathbf{r}) \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \\ + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{r} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (I.46)$$

où les opérateurs de champs $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ et $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ définis dans les équations (I.29) annihilent et créent respectivement un boson à la position \mathbf{r} . Le premier terme est simplement un hamiltonien à un corps décrivant la dynamique d'une particule dans un potentiel $V(\mathbf{r})$, là où le second détermine l'interaction entre deux corps au moyen de $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. L'hypothèse d'un gaz dilué justifie d'autant plus le choix d'une interactions à (très) courte portée quand a_s est plus petit que la distance inter-atomique.

L'approximation de Hartree

Dans le but de calculer l'état fondamental d'un hamiltonien du type (I.46), on va supposer que les N particules sont dans des états à un corps et qu'elles partagent la même orbitale qui est à déterminer. En réalité, cette supposition revient à considérer que les interactions entre atomes sont faibles et qu'elles ne modifient que peu leurs états. On a déjà montré qu'à basse température tous les bosons s'accumulent dans l'état fondamental, on va donc prendre l'état partagé comme étant celui de plus basse énergie. Dans ce cadre, la fonction d'onde du système peut s'écrire dans la base de Fock :

$$|\psi_0\rangle = |N, 0, 0, \dots\rangle. \quad (I.47)$$

L'action des opérateurs de champs sur cet état sera de créer ou d'annihiler une particule représentée par une fonction d'onde à la position \mathbf{r} , c'est à dire

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) |N, 0, 0, \dots\rangle = \sqrt{N} \phi_0(\mathbf{r}) |N-1, 0, 0, \dots\rangle. \quad (1.48)$$

On peut alors calculer la valeur moyenne de l'énergie dans l'état $|\psi_0\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle &= N \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{r} \phi_0^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + V(\mathbf{r}) \right) \phi_0(\mathbf{r}) \\ &\quad + \frac{g}{2} N(N-1) \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{r} |\phi_0(\mathbf{r})|^4. \end{aligned} \quad (1.49)$$

En supposant $N \gg 1$, le facteur devant le second terme devient N^2 et on peut associer \sqrt{N} à $\phi_0(\mathbf{r})$ pour former le paramètre d'ordre (1.45). On obtient alors une fonctionnelle de l'énergie, dépendant de $\psi_0(\mathbf{r})$:

$$E_{GP}[\psi_0] \equiv \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{r} \left[\psi_0^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + V(\mathbf{r}) \right) \psi_0(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} |\psi_0(\mathbf{r})|^4 \right]. \quad (1.50)$$

On a maintenant l'expression de l'énergie à minimiser afin de trouver l'état fondamental de l'hamiltonien. Cependant, on doit imposer une condition : l'état doit être normalisé. Pour extrémiser une fonctionnelle sous une certaine contrainte, on applique la méthode des *multiplicateurs de Lagrange* et on fait varier la fonction $E_{GP}[\psi_0] - \mu (\int d\mathbf{r} |\psi_0(\mathbf{r})|^2 - N)$, où $\mu \in \mathbb{R}$ est le multiplicateur. Le paramètre μ doit être vu comme une nouvelle variable du problème, qui impose la normalisation de ψ lorsque l'on minimise en fonction du multiplicateur. Comme souvent en théorie des champs, il n'y a aucune raison de considérer $\psi = \psi^*$ (c'est à dire parler de champs réels), il faut donc les considérer comme parfaitement distincts. La dérivée fonctionnelle par rapport à $\psi_0^*(\mathbf{r})$ donne

$$0 = \frac{\delta}{\delta \psi_0^*(\mathbf{r})} \left(E_{GP}[\psi_0] - \mu \int d\mathbf{r} |\psi_0(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \right). \quad (1.51)$$

Finalement, cette dérivée se calcule facilement et on obtient l'équation de Gross-Pitaevskii :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \psi_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}) + g |\psi_0(\mathbf{r})|^2 \psi_0(\mathbf{r}) = \mu \psi_0(\mathbf{r}). \quad (1.52)$$

C'est une équation de Schrödinger non-linéaire décrivant la dynamique d'une particule individuelle du système. Cette dernière est soumise à un potentiel extérieur $V(\mathbf{r})$, mais aussi à un potentiel effectif $g |\psi_0(\mathbf{r})|^2$ résultant de l'interaction avec les $N-1$ autres particules du système. La nature de μ peut être relativement bien décrite si l'on regarde la variation de la fonctionnelle de l'énergie E_{GP} en fonction du nombre de particules : $dE_{GP} = \mu dN$. Le paramètre μ est alors à interpréter comme étant le potentiel chimique du système bosonique étudié.

1.2.3 Modèle de Bose-Hubbard

En physique de la matière condensée, il est coutume d'exploiter une propriété du réseau dans lequel on travaille : la plupart du temps, il s'agit de la symétrie par translation spatiale d'un cristal. Comme notre condensat est piégé dans un réseau optique, le potentiel de piège est périodique et suit donc une symétrie de translation. Nous allons développer l'expression de l'hamiltonien décrivant un tel système, en suivant les développements de Barter T.H. [20]. En supposant que notre système soit indépendant du temps, les énergies propres de ce dernier sont déterminées par l'équation de Schrödinger

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \phi_n(\mathbf{r}) = E_n \phi_n(\mathbf{r}), \quad (1.53)$$

où $V(\mathbf{r})$ est le potentiel du réseau optique. En présence d'un potentiel périodique, les énergies propres E_n de ce système sont bien connues et présentent une structure en bande, caractéristique de la physique de l'état solide [19]. De par le théorème de Bloch, on peut décomposer la fonction d'onde de la particule en une partie présentant la périodicité du réseau et une partie correspondant à une onde plane. La fonction d'onde du condensat peut alors s'écrire $\phi_n = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u^n(\mathbf{r})$. Dès lors, il est possible de déterminer les énergies propres d'un système périodique et d'en tirer leurs dépendances envers le réseau. Afin de construire une base localisée à partir des ϕ_n , on introduit les fonctions d'ondes maximales localisées

$$w_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \phi_n(\mathbf{r}), \quad (1.54)$$

appelées *fonctions de Wannier*. Particularisons maintenant à un gaz d'atomes froids bosoniques. On a vu dans la section (1) qu'un tel gaz était modélisé par un ensemble d'opérateurs de champs quantiques $\Psi(\mathbf{r})$ vérifiant l'algèbre bosonique $[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. L'hamiltonien à plusieurs corps d'un tel système est alors donné par (1.46) et peut être décomposé en deux termes H_1 et H_2 , respectivement à un et deux corps.

Le modèle de Bose-Hubbard est construit en exprimant les opérateurs de champs à partir des fonctions de Wannier,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{i,n} w_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \hat{b}_{n,i}, \quad (1.55)$$

avec $\hat{b}_{n,i}$ les opérateurs d'échelle relatifs à l'énergie E_n sur le site i . L'expression des opérateurs de champs en terme de fonction de Wannier est justifiée par l'hypothèse de forte localisation du paquet d'ondes lorsque le système présente une énergie relativement basse, conformément à l'hypothèse de basse température. Dans la même optique, on considèrera que seul l'état fondamental est occupé : toutes les fonctions de Wannier relatives aux bandes $n > 0$ seront négligées.

Réexprimons le premier terme de l'hamiltonien H en fonction de w_0 :

$$\hat{H}_1 = \sum_{i,j} \int d\mathbf{r} w_0^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) w_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j. \quad (1.56)$$

Comme les fonctions de Wannier sont maximales localisées, ce dernier terme correspond en fait à une somme sur les différents sites. On annihile une particule dans le site j et on en crée une dans le site i : c'est le phénomène de *tunneling*. Pour $i = j$, il s'agit juste de la caractérisation d'une particule dans le potentiel optique : on considèrera cela comme un paramètre qui ne nous intéresse pas pour notre étude. Les termes suivants seront les taux de tunneling entre les sites premiers voisins, seconds voisins, et ainsi de suite. Pour des puits de potentiels suffisamment profonds, on peut se contenter de ne considérer que les tunnelings entre premiers voisins. Dans cette approximation, on réécrit

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= - \int d\mathbf{r} w_0^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) w_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j \\ &= -J \sum_{i,j} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j, \end{aligned} \quad (1.57)$$

où la somme se fait sur les paires de sites voisins. J est donc le taux de tunneling d'un site à un autre, qui en vertu de la symétrie de translation du réseau, ne dépend pas des sites.

Il reste à réexprimer le terme d'interactions entre particules. Dans le même développement que pour le terme H_1 , le second terme évalué dans l'état fondamental s'écrit

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2} U_{ijkl} \sum_{ijkl} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k \hat{b}_l. \quad (1.58)$$

Encore une fois, comme les fonctions de Wannier sont maximale-ment localisées, les interactions entre différents sites sont largement dominées par les interactions entre particules d'un même site. On réécrit donc

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2}U \sum_j \hat{n}_j(\hat{n}_j + 1), \quad (1.59)$$

où $U \equiv U_{iiii}$ et $n_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ est le nombre de particules dans le site i . Finalement, on peut réécrire l'**hamiltonien de Bose-Hubbard** en sommant sur l'ensemble des sites, et en considérant une énergie par particule \mathcal{E}_i :

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_i \left[\mathcal{E}_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i + \frac{1}{2} \mathcal{U}_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_i - \mathcal{J} \left(\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1} + \hat{b}_{i+1}^\dagger \hat{b}_i \right) \right]. \quad (1.60)$$

Ainsi, le système étudié est caractérisé par un hamiltonien à 3 termes : une énergie par site, une interaction entre particules du même site et un tunneling entre deux sites voisins.

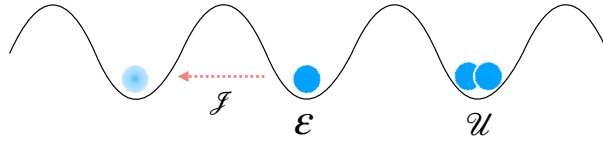


FIGURE 1.7 – Représentation schématique d'un système de Bose-Hubbard. Les trois sites représentés peuvent communiquer via tunneling avec un taux \mathcal{J} . Il y a une énergie par site \mathcal{E} , ainsi qu'une énergie d'interaction entre particules \mathcal{U} .

On est donc en mesure de déterminer les différentes phases du modèle [21] :

Etat Superfluide ($\mathcal{U}/\mathcal{J} \rightarrow 0$) : il y a beaucoup de tunneling et très peu d'interactions. Les atomes sont délocalisés sur l'entiereté du réseau, l'état fondamental du système est donc composé des états fondamentaux de tous les atomes.

Etat Mott Insulator ($\mathcal{U}/\mathcal{J} \rightarrow \infty$) : les interactions dominent et les atomes sont complètement localisés. Il n'y a quasi aucune communication entre les sites, d'où le nom d'isolant. Dans l'approximation de champ moyen qui consiste à moyenner les interactions qui s'appliquent sur un corps [22], la frontière entre les différentes phases est donnée par [23] :

$$\left(\frac{\mathcal{J}}{\mathcal{U}} \right) = \frac{\left(n - \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{U}} \right) \left(1 - n + \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{U}} \right)}{1 + \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{U}}}. \quad (1.61)$$

On remarque dans la figure (1.8) différents lobes correspondant à des transitions de phase entre les états superfluides et isolants de Mott. Quand le rapport énergie par site/interactions est petit, un grand taux de tunneling est nécessaire afin d'avoir une délocalisation complète des atomes. Cependant, plus on considère de voisins, moins \mathcal{J} devra être grand : il y a en effet plus de possibilités de tunnelings au voisinage, donc une plus grande probabilité.

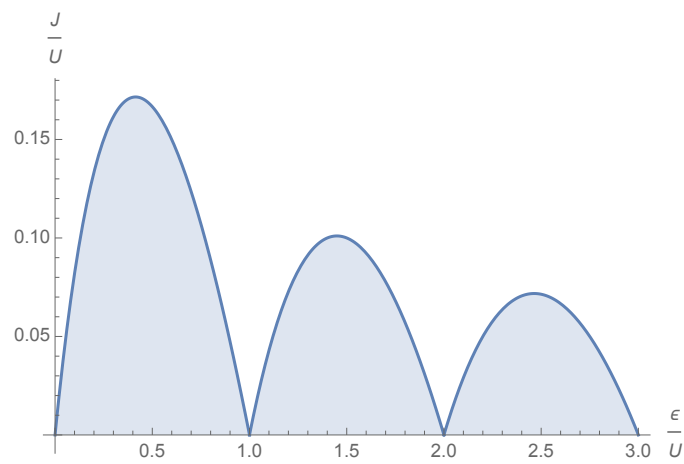


FIGURE 1.8 – Phases du modèle de Bose-Hubbard, respectivement pour $n=1,2$ et 3 . Les phases isolantes sont en bleu, et l'extérieur sont des phases superfluides.

Chapitre 2

Les intégrales de chemin de Feynman

Dans ce chapitre, nous allons développer la théorie autour du principe de moindre action. Des discussions autour de la philosophie et de la puissance de ce principe seront proposées. À partir de l'équation de Schrödinger, nous établirons le propagateur de Feynman, que nous appliquerons à une particule libre. Enfin, l'hamiltonien de Bose-Hubbard sera réexprimé en termes de variables canoniques.

2.1 Le principe de moindre action

Alors que Richard P. Feynman s'ennuyait à l'école, son professeur de physique lui parla d'un phénomène curieux [24]. Prenez une balle et lancez-la vers le ciel. À moins que vous n'ayez la force nécessaire à l'envoyer en orbite autour de la Terre, le projectile devrait suivre une parabole et s'écraser au sol après un certain temps de vol. Imaginez maintenant que ladite balle fasse un trajet différent : qu'est-ce qui l'empêche de faire plusieurs ondulations avant d'atterrir ? Supposons que la particule mette le même temps Δt à atteindre le point final de sa trajectoire, qu'elle soit imaginaire ou physique. Si l'on calcule son énergie cinétique $\frac{1}{2}mv^2$ et qu'on lui retire l'énergie potentielle gravifique mgh qu'elle subit selon sa hauteur h par rapport au sol, nous obtenons une quantité qui sera *toujours* plus petite dans le cas d'une trajectoire physique. Il semble donc que la nature suit un certain principe physique qu'il est possible de modéliser à partir de cette quantité qui doit être minimale. Essayons de l'appliquer à un système relativement simple, celui d'une particule se déplaçant librement. La quantité à calculer, que l'on appellera S , n'est composée que de son énergie cinétique. Cherchons son minimum, en supposant qu'elle démarre et arrive à des temps fixés : $\delta S = \frac{1}{2}m\delta(v^2) = mv\delta v = 0$. Si l'on évite le cas trivial où sa vitesse est nulle (elle ne se déplace donc pas), la solution de cette équation demande que la vitesse de la particule ne varie pas. La variation δv est nulle, elle se déplace à vitesse *constante*. Si la particule est plongée dans un potentiel extérieur, la minimisation de S sur toute la durée de la trajectoire ne nous rend rien de moins que la loi la plus connue de la physique :

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left[-m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} - \frac{dV(x)}{dx} \right] dt = 0, \quad (2.1)$$

plus souvent écrite sous la forme $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$. À partir de cette équation, toute la physique pré-19ème siècle peut se déduire. Afin de puiser tout le potentiel de ce principe, il est nécessaire de construire un formalisme qui permet de caractériser n'importe quel système physique. Pour se faire, la mécanique lagrangienne introduit un scalaire appelé le *lagrangien*, qui contient toute l'information du système physique étudié. Par définition, le lagrangien a comme expression $\mathcal{L} = T - V$, où T et V sont les énergies cinétiques et potentielles du système. C'est une fonction des positions et vitesses généralisées (respectivement q_i et \dot{q}_i), ainsi que du temps. Il s'agit exactement de la quantité qu'on a calculée si l'on en prend l'intégrale sur le temps de notre trajectoire.

La définition de l'*action* pour un système physique quelconque est donc

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} dt. \quad (2.2)$$

Minimiser cette quantité par rapport aux positions généralisées q_i permet d'obtenir les équations d'*Euler-Lagrange*, utilisées du pendule classique jusqu'en théorie quantique des champs pour caractériser les équations du mouvement d'un système physique :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \quad (2.3)$$

La thèse de doctorat de Feynman avait pour but de construire un nouveau formalisme applicable à la physique quantique qui se baserait sur le principe de moindre action [25].

2.1.1 Formalisme hamiltonien

La mécanique lagrangienne, bien que très utilisée, est parfois mise de côté au profit de la mécanique hamiltonienne. Dans cette dernière, une nouvelle fonction $H(p, q, t)$ des impulsions et coordonnées généralisées est construite par la transformée de Legendre du lagrangien : $H(p, q, t) = p\dot{q} - \mathcal{L}(q, \dot{q}, t)$. Les équations du mouvement prennent cette fois une nouvelle forme, que l'on nomme les *équations d'hamilton*

$$\frac{\partial H}{\partial q} = -\dot{p} \quad \frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}. \quad (2.4)$$

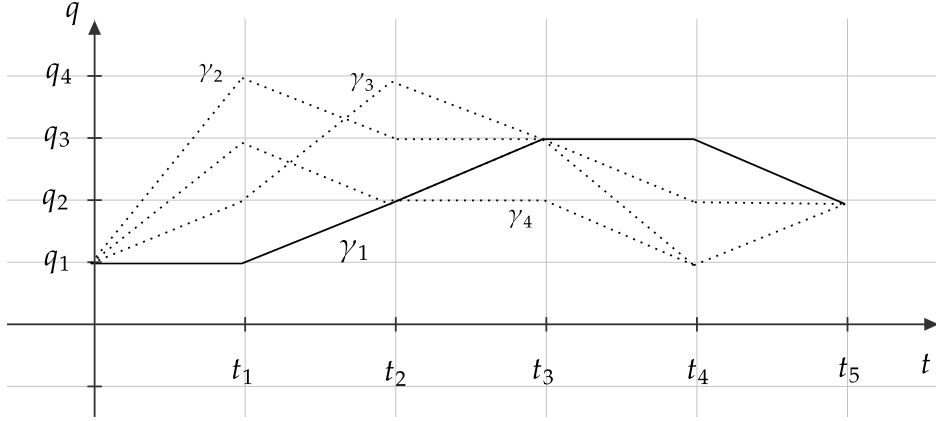
Dans le contexte hamiltonien, la dynamique du mouvement est entièrement décrite par les valeurs des variables canoniques p et q , dont l'évolution est régie par les équations (2.4). Au delà de la forme plus compacte des équations du mouvement, la mécanique hamiltonienne permet l'introduction de plusieurs concepts clés qui auront leur importance dans des notions semblant sortir complètement du contexte. On nommera par exemple les crochets de Poisson, qui permettent par identification avec le commutateur de la mécanique quantique de faire le lien entre ces deux formalismes et d'ainsi construire la démarche de quantification canonique. On tire de ce lien le *principe de correspondance*, qui permet sous certaines conditions de retranscrire l'hamiltonien d'un système classique en son équivalent quantique. De là naissent les premières études du chaos quantique et du questionnement de savoir si un système classique chaotique peut présenter des caractéristiques typiques du chaos après quantification. Nous reviendrons sur le principe de correspondance au chapitre 3.

2.2 Le propagateur de Feynman

2.2.1 Définition d'un propagateur

La notion d'action est intimement liée à la notion de trajectoire. En effet, minimiser l'action, c'est considérer tous les chemins possible pour notre système physique et ne choisir que celui qui vérifie cette condition. Sachant que les seules variables fixées sont les conditions initiales et finales, toutes les trajectoires liant le point (\mathbf{q}_i, t_i) au point (\mathbf{q}_f, t_f) dans l'espace des phases sont à considérer. Regardons premièrement comment, en mécanique quantique, on transpose un état d'un point à un autre. On sait de la mécanique hamiltonienne que l'hamiltonien \hat{H} d'un système est le générateur des translations dans le temps, autrement dit des trajectoires physiques. L'évolution temporelle d'un vecteur ket $|\psi(t)\rangle$ représentant l'état physique d'un corps est alors régie par l'application de l'opérateur \hat{H} sur ce dernier. On démarre donc de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad (2.5)$$



Dans le cas d'un hamiltonien indépendant du temps, cette équation possède une solution particulière si la condition initiale $|\psi(t_0)\rangle$ est connue,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle. \quad (2.6)$$

En particulier, comme l'équation de Schrödinger est linéaire, toute combinaison linéaire de solutions est aussi solution. Afin d'obtenir la fonction d'onde ψ du système, on projette son état au cours du temps dans la base des positions \mathbf{q} . On a

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{q}, t) &= \langle \mathbf{q} | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \mathbf{q} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle \\ &= \int d\mathbf{q}_0 \langle \mathbf{q} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} | \mathbf{q}_0 \rangle \langle \mathbf{q}_0 | \psi(t_0) \rangle. \end{aligned} \quad (2.7)$$

En utilisant la relation de fermeture $\int d\mathbf{q}_0 | \mathbf{q}_0 \rangle \langle \mathbf{q}_0 | = \mathbb{I}$. On définit alors la fonction qui *propage* $|\psi\rangle$ des (\mathbf{q}_0, t_0) aux coordonnées (\mathbf{q}, t) par le **propagateur K** :

$$K(\mathbf{q}_0, t_0, \mathbf{q}, t) = \langle \mathbf{q} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} | \mathbf{q}_0 \rangle. \quad (2.8)$$

On exprime alors la fonction d'onde évaluée en (\mathbf{q}, t) par rapport à sa valeur aux conditions initiales (\mathbf{q}_0, t_0) ,

$$\psi(\mathbf{q}, t) = \int d\mathbf{q}_0 K(\mathbf{q}_0, t_0, \mathbf{q}, t) \psi(\mathbf{q}_0, t_0). \quad (2.9)$$

Grâce à cette fonction K , on est en mesure de décrire l'évolution de la fonction d'onde de notre système à partir de la connaissance des conditions initiales et de la manière dont les coordonnées \mathbf{q} varient lors de l'application de l'opérateur d'évolution $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)$. Au passage, on remarque qu'évaluer K en t_0 nous redonne bien les conditions initiales : $\langle \mathbf{q} | \mathbf{q}_0 \rangle = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0)$.

Afin de considérer toutes les trajectoires possibles, nous allons discrétiser l'espace et découper l'intervalle $t-t_0$ en N morceaux de durée élémentaire δt . De par la définition du propagateur, il est évident qu'il existe une fonction équivalente qui va propager du temps t_0 au temps intermédiaire t_1 . Aussi, si l'on veut exprimer la propagation entre les coordonnées (\mathbf{q}_0, t_0) et (\mathbf{q}_2, t_2) en passant par le point (\mathbf{q}_1, t_1) , l'équation dite de Chapman-Kolmogorov nous donne le propagateur correspondant :

$$K(\mathbf{q}_0, t_0, \mathbf{q}_2, t_2) = \int d\mathbf{q}_1 K(\mathbf{q}_1, t_1, \mathbf{q}_2, t_2) K(\mathbf{q}_0, t_0, \mathbf{q}_1, t_1). \quad (2.10)$$

En découpant notre intervalle à N morceaux, on va pouvoir exprimer le propagateur global en $N - 1$ fonctions K :

$$\begin{aligned} K(\mathbf{q}_0, t_0, \mathbf{q}_N, t_N) &= \int \left[\prod_{k=1}^N d\mathbf{q}_k \right] K(\mathbf{q}_N, t_N, \mathbf{q}_{N-1}, t_{N-1}) \dots K(\mathbf{q}_1, t_1, \mathbf{q}_0, t_0) \\ &= \int \left[\prod_{k=1}^N d\mathbf{q}_k \right] \langle \mathbf{q}_N | e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \hat{H}} | \mathbf{q}_{N-1} \rangle \dots \langle \mathbf{q}_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \hat{H}} | \mathbf{q}_0 \rangle, \end{aligned} \quad (2.11)$$

où l'on a exprimé l'intervalle de temps total comme un ensemble de N petits accroissements : $(t - t_0) = N \delta t$. En fait, comme l'indique le produit d'intégrales sur les coordonnées \mathbf{q} , on a discrétisé l'espace en N étapes. En définitive, le propagateur global est entièrement déterminé par la connaissance d'un propagateur *élémentaire*

$$K(\mathbf{q}_{k+1}, t_{k+1}, \mathbf{q}_k, t_k) = \langle \mathbf{q}_{k+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \hat{H}} | \mathbf{q}_k \rangle. \quad (2.12)$$

2.2.2 Exemple de la particule libre

Dans le but de mieux appréhender la manière d'utiliser le propagateur, nous allons illustrer le cas d'une particule libre. L'hamiltonien d'un tel système n'est que composé d'une énergie cinétique $p^2/2m$ [28]. Utilisons premièrement la relation de fermeture sur l'espace des impulsions :

$$K(\mathbf{q}_{k+1}, t_{k+1}, \mathbf{q}_k, t_k) = \int d\mathbf{p}_0 d\mathbf{p}_1 \langle \mathbf{q}_{k+1} | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \frac{\mathbf{p}^2}{2m}} | \mathbf{p}_0 \rangle \langle \mathbf{p}_0 | \mathbf{q}_k \rangle. \quad (2.13)$$

L'expression de la projection de la base des coordonnées sur la base des impulsions peut se trouver grâce à la transformée de Fourier $\tilde{\psi}$ de la fonction d'onde ψ . On a, en 3 dimensions,

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{q}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\mathbf{p} \tilde{\psi}(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}} \\ &= \langle \mathbf{q} | \psi \rangle = \int d\mathbf{p} \langle \mathbf{q} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (2.14)$$

où la puissance 3/2 de l'exposant correspond à la dimension du système divisée par deux. Dès lors, on peut identifier

$$\langle \mathbf{q} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}}, \quad (2.15)$$

qui ne sont autre que les fonctions propres de l'opérateur d'impulsion $\hat{\mathbf{p}}$, c'est à dire des ondes planes de vecteur d'onde \mathbf{p} . L'expression du braket contenant l'opérateur d'évolution dans l'équation (2.13) s'obtient directement par la définition de l'exponentielle d'un opérateur et du produit scalaire entre deux vecteurs de base :

$$\langle \mathbf{p}_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \frac{\mathbf{p}^2}{2m}} | \mathbf{p}_0 \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \frac{\mathbf{p}_0^2}{2m}} \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0). \quad (2.16)$$

Le propagateur élémentaire s'écrit alors

$$K(\mathbf{q}_{k+1}, t_{k+1}, \mathbf{q}_k, t_k) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p}_0 \exp \left[\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k) - \frac{i}{\hbar} \delta t \frac{\mathbf{p}_0^2}{2m} \right]. \quad (2.17)$$

En mettant en évidence un facteur $-\frac{i\delta t}{2m\hbar}$ et avec l'identité

$$\mathbf{p}^2 - \frac{2m \mathbf{p} \cdot (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k)}{\delta t} = \left(\mathbf{p} - \frac{m(\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k)}{\delta t} \right)^2 - \frac{m^2 (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k)^2}{\delta t^2}, \quad (2.18)$$

on s'aperçoit que le dernier terme est indépendant de \mathbf{p} . On peut donc sortir de l'intégrale l'exponentielle dont ce terme est l'argument et on obtient

$$K(\mathbf{q}_{k+1}, t_{k+1}, \mathbf{q}_k, t_k) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} e^{\frac{i}{2\hbar} \frac{m(\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k)^2}{\delta t}} \int d\mathbf{p}_0 e^{-\frac{i\delta t}{2m\hbar} \left(\mathbf{p}_0 - \frac{m(\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k)}{\delta t} \right)^2}, \quad (2.19)$$

expression que l'on identifie à une intégrale gaussienne après le changement de variable $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{k} = \mathbf{p} - \frac{m(\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k)}{\delta t}$. Finalement, le propagateur d'une particule libre est donné par

$$K(\mathbf{q}_{k+1}, t_{k+1}, \mathbf{q}_k, t_k) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{5/2}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{i\delta t}} \exp \left[\frac{im}{2\hbar} \frac{(\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k)^2}{\delta t} \right]. \quad (2.20)$$

Par exemple, si l'état initial du système est un paquet d'onde gaussien (Fig.2.1), l'évolution temporelle de la fonction d'onde sera déterminée par l'équation (2.9).

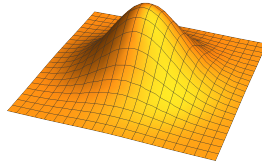


FIGURE 2.1 – Représentation du paquet d'onde gaussien

2.3 Application à l'hamiltonien de Bose-Hubbard

Le propagateur qui va nous intéresser est celui qui nous donnera l'évolution de la fonction d'onde d'un gaz d'atomes froids piégés dans un réseau optique. L'hamiltonien de Bose-Hubbard (BH) fut dérivé dans la section 1.2.3,

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^L \left[\mathcal{E}_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i + \frac{1}{2} \mathcal{U}_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_i - \mathcal{J} \left(\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1} + \hat{b}_{i+1}^\dagger \hat{b}_i \right) \right], \quad (2.21)$$

où l'on somme sur l'ensemble des L sites du réseau optique. Par la suite on laissera tomber la somme afin de s'intéresser à la formulation de l'hamiltonien dans un seul site. La première étape du développement du propagateur de BH va être de réexprimer l'hamiltonien en fonction des variables canoniques q et p . Pour se faire, on définit les opérateurs d'échelle de l'oscillateur harmonique en fonction des opérateurs \hat{q} et \hat{p} :

$$\hat{b}_i = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{q}_i + \frac{i}{m\omega} \hat{p}_i \right) \quad (2.22)$$

$$\hat{b}_i^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{q}_i - \frac{i}{m\omega} \hat{p}_i \right), \quad (2.23)$$

où m et ω sont la masse et la fréquence de l'oscillateur harmonique. On gardera ces facteurs afin d'aider la visualisation de l'isomorphisme entre les opérateurs de champs et les modes de l'oscillateur harmonique comme décrit dans la section sur la seconde quantification. En réexprimant terme par terme, on a

$$\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i = \frac{m\omega}{2\hbar} \left[\hat{q}_i^2 + \frac{1}{(m\omega)^2} \hat{p}_i^2 \right] - \frac{1}{2} \quad (2.24)$$

$$\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_i = \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^2 \left[\hat{q}_i^4 + \frac{1}{(m\omega)^4} \hat{p}_i^4 \right] + \frac{1}{4\hbar^2} \left[\hat{q}_i^2 \hat{p}_i^2 + \hat{p}_i^2 \hat{q}_i^2 \right] - \frac{m\omega}{\hbar} \left[\hat{q}_i^2 + \frac{1}{(m\omega)^2} \hat{p}_i^2 \right] + \frac{3}{4}. \quad (2.25)$$

Comme les opérateurs relatifs à des sites différents commutent, le terme de tunneling se réécrit

$$\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1} = \frac{m\omega}{2\hbar} \left[\hat{q}_i \hat{q}_{i+1} + \frac{1}{m\omega} \hat{p}_i \hat{p}_{i+1} \right]. \quad (2.26)$$

Nous pouvons finalement réexprimer l'hamiltonien de Bose-Hubbard en termes d'opérateurs canoniques \hat{q} et \hat{p} .

$$\sum_i \hat{\mathcal{H}}(\hat{q}_i, \hat{p}_i) = \sum_i \hat{H}_1(\hat{q}_i) + \hat{H}_2(\hat{p}_i) + \alpha (V(\hat{q}_i)V(\hat{p}_i) + V(\hat{p}_i)V(\hat{q}_i)) - D. \quad (2.27)$$

Où on identifie

$$\hat{H}_1(\hat{q}_i) = \mathcal{E}_i \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{q}_i^2 + \frac{1}{2} \mathcal{U}_i \left[\left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^2 \hat{q}_i^4 - \frac{m\omega}{\hbar} \hat{q}_i^2 \right] - \mathcal{J} \frac{m\omega}{\hbar} (\hat{q}_i \hat{q}_{i+1}) \quad (2.28)$$

$$\hat{H}_2(\hat{p}_i) = \frac{\mathcal{E}_i}{2m\omega\hbar} \hat{p}_i^2 + \frac{1}{2} \mathcal{U}_i \left[\left(\frac{1}{2m\omega\hbar} \right)^2 \hat{p}_i^4 - \frac{1}{m\omega\hbar} \hat{p}_i^2 \right] - \mathcal{J} \frac{1}{\hbar} (\hat{p}_i \hat{p}_{i+1}) \quad (2.29)$$

$$V(\hat{q}_i) = \hat{q}_i^2 \quad (2.30)$$

$$V(\hat{p}_i) = \hat{p}_i^2 \quad (2.31)$$

$$\alpha = \frac{1}{8\hbar^2} \mathcal{U}_i \quad (2.32)$$

$$D = \frac{1}{2} \mathcal{E}_i + \frac{3}{8} \mathcal{U}_i. \quad (2.33)$$

On intégrera par la suite la constante D dans les termes de couplage V pour une meilleure visibilité. L'hamiltonien (2.21) peut se réécrire comme une somme de deux opérateurs dépendant respectivement des positions et des impulsion généralisées, ainsi que d'un terme de couplage entre les variables canoniques. Plus important encore, nous avons une dépendance à la puissance quatrième entre les \hat{q} et les \hat{p} ! La présence de ce terme, bien que conditionnée par l'existence d'interactions inter-atomiques, est la motivation principale du travail accompli dans ce mémoire. En effet, dans les développements actuels, il est coutume de s'arrêter au premier ordre du développement en série de Taylor. Celui-ci s'avère exact si les interactions ne sont pas prises en compte, mais des contributions peuvent apparaître si l'ordre en \hat{q} est plus grand que 2. Nous reviendrons sur cet aspect du problème lorsque nous discuterons de l'approximation de phase stationnaire.

Maintenant que nous avons exprimé l'hamiltonien du système en fonction des opérateurs des variables canoniques, cherchons à trouver l'expression du propagateur élémentaire

$$\begin{aligned} K(\mathbf{q}, \mathbf{q}_f, t) &= \langle \mathbf{q}_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \mathcal{H}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}})} | \mathbf{q} \rangle \\ &= \langle \mathbf{q}_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t [\hat{H}_1(\hat{q}) + \hat{H}_2(\hat{p}) + \alpha (V(\hat{q})V(\hat{p}) + V(\hat{p})V(\hat{q}))]} | \mathbf{q} \rangle. \end{aligned} \quad (2.34)$$

La première étape est de factoriser les exponentielles. Comme H_1 , H_2 et V ne commutent à priori pas, on utilise la formule de Baker-Campbell-Hausdorf :

$$e^X e^Y = e^{X+Y+\frac{1}{2}[X,Y]+\dots}. \quad (2.35)$$

Alors qu'il est possible de séparer les exponentielles en ne commettant qu'une erreur proportionnelle à δt^3 , le développement théorique se trouve bloqué dès la prochaine étape si l'on continue à prendre en compte les

termes en δt^2 (Annexe A). Ainsi, pour la suite, on négligera les termes à partir du commutateur inclus. En appliquant ce développement à l'hamiltonien de Bose-Hubbard et en utilisant la relation de fermeture, on a

$$\begin{aligned} K(\mathbf{q}, \mathbf{q}_f, t) &= \langle \mathbf{q}_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t H_1(\hat{\mathbf{q}})} e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t H_2(\hat{\mathbf{p}})} e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \alpha V(\hat{\mathbf{q}}) V(\hat{\mathbf{p}})} e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \alpha V(\hat{\mathbf{p}}) V(\hat{\mathbf{q}})} | \mathbf{q} \rangle \quad (2.36) \\ &= \int d\mathbf{q}_1 \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{p}_1 \int d\mathbf{q}_2 \int d\mathbf{p}_2 \langle \mathbf{q}_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t H_1(\hat{\mathbf{q}})} | \mathbf{q}_1 \rangle \langle \mathbf{q}_1 | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t H_1(\hat{\mathbf{p}})} | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | \mathbf{q}_2 \rangle \\ &\quad \langle \mathbf{q}_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \alpha V(\hat{\mathbf{q}}) V(\hat{\mathbf{p}})} | \mathbf{p}_2 \rangle \langle \mathbf{p}_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \alpha V(\hat{\mathbf{p}}) V(\hat{\mathbf{q}})} | \mathbf{q} \rangle. \end{aligned}$$

Analysons terme par terme :

$$\langle \mathbf{q}_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t H_1(\hat{\mathbf{q}})} | \mathbf{q}_1 \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t H_1(\mathbf{q}_1)} \delta(\mathbf{q}_f - \mathbf{q}_1), \quad (2.37)$$

$$\langle \mathbf{q}_1 | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{L/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{p}}, \quad (2.38)$$

$$\langle \mathbf{p} | e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t H_2(\hat{\mathbf{p}})} | \mathbf{p}_1 \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t H_2(\mathbf{p}_1)} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1), \quad (2.39)$$

$$\langle \mathbf{p}_1 | \mathbf{q}_2 \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{L/2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{p}_1}. \quad (2.40)$$

Les termes de couplage demandent un développement supplémentaire. Ainsi, par la définition de l'exponentielle d'un opérateur, on a :

$$\langle \mathbf{q}_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \delta t V(\hat{\mathbf{q}}) V(\hat{\mathbf{p}})} | \mathbf{p}_2 \rangle = \langle \mathbf{q}_2 | \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar} \alpha \delta t \right)^k [V(\hat{\mathbf{q}}) V(\hat{\mathbf{p}})]^k | \mathbf{p}_2 \rangle. \quad (2.41)$$

Comme on néglige les ordres en δt^2 et supérieurs, les deux derniers termes se réduisent à

$$\langle \mathbf{q}_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \delta t V(\hat{\mathbf{q}}) V(\hat{\mathbf{p}})} | \mathbf{p}_2 \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \delta t V(\mathbf{q}_2) V(\mathbf{p}_2)} \langle \mathbf{q}_2 | \mathbf{p}_2 \rangle, \quad (2.42)$$

$$\langle \mathbf{p}_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \delta t V(\hat{\mathbf{p}}) V(\hat{\mathbf{q}})} | \mathbf{q}' \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \delta t V(\mathbf{p}_2) V(\mathbf{q})} \langle \mathbf{p}_2 | \mathbf{q} \rangle. \quad (2.43)$$

Ainsi, le propagateur se réécrit comme suit :

$$\begin{aligned} K(\mathbf{q}, \mathbf{q}_f, t) &= \int d\mathbf{q}_1 \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{p}_1 \int d\mathbf{q}_2 \int d\mathbf{p}_2 \frac{1}{(2\pi\hbar)^{2L}} e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t H_1(\mathbf{q}_1)} \delta(\mathbf{q}_f - \mathbf{q}_1) e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t H_2(\mathbf{p}_1)} \\ &\quad \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) e^{-\frac{i}{\hbar} (\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{p} - \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{q}_2)} \\ &\quad e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \delta t V(\mathbf{q}_1) V(\mathbf{p}_2)} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{p}_2} \\ &\quad e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \delta t V(\mathbf{p}_2) V(\mathbf{q})} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{q}} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{2L}} \int d\mathbf{q}_2 \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{p}_2 e^{\frac{i}{\hbar} \delta t \left[\mathbf{p}_2 \cdot \frac{(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q})}{\delta t} - (H_1(\mathbf{q}_f) + H_2(\mathbf{p}_1) + \alpha(V(\mathbf{q}_2) V(\mathbf{p}_2) + V(\mathbf{p}_2) V(\mathbf{q}))) \right]}. \quad (2.45) \end{aligned}$$

En prenant la limite pour $\delta t \rightarrow 0$, le premier terme de l'argument de l'exponentielle comporte la dérivée temporelle des coordonnées généralisées : $\frac{\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}}{\delta t} = \dot{\mathbf{q}}$. En effet, \mathbf{q}_2 peut être choisi tel que $\mathbf{q}_2 = \mathbf{q}(t + \delta t)$ étant donné qu'il s'agit d'un accroissement infinitésimal des coordonnées. Sous cette forme, on reconnaît la transformée de Legendre de la fonction hamiltonienne qui n'est autre que le lagrangien du système physique : $\mathbf{p}\dot{\mathbf{q}} - \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \equiv \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$. Le propagateur élémentaire est finalement

$$K(\mathbf{q}, \mathbf{q}_f, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{2L}} \int d\mathbf{q}_2 \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{p}_2 e^{\frac{i}{\hbar} \delta t \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \mathbf{p})}. \quad (2.46)$$

Lorsque l'on calcule le propagateur d'un pas de temps à un autre, nous obtenons une expression faisant intervenir le lagrangien du système. Afin de calculer le propagateur global, nous prendrons le produit de tous les propagateurs afin de compter chaque pas de temps. On a

$$K(\mathbf{q}_N, t_N, \mathbf{q}_0, t_0) = \int \left[\prod_{k=0}^{N-1} d\mathbf{q}_k d\mathbf{p}_k \right] \frac{1}{(2\pi\hbar)^{2LN}} e^{\sum_{k=0}^{N-1} \frac{i}{\hbar} \delta t \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)}. \quad (2.47)$$

Comme auparavant, on prend la limite pour $\delta t \rightarrow 0$. Pour rappel, cela correspond à découper notre temps total en un nombre d'intervalles tendant vers l'infini car $(t - t_0) = N\delta t$. Une somme infinie sur un incrément infinitésimal correspond à une intégrale, on retombe donc sur la définition de l'action du système pour la trajectoire :

$$\int_{t_0}^{t_N} \mathcal{L}(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), t) dt = R[\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)]. \quad (2.48)$$

Cependant, comme le contexte se prête plutôt à une action discrétisée, on parlera plutôt de la *fonction principale d'hamilton* $R(\mathbf{q}, \mathbf{p})$. Avec la notation $\mathcal{D}[\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)] = \prod_{k=1}^{N-1} dq_k dp_k \frac{1}{(1\pi\hbar)^{2LN}}$, on a finalement le PROPAGATEUR DE FEYNMAN :

$$K(\mathbf{q}_N, t_N, \mathbf{q}_0, t_0) = \int \mathcal{D}[\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)] e^{\frac{i}{\hbar} R[\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)]}. \quad (2.49)$$

Une discussion s'impose. Le propagateur de Feynman constitue le fondement de la notion d'intégrales de chemin. En effet, l'intégrale $\int \mathcal{D}[\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)]$ parcourt toutes les trajectoires de l'espace des phases. Ces dernières sont sans aucune restriction : elles peuvent être classiques (donc obéir au principe de moindre action) ou ne suivre aucune loi. Les positions initiales et finales sont fixées, mais le trajet entre ces dernières peut prendre toutes les valeurs possibles. Il y a donc un nombre infini de trajectoires possibles pour une particule. Comment déterminer une évolution physique possible parmi cet ensemble infini ? Au fil du temps, la trajectoire d'une particule va correspondre à une action donnée, vérifiant le principe de moindre action. La phase va donc être fixée par l'action de la trajectoire dans l'espace des phases. Chaque chemin aura une action associée, et les trajectoires physiques seront restreintes par la condition $\delta S = 0$. Tous les chemins s'additionnent, et à l'instar des diagrammes de Feynman, des interférences entre différents chemins peuvent intervenir.

2.4 Fonctions de Green et propagateurs

Le cadre mathématique décrivant les propagateurs est appelé Fonctions de Green. De manière très formelle, on va montrer que ces dernières sont des outils puissants de résolution d'équations différentielles linéaires (ED).

Supposons une telle équation, c'est à dire de la forme

$$Df(x) = g(x), \quad (2.50)$$

où D est un opérateur linéaire différentiel, f est la fonction à trouver et g la solution de l'équation inhomogène. Une solution particulière de l'ED peut être trouvée à l'aide de la fonction de Green $G(x, x')$, que l'on définit par

$$DG(x, x') = \delta(x - x'). \quad (2.51)$$

On vérifie alors que l'on peut exprimer f en fonction de G et de la solution inhomogène :

$$f(x) = \int G(x, x') g(x') dx'. \quad (2.52)$$

Concrètement, la fonction de Green semble être un premier bloc de résolution de l'équation différentielle. Etant donné qu'elle correspond à la solution d'une impulsion instantanée correspondant à un pic de Dirac, on peut reconstruire la solution complète en sommant ces solutions partielles sur l'entierité de la variable. C'est ce que l'on fait en intégrant sur x afin de retrouver la fonction f . En guise d'illustration du fonctionnement de cette méthode de résolution, nous allons chercher à résoudre l'équation régissant la dynamique du potentiel électrostatique $\varphi(\mathbf{r})$ généré par une densité de charge quelconque $\rho(\mathbf{r})$

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\varepsilon_0}, \quad (2.53)$$

appelée **équation de Poisson**. Les conditions aux limites sont fixées de telle manière à ce que le champ $\varphi(\mathbf{r})$ soit nul pour $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. Ici, l'opérateur linéaire différentiel est le laplacien ∇^2 et la solution inhomogène est $-\rho(\mathbf{r})/\varepsilon_0$. La fonction de Green associée à l'équation (2.53) est celle qui vérifie la condition

$$\nabla^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.54)$$

tout en permettant de réexprimer la solution en fonction d'elle :

$$\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\varepsilon_0} \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (2.55)$$

Afin de trouver l'expression de G , on va prendre la transformée de Fourier des deux côtés de l'équation (2.54). Notons $\tilde{G}(\mathbf{q}, \mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}$ la transformée de la fonction de Green. On a

$$-\mathbf{q}^2 \tilde{G}(\mathbf{q}, \mathbf{r}') = \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}. \quad (2.56)$$

On peut alors trouver l'expression de \tilde{G} grâce à la définition de la distribution δ de Dirac, et prendre la transformée de Fourier inverse afin de récupérer la fonction de Green initiale,

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{\mathbf{q}^2}. \quad (2.57)$$

Il est alors possible de résoudre cette intégrale en passant en coordonnées sphériques afin de retomber sur une intégrale connue du type $\int_0^\infty \frac{\sin(x)}{x} dx = \pi/2$. Finalement, la fonction de Green a comme expression

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (2.58)$$

On peut alors injecter dans l'équation (2.55) et obtenir le champ généré en tout point de l'espace par une distribution de charge quelconque :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'. \quad (2.59)$$

En partant simplement de l'équation de Poisson, on a pu retrouver le potentiel électrostatique bien connu de l'électromagnétisme. On voit tout l'intérêt des fonctions de Green : elles nous permettent de résoudre une équation différentielle aux dérivées partielles linéaire en mettant en évidence une solution instantanée. C'est exactement ce que l'on a fait dans la section précédente avec le propagateur de l'équation de Schrödinger : On est parti d'une équation décrivant l'effet d'un opérateur linéaire sur un vecteur ket $|\psi\rangle$, nous avons discrétisé l'espace en petits morceaux et avons trouvé un propagateur nous permettant de reconstruire la solution générale à partir des solutions dans chaque incrément. Les fonctions de Green sont d'une importance capitale en théorie quantique des champs. Les processus d'interactions sont caractérisés par 3 paramètres : les lignes

externes décrivant les particules incidentes, les vertex décrivant les interactions et les propagateurs décrivant les particules virtuelles portant l'interaction d'un point à un autre. Notamment, cette méthode de résolution est utilisée pour trouver les fonctions de Green relatives aux différentes équations : le propagateur scalaire pour l'équation de Klein-Gordon, spinoriel pour l'équation de Dirac et vectoriel pour la méthode de Gupta-Bleuler. Les diagrammes de Feynman sont alors construits à partir de ces ingrédients, et demeurent jusqu'à aujourd'hui les outils qui ont permis la vérification expérimentale du moment magnétique de l'électron, la prédiction théorique la mieux vérifiée de toute la physique [29][30].

Chapitre 3

La mécanique quantique dans l'espace des phases

Dans ce chapitre, nous allons discuter de l'espace des phases et plus précisément de la représentation des trajectoires physiques dans celui-ci. Le lien entre l'espace des phases classique et quantique sera détaillé afin de pouvoir s'intéresser plus particulièrement à la manière de représenter les fonctions classiques en termes d'opérateurs quantiques. Pour ce faire, nous allons nous attarder sur une représentation en particulier : la fonction de Wigner. Ses propriétés seront présentées et un lien global entre les propagateurs et la représentation de Wigner sera établi, permettant de créer un pont direct entre l'espace des phases classique et quantique.

3.1 Représentation dans l'espace des phases

3.1.1 Mécanique classique

En physique classique, l'état d'un système à tout instant est donné par la connaissance conjointe de la position et de l'impulsion de chacun des objets le composant. Pour cette raison, on nomme les coordonnées \mathbf{q} et les impulsions \mathbf{p} les *variables d'état*. En effet, à partir des équations d'Hamilton, si les conditions initiales ($\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_i$) sont fixées l'évolution temporelle du système est parfaitement déterminée. L'état d'un système est donc paramétré par un ensemble de points vivant dans un espace abstrait que l'on appelle **l'espace des phases**. Dans ce dernier, l'évolution temporelle du système va former une courbe appelée **trajectoire de phase**, définie à tout instant par les équations d'Hamilton. L'espace des phases est un espace abstrait qu'il est difficile de se représenter en toute généralité. En effet, lorsqu'un système est composé d'un ensemble de N particules, l'espace des phases physique va être de dimension $6N$: $3N$ coordonnées et $3N$ impulsions. On va cependant se donner une bonne intuition de cet espace en étudiant des cas simples.

Oscillateur harmonique

Un tel système est composé d'une particule astreinte à se mouvoir dans une direction, soumise à une force de rappel. L'hamiltonien correspondant à cette situation est composé d'un terme décrivant l'énergie cinétique de la particule et d'une énergie potentielle de rappel,

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega}{2}q^2. \quad (3.1)$$

Si le système est isolé, l'hamiltonien ne dépend pas du temps : ce dernier représente donc l'énergie du système qui doit être conservée. On peut alors représenter dans l'espace des phases les courbes d'énergie constante qui sont des ellipses centrées en 0. La figure (3.2) représente trois trajectoires de phase pour des énergies différentes. Comme le système n'est pas dissipatif, l'énergie ne change jamais et il est impossible de passer d'une

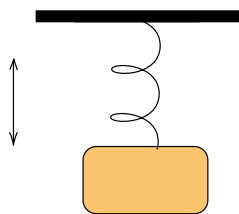


FIGURE 3.1 – Représentation schématique d'un oscillateur harmonique composé d'un bloc massif oscillant par l'action d'un ressort.

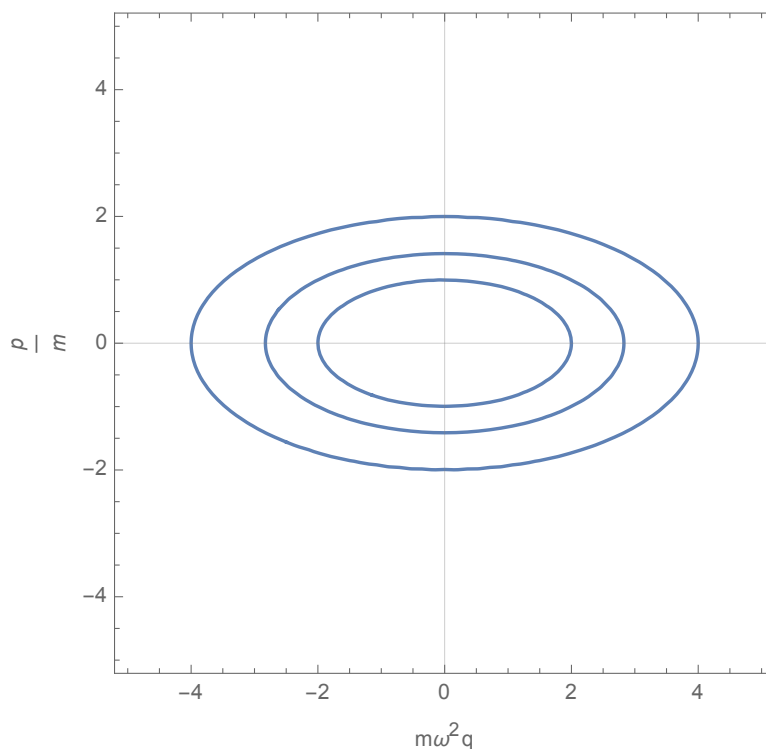


FIGURE 3.2 – Représentation de l'oscillateur harmonique et son espace des phases. Les courbes d'énergies fixées sont paramétrées par $q = q_0 \sin(\omega_0 t)$ et $p = p_0 \cos(\omega_0 t)$, solutions des équations d'Hamilton dans le cadre d'un hamiltonien du type (3.1).

courbe à une autre. Pour transitionner, il faudrait une perturbation qui amènerait le système à gagner ou perdre de l'énergie. Il est clair que l'espace des phases ne représente pas une trajectoire physique. L'oscillateur harmonique représenté ici ne suit qu'un chemin vertical et ne peut absolument pas former d'ellipse au cours de son trajet. Il y a donc une distinction entre l'espace des coordonnées du système, l'espace des impulsions du système, et finalement l'espace des phases formé à partir des deux espaces précédemment mentionnés.

Formalisme

L'ensemble des coordonnées accessibles par le système est appelé **espace des configurations**. C'est une variété \mathcal{M} formée à partir d'un ensemble de points (q_1, \dots, q_n) . Dans le cas de l'oscillateur harmonique simple, il s'agit d'une droite sur laquelle oscille l'objet, tandis que pour un pendule circulaire l'espace est un

cercle de rayon correspondant à la longueur du pendule.

A partir de cet espace, on va construire le **fibré tangent** à partir des espaces tangents à chaque point. On nomme cet ensemble \mathcal{TM} . En vérité, l'espace tangent n'est défini que si \mathcal{M} est une variété différentielle. De là, on peut former une base : $(\frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial q_n})$ de \mathcal{TM} . Les composantes d'un vecteur v vivant dans cet espace sont formées à partir des dérivées de chaque coordonnée : $v = \dot{q}_1 \frac{\partial}{\partial q_1} + \dots + \dot{q}_n \frac{\partial}{\partial q_n}$. Pour définir un système lagrangien, on a juste besoin de l'espace des coordonnées \mathcal{M} et d'une fonction $\mathcal{L} : \mathcal{TM} \rightarrow \mathbb{R} : (q, \dot{q}) \mapsto \mathcal{L}(q, \dot{q})$ définie sur le fibré tangent.

Cependant, si on veut faire de la mécanique hamiltonienne, la définition de l'impulsion p comme variable indépendante des coordonnées nécessite l'introduction d'un autre objet : l'**espace cotangent** à la variété différentielle \mathcal{M} , noté $\mathcal{T}^*\mathcal{M}$. Les points de cet espace sont les coordonnées et impulsions $(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n)$. On peut donc y définir les équations d'Hamilton et par la même occasion les évolutions des variables $q(t)$ et $p(t)$: l'espace cotangent peut formellement être identifié à l'espace des phases d'un système dynamique.

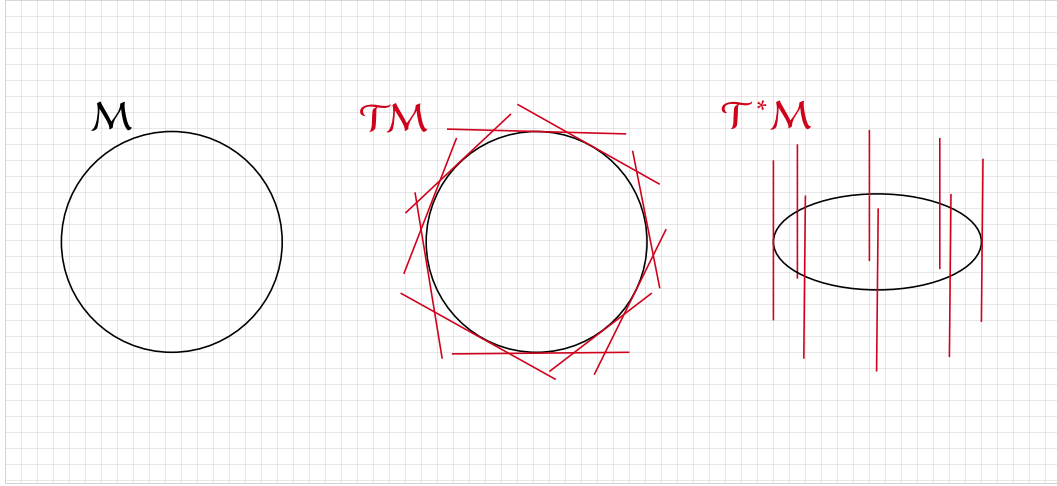


FIGURE 3.3 – Espace des configurations, tangent et cotangent du pendule circulaire.

Les équations d'Hamilton peuvent maintenant être définies afin de paramétrer l'évolution temporelle des variables canoniques $q(t)$ et $p(t)$. À chaque point (q, p) de $\mathcal{T}^*\mathcal{M}$, on associe un vecteur $(\dot{q}, -\dot{p}) = (\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}, \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q})$. On a donc un **champ de vecteurs** \mathcal{V} sur l'espace des phases, qui forment une famille constituant un **flot hamiltonien**.

Ce champ de vecteurs possède une propriété essentielle : c'est le théorème de **Liouville** [31]

Le flot hamiltonien préserve les volumes dans l'espace des phases.

Autrement dit, un volume d'hypersurface à énergie constante,

$$\Omega = \int d^3 \mathbf{q}_1 \int d^3 \mathbf{p}_1 \dots \int d^3 \mathbf{p}_n \delta(E - \mathcal{H}(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n)), \quad (3.2)$$

est conservé lors de l'évolution temporelle du système. Ce théorème très puissant nous indique que si l'on définit une densité de probabilité $\rho(p, q)$ par la probabilité $\rho(p, q) d^N q d^N p$ de rencontrer l'état du système dans un volume infinitésimal $d^N q d^N p$, alors cette probabilité est conservée dans le temps :

$$\frac{d\rho}{dt} = 0. \quad (3.3)$$

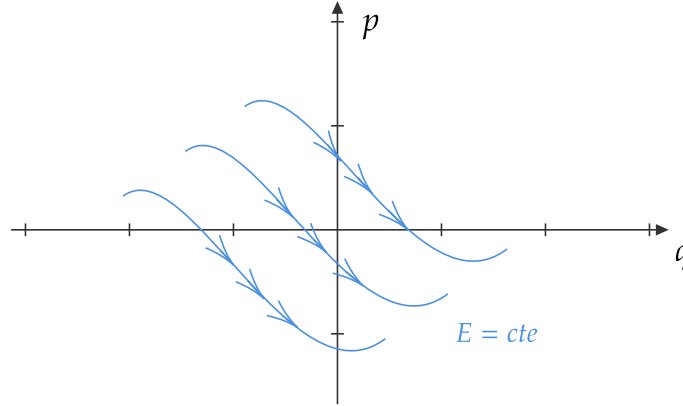


FIGURE 3.4 – Une famille de courbes d'énergie constantes peut se voir comme un flot.

Dès lors, on peut montrer (voir Annexe B) que l'évolution temporelle de la densité de probabilité est régie par les crochets de Poisson de l'hamiltonien avec cette dernière. Ce résultat est généralisable pour une observable quelconque A de l'espace des phases et l'on obtient :

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{\mathcal{H}, A\}. \quad (3.4)$$

Cette dernière équation nous permet de conclure la section : nous avons trouvé une manière de définir l'évolution temporelle d'une observable (formellement une fonction quelconque de l'espace des phases) à partir de l'hamiltonien du système. Un cas particulier notable de l'équation (3.4) est lorsque l'observable A est une des variables canoniques, q ou p . On retrouve directement les équations d'Hamilton au travers des correspondances $\dot{q} = \{\mathcal{H}, q\}$ et $\dot{p} = \{\mathcal{H}, p\}$.

3.1.2 Mécanique quantique

Nous allons maintenant essayer de définir la mécanique quantique dans l'espace des phases. Formellement, cela signifie que l'on veut établir une connexion entre les opérateurs représentant des observables agissant sur un espace de Hilbert, et les fonctions des variables canoniques de l'espace des phases. La majeure partie de ce formalisme fut réalisé conjointement par Hilbrand Groenewold [32] et Joe Moyal [33] en 1946.

L'équation (3.4) permet de créer un premier lien entre mécanique quantique et hamiltonienne. Dans sa thèse de doctorat, [34] Paul Dirac propose la recette de la quantification canonique : par analogie avec les crochets de Poisson qui génèrent la dynamique d'un système, le commutateur d'opérateurs doit générer l'espace des états d'un système quantique. La dynamique des opérateurs suit l'équation de Heisenberg : pour une observable \hat{A} représentée par un opérateur hermitique \hat{A} , l'évolution temporelle de \hat{A} est caractérisée par

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}(t)]. \quad (3.5)$$

On peut alors identifier le lien entre les crochets de Poisson de la mécanique classique et le commutateur de deux observables :

$$\{A, B\} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}], \quad (3.6)$$

à condition de pouvoir faire correspondre une fonction de l'espace des phases $A(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ avec un opérateur agissant sur un espace d'Hilbert $\hat{A}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}})$. On parlera du **principe de correspondance** comme la correspondance formelle entre les grandeurs classiques et les opérateurs quantiques. À noter que les produits scalaires

de variables classiques doivent être symétrisés car les opérateurs ne commutent pas forcément¹. Ainsi, on associe à la position \mathbf{r} et à l'impulsion \mathbf{p} d'une particule les opérateurs hermitiques $\hat{\mathbf{r}}$ et $\hat{\mathbf{p}}$ vérifiant la relation de commutation canonique $[\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{p}}_j] = i\hbar\delta_{ij}$.

Quantification de Weyl

On va maintenant essayer de mettre en évidence une expression reliant un opérateur et la fonction de l'espace des phases associé [35]. Supposons une observable classique que l'on quantifie selon la prescription de Dirac :

$$A(x) \rightarrow \hat{A} \equiv A(\hat{x}). \quad (3.7)$$

Par définition de la distribution de Dirac $\delta(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int_{\mathbb{R}^N} e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot x} d^N \xi$, on réécrit

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \int_{\mathbb{R}^N} A(x) \delta(x - \hat{x}) d^N x \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} A(x) e^{\frac{i}{\hbar}\xi \cdot (x - \hat{x})} d^N x d^N \xi, \end{aligned} \quad (3.8)$$

où ξ a les dimensions d'une impulsion. On généralise cette formule dans le cas d'une fonction dépendant conjointement de x et de p en faisant particulièrement attention au produit symétrique évoqué un peu plus tôt et on obtient

$$\hat{A} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} A(p, x) e^{\frac{i}{\hbar}[\xi(x - \hat{x}) + y(p - \hat{p})]} d^N \xi d^N y d^N p d^N x. \quad (3.9)$$

On appelle généralement $A(p, x)$ le **symbole de Weyl** de \hat{A} . La quantification de Weyl consiste en la mise en évidence d'une expression pour l'application de \hat{A} sur une fonction d'onde ψ . Pour ce faire, on se place en représentation de Schrödinger et après quelques changements de variables, on obtient

$$(\hat{A}\psi)(z) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} A(p, \frac{z+x}{2}) e^{\frac{i}{\hbar}p(z-x)} \psi(x) d^N p d^N x. \quad (3.10)$$

En fait, on peut identifier cette équivalence par une **transformation intégrale**[36], qui associe une fonction à une autre par intégration comme suit : $g(x) = \int_a^b K(x, y) f(y) dy$. On identifie K moyennant un changement de variables $X = \frac{x+y}{2}$ et $z = x - y$:

$$K(X + \frac{z}{2}, X - \frac{z}{2}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int_{\mathbb{R}^N} A(p, X) e^{\frac{i}{\hbar}pz} d^N p. \quad (3.11)$$

Ainsi, par transformation de Fourier inverse, on peut réexprimer le symbole de \hat{A} en fonction de K :

$$A(p, x) = \int_{\mathbb{R}^N} K\left(X + \frac{z}{2}, X - \frac{z}{2}\right) e^{-\frac{i}{\hbar}pz} d^N z. \quad (3.12)$$

On peut donc librement exprimer un opérateur en fonction de son équivalent dans l'espace des phases. On est maintenant en mesure de représenter les observables dans l'espace des phases, mais il nous manque toujours un moyen d'exprimer une fonction d'onde dans cet espace.

1. C'est à dire qu'à un produit $\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$ sera associé le produit symétrique $\frac{1}{2}(\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}})$.

3.2 La fonction de Wigner

Définition et propriétés

La distribution de quasi-probabilité de Wigner fut introduite par Eugene Wigner en 1932 [37]. Afin de la définir, on introduit l'opérateur de projection \hat{P}_ψ sur un état ψ :

$$(\hat{P}_\psi \phi)(x) = \psi(x) \int_{\mathbb{R}^N} \overline{\psi(y)} \phi(y) d^N y. \quad (3.13)$$

La fonction de Wigner est le symbole de ce projecteur :

$$W[\psi](p, x) = \int_{\mathbb{R}^N} \psi\left(x + \frac{z}{2}\right) \overline{\psi\left(x - \frac{z}{2}\right)} e^{-\frac{i}{\hbar} p z} d^N z, \quad (3.14)$$

ou encore en fonction de l'opérateur densité $\hat{\rho}$ et en termes de vecteurs :

$$W(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int d\mathbf{q} \langle \mathbf{x} + \frac{1}{2}\mathbf{q} | \hat{\rho}(t) | \mathbf{x} - \frac{1}{2}\mathbf{q} \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}}. \quad (3.15)$$

Par cette définition, l'utilité de distribution est immédiate : par transformée de Fourier inverse, on retrouve la densité de probabilité

$$|\psi(x)|^2 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int_{\mathbb{R}^N} W[\psi](p, x) d^N p. \quad (3.16)$$

La valeur moyenne d'une observable est tout aussi simple à obtenir :

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} W[\psi](p, x) A(p, x) d^N p d^N x. \quad (3.17)$$

On peut donc associer la distribution de Wigner à la distribution de probabilité dans l'espace des phases. On notera cependant que, comme l'indique la notion de quasi-probabilité, la fonction de Wigner peut prendre des valeurs négatives. Ce ne sera cependant pas un problème dans le cas des valeurs *moyennes* où elle sera positive. La fonction de Wigner évolue selon l'équation suivante :

$$\frac{\partial W(p, x, t)}{\partial t} = -\{ \{ W(p, x, t), \mathcal{H}(x, p) \} \}, \quad (3.18)$$

où l'on définit les *crochets de Moyal* par le produit éponyme \star

$$\{ \{ W(p, x, t), \mathcal{H}(x, p) \} \} = W(p, x, t) \mathcal{H}(x, p) \star \mathcal{H}(x, p), \quad (3.19)$$

avec $\star \equiv e^{i\frac{\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q)}$, les flèches sur les dérivées partielles indiquant si elles s'appliquent à leur gauche ou à leur droite. À noter que les crochets de Moyal se réduisent aux crochets de Poisson dans la limite pour $\hbar \rightarrow 0$. L'approximation consistant à identifier la fonction d'onde par la fonction de Wigner n'est valable que lors d'un temps appelé **temps de Ehrenfest**. C'est le temps après lequel le comportement d'un paquet d'ondes ne peut plus être caractérisé par une dynamique classique. Pour un système classique chaotique, le temps d'Ehrenfest fait intervenir l'exposant de Lyapunov λ et l'action typique S du système étudié : $t_E = \lambda^{-1} \ln(S/\hbar)$. On va cependant voir qu'il est possible de déterminer l'évolution de la fonction de Wigner d'une autre manière, qui sera moins sensible au temps.

Wigner, fonctions de Green et propagateurs

Cherchons l'évolution de la fonction de Wigner $W(\xi, t)$, avec $\xi = (\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Si l'on note $W(\xi, 0)$ sa valeur initiale, alors à tout instant t on a

$$W(\xi, t) = \int d^3\xi' G(\xi, \xi', t) W(\xi', 0). \quad (3.20)$$

La fonction de Wigner au temps zéro peut se réécrire en fonction de l'opérateur densité ρ_0 du système initial. En reprenant la forme (3.15), on a

$$W(\xi, 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int d\mathbf{q}_i \langle \mathbf{x}_i + \frac{1}{2}\mathbf{q}_i | \hat{\rho}_0 | \mathbf{x}_i - \frac{1}{2}\mathbf{q}_i \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{q}_i}. \quad (3.21)$$

Par transformée de Fourier inverse, on peut donc directement exprimer le bracket en fonction de $W(\xi, 0)$:

$$\langle \mathbf{x}_i + \frac{1}{2}\mathbf{q}_i | \hat{\rho}_0 | \mathbf{x}_i - \frac{1}{2}\mathbf{q}_i \rangle = \int d\mathbf{p}_i W(\xi, 0) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{q}_i}. \quad (3.22)$$

L'évolution temporelle de l'opérateur densité est régie par l'application d'un opérateur unitaire U . Or, comme on l'a vu, l'application de cet opérateur sur un état revient à utiliser un propagateur. On a

$$\begin{aligned} W(\xi, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int d\mathbf{q} \langle \mathbf{x} + \frac{1}{2}\mathbf{q} | U \hat{\rho}_0 U^\dagger | \mathbf{x} - \frac{1}{2}\mathbf{q} \rangle e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p} \cdot \mathbf{q}} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int d\mathbf{q} d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 K(\mathbf{x}_f + \frac{1}{2}\mathbf{q}, \mathbf{y}_1, t) \langle y_0 | \hat{\rho}_0 | y_2 \rangle K^*(\mathbf{x}_f - \frac{1}{2}\mathbf{q}, \mathbf{y}_2, t) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

On peut alors identifier la fonction de Green d'évolution de la fonction de Wigner :

$$G(\xi, \xi', t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int d\mathbf{q} d\mathbf{q}' K(\mathbf{x}_f + \frac{1}{2}\mathbf{q}, \mathbf{x}_i + \frac{1}{2}\mathbf{q}', t) K^*(\mathbf{x}_f - \frac{1}{2}\mathbf{q}, \mathbf{x}_i - \frac{1}{2}\mathbf{q}', t) e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{q} - \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{q}').} \quad (3.24)$$

On a tout ce qu'il nous faut pour pouvoir utiliser la fonction de Wigner comme une représentation de l'évolution de la fonction d'onde dans l'espace des phases. Pour ce qui est de la distribution initiale, la méthode de Truncated Wigner va prendre comme échantillon initial une fonction d'onde satisfaisant à l'équation de Gross-Pitaevskii (1.52). Ainsi, afin d'avoir une description complète de l'évolution d'un système quantique dans l'espace des phases, il ne nous manque plus qu'à identifier le propagateur élémentaire K .

Chapitre 4

Le propagateur de Van Vleck-Gutzwiller

Dans ce chapitre, nous allons développer l'aspect semiclassique de l'étude de l'hamiltonien de Bose-Hubbard. En effet, le propagateur de Feynman (2.49) est la porte d'entrée vers une interprétation classique d'un phénomène quantique. Le contenu de l'intégrale étant une phase à oscillation rapide du style $e^{i\lambda f(x)}$, la plupart des contributions vont s'annihiler entre elles. Les interférences constructives n'auront lieu que pour des fréquences petites, il n'y a donc que ces dernières qui contribueront à l'intégrale. On identifie formellement ces régions aux endroits où la fonction ne varie que peu, c'est à dire $\delta f(x) = 0$. L'approximation consistant à se réduire aux endroits où la phase varie peu se nomme l'approximation de phase stationnaire. Nous allons mettre en évidence cette approximation dans le cadre usuel où elle est exacte, puis nous la particulariserons afin d'obtenir une expression sans erreur pour l'hamiltonien de Bose-Hubbard.

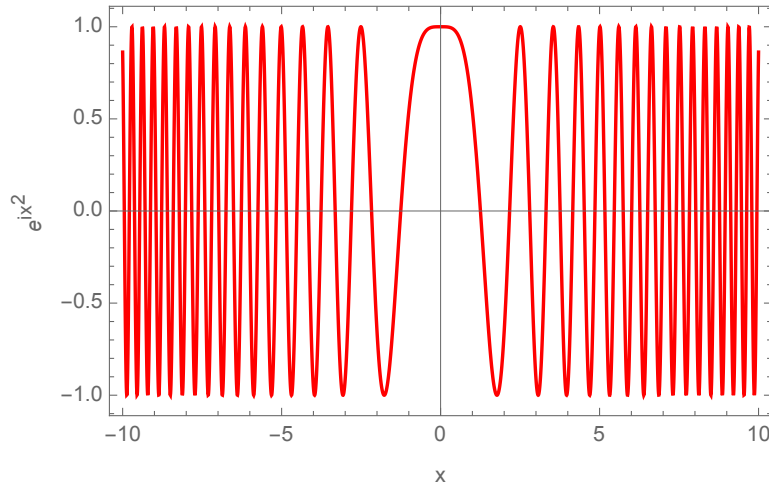


FIGURE 4.1 – Partie réelle d'une fonction oscillante rapide, e^{ix^2} . La plupart des contributions pour x s'éloignant de 0 s'annulent entre elles lorsque l'on intègre la fonction.

4.1 Approximation de la phase stationnaire

Supposons une intégrale de la forme

$$I = \int d\phi e^{i\nu S(\phi)} g(\phi), \quad (4.1)$$

avec ν supposé grand, g une fonction quelconque et ϕ un vecteur à N dimensions, de composantes ϕ_j . L'intégrale $d\phi$ est en fait N intégrales à 1 dimension :

$$\int d\phi = \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_N. \quad (4.2)$$

Prenons un point ϕ_{cl} tel que le gradient de S s'annule : $\frac{\partial}{\partial \phi_i} S(\phi_{cl}) = 0$. On nomme ce point un **point stationnaire** (PS). A priori, les points stationnaires sont multiples et sont distribués de manière équivalente dans l'espace des phases. Afin de pouvoir découper l'intervalle d'intégration en plusieurs sous-domaines comportant chacun un unique P.S., on suppose que les points nous intéressant sont suffisamment éloignés les uns des autres que pour éviter d'avoir des effets de bord. Développons en série de Taylor la fonction S autour d'un point stationnaire ϕ_{cl} :

$$\begin{aligned} S(\phi) \approx & S(\phi_{cl}) + (\phi - \phi_{cl})_i \left. \frac{\partial S(\phi)}{\partial \phi_i} \right|_{\phi=\phi_{cl}} \\ & + \frac{1}{2} (\phi - \phi_{cl})_i (\phi - \phi_{cl})_j \left. \frac{\partial^2 S(\phi)}{\partial \phi_i \partial \phi_j} \right|_{\phi=\phi_{cl}} \\ & + \frac{1}{6} (\phi - \phi_{cl})_i (\phi - \phi_{cl})_j (\phi - \phi_{cl})_k \left. \frac{\partial^3 S(\phi)}{\partial \phi_i \partial \phi_j \partial \phi_k} \right|_{\phi=\phi_{cl}} \\ & + \frac{1}{24} (\phi - \phi_{cl})_i (\phi - \phi_{cl})_j (\phi - \phi_{cl})_k (\phi - \phi_{cl})_l \left. \frac{\partial^4 S(\phi)}{\partial \phi_i \partial \phi_j \partial \phi_k \partial \phi_l} \right|_{\phi=\phi_{cl}}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

sans oublier que, par définition d'un point stationnaire, la dérivée première de S par rapport à ϕ évaluée en ϕ_{cl} est nulle. En prévision de l'application à l'hamiltonien de Bose-Hubbard qui présente une dépendance en la quatrième puissance des variables canoniques, on a développé au quatrième ordre. A l'avenir, on notera pour plus de lisibilité

$$\Delta \phi_i \equiv (\phi - \phi_{cl})_i, \quad (4.4)$$

$$\mathcal{D}_{ij} \equiv \left. \frac{\partial^2 S(\phi)}{\partial \phi_i \partial \phi_j} \right|_{\phi=\phi_{cl}}, \quad (4.5)$$

$$\mathcal{D}_{ijk} \equiv \left. \frac{\partial^3 S(\phi)}{\partial \phi_i \partial \phi_j \partial \phi_k} \right|_{\phi=\phi_{cl}}, \quad (4.6)$$

$$\mathcal{D}_{ijkl} \equiv \left. \frac{\partial^4 S(\phi)}{\partial \phi_i \partial \phi_j \partial \phi_k \partial \phi_l} \right|_{\phi=\phi_{cl}}. \quad (4.7)$$

On peut alors réécrire l'intégrale (4.1) avec ce développement :

$$I = e^{i\nu S(\phi_{cl})} g(\phi_{cl}) \int d\Delta \phi e^{i\nu \sum_{ijkl} [\frac{1}{2} \Delta \phi_i \mathcal{D}_{ij} \Delta \phi_j + \frac{1}{6} \Delta \phi_i \Delta \phi_j \Delta \phi_k \mathcal{D}_{ijk} + \frac{1}{24} \Delta \phi_i \Delta \phi_j \Delta \phi_k \Delta \phi_l \mathcal{D}_{ijkl}]}. \quad (4.8)$$

en notant que l'intégration se fait sur les N coordonnées ϕ , il y a donc N intégrales cachées derrière la notation $\int d\Delta \phi \equiv \int d\Delta \phi_1 \int d\Delta \phi_2 \dots \int d\Delta \phi_N$. En considérant que les ordres 3 et 4 sont des petites corrections par rapport au second ordre, on peut développer les nouvelles exponentielles elles-mêmes en série et obtenir

$$\begin{aligned} I \approx & e^{i\nu S(\phi_{cl})} g(\phi_{cl}) \int d\Delta \phi e^{\frac{i\nu}{2} \sum_{ij} \Delta \phi_i \mathcal{D}_{ij} \Delta \phi_j} \\ & \left[1 + i\nu \left(\frac{1}{6} \sum_{klm} \Delta \phi_k \Delta \phi_l \Delta \phi_m \mathcal{D}_{klm} + \frac{1}{24} \sum_{klmn} \Delta \phi_k \Delta \phi_k \Delta \phi_l \Delta \phi_m \Delta \phi_n \mathcal{D}_{klmn} \right) \right. \\ & \left. - \nu^2 \left(\sum_{klm} \frac{1}{6} \Delta \phi_k \Delta \phi_l \Delta \phi_m \mathcal{D}_{klm} + \frac{1}{24} \sum_{klmn} \Delta \phi_k \Delta \phi_k \Delta \phi_l \Delta \phi_m \Delta \phi_n \mathcal{D}_{klmn} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Nous allons procéder ordre par ordre, que nous noterons I_A , I_B et I_C . Par la suite, on omettra $g(\phi_{cl})$ étant donné que cette fonction vaut 1 dans le cadre du développement du propagateur de Feynman.

4.1.1 Second ordre

Dans un premier temps, nous allons calculer le second ordre qui est habituellement utilisé pour l'approximation de phase stationnaire. On cherche donc à calculer l'intégrale

$$I_A = e^{i\nu S(\phi_{cl})} \int d\Delta\phi e^{\frac{i\nu}{2} \sum_{ij} \Delta\phi_i \mathcal{D}_{ij} \Delta\phi_j}. \quad (4.10)$$

La matrice des dérivées secondes \mathcal{D}_{ij} est réelle et symétrique : elle est donc diagonalisable et possède un ensemble complet de vecteurs propres v_n tels que

$$\sum_i \mathcal{D}_{ij} v_n^j = \lambda_n v_n^i, \quad (4.11)$$

où λ_n est la valeur propre associée au vecteur propre v_n . Ce sont les vecteurs de base du sous-espace propre de \mathcal{D}_{ij} , nous sommes libre de les choisir normalisés et orthogonaux :

$$\sum_i v_m^i v_n^i = \delta_{mn}. \quad (4.12)$$

Pour la suite du développement, il est utile de réexprimer nos coordonnées $\Delta\phi_i$ dans la base des vecteurs propres de \mathcal{D}_{ij} . Dans cette dernière, la matrice des dérivées secondes est diagonale. On décompose donc $\Delta\phi_i = \sum_n a_n v_n^i$, et nous devons regarder l'impact que ce changement de variable a sur l'argument de l'exponentielle :

$$\sum_{i,j} \Delta\phi_i \mathcal{D}_{ij} \Delta\phi_j = \sum_{n,m} a_n a_m \sum_{i,j} v_m^i \mathcal{D}_{ij} v_n^j \quad (4.13)$$

$$= \sum_{n,m} a_n a_m \lambda_n \sum_i v_m^i v_n^i \quad (4.14)$$

$$= \sum_n a_n^2 \lambda_n. \quad (4.15)$$

Ce changement de variable a aussi une influence sur la variable d'intégration :

$$\prod_i \int d\Delta\phi_i = \det(v) \prod_n \int da_n. \quad (4.16)$$

Mais comme les vecteurs propres v de la matrice \mathcal{D}_{ij} sont orthonormés, le déterminant vaut 1. De plus, on réécrit la somme dans l'exponentielle comme un produit que l'on inclut dans la multiplication des intégrales¹. Finalement, après ce premier changement de variables, l'intégrale I_A se réécrit :

$$I_A = e^{i\nu S(\phi_{cl})} \prod_n \int da_n e^{i\nu \frac{1}{2} \lambda_n a_n^2}. \quad (4.17)$$

Il ne reste plus qu'à résoudre les N intégrales indépendantes. Pour ce faire, on effectue le changement de variables $a_n \rightarrow \sqrt{\frac{2i}{\lambda_n \nu}} \xi_n$ afin de se retrouver avec une intégrale connue :

$$\int d\xi_n e^{-\xi_n^2} = \sqrt{\pi}. \quad (4.18)$$

1. En effet, $\int dx_1 \int dx_2 e^{x_1^2 + x_2^2} = \int dx_1 \int dx_2 e^{x_1^2} e^{x_2^2} = \int dx_1 e^{x_1^2} \int dx_2 e^{x_2^2} = \prod_{i=1}^2 \int dx_i e^{x_i^2}$. Comme les variables x_i sont indépendantes, il n'y a aucun problème à séparer les intégrales.

On obtient alors une expression nettement plus simple, faisant intervenir un produit sur l'ensemble valeurs propres λ_n :

$$I_A = e^{i\nu S(\phi_{cl})} \prod_n \sqrt{\frac{2\pi i}{\lambda_n \nu}}. \quad (4.19)$$

Il y a cependant une subtilité : rien n'interdit aux valeurs propres λ_n d'être négatives, ce qui pose un problème vu leur puissance $-1/2$. Heureusement, la présence du nombre complexe i va nous sauver. Supposons qu'aucune valeur propre ne soit négative : on a un simple produit de N fois i : $\sqrt{i}^N = \sqrt{e^{i\frac{\pi}{2}}}^N = e^{i\frac{\pi}{4}N}$. Si maintenant, seule la valeur propre λ_j est négative : il faut que l'on puisse annuler son signe afin de ne pas avoir de souci. On a $\sqrt{(-1)i}^N = \sqrt{(i)^2(i)}^N = e^{i\frac{\pi}{2}} e^{i\frac{\pi}{4}N}$. On aura donc un facteur $e^{i\frac{\pi}{2}}$ pour chaque valeur propre négative. On introduit l'index de Morse μ [38], qui va compter la dimension du sous-espace contenant toutes les valeurs propres négatives et permettra de compenser les $\lambda < 0$. Si on note β la différence entre le nombre de valeurs propres positives et négatives et que l'on somme sur chaque point stationnaire,

$$\sum_{j=1}^d \sqrt{i}^N e^{-i\frac{\pi}{2}\beta_j} = \sum_{j=1}^d e^{\frac{i\pi}{2}\frac{N}{2}} e^{-\frac{i\pi}{2}\beta_j} \quad (4.20)$$

$$= \sum_{j=1}^d e^{\frac{i\pi}{4}(N-2\beta_j)} \quad (4.21)$$

$$= \sum_{j=1}^d e^{\frac{i\pi}{4}\mu_j}. \quad (4.22)$$

Le problème des valeurs propres négatives étant maintenant réglé, on met en évidence le déterminant de la matrice \mathcal{D} via le produit de ses valeurs propres. C'est un résultat que l'on réutilisera plus tard, qui est bien connu de l'algèbre linéaire : si les λ_i sont les N valeurs propres d'une matrice \mathcal{D} ,

$$\prod_{i=1}^N \lambda_i = \det(\mathcal{D}). \quad (4.23)$$

Nous y sommes presque. Nous avons, au début du développement, découpé les domaines d'intégration de manière à ne comprendre qu'un seul point stationnaire par domaine. Ainsi, il ne nous reste plus qu'à sommer les intégrales afin de couvrir l'espace tout entier. Finalement, nous avons l'approximation de phase stationnaire à N dimensions et d points stationnaires :

$$I_A = \sum_{i=1}^d e^{i\nu S(\phi_{cl,i})} \frac{1}{\sqrt{\det(\mathcal{D})}} \left[\frac{2\pi}{\nu} \right]^{N/2} e^{\frac{i\pi}{4}\mu_i}. \quad (4.24)$$

Ce résultat est bien connu et s'avère être exact dans le cas d'une dépendance quadratique de l'hamiltonien envers les variables canoniques. En effet, la matrice \mathcal{D} étant constituée des dérivées secondes de l'hamiltonien, l'étude d'une particule libre ou plongée dans un potentiel harmonique trouve un résultat exacte dans cette approximation. Ce n'est plus le cas lorsque la dépendance est dans une plus grande puissance comme dans la situation d'un hamiltonien de Bose-Hubbard. Nous allons donc maintenant pousser le développement plus loin, et tenter de déterminer quelles sont les conditions pour que les ordres suivants ne soient que des petites corrections. L'important ici, au delà de l'exactitude de la solution, c'est que nous ayons réussi à exprimer une intégrale du même type que celle du propagateur de Feynman (2.49) en un résultat simple ne demandant que de calculer la matrice Hessienne de l'action S .

Il est maintenant temps de revenir au propagateur de Feynman (2.49) établi dans le chapitre 2. Ce dernier prend exactement la forme de l'intégrale postulée dans le cadre du développement de l'approximation de phase stationnaire. L'action S est en réalité la fonction principale d'Hamilton R_γ pour la trajectoire γ . Mais que sont ces chemins dont on parle? Comment sélectionne-t-on les fonctions R qui représentent un intérêt pour l'étude physique d'un système? La réponse fût déjà présentée dans l'introduction de ce mémoire : le principe de moindre action. C'est cette loi qui va dicter quelles sont les actions R_γ qui traduisent une réalité physique. Ainsi, l'ensemble des points *stationnaires* $\phi_{cl,i}$ sont en fait l'ensemble des points (\mathbf{q}, \mathbf{p}) dont l'évolution temporelle est dictée par les équations d'Hamilton. C'est là que la notion de trajectoire trouve sa définition : une trajectoire γ est un ensemble de points $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ dont l'évolution temporelle est régie par les équations d'Hamilton. Comme l'a montré Cécile Morette en 1951, il est possible d'exprimer le préfacteur comme le déterminant des dérivées secondes de la fonction principale d'Hamilton [26]. Cette nouvelle expression porte le nom de propagateur de **Van Vleck-Gutzwiller** :

$$K(\mathbf{q}, \mathbf{q}_f) = \sum_{\gamma} \left(\frac{\nu}{2\pi} \right)^{N/2} \sqrt{\det \frac{\partial^2 R_\gamma}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{q}_f}} e^{i\nu R_\gamma + \frac{i\pi}{4}\mu} \quad (4.25)$$

premièrement dérivé par Van Vleck sous des considérations statistiques, puis amélioré par Gutzwiller grâce au coefficient de Morse [27]. Nous sommes donc passés d'une intégrale sur toutes les variables de l'espace des phases à une somme sur toutes les trajectoires **physiques**.

À quoi ressemble la matrice \mathcal{D} ? Il s'agit de la matrice Hessienne de S , c'est à dire la matrice des dérivées secondes, que l'on évaluera en $\phi = \phi_{cl}$.

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S}{\partial \phi_1^2} & \frac{\partial^2 S}{\partial \phi_1 \partial \phi_2} & \cdots & \frac{\partial^2 S}{\partial \phi_1 \partial \phi_N} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial \phi_2 \partial \phi_1} & \frac{\partial^2 S}{\partial \phi_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 S}{\partial \phi_2 \partial \phi_N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 S}{\partial \phi_N \partial \phi_1} & \frac{\partial^2 S}{\partial \phi_N \partial \phi_2} & \cdots & \frac{\partial^2 S}{\partial \phi_N^2} \end{pmatrix}.$$

Cette matrice n'est pas diagonale pour l'hamiltonien de Bose-Hubbard, il est donc pertinent de pousser le développement plus loin. On peut cependant se donner une intuition de sa forme en l'étudiant dans le cas d'une dimension 2. Les variables sont alors q et p , et l'action à dériver est donnée par la fonction principale d'Hamilton $R = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^{\infty} \mathcal{L} \delta t$, où $\mathcal{L} = p \cdot \frac{(q' - q)}{\delta t} - \mathcal{H}$ comme défini dans l'équation (2.27). On calcule alors

$$\mathcal{D}_{11} = -\delta t \partial_q^2 \mathcal{H} = -\delta t \left[\mathcal{E} \frac{m\omega}{\hbar} + \frac{1}{2} \mathcal{U} \left[\left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^2 12q^2 - \frac{2m\omega}{\hbar} \right] + \frac{\mathcal{U}}{2\hbar^2} p^2 \right], \quad (4.26)$$

$$\mathcal{D}_{12} = -1 - \delta t \partial_q \partial_p \mathcal{H} = -1 - \delta t \frac{\mathcal{U}}{4\hbar^2} (q \cdot p + p \cdot q) = \mathcal{D}_{2,1}, \quad (4.27)$$

$$\mathcal{D}_{22} = -\delta t \partial_p^2 \mathcal{H} = -\delta t \left[\mathcal{E} \frac{1}{m\omega\hbar} + \frac{\mathcal{U}}{2} \left[12 \left(\frac{1}{2m\omega\hbar} \right)^2 p^2 - \frac{2}{m\omega\hbar} \right] + \frac{\mathcal{U}}{2\hbar^2} q^2 \right], \quad (4.28)$$

On obtient donc une matrice proche de l'unité à laquelle on soustrait une correction proportionnelle à δt :

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

$$- \delta t \begin{pmatrix} \mathcal{E} \frac{m\omega}{\hbar} + \frac{1}{2} \mathcal{U} \left[\left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^2 12q^2 - \frac{2m\omega}{\hbar} \right] + \frac{\mathcal{U}}{2\hbar^2} p^2 & \frac{\mathcal{U}}{4\hbar^2} (q \cdot p + p \cdot q) \\ \frac{\mathcal{U}}{4\hbar^2} (q \cdot p + p \cdot q) & \mathcal{E} \frac{1}{m\omega\hbar} + \frac{\mathcal{U}}{2} \left[12 \left(\frac{1}{2m\omega\hbar} \right)^2 p^2 - \frac{2}{m\omega\hbar} \right] + \frac{\mathcal{U}}{2\hbar^2} q^2 \end{pmatrix}.$$

Le spectre de cette matrice sera dès lors composé d'une constante et vecteur propre/valeur propre proportionnel à δt .

4.1.2 Troisième ordre

On cherche maintenant à résoudre l'intégrale

$$I_B = i\nu e^{i\nu S(\phi_{cl})} \int d\Delta\phi e^{\frac{i\nu}{2} \sum_{ij} \Delta\phi_i \mathcal{D}_{ij} \Delta\phi_j} \sum_{klmn} \left[\frac{1}{6} \Delta\phi_k \Delta\phi_l \Delta\phi_m \mathcal{D}_{klm} + \frac{1}{24} \Delta\phi_k \Delta\phi_l \Delta\phi_m \Delta\phi_n \mathcal{D}_{klmn} \right] \quad (4.30)$$

Les changements notables de ce terme par rapport à I_A sont l'apparition des tenseurs \mathcal{D}_{klm} et \mathcal{D}_{klmn} , ainsi que l'apparition des variables d'intégration dans l'intégrand. Il y a cependant une simplification directe : le terme en $\Delta\phi^3$ rend l'intégrand impair en la variable d'intégration. Par un résultat très classique de l'analyse, l'intégration sur un domaine symétrique d'une fonction impaire sur le domaine vaut zéro. On se débarrasse donc instantanément du premier terme, il ne nous reste plus qu'à calculer le deuxième.

Comme pour le premier ordre, on va se placer dans les coordonnées où la matrice \mathcal{D} est diagonale. On effectue donc le changement $\Delta\phi_i = \sum_{\alpha} a_{\alpha} v_{\alpha}^i$ et $\int d\Delta\phi_i = \det(v) \int da_i$,

$$I_B = \frac{i\nu}{24} e^{i\nu S(\phi_{cl})} \int d\Delta\phi e^{\frac{i\nu}{2} \sum_{ij} \Delta\phi_i \mathcal{D}_{ij} \Delta\phi_j} \sum_{klmn} \Delta\phi_k \Delta\phi_l \Delta\phi_m \Delta\phi_n \mathcal{D}_{klmn} \quad (4.31)$$

$$= \frac{i\nu}{24} e^{i\nu S(\phi_{cl})} \prod_n \int da_n e^{\frac{i\nu}{2} \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} a_{\alpha} a_{\beta} v_{\alpha}^i \mathcal{D}_{ij} v_{\beta}^j} \sum_{klmn} \sum_{\gamma\delta\epsilon\theta} a_{\gamma} a_{\delta} a_{\epsilon} a_{\theta} v_{\gamma}^k v_{\delta}^l v_{\epsilon}^m v_{\theta}^n \mathcal{D}_{klmn} \quad (4.32)$$

$$= \frac{i\nu}{24} e^{i\nu S(\phi_{cl})} \prod_n \int da_n e^{\frac{i\nu}{2} \sum_{\alpha} a_{\alpha}^2 \lambda_{\alpha}} \sum_{klmn} \sum_{\gamma\delta\epsilon\theta} a_{\gamma} a_{\delta} a_{\epsilon} a_{\theta} v_{\gamma}^k v_{\delta}^l v_{\epsilon}^m v_{\theta}^n \mathcal{D}_{klmn}. \quad (4.33)$$

Encore une fois, on passera la somme de l'argument dans le produit des intégrales.

On se retrouve avec une expression nettement plus complexe à résoudre que pour l'intégrale I_A . En physique théorique, il est commun d'étudier un système dans une version simplifiée (par exemple en dimension finie) afin d'essayer de repérer un motif qui pourrait se répéter lorsque la complexité augmente. Essayons dès lors de traiter I_B en se contentant d'un sous-espace propre de dimension 2 :

$$I_{B,2} = \frac{i\nu}{24} e^{i\nu S(\phi_{cl})} \sum_{klmn} \int da_1 \int da_2 e^{\frac{i\nu}{2} (a_1^2 \lambda_1 + a_2^2 \lambda_2)} V \mathcal{D}_{klmn}, \quad (4.34)$$

où V est une somme des différentes combinaisons possibles de vecteurs propres. On note $a_{\alpha\beta\gamma\delta} \equiv a_{\alpha} a_{\beta} a_{\gamma} a_{\delta}$ et $v_{\alpha\beta\gamma\delta}^{ijkl} \equiv v_{\alpha}^i v_{\beta}^j v_{\gamma}^k v_{\delta}^l$ pour alléger la notation. On a donc

$$V = a_{1111} v_{1111}^{klmn} + a_{2222} v_{2222}^{klmn} + \sum_{\substack{\text{permutations} \\ ij}} \left(a_{iii} v_{iii}^{klmn} + a_{iij} v_{iij}^{klmn} + a_{ijj} v_{ijj}^{klmn} \right) \quad (4.35)$$

$$= (a_1)^4 v_{1111}^{klmn} + (a_2)^4 v_{2222}^{klmn} + \sum_{\substack{\text{permutations} \\ ij}} \left(a_i^3 a_j v_{iii}^{klmn} + a_i^2 a_j^2 v_{iij}^{klmn} + a_i a_j^3 v_{ijj}^{klmn} \right). \quad (4.36)$$

L'intégrale $I_{B,2}$ peut donc se réécrire

$$\begin{aligned}
 I_{B,2} = \frac{i\nu}{24} e^{i\nu S(\phi_{cl})} & \left[\int da_1 e^{\frac{i\nu}{2} a_1^2 \lambda_1} a_1^4 v_{1111}^{klmn} \int da_2 e^{\frac{i\nu}{2} a_2^2 \lambda_2} \right. \\
 & + \int da_1 e^{\frac{i\nu}{2} a_1^2 \lambda_1} \int da_2 e^{\frac{i\nu}{2} a_2^2 \lambda_2} a_2^4 v_{2222}^{klmn} \\
 & + \int da_1 e^{\frac{i\nu}{2} a_1^2 \lambda_1} a_1^3 \int da_2 e^{\frac{i\nu}{2} a_2^2 \lambda_2} a_2 \left(\sum_{\substack{\text{permutations} \\ ij}} v_{iijj}^{klmn} \right) \\
 & + \int da_1 e^{\frac{i\nu}{2} a_1^2 \lambda_1} a_1^2 \int da_2 e^{\frac{i\nu}{2} a_2^2 \lambda_2} a_2^2 \left(\sum_{\substack{\text{permutations} \\ ij}} v_{iijj}^{klmn} \right) \\
 & \left. + \int da_1 e^{\frac{i\nu}{2} a_1^2 \lambda_1} a_1 \int da_2 e^{\frac{i\nu}{2} a_2^2 \lambda_2} a_2^3 \left(\sum_{\substack{\text{permutations} \\ ij}} v_{ijjj}^{klmn} \right) \right]. \quad (4.37)
 \end{aligned}$$

Comme les vecteurs propres commutent, la somme sur les permutations se résume à compter le nombre d'arrangements en prenant en compte les répétitions. On peut réécrire l'intégrale de la somme comme la somme des intégrales et on a

$$I_{B,2} = \sum_{\beta\gamma\delta\epsilon=1}^2 \prod_{\alpha=1}^2 \int da_{\alpha} e^{\frac{i\nu}{2} a_{\alpha}^2 \lambda_{\alpha}} a_{\beta} a_{\gamma} a_{\delta} a_{\epsilon} v_{\beta\gamma\delta\epsilon}^{klmn}. \quad (4.38)$$

Ainsi, sortir la somme de l'intégrale reviendra à compter plus judicieusement les différents arrangement entre vecteurs propres. Comme ici nous n'avons pas de règle de sélection particulière, il n'y a aucun souci. On peut généraliser à N dimensions et on obtient

$$I_B = \frac{i\nu}{24} e^{i\nu S(\phi_{cl})} \sum_{klmn} \mathcal{D}_{klmn} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \prod_n \int da_n e^{\frac{i\nu}{2} a_n^2 \lambda_n} a_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta}^{klmn}. \quad (4.39)$$

C'est déjà une forme un peu plus appréciable. On peut dès à présent mettre en évidence que les seules intégrales qui vont contribuer sont celles pour lesquelles les indices grecs sont égaux en paires ou tous égaux. Les autres cas se retrouvant dans la catégorie des intégrales de fonctions impaires sur un domaine symétrique, ils s'annulent. On connaît déjà le cas où il n'y a pas de facteur devant l'exponentielle,

$$\int da e^{\frac{i\nu}{2} a^2 \lambda} = \sqrt{\frac{2\pi i}{\lambda\nu}}. \quad (4.40)$$

Le cas suivant est celui où un facteur a^2 est présent dans l'intégrale :

$$\int da e^{\frac{i\nu}{2} a^2 \lambda} a^2. \quad (4.41)$$

Factuellement, cette intégrale diverge. Nous sommes obligés d'utiliser une astuce pour la rendre calculable :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int da e^{(i-\epsilon)\frac{\nu}{2} a^2 \lambda} a^2 = \sqrt{\frac{2\pi}{i\nu^3}} \lambda^{-3/2}. \quad (4.42)$$

Par le même procédé, on a aussi le cas où la puissance de a est quatrième :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int da e^{(i-\epsilon)\frac{\nu}{2}a^2\lambda} a^4 = 3\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu^5}} \lambda^{-5/2}. \quad (4.43)$$

On est maintenant en mesure de calculer I_B . Prenons d'abord le cas où tous les coefficients grecs sont égaux à α . La seule intégrale qui va être différente de (4.40) est celle où $n = \alpha$.

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} \int da_{\alpha} e^{\frac{i\nu}{2}a_{\alpha}^2\lambda_{\alpha}} a_{\alpha}^4 \prod_{n \neq \alpha} \int da_n e^{\frac{i\nu}{2}a_n^2\lambda_n} \\ &= \sum_{\alpha} \left[3\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu^5}} \lambda_{\alpha}^{-5/2} \right] \prod_{n \neq \alpha} \left[\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu}} \lambda_n^{-1/2} \right] \\ &= \left[3\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu^5}} \right] \left[\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu}} \right]^{N-1} \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^{-5/2} \prod_{n \neq \alpha} \lambda_n^{-1/2}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Les deux derniers facteurs se regroupent pour former le produit de l'ensemble des valeurs propres : le déterminant de \mathcal{D}^2 ! Il reste un excès λ_{α}^{-2} qui permettra de compenser la somme sur les vecteurs propres et d'éviter une divergence. Le terme concernant a^4 prendra donc la forme suivante :

$$\left[\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu}} \right]^{N-1} \left[3\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu^5}} \right] \frac{1}{\sqrt{\det(\mathcal{D})}} \sum_{\alpha} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l v_{\alpha}^m v_{\alpha}^n}{\lambda_{\alpha}^2}. \quad (4.45)$$

En vérité, cette démarche va être la même pour les différentes contributions. Pour le cas où deux coefficients grecs sont égaux, on a

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \alpha \neq \beta}} \int da_{\alpha} e^{\frac{i\nu}{2}a_{\alpha}^2\lambda_{\alpha}} a_{\alpha}^2 \int da_{\beta} e^{\frac{i\nu}{2}a_{\beta}^2\lambda_{\beta}} a_{\beta}^2 \prod_{\substack{n \neq \alpha \\ n \neq \beta}} \int da_n e^{\frac{i\nu}{2}a_n^2\lambda_n} \\ &= \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \alpha \neq \beta}} \left[\sqrt{\frac{2\pi}{i\nu^3}} \lambda_{\alpha}^{-3/2} \right] \left[\sqrt{\frac{2\pi}{i\nu^3}} \lambda_{\beta}^{-3/2} \right] \prod_{\substack{n \neq \alpha \\ n \neq \beta}} \left[\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu}} \lambda_n^{-1/2} \right]. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Encore une fois, on peut mettre en évidence le déterminant de \mathcal{D} via le produit de l'entierité des valeurs propres. La forme de cette contribution est finalement

$$\left[\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu}} \right]^{N-2} \left[\frac{2\pi}{i\nu^3} \right] \frac{1}{\sqrt{\det(\mathcal{D})}} \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \alpha \neq \beta}} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l v_{\beta}^m v_{\beta}^n}{\lambda_{\alpha} \lambda_{\beta}}. \quad (4.47)$$

Et c'est tout ! Les termes en a^3 ou a ne vont pas contribuer car ils sont impaires. Finalement, on peut rassembler tous les morceaux et exprimer notre troisième ordre :

$$\begin{aligned} I_B = \frac{i\nu}{24} \frac{e^{i\nu S(\phi_{cl})}}{\sqrt{\det(\mathcal{D})}} \sum_{klmn} \mathcal{D}_{klmn} & \left\{ \frac{3}{4} \left[\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu}} \right]^{N-1} \sqrt{\frac{32\pi i}{\nu^5}} \sum_{\alpha} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l v_{\alpha}^m v_{\alpha}^n}{\lambda_{\alpha}^2} \right. \\ & \left. + \left[\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu}} \right]^{N-2} \left[\frac{2\pi i}{\nu^3} \right] \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \alpha \neq \beta}} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l v_{\beta}^m v_{\beta}^n}{\lambda_{\alpha} \lambda_{\beta}} \right\}. \end{aligned} \quad (4.48)$$

2. En effet, $\lambda_{\alpha}^{-5/2} \lambda_n^{-1/2} = (\lambda_{\alpha} \lambda_n)^{-1/2} \lambda_{\alpha}^{-2}$.

En mettant en évidence les facteurs communs,

$$I_B = \frac{i\nu}{24} \frac{e^{i\nu S(\phi_{cl})}}{\sqrt{\det(\mathcal{D})}} \sum_{klmn} \mathcal{D}_{klmn} \sqrt{2\pi i}^N \nu^{-\frac{N-6}{2}} \left\{ 3 \sum_{\alpha} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l v_{\alpha}^m v_{\alpha}^n}{\lambda_{\alpha}^2} + \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \alpha \neq \beta}} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l}{\lambda_{\alpha}} \frac{v_{\beta}^m v_{\beta}^n}{\lambda_{\beta}} \right\}. \quad (4.49)$$

On retrouve donc un terme plutôt similaire au second ordre, si ce n'est que cette fois on a un tenseur des dérivées quatrième. On a toujours le déterminant de \mathcal{D} qui intervient en facteur global. Une chose à remarquer, c'est qu'on obtient à chaque fois un facteur $\sqrt{2\pi i/\nu}$ élevé une puissance décroissante au fil des termes. Comme pour l'ordre précédent, essayons de trouver la forme du tenseur \mathcal{D}_{klmn} . Étant donné que ce dernier est de dimension 4, tenter de le représenter dans une projection 2D d'un espace 3D serait plus confusant qu'éclairant. On peut cependant le calculer pour une dimension 2 dans le cas de l'hamiltonien (2.27). Nous obtenons

$$\mathcal{D}_{1111} = -\delta t \partial_q^4 \mathcal{H} = -12\delta t \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^2 \mathcal{U}, \quad (4.50)$$

$$\mathcal{D}_{1112} = 0 = \mathcal{D}_{2221}, \quad (4.51)$$

$$\mathcal{D}_{1122} = -\delta t \partial_q^2 \partial_p^2 \mathcal{H} = -\delta t \frac{1}{2\hbar^2} \mathcal{U} = \mathcal{D}_{2211}, \quad (4.52)$$

$$\mathcal{D}_{2222} = -\delta t \partial_p^4 \mathcal{H} = -12\delta t \left(\frac{1}{2m\omega\hbar} \right)^2 \mathcal{U}, \quad (4.53)$$

sans oublier que vu la symétrie du tenseur, toutes les permutations d'indices sont équivalentes. Le tenseur \mathcal{D}_{klmn} est non nul uniquement si $\mathcal{U} \neq 0$, c'est à dire si les particules interagissent entre elles. Au vu des termes nuls, on a des règles de sélection sur les indices du tenseur : la somme sur $klmn$ se réduit à une somme sur k et l étant donné que les éléments correspondant à, par exemple, \mathcal{D}_{kkkl} sont nuls.

4.1.3 Quatrième ordre

Jusqu'à maintenant, nous avons mis en évidence une correction correspondant à un tenseur proportionnel à δt . Il n'est pas nécessaire de pousser le développement (4.8) plus loin étant donné que toute dérivée cinquième de l'hamiltonien est nulle. Cependant, l'ordre suivant nous renseignera sur la dépendance en δt de l'approximation, c'est à dire sa validité pour un temps plus long. Attaquons-nous dès à présent au quatrième et dernier ordre :

$$I_C = e^{i\nu S(\phi_{cl})} \int d\Delta\phi e^{\frac{i\nu}{2} \sum_{ij} \Delta\phi_i \mathcal{D}_{ij} \Delta\phi_j} \times \left[i\nu \left(\frac{1}{6} \sum_{klm} \Delta\phi_k \Delta\phi_l \Delta\phi_m \mathcal{D}_{klm} + \frac{1}{24} \sum_{klmn} \Delta\phi_k \Delta\phi_l \Delta\phi_m \Delta\phi_n \mathcal{D}_{klmn} \right) \right]^2. \quad (4.54)$$

Réécrivons le terme entre crochets en développant le carré :

$$\begin{aligned}
& -\nu^2 \left[\frac{1}{36} \sum_{\substack{klmn \\ op}} \Delta\phi_k \Delta\phi_l \Delta\phi_m \Delta\phi_n \Delta\phi_o \Delta\phi_p \mathcal{D}_{klm} \mathcal{D}_{nop} \right. \\
& + \frac{1}{72} \sum_{\substack{klmn \\ opq}} \Delta\phi_k \Delta\phi_l \Delta\phi_m \Delta\phi_n \Delta\phi_o \Delta\phi_p \Delta\phi_q \mathcal{D}_{klm} \mathcal{D}_{nopq} \\
& \left. + \frac{1}{576} \sum_{\substack{klmn \\ opqr}} \Delta\phi_k \Delta\phi_l \Delta\phi_m \Delta\phi_n \Delta\phi_o \Delta\phi_p \Delta\phi_q \Delta\phi_r \mathcal{D}_{klmn} \mathcal{D}_{opqr} \right]. \quad (4.55)
\end{aligned}$$

Premièrement, on remarque que le deuxième terme est proportionnel à $\Delta\phi^7$, qui est une puissance impaire de la variable d'intégration. Encore une fois, l'intégration d'une fonction impaire sur un intervalle paire est nulle. On ne calculera pas le terme en $\Delta\phi^8$ car les termes deviennent trop petits que pour être considérés. Comme d'habitude, on se place dans les coordonnées qui diagonalisent \mathcal{D} :

$$\prod_{\alpha} \int da_{\alpha} e^{\frac{i\nu}{2} a_{\alpha}^2 \lambda_{\alpha}} \sum_{\substack{klmnop \\ \theta\omega}} \sum_{\beta\gamma\delta\epsilon} a_{\beta} a_{\gamma} a_{\delta} a_{\epsilon} a_{\theta} a_{\omega} v_{\beta}^k v_{\gamma}^l v_{\delta}^m v_{\epsilon}^n v_{\theta}^o v_{\omega}^p. \quad (4.56)$$

On a déjà montré qu'on pouvait sortir la somme de l'intégrale, et la plupart des intégrales qu'on devra calculer sont en fait (4.40), (4.42) et (4.43). Il y a cependant cette fois le cas où a^6 , que l'on calcule de la même manière :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int da e^{\frac{(i-\epsilon)\nu}{2} a^2 \lambda} a^6 = 15 \sqrt{\frac{2\pi}{i\nu^7}} \lambda^{-7/2}. \quad (4.57)$$

De plus, on a maintenant des cas $a_{\alpha}^2 a_{\beta}^4$ et $a_{\alpha}^2 a_{\beta}^2 a_{\gamma}^2$ ainsi que leurs permutations. Ces termes se calculent assez facilement une fois qu'on a déjà les expressions des intégrales séparées :

$$\prod_{\alpha} \int da_{\alpha} e^{\frac{i\nu}{2} a_{\alpha}^2 \lambda_{\alpha}} a_{\alpha}^2 a_{\beta}^4 = \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \alpha \neq \beta}} \left[\sqrt{\frac{2\pi}{i\nu^3}} \lambda_{\alpha}^{-3/2} \right] \left[3 \sqrt{\frac{2\pi}{-i\nu^5}} \lambda_{\beta}^{-5/2} \right] \left[\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu}} \right]^{N-2} \prod_n \lambda_n^{-1/2}, \quad (4.58)$$

$$\begin{aligned}
\prod_{\alpha} \int da_{\alpha} e^{\frac{i\nu}{2} a_{\alpha}^2 \lambda_{\alpha}} a_{\alpha}^2 a_{\beta}^2 a_{\gamma}^2 &= \sum_{\substack{\alpha\beta\gamma \\ \alpha \neq \beta \neq \gamma}} \left[\sqrt{\frac{2\pi}{i\nu^3}} \lambda_{\alpha}^{-3/2} \right] \left[\sqrt{\frac{2\pi}{i\nu^3}} \lambda_{\beta}^{-3/2} \right] \left[\sqrt{\frac{2\pi}{i\nu^3}} \lambda_{\gamma}^{-3/2} \right] \\
&\quad \left[\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu}} \right]^{N-3} \prod_{n=0}^{N-3} \lambda_n^{-1/2}, \quad (4.59)
\end{aligned}$$

Finalement, l'expression complète du quatrième ordre est

$$\begin{aligned}
 I_C = & -\frac{\nu^2}{36} e^{i\nu S(\phi_{cl})} \sum_{\substack{klm \\ nop}} \mathcal{D}_{klm} \mathcal{D}_{nop} \frac{1}{\sqrt{\det(\mathcal{D})}} \left\{ \left[\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu}} \right]^{N-1} \left[15 \sqrt{\frac{2\pi}{i\nu^7}} \right] \sum_{\alpha} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l v_{\alpha}^m v_{\alpha}^n v_{\alpha}^o v_{\alpha}^p}{\lambda_{\alpha}^3} \right. \\
 & + \left[\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu}} \right]^{N-2} \left[3 \sqrt{\frac{2\pi i}{\nu^5}} \right] \left[\sqrt{\frac{2\pi}{i\nu^3}} \right] \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \neq\beta}} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l}{\lambda_{\alpha}} \frac{v_{\alpha}^m v_{\alpha}^n v_{\alpha}^o v_{\alpha}^p}{\lambda_{\beta}^2} \\
 & \left. + \left[\sqrt{\frac{2\pi i}{\nu}} \right]^{N-3} \left[\sqrt{\frac{2\pi}{i\nu^3}} \right]^3 \sum_{\substack{\alpha\beta\gamma \\ \alpha\neq\beta\neq\gamma}} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l}{\lambda_{\alpha}} \frac{v_{\beta}^m v_{\beta}^n}{\lambda_{\beta}} \frac{v_{\gamma}^o v_{\gamma}^p}{\lambda_{\gamma}} \right\}. \tag{4.60}
 \end{aligned}$$

En mettant en évidence les facteurs communs,

$$\begin{aligned}
 I_C = & \frac{i\nu^2}{36} e^{i\nu S(\phi_{cl})} \sum_{\substack{klm \\ nop}} \mathcal{D}_{klm} \mathcal{D}_{nop} \frac{1}{\sqrt{\det(\mathcal{D})}} \sqrt{2\pi i}^N \nu^{-\frac{N-6}{2}} \\
 & \times \left\{ 15 \sum_{\alpha} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l v_{\alpha}^m v_{\alpha}^n v_{\alpha}^o v_{\alpha}^p}{\lambda_{\alpha}^3} + 3 \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \neq\beta}} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l}{\lambda_{\alpha}} \frac{v_{\alpha}^m v_{\alpha}^n v_{\alpha}^o v_{\alpha}^p}{\lambda_{\beta}^2} - \sum_{\substack{\alpha\beta\gamma \\ \alpha\neq\beta\neq\gamma}} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l}{\lambda_{\alpha}} \frac{v_{\beta}^m v_{\beta}^n}{\lambda_{\beta}} \frac{v_{\gamma}^o v_{\gamma}^p}{\lambda_{\gamma}} \right\}. \tag{4.61}
 \end{aligned}$$

À quoi ressemble le tenseur \mathcal{D}_{klm} ? De la même manière que pour les cas précédents, on obtient

$$\begin{aligned}
 \mathcal{D}_{111} &= -\delta t \partial_q^3 \mathcal{H} = -12\delta t \mathcal{U} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^2 q, \\
 \mathcal{D}_{122} &= -\delta t \partial_q \partial_p^2 \mathcal{H} = -\delta t \frac{\mathcal{U}}{2\hbar^2} q, \\
 \mathcal{D}_{112} &= -\delta t \partial_q^2 \partial_p \mathcal{H} = -\delta t \frac{\mathcal{U}}{2\hbar^2} p, \\
 \mathcal{D}_{222} &= -\delta t \partial_p^3 \mathcal{H} = -12\delta t \mathcal{U} \left(\frac{1}{2m\omega\hbar} \right)^2 p.
 \end{aligned} \tag{4.62}$$

Nous sommes désormais en mesure de donner l'expression exacte de l'approximation de phase stationnaire dans le cas d'un hamiltonien de Bose-Hubbard

$$\begin{aligned}
 I = & e^{i\nu S(\phi_{cl}) + \frac{i\pi}{4} \mu_{cl}} \frac{1}{\sqrt{\det(\mathcal{D})}} \left[\sqrt{\frac{2\pi}{\nu}} \right]^N \left\{ 1 + \frac{i\nu^{-2}}{24} \sum_{klmn} \mathcal{D}_{klmn} \left[3 \sum_{\alpha} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l v_{\alpha}^m v_{\alpha}^n}{\lambda_{\alpha}^2} + \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \alpha\neq\beta}} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l}{\lambda_{\alpha}} \frac{v_{\beta}^m v_{\beta}^n}{\lambda_{\beta}} \right] \right. \\
 & + \frac{i\nu^{-1}}{36} \sum_{\substack{klm \\ nop}} \mathcal{D}_{klm} \mathcal{D}_{nop} \left[15 \sum_{\alpha} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l v_{\alpha}^m v_{\alpha}^n v_{\alpha}^o v_{\alpha}^p}{\lambda_{\alpha}^3} \right. \\
 & \left. \left. + 3 \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \neq\beta}} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l}{\lambda_{\alpha}} \frac{v_{\alpha}^m v_{\alpha}^n v_{\alpha}^o v_{\alpha}^p}{\lambda_{\beta}^2} - \sum_{\substack{\alpha\beta\gamma \\ \alpha\neq\beta\neq\gamma}} \frac{v_{\alpha}^k v_{\alpha}^l}{\lambda_{\alpha}} \frac{v_{\beta}^m v_{\beta}^n}{\lambda_{\beta}} \frac{v_{\gamma}^o v_{\gamma}^p}{\lambda_{\gamma}} \right] \right\}. \tag{4.63}
 \end{aligned}$$

Discutons de l'expression obtenue. Premièrement, le paramètre ν est supposé être grand pour que le concept d'oscillations rapides ait un sens. En comparant avec le propagateur de Feynman (2.49), on identifie ν à $1/\hbar$.

Nous sommes dans un développement semiclassique où l'on considère que \hbar est "petit" devant l'action du système [39], le paramètre $\nu = 1/\hbar$ est donc grand pour $\hbar \rightarrow 0$. Au moyen d'une analyse dimensionnelle sur la dépendance en \hbar des différents termes, on s'aperçoit que l'on décroît en puissance. Ainsi, seuls les premiers ordres prennent de l'importance pour des approches semiclassiques. On remarque par la même occasion une somme sur l'ensemble des vecteurs propres modulé par la valeur propre correspondante.

Cependant, que se passe-t-il si \hbar ne peut plus être considéré comme petit ? En l'occurrence, on remarque que tous les termes correctifs sont précédés par des tenseurs, tous proportionnels à \mathcal{U}/\hbar^2 . Si l'on introduit un paramètre semiclassique $\hbar_{eff} = \sqrt{\mathcal{U}/\mathcal{N}}$ proportionnel aux interactions \mathcal{U} et au nombre de particules \mathcal{N} , le comportement $\hbar \rightarrow 0$ est reproduit par $\mathcal{U} \rightarrow 0$ ou $\mathcal{N} \rightarrow \infty$. La limite classique est donc atteinte par une de ces deux conditions.

4.2 Approximation diagonale

Maintenant que le propagateur de Van Vleck-Gutzwiller a été établi dans le cadre de l'hamiltonien de Bose-Hubbard, nous allons voir l'utilité de ce dernier et pourquoi nous nous intéressons à sa formulation. Regardons l'évolution temporelle d'une valeur moyenne [40] :

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_t &= \langle \psi(t) | \hat{A}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t-t_0)} A(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t-t_0)} | \psi(0) \rangle \\ &= \int d\mathbf{q}_f d\mathbf{q}_i d\mathbf{q}'_i \langle \mathbf{q}'_i | \psi(0) \rangle \langle \psi(0) | \mathbf{q}_i \rangle \\ &\quad K(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}_i, t)^* A(\mathbf{q}_f, -i\hbar\partial/\partial\mathbf{q}_f) K(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}'_i, t). \end{aligned} \quad (4.64)$$

Grâce au propagateur de Van Vleck-Gutzwiller, on est en mesure de donner une expression à K et donc d'obtenir l'évolution temporelle de valeurs moyennes d'observables. Les deux propagateurs qui interviennent sont relatifs à des chemins différents : les conditions finales q_f sont fixées et sont les mêmes, mais les coordonnées initiales q_i et q'_i sont différentes. En injectant le propagateur (4.25), on obtient une double somme sur les trajectoires γ et γ' :

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_t &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int d\mathbf{q}_f d\mathbf{q}_i d\mathbf{q}' \psi(\mathbf{q}_i, 0)^* \psi(\mathbf{q}'_i, 0) \\ &\quad \times \sum_{\gamma\gamma'} \left| \det \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{q}_i \partial \mathbf{q}_f} R_\gamma(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}_i, t) \right) \right|^{1/2} \left| \det \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{q}'_i \partial \mathbf{q}_f} R_{\gamma'}(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}'_i, t) \right) \right|^{1/2} \\ &\quad \times A(\mathbf{q}_f, -i\hbar\partial/\partial\mathbf{q}_f) e^{\frac{i}{\hbar} (R_\gamma(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}_i, t) - R_{\gamma'}(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}'_i, t))}. \end{aligned} \quad (4.65)$$

Pour rappel, les trajectoires γ sont sélectionnées par les équations d'Hamilton. Seules celles respectant le principe de moindre action sont considérées : les trajectoires classiques. Nous avons donc une double somme sur les trajectoires physiques classiques, dont la différence des actions intervient dans une exponentielle complexe, une fonction oscillante. Dans le cadre de l'*approximation diagonale* [41], on ne va considérer que des trajectoires qui ne se distinguent que par une légère variation des conditions initiales. La double somme devient une simple somme sur les trajectoires $\gamma(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}_i, t)$ et $\gamma(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}'_i, t)$.

Effectuons un changement de variable de manière à nous placer dans le référentiel de centre de masse $\mathbf{q} \equiv \frac{\mathbf{q}_i + \mathbf{q}'_i}{2}$ ainsi que dans les coordonnées relatives $\mathbf{Q} \equiv \mathbf{q}_i - \mathbf{q}'_i$. Dans ce nouveau référentiel, on réexprime

$$\mathbf{q}_i \rightarrow \mathbf{q} + \frac{1}{2}\mathbf{Q} \quad \mathbf{q}'_i \rightarrow \mathbf{q} - \frac{1}{2}\mathbf{Q}, \quad (4.66)$$

et on peut réécrire la différence des actions et développer en série :

$$\begin{aligned}
 R_\gamma(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}_i, t) - R_\gamma(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}'_i, t) &= R_\gamma(\mathbf{q}_f, \mathbf{q} + \frac{1}{2}\mathbf{Q}, t) - R_\gamma(\mathbf{q}_f, \mathbf{q} - \frac{1}{2}\mathbf{Q}, t) \\
 &= 0 + \frac{1}{2} \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{q}} \mathbf{Q} - \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{q}} \mathbf{Q}\right) \\
 &\quad + \frac{1}{8} \frac{\partial^2 R_\gamma}{\partial \mathbf{q}^2} \mathbf{Q}^2 - \frac{1}{8} \frac{\partial^2 R_\gamma}{\partial \mathbf{q}^2} \mathbf{Q}^2 + \frac{1}{48} \frac{\partial^3 R_\gamma}{\partial \mathbf{q}^3} \mathbf{Q}^3 - \left(-\frac{1}{48} \frac{\partial^3 R_\gamma}{\partial \mathbf{q}^3} \mathbf{Q}^3\right) + \dots
 \end{aligned} \tag{4.67}$$

Pour plus de clarté, on note la somme sur les composantes implicitement, c'est à dire $(\partial^2 R_\gamma / \partial \mathbf{q}^2) \mathbf{Q}^2 = \sum_{ij} (\partial^2 R_\gamma / \partial q_i \partial q_j) Q_i Q_j$. Les termes correspondant aux ordres pairs ne contribuent pas car ils s'annulent entre-eux. Finalement, l'approximation diagonale se réécrit

$$R_\gamma(\mathbf{q}_f, \mathbf{q} + \frac{1}{2}\mathbf{Q}, t) - R_\gamma(\mathbf{q}_f, \mathbf{q} - \frac{1}{2}\mathbf{Q}, t) = \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}, t) \mathbf{Q} + \frac{1}{24} \frac{\partial^3 R_\gamma}{\partial \mathbf{q}^3}(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}, t) \mathbf{Q}^3 + \dots \tag{4.68}$$

Par les équations d'Hamilton, on peut déjà réexprimer la variation de R_γ comme l'impulsion du système : $\partial R_\gamma(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}, t) / \partial \mathbf{q} = -\mathbf{p}_{i,\gamma}(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}, t)$. De là, l'équation (4.65) devient

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle_t &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int d\mathbf{q}_f d\mathbf{q}_i d\mathbf{q}'_i \langle q'_i | \psi(0) \rangle \langle \psi(0) | q_i \rangle \sum_\gamma A(\mathbf{q}_f, \mathbf{p}_f, t) \\
 &\quad \times \left| \det \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{q}_f} R_\gamma(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}, t) \right| e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_{i,\gamma} \cdot (\mathbf{q}_i - \mathbf{q}'_i)}.
 \end{aligned} \tag{4.69}$$

De là, on peut identifier $\partial^2 R_\gamma(\mathbf{q}, \mathbf{q}_f, t) / \partial \mathbf{q}_f \partial \mathbf{q} = -\partial \mathbf{p}_{i,\gamma}(\mathbf{q}_f, \mathbf{q}, t) / \partial \mathbf{q}_f$ comme la matrice jacobienne du changement de variables $\mathbf{q}_f \rightarrow \mathbf{p}_i$. En se plaçant dans les coordonnées du centre de masse et les coordonnées relatives ($\mathbf{q} = \frac{(\mathbf{q}_i + \mathbf{q}'_i)}{2}$ et $\mathbf{x} = \mathbf{q}_i - \mathbf{q}'_i$), on retombe sur une fonction connue :

$$\langle A \rangle_t = \int d\mathbf{q} d\mathbf{p} A(\mathbf{q}, \mathbf{p}) W[\psi](\mathbf{q}, \mathbf{p}), \tag{4.70}$$

avec la fonction de Wigner définie comme dans le chapitre 3 (Eq.3.15). Enfin, nous avons obtenu la Truncated Wigner method en négligeant les termes non-diagonaux des propagateurs semi-classiques.

Peut-on avoir une idée de comment se comporte le polynome 4.68? Supposons que R_γ soit de la forme $R_\gamma = \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} + \dots + \mathbf{q}^3 + \dots + \mathbf{q}^5 + \dots$. En posant $\hbar \mathbf{x} = \mathbf{q}$, on a

$$\frac{i}{\hbar} R_\gamma \approx i \left[\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} + \dots + \hbar^2 \mathbf{x}^3 + \dots \right]. \tag{4.71}$$

On s'attend donc à avoir les dépendances en \hbar suivantes : $\partial^2 R_\gamma / \partial \mathbf{q}_f \partial \mathbf{q} \sim \hbar + \mathcal{O}(\hbar^2)$, $\partial^3 R_\gamma / \partial \mathbf{q}_f \partial \mathbf{q}^2 \sim \hbar^2 + \mathcal{O}(\hbar^3)$. Comme dans l'approximation de phase stationnaire, en introduisant un \hbar_{eff} , on s'aperçoit que la limite classique est obtenue pour $\mathcal{U} \rightarrow 0$ ou $N \rightarrow \infty$. On a donc besoin d'un système dans lequel il y a beaucoup de particules ou très peu d'interactions.

Chapitre 5

Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons pu voyager au travers de plusieurs disciplines de la physique semblant au départ être déconnectées, mais que nous avons unifiées dans un trajet liant la physique classique et la mécanique quantique.

Dans le premier chapitre, nous avons mis en place le formalisme nécessaire afin d'étudier des systèmes composés d'un grand nombre de particules. Dans ce cadre, nous avons expliqué la notion de seconde quantification et introduit l'espace de Fock, afin de pouvoir travailler dans un espace se concentrant sur le nombre de particules dans chaque état plutôt que sur les états eux-même. Grâce à cette formulation, nous avons mis en évidence la notion de **condensat de Bose-Einstein**, un état particulier de la matière où un ensemble de bosons se comporte comme une seule onde de matière. L'équation de Gross-Pitaevskii a été présentée afin de caractériser la dynamique d'un condensat. Enfin, nous avons introduit un système particulier du nom de **Bose-Hubbard**, dans lequel un ensemble de bosons est capturé dans un piège optique. Les particules peuvent tunneler entre deux puits et interagir entre elles, et présenter un comportement commun : un état superfluide ou un état isolant.

Afin de pouvoir établir un formalisme qui pourrait nous permettre d'étudier le comportement du système de Bose-Hubbard, nous avons introduit les intégrales de chemin de Feynman dans le deuxième chapitre. Nous avons démarré d'un principe fondamental de la nature, le **principe de moindre action**. Dans ce cadre, nous avons brièvement rappelé la formulation hamiltonienne de la mécanique classique, caractérisée par les équations d'Hamilton. Ensuite, le propagateur de Feynman fut mis en évidence au moyen d'une discrétisation de l'espace. Chaque trajectoire possible est considérée et la dynamique résultante est composée de la probabilité pondérée de chaque chemin. Afin de l'illustrer, l'exemple de la particule libre fut présenté. Enfin, nous avons réexprimé l'hamiltonien de Bose-Hubbard en fonction des variables canoniques q et p afin de pouvoir faire une correspondance formelle avec un ensemble d'oscillateurs harmoniques. Nous avons par la même occasion éclairé le formalisme mathématique des propagateurs par la notion des fonctions de Green.

Le troisième chapitre présente un espace de travail particulier appelé l'**espace des phases**. Dans ce dernier, la dynamique classique est entièrement déterminée par les équations d'Hamilton. Nous présentons une manière de réexprimer la mécanique quantique dans cet espace au moyen de la **quantification de Weyl**, permettant une correspondance formelle entre un opérateur et une fonction de l'espace des phases relatifs à la même grandeur physique. La fonction de Wigner fut introduite comme un moyen particulièrement pertinent de représenter la fonction d'onde dans l'espace des phases. Cette fonction possède une équation d'évolution propre, mais il est possible de réexprimer sa dynamique en fonction de propagateurs. Nous avons donc fait un lien entre la mécanique quantique et l'espace des phases au moyen des propagateurs. Afin de pouvoir faire une approche semiclassique d'un hamiltonien quantique comme celui de Bose-Hubbard, il ne suffisait plus que de mettre en évidence le propagateur correspondant.

Le chapitre 4 s'attèle à mettre en évidence le propagateur de Feynman appliqué à l'hamiltonien de Bose-Hubbard. Il s'agit ici bel et bien du coeur du mémoire : nous avons mis en évidence l'expression exacte du propagateur de Van Vleck-Gutzwiller dans le cadre de l'approximation de phase stationnaire. Dans cette dernière, nous développons en série l'action du système autour des points stationnaires, c'est à dire les endroits où les actions vérifiant le principe de moindre action sont extrémales. De là, nous avons poussé le développement jusqu'au quatrième ordre afin de couvrir parfaitement les cas où le système étudié présente une interaction entre particules. Ensuite, dans la deuxième partie de ce chapitre, nous avons détaillé l'approximation diagonale qui consiste à ne considérer que les trajectoires dont les conditions initiales sont proches. Concrètement, cette approximation permet de retrouver la méthode de la fonction de Wigner lorsque seuls les termes diagonaux sont considérés. Ainsi, nous avons étudié le cas où des termes quasi diagonaux sont présents.

Durant ce travail, nous avons concentré nos efforts en ayant pour but d'être le plus général possible. À vrai dire, nous n'avons particularisé l'hamiltonien que dans le cadre d'interprétations en termes de dynamiques semiclassiques. Dans ce cadre, nous avons pu mettre en évidence les conditions de validité de la Truncated Wigner method en fonction des paramètres semiclassiques que sont l'interaction entre particules et leur nombre. Une discussion autour de ces derniers est donc maintenant devenue possible. Nous avons vu que lorsque l'on ne considère plus \hbar comme tendant vers 0, la dynamique est conservée vu que le paramètre d'interaction \mathcal{U} prend le relais et tend vers 0. **La réponse à la question qui a motivé ce mémoire** est donc que lorsque les interactions sont prises en compte dans un système de Bose-Hubbard, la transition semiclassique est effectuée par un paramètre $\hbar_{eff} = \sqrt{\mathcal{U}/N}$ tendant vers 0, traduisant que les interactions doivent être faibles ou qu'un grand nombre de particules doit être considéré. Ainsi, une perspective naturelle qui en découlerait serait une analyse de la dépendance de la dynamique quantique de Bose-Hubbard envers les paramètres semiclassiques. Par exemple, une mise en évidence des états superfluides et isolants dans l'approche semiclassique pourrait nous renseigner sur la frontière classique séparant un fluide d'un superfluide.

Annexe A

Formule de Baker-Campbell-Hausdorff

Montrons comment séparer les exponentielles d'opérateurs x et y qui ne commutent à priori pas et dépendent de δt tous les deux. Par la formule de Baker-Campbell-Hausdorff,

$$e^x e^y = e^{x+y+\frac{1}{2}[x,y]+\mathcal{O}(\delta t^3)}. \quad (\text{A.1})$$

Par la suite, on se limitera à δt^2 . En multipliant par $e^z e^w$ les deux côtés de l'équation,

$$\begin{aligned} e^x e^y e^z e^w &= e^{x+y+\frac{1}{2}[x,y]} e^z e^w \\ &= e^{x+y+\frac{1}{2}[x,y]+z+\frac{1}{2}[(x+y+\frac{1}{2}[x,y]),z]} e^w. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Or, le dernier commutateur comprend un terme proportionnel à δt^3 :

$$\left[\left(x + y + \frac{1}{2} [x, y] \right), z \right] = [x, y] + [y, z] + \frac{1}{2} [[x, y], z] = [x, z] + [y, z] + \mathcal{O}(\delta t^3). \quad (\text{A.3})$$

On peut donc le réduire à deux termes. En réutilisant la formule BCH pour la dernière exponentielle,

$$e^x e^y e^z e^w = e^{x+y+z+w+\frac{1}{2}([x,y]+[x,z]+[y,z]+[x,w]+[y,w]+[z,w])} \quad (\text{A.4})$$

Dès lors, si $x = w = \frac{1}{2}H_1(\hat{q})$, $y = z = \frac{1}{2}H_2(\hat{p})$,

$$e^{\frac{1}{2}H_1(\hat{q})} e^{\frac{1}{2}H_2(\hat{p})} e^{\frac{1}{2}H_2(\hat{p})} e^{\frac{1}{2}H_1(\hat{q})} = e^{H_1(\hat{q})+H_2(\hat{p})} \quad (\text{A.5})$$

Annexe B

Théorème de Liouville

On part donc de la dérivée temporelle de la densité de probabilité $\rho(p, q)$ de trouver l'état du système dans un volume $d^N q d^N p$.

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right] = 0 \quad (\text{B.1})$$

On suppose une conservation locale de ρ :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (\text{B.2})$$

Or le vecteur \mathbf{v} a comme composantes les \dot{q}_i et \dot{p}_i . Donc

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{v} &= \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right] \\ &= \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right] = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Dès lors, la divergence ne s'applique qu'à ρ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \rho) \cdot \mathbf{v} &= \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \\ &= \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right] = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

En se rappelant la définition des crochets de Poisson $\{A, B\} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right]$, on met en évidence l'évolution de la densité de probabilité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \left\{ \mathcal{H}, \rho(p, q, t) \right\} \quad (\text{B.5})$$

Bibliographie

- [1] Pierre de Fermat, P. Tannery, C. Henry, *Oeuvres de Fermat*, Hachette, 1912.
- [2] Leonhard Euler (1707-1783). *Sur le principe de la moindre action*, Mémoires de l'académie des sciences de Berlin, 7, 1753, pp. 199-218
- [3] P. Dauby, *Mécanique analytique II*, Université de Liège, 2019.
- [4] Richard P. Feynman, *The principle of least action in quantum mechanics*, Princeton, 1942.
- [5] Balibar, Sébastien. (2007). The Discovery of Superfluidity. Journal of Low Temperature Physics. 146. 441-470. 10.1007/s10909-006-9276-7.
- [6] Anderson MH, Ensher JR, Matthews MR, Wieman CE, Cornell EA. Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. Science. 1995 Jul 14;269(5221) :198-201. doi : 10.1126/science.269.5221.198. PMID : 17789847.
- [7] Arlt, Jan Bongs, Kai Sengstock, K Ertmer, Wolfgang. (2002). Bose-Einstein condensation in dilute atomic gases. Die Naturwissenschaften. 89. 47-56. 10.1007/s00114-001-0277-8.
- [8] The Stochastic Gross–Pitaevskii Methodology Stuart P. Cockburn (UK) and Nick P. Proukakis (UK) Quantum Gases. April 2013, 177-189
- [9] Brewczyk, Mirosław Gajda, Mariusz Rzazewski, Kazimierz. (2013). A Classical-Field Approach for Bose Gases. 10.1142/9781848168121_0012.
- [10] Peter Schlagheck, *Advanced Quantum Mechanics, Partim II*, Université de Liège, 2020.
- [11] S. Haroche et J-M. Raimond, *Exploring the quantum : Atoms, Cavities and Photons*, Oxford graduate texts, 2013.
- [12] A. Einstein, *Quantentheorie des einatomigen idealen Gases : Abhandlung 2*. 1925.
- [13] All Nobel Prizes in Physics, sur <https://www.nobelprize.org/prizes/lists/all-nobel-prizes-in-physics/>, page visitée le 17 mars 2022.
- [14] La condensation de Bose-Einstein, *La physique autrement*, sur <https://www.youtube.com/watch?v=6joDoSeq8eg>, page visitée le 17 mars 2022.
- [15] Bose-Einstein Condensate, sur https://en.wikipedia.org/wiki/Bose%E2%80%93Einstein_condensate, page visitée le 17 mars 2022.
- [16] Bloch, I. Ultracold quantum gases in optical lattices. Nature Phys 1, 23–30 (2005). DOI :10.1038/NPHYS138
- [17] J. Pérez-Ríos, A. S. Sanz, How does a magnetic trap work? Am. J. Phys. 81, 836 (2013)
- [18] Michèle Leduc, Julien Dugué, and Juliette Simonet , "Laser Cooling, Trapping, and Bose-Einstein Condensation of Atoms and Molecules", AIP Conference Proceedings 1119, 37-42 (2009) <https://doi.org/10.1063/1.3137904>.
- [19] M. Machholm, C. J. Pethick, H. Smith, Band structure, elementary excitations, and stability of a Bose-Einstein condensate in a periodic potential, arXiv :cond-mat/0301012 [cond-mat.soft] (2003), <https://doi.org/10.48550/arXiv.cond-mat/0301012>.

- [20] Barter, T. H. (2018). Quantum Simulation of the Bose-Hubbard Model with Ultracold Atoms in Triangular Optical Superlattices. UC Berkeley. ProQuest ID : Barter_berkeley_0028E_18458. Merritt ID : ark : /13030/m5cg4ns9. Retrieved from <https://escholarship.org/uc/item/0hs0r409>
- [21] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, “Many-body physics with ultracold gases”, *Reviews of Modern Physics* 80, 885–964 (2008).
- [22] E.-M. Graefe, C. Liverani, “Mean-field approximation for a Bose-Hubbard dimer with complex interaction strength”, *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical* 46, <https://arxiv.org/abs/1305.7160>.
- [23] D. van Oosten, P. van der Straten, and H. T. C. Stoof, “Quantum phases in an optical lattice”, *Physical Review A* 63, 053601 (2001).
- [24] Richard P. Feynman, *The Feynman Lectures on Physics*, Caltech 1963.
- [25] Feynman’s Thesis — A New Approach to Quantum Theory Laurie M Brown (Northwestern University, USA) Default Book Series. August 2005
- [26] Cécile Morette. On the definition and approximation of feynman’s path integrals. *Phys. Rev.*, 81 :848–852, Mar 1951.<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.81.848>.
- [27] J. H. Van Vleck, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 14, 178 (1928).
- [28] D.E. Soper, *Path integrals and the classical approximation*, University of Oregon, 2011.
- [29] D. Hanneke, S. Fogwell, and G. Gabrielse, *Phys. Rev. Lett.* 100, 120801 (2008).
- [30] D. Hanneke, S. Fogwell Hoogerheide, and G. Gabrielse, *Phys. Rev. A* 83, 052122 (2011).
- [31] A. Henriksson « Liouville’s theorem and the foundation of classical mechanics », arXiv :1905.06185 [cond-mat.stat-mech] <https://arxiv.org/abs/1905.06185>
- [32] Groenewold, « On the principles of elementary quantum mechanics », *Physica*, vol. 12, no 7, 1946, p. 405–460.
- [33] Moyal et Bartlett, « Quantum mechanics as a statistical theory », *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 45, no 1, 1949, p. 99–124.
- [34] Dirac, « The Fundamental Equations of Quantum Mechanics », *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 109, no 752, 1925, p. 642.
- [35] Jan Dereziński, “Introduction to quantization”, Winter semester 2016-17, Dept. of Math. Methods in Phys., Faculty of Physics, University of Warsaw.
- [36] Frank Porter, “Integral equations”, California Institute of Technology (Caltech), 2018.
- [37] E. P. Wigner (1932). “On the quantum correction for thermodynamic equilibrium”. *Phys. Rev.* 40 (5) : 749–759.
- [38] Michèle Audin and Mihai Damian. *Morse Theory and Floer Homology*. Universitext. Springer-Verlag London, 2014.
- [39] U. Klein, (2012), “What is the limit $\hbar \rightarrow 0$ of quantum theory?”, University of Linz, <https://doi.org/10.48550/arXiv.1201.0150>.
- [40] J. Dujardin, T. Engl, J. D. Urbina, and P. Schlagheck, “Describing many-body bosonic waveguide scattering with the truncated Wigner method”, *Ann. Phys.* 527, 629 (2015).
- [41] J. Dujardin, T. Engl, and P. Schlagheck, “Breakdown of Anderson localization in the transport of Bose-Einstein condensates through one-dimensional disordered potentials”, *Phys. Rev. A* 93, 1 (2016).