



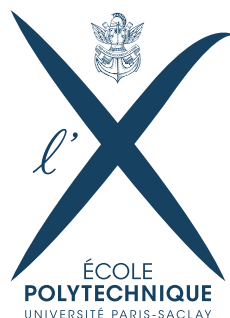
# ENSEIGNEMENT D'APPROFONDISSEMENT

**Simulation d'un système bosonique avec des intégrales de  
chemin**

Décembre-Février 2016

---

Dhruv SHARMA  
José MORAN



## 1 cours 1

On se propose d'étudier un système équivalent à deux particules identiques (même masse donc) dans une boîte à  $d$  dimensions, par exemple deux particules dans la boîte  $[0; 1]^d$  avec des conditions périodiques et l'hamiltonien :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^d \left( \frac{\partial^2}{\partial x_{1,i}} + \frac{\partial^2}{\partial x_{2,i}} \right) + v(x_1) + v(x_2) + w(x_1, x_2) \quad (1)$$

où  $v$  est le potentiel à une particule et  $w$  le potentiel d'interaction à deux particules, supposés ici continus. On pourra, par exemple, s'intéresser à la dynamique du système si on prend pour  $v$  un potentiel avec deux puits de profondeurs inégales, et étudier dans quel cas les deux particules sont dans le même puits et dans quel cas elles sont dans des puits différents.

Dans le cas général, nous étudions le système de  $N$  particules dans un domaine que nous appelons  $L\mathbb{T}^d$ , où  $L$  est la longueur caractéristique du domaine et  $d$  sa dimension. Nous verrons après qu'il convient de prendre un tore.

Dans ce cas, nous avons toujours au minimum  $\hat{H}$  autoadjoint sur  $\mathcal{H} = L^2(L\mathbb{T}^d)$ . Pour étudier notre système nous avons par ailleurs besoin de définir pour  $\beta = \frac{1}{k_B T} \geq 0$  l'opérateur :

$$\hat{A}(\beta) = e^{-\beta \hat{H}} \quad (2)$$

Comme  $\hat{H}$  est autoadjoint, cet opérateur est un opérateur auto-adjoint positif. Par ailleurs nous avons que

$$Z(\beta) = \text{Tr}(\hat{A}(\beta)) = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}}) \in \mathbb{R}^+ \cup \{+\infty\} \quad (3)$$

Pour que  $Z(\beta) \in \mathbb{R}^+$  il faut que  $\hat{H}$  soit borné inférieurement et à résolvante compacte. Dans la pratique, deux cas de figure suffisent à avoir cela :

- on prend pour  $v$  un potentiel confinant et pour  $w$  un potentiel borné.
- le domaine correspond à une super-cellule, i.e. on prend un tore (conditions aux bords périodiques).

Nous allons donc considérer pour  $L\mathbb{T}^d$  le tore de longueur caractéristique  $L$  et de dimension  $d$ . Nous pouvons alors dans ce cas général à  $N$  particules écrire un hamiltonien où nous séparons la partie cinétique de la partie potentielle :

$$\hat{H}_N = \hat{T}_N + \hat{V}_N, \quad (4)$$

où, en notant  $X = (x_1, x_2, \dots, x_{N-1}, x_N)$  le vecteur à  $dN$  composantes :

$$\hat{T}_N = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_{x_i} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_X \quad (5)$$

est l'énergie cinétique des  $N$  particules. De même nous allons nous restreindre, du moins dans un premier temps, au cas où nous n'avons que le potentiel agissant sur chaque particule et le potentiel d'interaction entre deux particules, c'est-à-dire :

$$\hat{V}_N = \sum_{i=1}^N v(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} w(x_i, x_j) \quad (6)$$

Ainsi si nous prenons  $v$  et  $w$  bornées à valeurs réelles, alors  $\hat{H}_N$  est auto-adjoint, borné inférieurement, à résolvante compacte et la fonction de partition  $Z(\beta)$  est bien définie car nous avons que

$$\forall \beta > 0, \quad Z(\beta) < \infty \quad (7)$$

Notre objectif pour la suite sera d'exprimer la fonction de partition comme une intégrale.

## 1.1 Expression de $Z$ comme une intégrale

Soit  $\beta > 0$  fixé. Alors, comme vu auparavant,  $e^{-\beta \hat{H}}$  est un opérateur à trace. Nous savons par ailleurs qu'il a un noyau  $k_\beta(X, X'), (X, X') \in (L\mathbb{T}^d)^2$ , i.e. que pour tout  $\psi \in \mathcal{H}$  :

$$(e^{-\beta \hat{H}} \psi)(X) = \int_{L\mathbb{T}^d} k_\beta(X, X') \phi(X') dX'. \quad (8)$$

Il est possible, par des arguments de régularité elliptiques, de montrer que  $k_\beta$  est une fonction régulière. On peut ainsi montrer que dans ce cas :

$$Z(\beta) = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}}) = \int_{L\mathbb{T}^d} k_\beta(X, X) dX \quad (9)$$

Nous allons donc exprimer ceci à l'aide de la formule de Trotter, qui dit que, pour  $\hat{H} = \hat{V} + \hat{T}$  :

$$(e^{-\beta \hat{H}} \psi)(X) = \lim_{M \rightarrow \infty} \left[ (e^{-\frac{\beta}{2M} \hat{V}} e^{-\frac{\beta}{M} \hat{T}} e^{-\frac{\beta}{2M} \hat{V}})^M \psi \right](X), \quad (10)$$

Où la limite s'entend au sens de  $L^2$ .

## 1.2 Démonstration de la formule de Trotter

Nous notons dorénavant  $V = \hat{V}$  et  $T = \hat{T}$ . Nous avons pour  $M$  quelconque les égalités suivantes :

$$(e^{-\frac{\beta}{2M} V} \psi)(X) = e^{-\frac{\beta}{2M} V(X)} \psi(X) \quad (11)$$

$$(e^{-\frac{\beta}{M} T} \psi)(X) = (e^{\frac{\hbar^2 \beta}{2mM} \Delta} \psi)(X) \quad (12)$$

$$= \int_{L\mathbb{T}^d} k_T(X, X') \psi(X') dX' \quad (13)$$

où nous avons noté, avec  $\sigma^2 = \frac{mM}{\beta \hbar^2}$ ,

$$k_T(X, X') = \sum_{k \in \mathbb{Z}^{dN}} \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{dN}{2}}} \exp\left(-\frac{|X - X' - k|^2}{2\sigma^2}\right). \quad (14)$$

Or pour  $\sigma$  petit, i.e. pour  $M$  grand, seul le terme en  $k = 0$  a une contribution appréciable, de sorte que, lorsque  $M \gg 1$  :

$$k_T(X, X') \simeq \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{dN}{2}}} e^{-\frac{|X - X'|^2}{2\sigma^2}} \quad (15)$$

Posons

$$h_M = e^{-\frac{\beta}{2M} \hat{V}} e^{-\frac{\beta}{M} \hat{T}} e^{-\frac{\beta}{2M} \hat{V}} \quad (16)$$

Ainsi

$$\begin{aligned}
(h_M^M \psi)(X) &= e^{-\frac{\beta}{2M} V(X)} \int_{L\mathbb{T}^d} k_T(X, X_1) e^{-\frac{\beta}{2M} V(X_1)} (h_M^{M-1} \psi)(X_1) dX_1 \\
&= e^{-\frac{\beta}{2M} V(X)} \int_{(L\mathbb{T}^d)^2} k_T(X, X_2) k_T(X_2, X_1) e^{-\frac{\beta}{M} \left( V(X_2) + \frac{V(X_1)}{2} \right)} (h_M^{M-2} \psi)(X_1) dX_1 dX_2 \\
&= e^{-\frac{\beta}{2M} V(X)} \int_{(L\mathbb{T}^d)^3} k_T(X, X_3) k_T(X_3, X_2) k_T(X_2, X_1) e^{-\frac{\beta}{M} \left( V(X_3) + V(X_2) + \frac{V(X_1)}{2} \right)} (h_M^{M-3} \psi)(X_1) dX_1 dX_2 dX_3 \\
&\vdots \\
&= e^{-\frac{\beta}{2M} V(X)} \int_{(L\mathbb{T}^d)^{M-1}} \left( \prod_{i=1}^{M-1} dX_i \right) dX_i k_T(X, X_{M-1}) \dots k_T(X_2, X_1) e^{-\frac{\beta}{M} \left( \frac{V(X_1)}{2} + \sum_{i=2}^{M-1} V(X_i) \right)} (h_M \psi)(X_1) \\
&= e^{-\frac{\beta}{2M} V(X)} \int_{(L\mathbb{T}^d)^M} \left( \prod_{i=1}^M dX_i \right) k_T(X, X_M) \dots k_T(X_2, X_1) e^{-\frac{\beta}{M} \left( \frac{V(X_1)}{2} + \sum_{i=2}^M V(X_i) \right)} \psi(X_1) \\
&= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{dNM}{2}}} \int_{(L\mathbb{T}^d)^M} \left( \prod_{i=1}^M dX_i \right) e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^M |X_{i+1} - X_i|^2 - \frac{\beta}{M} \left( \frac{V(X_{M+1}) + V(X_1)}{2} + \sum_{i=2}^M V(X_i) \right)} \psi(X_1) \\
&= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{dNM}{2}}} \int_{(L\mathbb{T}^d)^M} \left( \prod_{i=1}^M dX_i \right) e^{-\beta \mathcal{V}(X, X_1, \dots, X_M)} \psi(X_1),
\end{aligned}$$

où l'on a posé  $X_0 = X$  et :

$$\mathcal{V}(X_0, X_1, \dots, X_M) = \frac{1}{2\beta\sigma^2} \sum_{i=0}^{M-1} |X_{i+1} - X_i|^2 + \frac{1}{M} \left( \frac{V(X_0) + V(X_1)}{2} + \sum_{i=1}^{M-1} V(X_i) \right) \quad (17)$$

$\mathcal{V}$  s'interprète comme l'énergie potentielle de  $M + 1$  systèmes à  $N$  particules, où les particules interagissent entre elles au sein d'un même système, comme on le voit dans la somme des  $V(X_i)$ , et d'un système au suivant avec elles mêmes, à travers le terme en  $\sum \frac{|X_i - X_{i+1}|^2}{2\beta\sigma^2}$ .

Ainsi nous avons immédiatement que

$$(h_M^M \phi)(X) = \int_{L\mathbb{T}^d} k_h(X, X') dX' \quad (18)$$

Avec

$$k_h(X, X') = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{dNM}{2}}} \int_{(L\mathbb{T}^d)^{M-1}} \left( \prod_{i=1}^{M-1} dX_i \right) e^{-\beta \mathcal{V}(X, X_1, \dots, X_{M-1}, X')} \quad (19)$$

Nous pouvons enfin calculer la fonction de partition du système pour  $M$  suffisamment grand :

$$\begin{aligned}
Z(\beta) &= Tr(e^{-\beta H}) \simeq Tr(h_M^M) \\
&= \int_{L\mathbb{T}^d} dX k_h(X, X) \\
&= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{dNM}{2}}} \int_{(L\mathbb{T}^d)^M} dX \left( \prod_{i=1}^M dX_i \right) e^{-\beta S_M(X, X_M, \dots, X)}
\end{aligned}$$

Où l'intégrale ci-dessus s'interprète comme l'intégrale de la pseudo-action  $S_M$  le long d'un chemin qui part de  $X$  et revient vers  $X$  en temps  $\beta$  fini.