

Analogies Optiques de l'Intégrale de Chemin

Thomas Bernet

16 juin 2011

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Intégrale de chemin pour une particule libre	1
1.2	Analogie optique	2
2	Diffraction par rapport à un demi-plan	3
2.1	Solution exacte	3
2.2	Propagateur semi-classique	4
2.3	Étude de l'action et conclusion	6
3	Annexe 1 : schémas	8
4	Annexe 2 : vérification de l'équation de Schrödinger pour la diffraction	9

1 Introduction

1.1 Intégrale de chemin pour une particule libre

On étudie une particule libre, son hamiltonien H ne dépend pas du temps et les potentiels qu'il aurait pu éventuellement contenir sont nuls. On considère l'opérateur d'évolution e^{-iHt} , dont on calcule la valeur moyenne entre l'état initial $|a, 0\rangle$ et l'état final $|b, t\rangle$. Pour cela, on discrétise la durée t en $N + 1$ intervalles ε , définissant les instants t_j pour $j = 0, 1 \dots N + 1$ tels que

$$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_N < t_{N+1} = t ;$$

c'est à partir de cette étape que l'on peut introduire l'idée de *l'intégrale de chemin*.

On applique la relation de fermeture sur tous les états $|x_j, t_j\rangle$, ce qui donne, à une dimension,

$$G(b, t; a) = \int_{a,0}^{b,t} \prod_{\tau} dx(\tau) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 d\tau} \quad (1.1)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N+1}{2}} \int dx_1 \dots dx_N e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \sum_{j=0}^N (x_{j+1} - x_j)^2}, \quad (1.2)$$

où $a = x_0$ et $b = x_{N+1}$. Le calcul du propagateur à une dimension donne le résultat

$$G(b, t; a) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} e^{-\frac{m}{2i\hbar t} (b-a)^2}. \quad (1.3)$$

On remarque que dans cette expression la discrétisation n'apparaît plus ; elle est masquée par $(N+1)\varepsilon = t$. En fait, en réalisant la sommation sur toutes les positions x_j , respectivement associées aux instants t_j

entre 0 et t , nous avons intégré sur tous les chemins possibles.

On veut maintenant établir un lien avec la mécanique classique, selon laquelle une particule libre possède une vitesse constante $v = \frac{b-a}{t}$ et une énergie égale à son lagrangien (pas de potentiel), $E = E_{cin} = \frac{m(b-a)^2}{2t^2} \equiv L$. Le lagrangien ne dépend pas du temps (conservation de l'énergie), et l'action classique s'écrit

$$S_{classique} = \int L dt = Lt = \frac{m(b-a)^2}{2t}. \quad (1.4)$$

Or selon l'équation (1.3), le terme dans l'exponentielle du propagateur d'une particule libre s'écrit $-\frac{m}{2i\hbar t}(b-a)^2$, que l'on relit directement à l'action classique pour réécrire le propagateur, et en le généralisant à d dimensions, on obtient

$$G(\vec{b}, t; \vec{a}) = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar t}\right)^{\frac{d}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{classique}}. \quad (1.5)$$

On remarque alors que l'intégrale de chemin, bien qu'étant une reformulation de la mécanique quantique, fait directement intervenir l'action de la particule calculée selon les lois de la mécanique classique. Cette constatation est aussi valable pour d'autres systèmes, par exemple un oscillateur harmonique (libre ou forcé).

Par ailleurs, son mouvement reste de nature quantique, et il est possible de vérifier que le propagateur ci-dessus satisfait bien l'équation de Schrödinger.

1.2 Analogie optique

On s'intéresse maintenant à la propagation d'un champ ou d'un potentiel électromagnétique $u(x, t)$, dans un milieu d'indice de réfraction $n(x)$ variant lentement. Son équation de propagation s'écrit

$$\left(\frac{n(x)}{c}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \nabla_x^2 u = 0. \quad (1.6)$$

Une solution de cette équation est une onde stationnaire de pulsation ω , de la forme $u(x, t) = \psi(x)e^{-i\omega t}$, et en posant $x = \frac{\beta c}{\omega} y$, on trouve l'équation différentielle $\frac{1}{\beta^2} \nabla_y^2 \psi + n^2(x)\psi = 0$. On suppose que quelle que soit la direction dans laquelle on se place, $n(x) \rightarrow \sqrt{E}$ si $x \rightarrow \infty$. On pose le potentiel $V(y) = E - n^2(x)$ et le problème revient à écrire

$$-\frac{1}{\beta^2} \nabla_y^2 \psi + V(y)\psi = E\psi, \quad (1.7)$$

analogue à l'équation de Schrödinger stationnaire $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(y)\psi = E\psi$ pour laquelle la masse m vaudrait $\frac{1}{2}$ et où le paramètre $\frac{1}{\beta}$ jouerait le rôle de la constante fondamentale \hbar : si β est grand, on se place implicitement dans le cadre de l'optique géométrique (analogue à la mécanique classique), si l'ordre de grandeur de β correspond aux dimensions du système (et à la longueur d'onde), on se place dans le cadre de l'optique ondulatoire (mécanique quantique).

Il est cependant nécessaire de relever quelques précautions à prendre pour évoquer l'analogie entre les ondes électromagnétiques en optique et les fonctions d'ondes en mécanique quantique. En effet, la propagation des ondes et des potentiels électromagnétiques est décrite par les équations de Maxwell, qui donnent l'équation de propagation (1.6) faisant intervenir une dérivée seconde en temps. La fonction d'onde en mécanique quantique est quant à elle régie par l'équation de Schrödinger, faisant intervenir une dérivée première en temps ainsi que le nombre complexe i . Cette différence est levée en étudiant les solutions stationnaires, données par l'équation (1.7) pour l'optique. Comme pour la mécanique quantique, il est alors possible de développer une approche semi-classique de l'optique et de l'équation (1.7), au moyen de l'intégrale de chemin. Cette approche, que nous introduirons ici, fut développée à partir des travaux de A. Sommerfeld sur la résolution exacte du problème de diffraction par un demi-plan, à la fin

du dix-neuvième siècle, et à partir de la publication de J.B. Keller présentant la « théorie géométrique de la diffraction », plus d'un demi-siècle plus tard, en 1962.

On introduit maintenant le propagateur faisant passer la fonction d'onde d'un état initial $|\psi(0)\rangle$ à un état final $|\psi(t)\rangle$, tel que $|\psi(t)\rangle = G(t)|\psi(0)\rangle$, avec $G(t) = e^{-i\beta\hat{H}t}$ et \hat{H} l'équivalent du hamiltonien décrivant le système. Puis on utilise la relation de fermeture sur une position intermédiaire y' , ainsi que la projection sur l'état $|y\rangle$, $\langle y|\psi(t)\rangle = \langle y|G(t)|\psi(0)\rangle = \int dy' \langle y|G(t)|y'\rangle \langle y'|\psi(0)\rangle$, qui se réécrit, $\psi(y, t) = \int dy' G(y, t; y')\psi(y', 0)$, où $\psi(y, t)$ est une fonction d'onde de la forme $\psi(y, t) = \psi(y)e^{-i\beta Et}$.

L'expression générale du propagateur est

$$G(y, t; y') = \int_{y', 0}^{y, t} dy(\cdot) e^{i\beta S[y(\cdot)]}, \quad (1.8)$$

où $y(\cdot)$ représente l'ensemble des chemins et $S[y(\cdot)]$ l'action, qui s'écrit

$$S[y(t')] = \int_0^t dt' \left[\frac{1}{4} \left(\frac{dy}{dt'} \right)^2 - V(y) \right]. \quad (1.9)$$

On note que l'on fait apparaître ici l'équivalent d'un lagrangien classique dans lequel la valeur de la masse serait prise à $\frac{1}{2}$. On se sert alors d'une approximation dite de la *phase stationnaire*, avec ici la phase $\beta S[y(\cdot)]$, qui consiste à prendre la limite $\beta \rightarrow \infty$ et qui a pour conséquence de ne prendre en compte que les chemins classiques. En mécanique, cette approximation revient à prendre la limite $\hbar \rightarrow 0$. En désignant par α les différents chemins, on peut montrer que

$$G(b, t; a) = \sum_{\alpha} \sqrt{\det \left(\frac{i\beta}{2\pi} \frac{\partial^2 S_{\alpha}}{\partial b \partial a} \right)} e^{i\beta S_{\alpha}}. \quad (1.10)$$

Avec cette expression, seuls les chemins satisfaisant les équations classiques du mouvement apparaissent. Enfin, pour décrire la propagation d'une onde libre, on se sert de l'expression issue de la section précédente du propagateur G pour une particule libre, qui à deux dimensions s'écrit $G(\vec{b}, t; \vec{a}) = \frac{\beta}{4i\pi t} e^{\frac{i\beta}{4t}(\vec{b}-\vec{a})^2}$.

2 Diffraction par rapport à un demi-plan

2.1 Solution exacte

Dans ce problème, on considère qu'une onde plane incidente est émise en direction d'un demi-plan supposé infini. Pour des raisons de symétrie, il est possible de se ramener à un problème à deux dimensions, dans lequel le demi-plan est placée sur l'axe $y < 0$. Au niveau du bord du demi-plan, qui se traduit à deux dimensions par un point que nous choisissons comme origine O , le phénomène de diffraction a été observé, et la solution exacte à ce problème fut établie par Sommerfeld en 1896. La *figure 1* illustre cette situation.

L'expression de cette onde plane incidente est $u_0^i = \exp[-ik\rho(\psi - \theta)]$ en coordonnées polaires (ρ, θ) , où k est le nombre d'onde, ψ l'angle d'incidence et θ l'angle d'observation. On définit la fonction

$$h(t) = \frac{1}{\sqrt{i\pi}} \int_{-\infty}^t e^{it'^2} dt'. \quad (2.1)$$

La solution de Sommerfeld donne le champ total au point (ρ, θ) , et se met sous la forme

$$u = e^{-ik\rho \cos(\psi-\theta)} h \left(\sqrt{2k\rho} \cos \left[\frac{\psi - \theta}{2} \right] \right) \mp e^{ik\rho \cos(\psi+\theta)} h \left(-\sqrt{2k\rho} \sin \left[\frac{\psi + \theta}{2} \right] \right). \quad (2.2)$$

Ci-dessus, le signe moins vérifie la condition sur le demi-plan $u = 0$, dite de Dirichlet, et le signe plus correspond à $\frac{\partial u}{\partial \theta} = 0$, condition de Neumann (où $\frac{\partial}{\partial \theta}$ est associé à une normale d'un côté du demi-plan).

Ces deux conditions se justifient physiquement pour l'optique, et seule la condition $u = 0$ sera réutilisée en mécanique quantique. Dans le cas présent, en coordonnées polaires, le demi-plan est caractérisé par l'angle $\theta = \frac{3\pi}{2}$. Pour vérifier les conditions de Dirichlet, on calcule

$$u\left(\theta = \frac{3\pi}{2}\right) = e^{-ik\rho \cos(\psi - \frac{3\pi}{2})} h\left(\sqrt{2k\rho} \cos\left[\frac{\psi}{2} - \frac{3\pi}{4}\right]\right) - e^{ik\rho \cos(\psi + \frac{3\pi}{2})} h\left(-\sqrt{2k\rho} \sin\left[\frac{\psi}{2} + \frac{3\pi}{4}\right]\right) \quad (2.3)$$

$$= e^{ik\rho \sin(\psi)} \left\{ h\left(\sqrt{k\rho} \left[\cos\left(\frac{\psi}{2}\right) - \sin\left(\frac{\psi}{2}\right)\right]\right) - h\left(-\sqrt{k\rho} \left[\sin\left(\frac{\psi}{2}\right) - \cos\left(\frac{\psi}{2}\right)\right]\right) \right\} \quad (2.4)$$

$$= 0, \quad (2.5)$$

ce qui correspond au résultat attendu dans ce cas. Un calcul semblable peut être effectué pour vérifier la condition de Neumann, sur la dérivée de la fonction u .

Le premier terme de la solution générale (2.2) vérifie aussi la solution de l'onde plane pour $\rho \rightarrow \infty$. L'autre partie quant à elle, met en évidence une onde « réfléchie », $u_0^r = \exp(ik\rho \cos(\psi + \theta))$, symétrique de u_0^i par rapport au demi-plan (solution de la méthode des images employée par Sommerfeld), voir *figure 1*. Pour $t \rightarrow \pm\infty$, $h(t)$ est plus ou moins constant, ce que l'on observe en réalisant un développement asymptotique,

$$h(t) = \Theta(t) - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{i}{\pi}} \frac{e^{i^2}}{t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{(it^2)^n}, \quad (2.6)$$

avec $a_0 = 1$ et $a_n = \frac{2n-1}{2} a_{n-1}$. Nous obtenons alors

$$u = \Theta\left(\cos\left[\frac{\psi - \theta}{2}\right]\right) u_0^i \mp \Theta\left(-\sin\left[\frac{\psi + \theta}{2}\right]\right) u_0^r \quad (2.7)$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{e^{ik\rho}}{\sqrt{i\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{(i\sqrt{2k\rho})^{2n+1}} \left\{ \frac{1}{[\cos(\frac{\psi-\theta}{2})]^{2n+1}} \mp \frac{1}{[-\sin(\frac{\psi+\theta}{2})]^{2n+1}} \right\}. \quad (2.8)$$

Ces développements asymptotiques divergent si on tient compte de trop de termes. Ici, on ne garde que $n = 0$, pour des raisons que nous justifierons plus tard, et on trouve,

$$u = \Theta\left(\cos\left[\frac{\psi - \theta}{2}\right]\right) u_0^i \mp \Theta\left(-\sin\left[\frac{\psi + \theta}{2}\right]\right) u_0^r + \frac{e^{ik\rho}}{\sqrt{k\rho}} \frac{\sqrt{i}}{2\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{\cos(\frac{\psi-\theta}{2})} \pm \frac{1}{\sin(\frac{\psi+\theta}{2})} \right] + o\left(\frac{1}{k^{3/2}}\right). \quad (2.9)$$

On remarque que le terme $\frac{e^{ik\rho}}{\sqrt{k\rho}}$ peut s'interpréter comme une onde cylindrique dont la source serait le bord du demi-plan. Cette vision s'oppose à la vision définie par le principe de Huygens qui affirme que les rayons émis proviennent des rayons eux-mêmes (sur la surface d'onde) et non des bords de l'obstacle réalisant la diffraction. Dans le cas usuel, on a $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$ et $\pi < \psi < \frac{3\pi}{2}$, sans pour autant avoir de chemin direct évitant le demi-plan, c'est-à-dire qu'il faut $\psi - \theta < \pi$. On note par ailleurs que pour avoir $\Theta(\cos[\frac{\psi-\theta}{2}]) = 0$, c'est-à-dire $\cos[\frac{\psi-\theta}{2}] < 0$, il faut que $\pi < \psi - \theta < 3\pi$, ce qui est toujours vrai dans le cas présent, et que l'on a toujours de même $\Theta(-\sin[\frac{\psi+\theta}{2}]) = 0$ car la condition $0 < \psi + \theta < 2\pi$ est également vérifiée. Les deux fonctions Θ s'annulent, et l'expression de la fonction d'onde u se simplifie en

$$u = \frac{e^{ik\rho}}{\sqrt{k\rho}} \frac{\sqrt{i}}{2\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{\cos(\frac{\psi-\theta}{2})} \pm \frac{1}{\sin(\frac{\psi+\theta}{2})} \right], \quad (2.10)$$

avec un développement en $\frac{1}{\sqrt{k}}$.

2.2 Propagateur semi-classique

Dans cette section, nous ferons référence à la *figure 2* pour définir les points et les angles importants. Nous allons tout d'abord exprimer le propagateur dans le cas où les chemins éviteraient le demi-plan

et passeraient directement du point initial a au point final b en un temps t . Pour ce chemin direct, on prendrait $n(x) = 1$, $V(y) = 0$ et $E = 1$ (ailleurs que sur le demi-plan), et le propagateur s'écrirait

$$G(\vec{b}, t; \vec{a}) = \int_{\vec{a}, 0}^{\vec{b}, t} dy(\cdot) e^{i\beta \int_0^t dt' \left[\frac{1}{4} \left(\frac{dy}{dt'} \right)^2 \right]}. \quad (2.11)$$

Pour traiter le cas où l'on considère qu'il n'existe pas de chemin direct pour aller du point a au point b ($\psi - \theta > \pi$), nous allons introduire un point intermédiaire c , caractérisé par les coordonnées (c, φ) , dont le chemin jusqu'à b est direct, tel que $\varphi < \theta + \pi$. Depuis le point initial a , on atteint le point c au bout du temps $t_c = \frac{at}{a+b}$. On remarque également que le trajet de a jusqu'à c puis de c jusqu'à b se fait à une vitesse $v = \frac{a}{t_c} = \frac{b}{t-t_c}$, de norme constante mais changeant de direction au point c (si on considère un chemin indirect entre a et b). De cette manière, on se retrouve dans les conditions d'utilisation de l'intégrale de chemin, avec un seul point intermédiaire c , caractérisé par le temps t_c .

On note G_D les propagateurs caractérisant des chemins « directs » d'un point à un autre, c'est-à-dire qui évitent le demi-plan. On écrit ainsi le propagateur pour un chemin allant de c jusqu'à b , $G_D(\vec{b}, t - t_c; \vec{c}) = \frac{\beta}{4i\pi(t-t_c)} \exp\left(\frac{i\beta(\vec{b}-\vec{c})^2}{4(t-t_c)}\right)$. Il existe par ailleurs deux possibilités pour aller de a jusqu'à c . Tout d'abord, on considère un chemin direct, si $\varphi \geq \psi - \pi$, avec un propagateur $G_D(\vec{c}, t_c; \vec{a}) = \frac{\beta}{4i\pi t_c} \exp\left(\frac{i\beta(\vec{c}-\vec{a})^2}{4t_c}\right)$. Il est aussi possible que l'onde incidente soit réfléchiée sur le demi-plan au point R , puis atteigne le point c , si $\varphi \geq 2\pi - \psi$. Dans ce cas, on peut utiliser l'image du point c , notée c' , de coordonnées $(c, \pi - \varphi)$, qui est le symétrique de c par rapport à l'axe y , sur lequel se trouve le demi-plan. Le propagateur de cette onde réfléchiée, noté G_R s'écrit alors $G_R(\vec{c}, t_c; \vec{a}) = \frac{\beta}{4i\pi t_c} \exp\left(\frac{i\beta(\vec{c}'-\vec{a})^2}{4t_c}\right)$. En considérant ces deux aspects de propagation de a jusqu'à c , nous avons $G(\vec{c}, t_c; \vec{a}) = G_D(\vec{c}, t_c; \vec{a}) \mp G_R(\vec{c}, t_c; \vec{a})$, où le signe \mp provient des conditions de Dirichlet et de Neumann. Ainsi, pour se rendre de a jusqu'à b , il faut considérer le propagateur global sur l'ensemble des chemins, $G(\vec{b}, t; \vec{a}) = \int d^2c G_D(\vec{b}, t - t_c; \vec{c}) G(\vec{c}, t_c; \vec{a})$, avec $d^2c = \rho d\rho d\varphi$, ce qui donne

$$G(\vec{b}, t; \vec{a}) = \int_0^\infty \rho d\rho \left(\int_{\psi-\pi}^{\theta+\pi} d\varphi G_D(\vec{b}, t - t_c; \vec{c}) G_D(\vec{c}, t_c; \vec{a}) \mp \int_{2\pi-\psi}^{\theta+\pi} d\varphi G_D(\vec{b}, t - t_c; \vec{c}) G_R(\vec{c}, t_c; \vec{a}) \right). \quad (2.12)$$

On pose $\gamma = \frac{1}{t_c} + \frac{1}{t-t_c}$ pour simplifier les produits des propagateurs. Pour les chemins directs de a jusqu'à c , on note

$$G_{DD}(\vec{b}, t; \vec{a}) = \int_0^\infty \rho d\rho \int_{\psi-\pi}^{\theta+\pi} d\varphi G_D(\vec{b}, t - t_c; \vec{c}) G_D(\vec{c}, t_c; \vec{a}) \quad (2.13)$$

$$= \frac{\beta}{4i\pi t} \frac{\beta\gamma}{4i\pi} \int_0^\infty \rho d\rho \int_{\psi-\pi}^{\theta+\pi} d\varphi \exp\left\{ \frac{i\beta}{4} \left[\frac{(\vec{b}-\vec{c})^2}{t-t_c} + \frac{(\vec{c}-\vec{a})^2}{t_c} \right] \right\}. \quad (2.14)$$

En posant $G_0 = \frac{\beta}{4i\pi t} e^{\frac{i\beta}{4t}(a+b)^2}$ et $A_{DD} = \frac{1}{4}\gamma c^2 - \frac{1}{2}cv[\cos(\varphi - \psi) + \cos(\varphi - \theta)]$, on trouve $G_{DD}(\vec{b}, t; \vec{a}) = G_0 \frac{\beta\gamma}{4i\pi} \int_0^\infty \rho d\rho \int_{\psi-\pi}^{\theta+\pi} d\varphi e^{i\beta A_{DD}}$. De même, on peut exprimer $G_{RD}(\vec{b}, t; \vec{a}) = G_0 \frac{\beta\gamma}{4i\pi} \int_0^\infty \rho d\rho \int_{2\pi-\psi}^{\theta+\pi} d\varphi e^{i\beta A_{RD}}$, avec $A_{RD} = \frac{1}{4}\gamma c^2 - \frac{1}{2}cv[\cos(\varphi + \psi) + \cos(\varphi + \theta)]$, et on obtient

$$G(\vec{b}, t; \vec{a}) = G_0 \frac{\beta\gamma}{4i\pi} \int_0^\infty \rho d\rho \left(\int_{\psi-\pi}^{\theta+\pi} d\varphi e^{i\beta A_{DD}} \mp \int_{2\pi-\psi}^{\theta+\pi} d\varphi e^{i\beta A_{RD}} \right). \quad (2.15)$$

On effectue alors un changement de variables, en posant les angles $\omega_1 = \frac{\psi+\theta}{2}$, $\omega_2 = \frac{\psi-\theta}{2} - \frac{\pi}{2}$, et $\alpha = \varphi - \omega_1$. La phase βA_{DD} s'exprime alors $A_{DD} = \frac{\gamma c^2}{4} - cv \cos(\alpha) \sin(\omega_2)$. Compte tenu des limites imposées aux variations des angles dans ce problème, on remarque qu'en appliquant l'approximation de la phase stationnaire au terme A_{DD} , on impose $\alpha = 0$, et qu'en l'absence de chemin direct de a jusqu'à b , nous

avons $\omega_2 > 0$. En réalisant ce calcul en tenant compte du comportement asymptotique déjà évoqué, on peut définir la variable μ telle que

$$\mu = \sqrt{\frac{\beta}{\gamma}} \nu \sin(\omega_2) = \sqrt{\frac{ab\beta}{t}} \sin(\omega_2), \quad (2.16)$$

qui est utile, car elle permet de faire apparaître la fonction $h(-\mu)$ dans l'expression de G_{DD} , qui se met alors sous la forme $G_0 h(-\mu) e^{-i\mu^2}$. De même, cette démarche peut être appliquée aux termes G_{RD} et A_{RD} , en posant

$$\nu = \sqrt{\frac{\beta}{\gamma}} \nu \sin(\omega_1) = \sqrt{\frac{ab\beta}{t}} \sin(\omega_1), \quad (2.17)$$

et on trouve $G_0 h(-\nu) e^{-i\nu^2}$.

De cette manière, le propagateur total se met sous la forme

$$G(\vec{b}, t; \vec{a}) = G_0 \left(h(-\mu) e^{-i\mu^2} \mp h(-\nu) e^{-i\nu^2} \right). \quad (2.18)$$

Il s'avère que cette expression est une solution exacte pour le propagateur car elle permet de retrouver l'expression (2.2) de l'onde diffractée pour laquelle le nombre d'onde k n'est autre que la quantité β . Elle vérifie également les conditions aux limites, en $\theta = \frac{3\pi}{2}$. Par exemple, pour les conditions de Dirichlet, on vérifie bien que $G(\theta = \frac{3\pi}{2}) = 0$ par un calcul similaire à celui vérifiant cette même condition pour l'onde u . En effet,

$$G\left(\theta = \frac{3\pi}{2}\right) = G_0 e^{-\frac{iab\beta}{2t} [1 - \sin(\psi)]} \left\{ h\left(\sqrt{\frac{ab\beta}{2t}} \left[\cos\left(\frac{\psi}{2}\right) - \sin\left(\frac{\psi}{2}\right)\right]\right) \right. \quad (2.19)$$

$$\left. - h\left(-\sqrt{\frac{ab\beta}{2t}} \left[\sin\left(\frac{\psi}{2}\right) - \cos\left(\frac{\psi}{2}\right)\right]\right) \right\} = 0. \quad (2.20)$$

Dans le cadre de la mécanique, ce propagateur vérifie bien l'équation de Schrödinger, ce qui est démontré en annexe. Ainsi, l'approximation semi-classique de l'intégrale de chemin, n'utilisant qu'un seul temps intermédiaire t_c , permet de retrouver la solution exacte du problème de diffraction par un demi-plan.

Par le développement asymptotique de h (2.6), nous montrons que le premier terme du développement est de l'ordre de $\frac{1}{\sqrt{\beta}}$ (équivalent à $\sqrt{\hbar}$ en mécanique quantique), déjà très petit mais non négligeable. Il n'est pas nécessaire de pousser le développement plus loin (des termes d'ordre au moins $\frac{1}{\beta^{3/2}}$ apparaîtraient), ce qui justifie l'expression (2.9).

Nous notons également que la propagation de l'onde de a jusqu'à c s'effectue en ligne *droite*, directe ou réfléchi, ce qui justifie l'approximation de la phase stationnaire (équivalente à considérer l'action comme étant extrémale). Il en est de même pour la propagation de c jusqu'à b . Cependant, le principe de phase stationnaire n'est pas respecté en c puisque la propagation ne se fait plus en ligne droite. Cette déviation entraîne l'apparition du facteur $\frac{1}{\sqrt{\beta}}$ dans le développement asymptotique de l'expression de l'onde.

Par ailleurs, lorsque nous avons étudié la particule libre, nous avons fait apparaître directement l'action classique de la particule dans la phase du propagateur. Nous allons maintenant voir que cette observation n'est plus valable dans le cas de la diffraction par rapport à un demi-plan.

2.3 Étude de l'action et conclusion

Si l'on ne tenait pas compte du demi-plan, le chemin rendant l'action extrémale, $\delta S = 0$, serait la ligne droite. En présence du demi-plan entre a et b , il n'existe pas de tel chemin, et l'approximation de la phase stationnaire n'est plus valable pour une propagation directe de a jusqu'à b .

On considère alors le chemin $a-O-b$, se propageant directement du point a jusqu'au point O (qui ici joue

le rôle du point c de la section précédente), puis du O jusqu'au point b , en effectuant un tournant en O . Ce chemin peut être décrit par la coordonnée $\vec{y}(t')$, telle que

$$\begin{cases} \vec{y}(t') = \frac{\vec{a}(t_0-t')}{t_0} & \text{pour } t' \leq t_0 \\ \vec{y}(t') = \frac{\vec{b}(t'-t_0)}{(t-t_0)} & \text{pour } t' \geq t_0 \end{cases} \quad (2.21)$$

Nous voulons vérifier si l'action est extrémale et si les équations de Lagrange-Euler sont satisfaites. En considérant que le milieu est caractérisé par un indice de réfraction constant ($V(y) = 0$), l'action pour l'optique donnée par l'équation (1.9) se décompose en deux termes caractérisant respectivement la propagation avant et après l'instant t_0 , où l'on utilise les différentes expressions de la vitesse $v = \frac{dy}{dt'}$, ce qui donne

$$S[y(t')] = \frac{1}{4} \int_0^t \left(\frac{dy}{dt'} \right)^2 dt' = \frac{1}{4} \left[\int_0^{t_0} \left(\frac{dy}{dt'} \right)^2 dt' + \int_{t_0}^t \left(\frac{dy}{dt'} \right)^2 dt' \right] = \frac{1}{4} \left[\frac{a^2}{t_0} + \frac{b^2}{t-t_0} \right], \quad (2.22)$$

et en ne faisant pas apparaître la dépendance en t_0 grâce aux formules $t_0 = \frac{at}{a+b}$ et $t-t_0 = \frac{bt}{t-t_c}$, on obtient

$$S[y(\cdot)] = \frac{(a+b)^2}{4t}. \quad (2.23)$$

On remarque que cette expression apparaît dans le terme G_0 du propagateur général (2.18), mais qu'il ne fait pas apparaître le reste de l'expression, $h(-\mu)e^{-i\mu^2} \mp h(-\nu)e^{-i\nu^2}$.

On calcule alors une petite variation de l'action, et en posant $\vec{u}_a = \frac{\vec{a}}{a}$ et $\vec{u}_b = \frac{\vec{b}}{b}$, on obtient

$$\left. \frac{\delta S}{\delta \vec{y}(t')} \right|_y = -\frac{(a+b)}{t} (\vec{u}_a + \vec{u}_b) \delta(t' - t_0) \neq 0. \quad (2.24)$$

Cette variation est bien différente de zéro, les équations décrivant le mouvement classique ne sont pas vérifiées, mais le chemin $a-O-b$ est pourtant minimal, en tenant compte du demi-plan.

Nous pouvons alors faire un bilan de tous ces résultats. L'action classique n'apparaît pas dans l'expression générale du propagateur, pour une onde subissant une diffraction par un demi-plan. Une partie de l'expression de ce propagateur est directement donnée par la géométrie du problème, et se retrouve aussi dans l'expression de l'onde diffractée u . On note aussi la présence d'un terme $\frac{1}{\sqrt{\beta}}$ (équivalent à $\sqrt{\hbar}$ en mécanique, mais correspondant plutôt à la longueur d'onde en optique), en facteur dans l'expression (asymptotique) de u , et qui provient directement de la géométrie du problème.

Ces constatations sont à l'origine de la *théorie géométrique de la diffraction* établie par Keller. Cette théorie permet d'établir des résultats sur le comportement d'ondes diffractées par des surfaces non-idéales, grâce à des développements asymptotiques réalisant de très bonnes approximations. L'idée développée par Keller consiste à ajouter les rayons diffractés aux rayons de l'optique géométrique, en considérant que la diffraction est un phénomène local et qu'il est possible d'assimiler la forme de la surface au voisinage du point de diffraction à une forme simple dont on connaît la solution exacte au problème de diffraction. Ces surfaces ont par exemple la forme d'un demi-plan, d'un coin, d'une pointe ou encore d'un cylindre. Les rayons diffractés obéissent aux lois de l'optique géométrique et au principe de Fermat. Il est possible de montrer que des rayons arrivant sur une arête sont déviés en formant un cône, et qu'en l'absence d'arête les rayons longent la surface de diffraction et sont légèrement déviés. Outre son intérêt théorique, ce phénomène a été utilisé dans le développement d'avions furtifs, dont la forme dévie certains rayons en ne les renvoyant pas vers le sol, ce qui limite leur détection par les radars.

3 Annexe 1 : schémas

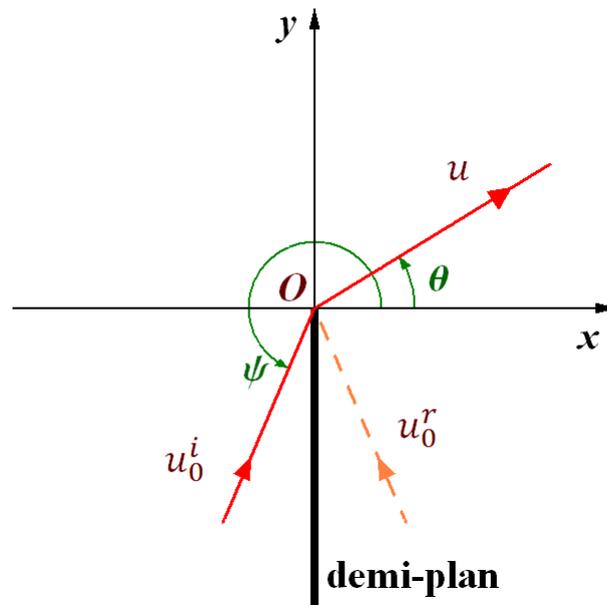


Figure 1 : une onde incidente u_0^i dont la direction est caractérisée par un angle ψ arrive au bord d'un demi-plan vertical sur $y < 0$, au point O . On observe une diffraction, déviant cette onde incidente et formant une onde diffractée u , caractérisée par un angle θ . L'expression de cette onde fait intervenir une onde « réfléchie », u_0^r , qui est le symétrique de l'onde incidente par rapport au demi-plan.

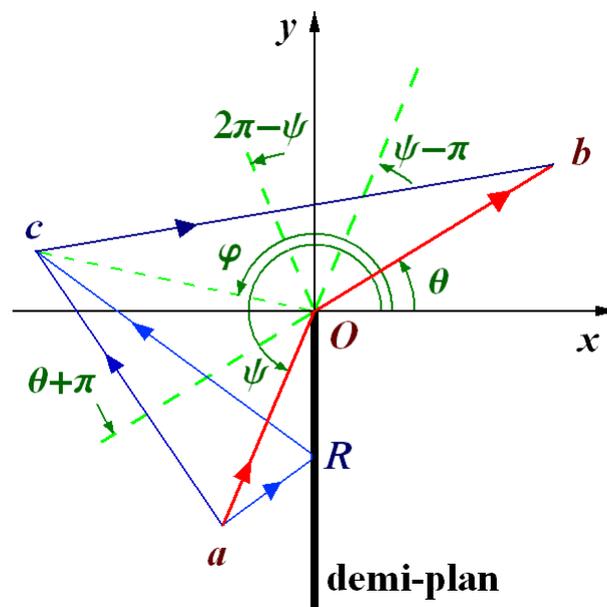


Figure 2 : une onde incidente partant du point a de coordonnées (a, ψ) arrive au bord d'un demi-plan vertical sur $y < 0$, au point O , où elle est diffractée et déviée, et parvient au point b , de coordonnées (b, θ) . On introduit un point intermédiaire (pour utiliser l'intégrale de chemin), c , de coordonnées (c, φ) . Pour que l'onde se rende de a en c , il faut qu'elle emprunte soit un chemin direct, ce qui est possible si $\psi - \pi < \varphi < \theta + \pi$, soit qu'elle soit réfléchie au point R sur le demi-plan, ce qui est possible si $2\pi - \psi < \varphi < \theta + \pi$. Dans ces deux cas, le trajet de c jusqu'à b est direct.

4 Annexe 2 : vérification de l'équation de Schrödinger pour la diffraction

Dans cette section, nous allons vérifier que l'équation (2.18) établie pour le propagateur d'une onde diffractée par un demi-plan vérifie bien l'équation de Schrödinger, qui s'écrit, avec une masse égale à $\frac{1}{2}$,

$$\frac{\partial G}{\partial t} = i\hbar\Delta G \quad (4.1)$$

où Δ est le laplacien en coordonnées cylindriques au point final b de coordonnées (b, θ) , qui s'écrit $\frac{\partial^2}{\partial b^2} + \frac{1}{b}\frac{\partial}{\partial b} + \frac{1}{b^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$. Pour la mécanique quantique, le propagateur s'écrit, en fonction de \hbar ,

$$G(\vec{b}, t; \vec{a}) = \underbrace{\frac{1}{4\pi i\hbar t} e^{\frac{i}{4\hbar t}(a+b)^2}}_{G_0(t,b)} \underbrace{\left(h(-\mu)e^{-i\mu^2} \mp h(-\nu)e^{-i\nu^2} \right)}_{H(t,b,\theta)}, \quad (4.2)$$

où on rappelle que $h(u) = \frac{1}{\sqrt{i\pi}} \int_{-\infty}^u e^{iv^2} dv$. Pour simplifier les expressions, on introduit la fonction $F(u) = h(-u)e^{-iu^2}$, qui permet de mettre H sous la forme $F(\mu) \mp F(\nu)$. On rappelle également l'expression des variables

$$\mu = \sqrt{\frac{ab}{\hbar t}} \sin(\omega_2) \quad \text{avec} \quad \omega_2 = \frac{\psi - \theta}{2} - \frac{\pi}{2}, \quad (4.3)$$

et

$$\nu = \sqrt{\frac{ab}{\hbar t}} \sin(\omega_1) \quad \text{avec} \quad \omega_1 = \frac{\psi + \theta}{2}. \quad (4.4)$$

On introduit aussi deux variables utiles pour ce calcul,

$$\tilde{\mu} = \sqrt{\frac{ab}{\hbar t}} \cos(\omega_1) \quad \text{avec} \quad \tilde{\nu} = \sqrt{\frac{ab}{\hbar t}} \cos(\omega_2). \quad (4.5)$$

On calcule maintenant les dérivées du propagateur $G(t, b, \theta) = G_0(t, b)H(t, b, \theta)$ en fonction de H et de ses dérivées. La dérivée première par rapport au temps s'écrit

$$\frac{\partial G}{\partial t} = \left[\frac{\partial H}{\partial t} - \frac{1}{t} \left(1 + \frac{i(a+b)^2}{4\hbar t} \right) H \right] G_0. \quad (4.6)$$

La dérivée première par rapport à la position finale b s'écrit

$$\frac{\partial G}{\partial b} = \left[\frac{\partial H}{\partial b} + \frac{i(a+b)}{2\hbar t} H \right] G_0. \quad (4.7)$$

La dérivée seconde par rapport à la position finale b s'écrit

$$\frac{\partial^2 G}{\partial b^2} = \left\{ \frac{\partial^2 H}{\partial b^2} + \frac{i(a+b)}{\hbar t} \frac{\partial H}{\partial b} + \frac{i}{2\hbar t} \left[1 + \frac{i(a+b)^2}{2\hbar t} \right] H \right\} G_0 \quad (4.8)$$

Les dérivées première et seconde par rapport à l'angle final θ s'écrivent

$$\frac{\partial G}{\partial \theta} = \frac{\partial H}{\partial \theta} G_0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2 G}{\partial \theta^2} = \frac{\partial^2 H}{\partial \theta^2} G_0. \quad (4.9)$$

En regroupant ces termes dans le laplacien on obtient,

$$\Delta G = \left\{ \frac{\partial^2 H}{\partial b^2} + \frac{1}{b^2} \frac{\partial^2 H}{\partial \theta^2} + \left[\frac{i(a+b)}{\hbar t} + \frac{1}{b} \right] \frac{\partial H}{\partial b} + \frac{i}{\hbar t} \left[1 - \frac{(a+b)^2}{4\hbar t} + \frac{a}{2b} \right] H \right\} G_0. \quad (4.10)$$

Les dérivées de H par rapport à t , b et θ peuvent toutes s'exprimer en fonction des dérivées de $F(\mu)$ et de $F(\nu)$, qui s'expriment

$$\frac{\partial F(u)}{\partial u} = \frac{1}{\sqrt{i\pi}} - 2iuF(u) \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2 F(u)}{\partial u^2} = -2i \left(\frac{u}{\sqrt{i\pi}} + (1 - 2iu^2)F(u) \right). \quad (4.11)$$

En se servant de la décomposition de H , telle que $H = F(\mu) \mp F(\nu)$, on exprime ses dérivées en fonction de F et de ses dérivées première et seconde ; par rapport au temps t ,

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{1}{2t} \left(\mu \frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu} \mp \nu \frac{\partial F(\nu)}{\partial \nu} \right), \quad (4.12)$$

par rapport à la position b , une première fois,

$$\frac{\partial H}{\partial b} = -\frac{1}{2b} \left(\mu \frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu} \mp \nu \frac{\partial F(\nu)}{\partial \nu} \right) \quad (4.13)$$

puis une seconde,

$$\frac{\partial^2 H}{\partial b^2} = \frac{1}{4b^2} \left(\mu^2 \frac{\partial^2 F(\mu)}{\partial \mu^2} \mp \nu^2 \frac{\partial^2 F(\nu)}{\partial \nu^2} \right) - \frac{1}{4b^2} \left(\mu \frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu} \mp \nu \frac{\partial F(\nu)}{\partial \nu} \right), \quad (4.14)$$

par rapport à l'angle θ , une fois,

$$\frac{\partial H}{\partial \theta} = \frac{1}{2} \left(-\tilde{\mu} \frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu} \mp \tilde{\nu} \frac{\partial F(\nu)}{\partial \nu} \right), \quad (4.15)$$

deux fois,

$$\frac{\partial^2 H}{\partial \theta^2} = \frac{1}{4} \left(\tilde{\mu}^2 \frac{\partial^2 F(\mu)}{\partial \mu^2} \mp \tilde{\nu}^2 \frac{\partial^2 F(\nu)}{\partial \nu^2} \right) - \frac{1}{4} \left(\mu \frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu} \mp \nu \frac{\partial F(\nu)}{\partial \nu} \right). \quad (4.16)$$

On remplace ces termes dans l'expression (4.10) du laplacien du propagateur et on trouve

$$\Delta G = \frac{i}{\hbar t} \left\{ \frac{\mu \mp \nu}{2\sqrt{i\pi}} + \left[1 + i \left(\frac{(a+b)^2}{4\hbar t} - \mu^2 \right) \right] F(\mu) + \left[1 + i \left(\frac{(a+b)^2}{4\hbar t} - \nu^2 \right) \right] F(\nu) \right\} G_0. \quad (4.17)$$

Par ailleurs, en remplaçant la dérivée temporelle de H dans la dérivée temporelle de G , on trouve

$$\frac{\partial G}{\partial t} = \frac{-1}{t} \left\{ \frac{\mu \mp \nu}{2\sqrt{i\pi}} + \left[1 + i \left(\frac{(a+b)^2}{4\hbar t} - \mu^2 \right) \right] F(\mu) + \left[1 + i \left(\frac{(a+b)^2}{4\hbar t} - \nu^2 \right) \right] F(\nu) \right\} G_0, \quad (4.18)$$

ce qui vérifie bien l'équation (4.1) de Schrödinger.

Références

- [1] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*. Dover Publications, Inc., Mineola, New York, 2nd édition, en particulier p. 382-386, 2005.
- [2] L. S. Schulman, *Exact Time-Dependent Green's Function for the Half-Plane Barrier*. Phys. Rev. Letters, Vol. 49, p. 599-601, 1982.
- [3] L. S. Schulman, *Ray Optics for Diffraction : A Useful Paradox in a Path Integral Context*. Proceedings of Wave-Particle Dualism, S. Diner et al., eds., p. 253-272, 1984.
- [4] L. S. Schulman et R. W. Ziolkowski, *Path Integral Asymptotics in the Absence of Classical Paths*. proceedings of Path Integrals from meV to MeV, V. Sa-yakanit et al., eds., World Scientific, p. 253-278, 1989.
- [5] A. J. W. Sommerfeld, *Optics*. Academic Press, New York, p. 247-272, 1964.
- [6] J. B. Keller, *Geometrical Theory of Diffraction*. J. of the Optical Soc. of America, Vol. 52, p. 116-130, 1962.
- [7] M. Born et E. Wolf, *Principles of Optics*. Cambridge University Press, 7ème édition, chapitre XI, 1999.
- [8] P. B. Sunil Kumar et G. S. Ranganath, *Geometrical Theory of Diffraction*. Pramana - J. Phys., Vol. 37, p. 457-488, 1991.