

L'Intégrale de Chemin

Thomas Bernet et Jonathan Bertolaccini

31 mai 2011

Table des matières

1	Introduction	2
1.1	Discrétisation du temps	2
1.2	Démarche de Faddeev	2
1.2.1	Forme du hamiltonien	2
1.2.2	Ordre de Weyl	3
1.3	Formule de Feynman et apparition du lagrangien	5
2	Premières applications	7
2.1	Potentiels vecteurs et équation de Schrödinger	7
2.2	Le mouvement brownien	9
3	Calcul de propagateurs	14
3.1	Particule libre	14
3.2	Potentiel quadratique	15
3.3	Oscillateur harmonique	18
3.3.1	Oscillateur harmonique libre	18
3.3.2	Oscillateur harmonique libre, méthode Feynman	20
3.3.3	Oscillations forcées	22
3.3.4	Amplitude de transition dans le vide	25
4	Méthode des variations	30
4.1	Premier et second ordre	30
5	Optique	36
5.1	Optique principe de Huygens	36
5.2	Onde plane	36
5.3	Au voisinage du point focal sur l'axe optique	37
5.4	Au voisinage du point focal et de la caustique	39
5.5	La fonction d'Airy	41
6	BKW - Approximation semi-classique	45
6.1	BKW - Approximation semi-classique	45
6.1.1	Approximation BKW	45
6.1.2	Approximation BKW généralisée	46
6.1.3	Aparté sur l'approximation asymptotique	48
6.1.4	Retour à l'approximation BKW généralisée	49
6.1.5	Règle de Bohr-Sommerfeld	50
6.2	Niveaux d'Energie par l'intégrale de chemin	52
6.2.1	Aparté sur le champs de Jacobi	56
6.2.2	Retour aux niveaux d'Energie par l'intégrale de chemin	56
6.3	Spin	59
6.3.1	Etats cohérents	59
6.3.2	Intégrale de chemin pour un spin	62
6.3.3	Intégrale de chemin pour le spin, d'après E.A Kochetov	65
6.3.4	Equation du mouvement pour le spin	68
7	ANNEXE	70
7.1	Inversion d'opérateurs en dimension infinie par la méthode de Kochetov	70
	Bibliographie	74

Chapitre 1

Introduction

1.1 Discrétisation du temps

On étudie le mouvement d'une particule dont la position au temps initial t est q et la position au temps final t' est q' . On considère l'opérateur d'évolution $e^{-i(t'-t)H}$ dans lequel le hamiltonien H ne dépend pas du temps. Nous posons dans cette section $\hbar = 1$ par commodité. La valeur moyenne de cet opérateur d'évolution pris entre l'état initial $|q, t\rangle$ et l'état final $|q', t'\rangle$ est $\langle q', t' | e^{-i(t'-t)H} | q, t \rangle$ et sera noté de façon abrégée $\langle q', t' | q, t \rangle$. La première étape dans le calcul du propagateur $\langle q', t' | q, t \rangle$ consiste à discrétiser le temps en $n + 1$ intervalles élémentaires. On définit les instants t_j pour $j = 0, 1, \dots, n + 1$ tels que

$$t = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n < t_{n+1} = t' .$$

On applique alors la relation de fermeture sur tous les états $|q_j, t_j\rangle$ ce qui donne

$$\langle q', t' | q, t \rangle = \int dq_n \dots dq_1 \langle q', t' | e^{-i(t'-t_n)H} | q_n, t_n \rangle \times \langle q_n, t_n | e^{-i(t_n-t_{n-1})H} | q_{n-1}, t_{n-1} \rangle \quad (1.1.1)$$

$$\times \dots \times \langle q_1, t_1 | e^{-i(t_1-t)H} | q, t \rangle, \quad (1.1.2)$$

ou simplement, avec la notation abrégée

$$\langle q', t' | q, t \rangle = \int dq_n \dots dq_1 \langle q', t' | q_n, t_n \rangle \times \langle q_n, t_n | q_{n-1}, t_{n-1} \rangle \times \dots \times \langle q_1, t_1 | q, t \rangle . \quad (1.1.3)$$

1.2 Démarche de Faddeev

1.2.1 Forme du hamiltonien

Supposons que le hamiltonien est un polynôme en (\hat{P}, \hat{Q}) , dans lequel tous les \hat{P} sont à gauche et tous les \hat{Q} sont à droite. On remarque au passage que \hat{H} n'est plus hermitien.

$$\hat{H}(\hat{P}, \hat{Q}) := \sum_{n,m} \hat{P}^n \hat{Q}^m \quad (1.2.1)$$

Déterminons l'amplitude pour passer d'une position q à une position q' : $\langle q' | \hat{P}^n \hat{Q}^m | q \rangle$ et insérons la relation de fermeture sur l'impulsion, entre \hat{P} et \hat{Q}

$$\langle q' | \hat{P}^n \hat{Q}^m | q \rangle = \int \langle q' | \hat{P}^n | p \rangle \langle p | \hat{Q}^m | q \rangle dp$$

On sait que :

$$\langle q | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipq} \quad (1.2.2)$$

d'où

$$\langle q' | \hat{P}^n \hat{Q}^m | q \rangle = \int \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ip(q-q')} p^n q^m dp \quad (1.2.3)$$

Dans l'expression (1.2.3) p et q sont maintenant de simples variables. En appliquant le principe correspondance, c'est à dire en cherchant la limite semi-classique de cette expression, nous ne retrouvons pas le résultat suivant : un facteur $\frac{1}{2}$ lorsqu'une particule est plongée dans un champs. Ceci implique donc que la forme du hamiltonien choisi n'est pas correcte, puisqu'elle n'utilise pas la relation de commutation entre \hat{P} et \hat{Q} , il nous faut donc symétriser l'expression (1.2.1). Pour une discussion sur la symétrisation, nous vous recommandons l'ouvrage de M.Messiah. ([8],page 59). Pour approche formelle un article de J.E Moyal (ref. [12]) publié en 1949, encore utilisé en théorie des nombres, géométrie non-commutative, ...

1.2.2 Ordre de Weyl

On appelle $[Q^n, P^r]_w$ le commutateur de Weyl, il est à noter que ce dernier est hermitien. Nous nous restreindrons au second ordre ($r = 2$) puisque \hat{P} ne dépasse jamais le second degré, en effet dans le cas contraire la causalité ne serait plus respectée. Lee définit les deux relations suivantes [11] :

$$[Q^n, P]_w := \frac{1}{n+1}(Q^n P + Q^{n-1} P Q + \dots + P Q^n) \quad (1.2.4)$$

$$[Q^n, P^2]_w := \frac{2}{(n+1)(n+2)} \sum_{l,m} Q^{n-l-m} P Q^l P Q^m \quad (1.2.5)$$

Rappelons la relation de commutation entre \hat{P} et \hat{Q} :

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = -i \quad (1.2.6)$$

De plus, il est facile de vérifier que :

$$P Q^l = Q^l P - i l Q^{l-1} \quad (1.2.7)$$

Ordre 1 en P

Montrons que (1.2.4) peut aussi s'écrire sous la forme suivante :

$$[f(Q^n), P]_w = \frac{1}{2}(f(Q^n)P + P f(Q^n)) \quad (1.2.8)$$

En utilisant la relation (1.2.6), on fait passer les P sur la droite dans (1.2.4)

$$[Q^n, P]_w = Q^n P - i \frac{n}{2} Q^{n-1}$$

En procédant de la même façon, on vérifie que

$$[f(Q^n), P]_w = Q^n P - i \frac{n}{2} Q^{n-1}$$

Au final,

$$[Q^n, P]_w = [f(Q^n), P]_w = Q^n P - i \frac{n}{2} Q^{n-1}$$

Ordre 2 en P

Vérifions le coefficient de normalisation de (1.2.5)

$$\sum_{\substack{l,m \\ m+l \leq n}} 1 = \sum_{l=0}^n \sum_{m=0}^{n-l} 1 = \sum_{l=0}^n (n-l+1) = (n+1)^2 - \frac{n(n+1)}{2} = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$$

Montrons que (1.2.5) peut aussi s'écrire sous la forme suivante (avec $r = 2$) :

$$[Q^n, P^r]_w = \frac{1}{2^n} \sum_l C_n^l Q^{n-l} P^r Q^l \quad (1.2.9)$$

En utilisant la relation (1.2.7), on fait passer les P sur la droite dans (1.2.5), après trois échanges on obtient :

$$[Q^n, P^2]_w = \frac{2}{(n+1)(n+2)} \sum_{l,m} (Q^{l+m} P - i(l+2m)Q^{l+m-1} - m(l+m-1)Q^{l+m-2}) \quad (1.2.10)$$

On arrive au résultat suivant :

$$[Q^n, P^2]_w = Q^n P^2 - i n Q^{n-1} P - \frac{1}{4} n(n-1) Q^{n-2} \quad (1.2.11)$$

Retrouvons (1.2.11) en partant cette fois-ci de la relation (1.2.9). En utilisant (1.2.7), on fait passer les P sur la droite dans (1.2.9), Développons dans un premier temps le terme $P^2 Q^l$

$$P^2 Q^l = P(Q^l P - i l Q^{l-1}) = Q^2 P^2 - 2i l Q^{l-1} P + l(l-1) Q^{l-2}$$

d'où, en multipliant par $\frac{1}{2^n} \sum_l C_n^l$

$$[Q^n, P^2]_w = \frac{1}{2^n} \sum_l C_n^l (Q^n P^2 - 2i l Q^{n-1} P - l(l-1) Q^{n-2})$$

Il nous faut maintenant calculer explicitement les sommes suivantes :

$$\begin{aligned}\sum_l l C_n^l &= \sum_l l \frac{n!}{l!(n-l)!} = \sum_l \frac{n(n-1)!}{(l-1)!(n-l)!} = n2^{n-1} \\ \sum_l l(l-1)C_n^l &= \sum_l \frac{n(n-1)(n-2)!}{(l-2)!(n-l)!} = n(n-1)2^{n-2}\end{aligned}$$

Où l'on a utilisé le résultat bien connu : $\sum_l C_n^l = 2^n$

Retour au calcul de $\langle q' | \hat{H}(\hat{P}, \hat{Q}) | q \rangle$:

Utilisons (1.2.9), insérons la relation de fermeture sur p , et appliquons (1.2.2)

$$\begin{aligned}\langle q' | [Q^n, P^r]_w | q \rangle &= \frac{1}{2^n} \sum_l C_n^l \int \frac{dp}{2\pi} \langle q' | [Q^{n-l} | p \rangle \langle p | P^r Q^l | q \rangle \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_l C_n^l \int \frac{dp}{2\pi} q'^{n-l} \langle q' | p \rangle \langle p | q \rangle p^r q^l \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dp e^{ip(q'-q)} p^r \frac{1}{2^n} \sum_l C_n^l q'^{n-l} q^l \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dp e^{ip(q'-q)} p^r \left(\frac{q'+q}{2} \right)^n\end{aligned}\tag{1.2.12}$$

On constate que l'intégrale de chemin permet de changer le statut d'opérateur à celui de variable. En effet les relations de commutation entre opérateurs seront alors exprimées sous forme d'une combinaison algébrique appropriée des variables (associées aux opérateurs) et déterminée lors de la discrétisation. Cette non-commutativité des opérateurs est liée au caractère fini et non nul de \hbar .

On peut schématiser de la façon suivante ce processus :

$$\hat{H}(\hat{P}, \hat{Q}) \quad \underline{\text{Discretisation}} \quad \hat{H}\left(p, \left(\frac{q+q'}{2}\right)\right)$$

Nous montrerons dans la section 2.1 (page 7) que ce choix de variables est primordial pour retrouver un certain nombre de résultats solides comme le principe de correspondance pour une particule dans un champ, ou même plus fondamentalement pour retrouver (ou vérifier) l'équation de Schrödinger. Finalement on est conduit à penser que tout hamiltonien doit s'écrire sous forme d'un commutateur de Weyl.

Reprenons le calcul d'une brique élémentaire dans l'expression de l'amplitude $\langle q' | e^{-iH(t'-t)} | q \rangle$ et définissons la notation suivante : $\langle q', t' | q, t \rangle := \langle q' | e^{-i\varepsilon \hat{H}(\hat{P}, \hat{Q})} | q \rangle$

On rappelle que $\varepsilon := \frac{T}{n} = \frac{t'-t}{n}$

$n-2$ représente le nombre de segments élémentaires joignant q à q' . On peut donc choisir arbitrairement grand ce nombre, ce qui implique que ε est un arbitrairement petit et justifie donc un développement de l'exponentielle au premier ordre.

$$\langle q', t' | q, t \rangle := \langle q' | e^{-i\varepsilon \hat{H}(\hat{P}, \hat{Q})} | q \rangle = \langle q', t' | \hat{I} - i\varepsilon \hat{H}(\hat{P}, \hat{Q}) + o(\varepsilon^2) | q, t \rangle$$

Nous venons de montrer, en utilisant le commutateur de Weyl, que la relation de commutation (1.2.6) et le processus de discrétisation impliquent d'utiliser le jeu de variables $(p, (\frac{q+q'}{2}))$.

$$\langle q', t' | \hat{I} - i\varepsilon \hat{H}(\hat{P}, \hat{Q}) + o(\varepsilon^2) | q, t \rangle = \int \frac{dp}{2\pi} e^{ip(q'-q)} (1 - i\varepsilon H(p, (\frac{q+q'}{2})) + o(\varepsilon^2))$$

Nous sommes tenter d'exprimer la quantité $(1 - i\varepsilon H(p, (\frac{q+q'}{2})))$ sous forme exponentielle, ce qui ne pose pas de problème du point de vue de la commutation, puisque (p, q, q') sont des variables. En revanche il nous faut estimer l'erreur commise en ε .

- $\frac{1}{\varepsilon}$ représente le nombre de répétitions de l'erreur
- ε^2 représente la taille de l'erreur

$$o\left(\frac{1}{\varepsilon}\varepsilon^2\right) = o(\varepsilon)$$

Au final

$$\langle q', t' | q, t \rangle = \langle q' | e^{-i\varepsilon \hat{H}(\hat{P}, \hat{Q})} | q \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \frac{dp}{2\pi} e^{ip(q' - q) - i\varepsilon H(p, (\frac{q+q'}{2}))} \quad (1.2.13)$$

Comme nous le montrerons dans la section 2.1 (page 7) il est indispensable de prendre la position moyenne dans l'hamiltonien exprimé avec les variables p et q .

1.3 Formule de Feynman et apparition du lagrangien

L'intérêt de cette approche réside dans la reformulation de la mécanique quantique au moyen de variables et non d'opérateurs. Cette approche, développée par R. P. Feynman (1918 – 1988) dans les années quarante, a pour particularité de faire intervenir le lagrangien et l'action associés au mouvement étudié à la place du hamiltonien dans le propagateur, dans les cas où le hamiltonien se décompose en une somme de $n + 1$ termes dépendant soit d'une impulsion p_j , dans le terme d'énergie cinétique $\frac{p_j^2}{2m}$, soit de la valeur moyenne de la position \bar{q}_j , dans un potentiel $V(\bar{q}_j)$. Cependant, les propriétés de non commutation des opérateurs en mécanique quantique ne disparaîtront pas mais se retrouvent masquées par la discrétisation du temps.

En considérant un intervalle $t' - t$ discrétisé en intervalles égaux infiniment petits ε , on note que le propagateur

$$\langle q', t' | q, t \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n+1}} \int dq_1 \dots dq_n dp_0 \dots dp_n \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n \varepsilon \left(p_j \frac{q_{j+1} - q_j}{\varepsilon} - H \left(p_j, \frac{q_j + q_{j+1}}{2} \right) \right) \right) \quad (1.3.1)$$

fait intervenir la valeur moyenne entre deux positions q_j et q_{j+1} notée $\bar{q}_j = \frac{q_j + q_{j+1}}{2}$, et la variation prise dans cet intervalle ε , notée $\dot{q}_j = \frac{q_{j+1} - q_j}{\varepsilon}$, analogue à une dérivée pour un temps que l'on considère continu. Nous notons ainsi

$$\langle q', t' | q, t \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n+1}} \int dq_1 \dots dq_n dp_0 \dots dp_n \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n \varepsilon (p_j \dot{q}_j - H(p_j, \bar{q}_j)) \right). \quad (1.3.2)$$

À ce stade, nous considérons un hamiltonien ne faisant pas intervenir de produit entre les positions moyennes et les impulsions.

$$H(p_j, \bar{q}_j) = \frac{p_j^2}{2m} + V(\bar{q}_j). \quad (1.3.3)$$

On calcule alors le terme présent dans l'exponentielle du propagateur, qui fait apparaître le lagrangien $L(\bar{q}_j, \dot{q}_j)$,

$$p_j \dot{q}_j - \frac{p_j^2}{2m} - V(\bar{q}_j) = -\frac{1}{2m} (p_j - m\dot{q}_j)^2 + \frac{1}{2} m \dot{q}_j^2 - V(\bar{q}_j) = -\frac{1}{2m} (p_j - m\dot{q}_j)^2 + L(\bar{q}_j, \dot{q}_j). \quad (1.3.4)$$

D'habitude, on identifie l'impulsion p à $m\dot{q}$, ce qui simplifie l'expression ci-dessus, permettant d'écrire $L = p\dot{q} - H$, mais en faisant cela maintenant, on ne tiendrait pas compte de l'impulsion dans l'intégrale gaussienne présente dans le propagateur. Nous avons

$$\langle q', t' | q, t \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n+1}} \int dq_1 \dots dq_n dp_0 \dots dp_n \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n \varepsilon \left(-\frac{(p_j - m\dot{q}_j)^2}{2m} + \frac{1}{2} m \dot{q}_j^2 - V(\bar{q}_j) \right) \right), \quad (1.3.5)$$

dont on sépare les variables d'impulsion et de position,

$$\langle q', t' | q, t \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n+1}} \left(\int dp \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{(p - m\dot{q})^2}{2m} \right) \right)^{n+1} \quad (1.3.6)$$

$$\times \int dq_1 \dots dq_n \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n \varepsilon \left(\frac{1}{2} m \dot{q}_j^2 - V(\bar{q}_j) \right) \right), \quad (1.3.7)$$

qui s'écrit, en calculant l'intégrale sur p et en ayant $\varepsilon \rightarrow 0$ (limite continue),

$$\langle q', t' | q, t \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n+1}} \left(\sqrt{\frac{2\pi\hbar m}{i\varepsilon}} \right)^{n+1} \int dq_1 \dots dq_n \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} d\tau \left(\frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(\bar{q}) \right) \right). \quad (1.3.8)$$

On fait ainsi apparaître l'action S , fonctionnelle de la position q au temps τ ,

$$\int_t^{t'} d\tau \left(\frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(\bar{q}) \right) = \int_t^{t'} d\tau L(\bar{q}, \dot{q}) = S[q(\tau)], \quad (1.3.9)$$

ce qui donne finalement la formule de Feynman,

$$\boxed{\langle q', t' | q, t \rangle = \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}} \right)^{n+1} \int [dq] \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[q(\tau)] \right)}, \quad (1.3.10)$$

où $[dq(\tau)]$ est associé à la sommation sur l'ensemble des positions q , respectivement associées aux instants τ entre t et t' , et formant un *chemin*. Puisque nous sommes sur tous ces instants τ nous parlons d'*intégrale de chemin*.

Cette expression du propagateur dans le cas simple du hamiltonien (1.3.3) fait apparaître l'action S , les chemins $q(\tau)$ et la constante \hbar , très petite, dans l'exponentielle. La nature de cette action sera précisée plus tard, ainsi que son lien avec la mécanique classique.

Remarque : le facteur présent à cause de la normalisation contient le produit du nombre imaginaire i par l'intervalle de temps infiniment petit ε , qui peut se lire comme un temps imaginaire,

$$\sqrt{i\varepsilon} \xrightarrow{\text{temps imaginaire}} \sqrt{\varepsilon}.$$

Nous ne développerons pas cette interprétation.

Chapitre 2

Premières applications

2.1 Potentiels vecteurs et équation de Schrödinger

Si l'intégrale de chemin est équivalente à la formulation habituelle de la mécanique quantique, nous devons retrouver l'équation de Schrödinger. Nous nous plaçons pour cela dans le cas d'une particule en présence d'un champ électromagnétique, auquel sont associés les potentiels scalaire et vecteur respectivement notés V et \vec{A} . Au temps initial, pris en 0, la particule est positionnée en y , et au temps t la particule est positionnée en x . Le propagateur s'écrit alors

$$G(x, t; y, 0) \propto \int_{y,0}^{x,t} dx(\tau) e^{\frac{i}{\hbar} S[x(\tau)]}, \quad (2.1.1)$$

où l'action S s'exprime en fonction du lagrangien,

$$S[x(\tau)] = \int_0^t d\tau L(x, \dot{x}). \quad (2.1.2)$$

Pour une particule de charge e placée dans un champ électromagnétique, le lagrangien vaut

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{e}{c} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A} - V(x). \quad (2.1.3)$$

Il faut alors considérer l'expression du propagateur à trois dimensions, en prenant la valeur du potentiel scalaire en q_j et celle du potentiel vecteur en \vec{x}_j . En effet, ce choix s'avèrera nécessaire pour retrouver l'équation de Schrödinger, en particulier lorsque nous développerons le terme issu du potentiel \vec{A} . On a alors

$$G(\vec{x}, t; \vec{y}, 0) = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{3(n+1)}{2}} \int d^3x_1 \dots d^3x_n e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n \varepsilon \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\varepsilon} \right)^2 - V(x_j) + \frac{e}{c} \frac{x_{j+1} - x_j}{\varepsilon} \cdot \vec{A}(\vec{x}_j) \right)}. \quad (2.1.4)$$

La position initiale est donnée par la fonction d'onde $\psi(\vec{y}, t)$. En appliquant le propagateur pour un temps infiniment petit ε , nous obtenons la fonction d'onde

$$\psi(\vec{x}, t + \varepsilon) = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}} \int d^3y e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{\vec{x} - \vec{y}}{\varepsilon} \right)^2 - V(\vec{y}) + \frac{e}{c} \frac{\vec{x} - \vec{y}}{\varepsilon} \cdot \vec{A} \left(\frac{\vec{x} + \vec{y}}{2} \right) \right)} \psi(\vec{y}, t). \quad (2.1.5)$$

Il est commode d'introduire le changement de variables $\vec{\xi} = \vec{y} - \vec{x}$ correspondant au terme quadratique présent dans l'exponentielle de la fonction d'onde et ne changeant pas l'élément différentiel $d^3\xi = d^3y$. La fonction d'onde s'écrit alors

$$\psi(\vec{x}, t + \varepsilon) = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}} \int d^3\xi e^{-\frac{m\varepsilon^2}{2i\hbar\varepsilon}} e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(\vec{x} + \vec{\xi})} e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar c} \vec{\xi} \cdot \vec{A} \left(\vec{x} + \frac{\vec{\xi}}{2} \right)} \psi(\vec{x} + \vec{\xi}, t). \quad (2.1.6)$$

On remarque l'apparition d'un facteur $\frac{1}{2}$ dans le terme $\vec{A} \left(\vec{x} + \frac{\vec{\xi}}{2} \right)$, provenant du choix de la position moyenne pour paramétrer ce potentiel, qui jouera un rôle important dans la suite, pour faire le lien avec l'équation de Schrödinger.

L'intervalle de temps considéré étant très petit, on réalise un développement de chaque terme au premier ordre en ε . Les intégrales à calculer seront de la forme $\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) e^{-\frac{a}{\varepsilon} x^2}$ avec $f(x)$ un polynôme. On rappelle

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{a}{\varepsilon} x^2} = \sqrt{\frac{\pi\varepsilon}{a}} \quad \text{et} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-\frac{a}{\varepsilon} x^2} = \frac{1}{2} \frac{\varepsilon}{a} \sqrt{\frac{\pi\varepsilon}{a}}. \quad (2.1.7)$$

L'intégrale donne zéro (par parité) pour les puissances impaires de x . On note que dans chacune des deux expressions ci-dessus, la racine carrée se simplifiera avec le facteur de normalisation. La seconde expression, lorsque $f(x) = x^2$, est donc proportionnelle à ε , l'ordre du développement. On considère aussi que sur un intervalle de temps aussi court, le déplacement $|\vec{\xi}|$ est lui aussi petit devant la norme de \vec{x} .

La fonction d'onde finale donne

$$\psi(\vec{x}, t + \varepsilon) = \psi(\vec{x}, t) + \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (2.1.8)$$

Le potentiel scalaire donne

$$V(\vec{x} + \vec{\xi}) = V(\vec{x}) + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{x}) = V(\vec{x}) + \xi_n \nabla_n V(\vec{x}), \quad (2.1.9)$$

ce qui se simplifie dans l'exponentielle

$$e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(\vec{x} + \vec{\xi})} = e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} (V(\vec{x}) + \xi_n \nabla_n V(\vec{x}))} \simeq 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(\vec{x}) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \xi_n \nabla_n V(\vec{x}), \quad (2.1.10)$$

en utilisant la convention d'Einstein pour les sommations. On remarque que le dernier terme est proportionnel au produit des composantes de $\vec{\xi}$ par epsilon. Pour cette raison, il sera inutile par la suite car il donnera un terme du second ordre en ε ou bien un terme en puissance impaire de ξ .

Le potentiel vecteur donne

$$\vec{A}\left(\vec{x} + \frac{\vec{\xi}}{2}\right) = \vec{A}(\vec{x}) + \frac{1}{2} \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} \vec{A}(\vec{x}) = \vec{A}(\vec{x}) + \frac{1}{2} \xi_n \nabla_n \vec{A}(\vec{x}) \quad (2.1.11)$$

ce qui se développe aussi dans l'exponentielle, au second ordre en ξ pour faire apparaître deux termes en ξ^2 , donc proportionnellement à ε ,

$$e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar c} \vec{\xi} \cdot \vec{A}\left(\vec{x} + \frac{\vec{\xi}}{2}\right)} = e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar c} (\xi_n A_n(\vec{x}) + \frac{1}{2} \xi_n \xi_m \nabla_m A_n(\vec{x}))} \quad (2.1.12)$$

$$= 1 - \frac{ie}{\hbar c} \xi_n A_n(\vec{x}) - \frac{ie}{2\hbar c} \xi_n \xi_m \nabla_m A_n(\vec{x}) - \frac{e^2}{\hbar^2 c^2} \xi_n A_n(\vec{x}) \xi_m A_m(\vec{x}). \quad (2.1.13)$$

La fonction d'onde initiale donne

$$\psi(\vec{x} + \vec{\xi}, t) = \psi(\vec{x}, t) + \xi_n \nabla_n \psi(\vec{x}, t) + \frac{1}{2} \xi_n \xi_m \frac{\partial^2 \psi(\vec{x}, t)}{\partial x_n \partial x_m}, \quad (2.1.14)$$

en la développant au second ordre en ξ .

Le produit des termes issus des développements des deux potentiels et de la fonction d'onde initiale donne

$$\psi + \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3}{2}} \int d^3\xi e^{-\frac{m\xi^2}{2i\varepsilon\hbar}} \quad (2.1.15)$$

$$\times \left(\psi + \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_n \partial x_n} - \frac{ie}{\hbar c} A_n \nabla_n \psi - \frac{ie}{2\hbar c} \nabla_m A_n \psi - \frac{e^2}{\hbar^2 c^2} A_n A_m \psi \right) \xi_n \xi_m - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V \psi \right) \quad (2.1.16)$$

en ne gardant que les termes en puissance de ξ paires et du premier ordre en ε .

De plus, on remarque que si $n \neq m$, l'intégrale sera nulle. On a donc

$$\psi + \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V \psi + \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3}{2}} \sum_{n=1}^3 \int d^3\xi e^{-\frac{m\xi^2}{2i\varepsilon\hbar}} \quad (2.1.17)$$

$$\times \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_n^2} - \frac{ie}{\hbar c} A_n \frac{\partial \psi}{\partial x_n} - \frac{ie}{2\hbar c} \frac{\partial A_n}{\partial x_n} \psi - \frac{e^2}{\hbar^2 c^2} A_n^2 \psi \right) \xi_n^2. \quad (2.1.18)$$

Il faut alors calculer trois intégrales donnant toutes

$$\int d^3x x_1^2 e^{-ax^2} = \int dx_1 dx_2 dx_3 x_1^2 e^{-a(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)} = \frac{1}{2a} \left(\frac{\pi}{a}\right)^{\frac{3}{2}}. \quad (2.1.19)$$

Ce résultat ne dépend pas de la coordonnée x_1 et peut donc être factorisé dans l'expression (2.1.18), ce qui donne

$$\varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i\varepsilon}{\hbar} V \psi + \left(\frac{1}{2} \Delta \psi - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi - \frac{ie}{2\hbar c} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) \psi - \frac{e^2}{\hbar^2 c^2} \vec{A}^2 \psi \right) \frac{i\varepsilon \hbar}{m}. \quad (2.1.20)$$

On simplifie par ε et on multiplie par $i\hbar$,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + \frac{i\hbar e}{2mc} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) \psi + \frac{i\hbar e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi + \frac{e^2}{mc^2} \vec{A}^2 \psi + V \psi. \quad (2.1.21)$$

Il faut désormais identifier cette expression à l'équation de Schrödinger pour une particule dans un champ électromagnétique, qui s'écrit

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi + V \psi} . \quad (2.1.22)$$

En développement le terme

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi = \vec{p}^2 \psi - \frac{e}{c} (\vec{p} \vec{A} + \vec{A} \vec{p}) \psi + \frac{e^2}{c} \vec{A}^2 \psi = \vec{p}^2 \psi + \frac{i\hbar e}{c} ((\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) \psi + 2\vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi) + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \vec{A}^2 \psi \quad (2.1.23)$$

on retrouve bien l'équation (2.1.22) car $\vec{p} = i\hbar \vec{\nabla}$. Ainsi, on vérifie bien l'équivalence entre la formulation habituelle de la mécanique quantique, utilisant des opérateurs et l'équation de Schrödinger, et la formulation lagrangienne de l'intégrale de chemin utilisant des variables.

2.2 Le mouvement brownien

Considérons une particule se déplaçant sur un axe. La longueur d'un déplacement est notée Δ . La probabilité de se déplacer d'un pas sur la gauche (resp. droite) est donnée par q (resp. p).

Intéressons nous à la position de la particule après un temps $t = N\varepsilon$ où ε représente le temps élémentaire pour effectuer un saut, et N le nombre de pas. Soit ν (resp. μ) le nombre de sauts effectués à gauche (resp. droite).

Cherchons $W(j, N)$ la probabilité pour que la particule se situe à la position $j\Delta$.

On déduit de l'énoncé ci-dessus que :

$$N = \mu + \nu \quad (2.2.1)$$

$$j = \mu - \nu \quad (2.2.2)$$

$$\mu = \frac{1}{2}(N + j) \quad (2.2.3)$$

$$\nu = \frac{1}{2}(N - j) \quad (2.2.4)$$

D'un point de vue combinatoire, la probabilité pour que la particule se situe à la position $j\Delta$ est donnée par la loi binomiale. En effet, il nous faut d'abord :

- choisir μ pas à droite parmi N pas, sachant que les pas sont indiscernables : C_N^μ
- placer ces μ pas, ce qui revient à multiplier μ fois la probabilité de faire un pas à droite q : q^μ
- et enfin placer les pas restants c'est à dire multiplier ν fois la probabilité de faire un pas à gauche p : p^ν

Les pas étant décorélés entre eux la probabilité pour que la particule se situe à la position $j\Delta$ s'écrit comme le produit de ces trois termes :

$$W(j, N) = C_N^\mu q^\mu p^\nu \quad (2.2.5)$$

Utilisons l'approximation de Stirling (que l'on peut justifier via la fonction Γ et la méthode du col) :

$$n! \sim \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e} \right)^n \quad (2.2.6)$$

Réécrivons (2.2.6) pour des raisons calculatoires :

$$n! \sim \exp \left(n \log n - n + \frac{1}{2} \log n + \frac{1}{2} \log 2\pi \right) \quad (2.2.7)$$

Evaluons la quantité $\log W(j, N)$ dont les variations sont amorties :

$$\begin{aligned} \log W(j, N) = & N \log N - N + \frac{1}{2} \log N + \frac{1}{2} \log 2\pi \\ & - \frac{N+j}{2} \log \left(\frac{N+j}{2} \right) - \frac{1}{2} \log \left(\frac{N+j}{2} \right) - \frac{1}{2} \log 2\pi \\ & - \frac{N-j}{2} \log \left(\frac{N-j}{2} \right) - \frac{1}{2} \log \left(\frac{N-j}{2} \right) - \frac{1}{2} \log 2\pi \\ & + \mu \log p + \nu \log q \end{aligned}$$

Après quelques simplifications élémentaires,

$$\log W(j, N) = N \log N + \frac{1}{2} \log N - \frac{1}{2} \log 2\pi \quad (2.2.8)$$

$$- \frac{N+j}{2} \log(N+j) - \frac{1}{2} \log(N+j) \quad (2.2.9)$$

$$- \frac{N-j}{2} \log(N-j) - \frac{1}{2} \log(N-j) \quad (2.2.10)$$

$$\mu \log p + \nu \log q + N \log 2 + \log 2 \quad (2.2.11)$$

Après un grand nombre de pas, on peut supposer que $j \leq N$ d'après (2.2.1) et (2.2.2). Occupons nous du premier terme de (2.2.9) et du premier terme de (2.2.10).

$$- \frac{N+j}{2} \log(N+j) - \frac{N-j}{2} \log(N-j) = -N \log N - \frac{j^2}{2N} + o\left(\frac{j^2}{N^2}\right) \quad (2.2.12)$$

Toujours dans l'approximation des temps longs, $j \leq N$, occupons nous du second terme de (2.2.9) et du second terme de (2.2.10).

$$- \frac{1}{2} \log(N+j) - \frac{1}{2} \log(N-j) = -\log N + \frac{j^2}{2N^2} + o\left(\frac{j^2}{N^2}\right) \quad (2.2.13)$$

Réécrivons les 2 premiers termes de (2.2.11) en utilisant (2.2.3) et (2.2.4). Pour cela introduisons une nouvelle quantité α telle que $\alpha := N(p-q)$. Cet indice permet de quantifier la non équiprobabilité de la marche aléatoire 1D.

Si il n'y pas équiprobabilité, la particule peut partir à l'infini à gauche ou à droite, scénario que nous écartons donc p et q sont proches, et $\alpha \rightarrow 0$, ce qui est d'autant plus vrai pour $\frac{\alpha}{N}$. On peut exprimer p et q en fonction de α , en utilisant le fait que les probabilités sont complètes ($p+q=1$).

$$p = \frac{1}{2}(1+\alpha) \quad (2.2.14)$$

$$q = \frac{1}{2}(1-\alpha) \quad (2.2.15)$$

Les 2 premiers termes de (2.2.11) deviennent en utilisant les relations ci-dessus :

$$\mu \log p + \nu \log q = \frac{j\alpha}{N} - \frac{\alpha^2}{2N} + o\left(\frac{\alpha^2}{N^2}\right) \quad (2.2.16)$$

Au final, en rassemblant (2.2.12), (2.2.13), (2.2.16) dans l'expression de $\log W(j, N)$:

$$\log W(j, N) = -\frac{\alpha^2}{2N^2} - \frac{j^2}{2N^2} + \frac{j\alpha}{N} + \log 2 - \frac{1}{2} \log N - \frac{1}{2} \log 2\pi$$

On en déduit l'expression de la probabilité pour que la particule se situe à la position $j\Delta$:

$$W(j, N) = \sqrt{\frac{2}{N\pi}} e^{-\frac{(j-\alpha)^2}{2N}} \quad (2.2.17)$$

Il ne faut pas oublier que dans (2.2.17) $j \in \mathbb{Z}$ c'est à dire que cette description est discrète. Notre but est de passer à une description continue, posons $x := j\Delta$, (où l'on rappelle que Δ représente la longueur du pas), et exprimons la densité de probabilité de trouver la particule par unité de longueur et de temps $\rho(x, t)$.

$$\rho(x, t) = \frac{W(j, N)}{2\Delta} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{2\pi t \Delta^2}} \exp\left(-\frac{1}{2t} \frac{\varepsilon}{\Delta^2} (x - \alpha\Delta)^2\right)$$

Où l'on a divisé $W(j, N)$ par 2Δ pour des questions de normalisation. Pour justifier l'approximation continue, il faut pour x et t finis que $\Delta \rightarrow 0$, $\varepsilon \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$.

On suppose que $\frac{\varepsilon}{\Delta^2}$ tend vers une limite finie. Et posons $\frac{\varepsilon}{\Delta^2} := 2D$, avec D coefficient de diffusion.

On rappelle que $\alpha\Delta = N(p-q) = \frac{t}{\varepsilon} \Delta(p-q)$ et $(p-q) \rightarrow 0$ et on impose que $\frac{\Delta}{\varepsilon}(p-q)$ possède une limite finie. Nous verrons plus loin qu'il s'agit de la célérité. Posons d'ores et déjà $c := \frac{\Delta}{\varepsilon}(p-q)$.

Remarque : $\frac{\varepsilon}{\Delta} = 2D\Delta$ donc $c = \frac{1}{2D\Delta}(p-q)$ or $\Delta \rightarrow 0$, et $(p-q) \rightarrow 0$, nous avons ici une forme indéterminée ce qui implique qu'il faut choisir D judicieusement.

Dans ces conditions, et avec les nouvelles notations :

$$\rho(x, t) = \sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x-ct)^2}{4Dt}\right) \quad (2.2.18)$$

On peut vérifier que (2.2.18) est solution d'une équation de diffusion du type

$$\partial_t \rho(x, t) = D \partial_x^2 \rho(x, t) - c \partial_x \rho(x, t) \quad (2.2.19)$$

On remarque que cette équation de diffusion n'est pas réversible, puisqu'il s'agit d'une équation parabolique. Il est intéressant de noter que l'on peut retrouver l'équation (2.2.19) à partir d'une somme de variables aléatoires.

Le mathématicien américain, Norbert Wiener (1894 – 1964) s'intéressa à la somme sur les chemins de la densité $\rho(x, t)$ pour décrire le mouvement brownien.

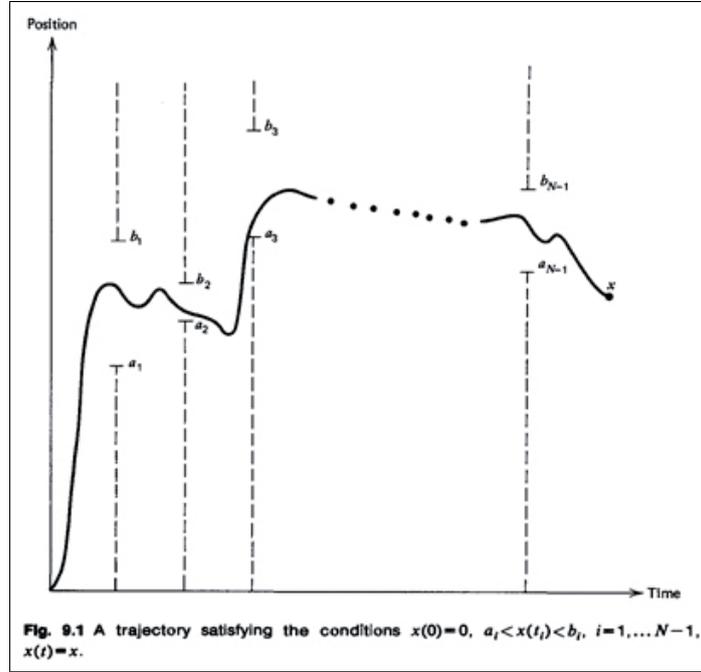
Si $x = 0$ à $t = 0$ alors $Prob(\text{particule} \in [a, b]) = \int_a^b \rho(x, t) dx$.

Si l'on subdivise le temps en N petits intervalles, comme nous l'avons fait pour l'intégrale de chemin

$$Prob([a_1, b_1[, t_1;]a_1, b_1[, t_1; \dots;]a_N, b_N[, t_N) = \int_{a_1}^{b_1} dx_1 \int_{a_2}^{b_2} dx_2 \dots \int_{a_N}^{b_N} dx_N \rho(x_1, t_1) \rho(x_2 - x_1, t_2 - t_1) \dots \rho(x_N - x_{N-1}, t_N - t_{N-1}) \quad (2.2.20)$$

L'expression (2.2.20) représente l'indépendance des déplacements, il n'y a pas de corrélations. Nous avons à faire à un processus sans mémoire, donc un processus de Markov. On peut interpréter (2.2.20) comme une probabilité conditionnelle.

L'intégrale de Wiener consiste donc à choisir un temps t_i et intégrer sur toutes les positions possibles de la particule, et recommencer sur tout l'intervalle de temps. Ceci est symbolisé par le schéma ci-dessous issu de Techniques And Applications of the Path Integration de L.S Schulman [1]. Comment définir une mesure dans



l'espace des fonctions continues telles que $x(0) = 0$ en dimension infinie? On effectue un produit cartésien finie (sur le temps) et aucune contrainte sur l'espace (donc dimension infinie), on parle de mesure cylindrique sur l'espace des chemins. On intègre le potentiel en considérant le terme cinétique comme une mesure sur l'espace produit cartésien des fonctions. Un des théorèmes de la théorie de la mesure annonce que tous les chemins dérivables, sont de mesure nulle. Ce qui est intuitif si l'on pense à la trajectoire de la particule sous forme discrétisée.

Posons

$$E_{xt} := \rho(x, t) = \sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x)^2}{4Dt}\right) \quad (2.2.21)$$

On développe l'exponentielle en série. (comme pour un traitement perturbatif)

$$W(x, t) = E_{xt} \exp \left(- \int_0^t U[x(\tau)] d\tau \right) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j!} E_{xt} \left[\int_0^t U[x(\tau)] d\tau \right]^j \quad (2.2.22)$$

et l'on pose par construction

$$W(x, t) := \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j W_j(x, t) \quad \text{avec} \quad W_j(x, t) := \frac{1}{j!} E_{xt} \left[\int_0^t U[x(\tau)] d\tau \right]^j \quad (2.2.23)$$

Explicitons les expressions pour différentes valeurs de j

Pour $j = 0$

$$W_0(x, t) = E_{xt} = \rho(x, t) \quad (2.2.24)$$

Pour $j = 1$

$$W_1(x, t) = E_{xt} \int_0^t U[x(\tau)] d\tau \quad (2.2.25)$$

$$= \int_0^t E_{xt} U[x(\tau)] d\tau \quad (2.2.26)$$

$$= \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \rho(x - \xi, t - \tau) U(x) \rho(\xi, \tau) d\tau \quad (2.2.27)$$

On remarque qu'il s'agit de l'expression d'une probabilité conditionnelle.

Avant de passer au point $j = 2$, il nous faut le lemme suivant, dont l'intérêt est d'ordonner les intégrations :

$$\left[\int_0^t f(\tau) \right]^N = N! \int_0^t d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_0^{\tau_{N-1}} d\tau_N f(\tau_1) \dots f(\tau_N) \quad (2.2.28)$$

Démonstration algébrique du lemme

$$g_N(t) = \left[\int_0^t f(\tau) \right]^N \quad (2.2.29)$$

On dérive

$$\frac{dg_N}{dt} = N g_{N-1}(t) f(t) \quad (2.2.30)$$

On intègre

$$g_N(t) = \int_0^t N g_{N-1}(\tau) f(\tau) d\tau \quad (2.2.31)$$

On voit poindre g_{N-1} dans l'expression (2.2.31), ceci suggère une récurrence. Et comme la proposition est vraie au rang 1, ceci termine la démonstration.

Revenons au cas $j = 2$ d'après l'expression (2.2.22)

$$W_2(x, t) = \frac{1}{2} E_{xt} \int_0^t U[x(\tau_1)] d\tau_1 \int_0^t U[x(\tau_2)] d\tau_2 \quad (2.2.32)$$

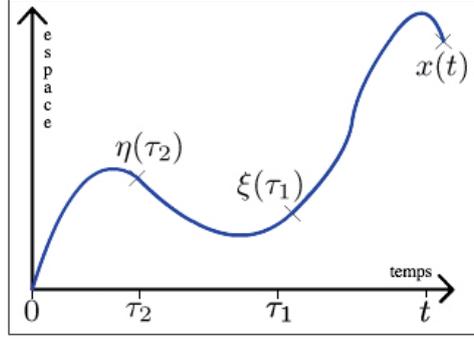
$$= \int_0^t \int_0^{\tau_1} d\tau_1 E_{xt} U[x(\tau_1)] U[x(\tau_2)] d\tau_2 \quad \text{avec} \quad \tau_2 < \tau_1 \quad (2.2.33)$$

$$= \int_0^t d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \rho(x - \xi, t - \tau_1) U(\xi) \rho(\xi - \eta, \tau_1 - \tau_2) U(\eta) \rho(\eta, \tau_2) \quad (2.2.34)$$

$$= \int_0^t d\tau_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \rho(x - \xi, t - \tau_1) U(\xi) W_1(\xi, \tau_1) \quad (2.2.35)$$

Pour passer de (2.2.33) à (2.2.34) nous avons utilisé notre lemme, dont l'intérêt est d'ordonner les intégrations. Le schéma ci-dessous permet de visualiser les étapes du calcul (2.2.34) et (2.2.35), il représente une trajectoire possible.

A l'étape (2.2.34) on écrit la densité de probabilité pour aller de $x(0) = 0$ à la position $\eta(\tau_2)$ en produit avec



celle pour aller de $\eta(\tau_2)$ à la position $\xi(\tau_1)$, et enfin produit avec celle pour aller de $\xi(\tau_1)$ à la position $x(t)$ (pas de corrélation), et on évalue le potentiel $U(x)$ en η et en ξ .

A l'étape (2.2.35) on a intégré sur η et sur τ_2 , sur leurs intervalles respectifs, contribution que l'on appelle W_1 .

Au final, on peut généraliser ce résultat comme suit

$$W_j(x, t) = \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \rho(x - \xi, t - \tau_1) U(\xi) W_{j-1}(\xi, \tau) \quad (2.2.36)$$

Que l'on peut réécrire pour faire apparaître $W_0(x, t)$ via la définition (2.2.21)

$$W_j(x, t) = \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{\infty} d\xi W_0(x - \xi, t - \tau_1) U(\xi) W_{j-1}(\xi, \tau) \quad (2.2.37)$$

Développons (comme pour un traitement perturbatif) $W(x, t)$ en utilisant (2.2.22) que l'on rappelle ici

$$W(x, t) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j!} E_{xt} \left[\int_0^t U[x(\tau)] d\tau \right]^j \quad (2.2.38)$$

$$= W_0(x, t) + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j!} E_{xt} \left[\int_0^t U[x(\tau)] d\tau \right]^j \quad (2.2.39)$$

$$= W_0(x, t) - \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(j+1)!} E_{xt} \left[\int_0^t U[x(\tau)] d\tau \right]^{j+1} \quad (2.2.40)$$

$$= W_0(x, t) - \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j W_{j+1}(x, t) \quad (2.2.41)$$

$$= W_0(x, t) - \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{\infty} d\xi W_0(x - \xi, t - \tau_1) U(\xi) W_j(\xi, \tau) \quad (2.2.42)$$

$$= W_0(x, t) - \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{\infty} d\xi W_0(x - \xi, t - \tau_1) U(\xi) W(\xi, \tau) \quad (2.2.43)$$

A l'étape (2.2.40) on a utilisé la définition (2.2.23). A l'étape (2.2.42) on a utilisé la définition (2.2.37).

Or $W_0(x, t)$ vérifie l'équation de diffusion par définition, puisqu'il s'agit de la densité de probabilité de trouver la particule au temps t et à la position x . Construisons cet opérateur "diffusion" $\hat{D}_{iff} := \partial_t - \partial_x^2$ et appliquons-le à (2.2.43).

Remarquons préalablement que $W_0(x - \xi, t - \tau)$ est une distribution centrée et piquée (pour des temps courts) sur ξ et τ , elle agira comme une distribution $\delta(x - \xi)\delta(t - \tau)$ de Dirac.

$$(\partial_t - \partial_x^2)W(x, t) = (\partial_t - \partial_x^2)W_0(x, t) - (\partial_t - \partial_x^2) \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{\infty} d\xi W_0(x - \xi, t - \tau_1) U(\xi) W(\xi, \tau)$$

$$\hat{D}_{iff}W(x, t) = -\hat{D}_{iff} \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{\infty} d\xi W_0(x - \xi, t - \tau_1) U(\xi) W(\xi, \tau)$$

$$\hat{D}_{iff}W(x, t) = -\hat{D}_{iff}U(x)W(x, t)$$

Au final on retrouve l'équation de Schrödinger 1D

$$\boxed{[\hat{D}_{iff} + U(x)]W(x, t) = [\partial_t - \partial_x^2 + U(x)]W(x, t) = 0} \quad (2.2.44)$$

Chapitre 3

Calcul de propagateurs

3.1 Particule libre

On considère une particule libre, les potentiels de son hamiltonien sont nuls. Cette particule se déplaçant dans un espace à une dimension, son propagateur s'écrit, sous forme continue et discrète en temps,

$$G(x, t; y, 0) = \int_{y,0}^{x,t} \prod_{\tau} dx(\tau) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \frac{a}{2} m \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 d\tau} \quad (3.1.1)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \int dx_1 \dots dx_N e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \sum_{j=0}^N (x_{j+1} - x_j)^2}, \quad (3.1.2)$$

où $y = x_0$, $x = x_{N+1}$ et $\varepsilon = \frac{t}{N+1}$. Nous allons calculer le propagateur pour deux intervalles successifs, pouvant être de tailles différentes, et délimités par les trois positions u , v et w . Par récurrence, nous calculerons l'action totale. En tenant compte de la normalisation, nous remarquons tout d'abord l'égalité suivante,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dv \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-a(v-u)^2} \sqrt{\frac{b}{\pi}} e^{-b(w-v)^2} = \sqrt{\frac{ab}{\pi(a+b)}} e^{-\frac{ab}{a+b}(w-u)^2}, \quad (3.1.3)$$

qui conduit à réécrire le propagateur. Pour cela, on fait apparaître la forme de l'équation précédente dans l'intégrale à calculer. On fait alors attention à la puissance du facteur $\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}$ qui va décroître à chaque intégration. En posant $a = \frac{m}{2i\hbar\varepsilon}$, on écrit

$$G(x, t; y, 0) = \left(\frac{a}{\pi} \right)^{\frac{N+1}{2}} \int dx_1 \dots dx_N e^{-a \sum_{j=0}^N (x_{j+1} - x_j)^2} \quad (3.1.4)$$

$$= \left(\frac{a}{\pi} \right)^{\frac{N-1}{2}} \int dx_1 \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-a(x_1 - x_0)^2} \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-a(x_2 - x_1)^2} dx_2 \dots dx_N e^{-a \sum_{j=2}^N (x_{j+1} - x_j)^2} \quad (3.1.5)$$

$$= \left(\frac{a}{\pi} \right)^{\frac{N-1}{2}} \int \sqrt{\frac{a}{2\pi}} e^{-\frac{a}{2}(x_2 - x_0)^2} dx_2 \dots dx_N e^{-a \sum_{j=2}^N (x_{j+1} - x_j)^2} \quad (3.1.6)$$

$$= \left(\frac{a}{\pi} \right)^{\frac{N-2}{2}} \int dx_2 \sqrt{\frac{a}{2\pi}} e^{-\frac{a}{2}(x_2 - x_0)^2} \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-a(x_3 - x_2)^2} dx_3 \dots dx_N e^{-a \sum_{j=3}^N (x_{j+1} - x_j)^2} \quad (3.1.7)$$

$$= \left(\frac{a}{\pi} \right)^{\frac{N-3}{2}} \int dx_3 \sqrt{\frac{a}{3\pi}} e^{-\frac{a}{3}(x_3 - x_0)^2} \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-a(x_4 - x_3)^2} dx_4 \dots dx_N e^{-a \sum_{j=4}^N (x_{j+1} - x_j)^2} \quad (3.1.8)$$

$$= \dots \quad (3.1.9)$$

$$= \left(\frac{a}{\pi} \right)^{\frac{N-N}{2}} \int dx_N \sqrt{\frac{a}{N\pi}} e^{-\frac{a}{N}(x_N - x_0)^2} \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-a(x_{N+1} - x_N)^2} \quad (3.1.10)$$

$$= \sqrt{\frac{a}{(N+1)\pi}} e^{-\frac{a}{N+1}(x_{N+1} - x_0)^2} \quad (3.1.11)$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}(x-y)^2}. \quad (3.1.12)$$

On remarque que dans cette expression la discrétisation n'apparaît plus, car on retrouve $(N+1)\varepsilon = t$.

On veut établir un lien avec la mécanique classique, selon laquelle une particule libre possède une vitesse constante

$$v = \frac{x - y}{t} \quad (3.1.13)$$

et une énergie égale à son lagrangien (pas de potentiel)

$$E = E_{cin} = \frac{1}{2}m \frac{(x-y)^2}{t^2} \equiv L. \quad (3.1.14)$$

Le lagrangien ne dépend pas du temps (conservation de l'énergie), et l'action s'écrit

$$S_{classique} = \int L dt = Lt = \frac{1}{2}m \frac{(x-y)^2}{t}. \quad (3.1.15)$$

Or selon l'équation (3.1.12), le terme dans l'exponentielle du propagateur d'une particule libre s'écrit

$$-\frac{m}{2i\hbar t}(x-y)^2,$$

que l'on relit directement à l'action classique pour réécrire le propagateur

$$G(x, t; y, 0) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{classique}}. \quad (3.1.16)$$

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. Comme pour les opérateurs, masqués par les variables, l'intégrale de chemin masque la mécanique quantique par l'action classique.

3.2 Potentiel quadratique

Considérons cette fois ci un lagrangien de la forme suivante

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x} + b(t)x\dot{x} - \frac{1}{2}c(t)x^2 - e(t)x \quad (3.2.1)$$

dont les coefficients sont des fonctions du temps. On retrouve cette situation dans le cas d'une particule soumise à un champ extérieur, par exemple.

Il nous faut calculer le propagateur suivant

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{x_a, t_a}^{x_b, t_b} dx(\tau) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} L d\tau\right) \quad (3.2.2)$$

On remarque qu'il n'y a plus d'invariance par translation dans le temps de part la définition du lagrangien, on ne peut donc plus intégrer de 0 à t , mais de t_a à t_b .

Déterminons les équations du mouvement classique. Rappelons pour cela l'équation d'Euler-Lagrange :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad (3.2.3)$$

On en déduit

$$m\ddot{x}_{class} + (\dot{b} + c)x_{class} + e = 0 \quad (3.2.4)$$

On impose les conditions initiales suivantes $x_{class}(t_a) = x_a$ et $x_{class}(t_b) = x_b$ ce qui donne une unique solution à (3.2.4). On constate, d'après le coefficient devant x_{class} que la contribution de b peut être compensée par celle de c . Effectuons une translation sur la variable d'intégration $x(\tau)$

$$x(\tau) = x_{class}(\tau) + y(\tau) \quad (3.2.5)$$

$$dx(\tau) = dy(\tau) \quad (3.2.6)$$

Nous verrons que le terme linéaire en $y(t)$ dans l'action est toujours nul.

Posons $x_{class} := \bar{x}$ et injectons (3.2.5) dans (3.2.1) et développons.

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\bar{x}} + b(t)\bar{x}\dot{\bar{x}} - \frac{1}{2}c(t)\bar{x}^2 - e(t)\bar{x} \quad (3.2.7)$$

$$+ \frac{1}{2}m\dot{y} + b(t)y\dot{y} - \frac{1}{2}c(t)y^2 \quad (3.2.8)$$

$$+ m\dot{\bar{x}}y + b(t)(\bar{x}\dot{y} + y\dot{\bar{x}}) - c(t)\bar{x}y - e(t)y \quad (3.2.9)$$

Nous avons regroupé les termes croisés sur la ligne (3.2.9). Déterminons l'action associée aux termes croisés.

$$S_{croisés} = \int y(b(t)\dot{\bar{x}} - c(t)\bar{x} - e(t)) + \dot{y}(m\dot{\bar{x}} + b(t)\bar{x}) d\tau \quad (3.2.10)$$

$$= \int y(b(t)\dot{\bar{x}} - c(t)\bar{x} - e(t)) + [y(b(t)\bar{x} + m\dot{\bar{x}})]_{t_a}^{t_b} - \int y(\dot{b}(t)\bar{x} + b(t)\dot{\bar{x}} + m\ddot{\bar{x}}) d\tau \quad (3.2.11)$$

$$= \int y(-m\ddot{\bar{x}} - (\dot{b}(t) + c(t))\bar{x} - e(t)) d\tau = 0 \quad \forall y(\tau) \quad (3.2.12)$$

Nous avons effectué une intégration par partie dans (3.2.11), et le terme sous forme primitivé s'annule puisque $y(t_a) = y(t_b) = 0$. En effet $y(\tau)$ représente une variation autour de la solution classique, et on avait imposé $x(t_a) = x_a$ et $x(t_b) = x_b$, donc fixent. De plus dans (3.2.12) on reconnaît l'équation du mouvement (3.2.4). Au final la contribution à l'action du terme linéaire en $y(\tau)$ dans le lagrangien est nul.

Pour obtenir l'action associée au second terme quadratique, il suffit de permuter $x \rightarrow y$ et de retirer $e(t)x(\tau)$ qui est linéaire.

Au final

$$\boxed{S[x(\tau)] = S_{class}[x(\tau)] + S_{quad}[y(\tau)]} \quad (3.2.13)$$

On insiste à nouveau sur le fait que $y(\tau)$ est une variation quelconque, c'est à dire petite ou grande. La translation sur la variable d'intégration permet de faire sortir le terme $\exp\left(\frac{i}{\hbar}S_{class}\right)$ d'où le résultat

$$\boxed{G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S_{class}[x(\tau)]\right) \int_{y=0, t_a}^{y=0, t_b} dx(\tau) \exp\left(\frac{i}{\hbar}S_{quad}[y(\tau)]\right)} \quad (3.2.14)$$

On remarque que les conditions aux limites sont plus simples sur y . On a vu précédemment que $b(t)$ peut être remplacé par $c(t)$. Si on pose $b(t) = c(t) = 0 \quad \forall t$, alors $\int_{y=0, t_a}^{y=0, t_b} dx(\tau) \exp\left(\frac{i}{\hbar}S_{quad}[y(\tau)]\right)$ devient un facteur de normalisation.

Calculons le propagateur suivant $\tilde{G}(0, t_b; 0, t_a)$ que l'on peut interpréter comme un facteur d'évolution du temps à position fixée sous l'effet de l'action quadratique.

$$\tilde{G}(0, t_b; 0, t_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dy_1 \dots dy_N \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N+1}{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^N \frac{m}{2\varepsilon} (y_{j+1} - y_j)^2 - \frac{1}{2}\varepsilon c_j y_j^2\right) \quad (3.2.15)$$

Il est à noter que lors de la discrétisation $c(t_j) = c_j$, $t_j = t_a + \frac{j}{N}(t_b - t_a)$ et le facteur ε est du à l'intégration sur le temps. Nous avons choisi de retirer le coefficient $b(t)$ qui est implicitement contenu dans $c(t)$. De plus dans (3.2.15) toutes les intégrales sont gaussiennes.

Posons

$$\eta := \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}$$

Et récrivons l'argument de l'exponentielle comme suit

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^N \frac{m}{2\varepsilon} (y_{j+1} - y_j)^2 - \frac{1}{2}\varepsilon c_j y_j^2\right) := \exp(-\eta^T \sigma \eta) \quad (3.2.16)$$

La matrice σ est symétrique puisqu'elle est associée à une forme bilinéaire, elle est donc diagonalisable par une matrice de $O_n(\mathbb{R})$.

Déterminons, dans un premier temps, la valeur des intégrales gaussiennes en dimension N

Petit rappel sur les intégrales gaussiennes en dimension N

$$dy_1 \dots dy_N = d\xi_1 \dots d\xi_N$$

Sachant que $e^{(O^T M O)} = O^T e^M O = e^M$, on déduit après diagonalisation

$$\int d\xi_1 \dots d\xi_N e^{-(\lambda_1 \xi_1^2 + \dots + \lambda_N \xi_N^2)} = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda_1}} \dots \sqrt{\frac{\pi}{\lambda_N}} = \sqrt{\frac{\pi^N}{\det(M)}}$$

Avec $\lambda_i \geq 0 \quad \forall i \in \mathbb{N}^*$ valeurs propres de M qui est symétrique définie positive (car elle définit un produit scalaire). La dernière égalité est obtenue puisque l'application $M \rightarrow \det(M)$ est invariante par conjugaison (fonction centrale).

On obtient donc

$$\tilde{G}(0, t_b; 0, t_a) = \left(\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{N+1} \frac{\pi^N}{\det(\sigma)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.2.17)$$

Identifions, dans un second temps, la matrice σ

Afin d'identifier plus facilement les coefficients de σ développons l'argument de l'exponentielle, et en particulier la somme sur j pour $j-1, j, j+1$, après regroupement des termes on obtient

$$\frac{i}{2\hbar\varepsilon} (2m - \varepsilon c_j \varepsilon) y_j^2 - \frac{im}{2\hbar\varepsilon} (2y_{j-1} + 2y_{j+1}) y_j + \text{termes sans } y_j \quad (3.2.18)$$

On identifie facilement le coefficient devant y_j^2 qui correspondent aux termes diagonaux de σ . Pour le coefficient de y_j il faut redoubler de vigilance, puisque le terme y_j est partagé entre y_{j-1} et y_{j+1} , il nous faut donc diviser par deux le coefficient de (3.2.18). Mais il faut faire attention puisque nous avons posé que l'argument dans l'exponentielle était $-\eta^T \sigma \eta$ ce qui revient seulement à passer le i au dénominateur dans l'expression (3.2.18), sans changement de signe.

Voici donc l'expression de la matrice σ

$$\sigma = \frac{m}{2i\hbar\varepsilon} \left(2 - \frac{\varepsilon^2 c_j}{m} \right) I + \frac{m}{2i\hbar\varepsilon} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.2.19)$$

Ou encore de façon plus compacte

$$\sigma = \frac{m}{2i\hbar\varepsilon} \begin{bmatrix} \left(2 - \frac{\varepsilon^2 c_j}{m} \right) & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & \left(2 - \frac{\varepsilon^2 c_{j+1}}{m} \right) & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & \left(2 - \frac{\varepsilon^2 c_N}{m} \right) \end{bmatrix} \quad (3.2.20)$$

Utilisons une méthode très astucieuse, inventée par un mathématicien russe, Israel Gelfand (1913 – 2009). Elle consiste à écrire le déterminant de notre matrice σ sous forme de récurrence sur j et reconnaître une équation différentielle portant sur le déterminant de la matrice elle-même, équation différentielle qui traduit l'évolution de la taille de σ impliquée par la discrétisation.

Cherchons l'expression du déterminant de σ , et posons P_N tel que

$$\det(\sigma) = \left(\frac{m}{2i\hbar\varepsilon} \right)^N \begin{vmatrix} \left(2 - \frac{\varepsilon^2 c_j}{m} \right) & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & \left(2 - \frac{\varepsilon^2 c_{j+1}}{m} \right) & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & \left(2 - \frac{\varepsilon^2 c_N}{m} \right) \end{vmatrix} := \left(\frac{m}{2i\hbar\varepsilon} \right)^N P_N \quad (3.2.21)$$

Développons P_N sur la dernière colonne. Le premier terme donne $\left(2 - \frac{\varepsilon^2 c_j}{m}\right) P_{N-1}$. Pour le second terme on obtient $(-1)P_{N-2}$. Au final

$$P_N = \left(2 - \frac{\varepsilon^2 c_j}{m}\right) P_{N-1} - P_{N-2} \quad (3.2.22)$$

Ou encore, en utilisant l'indice j

$$P_{j+1} = \left(2 - \frac{\varepsilon^2 c_{j+1}}{m}\right) P_j - P_{j-1} \quad (3.2.23)$$

Réécrivons (3.2.23) pour faire apparaître une équation différentielle

$$\frac{P_{j+1} + P_{j-1} - 2P_j}{\varepsilon^2} = -\frac{c_{j+1}}{m} P_j \quad j = 1, \dots, N \quad (3.2.24)$$

Posons

$$\varphi(t) := \varepsilon P_j \quad (3.2.25)$$

On rappelle que $t_j = t_a + \frac{j}{N}(t_b - t_a)$. On peut vérifier que cette expression est correcte si on prend $j = N$ on retrouve t_b .

On déduit de (3.2.24)

$$\frac{d^2 \varphi(t)}{dt^2} = -\frac{c(t)}{m} \varphi(t) \quad (3.2.26)$$

Il ne reste qu'à déterminer les conditions initiales sur $\varphi(t)$. On choisit $P_{-1} = 0$, $P_0 = 1$. Comme dans l'expression (3.2.25) il faut prendre $\varepsilon \rightarrow 0$ on obtient $\varphi(0) = 0$. De plus $\varphi'(0) = \frac{\varepsilon(P_1 - P_0)}{\varepsilon} = 2 - \frac{\varepsilon^2 c_1}{m} - 1 \rightarrow 1$

D'après les équations (3.2.17) et (3.2.21)

$$\tilde{G}(0, t_b; 0, t_a) = \left(\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{N+1} \frac{\pi^N}{\left(\frac{m}{2i\hbar\varepsilon} \right)^N \frac{\varphi(t_b)}{\varepsilon}} \right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar \varphi(t_b)}}$$

D'après l'équation (3.2.14)

$$\boxed{G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \tilde{G}(0, t_b; 0, t_a) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{class}[x(\tau)]\right)} \quad (3.2.27)$$

S_{class} correspond à l'action sur un chemin classique, et $\varphi(t_b)$ est donnée par (3.2.26) avec pour conditions initiales $\varphi(0) = 0$ et $\varphi'(0) = 1$.

Nous verrons dans le cas de l'oscillateur harmonique que c'est \tilde{G} qui contient les particularités de la mécanique quantique. De plus cette dernière expression nous prouve que la Mécanique Quantique et la Mécanique Classique sont plus étroitement liées qu'il n'y paraît.

3.3 Oscillateur harmonique

3.3.1 Oscillateur harmonique libre

On s'intéresse maintenant au cas de l'oscillateur harmonique, régit par l'équation

$$m\ddot{x} + cx = 0. \quad (3.3.1)$$

On pose ω la pulsation,

$$\omega = \sqrt{\frac{c}{m}}, \quad (3.3.2)$$

constant pour tout instant t , entre t_a et t_b . L'équation différentielle associée à la fonction $\varphi(t)$ s'écrit alors

$$\ddot{\varphi} + \omega^2 \varphi = 0 \quad (3.3.3)$$

et a pour solution

$$\varphi(t) = \frac{1}{\omega} \sin(\omega t). \quad (3.3.4)$$

Le propagateur est donc de la forme

$$G = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar\sin(\omega t)}} e^{\frac{i}{\hbar}S_{classique}} \quad (3.3.5)$$

d'après les expressions de la section précédente. Formulé ainsi, on penserait que le dénominateur présent dans la racine ci-dessus est en mesure de s'annuler pour $t = \frac{\pi}{\omega}$, entraînant une divergence. Pour supprimer cette difficulté, on considère alors qu'au temps initial on a $x(0) = x_0$ et $\dot{x}(0) = z$. Ainsi,

$$x(t) = x_0 \cos(\omega t) + \frac{z}{\omega} \sin \omega t. \quad (3.3.6)$$

Au temps $t = \frac{\pi}{\omega}$, on obtient finalement

$$x\left(\frac{\pi}{\omega}\right) = -x_0. \quad (3.3.7)$$

Ainsi pour deux valeurs de z différentes, deux trajectoires issues d'un même point initial convergeront en $-x_0$ au temps $t = \frac{\pi}{\omega}$. Ceci produit un déphasage d'un angle $\frac{\pi}{2}$ dans les oscillations étudiées. L'apparente divergence vue ci-dessus n'est en fait due qu'à de trop grandes approximations (car $x_0 \neq 0$).

Il nous faut maintenant chercher ce que vaut l'action classique associée à l'oscillateur harmonique. Avec (3.3.2), l'équation différentielle du mouvement s'écrit

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0. \quad (3.3.8)$$

Les conditions initiale et finale étant

$$\begin{cases} x(t_a) = x_a \\ x(t_b) = x_b \end{cases} \quad (3.3.9)$$

on obtient

$$x(t) = x_0 \cos(\omega(t - t_a)) + \frac{z}{\omega} \sin \omega(t - t_a) \quad (3.3.10)$$

au temps t , et on obtient

$$x_b = x_0 \cos(\omega(t_b - t_a)) + \frac{z}{\omega} \sin \omega(t_b - t_a) \quad (3.3.11)$$

à l'état final. On pose alors $T = t_b - t_a$ et on écrit $z = \frac{x_b - x_a \cos \omega T}{\sin \omega T}$. On obtient alors $x(t)$ en fonction des données initiales et finales,

$$x = \frac{x_a \sin(t_b - t) + x_b \sin(t - t_a)}{\sin(\omega T)}. \quad (3.3.12)$$

On peut alors exprimer le lagrangien,

$$L = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 - \omega^2 x^2), \quad (3.3.13)$$

ainsi que l'action,

$$S = \int_0^T \frac{m}{2}(\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) dt = \frac{m}{2} \left([x\dot{x}]_0^T - \int_0^T x(\ddot{x} + \omega^2 x) dt \right) = \frac{m}{2}(x_b \dot{x}(t_b) - x_a \dot{x}(t_a)). \quad (3.3.14)$$

On calcule la dérivée de x

$$\dot{x}(t) = \frac{\omega}{\sin(\omega T)}(x_b \cos(\omega(t - t_a)) - x_a \sin(\omega(t_b - t))), \quad (3.3.15)$$

qui donne au temps t_a

$$\dot{x}(t_a) = \frac{\omega}{\sin(\omega T)}(x_b - x_a \sin(\omega T)), \quad (3.3.16)$$

et au temps t_b

$$\dot{x}(t_b) = \frac{\omega}{\sin(\omega T)}(x_b \cos(\omega T) - x_a). \quad (3.3.17)$$

En remplaçant ces expressions dans (3.3.14), on obtient

$$S_{classique} = \frac{m\omega}{2\sin(\omega T)}((x_a^2 + x_b^2) \cos(\omega T) - 2x_a x_b). \quad (3.3.18)$$

Le propagateur s'écrit alors,

$$\boxed{G(x, t; y, 0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar\sin(\omega t)}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2\sin(\omega T)}((x_a^2 + x_b^2) \cos(\omega T) - 2x_a x_b)}}. \quad (3.3.19)$$

On se rappelle aussi que l'on fait intervenir la relation de fermeture dans le calcul du propagateur

$$G(x, t; y, 0) = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | y \rangle = \sum_n \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | y \rangle = \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(y) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \quad (3.3.20)$$

Ainsi, nous faisons apparaître les différents niveaux n de l'oscillateur harmonique. On sait d'après la mécanique quantique que les fonctions d'onde ψ_n associées à l'oscillateur harmonique sont décrites par les polynômes de Hermite H_n ,

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^n n!}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} H_n(x). \quad (3.3.21)$$

On en déduit une autre expression du propagateur à partir de (3.3.20),

$$G(x, t; y, 0) = \sum_n \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n!} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} (x_a^2 + x_b^2)} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} H_n(x_a) H_n(x_b). \quad (3.3.22)$$

On peut alors utiliser la formule de Mehler

$$\sum_{n=0}^{+\infty} \frac{H_n(x) H_n(y)}{n!} \left(\frac{w}{2}\right)^n = \frac{1}{\sqrt{1-w^2}} \exp\left(\frac{2xyw - (x^2 + y^2)w^2}{1-w^2}\right) \quad (3.3.23)$$

pour retrouver l'expression (3.3.19) du propagateur.

Nous voulons maintenant vérifier que l'on retrouve bien le spectre discret en énergie de l'oscillateur harmonique,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega. \quad (3.3.24)$$

Pour cela, nous prenons la « trace » du propagateur, c'est-à-dire pour $x = y$ et on a

$$\int dx G(x, t; x, 0) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \quad (3.3.25)$$

On se sert alors de (3.3.19),

$$\sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} = \int dx \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin(\omega t)}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2 \sin(\omega t)} 2x^2 (\cos(\omega t) - 1)}, \quad (3.3.26)$$

et des relations élémentaires de trigonométrie

$$\sin(x) = 2 \sin\left(\frac{x}{2}\right) \cos\left(\frac{x}{2}\right) \quad \text{et} \quad 1 - \cos(x) = 2 \sin^2\left(\frac{x}{2}\right) \quad (3.3.27)$$

pour trouver

$$\sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar 2 \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right) \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right)}} \int dx e^{-\frac{im\omega}{\hbar} \frac{\sin\left(\frac{\omega t}{2}\right)}{\cos\left(\frac{\omega t}{2}\right)} x^2} \quad (3.3.28)$$

$$= \frac{1}{2i \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right)} = \frac{1}{e^{i\frac{\omega t}{2}} - e^{-i\frac{\omega t}{2}}} = \frac{e^{-i\frac{\omega t}{2}}}{1 - e^{i\omega t}} = e^{-i\frac{\omega t}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-in\omega t} \quad (3.3.29)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} \quad (3.3.30)$$

On retrouve alors la relation (3.3.24) donnant l'énergie des niveaux de l'oscillateur harmonique. Tout ceci montre bien le lien entre l'action classique et les résultats de la mécanique quantique.

3.3.2 Oscillateur harmonique libre, méthode Feynman

On a montré que le propagateur de l'oscillateur harmonique libre est de la forme

$$\langle b, t_b | a, t_a \rangle = \sqrt{\frac{\omega}{2i\pi \sin(\omega T)}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}} \quad (3.3.31)$$

Redémontrons ce résultat avec la méthode introduite par Feynman. Utilisons les variations, en se souvenant qu'on définit $y(t)$ comme les variations quelconques autour de la solution classique, on obtient l'action quadratique en $y(t)$.

$$I = \int Dy \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T \left(\frac{1}{2} \dot{y}^2 - \frac{1}{2} \omega^2 y^2 \right) dt \right) \quad (3.3.32)$$

Avec les conditions limites

$$y(0) = 0 \quad \text{et} \quad y(T) = 0 \quad (3.3.33)$$

On sait qu'il faut trouver le déterminant de la forme quadratique associée à $y(t)$. Pour obtenir une diagonalisation directe il faut prendre les modes propres de cette forme quadratique.

On développe $y(t)$ sur les modes propres

$$y(t) = \sum_{n=1}^{\infty} y_n \sin \left(\frac{n\pi t}{T} \right) \quad (3.3.34)$$

On sait que les modes sont orthogonaux entre eux, ce qui implique que les indices de $y_n(t)$ seront égaux entre eux, lorsque que l'on injecte (3.3.34) dans $(\frac{1}{2}\dot{y}^2 - \frac{1}{2}\omega^2 y^2)$.

$$S_{quad} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2} \int_0^T y_n^2 \left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 \cos^2 \frac{n\pi t}{T} - y_n^2 \omega^2 \sin^2 \frac{n\pi t}{T} dt = \frac{T}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right) y_n^2 \quad (3.3.35)$$

On a évidemment linéarisé le carré des fonctions cosinus et sinus pour faire apparaître le facteur $\frac{T}{2}$. On constate que dans (3.3.35) les y_n sont découplées du coefficient, il s'agit donc bien d'une diagonalisation.

$$\begin{aligned} I &= \int dy_n \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{T}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right) y_n^2 \right) \\ &= \int dy_n \prod_n \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{T}{4} \left(\left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right) y_n^2 \right) \\ &= \prod_n \sqrt{\frac{\pi}{\frac{i}{\hbar} \frac{T}{4} \left(\left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right)}} = \left(\frac{4\pi\hbar}{\prod_n i \frac{n^2\pi^2}{T} \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2\pi^2} \right)} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (3.3.36)$$

Or on peut écrire

$$\sin x = x \prod_n \left(1 - \frac{x^2}{n^2\pi^2} \right) \quad (3.3.37)$$

Il nous faut vérifier plusieurs critères. Dans un premier temps que le produit infini est convergent, en prenant le logarithme de (3.3.37)

$$\log \left(\prod_n \left(1 - \frac{x^2}{n^2\pi^2} \right) \right) = \sum_n \frac{x^2}{n^2\pi^2} < \infty \quad (3.3.38)$$

On définit bien une fonction analytique. Vérifions que les 2 membres de (3.3.37) ont mêmes zéros on sait que

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x} = 1 \quad \text{et} \quad \lim_{x \rightarrow 0} \prod_n \left(1 - \frac{x^2}{n^2\pi^2} \right) = 1 \quad (3.3.39)$$

De plus en écrivant la fonction sinus sous forme exponentielle, on constate qu'elle ne possède pas de pôle, mais une singularité à l'infini, tout comme le produit infini. Leur quotient est égal à un, et est constant par théorème de Liouville.

Nous pouvons donc réécrire, par simple changement de variable dans (3.3.36).

$$I \propto \left(\frac{1}{\prod_n \frac{n^2\pi^2}{T} \sin(\omega T)} \right)^{1/2} \quad (3.3.40)$$

Nous allons supprimer le coefficient $\prod_n \frac{n^2 \pi^2}{T}$ bien qu'il soit infini, puisque si l'on compare ce résultat avec celui obtenu pour une particule libre, c'est à dire dans le cas présent $\lim \omega \rightarrow 0$ on retrouve le même résultat. Au final

$$\langle b, t_b | a, t_a \rangle \propto \sqrt{\frac{\omega T}{\sin(\omega T)}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}} \quad (3.3.41)$$

3.3.3 Oscillations forcées

On étudie maintenant le cas d'un oscillateur harmonique forcé, de pulsation libre ω et qui est caractérisé par un lagrangien s'écrivant

$$L = \frac{1}{2} (\dot{q}^2 - \omega^2 q^2) + J(t)q, \quad (3.3.42)$$

dans lequel le terme $J(t)$, que l'on appelle un *courant*, est associé à une force imposée au système et dépendant du temps. La présence de ce terme $J \neq 0$ brise la symétrie présente avec un oscillateur harmonique libre et change les conditions initiales du système, que l'on note

$$q(t) = a \quad \text{et} \quad q(t') = b, \quad (3.3.43)$$

et dont l'équation associée à son mouvement s'écrit

$$\ddot{q} + \omega^2 q = J, \quad (3.3.44)$$

dans laquelle q_0 et J dépendent du temps. Pour résoudre une telle équation du second ordre, on introduit la méthode des fonctions de Green, dépendant de deux paramètres τ et σ , et dont l'équation associée au problème étudié est de la forme

$$\left(\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2 \right) G(\tau, \sigma) = \delta(\tau - \sigma), \quad (3.3.45)$$

transformant les conditions aux limites en

$$G(t, \sigma) = 0 \quad \text{et} \quad G(t', \sigma) = 0. \quad (3.3.46)$$

Dans notre problème, on considère $t < \tau < t'$ et $t < \sigma < t'$. Il faut considérer deux cas pour donner l'expression de la solution $G(\tau, \sigma)$ avec $\tau \neq \sigma$,

$$G(\tau, \sigma) = C \begin{cases} \sin(\omega(t' - \sigma)) \sin(\omega(\tau - t)) & \text{si } \tau < \sigma \\ \sin(\omega(\sigma - t)) \sin(\omega(t' - \tau)) & \text{si } \tau > \sigma \end{cases}, \quad (3.3.47)$$

s'exprimant comme un produit de deux sinus, avec C une constante de normalisation, et permettant de vérifier l'équation différentielle

$$\left(\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2 \right) G(\tau, \sigma) = 0, \quad (3.3.48)$$

ainsi que les conditions aux limites précédentes.

Pour le cas où $\tau = \sigma$, on est en présence d'une *fonction* δ de Dirac dans l'équation différentielle (3.3.45) et la dérivée première de G n'est pas continue. On introduit alors la relation

$$\frac{d}{dt} H(t) = \delta(t) \quad (3.3.49)$$

dans laquelle $H(t)$ est la fonction de Heaviside faisant un saut d'amplitude 1 en $t = 0$. Elle vérifie bien la définition des fonctions de Dirac, car pour une fonction f s'annulant à l'infini, elle vérifie

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \frac{dH(t)}{dt} dt = [f(t)H(t)]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} H(t) \frac{df(t)}{dt} dt = - \int_0^{+\infty} \frac{df(t)}{dt} dt = -[f(t)]_0^{+\infty} = f(0). \quad (3.3.50)$$

La présence de la fonction δ dans l'équation (3.3.45), doit se traduire par un saut normé à l'unité de la dérivée en $\tau = \sigma$ de la fonction G . Sa dérivée en τ s'écrit

$$\frac{dG(\tau, \sigma)}{d\tau} = C\omega \begin{cases} \sin(\omega(t' - \sigma)) \cos(\omega(\tau - t)) & \text{si } \tau < \sigma \\ -\sin(\omega(\sigma - t)) \cos(\omega(t' - \tau)) & \text{si } \tau > \sigma \end{cases}. \quad (3.3.51)$$

Ainsi, le saut en $\tau = \sigma$ s'écrit

$$\frac{dG(\tau, \sigma)}{d\tau} \Big|_{\tau=\sigma^+} - \frac{dG(\tau, \sigma)}{d\tau} \Big|_{\tau=\sigma^-} = -C\omega [\sin(\omega(\sigma - t)) \cos(\omega(t' - \sigma)) \quad (3.3.52)$$

$$+ \sin(\omega(t' - \sigma)) \cos(\omega(\sigma - t))] \quad (3.3.53)$$

$$= -C\omega \sin(\omega T), \quad (3.3.54)$$

et compte tenu de la normalisation, on trouve

$$C = \frac{-1}{\omega \sin(\omega T)}, \quad (3.3.55)$$

ce qui permet d'écrire une expression de la fonction de Green en fonction des paramètres liés au problème,

$$G(\tau, \sigma) = \frac{-1}{\omega \sin(\omega T)} \begin{cases} \sin(\omega(t' - \sigma)) \sin(\omega(\tau - t)) & \text{si } \tau < \sigma \\ \sin(\omega(\sigma - t)) \sin(\omega(t' - \tau)) & \text{si } \tau > \sigma \end{cases}. \quad (3.3.56)$$

En multipliant maintenant l'expression (3.3.45) par $J(\sigma)$ et en intégrant par rapport à σ entre les temps t et t' , on trouve

$$\left(\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2 \right) \int_t^{t'} G(\tau, \sigma) J(\sigma) d\sigma = \int_t^{t'} \delta(\tau, \sigma) J(\sigma) d\sigma = J(\tau). \quad (3.3.57)$$

On identifie alors cette expression avec l'équation différentielle (3.3.44) associée au mouvement de l'oscillateur forcé, ce qui donne

$$q(\tau) = \int_t^{t'} G(\tau, \sigma) J(\sigma) d\sigma + q_{J=0}(\tau), \quad (3.3.58)$$

où $q_{J=0}(\tau)$ est la solution de l'équation pour $J = 0$. Dans ce cas, on peut trouver l'expression

$$q_{J=0}(\tau) = \frac{a}{\sin(\omega T)} \sin(\omega(t' - \tau)) + \frac{b}{\sin(\omega T)} \sin(\omega(\tau - t)), \quad (3.3.59)$$

qui vérifie bien les conditions en t_a et t_b .

On peut donc donner une expression générale à $q(\tau)$ dans le cas où J peut être différent de zéro, en décomposant le terme dépendant de G en deux intégrales dont les bornes font apparaître la dépendance de G en τ , afin de distinguer les deux expressions présentes dans l'expression (3.3.56). On a donc

$$q(\tau) = \int_t^\tau G(\tau, \sigma) J(\sigma) d\sigma + \int_\tau^{t'} G(\tau, \sigma) J(\sigma) d\sigma + q_{J=0}(\tau) \quad (3.3.60)$$

$$= \frac{-1}{\omega \sin(\omega T)} \left(\sin(\omega(t' - \tau)) \int_t^\tau \sin(\omega(\sigma - t)) J(\sigma) d\sigma \right. \quad (3.3.61)$$

$$\left. + \sin(\omega(\tau - t)) \int_\tau^{t'} \sin(\omega(t' - \sigma)) J(\sigma) d\sigma \right) \quad (3.3.62)$$

$$+ \frac{a}{\sin(\omega T)} \sin(\omega(t' - \tau)) + \frac{b}{\sin(\omega T)} \sin(\omega(\tau - t)). \quad (3.3.63)$$

On peut alors commencer le calcul de l'action classique, qui dépend de q . On remarque tout d'abord l'identité

$$\int \dot{q}^2 d\tau = [q\dot{q}] - \int q\ddot{q} d\tau, \quad (3.3.64)$$

qui va nous permettre de simplifier considérablement le calcul. En effet

$$S_{cl} = \int_t^{t'} \left(\frac{1}{2} (\dot{q}^2 - \omega^2 q^2) + Jq \right) d\tau \quad (3.3.65)$$

$$= \int_t^{t'} \left(\frac{1}{2} (\dot{q}^2 - \omega^2 q^2 + Jq) + \frac{1}{2} Jq \right) d\tau \quad (3.3.66)$$

$$= \frac{1}{2} [q\dot{q}]_t^{t'} - \int_t^{t'} \frac{1}{2} q(\ddot{q} + \omega^2 q - J) + \frac{1}{2} \int_t^{t'} Jq d\tau \quad (3.3.67)$$

$$= \frac{1}{2} \left([q\dot{q}]_t^{t'} + \int_t^{t'} Jq d\tau \right), \quad (3.3.68)$$

où l'on fait intervenir l'identité (3.3.44) pour simplifier l'avant-dernière expression de S_{cl} . De plus, le dernier terme entre parenthèses peut se réécrire en fonction de l'expression (3.3.63) de $q(\tau)$, pour trouver

$$\int_t^{t'} d\tau J(\tau) q(\tau) = -\frac{1}{\omega \sin(\omega T)} \int_t^{t'} d\tau J(\tau) \sin(\omega(t' - \tau)) \int_t^\tau d\sigma J(\sigma) \sin(\omega(\sigma - t)) \quad (3.3.69)$$

$$- \frac{1}{\omega \sin(\omega T)} \int_t^{t'} d\tau J(\tau) \sin(\omega(\tau - t)) \int_\tau^{t'} d\sigma J(\sigma) \sin(\omega(t' - \sigma)) \quad (3.3.70)$$

$$+ \frac{a}{\sin(\omega T)} \int_t^{t'} d\tau J(\tau) \sin(\omega(t' - \tau)) + \frac{b}{\sin(\omega T)} \int_t^{t'} d\tau J(\tau) \sin(\omega(\tau - t)). \quad (3.3.71)$$

Ce développement fait apparaître trois termes. Le premier décrit le cas où $\sigma < \tau$ et le second décrit le cas où $\sigma > \tau$. Par un changement astucieux des bornes d'intégration on peut identifier ces deux termes. En effet,

$$\int_t^{t'} d\tau J(\tau) \sin(\omega(\tau - t)) \int_\tau^{t'} d\sigma J(\sigma) \sin(\omega(t' - \sigma)) = \int_t^{t'} d\sigma J(\sigma) \sin(\omega(t' - \sigma)) \quad (3.3.72)$$

$$\times \int_t^\sigma d\tau J(\tau) \sin(\omega(\tau - t)), \quad (3.3.73)$$

et échangeant les variables muettes σ et τ on identifie bien

$$\int_t^{t'} d\tau J(\tau) \sin(\omega(\tau - t)) \int_\tau^{t'} d\sigma J(\sigma) \sin(\omega(t' - \sigma)) = \int_t^{t'} d\tau J(\tau) \sin(\omega(t' - \tau)) \quad (3.3.74)$$

$$\times \int_t^\tau d\sigma J(\sigma) \sin(\omega(\sigma - t)). \quad (3.3.75)$$

Nous nous sommes naturellement placés dans le cas où les temps sont ordonnés tels que $t < \sigma < \tau < t'$. Nous avons donc

$$\int_t^{t'} d\tau J(\tau) q(\tau) = -\frac{2}{\omega \sin(\omega T)} \int_t^{t'} d\sigma \int_t^\sigma d\tau J(\sigma) J(\tau) \sin(\omega(t' - \sigma)) \sin(\omega(\tau - t)) \quad (3.3.76)$$

$$+ \frac{a}{\sin(\omega T)} \int_t^{t'} d\tau J(\tau) \sin(\omega(t' - \tau)) + \frac{b}{\sin(\omega T)} \int_t^{t'} d\tau J(\tau) \sin(\omega(\tau - t)). \quad (3.3.77)$$

On calcule maintenant le premier terme de l'équation (3.3.68), pour cela, on exprime d'abord la dérivée de $q(\tau)$,

$$\dot{q}(\tau) = \frac{-1}{\omega \sin(\omega T)} \left(-\omega \cos(\omega(t' - \tau)) \int_t^\tau \sin(\omega(\sigma - t)) J(\sigma) d\sigma + \sin(\omega(t' - \tau)) \sin(\omega(\tau - t)) J(\tau) \right) \quad (3.3.78)$$

$$+ \omega \cos(\omega(\tau - t)) \int_\tau^{t'} \sin(\omega(t' - \sigma)) J(\sigma) d\sigma - \sin(\omega(\tau - t)) \sin(\omega(t' - \tau)) J(\tau) \quad (3.3.79)$$

$$+ \frac{-\omega a}{\sin(\omega T)} \cos(\omega(t' - \tau)) + \frac{\omega b}{\sin(\omega T)} \cos(\omega(\tau - t)) \quad (3.3.80)$$

$$= \frac{-1}{\omega \sin(\omega T)} \left(-\omega \cos(\omega(t' - \tau)) \int_t^\tau \sin(\omega(\sigma - t)) J(\sigma) d\sigma \right) \quad (3.3.81)$$

$$+ \omega \cos(\omega(\tau - t)) \int_\tau^{t'} \sin(\omega(t' - \sigma)) J(\sigma) d\sigma \quad (3.3.82)$$

$$+ \frac{-\omega a}{\sin(\omega T)} \cos(\omega(t' - \tau)) + \frac{\omega b}{\sin(\omega T)} \cos(\omega(\tau - t)). \quad (3.3.83)$$

Aux limites t' et t , on obtient

$$\dot{q}(t') = \frac{1}{\sin(\omega T)} \int_t^{t'} \sin(\omega(\sigma - t)) J(\sigma) d\sigma + \frac{\omega}{\sin(\omega T)} (b \cos(\omega T) - a), \quad (3.3.84)$$

et

$$\dot{q}(t) = \frac{-1}{\sin(\omega T)} \int_t^{t'} \sin(\omega(t' - \sigma)) J(\sigma) d\sigma - \frac{\omega}{\sin(\omega T)} (a \cos(\omega T) - b). \quad (3.3.85)$$

Ainsi, on peut écrire

$$[q\dot{q}]_t^{t'} = q(t')\dot{q}(t') - q(t)\dot{q}(t) = b\dot{q}(t') - a\dot{q}(t) \quad (3.3.86)$$

$$= \frac{a}{\sin(\omega T)} \int_t^{t'} \sin(\omega(t' - \sigma)) J(\sigma) d\sigma \quad (3.3.87)$$

$$+ \frac{b}{\sin(\omega T)} \int_t^{t'} \sin(\omega(\sigma - t)) J(\sigma) d\sigma \quad (3.3.88)$$

$$+ \frac{\omega}{\sin(\omega T)} [(a^2 + b^2) \cos(\omega T) - 2ab]. \quad (3.3.89)$$

En combinant l'équation précédente avec l'équation (3.3.77) dans l'expression (3.3.68), on trouve enfin

$$S_{cl} = \frac{\omega}{2 \sin(\omega T)} [(a^2 + b^2) \cos(\omega T) - 2ab] \quad (3.3.90)$$

$$+ \frac{a}{\sin(\omega T)} \int_t^{t'} d\tau J(\tau) \sin(\omega(t' - \tau)) \quad (3.3.91)$$

$$+ \frac{b}{\sin(\omega T)} \int_t^{t'} d\tau J(\tau) \sin(\omega(\tau - t)) \quad (3.3.92)$$

$$- \frac{1}{\omega \sin(\omega T)} \int_t^{t'} d\sigma \int_t^\sigma d\tau J(\sigma) J(\tau) \sin(\omega(t' - \sigma)) \sin(\omega(\tau - t)) \quad (3.3.93)$$

On note ainsi le propagateur,

$$\langle b, t' | a, t \rangle^J = \sqrt{\frac{\omega}{2i\pi \sin(\omega T)}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}}, \quad (3.3.94)$$

en soulignant la dépendance en J dans la notation $\langle b, t' | a, t \rangle^J$.

3.3.4 Amplitude de transition dans le vide

Dans cette section, on posera $\hbar = 1$ par convention. L'action classique S_{cl} correspond alors à la phase Ω , dans l'exponentielle présente dans l'expression du propagateur. Nous allons introduire certaines étapes conduisant à une généralisation de la Théorie Quantique des Champs, en calculant la valeur moyenne du propagateur dans le vide, représenté par des états $|0\rangle$. Nous noterons W cette valeur moyenne, qui dépend *a priori* d'une source J forçant un système ne dépendant pas du temps, que l'on décrit par un oscillateur harmonique. Les positions aux temps initial t_a , et final t_b , seront respectivement notées a et b . On peut alors développer le propagateur sur ces états, en supposant que les temps soient bien ordonnés, et on écrit, en faisant intervenir la relation de fermeture en a et en b ,

$$W[J] = \langle 0 | e^{-i(t_b - t_a)H} | 0 \rangle \quad (3.3.95)$$

$$= \iint da db \langle 0 | b \rangle \langle b | e^{-i(t_b - t_a)H} | a \rangle \langle a | 0 \rangle, \quad (3.3.96)$$

puis on met en évidence la fonction d'onde caractérisant un oscillateur harmonique dans son état fondamental, à la position q ,

$$\langle q | \varphi_0 \rangle = \langle q | 0 \rangle = \varphi_0(q) = \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\omega}{2} q^2} \quad (3.3.97)$$

et on note $\langle b, t_b | a, t_a \rangle^J$ la valeur moyenne du propagateur, en mettant en évidence la dépendance de ce terme en J . On écrit alors

$$W[J] = \iint da db \varphi_0^*(b) \langle b, t_b | a, t_a \rangle^J \varphi_0(a). \quad (3.3.98)$$

Avec les développements effectués dans la section précédente, on obtient finalement

$$W[J] = \frac{\omega}{\pi} \frac{e^{i\frac{\omega T}{2}}}{\sqrt{2i \sin(\omega T)}} \int da db e^{-\frac{\omega}{2}(a^2 + b^2) + i\Omega}. \quad (3.3.99)$$

Afin de simplifier le calcul, on effectue un changement de variable astucieux, pour transformer les conditions aux limites,

$$a = u + v \quad \text{et} \quad b = u - v. \quad (3.3.100)$$

Il est alors nécessaire de transformer l'élément différentiel dans l'intégrale précédente, ce qui donne l'expression

$$da db = 2 du dv, \quad (3.3.101)$$

dans laquelle le facteur 2 provient du jacobien. On note aussi les relations transformant les termes dépendant de a et de b dans l'exponentielle du propagateur,

$$a^2 + b^2 = 2(u^2 + v^2) \quad \text{et} \quad ab = u^2 - v^2, \quad (3.3.102)$$

qui seront utiles pour exprimer la phase Ω en fonction de u et v , ce qui donne

$$\Omega = \frac{\omega}{\sin(\omega T)} [(u^2 + v^2) \cos(\omega T) - (u^2 - v^2)] \quad (3.3.103)$$

$$+ \frac{u - v}{\sin(\omega T)} \int_{t_a}^{t_b} J(\tau) \sin(\omega(\tau - t_a)) d\tau \quad (3.3.104)$$

$$+ \frac{u + v}{\sin(\omega T)} \int_{t_a}^{t_b} J(\tau) \sin(\omega(t_b - \tau)) d\tau \quad (3.3.105)$$

$$- \frac{1}{\omega \sin(\omega T)} \int_{t_a}^{t_b} d\sigma \int_{t_a}^{\sigma} d\tau J(\sigma) J(\tau) \sin(\omega(t_b - \sigma)) \sin(\omega(\tau - t_a)). \quad (3.3.106)$$

Nous faisons apparaître ainsi deux termes quadratiques, l'un en u , l'autre en v , dans lesquels nous regrouperons les deux termes suivants de l'équation précédente, linéaires en u et v et dépendant du courant J . Le dernier terme quant à lui ne dépend ni de τ , ni de σ . Ces considérations permettront de simplifier l'expression du propagateur $W[J]$, mis sous la forme

$$W[J] = \frac{\omega}{\pi} \frac{2e^{i\frac{\omega T}{2}}}{\sqrt{2i \sin(\omega T)}} \int du dv e^{-\omega(u^2 + v^2) + i\Omega(u, v)}. \quad (3.3.107)$$

Dans l'exponentielle, on isole maintenant les termes en u^2 , que l'on factorise,

$$-\omega u^2 + \frac{i\omega u^2}{\sin(\omega T)} (\cos(\omega T) - 1) = \frac{i\omega u^2}{\sin(\omega T)} (\cos(\omega T) + i \sin(\omega T) - 1) = \frac{i\omega u^2}{\sin(\omega T)} (e^{i\omega T} - 1). \quad (3.3.108)$$

Il est intéressant maintenant de faire apparaître une expression quadratique en u dans l'exponentielle. Nous notons \mathcal{U} la somme des termes dépendant de u dans l'exponentielle. Nous allons faire apparaître la valeur moyenne du temps, $\bar{t} = \frac{t_a + t_b}{2}$, et nous écrivons ainsi,

$$\mathcal{U} = \frac{i\omega u^2}{\sin(\omega T)} (e^{i\omega T} - 1) + \frac{i u}{\sin(\omega T)} \int_{t_a}^{t_b} J(\tau) (\sin(\omega(\tau - t_a)) + \sin(\omega(t_b - \tau))) d\tau \quad (3.3.109)$$

$$= \frac{i\omega (e^{i\omega T} + 1)}{\sin(\omega T)} \left(\left[u + \frac{\sin(\frac{\omega T}{2})}{\omega (e^{i\omega T} - 1)} \int_{t_a}^{t_b} J(\tau) \cos(\omega(\tau - \bar{t})) d\tau \right]^2 \right. \quad (3.3.110)$$

$$\left. - \frac{\sin^2(\frac{\omega T}{2})}{\omega^2 (e^{i\omega T} - 1)^2 \sin(\omega T)} \left[\int_{t_a}^{t_b} J(\tau) \cos(\omega(\tau - \bar{t})) d\tau \right]^2 \right). \quad (3.3.111)$$

Dans le calcul du propagateur, on trouve alors une intégrale gaussienne en u , qui donne

$$\int du \exp \left(-\frac{\omega (e^{i\omega T} - 1)}{i \sin(\omega T)} \left[u + \frac{\sin(\frac{\omega T}{2})}{\omega (e^{i\omega T} - 1)} \int_{t_a}^{t_b} J(\tau) \cos(\omega(\tau - \bar{t})) d\tau \right]^2 \right) = \sqrt{\frac{i\pi \sin(\omega T)}{\omega (e^{i\omega T} - 1)}}. \quad (3.3.112)$$

On poursuit en reprenant la même démarche avec l'intégrale en v . Les termes en v^2 se factorisent en

$$-\omega v^2 + \frac{i\omega v^2}{\sin(\omega T)} (\cos(\omega T) + 1) = \frac{i\omega v^2}{\sin(\omega T)} (\cos(\omega T) + i \sin(\omega T) + 1) = \frac{i\omega v^2}{\sin(\omega T)} (e^{i\omega T} + 1) \quad (3.3.113)$$

et on note \mathcal{V} la somme des termes dépendant de v dans l'exponentielle du propagateur, qui donne

$$\mathcal{V} = \frac{i\omega v^2}{\sin(\omega T)} (e^{i\omega T} + 1) + \frac{i v}{\sin(\omega T)} \int_{t_a}^{t_b} J(\tau) (\sin(\omega(t_b - \tau)) - \sin(\omega(\tau - t_a))) d\tau \quad (3.3.114)$$

$$= \frac{i\omega (e^{i\omega T} + 1)}{\sin(\omega T)} \left(\left[v + \frac{\cos(\frac{\omega T}{2})}{\omega (e^{i\omega T} + 1)} \int_{t_a}^{t_b} J(\tau) \sin(\omega(\bar{t} - \tau)) d\tau \right]^2 \right. \quad (3.3.115)$$

$$\left. - \frac{\cos^2(\frac{\omega T}{2})}{\omega^2 (e^{i\omega T} + 1)^2 \sin(\omega T)} \left[\int_{t_a}^{t_b} J(\tau) \sin(\omega(\bar{t} - \tau)) d\tau \right]^2 \right). \quad (3.3.116)$$

Dans le propagateur, nous avons alors pour l'intégrale gaussienne en v le facteur

$$\int dv \exp \left(-\frac{\omega (e^{i\omega T} + 1)}{i \sin(\omega T)} \left[v + \frac{\cos(\frac{\omega T}{2})}{\omega (e^{i\omega T} + 1)} \int_{t_a}^{t_b} J(\tau) \sin(\omega(\bar{t} - \tau)) d\tau \right]^2 \right) = \sqrt{\frac{i\pi \sin(\omega T)}{\omega (e^{i\omega T} + 1)}}. \quad (3.3.117)$$

Ainsi, l'expression complète de $W[J]$ est

$$W[J] = \frac{\omega}{\pi} \frac{2e^{i\frac{\omega T}{2}}}{\sqrt{2i \sin(\omega T)}} \sqrt{\frac{i\pi \sin(\omega T)}{\omega(e^{i\omega T} - 1)}} \sqrt{\frac{i\pi \sin(\omega T)}{\omega(e^{i\omega T} + 1)}} \quad (3.3.118)$$

$$\times e^{-\frac{i \sin^2(\frac{\omega T}{2})}{\omega(e^{i\omega T} - 1) \sin(\omega T)} \left[\int_{t_a}^{t_b} J(\tau) \cos(\omega(\tau - \bar{t})) d\tau \right]^2} e^{-\frac{i \cos^2(\frac{\omega T}{2})}{\omega(e^{i\omega T} + 1) \sin(\omega T)} \left[\int_{t_a}^{t_b} J(\tau) \sin(\omega(\bar{t} - \tau)) d\tau \right]^2} \quad (3.3.119)$$

$$\times e^{-\frac{i}{\omega \sin(\omega T)} \int_{t_a}^{t_b} d\sigma \int_{t_a}^{\sigma} d\tau J(\sigma) J(\tau) \sin(\omega(t_b - \sigma)) \sin(\omega(\tau - t_a))}, \quad (3.3.120)$$

où apparaissent de nombreux termes à simplifier. Pour regrouper les dénominateurs des deux exposants de l'équation précédente, nous écrivons

$$(e^{i\omega T} - 1)(e^{i\omega T} + 1) = e^{i\omega T} 2i \sin\left(\frac{\omega T}{2}\right) 2 \cos\left(\frac{\omega T}{2}\right) = 2ie^{i\omega T} \sin(\omega T). \quad (3.3.121)$$

Par ailleurs, le facteur de la ligne (3.3.119) se simplifie fortement,

$$\frac{\omega}{\pi} \frac{2e^{i\frac{\omega T}{2}}}{\sqrt{2i \sin(\omega T)}} \sqrt{\frac{i\pi \sin(\omega T)}{\omega(e^{i\omega T} - 1)}} \sqrt{\frac{i\pi \sin(\omega T)}{\omega(e^{i\omega T} + 1)}} = \frac{\omega}{\pi} \frac{2e^{i\frac{\omega T}{2}}}{\sqrt{2i \sin(\omega T)}} \sqrt{\frac{i\pi \sin(\omega T) i\pi \sin(\omega T)}{\omega^2 2ie^{i\omega T} \sin(\omega T)}} = 1, \quad (3.3.122)$$

et il reste à calculer

$$W[J] = e^{-\frac{i \sin^2(\frac{\omega T}{2})}{\omega(e^{i\omega T} - 1) \sin(\omega T)} \left[\int_{t_a}^{t_b} J(\tau) \cos(\omega(\tau - \bar{t})) d\tau \right]^2} e^{-\frac{i \cos^2(\frac{\omega T}{2})}{\omega(e^{i\omega T} + 1) \sin(\omega T)} \left[\int_{t_a}^{t_b} J(\tau) \sin(\omega(\bar{t} - \tau)) d\tau \right]^2} \quad (3.3.123)$$

$$\times e^{-\frac{i}{\omega \sin(\omega T)} \int_{t_a}^{t_b} d\sigma \int_{t_a}^{\sigma} d\tau J(\sigma) J(\tau) \sin(\omega(t_b - \sigma)) \sin(\omega(\tau - t_a))}. \quad (3.3.124)$$

Pour poursuivre le calcul facilement, nous utilisons les relations de trigonométrie suivantes,

$$\frac{\sin^2\left(\frac{\omega T}{2}\right)}{e^{i\omega T} - 1} = -\frac{1}{4} e^{-i\omega T} (e^{i\omega T} - 1) = \frac{1}{4} (e^{-i\omega T} - 1) \quad (3.3.125)$$

et

$$\frac{\cos^2\left(\frac{\omega T}{2}\right)}{e^{i\omega T} + 1} = \frac{1}{4} e^{-i\omega T} (e^{i\omega T} + 1) = \frac{1}{4} (e^{-i\omega T} + 1). \quad (3.3.126)$$

Ainsi nous écrivons,

$$W[J] = \exp\left(\frac{i}{4\omega \sin(\omega T)} \left\{ (1 - e^{-i\omega T}) \left[\int_{t_a}^{t_b} J(\tau) \cos(\omega(\tau - \bar{t})) d\tau \right]^2 \right. \right. \quad (3.3.127)$$

$$\left. \left. - (1 + e^{-i\omega T}) \left[\int_{t_a}^{t_b} J(\tau) \sin(\omega(\bar{t} - \tau)) d\tau \right]^2 \right. \right. \quad (3.3.128)$$

$$\left. \left. - 4 \int_{t_a}^{t_b} d\sigma \int_{t_a}^{\sigma} d\tau J(\sigma) J(\tau) \sin(\omega(t_b - \sigma)) \sin(\omega(\tau - t_a)) \right\} \right). \quad (3.3.129)$$

Afin de regrouper les intégrales, nous pouvons exprimer les deux intégrales au carré ci-dessus en fonction des bornes de la troisième intégrale. Pour une fonction $f(\tau, \sigma)$ quelconque nous avons

$$\int_{t_a}^{t_b} d\sigma \int_{t_a}^{t_b} d\tau f(\tau, \sigma) = 2 \int_{t_a}^{t_b} d\sigma \int_{t_a}^{\sigma} d\tau f(\tau, \sigma), \quad (3.3.130)$$

ce qui nous permet d'écrire

$$W[J] = \exp\left(\frac{i}{2\omega \sin(\omega T)} \int_{t_a}^{t_b} d\sigma \int_{t_a}^{\sigma} d\tau J(\sigma) J(\tau) \left\{ (1 - e^{-i\omega T}) \cos(\omega(\sigma - \bar{t})) \cos(\omega(\tau - \bar{t})) \right. \right. \quad (3.3.131)$$

$$\left. \left. - (1 + e^{-i\omega T}) \sin(\omega(\bar{t} - \sigma)) \sin(\omega(\bar{t} - \tau)) \right. \right. \quad (3.3.132)$$

$$\left. \left. - 2 \sin(\omega(t_b - \sigma)) \sin(\omega(\tau - t_a)) \right\} \right) \quad (3.3.133)$$

$$= \exp\left(\frac{i}{2\omega \sin(\omega T)} \int_{t_a}^{t_b} d\sigma \int_{t_a}^{\sigma} d\tau J(\sigma) J(\tau) \right. \quad (3.3.134)$$

$$\left\{ \cos(\omega(\bar{t} - \sigma)) \cos(\omega(\bar{t} - \tau)) - \sin(\omega(\bar{t} - \sigma)) \sin(\omega(\bar{t} - \tau)) \right. \quad (3.3.135)$$

$$\left. - e^{-i\omega T} [\cos(\omega(\bar{t} - \sigma)) \cos(\omega(\bar{t} - \tau)) + \sin(\omega(\bar{t} - \sigma)) \sin(\omega(\bar{t} - \tau))] \right. \quad (3.3.136)$$

$$\left. - 2 \sin(\omega(t_b - \sigma)) \sin(\omega(\tau - t_a)) \right\}. \quad (3.3.137)$$

Grâce aux relations de trigonométrie de base et au développement des fonctions cosinus et sinus en exponentielles, nous trouvons

$$W[J] = \exp \left(\frac{i}{2\omega \sin(\omega T)} \int_{t_a}^{t_b} d\sigma \int_{t_a}^{\sigma} d\tau J(\sigma) J(\tau) \{ \cos(\omega(\sigma + \tau - 2\bar{t})) \right. \quad (3.3.138)$$

$$\left. - e^{-i\omega T} \cos(\omega(\tau - \sigma)) - 2 \sin(\omega(t_b - \sigma)) \sin(\omega(\tau - t_a)) \} \right) \quad (3.3.139)$$

$$= \exp \left(\frac{i}{4\omega \sin(\omega T)} \int_{t_a}^{t_b} d\sigma \int_{t_a}^{\sigma} d\tau J(\sigma) J(\tau) \left\{ e^{i\omega(\sigma + \tau - 2\bar{t})} + e^{-i\omega(\sigma + \tau - 2\bar{t})} \right. \right. \quad (3.3.140)$$

$$\left. - e^{-i\omega T} \left(e^{i\omega(\tau - \sigma)} + e^{-i\omega(\tau - \sigma)} \right) + \left(e^{i\omega(t_b - \sigma)} + e^{-i\omega(t_b - \sigma)} \right) \left(e^{i\omega(\tau - t_a)} + e^{-i\omega(\tau - t_a)} \right) \right\} \right) \quad (3.3.141)$$

$$= \exp \left(\frac{i}{4\omega \sin(\omega T)} \int_{t_a}^{t_b} d\sigma \int_{t_a}^{\sigma} d\tau J(\sigma) J(\tau) e^{-i\omega(\sigma - \tau)} 2i \sin(\omega T) \right), \quad (3.3.142)$$

$$(3.3.143)$$

qui se simplifie immédiatement en

$$W[J] = \exp \left(-i \int_{t_a}^{t_b} d\sigma \int_{t_a}^{\sigma} d\tau J(\sigma) \frac{e^{-i\omega(\sigma - \tau)}}{2i\omega} J(\tau) \right) \quad (3.3.144)$$

On remarque que dans (3.3.144) les variables σ et τ sont ordonnées, $\sigma - \tau > 0$, on peut donc interpréter ceci comme un sens de propagation. De plus t_a et t_b ont disparu du propagateur. On constate que l'on intègre sur un domaine triangulaire, par symétrie, on peut le compléter par une intégrale sur le carré, en prenant garde au facteur $n!$, qui dans notre cas vaut deux. Pour réaliser les intégrales triangulaires nous utiliserons la fonction de Heaviside et les temps t_a et t_b sont rejetés à l'infini, d'où

$$W[J] = \exp \left(-\frac{i}{2} \int \int d\sigma d\tau J(\sigma) \frac{1}{2i\omega} \left[H(\sigma - \tau) e^{-i\omega(\sigma - \tau)} + H(\tau - \sigma) e^{i\omega(\sigma - \tau)} \right] J(\tau) \right) \quad (3.3.145)$$

On reconnait ici le propagateur suivant

$$\frac{1}{2i\omega} \left[H(\sigma - \tau) e^{-i\omega(\sigma - \tau)} + H(\tau - \sigma) e^{i\omega(\sigma - \tau)} \right] \quad (3.3.146)$$

Que l'on peut écrire sous cette forme

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{-i(\sigma - \tau)E}}{E^2 - \omega^2 + i\varepsilon} \quad (3.3.147)$$

Les pôles sont, au premier ordre, $E = \omega - i\varepsilon$ et $E = -\omega + i\varepsilon$. Il nous faut déterminer comment refermer le contour d'intégration sur le plan complexe de E , c'est à dire pour qu'elles valeurs de σ et τ , $e^{-i(\sigma - \tau)E}$ converge.

Si $E = iK + \eta$ avec $\eta, K \in \mathbb{R}$ et $K > 0$ alors $e^{(\sigma - \tau)(K - i\eta)}$. On ne s'occupe pas de la partie oscillante, et on prend $K \gg 1$. L'intégrale converge donc pour $\sigma - \tau < 0$. On nomme γ_1 ce chemin d'intégration.

Si $E = -iK + \eta$ avec $\eta, K \in \mathbb{R}$ et $K > 0$ alors $e^{(\sigma - \tau)(-K - i\eta)}$. L'intégrale converge donc pour $\sigma - \tau > 0$. On nomme γ_2 ce chemin d'intégration.

Le contour γ_1 est parcouru dans le sens trigonométrique, on lui associe donc un indice $+2i\pi$, alors que le contour γ_2 est parcouru dans le sens anti-trigonométrique, son indice sera donc $-2i\pi$.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{-i(\sigma - \tau)E}}{E^2 - \omega^2 + i\varepsilon} = \int_{\gamma_1} \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{-i(\sigma - \tau)E}}{E^2 - \omega^2 + i\varepsilon} + \int_{\gamma_2} \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{-i(\sigma - \tau)E}}{E^2 - \omega^2 + i\varepsilon} = 2i\pi (Res_{(-\omega + i\varepsilon)} - Res_{(\omega - i\varepsilon)}) \quad (3.3.148)$$

Déterminons le résidus associé au pôle $E = \omega - i\varepsilon$

$$\begin{aligned} Res_{(-\omega + i\varepsilon)} &= \lim_{E \rightarrow -\omega + i\varepsilon} \frac{e^{-i(\sigma - \tau)E}}{(E - (-\omega + i\varepsilon))(E - (\omega - i\varepsilon))} (E - (-\omega + i\varepsilon)) \\ &= \frac{e^{-i(\sigma - \tau)(-\omega)}}{-2\omega} \\ Res_{(-\omega + i\varepsilon)} &= -\frac{e^{i\omega(\sigma - \tau)}}{2\omega} \end{aligned} \quad (3.3.149)$$

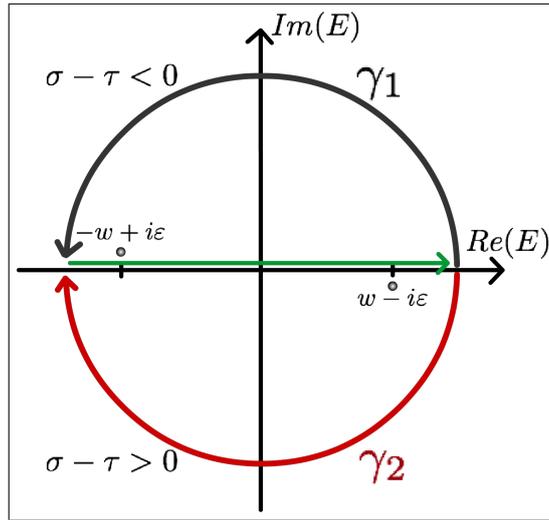


FIGURE 3.1 – Les deux différents chemins d'intégration

De la même façon on trouve

$$Res_{(\omega - i\varepsilon)} = \frac{e^{-i\omega(\sigma - \tau)}}{2\omega} \quad (3.3.150)$$

Au final

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{-i(\sigma - \tau)E}}{E^2 - \omega^2 + i\varepsilon} = \frac{i}{2\omega} (H(\sigma - \tau)e^{-i\omega(\sigma - \tau)} - H(\tau - \sigma)e^{i\omega(\sigma - \tau)}) \quad (3.3.151)$$

Et on peut maintenant faire apparaître le propagateur dans l'équation (3.3.145)

$$W[J] = \exp\left(\frac{i}{2} \int \int d\sigma d\tau J(\sigma) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{-i(\sigma - \tau)E}}{E^2 - \omega^2 + i\varepsilon} J(\tau)\right) \quad (3.3.152)$$

En regardant l'expression (3.3.145), la quantité $W[J]$ représente l'interaction entre la source et un champ d'oscillateur harmonique, via l'échange de photons. La partie d'énergie positive $H(\sigma - \tau)e^{-i\omega(\sigma - \tau)}$ se propage vers le futur, et vice versa la partie d'énergie négative $H(\tau - \sigma)e^{i\omega(\sigma - \tau)}$ remonte le temps. Il est impératif de noter que la causalité de la propagation est respectée par l'adjonction du terme imaginaire $i\varepsilon$. Ce facteur $i\varepsilon$ peut aussi s'interpréter de la manière suivante, c'est un facteur de convergence pour l'intégrale de la forme $\int e^{\frac{i}{\hbar}L}$ si l'on remplace la masse m par $m - i\varepsilon$.

On peut aussi remarquer que l'opération qui consiste à intégrer sur l'énergie est une transformation de Fourier, et en intégrant sur tous les moments, on obtient une fonction delta de Dirac, qui traduit la conservation des moments externes.

Chapitre 4

Méthode des variations

4.1 Premier et second ordre

Pour une position x et pour sa dérivée \dot{x} au temps τ , on considère le lagrangien $L(x, \dot{x})$ et l'action $S[x]$ pour une durée T ,

$$S[x] = \int_0^T L(x(\tau), \dot{x}(\tau)) d\tau. \quad (4.1.1)$$

On appelle $\eta(\tau)$ une variation de position au temps τ par rapport à la position $x(\tau)$,

$$x(\tau) \rightarrow x(\tau) + \eta(\tau),$$

avec les conditions

$$\eta(0) = 0 \quad \text{et} \quad \eta(T) = 0. \quad (4.1.2)$$

Pour étudier l'effet de ces variations, on développe l'action au second ordre en $\varepsilon\eta$, avec ε un facteur multiplicatif petit,

$$S[x + \varepsilon\eta] = S[x] + \varepsilon \int_0^T \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{\eta} + \frac{\partial L}{\partial x} \eta \right) + \frac{\varepsilon^2}{2} \int_0^T \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{\eta}^2 + 2 \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \eta \dot{\eta} + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \eta^2 \right) d\tau \quad (4.1.3)$$

Le terme obtenu au premier ordre en ε donne l'équation d'Euler-Lagrange,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0. \quad (4.1.4)$$

On prend une variation, au second ordre, de la forme

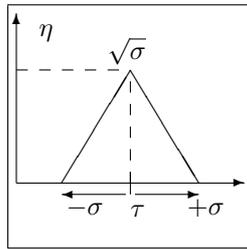


FIGURE 4.1 – Forme de la variation $\eta(\tau)$.

Le pic s'étale sur une durée de largeur $\tau \simeq o(\sigma)$ pour une hauteur maximale d'environ $\sqrt{\sigma}$. La pente ainsi caractérisée est alors de l'ordre de $\frac{1}{\sqrt{\sigma}}$, ainsi

$$\eta^2 \simeq o(\sigma), \quad \dot{\eta} \simeq o\left(\frac{1}{\sqrt{\sigma}}\right), \quad \eta \dot{\eta} \simeq o(1), \quad \text{et} \quad \dot{\eta}^2 \simeq o\left(\frac{1}{\sigma}\right) \quad (4.1.5)$$

et dans l'intégrale sur τ ,

$$\int d\tau \eta^2 = o(\sigma^2), \quad \int d\tau \eta \dot{\eta} = o(\sigma) \quad \text{et} \quad \int d\tau \dot{\eta}^2 \simeq 1. \quad (4.1.6)$$

Ainsi quand $\sigma \rightarrow 0$, le terme dominant est $\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{\eta}^2$ et on constate que,

$$\frac{\varepsilon^2}{2} \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \int \dot{\eta}^2 d\tau \geq 0, \quad (4.1.7)$$

et puisque S est minimum, on en déduit la condition de Legendre,

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \geq 0. \quad (4.1.8)$$

On cherche maintenant une fonction φ qui minimise $\delta^2 S$. Si $\delta^2 S > 0$, $\forall \varphi$, la quantité $\delta^2 S$ sera alors toujours positive. On impose une condition de normalisation pour φ ,

$$\int \varphi^2 dt = 1, \quad (4.1.9)$$

ainsi que les conditions aux temps initial et final, pour lesquelles tous les écarts de S sont nuls,

$$\varphi(0) = 0 \quad \text{et} \quad \varphi(T) = 0. \quad (4.1.10)$$

On pose,

$$\tilde{L}(\varphi, \dot{\varphi}) := \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{\varphi}^2 + 2 \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \varphi \dot{\varphi} + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \varphi^2, \quad (4.1.11)$$

quantité associée à l'intégrale à minimiser, $\int_0^T \tilde{L}(\varphi, \dot{\varphi}) dt$.

On introduit alors les multiplicateurs de Lagrange λ , ainsi,

$$\delta \int_0^T (\tilde{L}(\varphi, \dot{\varphi}) - \lambda \varphi^2) d\tau = 0 \quad (4.1.12)$$

et on applique l'équation d'Euler-Lagrange (4.1.4) à $\tilde{L} - \lambda \varphi^2$,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial(\tilde{L} - \lambda \varphi^2)}{\partial \dot{\varphi}} - \frac{\partial(\tilde{L} - \lambda \varphi^2)}{\partial \varphi} = 0. \quad (4.1.13)$$

pour obtenir,

$$\boxed{\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{\varphi} \right) + \left(\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \right) \varphi + \lambda \varphi = 0}. \quad (4.1.14)$$

Par ailleurs, on remarque, dans l'expression de $\delta^2 S$, que $2\varphi \dot{\varphi} = \frac{d(\varphi^2)}{dt}$, ce qui donne

$$\delta^2 S[\varphi] = \int_0^T \tilde{L}(\varphi, \dot{\varphi}) dt = \int_0^T \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{\varphi}^2 + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \frac{d(\varphi^2)}{dt} + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \varphi^2 \right) dt = \lambda \int \varphi^2 dt = \lambda, \quad (4.1.15)$$

que l'on intègre par parties,

$$\left[\dot{\varphi} \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \varphi \right]_0^T - \int_0^T \varphi \frac{d}{dt} \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{\varphi} dt + \left[\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \varphi^2 \right]_0^T - \int_0^T \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \right) \varphi^2 dt + \int_0^T \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \varphi^2 dt = \lambda, \quad (4.1.16)$$

ce qui donne

$$\int_0^T \varphi \left(\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{\varphi} \right) + \left(\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \right) \varphi + \lambda \varphi \right) dt = 0. \quad (4.1.17)$$

L'identité n'est possible que si on retrouve l'équation (4.1.14). On remarque par ailleurs que cette équation est analogue à un problème de Sturm-Liouville de la forme

$$\frac{d}{dt}(p\dot{x}) + qx = \lambda x. \quad (4.1.18)$$

Nous avons

$$\delta^2 S[\varphi] = \lambda. \quad (4.1.19)$$

On considère $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n$ avec les termes λ_n associés aux fonctions φ_n , formant une base orthonormées, sur lesquelles se décompose $\eta(t)$

$$\eta(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \varphi_n(t), \quad (4.1.20)$$

ce qui donne

$$\delta^2 S[\eta] = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n a_n^2. \quad (4.1.21)$$

L'extremum étudié est un minimum, et on suppose pour le moment que $\lambda_1 > 0$. On se place maintenant dans le cas particulier où L est de la forme

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x). \quad (4.1.22)$$

Pour une durée T très petite, avec comme conditions

$$x(0) = 0 \quad \text{et} \quad x(T) = b, \quad (4.1.23)$$

on peut approximer la trajectoire $x(t)$ par une droite

$$x(t) = a + \frac{b-a}{T} t. \quad (4.1.24)$$

On applique

$$m\ddot{\varphi} + V''(x)\varphi + \lambda\varphi = 0, \quad (4.1.25)$$

et avec le développement de $x(t)$, on remarque que V'' ne dépend pas du temps,

$$\ddot{\varphi} + (V''(a) + \lambda)\varphi = 0. \quad (4.1.26)$$

Cette équation est analogue à une équation de Schrödinger dans laquelle on a remplacé x par le temps. La solution pour $n = 1$ est alors du type

$$\varphi(t) = \sin\left(\frac{\pi t}{T}\right), \quad (4.1.27)$$

ce qui dans l'équation du second ordre en φ donne

$$\lambda + V''(a) = \frac{\pi^2}{T^2}. \quad (4.1.28)$$

Lorsque la durée T tend vers zéro, on peut négliger le potentiel dans la formule précédente. De plus, pour un n quelconque, on obtient

$$\lambda_n = \frac{\pi^2}{T^2} n^2. \quad (4.1.29)$$

On considère maintenant que T n'est plus nécessairement petit et que les valeurs de λ_n décroissent lorsque T augmente. λ_1 est la première valeur susceptible de devenir négative ; si cela se produit, on note T_0 la valeur de T en ce point, que l'on appelle *point focal* ou *point conjugué* et a pour coordonnée b . Les conditions aux limites sont alors

$$x(0) = a \quad \text{et} \quad x(T_0) = b. \quad (4.1.30)$$

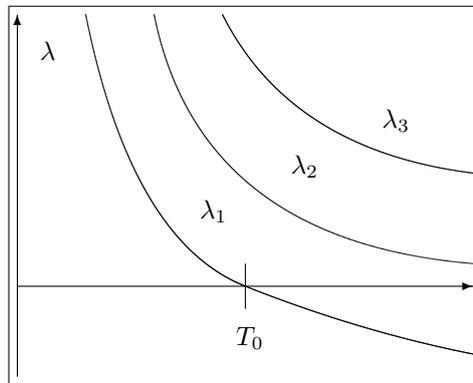


FIGURE 4.2 – Dépendance en T de λ . On montre que λ_1 peut s'annuler en T_0 .

Il doit donc exister une fonction φ solution de l'équation (4.1.14) telle que $\lambda = 0$, $\varphi(0) = 0$ et $\varphi(T_0) = 0$. De plus si b est un point focal, on peut dire qu'une petite variation de x devenant $x + \varepsilon\varphi$ doit permettre de retrouver les conditions précédentes, devenant

$$(x + \varepsilon\varphi)(0) = a \quad \text{et} \quad (x + \varepsilon\varphi)(T_0) = b. \quad (4.1.31)$$

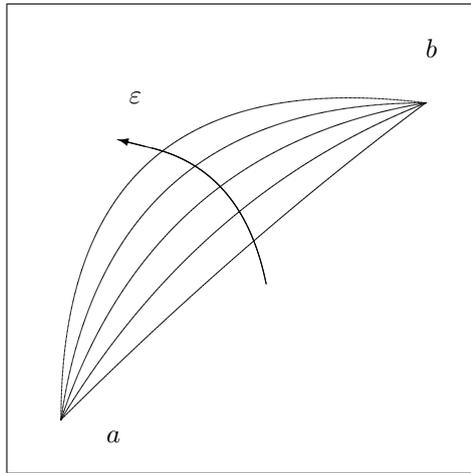


FIGURE 4.3 – Chemins pour différentes valeurs de ε , convergeant au point focal b .

Il faut cependant vérifier que $x + \varepsilon\varphi$ satisfait bien les équations du mouvement. Le lagrangien du problème est (4.1.22), et en appliquant les équation d'Euler-Lagrange, on trouve, pour x ,

$$m\ddot{x} = -V'(x). \quad (4.1.32)$$

Pour $x + \varepsilon\varphi$, on a

$$m \frac{d(x + \varepsilon\varphi)}{dt} = -V(x + \varepsilon\varphi) \quad (4.1.33)$$

qui donne l'équation de Jacobi, en développant le potentiel au premier ordre,

$$\boxed{m\ddot{\varphi} = -\varphi V''(x)}. \quad (4.1.34)$$

Cette équation est l'analogie de (4.1.14) pour $\lambda = 0$. Elle indique la différence entre les deux solutions pour x et $x + \varepsilon\varphi$.

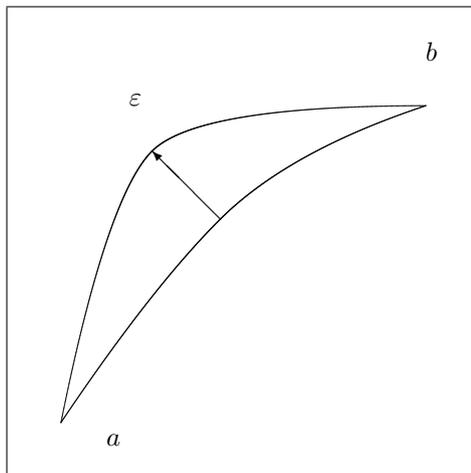


FIGURE 4.4 – Mise en évidence de l'écart entre deux solutions dépendant de deux valeurs de ε différentes.

Dans le cas général pour un potentiel quadratique, étudié plus haut, la lagrangien s'écrit

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}cx^2, \quad (4.1.35)$$

le potentiel $V(x)$ étant dans ce cas $V(x) = \frac{1}{2}cx^2$, et sa dérivée seconde $V''(x) = c$. L'équation de Jacobi (4.1.34) prend alors la forme

$$m\ddot{\varphi} = -c\varphi. \quad (4.1.36)$$

Par ailleurs, nous avons vu que le propagateur dans le cas d'un lagrangien présentant un potentiel quadratique était de la forme

$$\frac{1}{\sqrt{4i\pi\hbar|\varphi(t)|}} e^{\frac{i}{\hbar}S_\varphi}, \quad (4.1.37)$$

et dont le facteur accolé à l'exponentielle diverge aux points focaux, quand $\varphi = 0$. En développant ce commentaire dans le cas de l'optique, nous verrons que ce comportement justifie le lien entre les variations et l'intégrale de chemin. Nous verrons aussi qu'à chaque passage par un point focal, on observe un déphasage dans l'expression du propagateur.

Dans cette partie, on se place au point focal, c'est à dire que la première valeur propre λ_1 du spectre discret de $\varphi(t)$ est nulle. On rappelle que la fonction $\varphi(t)$ est appelée champs de Jacobi, qui vérifie l'équation (??), elle décrit l'écart à la trajectoire qui minimise l'action.

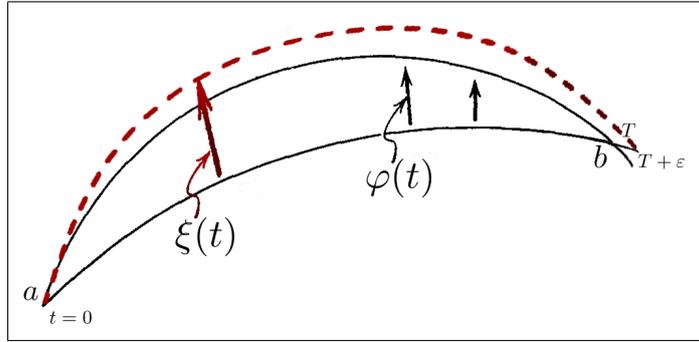
On garde les mêmes conditions au bord à savoir $x(t=0) = a$ et $x(t=T) = b$. Mais cette fois ci prolongeons l'intervalle de temps pour dépasser le point focal, la position $x(t)$ est alors définie sur $0 \leq t \leq T' = t + \varepsilon$. On défini $\xi(t)$ une autre fonction d'écart à la solution $x(t)$, et $\xi(t)$ est définie sur $0 \leq t \leq T' = t + \varepsilon$, avec pour conditions aux bords $\xi(0) = 0$ et $\xi(T + \varepsilon) = 0$.

Soit $y(t)$ une variation que l'on définit ainsi

$$y(t) := \begin{cases} \frac{1}{c}\varphi(t) - c\xi(t) & \text{si } 0 \leq t \leq T, \\ -c\xi(t) & \text{si } T \leq t \leq T + \varepsilon \end{cases} \quad (4.1.38)$$

Avec le coefficient c réel mais petit.

Le schéma ci-dessous représente les différentes grandeurs mises en jeu.



Nous avons montré précédemment que la dérivée fonctionnelle seconde de l'action se mettait sous cette forme.

$$\delta^2 S[y] = \int_0^{T+\varepsilon} dt \left[\frac{\partial^2 L}{\partial^2 \dot{x}} \dot{y}^2 + 2 \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x} y \dot{y} + \frac{\partial^2 L}{\partial^2 x} y^2 \right] \quad (4.1.39)$$

Utilisons le paramétrage de la variation (4.1.38) et réécrivons la dérivée fonctionnelle seconde de l'action (4.1.39). On remarque préalablement que les termes en $y(t)$ dans (4.1.39) sont quadratiques, l'intégrale entre T et $T + \varepsilon$ engendrera donc un terme d'ordre c^2 , que nous négligerons, au final les bornes de l'intégrale sont réduites à $[0, T]$.

D'après (4.1.39) et (4.1.38)

$$\delta^2 S \left[\frac{1}{c}\varphi(t) - c\xi(t) \right] = \int_0^T dt \frac{\partial^2 L}{\partial^2 \dot{x}} \left[\frac{1}{c^2}\varphi^2 - 2\dot{\varphi}\dot{\xi} + c^2\dot{\xi}^2 \right] \quad (4.1.40)$$

$$+ \int_0^T dt 2 \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x} \left[\frac{1}{c^2}\varphi\dot{\varphi} - \dot{\xi}\varphi - \dot{\varphi}\xi + c^2\dot{\xi}\dot{\xi} \right] \quad (4.1.41)$$

$$+ \int_0^T dt \frac{\partial^2 L}{\partial^2 x} \left[\frac{1}{c^2}\varphi^2 - 2\xi\varphi + c^2\xi^2 \right] \quad (4.1.42)$$

A cette étape deux remarques s'imposent : l'ordre c^2 sera négligé et on avait montré que $\delta^2 S[\varphi] = \sum_i \lambda_i \varphi_i^2$. Or dans cette partie, on considère que le point focal existe ce qui signifie que la première valeur propre $\lambda_1 = 0$. Regardons le premier terme de (4.1.40), (4.1.41) et (4.1.42) ensemble ils reconstituent le premier terme de la somme $\delta^2 S[\varphi]$ soit $\lambda_1 \varphi_1^2 = 0$

Au final on peut réécrire

$$\delta^2 S[y] = -2 \int_0^T dt \left[\frac{\partial^2 L}{\partial^2 \dot{x}} (\dot{\varphi}\dot{\xi}) + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x} (\dot{\xi}\varphi + \dot{\varphi}\xi) + \frac{\partial^2 L}{\partial^2 x} (\varphi\xi) + o(c^2) \right] \quad (4.1.43)$$

Connaissant les conditions aux bords pour $\varphi(t)$ on peut intégrer par partie pour avoir une expression dépendant uniquement de $\xi(t)$ et non de ses dérivées.

Procédons terme à terme :

$$\int_0^T dt \frac{\partial^2 L}{\partial^2 \dot{x}} (\dot{\varphi} \dot{\xi}) = \left[\frac{\partial^2 L}{\partial^2 \dot{x}} \dot{\varphi} \dot{\xi} \right]_0^T - \int_0^T \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial^2 \dot{x}} \dot{\varphi} \right) \xi dt \quad (4.1.44)$$

Dans (4.1.44) le premier terme disparaît grâce à la condition au bord sur $\dot{\varphi}$.

$$\int_0^T dt \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x} (\dot{\xi} \varphi + \dot{\varphi} \xi) = \int_0^T dt \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x} (\xi \varphi)' = \left[\frac{\partial^2 L}{\partial^2 \dot{x}} \varphi \xi \right]_0^T - \int_0^T \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial^2 \dot{x}} \right) \varphi \xi dt \quad (4.1.45)$$

Dans (4.1.45) le premier terme disparaît grâce à la condition au bord sur φ .

En regroupant (4.1.44), (4.1.45) dans (4.1.43).

$$\delta^2 S[y] = -2 \left[\frac{\partial^2 L}{\partial^2 \dot{x}} \dot{\varphi} \dot{\xi} \right]_0^T - 2 \int_0^T -\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial^2 \dot{x}} \dot{\varphi} \right) \xi + \left(\frac{\partial^2 L}{\partial^2 x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial^2 \dot{x}} \right) \right) \varphi \xi + o(c^2) dt \quad (4.1.46)$$

On reconnaît l'équation de Sturm-Liouville (4.1.14) avec $\lambda = 0$. Au final

$$\delta^2 S[y] = -2 \left[\frac{\partial^2 L}{\partial^2 \dot{x}} \dot{\varphi} \dot{\xi} \right]_0^T \quad (4.1.47)$$

Or les conditions initiales sur $\dot{\varphi}(t)$ sont les suivantes : $\dot{\varphi}(0) = 0$ et $\dot{\varphi}(T) \neq 0$

$$\delta^2 S[y] = -2 \xi(T) \frac{\partial^2 L}{\partial^2 \dot{x}}(T) \dot{\varphi}(T) + o(c^2) dt \quad (4.1.48)$$

On peut montrer qu'il existe au moins une valeur propre négative, en posant $\xi(t) = t \dot{\varphi}(t)$ puisque $\dot{\varphi}(t)$ est quelconque, le t en facteur permet de respecter la condition au bord à $t = 0$, on obtient ainsi une quantité au carré, donc positive à savoir $\frac{\dot{\varphi}^2(T)}{t}$. Or nous avons prouvé dans la section précédente que pour avoir un minimum de l'action il fallait $\frac{\partial^2 L}{\partial^2 \dot{x}} \geq 0$. Et donc $\delta^2 S[y] \leq 0$ pour au moins une valeur propre.

Chapitre 5

Optique

5.1 Optique principe de Huygens

Le principe de Huygens est une approximation décrivant la propagation des ondes lumineuses. Il stipule que chaque point du front d'une onde émet lui-même de la lumière en se comportant comme une source d'ondes sphériques de la forme

$$\frac{A}{r} e^{ikr}. \quad (5.1.1)$$

En un point d'observation, l'important est la somme des amplitudes de chaque onde.

Nous verrons à la fin de cette section qu'il est possible d'établir un lien entre le principe de Huygens (et ses approximations) avec l'intégrale de chemin (exacte).

5.2 Onde plane

Nous tenons tout d'abord à vérifier que le principe de Huygens permet de décrire la propagation d'une onde plane, se propageant dans la direction x . On appelle Ψ la fonction associée au front de l'onde, d'amplitude A et de vecteur d'onde k selon x ,

$$\boxed{\Psi = A e^{ikx}}. \quad (5.2.1)$$

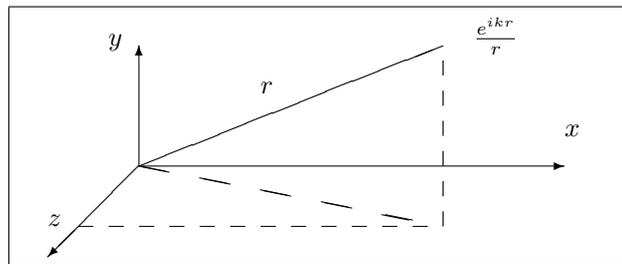


FIGURE 5.1 – Pour une onde plane, la fonction d'onde se propage davantage dans une direction, x .

Dans ce cas, la valeur du déplacement selon la direction de x est plus important que selon les autres directions, ce qui permet d'écrire

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \simeq x \left(1 + \frac{1}{2} \frac{y^2 + z^2}{x^2} \right) \simeq x + \frac{1}{2x} (y^2 + z^2). \quad (5.2.2)$$

Dans l'expression de la fonction d'onde sphérique, on néglige les termes en y et z , ainsi $\frac{1}{r} \rightarrow \frac{1}{x}$.

En appelant C la constante de normalisation de Ψ , et en intégrant sur un élément de surface ds associé au front

d'onde, nous pouvons écrire

$$\Psi = C \iint ds \frac{A}{r} e^{ikr} \quad (5.2.3)$$

$$\simeq C \iint dy dz \frac{A}{x} e^{ik(x + \frac{1}{2x}(y^2+z^2))} \quad (5.2.4)$$

$$= Ae^{ikx} \frac{C}{x} \iint dy dz e^{-\frac{k}{2ix}(y^2+z^2)} \quad (5.2.5)$$

$$= Ae^{ikx} \frac{C}{x} \frac{2i\pi x}{k} \quad (5.2.6)$$

$$= Ae^{ikx} C \frac{2i\pi}{k}. \quad (5.2.7)$$

On remarque bien que la dépendance de la fonction Ψ en x n'est à considérer que pour la direction de propagation, et plus pour l'amplitude de la fonction, comme avec les ondes sphériques. Pour une onde plane idéale, l'intensité ne décroît pas en s'éloignant de la source. Cependant, pour retrouver la fonction de l'onde plane décrite par l'équation (5.2.1), nous devons poser, pour la constante de normalisation,

$$C = \frac{k}{2i\pi}. \quad (5.2.8)$$

Ainsi, d'une manière plus générale, l'élément de surface à intégrer associé à la propagation d'une onde est de la forme

$$\frac{k}{2i\pi} \frac{e^{ikr}}{r} ds. \quad (5.2.9)$$

5.3 Au voisinage du point focal sur l'axe optique

Dans cette section, on considère un système optique convergent, par exemple une lentille. Les rayons convergent vers une zone assimilée à un « point » focal, et y arrivent en phase. Compte-tenu des dimensions du système optique, on met en évidence une zone non éclairée, délimitée par une enveloppe appelée la *caustique*.

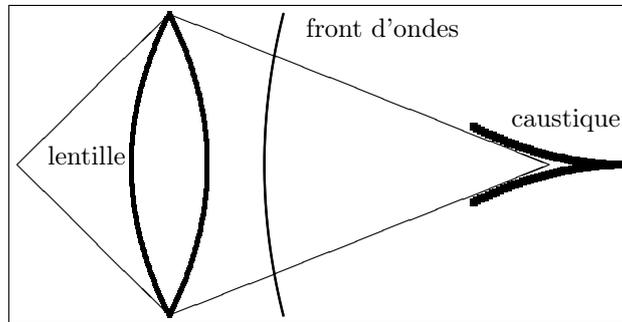


FIGURE 5.2 – Les rayons convergent et mettent en évidence une zone d'ombre délimitée par une enveloppe appelée la caustique.

Pour évaluer la position X de la surface d'onde selon l'axe optique, noté x , on se place d'abord dans un plan xOy . Pour le moment, on se place au voisinage du point focal, sur l'axe Ox .

La surface d'onde est alors représentée par une courbe que l'on assimile à un cercle de rayon R . Ceci n'est valable que si le déplacement X est très petit devant le rayon de courbure de la surface d'onde. À deux dimensions, l'équation du cercle est ici

$$(R - X)^2 + y^2 = R^2, \quad (5.3.1)$$

et puisque $X \ll R$, nous obtenons

$$X = \frac{y^2}{2R}. \quad (5.3.2)$$

Quand on considère la troisième dimension, on associe un rayon de courbure à chaque direction y et z , respectivement notés R_1 et R_2 , proches l'un de l'autre. Cette approximation n'est valable que si la position de R_1 est proche de la position de R_2 et qu'elles sont assez grandes devant X , pour que l'onde soit presque plane. On considèrera par la suite $R_1 \leq R_2$.

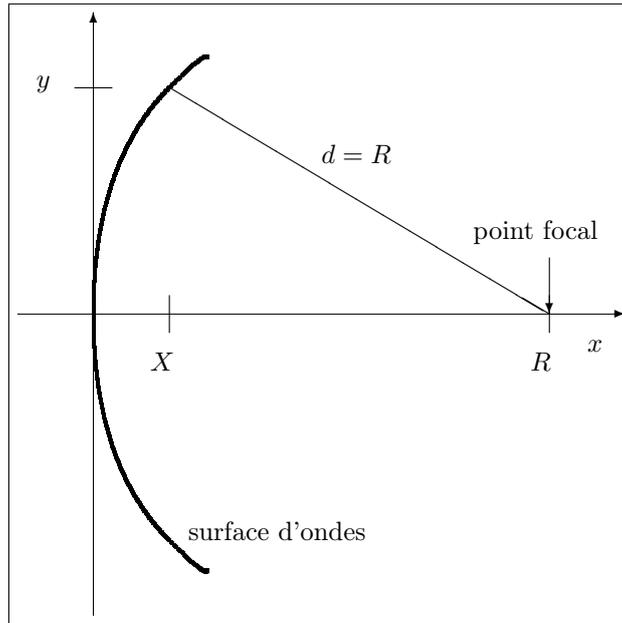


FIGURE 5.3 – Représentation d'une surface d'ondes dans un plan contenant un rayon R .

L'équation de la surface d'onde devient dans ce cas

$$X = \frac{y^2}{2R_1} + \frac{z^2}{2R_2}. \quad (5.3.3)$$

À trois dimensions, le rayon R de la surface d'onde observée depuis l'axe x s'écrit et peut être approximé comme suit,

$$R = \sqrt{(x - X)^2 + y^2 + z^2} \simeq x \sqrt{1 - \frac{2X}{x} + \frac{y^2 + z^2}{x^2}} \simeq x + \frac{1}{2} \left(y^2 \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{R_1} \right) + z^2 \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{R_2} \right) \right). \quad (5.3.4)$$

La propagation se faisant essentiellement selon x , la fonction d'onde Ψ devient alors,

$$\Psi = A \int \frac{k}{2i\pi} \frac{e^{ikr}}{x} dy dz \quad (5.3.5)$$

$$= A \frac{k}{2i\pi} \frac{1}{x} \int e^{ik \left(x + \frac{y^2}{2} \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{R_1} \right) + \frac{z^2}{2} \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{R_2} \right) \right)} dy dz \quad (5.3.6)$$

$$= A \frac{k}{2i\pi} \frac{1}{x} \sqrt{\frac{2i\pi}{k \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{R_1} \right)}} \sqrt{\frac{2i\pi}{k \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{R_2} \right)}} \quad (5.3.7)$$

$$= \sqrt{\frac{R_1 R_2}{(R_1 - x)(R_2 - x)}} A e^{ikx}. \quad (5.3.8)$$

Comme avec l'intégrale de chemin, les approximations effectuées dans le calcul de Ψ font apparaître un comportement divergent aux points

$$x = R_1 \quad \text{et} \quad x = R_2. \quad (5.3.9)$$

Lorsqu'on regarde le comportement de Ψ pour une onde se déplaçant selon des x croissants, on remarque que pour $x < R_1$, le terme sous la racine

$$\sqrt{\frac{R_1 R_2}{(R_1 - x)(R_2 - x)}} \quad (5.3.10)$$

est positif. En dépassant le premier point de divergence on a $R_1 < x < R_2$, ce qui fait apparaître

$$\frac{1}{\sqrt{-1}} = \frac{1}{i} = e^{-i\frac{\pi}{2}} \quad (5.3.11)$$

avec la racine

$$\sqrt{\frac{R_1 R_2}{(x - R_1)(R_2 - x)}} e^{-i\frac{\pi}{2}}, \quad (5.3.12)$$

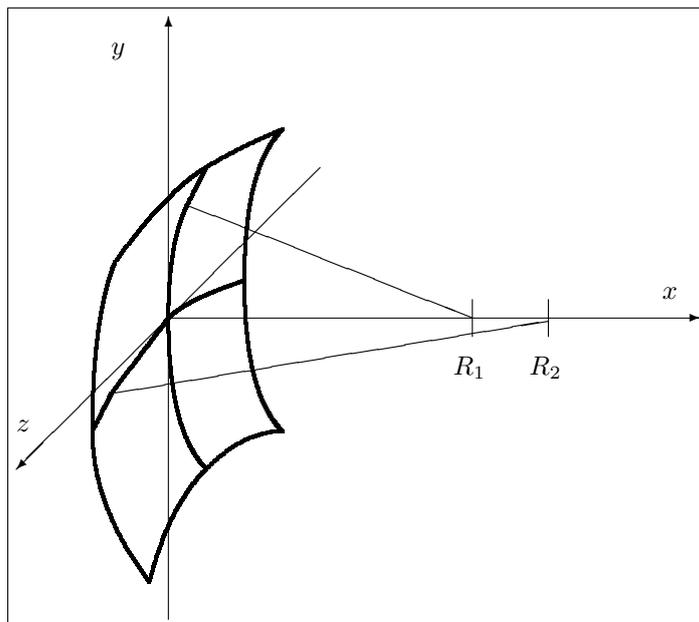


FIGURE 5.4 – Surface de l’onde. On met en évidence les deux points $x = R_1$ et $x = R_2$, qui sont les deux points de contact d’un rayon avec les deux caustiques.

ce qui se traduit par un déphasage de $\frac{\pi}{2}$ dans la fonction Ψ . De même, en passant par le second point de divergence en $x = R_2$, on fait apparaître un nouveau déphasage de $\frac{\pi}{2}$, qui implique

$$\sqrt{\frac{R_1 R_2}{(x - R_1)(x - R_2)}} e^{-i\pi}. \quad (5.3.13)$$

Les points R_1 et R_2 étant voisins, on considère qu’ils forment une zone de convergence assimilable à un point focal. En passant par ce point, on observe un déphasage d’un angle π .

5.4 Au voisinage du point focal et de la caustique

On regarde maintenant ce qui se passe au voisinage du point focal. On peut mettre en évidence une zone d’ombre, délimitée par une surface que l’on appelle la *caustique*. Il serait cependant possible de montrer que l’intensité lumineuse est très forte juste avant de passer dans la zone d’ombre. La transition entre ces deux domaines d’intensité sera évoquée dans la section suivante.

On désigne par φ une fonction s’annulant sur la surface d’onde dont l’expression générale peut être décrite par un développement en x , petit devant les rayons de courbure,

$$\varphi(x, z) = z - \frac{x^2}{2R} - \frac{\beta}{3}x^3 + \dots \quad (5.4.1)$$

Les deux premiers termes de la partie à droite du signe égal sont présents dans l’expression de la distance de la surface d’onde au point focal dans la section précédente. Le dernier terme permettra quant à lui d’éviter la divergence observé dans le cas décrit précédemment. Il est inutile de pousser le développement plus loin en x , notamment en x^4 car l’effet de ce terme serait nul par symétrie autour de l’axe $z = 0$ (seules les puissances impaires entraînent une dissymétrie de part et d’autre de cet axe selon la valeur de x).

Le point d’observation est repéré par les coordonnées (X, Z) . Lorsque la surface d’ondes arrive en ce point, on a

$$\varphi(X, Z) = 0 \quad (5.4.2)$$

En supposant que l’on a $X \gg x$, coordonnée du point d’émission, on peut développer $\varphi(X, Z)$ au premier ordre, ce qui donne

$$\varphi(X, Z) = \varphi(x, z) + (X - x)\varphi'_x + (Z - z)\varphi'_z. \quad (5.4.3)$$

Puisque les deux valeurs de φ ci-dessus sont nulles d’après (5.4.2), nous avons, pour une tangente à la surface d’ondes,

$$(X - x)\varphi'_x + (Z - z)\varphi'_z = 0. \quad (5.4.4)$$

L'équation décrivant la normale aux surfaces d'ondes se trouve par orthogonalité,

$$(X - x)\varphi'_z - (Z - z)\varphi'_x = 0, \quad (5.4.5)$$

avec

$$\varphi'_x = -\frac{x}{R} - \frac{2\beta}{3}x^2 \quad \text{et} \quad \varphi'_z = 1. \quad (5.4.6)$$

Ainsi, pour la normale D_x , on obtient une parabole caractérisée par l'équation

$$X - x + \left(\frac{x}{R} + x^2\right)Z + o(x^3) = 0. \quad (5.4.7)$$

Pour trouver l'enveloppe caractérisant la zone d'ombre, on considère l'intersection entre D_x et D'_x , dont l'expression est

$$-1 + \left(\frac{1}{x} + 2\beta x\right)Z + o(x^2) = 0. \quad (5.4.8)$$

L'expression de Z associée au rayon de courbure est alors

$$Z = R(1 - 2\beta Rx + o(x^2)), \quad (5.4.9)$$

ce qui donne l'expression du paramètre x ,

$$x = -\frac{Z - R}{2\beta R^2}. \quad (5.4.10)$$

On remarque que pour $x = 0$, on obtient $Z = R$, et que tout cela désigne respectivement le centre et le rayon de courbure de l'enveloppe. Pour l'équation caractérisant l'enveloppe par X , on obtient,

$$X = x - \frac{x}{R}Z - \beta Zx^2 = \beta Rx^2 + o(x^3), \quad (5.4.11)$$

ce qui donne au second ordre en x l'expression $X = \beta Rx^2$. En remplaçant le paramètre x par son expression (5.4.10), on obtient pour l'enveloppe

$$X = \frac{(Z - R)^2}{4\beta R^3} \equiv \frac{(Z - R)^2}{2\rho}, \quad (5.4.12)$$

dans laquelle on identifie le rayon de courbure ρ de l'enveloppe,

$$\rho = 2\beta R^3. \quad (5.4.13)$$

On applique maintenant la formule de Huygens, où on note d la distance séparant le point d'émission de coordonnées (x, z) d'un point voisin du point focal, de coordonnées $(\xi, R + \eta)$, avec ξ et η petits.

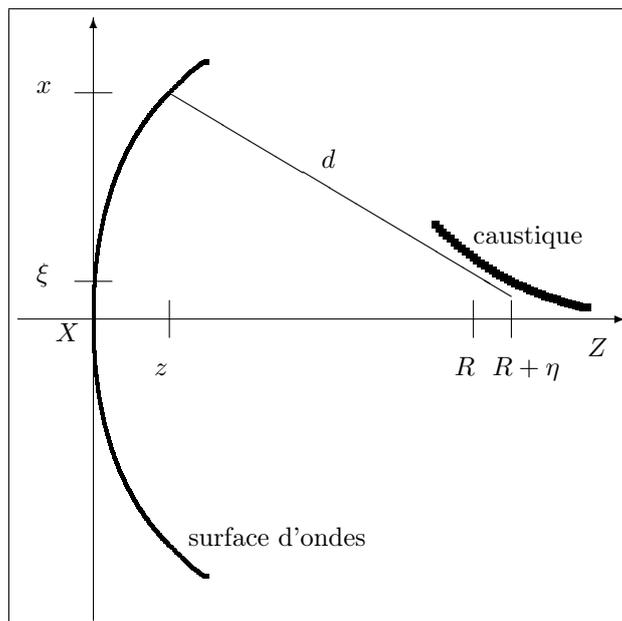


FIGURE 5.5 – Développement au voisinage du point focal.

On a

$$\Psi = C \int ds \frac{e^{ikd}}{d} \propto \int dx \frac{e^{ikd}}{d}. \quad (5.4.14)$$

L'expression de d^2 est alors

$$d^2 = (\xi - x)^2 + \left(R + \eta - \frac{x^2}{2R} - \frac{\beta}{3}x^3 \right)^2, \quad (5.4.15)$$

et au voisinage du centre de courbure, on développe au premier ordre en η et ξ et au troisième ordre en x ,

$$d^2 = x^2 - 2\xi x + R^2 + 2R\eta - x^2 - \frac{2\beta R}{3}x^3 - \frac{\eta}{R}x^2 - \frac{2\eta\beta}{3}x^3 \quad (5.4.16)$$

$$= R^2 \left(1 + \frac{2\eta}{R} - \frac{2\xi}{R^2}x - \frac{\eta}{R^3}x^2 - \left(1 + \frac{\eta}{R} \right) \frac{2\beta}{3R}x^3 \right), \quad (5.4.17)$$

pour obtenir finalement

$$d = R + \eta - \frac{\xi}{R}x - \frac{\eta}{2R^2}x^2 - \left(1 + \frac{\eta}{R} \right) \frac{\beta}{3R}x^3. \quad (5.4.18)$$

Au point focal, $\eta = 0$ et $\xi = 0$, et nous avons

$$d = R - \frac{\beta}{3R}x^3. \quad (5.4.19)$$

En faisant le même développement qu'à la section précédente, mais en tenant compte cette fois du terme en x^3 , on évite la divergence qui nous posait problème. Ce développement avec $\beta \neq 0$ permet en effet de faire moins d'approximations.

5.5 La fonction d'Airy

$$A(x) := \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(tx + \frac{1}{3}t^3)} dt \quad (5.5.1)$$

Retrouvons l'équation différentielle pour A , essayons avec

$$\frac{d^2}{dx^2}A(x) - xA(x) = 0 \quad (5.5.2)$$

$$-\frac{d^2}{dx^2}A(x) + xA(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} (t^2 + x)e^{i(tx + \frac{1}{3}t^3)} dt = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dt} e^{i(tx + \frac{1}{3}t^3)} dt = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(tx + \frac{1}{3}t^3)} dt \quad (5.5.3)$$

On reconnaît dans (5.5.3) une dérivée totale par rapport à la variable t , reste à connaître le comportement à l'infini. On remarque au passage que cette équation est semblable à une équation de Schrödinger pour un potentiel $V = x$.

Comportement à l'infini

Dans l'équation (5.5.1) la phase est oscillante, on demande donc à ce qu'elle s'annule d'où

$$t^2 + x = 0 \quad (5.5.4)$$

Si $x < 0$ alors $t = \pm\sqrt{|x|}$ et Si $x > 0$ alors $t = \pm i\sqrt{x}$

On voit qu'à l'infini le terme en t^3 domine. Effectuons le changement de variable suivant $t := \rho e^{i\theta}$ alors $i\frac{t^3}{3} = i\frac{\rho^3}{3}e^{i(3\theta)} = i(\cos(3\theta) + i\sin(3\theta))$. On en déduit que la partie réelle $-\frac{\rho^3}{3}\sin 3\theta$ peut faire diverger cette intégrale.

Schématisons le comportement de $A(x)$ à l'infini, c'est à dire pour ρ très grand.

Etude du cas $x < 0$, phase stationnaire

On développe l'expression de l'intégrale, autour des 2 pôles. Dans un premier temps, on pose $t := +\sqrt{|x|} + s$,

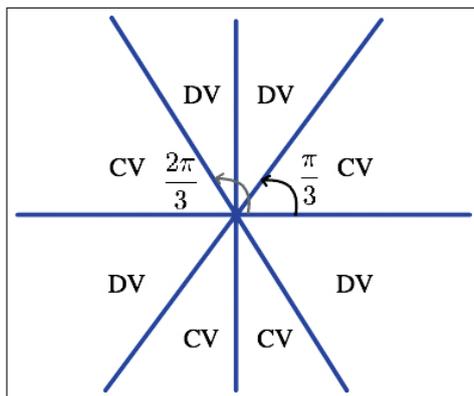


FIGURE 5.6 – CV : domaine de convergence, DV : domaine de divergence

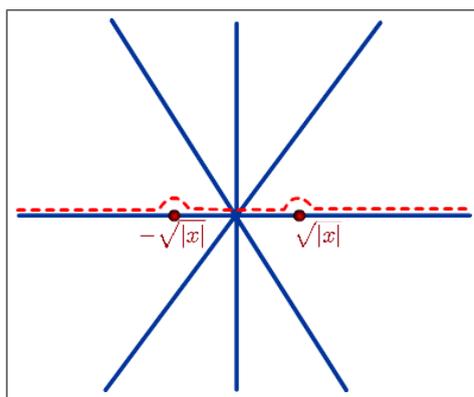


FIGURE 5.7 – Déformation du contour, autour des 2 pôles réels

on injecte dans (5.5.1).

$$tx + \frac{1}{3}t^3 = x\sqrt{|x|} + xs + \frac{1}{3} \left(|x|^{3/2} + 3|x|s + 3|x|^{1/2}s^2 + s^3 \right) \quad (5.5.5)$$

Les termes linéaires en x s'annulent à cause de la valeur absolue, et on néglige le terme d'ordre 3 en s . On injecte ce résultat dans (5.5.1), et on obtient l'intégrale gaussienne suivante :

$$A_1(x) = \int e^{-\frac{2i}{3}|x|^{3/2} + i|x|^{1/2}s^2} ds = e^{-\frac{2i}{3}|x|^{3/2}} \sqrt{\frac{i\pi}{|x|^{1/2}}} \quad (5.5.6)$$

En procédant de la même façon pour le second pôle, $-\sqrt{|x|}$, mais cette fois ci en posant $t := -\sqrt{|x|} + s$, on obtient le résultat similaire

$$A_2(x) = e^{\frac{2i}{3}|x|^{3/2}} \sqrt{\frac{\pi}{i|x|^{1/2}}} \quad (5.5.7)$$

Au final, et en faisant apparaître une phase dans l'exponentielle

$$A_{x<0}(x) = A_1 + A_2 = \frac{\sqrt{\pi}}{|x|^{1/4}} \left(e^{\frac{2i}{3}|x|^{3/2} - i\frac{\pi}{4}} + e^{-\frac{2i}{3}|x|^{3/2} + i\frac{\pi}{4}} \right)$$

$$A_{x<0}(x) = 2 \frac{\sqrt{\pi}}{|x|^{1/4}} \cos \left(\frac{2}{3}|x|^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right) \quad (5.5.8)$$

Peut on négliger à l'infini les contributions ?

D'un point de vue général, si Θ est une fonction de la forme.

$$\Theta := \int e^{i\alpha\phi(x)} \quad (5.5.9)$$

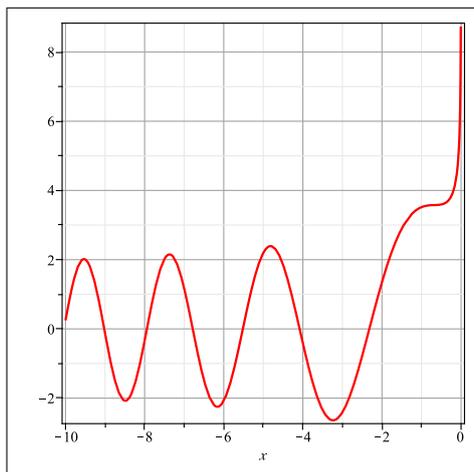


FIGURE 5.8 – $A_{x<0}(x)$ Le facteur $2\frac{\sqrt{\pi}}{|x|^{1/4}}$ donne l'enveloppe de $A_{x<0}(x)$.

Avec $\phi(x)$ maximale en $x = 0$. On développe ϕ autour de son maximum au second ordre d'où $\phi(x) = \phi(0) + \frac{1}{2}\phi''(0)x^2$, l'intégration est celle d'une gaussienne et on trouve une décroissance en $\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$. Si ϕ' n'admet pas de zéro sur $[a, b]$, on peut faire le changement de variable suivant $y := \phi(x)$ (car fonction monotone) et $dy = |\phi'(x)|dx$ et $\int e^{i\alpha y} \frac{dy}{|\phi'(x)|} \propto \frac{1}{\alpha}$

Pour trouver α on utilise un changement d'échelle tel que $t = t'x^{1/2}$ et on intégrera $e^{ix^{3/2}(t' + \frac{1}{3}t'^3)}$.

Etude du cas $x > 0$, méthode du col

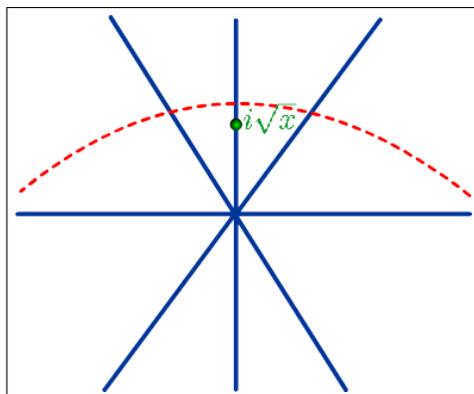


FIGURE 5.9 – Déformation du contour, autour du pôle imaginaire pure

En utilisant le théorème de Liouville, "toute fonction holomorphe est constante si elle est bornée". Dans notre cas $A(x)$ n'admet donc pas de maximum ou de minimum.

On se rappelle que pour $x > 0$ l'unique pôle contenu dans le demi plan complexe tel que la partie imaginaire soit positive est $+i\sqrt{x}$.

Posons $t := i\sqrt{x} + s$

$$tx + \frac{1}{3}t^3 = ix\sqrt{|x|} + xs + \frac{1}{3} \left(-i|x|^{3/2} - 3|x|s + 3i|x|^{1/2}s^2 + s^3 \right) \quad (5.5.10)$$

Le terme linéaire disparaît à nouveau. En remplaçant dans l'intégrale (5.5.1)

$$A_{x>0}(x) = \int e^{i\left(\frac{2i}{3}|x|^{3/2} + i|x|^{1/2}s^2\right)} ds$$

$$\boxed{A_{x>0}(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{|x|^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}|x|^{3/2}}} \quad (5.5.11)$$

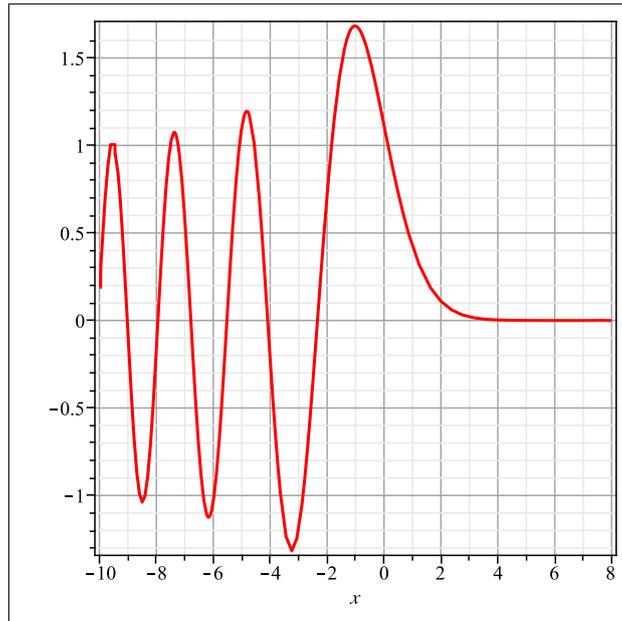


FIGURE 5.10 – Graphe de la fonction d’Airy.

La partie oscillante correspond $A_{x<0}(x)$ et la partie exponentiellement décroissante est donnée par $A_{x>0}(x)$. La divergence est absorbée par le terme d’ordre 3 en x . On peut remarquer que la dernière oscillation, donc celle d’amplitude maximale est située à une phase de $\frac{\pi}{4}$ par rapport à l’origine. Cette remarque nous sera utile lorsque nous aborderons l’approximation BKW. (voir section 6.1.1)

Chapitre 6

BKW - Approximation semi-classique

6.1 BKW - Approximation semi-classique

6.1.1 Approximation BKW

Dans cette partie on suppose que $x \in \mathbb{R}$, donc problème à une dimension (ici $m = 1$). L'approximation semi-classique consiste à rechercher les solutions de l'équation de Schrödinger sous la forme

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} \quad (6.1.1)$$

Rappelons l'équation de Schrödinger à 1D

$$-\frac{\hbar^2}{2} \psi''(x) + V(x)\psi = E\psi \quad (6.1.2)$$

On calcul $\psi'(x)$ et $\psi''(x)$ puis on les injecte dans (6.1.2), les facteurs $e^{\frac{i}{\hbar} S[x]}$ se simplifient et au final on obtient une équation différentielle sur l'action

$$S'^2[x] - i\hbar S''[x] = 2(E - V) \quad (6.1.3)$$

Insistons sur le fait que (6.1.3) est exacte, nous n'avons pas encore fait d'approximation.

Développons l'action en série de \hbar

$$S[x] = S_0[x] + \hbar S_1[x] + \hbar^2 S_2[x] + \dots \quad (6.1.4)$$

On injecte (6.1.4) dans (6.1.3), et on regroupe en puissance de \hbar .

Termes en \hbar^0

$$S_0'^2[x] = 2(E - V(x)) \rightarrow S_0[x] = \int^x \sqrt{2(E - V(x))} dx \quad (6.1.5)$$

On nomme $S_0[x]$ l'action réduite puisque $S_0[x] := \int p dq$. On peut le justifier comme ceci : $L := p\dot{q} - H$ et si H est constant on définira l'action réduite à une constante près.

Au final on peut réécrire la fonction d'onde à l'ordre 0 comme ceci

$$\boxed{\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} \int p dq}} \quad (6.1.6)$$

Une fois de plus (6.1.6) nous prouve que le lien entre la mécanique classique et la mécanique quantique est étroit. En première approximation la fonction d'onde est reliée à l'action réduite.

Termes en \hbar^1

$$2S_0' S_1'[x] - iS_0'' = 0 \rightarrow S_1[x] = \frac{i}{2} \log S_0' + k \quad (6.1.7)$$

Or de $S_0[x] := \int p dq$ on déduit que $S_0'[x] = p$.

Déterminons la nouvelle expression de la fonction d'onde au premier ordre. La constante arbitraire k sera transformée en facteur de normalisation K .

$$\boxed{\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} (S_0 + \frac{i}{2} \log S_0')} = \frac{K}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int^x p dq\right)} \quad (6.1.8)$$

Il faut faire attention (6.1.8) n'est valable que pour des impulsions grandes, nous rencontrerons plus loin les divergences sur $\psi(x)$. Si on continue le développement en puissance de \hbar^2 on ne trouve pas une expression significative, en revanche il est à noter qu'au dénominateur, les puissances de l'impulsion p augmentent, ce qui accentue le phénomène de divergence pour les impulsions proches de zéro.

On définit les "points de rebroussement" (aussi appelés "turning points"), points auxquels la vitesse change de sens, et l'impulsion devient nulle, ce qui engendre une divergence sur ψ , pour contourner ce problème, on approxime le potentiel $V(x)$ par sa tangente. On dit donc que $V(x) = \alpha x$ et on retrouve l'équation différentielle (5.5.2) vérifiée par la fonction d'Airy qui cette fois ci est aussi vérifiée par la fonction d'onde ψ ,

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) - x\psi(x) = 0 \quad (6.1.9)$$

6.1.2 Approximation BKW généralisée

Comme dans la section sur le potentiel quadratique, nous allons utiliser la méthode des variations, et nous justifierons le remplacement d'un lagrangien non quadratique par un lagrangien quadratique. L'approche est totalement différente de celle ci-dessus, où nous utilisons l'équation de Schrödinger.

$$G^{(N)}(b, T; a, 0) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right)^{\frac{N+1}{2}} \int dx_1 \dots dx_N \exp\left(\frac{i}{\hbar}S^{(N)}(x_1, \dots, x_N)\right) \quad (6.1.10)$$

où apparaît l'action discrétisée

$$S^{(N)}(x_1, \dots, x_N) = \sum_{j=0}^N \varepsilon \left[\frac{m}{2}(x_{j+1} - x_j)^2 - V(x_j) \right] \quad (6.1.11)$$

avec

$$x_{N+1} = b, \quad x_0 = a, \quad \varepsilon = \frac{T}{N+1} \quad (6.1.12)$$

et nous avons montré que

$$G(b, T; a, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} G^{(N)}(b, T; a, 0) \quad (6.1.13)$$

On utilise la méthode de la phase stationnaire, d'où les équations suivantes

$$\frac{\partial S^{(N)}}{\partial x_i} = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (6.1.14)$$

qui nous conduisent aux équations du mouvement discrètes

$$m \left(\frac{x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{\varepsilon^2} \right) = -\frac{\partial V(x_i)}{\partial x} \quad i = 1, \dots, N \quad (6.1.15)$$

On pose \bar{x}_i solutions classiques des équations du mouvement et $y(t)$ variations quelconques autour de \bar{x}_i . Et comme lors de l'étude des potentiels quadratiques on approxime le potentiel par sa tangente. On développe l'action autour de $\bar{x}_i + y(t)$, et on fait apparaître l'action quadratique.

$$\delta S^{(N)}[y] = \sum_{j=0}^N \left[\frac{m}{2\varepsilon}(y_{j+1} - y_j)^2 - \varepsilon W_j y_j^2 \right] \quad \text{avec} \quad W_j = \frac{\partial^2 V(\bar{x}_j)}{\partial x^2} \quad (6.1.16)$$

Il faut noter qu'ici nous sommes en dimension n et donc W_j est une matrice.

On peut généraliser l'expression de la dérivée fonctionnelle de l'action

$$\delta^m S[y] = -\varepsilon \sum_{j=0}^N \frac{\partial^m V(\bar{x}_j)}{\partial x^m} y_j^m \quad (6.1.17)$$

On réutilise la méthode développée pour les lagrangiens quadratiques, c'est à dire qu'il faut calculer le déterminant de la forme quadratique associée.

On reprend l'expression de σ que l'on avait démontré (voir section 4.1)

$$\sigma = \frac{m}{2\varepsilon^2} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} W_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & W_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & W_{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & W_N \end{bmatrix} \quad (6.1.18)$$

Posons $\frac{1}{2}\delta^2 S[y] := \varepsilon \eta^T \sigma \eta$

On constate dans (6.1.18), que la matrice de gauche est une matrice de Jacobi. Rappelons quelques propriétés sur ces matrices.

Elles sont de la forme

$$J := \begin{bmatrix} a & b & 0 & 0 & 0 \\ c & a & b & 0 & 0 \\ 0 & c & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & b \\ 0 & 0 & 0 & c & a \end{bmatrix}_{N \times N} \quad (6.1.19)$$

Les valeurs propres sont $\lambda_k = a - 2\sqrt{bc} \cos(k\theta)$ $k = 1, \dots, N$ $\theta = \frac{\pi}{N+1}$.

Le k -ième vecteur propre $(\alpha_k)_j = \left(\frac{c}{b}\right)^{\frac{j-1}{2}} \sin(jk\theta)$.

Dans notre cas $\lambda_k = 2(1 - \cos k\theta) = 4 \sin^2\left(\frac{k\theta}{2}\right)$ et $(\alpha_k)_j = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin(jk\theta)$. Le facteur $\sqrt{\frac{2}{N+1}}$ est un coefficient d'échelle, fonction de la taille de la matrice.

Dans notre cas, le système aux valeurs propres est le suivant $\sigma \xi = l \xi$, avec $l_1 < l_2 < \dots < l_N$. Pour j grand l'influence du potentiel est négligeable, on ne tiendra pas compte de la matrice de W_j , et on se retrouve donc uniquement avec une matrice de Jacobi. Les vecteurs propres de J et σ diffèrent donc seulement par le coefficient d'échelle, d'où

$$l_j = \frac{2m}{\varepsilon^2} \sin^2\left(\frac{j\theta}{2}\right) \quad (6.1.20)$$

Pour $1 \ll j \ll N$, sachant que $\theta = \frac{\pi}{N+1}$ et $\varepsilon = \frac{T}{N+1}$

$$\begin{aligned} l_j &= \frac{2m}{\varepsilon^2} \sin^2\left(\frac{j\pi}{2(N+1)}\right) \\ &= \frac{2m}{\varepsilon^2} \left(\frac{j\pi}{2(N+1)}\right)^2 + o\left(\frac{j}{N}\right)^2 \\ l_j &= \frac{m}{T^2} j^2 \pi^2 + o\left(\frac{j}{N}\right)^2 \end{aligned} \quad (6.1.21)$$

On sait que les vecteurs propres ξ sont orthonormés, donc dans la limite $N \rightarrow \infty$ on peut écrire

$$\varepsilon \xi_i^T \xi_j = \varepsilon \sum_{k=1}^N (\xi_i)_k (\xi_j)_k = \delta_{ik} \quad (6.1.22)$$

En remarquant que les $(\alpha_k)_j \propto (\xi_k)_j$ et en utilisant (6.1.22), on a l'isométrie suivante au facteur ε près $(\xi)_j^T (\xi_j) = \frac{1}{\varepsilon}$.

Les ξ_i formant une base d'après (6.1.22), tout vecteur peut être décomposé dessus. Soit η un vecteur à N composantes.

$$\eta_i = \sum_{j=1}^N (\xi_j)_i c_j \quad (6.1.23)$$

En multipliant (6.1.23) par $\sum_{j=1}^N (\xi_i)_j c_j$ et en utilisant (6.1.22), on obtient l'égalité de Parseval $\varepsilon \eta^T \eta = c^T c$.

On peut donc réécrire la dérivée fonctionnelle seconde de l'action, en utilisant (6.1.22)

$$\frac{1}{2} \delta^2 S[y] := \varepsilon \eta^T \sigma \eta = \varepsilon c^T (\xi_i)^T \sigma (\xi_i) c = \sum_{j=1}^N c_j^2 l_j \quad (6.1.24)$$

En généralisant ceci, la dérivée troisième de l'action s'écrira comme le produit de trois vecteurs c_j , la dérivée troisième du potentiel du potentiel, et trois matrices $(\xi_i)_j$.

On souhaite réexprimer le propagateur, pour faire apparaître la diagonalisation de l'action non classique. Le volume d'intégration est inchangé puisque nous utilisons des isométries ($(\xi_i)_j$ sont dans $O_1(\mathbb{R})$), donc $dy_1 \dots dy_N = d\eta_1 \dots d\eta_N$. Il n'en est pas de même entre $d\eta_i$ et dc_i .

$$\frac{\partial(\eta_1 \dots \eta_N)}{\partial(c_1 \dots c_N)} = \det(\xi_i)_j = \sqrt{\det[(\xi_i)_j^T (\xi_i)_j]} = \sqrt{\det \frac{1}{\varepsilon}} = \varepsilon^{-N/2} \quad (6.1.25)$$

Comme nous l'avons fait dans la partie sur les potentiels quadratiques, on peut séparer dans le propagateur l'action classique de l'action non quadratique liée aux variations $y(t)$. En utilisant la diagonalisation ci-dessus, l'équation (6.1.25), et l'équation (6.1.24) on exprime (6.1.10) sous cette forme

$$G^{(N)}(b, T; a, 0) = \left(\frac{m}{2\pi \hbar i \varepsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \varepsilon^{-N/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}\right) \int dc_1 \dots dc_N \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum l_i c_i^2 + \frac{i}{\hbar} \sum_{m=3}^{\infty} \frac{1}{m!} \delta^m S\right) \quad (6.1.26)$$

En utilisant l'approximation de la phase stationnaire, on peut se débarrasser de $\sum_{m=3}^{\infty} \frac{1}{m!} \delta^m S$ (cf Calcul des variations 1). Dans ce cas, le propagateur $G_2^{(N)}$ sera de la forme (3.2.27).

Retournons au cas où l'on conserve $\sum_{m=3}^{\infty} \frac{1}{m!} \delta^m S$. Comme nous passons par l'intégrale de chemin nous devrions utiliser l'approximation de la phase stationnaire, mais M.Schulman (voir ref. [1]) fait la remarque suivante : le problème est plus facile à traiter sous la forme d'intégrale de Wiener via la méthode du col de Laplace, bien sûr cela ne change pas la véracité du raisonnement.

Considérons donc le propagateur suivant

$$G^{(N)}(b, T; a, 0) = \left(\frac{m}{2\pi \hbar i \varepsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \varepsilon^{-N/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}\right) \times \int dc_1 \dots dc_N \exp\left(-\frac{1}{\mu} \sum l_i c_i^2 + \frac{1}{6\mu} \sum_{j_1, j_2, j_3} U_{j_1, j_2, j_3} c_{j_1} c_{j_2} c_{j_3} + \dots\right) \quad (6.1.27)$$

On remarque le changement de variable suivant $\mu = i\hbar$, la limite asymptotique est donnée par $\mu \rightarrow 0$.

6.1.3 Aparté sur l'approximation asymptotique

Considérons l'intégrale suivante

$$F(\lambda) = 2\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\lambda(x^2 + f(x))} dx \quad (6.1.28)$$

On choisit $\lambda \rightarrow \infty$, et $f(x) = o(x^2)/f(x) \geq 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}$ Le point stationnaire est $x = 0$ et par la méthode de Laplace on devrait avoir $F(\lambda) - 1 = o(1), \lambda \rightarrow \infty$. Vérifions ce résultat.

Soit

$$\frac{1}{2}(1 - F(\lambda)) = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int_0^\infty e^{-\lambda x^2} (1 - e^{-\lambda f(x)}) dx \quad (6.1.29)$$

$$= \int_0^a \int_a^\infty := \Delta_1 + \Delta_2 \quad (6.1.30)$$

Dans (6.1.29), on a utilisé le fait que l'intégrale gaussienne en x^2 est normalisée à l'unité, et dans (6.1.30) on découpe l'intégrale en deux parties. Le choix judicieux de a sera établie plus loin.

Cherchons à majorer (6.1.29), pour cela commençons par majorer $(1 - e^{-\lambda f(x)})$. En développant l'exponentielle en série au premier ordre en λ , on constate que l'on pourrait majorer $(1 - e^{-\lambda f(x)})$ par $\lambda f(x)$. Vérifions-le, via une réécriture sous forme d'une intégrale double ordonnée (avec $f(x) \geq 0$).

$$\begin{aligned} -1 + e^{-\lambda f(x)} + \lambda f(x) &= \int_0^{f(x)} \lambda^2 d\tau \int_0^\tau e^{-\lambda y} dy \geq 0 \\ 1 - e^{-\lambda f(x)} &\leq \lambda f(x) \quad \forall x/f(x) \geq 0 \end{aligned} \quad (6.1.31)$$

On peut donc majorer l'intégrale Δ_1 en utilisant (6.1.31) dans (6.1.30)

$$\Delta_1 \leq \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int_0^a e^{-\lambda x^2} \lambda f(x) dx \leq \frac{\lambda^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \left(\int_0^\infty e^{-\lambda x^2} dt \right) \max_{0 \leq x \leq a} f(x) \quad (6.1.32)$$

Mais on avait choisi $f(x) = o(x^2)$ donc il existe une fonction η telle que $\max_{0 \leq x \leq a} f(x) = a^2 \eta(a)$ avec $\eta(a) = o(1), a \rightarrow 0$.

Au final

$$\Delta_1 \leq \lambda a^2 \eta(a) \quad (6.1.33)$$

Majorons l'intégrale Δ_2 . On retire la contribution négative $-e^{\lambda f(x)}$, notre majoration n'en sera que plus vraie.

$$\begin{aligned} \Delta_2 &\leq \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int_a^\infty e^{-\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int_a^\infty \left(\frac{-1}{2\lambda x} \right) \frac{d}{dx} e^{-\lambda x^2} dx \\ &= -\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \left[\frac{1}{2\lambda} \frac{e^{-\lambda x^2}}{x} \right]_a^\infty - \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int_a^\infty e^{-\lambda x^2} \frac{1}{2\lambda x^2} dx \\ \Delta_2 &\leq \frac{e^{-\lambda a^2}}{\sqrt{4\pi\lambda a^2}} \end{aligned} \quad (6.1.34)$$

N'oublions pas que l'on cherche à démontrer que $F(\lambda) - 1 = o(1), \lambda \rightarrow +\infty$. On souhaite donc que $\Delta_1 + \Delta_2 \rightarrow 0$ quand $\lambda \rightarrow +\infty$. En regardant l'argument dans l'exponentielle de (6.1.34), on a $\lambda a^2 \rightarrow +\infty$, il faut donc que $a \rightarrow 0$ plus lentement que $1/\sqrt{\lambda}$ pour avoir $\Delta_2 \leq 0$. En même temps, d'après (6.1.33) il faut $\lambda a^2 \eta(a) \rightarrow 0$. On avait $f(x) = o(x^2)$ et $\eta(a) = o(a)$, si $f(x) = x^4$ alors $\eta(a) \propto a^2$. Il faut donc choisir $a = \log(\lambda)/\sqrt{\lambda}$.

6.1.4 Retour à l'approximation BKW généralisée

On reprend l'expression (6.1.27) avec

$$U_{j_1, j_2, j_3} := -\varepsilon \sum_k \frac{\partial^3 V(\bar{x}_k)}{\partial x^3} (\xi_{j_1})_k (\xi_{j_2})_k (\xi_{j_3})_k \quad (6.1.35)$$

Cette fois nous avons N intégrales de la forme $F(\lambda) = 2\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int_0^\infty e^{-\lambda(x^2+f(x))} dx$ (cf (6.1.28)). Il faut donc montrer que la somme des erreurs individuelles dans l'approximation de $F(\lambda)$ tend vers zéro lorsque μ tend vers zéro.

Nous considérons l'intégrale (6.1.27) comme une intégrale de Wiener, le terme quadratique en c_i sera donc la mesure pour les termes $\delta^m S, m \geq 3$. Comme dans l'aparté ci-dessus, nous voulons montrer que $F(\lambda) \rightarrow 1$ pour $\mu \rightarrow 0$. Mais maintenant $F(\lambda)$ est de la forme suivante, en tenant compte de la normalisation

$$F(\mu) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dc_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dc_N \exp\left(-\frac{1}{\mu} \sum l_i c_i^2 + \frac{1}{6\mu} \sum_{j_1, j_2, j_3} U_{j_1, j_2, j_3} c_{j_1} c_{j_2} c_{j_3} + \dots\right)}{\int_{-\infty}^{\infty} dc_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dc_N \exp\left(-\frac{1}{\mu} \sum l_i c_i^2\right)} \quad (6.1.36)$$

On découpe à nouveau chaque intégrale entre $[-\infty, a_i]$ et $[a_i, +\infty]$. Il faut donc choisir judicieusement les a_i . On peut généraliser l'équation (6.1.34)

$$\Delta_2 \leq \sum_i \frac{e^{-l_i a_i^2 / \mu}}{\sqrt{l_i a_i^2 / \mu}} \quad (6.1.37)$$

Pour assurer la convergence de Δ_2 vers zéro, il faut que les a_i tendent vers zéro plus lentement que $\sqrt{\mu/l_i}$.

Maintenant il faut montrer que le terme quadratique en c_i domine les termes $\delta^m S, m \geq 3$. On généralise (6.1.33) par

$$\Delta_1 \leq \max_{|c_i| \leq a_i} \frac{1}{\mu} \sum c_i c_j c_k U_{ijk} \leq \frac{1}{\mu} \sum a_i a_j a_k |U_{ijk}| \quad (6.1.38)$$

Les U sont les coefficients de Fourier de la fonction $\frac{\partial^3 V(\bar{x})}{\partial x^3}$ prise le long de la trajectoire classique \bar{x} et non sur un mouvement de type brownien, les U restent donc bornés. En utilisant le lemme de Riemann-Lebesgue on peut majorer $|U_{ijk}| \leq \frac{\kappa}{jkl}$ d'où

$$\Delta_1 \leq \frac{\kappa}{\mu} \left(\sum_j \frac{a_j}{j} \right)^3 \quad (6.1.39)$$

Cherchons les a_i tels que (6.1.39) et (6.1.37) soient respectés. Pour cela on définit $a_i = b_i \sqrt{\mu/l_i}$. L'erreur sur $F(\mu)$ peut donc être majorée par

$$\Delta_1 + \Delta_2 \leq \sum_j \frac{e^{-b_j^2}}{b_j} + \kappa \sqrt{\mu} \left(\sum_j \frac{b_j}{j \sqrt{l_j}} \right)^3 \quad (6.1.40)$$

On choisira donc les b_i tels que $b_i = \sqrt{\log \frac{i}{\mu}}$ et au final les a_i qui permettent de négliger les termes $\delta^m S, m \geq 3$ dans l'exponentielle sont

$$a_i = \sqrt{\frac{\mu}{l_i} \log \frac{i}{\mu}} \quad (6.1.41)$$

6.1.5 Règle de Bohr-Sommerfeld

D'après le graphe de la fonction d'Airy, il y a un nombre entier d'oscillations entre les 2 points de rebroussement (points auxquels la vitesse change de sens, et donc par continuité l'impulsion devient nulle, ce qui engendre une divergence dans l'approximation BKW)

— Sans tenir compte du raccord avec la fonction d’Airy : Si on veut que la fonction d’onde ψ s’annule en a ou b , il faut

$$\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dq\right) = 0 \rightarrow \frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dq = n\pi \quad n \in \mathbb{Z} \quad (6.1.42)$$

Si on calcul l’intégrale sur un cycle, il faut tenir compte de l’aller/retour, or p change de signe, et q aussi, la quantité $\int_a^b p\,dq$ est donc doublée. En tenant compte que $\hbar = h/2\pi$ on obtient

$$\oint_a^b p\,dq = nh \quad n \in \mathbb{Z} \quad (6.1.43)$$

— En tenant compte du raccord avec la fonction d’Airy : On a montré qu’à chaque point de rebroussement, il existe un déphasage de $\frac{\pi}{4}$. Dans le cas présent nous avons deux points de rebroussement, un à chaque extrémité du potentiel.

$$\frac{1}{|x|^{1/4}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dq - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{4}\right) = 0 \rightarrow \frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dq = n\pi + \frac{\pi}{2} \quad n \in \mathbb{N} \quad (6.1.44)$$

$$\boxed{\oint_a^b p\,dq = (n + \frac{1}{2})h \quad n \in \mathbb{N}} \quad (6.1.45)$$

Il faut noter que grâce à la connexion avec la fonction de Airy, on retrouve l’énergie de point zéro, qui contient toutes les fluctuations quantiques.

Application à l’oscillateur harmonique

L’équation de Schrödinger dans ce cas là est

$$-\frac{\hbar^2}{2}\psi''(x) - \frac{1}{2}\omega^2 x^2 \psi = E\psi \quad (6.1.46)$$

Calculons le nombre d’oscillations

$$\int p\,dq = \int \sqrt{2(E - V(x))}\,dx = \int \sqrt{2E - \omega^2 x^2}\,dx \quad (6.1.47)$$

Posons $\frac{x\omega}{\sqrt{2E}} := \sin\theta$

$$\int p\,dq = \frac{2E}{\omega}(\theta + \frac{1}{2}\sin(2\theta)) \quad (6.1.48)$$

On cherche à évaluer cette expression pour un cycle. On cherche x tel que $\sqrt{2E - \omega^2 x^2} \geq 0$ soit $-\frac{\sqrt{2E}}{\omega} \leq x \leq \frac{\sqrt{2E}}{\omega}$ donc $\theta \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$. Avec le même argument que précédemment, on double l’action réduite pour un cycle.

$$\oint_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} p\,dq = 2 \int p\,dq = 2 \frac{2E}{\omega}(\frac{\pi}{2} + 0) \quad (6.1.49)$$

Or $\oint_a^b p\,dq = (n + \frac{1}{2})h$ on en déduit en utilisant (6.1.45)

$$\boxed{E = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})} \quad n \in \mathbb{N} \quad (6.1.50)$$

Ce fameux terme $\frac{1}{2}$ est comme nous le verrons plus tard, via l’intégrale de chemin, lié aux indices de Maslov. Dans le fondamental, il n’y a pas d’oscillation entre les 2 raccords de la fonction d’Airy et on retrouve une fonction d’onde de type gaussien.

Il est à noter que ce type de démarche, via les points de rebroussement, peut être exploitée pour les pendules. En effet à basse énergie, il existe 2 points tournants alors qu’à haute énergie il n’en existe pas.

6.2 Niveaux d'Énergie par l'intégrale de chemin

Toute notre démarche est inspirée par un article de R.Dashen, B.Hasslacher et A.Neuveu [6]. Nous allons passer par les pôles de la résolvante, déterminer sa trace, il nous faudra donc sommer sur tous les chemins qui forment des boucles fermées, et exprimer cette quantité en fonction de l'intégrale de chemin.

$$G(E) = \text{tr}\left(\frac{1}{H-E}\right) = \sum_n \frac{1}{E_n - E} \quad (6.2.1)$$

En utilisant l'astuce classique

$$\frac{1}{t} = \int_0^\infty e^{-xt} dx \quad (6.2.2)$$

On écrit $G(E)$ sous la forme suivante, et on applique le fait que la trace est une opération linéaire

$$G(E) = \frac{i}{\hbar} \text{tr} \int_0^\infty dT e^{\frac{i}{\hbar}(E-H)T} = \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}ET} \int_0^\infty dT \text{tr}(e^{-\frac{i}{\hbar}HT}) \quad (6.2.3)$$

Par définition de la trace

$$\text{tr}(e^{-\frac{i}{\hbar}HT}) := \int dx \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar}HT} | x \rangle \quad (6.2.4)$$

On constate que sous cette forme on vient d'écrire l'amplitude de probabilité de passer d'une position initiale x et d'y retourner, on somme donc des boucles fermées, ou plus mathématiquement des chemins périodiques ayant pour période T . Nous verrons que c'est la périodicité des chemins qui implique la discrétisation des niveaux d'énergie et les états liés.

Nous avons déjà montré que l'on peut encore réécrire le membre de droite de (6.2.4) via la formule de Feynman

$$\text{tr}(e^{-\frac{i}{\hbar}HT}) = \int Dx(\tau) e^{\frac{iS[x]}{\hbar}} \quad (6.2.5)$$

Dans notre problème, on considère un lagrangien, et donc une action de la forme

$$S = \int_0^T \frac{1}{2} \dot{x}^2 - V(x) d\tau \quad (6.2.6)$$

On utilise la méthode des variations (et donc de la phase stationnaire) qui consiste à choisir une variation quelconque autour de la solution classique, et développer le potentiel au second ordre autour de cette solution classique. On se rappelle que le terme linéaire en la variation sera amené à disparaître, et que les conditions aux limites portant sur l'intégrale sont simples. Au final

$$\text{tr}(e^{-\frac{i}{\hbar}HT}) = e^{\frac{iS_{cl}(T)}{\hbar}} \int Dx(\tau) dx_{cl}(0) e^{\frac{i\tilde{S}[x]}{\hbar}} \quad (6.2.7)$$

Il est à noter que la mesure $dx_{cl}(0)$, ou facteur d'ancrage initial, représente la liberté de commencer le développement n'importe où le long de la trajectoire classique.

On rappelle l'expression de $\tilde{S}[x]$

$$\tilde{S}[x] = \int_0^T \frac{1}{2} \dot{x}^2 - \frac{1}{2} x^2 V''(x_{cl}(\tau)) d\tau \quad (6.2.8)$$

Et les conditions limites périodiques suivantes $x(0) = 0$ et $x(T) = 0$.

Nous allons évaluer l'intégrale fonctionnelle (6.2.7) par une méthode introduite par Gel'Fand et Yaglom (ref. [7]) aussi appelée "shifting method". On introduit le changement de fonction $x(\tau)$ tel que

$$y(\tau) := x(\tau) - \int_0^\tau \frac{\dot{N}(\mu)}{N(\mu)} x(\mu) d\mu \quad (6.2.9)$$

Il est à noter que ce "mapping" est triangulaire, comme nous le verrons plus loin. De plus la fonction N est définie telle que $\dot{N} := -V''N$.

Montrons que l'inverse de ce mapping est de la forme

$$x(\tau) = y(\tau) + N(\tau) \int_0^\tau \frac{\dot{N}(\mu)}{N^2(\mu)} y(\mu) d\mu \quad (6.2.10)$$

Nous allons montrer l'égalité des dérivées. Commençons par dériver (6.2.9) par rapport à τ

$$\dot{y} = \dot{x} - \frac{\dot{N}}{N} x \quad (6.2.11)$$

De même avec (6.2.10)

$$\dot{x} = \dot{y} + \dot{N} \int \frac{\dot{N}}{N^2} y d\mu + \frac{\dot{N}}{N} y \quad (6.2.12)$$

Injectons (6.2.10) (l'expression de $x(\tau)$) dans (6.2.11), après quelques simplifications élémentaires, on retrouve bien l'équation (6.2.12). Les expressions dérivées sont donc bien égales.

Notre but maintenant est de faire disparaître le potentiel $V''(x_{cl})$ de $\tilde{S}[x]$. On se souvient que $\tilde{N} := -V''N$. De (6.2.11) on déduit

$$\frac{1}{2}\dot{y}^2 = \frac{1}{2}\dot{x}^2 - \frac{\dot{N}}{N} x \dot{x} + \frac{1}{2} \frac{\dot{N}^2}{N^2} x^2 \quad (6.2.13)$$

On remarque dans cette expression que l'on pourrait réécrire $\frac{\dot{N}}{N}$ puisque

$$\frac{d}{d\tau} \left(\frac{\dot{N}}{N} \right) = \frac{\ddot{N}}{N} - \frac{\dot{N}^2}{N^2}$$

Remplaçons dans (6.2.13)

$$\frac{1}{2}\dot{y}^2 = \frac{1}{2}\dot{x}^2 - \frac{\dot{N}}{N} \frac{d}{d\tau} \left(\frac{1}{2}x^2 \right) + \frac{1}{2}x^2 \left(\frac{\ddot{N}}{N} - \frac{d}{d\tau} \left(\frac{\dot{N}}{N} \right) \right) \quad (6.2.14)$$

Ou encore en faisant apparaître le potentiel

$$\frac{1}{2}\dot{y}^2 = \frac{1}{2}\dot{x}^2 - \frac{\dot{N}}{N} \frac{d}{d\tau} \left(\frac{1}{2}x^2 \right) + \frac{1}{2}x^2 \left(-V'' - \frac{d}{d\tau} \left(\frac{\dot{N}}{N} \right) \right) \quad (6.2.15)$$

On en déduit, en reconnaissant la dérivée totale par rapport à τ à savoir $\left(-\frac{\dot{N}}{N} \frac{d}{d\tau} \left(\frac{1}{2}x^2 \right) - \frac{1}{2}x^2 \frac{d}{d\tau} \left(\frac{\dot{N}}{N} \right) \right)$, et en utilisant les conditions limites périodiques

$$\int_0^T \frac{1}{2}\dot{y}^2 d\tau = \int_0^T \left[\frac{1}{2}\dot{x}^2 - \frac{1}{2}V''x^2 \right] d\tau - \frac{1}{2} \left[\frac{\dot{N}}{N}x^2 \right]_0^T = \int_0^T \left[\frac{1}{2}\dot{x}^2 - \frac{1}{2}V''x^2 \right] d\tau \quad (6.2.16)$$

Nous allons pouvoir exprimer $\tilde{S}[x]$ en fonction de $\int_0^T \frac{1}{2}\dot{y}^2 d\tau$ dans (6.2.8).

$$\tilde{S}[x] = \int_0^T \frac{1}{2}\dot{y}^2 d\tau \quad (6.2.17)$$

Mais pour écrire $tr(e^{\frac{-i}{\hbar}HT})$ nous devons rajouter cette fois ci des contraintes sur la fonction $y(\tau)$, contraintes que nous exprimons à l'aide d'une distribution Delta de Dirac (correctement normalisée par $2\pi\hbar$), via un paramètre α , et en intégrant sur α . En utilisant (6.2.7)

$$\begin{aligned} tr(e^{\frac{-i}{\hbar}HT}) &= e^{\frac{iS_{cl}(T)}{\hbar}} \int_{y(0)=0} \int_{y(T)=0} Dy(\tau) \frac{d\alpha}{2\pi\hbar} dx_{cl}(0) \left| \frac{Dx}{Dy} \right| \times \\ &\times \exp \left(\frac{i}{\hbar} \left(\int_0^T \frac{1}{2}\dot{y}^2 + \alpha \left(y(T) + N(T) \int_0^T \frac{\dot{N}(\tau)}{N^2(\tau)} y(\tau) d\tau \right) \right) \right) \end{aligned} \quad (6.2.18)$$

Maintenant, trouvons le jacobien du changement de fonction $\left| \frac{Dx}{Dy} \right|$. Pour cela discrétisons la matrice représentant le mapping $x() \leftrightarrow y()$

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ x(\tau - \varepsilon) \\ x(\tau) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ & 1 + N(\tau - \varepsilon) \frac{\dot{N}}{N^2}(\tau - 2\varepsilon) & & \\ & & 1 + N(\tau) \frac{\dot{N}}{N^2}(\tau - \varepsilon) & \\ & & & \ddots \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ y(\tau - \varepsilon) \\ y(\tau) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (6.2.19)$$

On remarque que $N(\tau) \frac{\dot{N}}{N^2} y(\tau) = \frac{\dot{N}}{N} y(\tau)$.

Utilisons l'intégrale trapézoïdale pour de meilleurs résultats, cette démarche revient à associer aux extrémités de l'intervalle un coefficient $\frac{1}{2}$ et aucun aux termes intermédiaires puisqu'ils seront comptés deux fois.

D'où le terme diagonal suivant

$$1 + \frac{1}{2} \frac{\dot{N}}{N} \varepsilon \quad (6.2.20)$$

Or nous cherchons le déterminant, soit le produit des valeurs propres.

$$\begin{aligned} \det &= \prod \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\dot{N}}{N} \varepsilon \right) \\ \log \left(\prod \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\dot{N}}{N} \varepsilon \right) \right) &= \sum_{\varepsilon} \frac{1}{2} \frac{\dot{N}}{N} \varepsilon \\ &= \frac{1}{2} \int_0^T \frac{\dot{N}}{N} dt = \frac{1}{2} [\log N]_0^T \end{aligned}$$

En prenant l'exponentielle

$$\left| \frac{Dx}{Dy} \right| = \sqrt{\frac{N(T)}{N(0)}} \quad (6.2.21)$$

Dans l'équation (6.2.18) on peut exprimer l'intégrale fonctionnelle uniquement en fonction de $\dot{y}(\tau)$, le but étant de se ramener à une intégrale gaussienne translatée. Pour cela, effectuons une intégration par partie sur le terme suivant

$$N(T) \int_0^T \frac{\dot{N}(\tau)}{N^2(\tau)} y(\tau) d\tau = N(T) \left(\left[-\frac{1}{N} y \right]_0^T + \int_0^T \frac{1}{N} \dot{y} d\tau \right) = -y(T) + N(T) \int_0^T \frac{1}{N} \dot{y} d\tau \quad (6.2.22)$$

En utilisant la condition au bord pour sur $y(\tau)$, à savoir $y(0) = 0$ on en déduit que

$$\alpha \left(y(T) + \int_0^T \frac{\dot{N}(\tau)}{N^2(\tau)} y(\tau) d\tau \right) = \alpha N(T) \int_0^T \frac{1}{N} \dot{y} d\tau \quad (6.2.23)$$

On peut donc réécrire (6.2.18) comme cela

$$tr(e^{-\frac{i}{\hbar} HT}) = e^{\frac{i S_{cl}(T)}{\hbar}} \int_{y(0)=0} Dy(\tau) \frac{d\alpha}{2\pi\hbar} dx_{cl}(0) \left| \frac{Dx}{Dy} \right| \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\int_0^T \frac{1}{2} \dot{y}^2 + \alpha N(T) \int_0^T \frac{1}{N} \dot{y} d\tau \right) \right] \quad (6.2.24)$$

Maintenant complétons le carré

$$\int_0^T \frac{1}{2} \dot{y}^2 + \alpha N(T) \int_0^T \frac{1}{N} \dot{y} d\tau = \frac{1}{2} \int_0^T d\tau \left(\dot{y}^2 + 2\alpha \frac{N(T)}{N} \right)^2 - \frac{1}{2} \alpha^2 \int_0^T d\tau \left(\frac{N(T)}{N} \right)^2 \quad (6.2.25)$$

On reconnait une intégrale gaussienne sur y et sur α .

$$\exp \frac{i}{\hbar} \left(\int_0^T \frac{1}{2} \dot{y}^2 + \alpha N(T) \int_0^T \frac{1}{N} \dot{y} d\tau \right) = \exp \left[\frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} \int_0^T d\tau \left(\dot{y}^2 + 2\alpha \frac{N(T)}{N} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} \alpha^2 \int_0^T d\tau \left(\frac{N(T)}{N} \right)^2 \right] \quad (6.2.26)$$

On commence par intégrer sur les $y(\tau)$, en étendant la borne supérieur à l'infini. D'où le facteur $\sqrt{\frac{2\hbar\pi}{i}}$. On intègre ensuite sur les α

$$\begin{aligned}
& \int d\alpha Dy(\tau) \exp \left[\frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} \int_0^T d\tau \left(\dot{y}^2 + 2\alpha \frac{N(T)}{N} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} \alpha^2 \int_0^T d\tau \left(\frac{N(T)}{N} \right)^2 \right] \\
&= \sqrt{\frac{1}{2i\pi\hbar T}} \int Dy e^{\frac{-i}{2\hbar T} y^2(T)} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{i \int_0^T d\tau \left(\frac{N(T)}{N} \right)^2}} \\
&= \sqrt{\frac{1}{2i\pi\hbar T}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar T}{-i}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{i \int_0^T d\tau \left(\frac{N(T)}{N} \right)^2}} \\
&= \sqrt{\frac{2i\pi\hbar}{\int_0^T d\tau \left(\frac{N(T)}{N} \right)^2}}
\end{aligned}$$

Ecrivons $tr(e^{\frac{-i}{\hbar} HT})$ en tenant compte du calcul précédent

$$tr(e^{\frac{-i}{\hbar} HT}) = \int dx_{cl}(0) e^{\frac{iS_{cl}(T)}{\hbar}} \frac{1}{2\pi\hbar} \left| \frac{Dx}{Dy} \right| \sqrt{\frac{2i\pi\hbar}{\int_0^T d\tau \left(\frac{N(T)}{N} \right)^2}}$$

Or nous avons montré précédemment que $\left| \frac{Dx}{Dy} \right| = \sqrt{\frac{N(T)}{N(0)}}$ d'où

$$tr(e^{\frac{-i}{\hbar} HT}) = \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar}} e^{\frac{iS_{cl}(T)}{\hbar}} \int dx_{cl}(0) \sqrt{\frac{N(T)}{N(0)}} \left(\int_0^T d\tau \frac{N(T)}{N} \right)^{-1} \quad (6.2.27)$$

Il nous faut trouver quelles sont les fonctions $N(\tau)$ acceptables. Utilisons (6.2.6) pour déterminer les équations du mouvement classique. On trouve via les équations d'Euler Lagrange

$$\ddot{x} = -V'(x) \quad (6.2.28)$$

Faisons apparaître $N(\tau)$ en dérivant une nouvelle fois,

$$\ddot{x} = -V''(x)\dot{x} \quad (6.2.29)$$

On rappelle que $\ddot{N} = -V''N$, et on choisit $N(\tau) = \dot{x}(\tau)$

Avec la méthode de la variation de la constante, on trouve une solution particulière aux équations du mouvement. Posons $N(\tau) = K\dot{x}(\tau)$, $K \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned}
\ddot{K}\dot{x} + 2\dot{K}\ddot{x} + K\ddot{\dot{x}} &= -V''K\dot{x} \\
\frac{\ddot{K}}{\dot{K}} &= -2\frac{\ddot{x}}{\dot{x}} \\
\dot{K} &= \frac{\text{cste}}{\dot{x}^2} \\
K &= \int \frac{\text{cste}}{\dot{x}^2} d\tau
\end{aligned}$$

Finalement, on définit $N(\tau)$ ainsi

$$N(\tau) = \left(\alpha \int \frac{1}{\dot{x}^2} d\tau + \beta \right) \dot{x} \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R} \quad (6.2.30)$$

On insiste encore sur le fait que $x(\tau)$ représente la trajectoire classique. De plus α et β doivent être choisis judicieusement pour assurer la convergence de l'intégrale fonctionnelle (6.2.18).

On souhaite réécrire ce terme $\sqrt{\frac{N(T)}{N(0)}} \left(\int_0^T d\tau \frac{N(T)}{N} \right)^{-1}$.

6.2.1 Aparté sur le champs de Jacobi

Dans ce problème on se place au point initial, avec une vitesse initiale donnée. On s'intéresse aux différentes trajectoires classiques possibles.

Soit $x(\tau)$ une solution classique telle que $x(0) = a$ et $\dot{x}(0) = p$.
On définit le champ de Jacobi

$$J := \frac{\partial x(p, t)}{\partial p} \quad (6.2.31)$$

J représente l'évolution des trajectoires en fonction de l'impulsion initiale.

En différenciant les équations d'Euler-Lagrange par rapport à p il vient

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \frac{\partial x}{\partial p} + \frac{\partial}{\partial \dot{x}} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \frac{\partial \dot{x}}{\partial p} \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial L}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial p} + \frac{\partial}{\partial \dot{x}} \frac{\partial L}{\partial x} \frac{\partial \dot{x}}{\partial p} \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} J + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{J} \right) &= \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} J + \frac{\partial}{\partial \dot{x}} \frac{\partial L}{\partial x} \dot{J} \end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{J} \right) + \left(\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \right) J = 0} \quad (6.2.32)$$

On retombe sur une équation de Sturm-Liouville.

On prend comme conditions initiales $x(p, 0) = 0$ et $J(p, 0) = 0$.
On sait que $p = m\dot{x}$ et donc $\frac{\partial \dot{x}}{\partial p} = \frac{1}{m}$ et donc $\dot{J}(p, 0) \neq 0$. On remarque que si $J(p, t) = 0$ on retrouve un point conjugué, ou point focal.

Si on fait maintenant varier les extrémités.

On peut montrer que

$$p(0) = - \left| \frac{\partial S}{\partial a} \right|_{b, T} \quad (6.2.33)$$

et donc

$$\boxed{\frac{\partial p}{\partial b} = - \frac{\partial^2 S}{\partial a \partial b} = \frac{1}{J}} \quad (6.2.34)$$

6.2.2 Retour aux niveaux d'Énergie par l'intégrale de chemin

Revenons à notre réécriture de $\sqrt{\frac{N(T)}{N(0)}} \left(\int_0^T d\tau \frac{N(T)}{N} \right)^{-1}$. Il serait souhaitable de se débarrasser des fonctions $N(\tau)$, idéalement on pourrait les remplacer par des quantités comme l'action classique, les variations aux extrémités etc...

Nous sommes donc tenté de faire un lien avec (6.2.34). Mais nous allons nous intéressé à la quantité $\frac{1}{N(T)N(0)} \int_0^T d\tau \frac{N(T)}{N}$.
Pour cela on pose

$$J := N(\tau)N(0) \int_0^\tau \frac{1}{N^2} d\mu \quad (6.2.35)$$

Vérifions que ce J est bien un champ de Jacobi, et donc qu'il vérifie l'équation (6.2.32). On a montré que $N(\tau)$ est solution de $\ddot{N} = -V''N$ qui est aussi une équation de Jacobi.

$$\begin{aligned} \dot{J} &= \dot{N}(\tau)N(0) \int_0^\tau \frac{1}{N^2} d\mu + \frac{N(0)}{N(\tau)} \\ \ddot{J} &= \ddot{N}(\tau)N(0) \int_0^\tau \frac{1}{N^2} d\mu + \dot{N} \frac{N(0)}{N^2} - \dot{N} \frac{N(0)}{N^2} \\ \ddot{J} &= -V''N(0)N(\tau) \int_0^\tau \frac{1}{N^2} d\mu \\ \ddot{J} &= -V''J \end{aligned}$$

On constate que J est solution de l'équation de Jacobi. Et en posant $\tau = 0$ dans les deux premières lignes du développement on obtient les conditions initiales suivantes sur J

$$J(0) = 0 \quad \text{et} \quad \dot{J}(0) = 1 \quad (6.2.36)$$

En utilisant l'équation (6.2.34), on peut relier J aux variations de l'action en fonction des extrémités du chemin. En adaptant les notations : $a \leftrightarrow x(0)$ et $b \leftrightarrow x(T)$ on a

$$\frac{\partial^2 S[x(\tau)]}{\partial x(0)\partial x(T)} = \left(N(T)N(0) \int_0^T \frac{1}{N^2} d\tau \right)^{-1} \quad (6.2.37)$$

On veut démontrer la relation

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x(0)\partial x(T)} = - \frac{\partial^2 W}{\partial E \partial x(0)} \frac{\partial^2 W}{\partial E \partial x(T)} \frac{1}{\frac{\partial^2 W}{\partial E^2}} \quad (6.2.38)$$

pour simplifier l'expression du propagateur donnée dans la section précédente. Afin d'alléger les notations, nous écrirons

$$x(0) = x \quad \text{et} \quad x(T) = y. \quad (6.2.39)$$

On remarque tout d'abord que pour une particule d'énergie classique

$$E = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + V(x), \quad (6.2.40)$$

on peut faire apparaître une expression utile, l'impulsion classique,

$$m\dot{x} = \sqrt{2m(E - V(x))}. \quad (6.2.41)$$

On fait ensuite apparaître l'énergie E dans l'expression de l'action classique, pour un mouvement de durée T

$$S = \int_0^T \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x) \right) dt = \int_0^T \left(m\dot{x} - \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + V(x) \right) \right) dt = \int_0^T m\dot{x}^2 dt - ET, \quad (6.2.42)$$

qui peut se réécrire, avec $\dot{x} = \frac{dx}{dt}$, sous la forme

$$S = \int_x^y m\dot{q} dq - ET = \int_x^y \sqrt{2m(E - V(q))} dq - ET. \quad (6.2.43)$$

On pose

$$W := \int_x^y \sqrt{2m(E - V(q))} dq, \quad (6.2.44)$$

qui est une fonction obéissant aux lois de mécanique classique. Il est important de noter de quelles variables dépendent les fonctions ci-dessus. Nous avons les fonctions $S = S(x, y, T)$ et $W = W(x, y, E)$, liées par la relation

$$S = W - ET, \quad (6.2.45)$$

qui mettent ici une relation de Legendre, que nous développerons plus loin. Calculons d'abord

$$\frac{\partial W}{\partial E} = \frac{\partial}{\partial E} \int_x^y \sqrt{2m(E - V(q))} dq = \int_x^y \frac{m}{\sqrt{2m(E - V(q))}} dq = \int_x^y \frac{dq}{\dot{q}}, \quad (6.2.46)$$

qui donne, en tenant à nouveau compte de l'expression $\dot{x} = \frac{dx}{dt}$, la relation

$$\frac{\partial W}{\partial E} = \int_0^T dt = T. \quad (6.2.47)$$

On vérifie aussi, avec (6.2.45) que

$$\frac{\partial S}{\partial T} = -E. \quad (6.2.48)$$

Les dérivées totales des deux fonctions $S(x, y, T)$ et $W(x, y, E)$ s'écrivent alors

$$dS = \frac{\partial S}{\partial x} dx + \frac{\partial S}{\partial y} dy - E dT \quad (6.2.49)$$

et

$$dW = \frac{\partial W}{\partial x} dx + \frac{\partial W}{\partial y} dy + T dE. \quad (6.2.50)$$

Pour calculer $\frac{\partial^2 S}{\partial x \partial y}$, nous commençons par exprimer

$$\frac{\partial S}{\partial x} = \frac{\partial W}{\partial x} + \frac{\partial W}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial x} - T \frac{\partial E}{\partial x} = \frac{\partial W}{\partial x}, \quad (6.2.51)$$

grâce à l'équation (6.2.47). Notons que nous avons aussi, par un calcul identique dans lequel on remplace x par y ,

$$\frac{\partial S}{\partial y} = \frac{\partial W}{\partial y}. \quad (6.2.52)$$

On dérive alors par rapport à y l'expression de $\frac{\partial S}{\partial x}$, en faisant attention aux variables dont dépend W ,

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right) \frac{\partial E}{\partial y} = \frac{\partial^2 W}{\partial E \partial x} \frac{\partial E}{\partial y}; \quad (6.2.53)$$

le terme croisé $\frac{\partial^2 W}{\partial x \partial y}$ est nul d'après la définition (6.2.44) de W . On calcule ensuite le terme $\frac{\partial E}{\partial y}$ en tenant compte de l'équation (6.2.48),

$$\frac{\partial E}{\partial y} = -\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) - \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) \frac{\partial T}{\partial y} = -\frac{\partial^2 S}{\partial T \partial y}. \quad (6.2.54)$$

Puis en utilisant l'équation (6.2.52), on trouve

$$\frac{\partial^2 S}{\partial T \partial y} = \frac{\partial^2 W}{\partial E \partial y} \frac{\partial E}{\partial T}. \quad (6.2.55)$$

On note par ailleurs la relation

$$\frac{\partial T}{\partial E} = \frac{\partial^2 W}{\partial E^2}, \quad (6.2.56)$$

dont les termes de part et d'autre du signe égal sont négatifs.

On obtient bien, finalement, la relation

$$\boxed{\frac{\partial^2 S}{\partial x \partial y} = -\frac{\partial^2 W}{\partial E \partial x} \frac{\partial^2 W}{\partial E \partial y} \frac{\partial E}{\partial T} = -\frac{\partial^2 W}{\partial E \partial x} \frac{\partial^2 W}{\partial E \partial y} \frac{1}{\frac{\partial^2 W}{\partial E^2}}}. \quad (6.2.57)$$

Pour poursuivre le calcul, nous utilisons l'équation (6.2.46), ce qui donne

$$\frac{\partial^2 W}{\partial E \partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \int_x^y \frac{dq}{\dot{q}} = \frac{1}{\dot{y}} = \frac{1}{\dot{x}(T)} \quad (6.2.58)$$

et

$$\frac{\partial^2 W}{\partial E \partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \int_x^y \frac{dq}{\dot{q}} = -\frac{1}{\dot{x}} = -\frac{1}{\dot{x}(0)}. \quad (6.2.59)$$

Ainsi, on peut reprendre le calcul du terme $\text{tr} e^{-\frac{i}{\hbar} HT}$. Nous notons désormais E_{cl} , S_{cl} , W_{cl} et T_{cl} les fonctions classiques précédentes, pour les différencier des fonctions « quantiques » respectivement associées, notées E , S , W et T . On utilise les nouvelles expressions, en faisant attention à l'apparition d'une phase π ,

$$\text{tr} e^{-\frac{i}{\hbar} HT} = \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}} \int dx_{cl}(0) \sqrt{\frac{N(T)}{N(0)} \frac{1}{\int_0^T \frac{N^2(T)}{N^2(t)} dt}} \quad (6.2.60)$$

$$= \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}} \int dx_{cl}(0) \sqrt{\frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial x(0) \partial x(T)}} \quad (6.2.61)$$

$$= \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}} \int dx_{cl}(0) \sqrt{-\frac{1}{\dot{x}(0)} \frac{1}{\dot{x}(T)} \left(-\left| \frac{\partial E_{cl}}{\partial T} \right| \right)} \quad (6.2.62)$$

$$= \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar}} \sqrt{\left| \frac{\partial E_{cl}}{\partial T} \right|} e^{i\left(\frac{S_{cl}}{\hbar} - \pi\right)} \int \frac{dx_{cl}(0)}{\dot{x}_{cl}(0)} \quad (6.2.63)$$

$$= \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar}} T(E) \sqrt{\left| \frac{\partial E_{cl}}{\partial T} \right|} e^{i\left(\frac{S_{cl}}{\hbar} - \pi\right)}. \quad (6.2.64)$$

On revient ensuite à l'expression du propagateur,

$$G(E) = i \int_0^\infty \frac{dT}{\hbar} \text{tr} e^{\frac{i}{\hbar}(E-H)T} \quad (6.2.65)$$

$$= \sqrt{\frac{-i}{2\pi\hbar}} \frac{T(E)}{\hbar} \sum_{n=1}^\infty \int_0^\infty dT \sqrt{n \left| \frac{\partial E_{cl}}{\partial T} \right|} e^{in \left(\frac{S_{cl} + ET}{\hbar} - \pi \right)}, \quad (6.2.66)$$

dans laquelle on somme sur toutes les valeurs de n , indiquant le nombre de passages par chaque trajectoire classique.

On fait maintenant une approximation dite de *phase stationnaire* (dans l'exponentielle), telle que

$$\boxed{\frac{d}{dT}(S_{cl} + ET) = 0}, \quad (6.2.67)$$

et qui montre l'égalité entre E et E_{cl} ,

$$\frac{dS_{cl}}{dT} = -E_{cl} = -E. \quad (6.2.68)$$

En notant $\delta T = T - T_{cl}$ la différence entre les temps « classique » et « quantique », que l'on considère petit, on peut développer l'expression

$$S + ET = S_{cl} + ET + \frac{dS_{cl}}{dT} \delta T + E \delta T + \frac{1}{2} \frac{d^2 S_{cl}}{dT^2} (\delta T)^2 \quad (6.2.69)$$

$$= S_{cl} + ET + \frac{1}{2} \left| \frac{\partial E}{\partial T} \right| (\delta T)^2 \quad (6.2.70)$$

et on pose $W(E) := S + ET$ pour terminer le calcul,

$$G(E) = \sqrt{\frac{-i}{2\pi\hbar}} \frac{T(E)}{\hbar} \sum_{n=1}^\infty \int_0^\infty dT \sqrt{n \left| \frac{\partial E}{\partial T} \right|} e^{-\frac{in}{2\hbar} \left| \frac{\partial E}{\partial T} \right| (T - T_{cl})^2} e^{in \left(\frac{W(E)}{\hbar} - \pi \right)} \quad (6.2.71)$$

$$= \frac{iT(E)}{\hbar} \sum_{n=1}^\infty e^{in \left(\frac{W(E)}{\hbar} - \pi \right)} = \frac{iT(E)}{\hbar} \left(\frac{1}{1 - e^{i \left(\frac{W(E)}{\hbar} - \pi \right)}} - 1 \right), \quad (6.2.72)$$

ce qui donne

$$\boxed{G(E) = \frac{-iT(E)}{\hbar} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} W(E)}}{1 + e^{\frac{i}{\hbar} W(E)}}}. \quad (6.2.73)$$

On peut vérifier que

$$G(E) = \sum_n \frac{1}{E_n - E}, \quad (6.2.74)$$

dont l'étude des pôles met en évidence les expressions

$$\boxed{W(E) = \left(k + \frac{1}{2} \right) h \equiv \oint p \, dq}. \quad (6.2.75)$$

On retrouve ainsi une expression de type Bohr-Sommerfeld.

Ceci montre bien l'importance des trajectoires périodiques. Dans ce cas, seules ces trajectoires produisent des états liés. Ce constat peut se généraliser pour des systèmes plus compliqués, dont les trajectoires ne sont pas *a priori* périodiques : les niveaux d'énergie ne s'obtiennent qu'en considérant les solutions périodiques du système complet.

6.3 Spin

6.3.1 Etats cohérents

Dans cette section, nous introduisons les opérateurs a et a^\dagger , semblables aux opérateurs d'annihilation et de création de l'oscillateur harmonique, vérifiant la relation de commutation

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (6.3.1)$$

Nous nous plaçons dans un espace de Fock caractérisé par des états $|n\rangle$, où n est un entier positif ou nul. En appliquant l'opérateur d'annihilation sur l'état $|0\rangle$, nous obtenons un état nul,

$$a|0\rangle = 0. \quad (6.3.2)$$

La définition de ces états $|n\rangle$ fait intervenir l'opérateur de création, et s'écrivent

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle. \quad (6.3.3)$$

On peut vérifier qu'ils sont orthonormés, $\langle n|n\rangle = 1$.

On appelle un *état cohérent* $|z\rangle$ un état de la forme

$$|z\rangle = e^{za^\dagger}|0\rangle. \quad (6.3.4)$$

En développant l'exponentielle en série, on peut exprimer un état cohérent $|z\rangle$ en fonction de l'ensemble des états $|n\rangle$ de l'espace de Fock,

$$|z\rangle = e^{za^\dagger}|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} (a^\dagger)^n |0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle, \quad (6.3.5)$$

où un coefficient c_n est associé à l'état $|n\rangle$, dont la norme au carré est

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{2n}}{n!} = e^{z^2}, \quad (6.3.6)$$

ce qui implique que z doit être complexe pour que cette norme puisse converger.

Afin d'étudier l'action des opérateurs a et a^\dagger sur $|z\rangle$, nous notons tout d'abord la relation de commutation

$$[a, (a^\dagger)^n] = a(a^\dagger)^n - (a^\dagger)^n a = n(a^\dagger)^{n-1}. \quad (6.3.7)$$

Nous calculons ainsi l'action de l'opérateur a sur $|z\rangle$,

$$a|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} a(a^\dagger)^n |0\rangle \quad (6.3.8)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} [(a^\dagger)^n a + n(a^\dagger)^{n-1}] |0\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} n \frac{z^n}{n!} (a^\dagger)^{n-1} |0\rangle = z \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^{n-1}}{(n-1)!} (a^\dagger)^{n-1} |0\rangle \quad (6.3.9)$$

$$= z|z\rangle, \quad (6.3.10)$$

et on met ainsi en évidence que $|z\rangle$ est un état propre de l'opérateur a , dont la valeur propre est la valeur de z elle-même. Puis on calcule l'action de l'opérateur a^\dagger sur $|z\rangle$, mais on note tout d'abord la relation $\frac{z^n}{n!} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{z^{n+1}}{(n+1)!} \right)$, qui va intervenir dans la réécriture de $|z\rangle$,

$$|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} (a^\dagger)^n |0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{z^{n+1}}{(n+1)!} \right) (a^\dagger)^n |0\rangle, \quad (6.3.11)$$

ce qui permet d'augmenter d'une puissance le terme $\frac{z^n}{n!}$, donnant $\frac{z^{n+1}}{(n+1)!}$, sans toucher à la puissance de $(a^\dagger)^n$, qui sera directement augmentée par l'action de ce même opérateur a^\dagger sur $|z\rangle$,

$$a^\dagger|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{z^{n+1}}{(n+1)!} \right) (a^\dagger)^{n+1} |0\rangle = \frac{\partial}{\partial z} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} (a^\dagger)^n - 1 \right) |0\rangle \quad (6.3.12)$$

$$= \frac{\partial}{\partial z} |z\rangle. \quad (6.3.13)$$

Nous faisons ainsi apparaître la dérivation par rapport à z .

Maintenant, en considérant deux états cohérents différents $|z\rangle$ et $|z'\rangle$, nous voulons calculer

$$\langle z|z'\rangle = \langle 0|e^{\bar{z}a} e^{za^\dagger}|0\rangle, \quad (6.3.14)$$

mais l'opérateur a^\dagger ne s'applique pas directement sur le *ket* $|0\rangle$ et l'opérateur a ne s'applique pas directement sur le *bra* $\langle 0|$. Nous utilisons alors la relation de Glauber particulière entre deux exponentielles d'opérateurs A et B donnant

$$e^A e^B = e^{[A,B]} e^B e^A, \quad (6.3.15)$$

et comme le commutateur entre a et a^\dagger donne un scalaire (égal à l'unité), nous avons

$$\langle z|z'\rangle = e^{z\bar{z}'} \langle 0|e^{z\bar{z}a^\dagger} e^{\bar{z}a}|0\rangle = e^{z\bar{z}'}. \quad (6.3.16)$$

On s'intéresse maintenant à un état $|\psi\rangle$ de l'espace de Hilbert, se décomposant sur les états $|n\rangle$, tel que

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\psi_n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (6.3.17)$$

On projette cet état $|\psi\rangle$ sur l'état $|z\rangle$, et on trouve

$$\langle z|\psi\rangle = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\bar{z}^n}{\sqrt{n!m!}} \psi_m \underbrace{\langle n|m\rangle}_{\delta_{nm}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{z}^n}{n!} \psi_n = \psi(\bar{z}), \quad (6.3.18)$$

ce qui correspond à la fonction ψ appliquée en \bar{z} . Inversement, en projetant l'état $|z\rangle$ sur l'état $|\psi\rangle$, on trouve

$$\langle \psi|z\rangle = \bar{\psi}(z). \quad (6.3.19)$$

Dans l'intégrale de chemin, l'identité $\sum_{n=0}^{\infty} |x_n\rangle\langle x_n|$ intervient souvent, mais avec des états cohérents, on écrit la *résolution de l'identité* sous la forme

$$\hat{1} := \int \frac{dz d\bar{z}}{2i\pi} e^{-z\bar{z}} |z\rangle\langle z|. \quad (6.3.20)$$

On note la présence du double élément différentiel $dz d\bar{z}$, inhabituel dans une relation de fermeture. On considère alors deux états de même forme

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\psi_n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad \text{et} \quad |\varphi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (6.3.21)$$

dont on veut calculer le produit scalaire $\langle \varphi|\psi\rangle$ en faisant intervenir la relation de fermeture (6.3.20),

$$\langle \varphi|\psi\rangle = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\varphi_n \psi_m}{\sqrt{n!m!}} \langle n|\hat{1}|m\rangle = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\varphi_n \psi_m}{\sqrt{n!m!}} \int \frac{dz d\bar{z}}{2i\pi} e^{-z\bar{z}} \langle n|z\rangle\langle z|m\rangle. \quad (6.3.22)$$

On décompose z sous une forme complexe $x + iy$ où x et y sont les coordonnées cartésiennes, pour exprimer l'élément différentiel $dz d\bar{z}$ en fonction de $dx dy$,

$$dz \wedge d\bar{z} = (dx + i dy) \wedge (dx - i dy) = i dy \wedge dx - i dx \wedge dy = -2i dx \wedge dy. \quad (6.3.23)$$

Compte tenu du terme $e^{-z\bar{z}}$ dans l'expression du produit scalaire $\langle \varphi|\psi\rangle$, ainsi que pour d'autres raisons que nous allons voir, il est très utile de faire intervenir les coordonnées cylindriques, ce qui donne

$$\frac{dz d\bar{z}}{2i\pi} = \frac{dx dy}{\pi} = \frac{\rho d\rho d\theta}{\pi}. \quad (6.3.24)$$

Nous continuons le calcul du produit scalaire $\langle \varphi|\psi\rangle$ en écrivant

$$\langle n|z\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle 0|a^n|z\rangle = \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \langle 0|z\rangle = \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \langle 0|e^{za^\dagger}|0\rangle = \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \quad (6.3.25)$$

et

$$\langle z|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{m!}} \langle z|(a^\dagger)^m|0\rangle = \frac{\bar{z}^m}{\sqrt{m!}} \langle z|0\rangle = \frac{\bar{z}^m}{\sqrt{m!}} \langle 0|e^{\bar{z}a}|0\rangle = \frac{\bar{z}^m}{\sqrt{m!}}, \quad (6.3.26)$$

ce qui donne l'expression

$$\langle \varphi|\psi\rangle = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\varphi_n \psi_m}{\sqrt{n!m!}} \int \frac{dz d\bar{z}}{2i\pi} e^{-z\bar{z}} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \frac{\bar{z}^m}{\sqrt{m!}} = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\varphi_n \psi_m}{n!m!} \int \frac{\rho d\rho d\theta}{\pi} z^n \bar{z}^m e^{-z\bar{z}}, \quad (6.3.27)$$

dans laquelle $z = \rho e^{i\theta}$. Dans les bonnes variables, nous exprimons

$$z^n \bar{z}^m = \rho^{n+m} e^{i(n-m)\theta}, \quad (6.3.28)$$

puis nous notons que $z\bar{z} = |z|^2 = \rho^2$. La partie angulaire dans l'expression de $\langle \varphi|\psi\rangle$ est alors

$$\int_0^{2\pi} d\theta e^{i(n-m)\theta} = 2\pi \delta_{n,m}. \quad (6.3.29)$$

De l'égalité entre n et m et des expressions précédentes, nous écrivons

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_n \psi_n}{(n!)^2} \int_0^{\infty} 2\rho d\rho \rho^{2n} e^{-\rho^2}. \quad (6.3.30)$$

Par commodité, on pose $s = \rho^2$, d'élément différentiel $ds = 2\rho d\rho$, et on trouve enfin

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_n \psi_n}{(n!)^2} \int_0^{\infty} ds s^n e^{-s} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_n \psi_n}{(n!)^2} \Gamma(n+1), \quad (6.3.31)$$

où nous avons fait apparaître la fonction $\Gamma(x) = \int_0^{\infty} dt t^{x-1} e^{-t}$ d'Euler. Pour un entier naturel n , $\Gamma(n+1) = n!$. D'où,

$$\boxed{\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_n \psi_n}{n!}}. \quad (6.3.32)$$

Maintenant, nous considérons un opérateur \hat{A} tel que

$$\hat{A} = \sum_{n,m=0}^{\infty} A_{nm} (a^\dagger)^n a^m. \quad (6.3.33)$$

Sa valeur moyenne prise entre deux états cohérents $|z\rangle$ et $|z'\rangle$ est alors

$$\langle z | \hat{A} | z' \rangle = \sum_{n,m=0}^{\infty} A_{nm} \langle z | (a^\dagger)^n a^m | z' \rangle = \sum_{n,m=0}^{\infty} A_{nm} \bar{z}^n z^m \langle z | z' \rangle \quad (6.3.34)$$

$$= \sum_{n,m=0}^{\infty} A_{nm} \bar{z}^n z^m e^{\bar{z}z'} = A(\bar{z}, z') e^{\bar{z}z'}. \quad (6.3.35)$$

Il peut être intéressant d'introduire l'opérateur $\hat{N} = a^\dagger a$, donnant

$$\langle z | \hat{N} | z' \rangle = \bar{z} z e^{\bar{z}z'}, \quad (6.3.36)$$

mais nous ne développerons pas son utilisation.

6.3.2 Intégrale de chemin pour un spin

Nous rappelons qu'un spin peut être décrit par les nombres quantiques j et m , associés au spin total et à sa composante suivant l'axe Oz , et que l'état associé à ces valeurs est noté $|j, m\rangle$. Les deux opérateurs associés à cette description, J^2 et J_z agissant sur cet état donnent les valeurs propres suivantes (pour $\hbar = 1$),

$$J^2 \rightarrow j(j+1) \quad \text{et} \quad J_z \rightarrow m = -j, -j+1, \dots, j-1, j. \quad (6.3.37)$$

Un état cohérent de spin est décrit par l'état $|z\rangle$, qui s'exprime

$$|z\rangle = e^{zJ_+} |j, -j\rangle. \quad (6.3.38)$$

On s'intéresse à la projection de cet état sur un état $|j, m\rangle$, et on écrit,

$$\langle j, m | z \rangle = \langle j, m | e^{zJ_+} |j, -j\rangle \simeq \sum_{k=0}^{2j} \frac{z^k}{k!} \langle j, m | (J_+)^k |j, -j\rangle. \quad (6.3.39)$$

En décomposant l'exponentielle de cette façon, on réalise une approximation importante, car pour être valable, il faut que $2j$, c'est-à-dire la valeur maximale de k , soit très grande. En effet l'exponentielle se décompose en une somme infinie de termes, de la forme $\frac{(zJ_+)^k}{k!}$, tendant vers zéro pour les plus grandes valeurs de k . Mais pour un spin, on voit que l'opérateur J_+ va agir k fois sur l'état $|j, -j\rangle$, et ce pour chaque k compris entre 0 et $2j$, ce qui va amener le *ket* dans l'état $|j, -j+k\rangle$. Cependant, en projetant sur l'état $|j, m\rangle$, le résultat ne sera non nul que pour une seule valeur de k , car

$$\langle j, m | j, -j+k \rangle = \delta_{m, -j+k}, \quad (6.3.40)$$

et on ne s'intéresse qu'à $k = j + m$, d'où

$$\langle j, m | z \rangle = \frac{z^{j+m}}{(j+m)!} \langle j, m | (J_+)^{j+m} |j, -j\rangle. \quad (6.3.41)$$

Il nous faut maintenant calculer $(J_+)^{j+m}|j, -j\rangle$, dont le résultat sera proportionnel à $|j, m\rangle$. On rappelle qu'en appliquant une fois l'opérateur J_+ sur un état $|j, k\rangle$, avec $-j < k < j$, nous avons

$$J_+|j, k\rangle = \sqrt{j(j+1) - k(k+1)} |j, k+1\rangle, \quad (6.3.42)$$

faisant passer le *ket* de $|j, k\rangle$ à $|j, k+1\rangle$. Dans notre cas, il est intéressant d'écrire k sous la forme $-j + \eta$, et nous ferons varier η de 0 à $j+m-1$, pour que l'état final soit porté à $|j, m\rangle$. Nous avons donc

$$J_+|j, -j + \eta\rangle = \sqrt{j(j+1) - (-j + \eta)(-j + \eta + 1)} |j, -j + \eta + 1\rangle \quad (6.3.43)$$

$$= \sqrt{(2j - \eta)(1 + \eta)} |j, -j + \eta + 1\rangle. \quad (6.3.44)$$

Ainsi, un nouveau facteur $\sqrt{(2j - \eta)(1 + \eta)}$ sera apporté à chaque application de J_+ , soit pour toutes les valeurs de η . Nous avons alors

$$(J_+)^{j+m}|j, -j\rangle = \underbrace{\sqrt{(2j)(1)}}_{\eta=0} \times \underbrace{\sqrt{(2j-1)(2)}}_{\eta=1} \times \underbrace{\sqrt{(2j-2)(3)}}_{\eta=2} \times \dots \times \underbrace{\sqrt{(j-m+1)(j+m)}}_{\eta=j+m-1} |j, m\rangle \quad (6.3.45)$$

$$= \sqrt{(2j)(2j-1)(2j-2)\dots(j-m+1) \times (j+m)\dots 3 \times 2 \times 1} |j, m\rangle. \quad (6.3.46)$$

$$(6.3.47)$$

Nous pouvons alors faire apparaître des produits factoriels, avec

$$(2j)(2j-1)\dots(j-m+1) = \frac{(2j)(2j-1)\dots(j-m+1) \times [(j-m)(j-m-1)\dots \times 2]}{(j-m)(j-m-1)\dots \times 2} \quad (6.3.48)$$

$$= \frac{(2j)!}{(j-m)!} \quad (6.3.49)$$

et

$$(j+m)\dots 3 \times 2 \times 1 = (j+m)! \quad (6.3.50)$$

pour écrire

$$(J_+)^{j+m}|j, -j\rangle = \sqrt{\frac{(2j)!(j+m)!}{(j-m)!}} |j, m\rangle \quad (6.3.51)$$

et enfin donner une expression au produit scalaire

$$\langle j, m|z\rangle = \frac{z^{j+m}}{(j+m)!} \sqrt{\frac{(2j)!(j+m)!}{(j-m)!}} = \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} z^{j+m}. \quad (6.3.52)$$

Pour un spin, la résolution de l'identité s'écrit

$$\hat{1} := \frac{2j+1}{\pi} \int \frac{d^2z}{(1+z\bar{z})^{2j+2}} |z\rangle\langle z|. \quad (6.3.53)$$

Nous allons montrer l'orthogonalité de deux états $|j, m\rangle$ et $|j, n\rangle$ en utilisant les relations précédentes. On applique tout d'abord l'identité ci-dessus,

$$\langle j, n|j, m\rangle = \langle j, n|\hat{1}|j, m\rangle = \frac{2j+1}{\pi} \int \frac{d^2z}{(1+z\bar{z})^{2j+2}} \langle j, n|z\rangle \langle z|j, m\rangle, \quad (6.3.54)$$

puis on utilise la relation de projection d'un état $|j, m\rangle$ sur un état $|z\rangle$, donnée par l'équation (6.3.52),

$$\langle j, n|j, m\rangle = \frac{2j+1}{\pi} \int \frac{d^2z}{(1+z\bar{z})^{2(j+1)}} \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+n)!(j-n)!}} \bar{z}^{j+m} z^{j+n}. \quad (6.3.55)$$

Ce calcul ressemble à ce que nous avons écrit dans la section précédente, et nous utilisons des formules du même type, pour l'élément différentiel (6.3.24) et les changement de coordonnées, et pour la transformation des puissances de z et \bar{z} , (6.3.28). Ainsi,

$$\langle j, n|j, m\rangle = \frac{2j+1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\rho d\rho}{(1+\rho^2)^{2(j+1)}} \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+n)!(j-n)!}} \rho^{2j+m+n} \quad (6.3.56)$$

$$\times \int_0^{2\pi} d\theta \underbrace{e^{i\theta(n-m)}}_{2\pi\delta_{n,m}}. \quad (6.3.57)$$

On identifie n à m , et en utilisant le même changement de variable $s = \rho^2$ on écrit

$$\langle j, n | j, m \rangle = \frac{(2j+1)!}{(j+m)!(j-m)!} \delta_{n,m} \int_0^\infty \frac{ds}{(1+s)^{2(j+1)}} s^{j+m}. \quad (6.3.58)$$

Pour calculer l'intégrale ci-dessus, nous allons procéder par intégrations par parties successives. En intégrant une première fois, on obtient

$$\int_0^\infty \underbrace{\frac{1}{(1+s)^{2j+2}}}_{\text{à intégrer}} \underbrace{s^{j+m}}_{\text{à dériver}} ds = \underbrace{\left[\frac{-1}{2j+1} \frac{1}{(1+s)^{2j+1}} s^{j+m} \right]_0^{+\infty}}_0 \quad (6.3.59)$$

$$- \int_0^{+\infty} ds \frac{-1}{2j+1} \frac{1}{(1+s)^{2j+1}} (j+m) s^{j+m-1} \quad (6.3.60)$$

$$= \int_0^{+\infty} ds \frac{j+m}{2j+1} \frac{s^{j+m-1}}{(1+s)^{2j+1}}. \quad (6.3.61)$$

Alors, en intégrant p fois par parties on obtient

$$\int_0^\infty \frac{1}{(1+s)^{2j+2}} s^{j+m} ds = \int_0^{+\infty} ds \frac{(j+m)(j+m-1)\dots(j+m-p+1)}{(2j+1)(2j)\dots(2j+2-p)} \frac{s^{j+m-p}}{(1+s)^{2j+2-p}}. \quad (6.3.62)$$

Puisque le terme à intégrer est de la forme $\frac{s^{j+m}}{(1+s)^{2j+2}}$ donnant après p intégrations le terme $\frac{s^{j+m-p}}{(1+s)^{2j+2-p}}$, et que $2j+2 > j+m$, on ne peut intégrer que $p = j+m$ fois. Nous calculons alors

$$\int_0^\infty \frac{1}{(1+s)^{2j+2}} s^{j+m} ds = \int_0^{+\infty} ds \frac{(j+m)(j+m-1)\dots \times 1}{(2j+1)(2j)\dots(j-m+2)} \frac{1}{(1+s)^{j-m+2}} \quad (6.3.63)$$

$$= \frac{(j+m)!(j-m+1)!}{(2j+1)!} \frac{-1}{j-m+1} \underbrace{\left[\frac{1}{(1+s)^{j-m+1}} \right]_0^{+\infty}}_{-1} \quad (6.3.64)$$

$$= \frac{(j+m)!(j-m+1)!}{(2j+1)!}. \quad (6.3.65)$$

Ce résultat est l'inverse du facteur devant l'intégrale calculée; nous vérifions bien que

$$\langle j, n | j, m \rangle = \delta_{n,m}. \quad (6.3.66)$$

On calcule maintenant le produit scalaire entre deux états cohérents $|z\rangle$ et $|z'\rangle$,

$$\langle z' | z \rangle = \langle j, -j | \sum_{n,m=0}^{2j} \frac{z^n \bar{z}'^m}{n!m!} (J_-)^n (J_+)^m | j, -j \rangle. \quad (6.3.67)$$

On remarque que pour que le résultat du produit scalaire soit différent de zéro, il faut

$$(J_-)^n (J_+)^m | j, -j \rangle \propto | j, -j \rangle, \quad (6.3.68)$$

or en appliquant m fois l'opérateur J_+ puis n fois l'opérateur J_- , on obtient

$$(J_-)^n (J_+)^m | j, -j \rangle \propto | j, -j + m - n \rangle, \quad (6.3.69)$$

ce qui conduit à l'égalité entre n et m . Nous écrivons alors

$$\langle z' | z \rangle = \langle j, -j | \sum_{n=0}^{2j} \frac{z^n \bar{z}'^n}{(n!)^2} (J_-)^n (J_+)^n | j, -j \rangle. \quad (6.3.70)$$

L'action de J_+ sur le ket $|j, -j\rangle$, n fois, donne

$$\sqrt{\frac{(2j)!n!}{(2j-n)!}} | j, -j + n \rangle, \quad (6.3.71)$$

et l'application de J_- sur le bra $\langle j, -j |$ donne la même racine. On obtient alors

$$\langle z' | z \rangle = \sum_{n=0}^{2j} \frac{z^n \bar{z}'^n}{(n!)^2} \frac{(2j)!n!}{(2j-n)!} = \sum_{n=0}^{2j} \frac{(2j)!}{(2j-n)!(n!)} (z\bar{z})^n = \sum_{n=0}^{2j} \mathbf{C}_{2j}^n (z\bar{z})^n, \quad (6.3.72)$$

et en utilisant la formule du binôme de Newton, on trouve

$$\boxed{\langle z'|z \rangle = (1 + z\bar{z})^{2j}}. \quad (6.3.73)$$

Ainsi, comme nous l'avons remarqué plus haut, l'application de l'intégrale de chemin à un spin n'est possible que si ce dernier est très élevé. Sur un chemin, son comportement est *classique*, au sens où il peut prendre de nombreuses valeurs, toutes très rapprochées les unes des autres, et formant un quasi-continuum. Mais l'effet proprement quantique est que l'on considère, en effectuant la sommation dans l'intégrale de chemin, tous les chemins possibles, bien que le chemin *classique* soit privilégié.

6.3.3 Intégrale de chemin pour le spin, d'après E.A Kochetov

Dans cette section nous allons déterminer l'intégrale de chemin pour le spin, en s'inspirant d'un article de E.A Kochetov (ref. [13]) publié en 1995. En effet depuis une trentaine d'années les tentatives infructueuses se sont accumulées. Comme nous le verrons, à la fin, les calculs font apparaître un terme Γ qui n'était jusqu'alors pas présent. Le problème n'est pas simple, puisque le spin est une grandeur quantique discrète, alors que l'intégrale de chemin permet d'obtenir une description continue de la grandeur en question. Pour réaliser cette transition du discret au continu, on s'appuie sur les états cohérents de $SU(2)$.

On commence par discrétiser le temps en le subdivisant en N parties telles que $\varepsilon := \frac{\tau}{N}$. A chaque pas de temps le spin change, on peut penser qu'une source extérieure en est la cause, ce que l'on traduit $S_k = \varepsilon k$.

On souhaite calculer le propagateur suivant

$$G(\bar{z}_1, z_2, \tau) = \langle z_1 | \hat{T} e^{-i \int_0^\tau \hat{H}(S_k) dS} | z_2 \rangle \quad (6.3.74)$$

Ici le \hat{T} signifie que l'on fait un T-produit, c'est à dire un produit infini et ordonné dans le temps. Ce T-produit est nécessaire puisque $\hat{H}(S_k)$ n'est pas indépendant du temps, en effet il dépend du spin, qui lui même dépend explicitement du temps, il ne commute donc pas à deux temps différents. Les états cohérents de $SU(2)$ sont de la forme

$$|z \rangle = (1 + \bar{z}z)^{-s} e^{iS+z} |S, -S \rangle \quad (6.3.75)$$

On aurait pu utiliser une autre définition faisant apparaître S_- agissant sur $|S, S \rangle : |z \rangle = (1 + \bar{z}z)^{-s} e^{iS-z} |S, S \rangle$. On peut faire le lien entre ces deux définitions des états cohérents. (cf. Stone and Park ref.[14])

La relation de fermeture dans $SU(2)$ s'écrit

$$\hat{I} = \frac{2s+1}{\pi} \int \frac{d^2z}{(1 + \bar{z}z)^2} |z \rangle \langle z| \quad (6.3.76)$$

Il est à noter que grâce à la définition des états cohérents (6.3.75), et en particulier à la présence du terme $(1 + \bar{z}z)^{-s}$, on fait apparaître dans la relation de fermeture (6.3.76) la mesure invariante de $SU(2)$, qui est $(1 + \bar{z}z)^2$. Invariante par la transformation $z \rightarrow \frac{1}{\bar{z}}$.

Par soucis de clarté quand nous utiliserons la relation de fermeture (6.3.76) nous effectuerons le changement de variable suivant $z \rightarrow \xi$.

$$\begin{aligned} G(\bar{z}_1, z_2, \tau) &= \langle z_1 | \int du_k |\xi_k \rangle \langle \xi_k | \prod_{k=1}^N e^{-i\varepsilon \hat{H}(S_k)} | z_2 \rangle \\ &= \langle z_1 | \int du_k |\xi_k \rangle \langle \xi_k | e^{-i\varepsilon \hat{H}(S_k)} | \int du_{k-1} |\xi_{k-1} \rangle \dots \langle \xi_1 | e^{-i\varepsilon \hat{H}(S_k)} \langle \xi_0 | z_2 \rangle \\ &= \int \prod_{k=0}^N (du_k) \langle z_1 | \xi_k \rangle \langle \xi_0 | z_2 \rangle \prod_{k=1}^N \langle \xi_k | e^{-i\varepsilon \hat{H}(S_k)} | \xi_{k-1} \rangle \end{aligned}$$

Maintenant on développe l'exponentielle au premier ordre

$$\langle \xi_k | e^{-i\varepsilon \hat{H}(S_k)} | \xi_{k-1} \rangle = \langle \xi_k | \xi_{k-1} \rangle \left(\hat{I} - i\varepsilon \frac{\langle \xi_k | \hat{H}(S_k) | \xi_{k-1} \rangle}{\langle \xi_k | \xi_{k-1} \rangle} \right) + o(\varepsilon^2) \quad (6.3.77)$$

On pose

$$\frac{\langle \xi_k | \hat{H}(S_k) | \xi_{k-1} \rangle}{\langle \xi_k | \xi_{k-1} \rangle} := H(\bar{\xi}_k, \xi_{k-1}, S_k) \quad (6.3.78)$$

On peut encore écrire

$$\langle \xi_k | e^{-i\varepsilon \hat{H}(S_k)} | \xi_{k-1} \rangle = \langle \xi_k | \xi_{k-1} \rangle e^{-i\varepsilon H(\bar{\xi}_k, \xi_{k-1}, S_k)} + o(\varepsilon) \quad (6.3.79)$$

Cette fois l'hamiltonien $H(\bar{\xi}_k, \xi_{k-1}, S_k)$ ne contient plus d'opérateurs, c'est un scalaire. Comme nous l'avons déjà vu, l'erreur est de taille $o(\varepsilon^2)$ et est répétée $\frac{1}{\varepsilon}$ fois, donc une fois exprimée sous forme d'exponentielle l'erreur est en $o(\varepsilon)$. Au final en prenant la limite $N \rightarrow \infty$

$$G(\bar{z}_1, z_2, \tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{k=0}^N (du_k) \langle z_1 | \xi_k \rangle \langle \xi_0 | z_2 \rangle \prod_{k=1}^N \langle \xi_k | \xi_{k-1} \rangle e^{-i\varepsilon H(\bar{\xi}_k, \xi_{k-1}, S_k)} \quad (6.3.80)$$

Nous allons montrer le lemme suivant, qui sera utile pour simplifier (6.3.80)

$$I := \int d\mu \langle \eta | z \rangle f(\bar{z}) = f(\bar{\eta}) \quad \text{avec} \quad f(\bar{z}) := \frac{P_m(\bar{z})}{(1 + \bar{z}z)^s} \quad (6.3.81)$$

$P_m(\bar{z})$ représente un polynôme de degré m en \bar{z} .

Preuve directe par le calcul de (6.3.81) :

On a déjà montré précédemment que

$$\langle \eta | z \rangle = \frac{(1 + \bar{\eta}z)^{2s}}{(1 + \bar{z}z)^s (1 + \bar{\eta}\eta)^s} \quad (6.3.82)$$

On utilise l'invariance par rotation dans le plan complexe. En supposant η réel et $z := \rho e^{i\theta}$ qui tourne autour.

Calculons I en utilisant le changement de variable ci-dessus. L'astuce consiste donc à passer en coordonnées polaires

$$\begin{aligned} I &= \frac{2s+1}{\pi} \int \frac{1}{(1+\rho^2)^2} \rho d\rho d\theta \frac{(1+\eta\rho e^{i\theta})^{2s}}{(1+\rho^2)^s (1+\eta^2)^s} f(e^{-i\theta}) \\ &= \frac{2s+1}{\pi} \int \frac{1}{(1+\rho^2)^2} \rho d\rho d\theta \frac{\sum_{k'} C_{2s}^{k'} (\eta\rho)^{k'} e^{ik'\theta}}{(1+\rho^2)^s (1+\eta^2)^s} \frac{\rho^k e^{i\theta(k'-k)}}{(1+\rho^2)^s} \\ &= \frac{2s+1}{\pi} \int \frac{\rho^k}{(1+\rho^2)^{2s}} \rho d\rho \frac{C_{2s}^k (\eta\rho)^k 2\pi}{(1+\rho^2)^s (1+\eta^2)^s} \end{aligned}$$

Lors de la dernière étape on a intégré sur θ pour faire apparaître $2\pi\delta_{kk'}$. On fait le changement de variable $\rho^2 := t$

$$I = (2s+1)\eta^k \frac{C_{2s}^k}{(1+\eta^2)^s} \int_0^\infty \frac{t^k}{(1+t)^{2s+2}} dt \quad (6.3.83)$$

Nous allons procéder par intégration par partie successives. Il faut répéter l'opération k -fois de façon à faire disparaître le terme t^k .

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{t^k}{(1+t)^{2s+2}} dt &= -\frac{k!}{(2s+2-k)!} \left(\left[\frac{t}{(1+t)^{2s+2-k}} \right]_0^\infty - \int_0^\infty \frac{dt}{(1+t)^{2s+2-k}} \right) \\ &= -\frac{k!}{(2s+2-k)!(2s+1-k)} \left[\frac{1}{(1+t)^{2s+1-k}} \right]_0^\infty = \frac{k!}{(2s+1-k)!} = \frac{k!(2s-k)!}{(2s+1)!} \end{aligned}$$

On remplace dans (6.3.83)

$$\begin{aligned} I &= (2s+1)\eta^k \frac{C_{2s}^k}{(1+\eta^2)^s} \frac{k!(2s-k)!}{(2s+1)!} \\ &= (2s+1)\eta^k \frac{2s!}{(2s-k)!k!} \frac{1}{(1+\eta^2)^s} \frac{k!(2s-k)!}{(2s+1)(2s)!} \\ I &= \frac{\eta^k}{(1+\eta^2)^s} := f(\bar{\eta}) \quad \text{car} \quad \eta \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

Ceci prouve donc le lemme (6.3.81). Il faut noter que cette preuve ne fonctionne que si le degré de P_m , c' est à dire m est tel que $m \leq 2s$.

Nous pouvons donc appliquer (6.3.81) à (6.3.80), en choisissant $f(\bar{z}) := e^{-i\varepsilon H(\bar{\xi}_k, \xi_{k-1}, S_k)}$. Nous allons dans un premier temps intégrer sur l'extrémité finale.

$$\begin{aligned}
G(\bar{z}_1, z_2, \tau) &= \int \prod_{k=0}^{N-1} (du_k) \underbrace{d\mu_N < z_1 | \xi_N \rangle e^{-i\varepsilon H(\bar{\xi}_N, \xi_{N-1}, S_N)} < \xi_N | \xi_{N-1} \rangle < \xi_0 | z_2 \rangle}_{\exp(-i\varepsilon H(\bar{z}_1, \xi_{N-1}))} \times \\
&\times \prod_{k=1}^{N-1} < \xi_k | \xi_{k-1} \rangle e^{-i\varepsilon H(\bar{\xi}_k, \xi_{k-1}, S_k)} \\
&= \int_{z_2=\xi_0}^{\bar{z}_1=\bar{\xi}_N} \prod_{k=1}^{N-1} (du_k) e^{-i\varepsilon H(\bar{\xi}_N, \xi_{N-1})} < \xi_N | \xi_{N-1} \rangle \underbrace{d\mu_0 < \xi_0 | z_2 \rangle e^{-i\varepsilon H(\bar{\xi}_1, \xi_0, S_1)} < \xi_1 | \xi_0 \rangle}_{\exp(-i\varepsilon H(\bar{\xi}_1, z_2))} \times \\
&\times \prod_{k=2}^{N-1} < \xi_k | \xi_{k-1} \rangle e^{-i\varepsilon H(\bar{\xi}_k, \xi_{k-1}, S_k)} \\
&= \int_{z_2=\xi_0}^{\bar{z}_1=\bar{\xi}_N} \prod_{k=1}^{N-1} (du_k) < \xi_N | \xi_{N-1} \rangle < \xi_1 | \xi_0 \rangle \prod_{k=2}^{N-1} < \xi_k | \xi_{k-1} \rangle e^{-i\varepsilon \sum_{k=1}^N H(\bar{\xi}_k, \xi_{k-1}, S_k)} \\
&= \int_{z_2=\xi_0}^{\bar{z}_1=\bar{\xi}_N} \prod_{k=1}^{N-1} (du_k) < z_1 | \xi_{N-1} \rangle < \xi_1 | z_2 \rangle \prod_{k=2}^{N-1} < \xi_k | \xi_{k-1} \rangle e^{-i\varepsilon \sum_{k=1}^N H(\bar{\xi}_k, \xi_{k-1}, S_k)} \quad (6.3.84)
\end{aligned}$$

Il faut noter que l'on obtient ici une intégrale de chemin, on est donc passé d'une description discrète à une description continue.

On peut donc voir le spin comme un vecteur centré en la sphère de Riemann. Quand le spin est quantifié il ne peut parcourir qu'un nombre fini de bandes sur cette sphère (exemple deux bandes pour un spin $\frac{1}{2}$). Avec cette nouvelle vision, on peut interpréter l'intégrale de chemin pour le spin comme l'ensemble des chemins que peut parcourir la pointe du spin sur la surface de la sphère pour aller de l'état initial à l'état final. On peut aussi comprendre que plus le spin est élevé, plus la surface accessible à la pointe du vecteur est grande. Résultat encore surprenant, pour les spins élevés, on retrouve l'approximation semi-classique.

Tout ceci permet une fois encore de confirmer que la mécanique classique et la mécanique quantique sont plus étroitement liées qu'il n'y paraît, puisqu'une grandeur introduite comme purement quantique, le spin, a son interprétation classique.

On souhaite reformuler le terme $< \xi_k | \xi_{k-1} \rangle$ dans l'équation (6.3.84).

Montrons que

$$\log(< \xi_k | \xi_{k-1} \rangle) = s \frac{\bar{\delta}_k \xi_{k-1} - \bar{\xi}_k \delta_k}{1 + \xi_k \xi_{k-1}} + o(\delta^2) \quad \text{avec} \quad \delta_k := \xi_k - \xi_{k-1} \quad (6.3.85)$$

On utilise (6.3.82) et

$$\log(< \xi_k | \xi_{k-1} \rangle) = \log\left(\frac{(1 + \bar{\eta}z)^{2s}}{(1 + \bar{\xi}_k \xi_k)^s (1 + \bar{\xi}_{k-1} \xi_{k-1})^s}\right) = s \log\left(\frac{(1 + \bar{\eta}z)^2}{(1 + \bar{\xi}_k \xi_k)(1 + \bar{\xi}_{k-1} \xi_{k-1})}\right) \quad (6.3.86)$$

On s'intéresse à la quantité suivante

$$\frac{(1 + \bar{X}Y)^2}{(1 + \bar{X}Y)(1 + \bar{Y}X)} \quad (6.3.87)$$

et on répartie l'écart δ_k partiellement sur \bar{X} et Y , par soucis de clarté on nomme cet écart t tel que $Y = X - t$

$$\begin{aligned}
\frac{(1 + \bar{X}Y)^2}{(1 + \bar{X}Y)(1 + \bar{Y}X)} &= \frac{(1 + \bar{X}(X-t))(1 + (\bar{Y}+t)X)}{(1 + \bar{X}Y)(1 + \bar{Y}X)} \\
&= \left(1 - \frac{\bar{X}t}{1 + \bar{X}X}\right) \left(1 + \frac{\bar{t}Y}{1 + \bar{Y}Y}\right) \\
\log\left(\frac{(1 + \bar{X}Y)^2}{(1 + \bar{X}Y)(1 + \bar{Y}X)}\right) &= \frac{\bar{t}Y}{1 + \bar{Y}Y} - \frac{\bar{X}t}{1 + \bar{X}X} = \frac{\bar{t}Y - \bar{X}t}{1 + \bar{X}Y} + o(t^2) \quad (6.3.88)
\end{aligned}$$

En combinant (6.3.86) et (6.3.88) on retrouve bien le résultat annoncé en (6.3.85).

On peut injecter le résultat (6.3.85) dans (6.3.84), et en négligeant les termes d'ordre $o(\varepsilon^2)$ on obtient finalement

$$G(\bar{z}_1, z_2, \tau) = \int_{z_2=\xi_0}^{\bar{z}_1=\bar{\xi}_N} \prod_{k=1}^{N-1} (du_k) \langle z_1 | \xi_{N-1} \rangle \langle \xi_1 | z_2 \rangle \exp \left(s \sum_{k=2}^{N-1} \frac{\bar{\delta}_k \xi_{k-1} - \bar{\xi}_k \delta_k}{1 + \xi_k \xi_{k-1}} - i\varepsilon \sum_{k=1}^{N-1} H(\bar{\xi}_k, \xi_{k-1}, S_k) \right) \quad (6.3.89)$$

A la limite continue $[D\mu] = \prod^{\infty} d\mu_k$ et $\delta_k := \dot{\xi}_k dS$ le propagateur s'écrit

$$G(\bar{z}_1, z_2, \tau) = \int_{z_2=z(0)}^{\bar{z}_1=\bar{z}(\tau)} [D\mu] e^{\Phi} \quad \text{avec} \quad \Phi = L + \Gamma \quad (6.3.90)$$

$$L := s \int_0^{\tau} \frac{\dot{z}z - \bar{z}\dot{z}}{1 + z\bar{z}} dS \quad \text{et} \quad \Gamma := s \log \left(\frac{(1 + \bar{z}_1 z(\tau))(1 + \bar{z}(0)z_2)}{(1 + z_1 \bar{z}_1)(1 + z_2 \bar{z}_2)} \right) \quad (6.3.91)$$

Il faut bien comprendre que dS signifie un changement infinitésimal de spin, mais comme à chaque pas de temps le spin change, ce dS peut être interpréter comme un dt variation infinitésimale dans le temps.

6.3.4 Equation du mouvement pour le spin

Auparavant, le lien entre l'intégrale de chemin et l'approximation semi-classique était possible en considérant le facteur $\frac{1}{\hbar}$ comme étant très grand dans la phase de l'exponentielle du propagateur. Ici, il est possible de réaliser un développement semblable pour le spin, en considérant un spin s très grand devant 1. On rappelle que le lagrangien pour un spin s'écrit

$$L = s \int_0^{\tau} \frac{\dot{z}z - \bar{z}\dot{z}}{1 + z\bar{z}} dt - i \int_0^{\tau} H(z, \bar{z}, s) dt. \quad (6.3.92)$$

Dans une approximation semi-classique, on développe la variation δL au premier ordre en z et en \bar{z} . La première intégrale présente dans L s'écrit

$$\delta \int_0^{\tau} \frac{\dot{z}z - \bar{z}\dot{z}}{1 + z\bar{z}} dt = \int_0^{\tau} dt \left(\frac{\delta \dot{z}z + \dot{z}\delta z - \delta \bar{z}\dot{z} - \bar{z}\delta \dot{z}}{1 + z\bar{z}} - \frac{(\dot{z}z - \bar{z}\dot{z})(z\delta \bar{z} + \bar{z}\delta z)}{(1 + z\bar{z})^2} \right) \quad (6.3.93)$$

$$= \left[\frac{z\delta \bar{z} - \bar{z}\delta z}{1 + z\bar{z}} \right]_0^{\tau} + \int_0^{\tau} dt \left(\delta z \frac{d}{dt} \left(\frac{\bar{z}}{1 + z\bar{z}} \right) - \delta \bar{z} \frac{d}{dt} \left(\frac{z}{1 + z\bar{z}} \right) \right) \quad (6.3.94)$$

$$+ \frac{\dot{z}\delta z - \delta \bar{z}\dot{z}}{1 + z\bar{z}} \frac{(\bar{z}\dot{z} - \dot{z}\bar{z})(z\delta \bar{z} + \bar{z}\delta z)}{(1 + z\bar{z})^2} \quad (6.3.95)$$

$$= \left[\frac{z\delta \bar{z} - \bar{z}\delta z}{1 + z\bar{z}} \right]_0^{\tau} + \int_0^{\tau} dt \left(\frac{\dot{z}\delta z - \delta \bar{z}\dot{z}}{1 + z\bar{z}} + \frac{(\delta \bar{z}z - \delta z\bar{z})(z\dot{z} + \dot{z}\bar{z})}{(1 + z\bar{z})^2} \right) \quad (6.3.96)$$

$$+ \frac{\dot{z}\delta z - \delta \bar{z}\dot{z}}{1 + z\bar{z}} \frac{(\bar{z}\dot{z} - \dot{z}\bar{z})(z\delta \bar{z} + \bar{z}\delta z)}{(1 + z\bar{z})^2}. \quad (6.3.97)$$

$$(6.3.98)$$

On note la simplification suivante,

$$(\delta \bar{z}z - \delta z\bar{z})(z\dot{z} + \dot{z}\bar{z}) + (\bar{z}\dot{z} - \dot{z}\bar{z})(z\delta \bar{z} + \bar{z}\delta z) = 2z\bar{z}(\dot{z}\delta \bar{z} - \dot{z}\delta z), \quad (6.3.99)$$

ce qui donne

$$\delta \int_0^{\tau} \frac{\dot{z}z - \bar{z}\dot{z}}{1 + z\bar{z}} dt = \left[\frac{z\delta \bar{z} - \bar{z}\delta z}{1 + z\bar{z}} \right]_0^{\tau} + 2 \int_0^{\tau} dt (\dot{z}\delta z - \dot{z}\delta \bar{z}) \left(\frac{1}{1 + z\bar{z}} - \frac{z\bar{z}}{(1 + z\bar{z})^2} \right) \quad (6.3.100)$$

$$= \left[\frac{z\delta \bar{z} - \bar{z}\delta z}{1 + z\bar{z}} \right]_0^{\tau} + 2 \int_0^{\tau} dt \frac{(\dot{z}\delta z - \dot{z}\delta \bar{z})}{(1 + z\bar{z})^2}, \quad (6.3.101)$$

pour ce terme.

On s'intéresse maintenant à l'intégrale contenant le hamiltonien H . On lui applique une variation δ , et un développement au premier ordre donne

$$\delta H(z, \bar{z}) \simeq \frac{\partial H}{\partial z} \delta z + \frac{\partial H}{\partial \bar{z}} \delta \bar{z}. \quad (6.3.102)$$

On peut ainsi regrouper tous ces termes pour exprimer la variation totale δL et on écrit

$$\delta L = \left[\frac{z\delta\bar{z} - \bar{z}\delta z}{1 + z\bar{z}} \right]_0^\tau + \int_0^\tau \frac{dt}{(1 + z\bar{z})^2} \left[2s(\dot{z}\delta z - \dot{\bar{z}}\delta\bar{z}) - i \left(\frac{\partial H}{\partial z} \delta z + \frac{\partial H}{\partial \bar{z}} \delta\bar{z} \right) (1 + z\hat{z})^2 \right] \quad (6.3.103)$$

$$= \left[\frac{z\delta\bar{z} - \bar{z}\delta z}{1 + z\bar{z}} \right]_0^\tau + \int_0^\tau \frac{dt}{(1 + z\bar{z})^2} \left[\left(2s\dot{z} - i \frac{\partial H}{\partial z} (1 + z\hat{z})^2 \right) \delta z - \left(2s\dot{\bar{z}} + i \frac{\partial H}{\partial \bar{z}} (1 + z\hat{z})^2 \right) \delta\bar{z} \right]. \quad (6.3.104)$$

Pour trouver les équations du mouvement, il faut que cette variation soit minimale. Ceci n'agit pas sur le terme tout intégré ci-dessus car il ne dépend que des conditions aux limites, mais il implique que l'intégrale soit nulle pour tous les éléments δz et $\delta\bar{z}$. De l'équation précédente, on identifie alors les « équations de mouvement » pour un spin

$$\boxed{2s\dot{z} = -i \frac{\partial H}{\partial \bar{z}} (1 + z\hat{z})^2} \quad (6.3.105)$$

et

$$\boxed{2s\dot{\bar{z}} = i \frac{\partial H}{\partial z} (1 + z\hat{z})^2}. \quad (6.3.106)$$

Chapitre 7

ANNEXE

7.1 Inversion d'opérateurs en dimension infinie par la méthode de Kochetov

Dans l'article [13], on est amené à calculer la variation au second ordre de l'action, pour les états cohérents du spin. On montre qu'elle peut se scinder en deux parties, une partie cinétique (première intégrale) et une autre qui traduit les fluctuations quantiques (la seconde intégrale)

$$\delta^2 S(\bar{\eta}, \eta) = \int_0^\tau (\dot{\bar{\eta}}\eta - \dot{\eta}\bar{\eta}) ds - \int_0^\tau (\hat{A}\eta^2 + \hat{C}\bar{\eta}^2) ds \quad (7.1.1)$$

Ici les coefficients \hat{A}, \hat{C} sont des opérateurs, ils contiennent le hamiltonien.

Ou encore, sous forme matricielle de la forme

$$\begin{bmatrix} \eta & \bar{\eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{A} & \partial_t \\ -\partial_t & \hat{C} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \eta \\ \bar{\eta} \end{bmatrix} \quad (7.1.2)$$

On pose alors

$$K := \begin{bmatrix} \hat{A} & \partial_t \\ -\partial_t & \hat{C} \end{bmatrix} \quad (7.1.3)$$

$$K_0 := \begin{bmatrix} 0 & \partial_t \\ -\partial_t & 0 \end{bmatrix} \quad (7.1.4)$$

D'après une remarque ci-dessus, K_0 est la forme quadratique associée à l'énergie cinétique, elle ne contient par conséquent aucune interaction.

On a montré que le propagateur $G(x_f, t_f; x_i, t_i)$ est proportionnel au déterminant de la forme quadratique de l'action. Pour des questions de normalisation, on pose

$$G_{red} := \left(\frac{\det(K)}{\det(K_0)} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad \text{tel que} \quad G(x_f, t_f; x_i, t_i) \propto G_{red} e^{i\Phi} \quad (7.1.5)$$

On introduit un nouveau paramètre λ , appelé paramètre spectral et une nouvelle fonction telle que

$$f(\lambda) := \det \left[(K_0^{-1})(K - \lambda \hat{I}) \right] = e^{tr \log (K_0^{-1}(K - \lambda \hat{I}))} \quad (7.1.6)$$

Et on en déduit

$$\begin{aligned} \log f(\lambda) &= tr(\log K_0^{-1}(K - \lambda \hat{I})) \\ \partial_\lambda \log f(\lambda) &= tr(\partial_\lambda \log K_0^{-1}(K - \lambda \hat{I})) \\ \partial_\lambda \log f(\lambda) &= -tr \frac{1}{K - \lambda \hat{I}} \end{aligned} \quad (7.1.7)$$

Il faut donc que nous inversions l'opérateur $K - \lambda \hat{I}$, on utilisera les fonctions de Green. Pour construire la fonction de Green $K - \lambda \hat{I}$ on introduit deux nouvelles fonctions $\phi(t)$ et $\psi(t)$, et leurs complexes

conjuguées, qui sont toutes indépendantes entre elles, de plus elles sont solutions du système d'équations ci-dessous. On en choisit deux, puisque nous avons initialement dans notre problème deux conditions aux bords, en $t = 0$ et $t = \tau$.

$$\begin{cases} (K - \lambda \hat{I}) \begin{bmatrix} \phi \\ \bar{\phi} \end{bmatrix} = 0 & \phi(0) = 0 \\ (K - \lambda \hat{I}) \begin{bmatrix} \psi \\ \bar{\psi} \end{bmatrix} = 0 & \psi(T) = 0 \end{cases} \quad (7.1.8)$$

On introduit le Wronskien W tel que

$$W := \det \begin{bmatrix} \phi(t) & \bar{\phi}(t) \\ \psi(t) & \bar{\psi}(t) \end{bmatrix} = (\phi \bar{\psi} - \psi \bar{\phi})(t) \quad (7.1.9)$$

Il est utile de rappeler un théorème et son corollaire, applicables pour les équations différentielles linéaires homogènes du second ordre

- les fonctions solutions sont linéairement indépendantes si, et seulement si le wronskien est non-nul.
- les fonctions solutions sont linéairement dépendantes si, et seulement si le wronskien est nul.

On calcul \dot{W} des solutions ϕ et ψ

$$\dot{W} = (\dot{\phi} \bar{\psi} + \phi \dot{\bar{\psi}} - \dot{\psi} \bar{\phi} - \psi \dot{\bar{\phi}})(t) \quad (7.1.10)$$

Dans un cas général on peut supposer que

$$\begin{cases} \dot{\phi} = \alpha \phi + \beta \bar{\phi} \\ \dot{\bar{\phi}} = \gamma \phi + \delta \bar{\phi} \end{cases} \quad (7.1.11)$$

et en remplaçant dans (7.1.10) on obtient finalement

$$\dot{W} = (\alpha + \delta)(\phi \bar{\psi} - \psi \bar{\phi}) = (\alpha + \delta)W \quad (7.1.12)$$

et donc

$$W = ae^{(\alpha+\delta)t} \quad \text{avec } a \neq 0, a \text{ constante} \quad (7.1.13)$$

Mais dans notre cas, nous avons choisi les fonctions ϕ et ψ , solutions des équations (7.1.8), que l'on peut encore écrire (nous le faisons ici pour ϕ uniquement)

$$\begin{cases} \dot{\phi} = -(\lambda + \hat{C})\bar{\phi} \\ \dot{\bar{\phi}} = -(\lambda + \hat{A})\phi \end{cases} \quad (7.1.14)$$

En identifiant avec (7.1.11), on déduit que $\alpha = \delta = 0$. C'est à dire que le wronskien est constant, mais surtout il est non-nul, donc les solutions ϕ et ψ sont linéairement indépendantes.

On calcul $W(0)$ et $W(T)$, et on utilise les conditions aux limites $\phi(0) = 0$ et $\psi(T) = 0$, pour déduire que $\bar{\phi}(0)\psi(0) = \bar{\phi}(T)\psi(T)$.

On construit la fonction de Green telle que l'équation $(K - \lambda \hat{I})\mathcal{G}(t, t') = \delta(t - t')$ soit vérifiée, on obtient ainsi

$$\mathcal{G}(t, t') = \frac{\Theta(t - t')}{W} \begin{bmatrix} \phi(t')\psi(t) & \bar{\phi}(t')\psi(t) \\ \phi(t')\bar{\psi}(t) & \bar{\phi}(t')\bar{\psi}(t) \end{bmatrix} + \frac{\Theta(t' - t)}{W} \begin{bmatrix} \phi(t)\psi(t') & \phi(t)\bar{\psi}(t') \\ \bar{\phi}(t)\psi(t') & \bar{\phi}(t)\bar{\psi}(t') \end{bmatrix} \quad t > t' \quad (7.1.15)$$

où la fonction $\Theta(t - t')$ est une fonction de Heaviside centrée en t' , et W le wronskien.

On peut aussi écrire $\mathcal{G}(t, t')$ comme agissant sur des spineurs

$$\mathcal{G}(t, t') = \frac{\Theta(t - t')}{W} \begin{bmatrix} \psi \\ \bar{\psi} \end{bmatrix}(t) + \bar{\phi}(t') \begin{bmatrix} \psi \\ \bar{\psi} \end{bmatrix}(t) + \frac{\Theta(t' - t)}{W} \begin{bmatrix} \phi \\ \bar{\phi} \end{bmatrix}(t) + \bar{\psi}(t') \begin{bmatrix} \phi \\ \bar{\phi} \end{bmatrix}(t) \quad (7.1.16)$$

Et de façon plus compacte

$$\mathcal{G}(t, t') = \frac{\Theta(t-t')}{W} (\phi(t') + \bar{\phi}(t')) \begin{bmatrix} \psi \\ \bar{\psi} \end{bmatrix} (t) + \frac{\Theta(t'-t)}{W} (\psi(t') + \bar{\psi}(t')) \begin{bmatrix} \phi \\ \bar{\phi} \end{bmatrix} (t) \quad (7.1.17)$$

On fait agir $(K - \lambda \hat{I})$ sur $\mathcal{G}(t, t')$ et on retrouve bien $(K - \lambda \hat{I})\mathcal{G}(t, t') = 0$, puisque par construction on a choisi les spineurs sur ϕ et ψ solution de (7.1.8).

On fait maintenant agir K_0 sur $\mathcal{G}(t, t')$ pour faire apparaître la discontinuité. La seule contribution non nulle vient de ∂_t agissant sur $\Theta(t-t')$, on peut donc se limiter à l'action de K_0 . Les g_{ij} représentent les coefficients de notre fonction de Green $\mathcal{G}(t, t')$.

$$\begin{bmatrix} 0 & \partial_t \\ -\partial_t & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \partial_t g_{21} & \partial_t g_{22} \\ -\partial_t g_{11} & -\partial_t g_{12} \end{bmatrix} \quad (7.1.18)$$

On calcul ici terme à terme pour reconstituer la matrice de droite dans (7.1.18). On se souvient que dans notre cas le wronskien est constant. On détail le calcul pour une entrée de la matrice.

$$\begin{aligned} \partial_t g_{21} &= \partial_t \left[\frac{\Theta(t-t')}{W} \right] \phi(t') \bar{\psi}(t) + \partial_t \left[\frac{\Theta(t'-t)}{W} \right] \bar{\phi}(t) \psi(t') \\ \partial_t g_{21} &= \frac{\delta(t-t')}{W} [\phi(t) \bar{\psi}(t) - \bar{\phi}(t) \psi(t)] = \delta(t-t') \end{aligned}$$

On trouve en procédant de la même façon

$$\begin{cases} \partial_t g_{21} = \delta(t-t') \\ \partial_t g_{22} = 0 \\ -\partial_t g_{11} = 0 \\ -\partial_t g_{12} = \delta(t-t') \end{cases} \quad (7.1.19)$$

D'où l'action de K_0

$$\begin{bmatrix} 0 & \partial_t \\ -\partial_t & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta(t-t') & 0 \\ 0 & \delta(t-t') \end{bmatrix} = \delta(t-t') \hat{I} \quad (7.1.20)$$

L'équation $(K - \lambda \hat{I})\mathcal{G}(t, t') = \delta(t-t')$ est donc bien vérifiée.

On cherche la trace de la fonction de Green, parce qu'on sait que le déterminant d'une matrice est égal à l'exponentielle de la trace du logarithme de cette matrice, et nous cherchons le déterminant.

$$tr(\mathcal{G}(t, t')) = \sum_t \langle t | \mathcal{G}(t, t') | t \rangle = \langle t | g_{11} | t \rangle + \langle t | g_{22} | t \rangle \quad (7.1.21)$$

On choisit $\Theta(t-t') = \frac{1}{2}$ pour répartir homogènement la fonction d'Heaviside, mais il doit exister une justification plus rigoureuse.

$$\langle t | g_{11} | t \rangle = \frac{1}{W} (\Theta(t-t') \phi(t') \psi(t) + \Theta(t-t') \phi(t) \psi(t)) = \frac{1}{W} \phi(t) \psi(t) \quad (7.1.22)$$

$$\langle t | g_{22} | t \rangle = \frac{1}{W} (\Theta(t-t') \bar{\phi}(t) \bar{\psi}(t) + \Theta(t-t') \bar{\phi}(t) \bar{\psi}(t)) = \frac{1}{W} \bar{\phi}(t) \bar{\psi}(t) \quad (7.1.23)$$

$$\boxed{tr(K - \lambda \hat{I})^{-1} = \frac{1}{W} \int_0^T (\phi \psi + \bar{\phi} \bar{\psi}) dt} \quad (7.1.24)$$

On s'intéresse maintenant aux conditions aux limites.

Si $\mathcal{G}(t, t')$ agit sur un couple $\begin{bmatrix} \xi \\ \bar{\xi} \end{bmatrix}$ tel que $\xi(0) = 0$ et $\bar{\xi}(T) = 0$. On remarque qu'il s'agit de la situation contraire à la notre puisque $\bar{\phi}(T)$ et $\psi(0)$ sont libres. Vérifions si l'image d'un tel couple est encore dans le même espace.

Pour cela on étudie la quantité suivante (voir (7.1.17))

$$\int_0^T \mathcal{G}(t, t') \begin{bmatrix} \xi \\ \bar{\xi} \end{bmatrix} (t') dt' = \frac{1}{W} \begin{bmatrix} \psi \\ \bar{\psi} \end{bmatrix} (t) \int_0^t (\phi(t') + \bar{\phi}(t')) \begin{bmatrix} \xi \\ \bar{\xi} \end{bmatrix} (t') dt' + \frac{1}{W} \begin{bmatrix} \phi \\ \bar{\phi} \end{bmatrix} (t) \int_t^T (\psi(t') + \bar{\psi}(t')) \begin{bmatrix} \xi \\ \bar{\xi} \end{bmatrix} (t') dt'$$

Posons $t = 0$, et utilisons la condition au bord $\phi(0) = 0$

$$\int_0^T \mathcal{G}(t, t') \begin{bmatrix} \xi \\ \bar{\xi} \end{bmatrix} (t') dt' = \frac{1}{W} \begin{bmatrix} 0 \\ \bar{\phi} \end{bmatrix} (t) \int_0^T (\psi(t') + \bar{\psi}(t')) \begin{bmatrix} \xi \\ \bar{\xi} \end{bmatrix} (t') dt' \quad (7.1.25)$$

La première composante s'annule pour $t = 0$.

Posons $t = T$, et utilisons la condition au bord $\bar{\psi}(T) = 0$

$$\int_0^T \mathcal{G}(t, t') \begin{bmatrix} \xi \\ \bar{\xi} \end{bmatrix} (t') dt' = \frac{1}{W} \begin{bmatrix} \psi \\ 0 \end{bmatrix} (t) \int_0^T (\phi(t') + \bar{\phi}(t')) \begin{bmatrix} \xi \\ \bar{\xi} \end{bmatrix} (t') dt' \quad (7.1.26)$$

La deuxième composante s'annule pour $t = T$.

Conclusion : $\mathcal{G}(t, t')$ projette les couples $\begin{bmatrix} \xi \\ \bar{\xi} \end{bmatrix}$ quelconques sur des couples satisfaisant $\xi(0) = 0$ et $\bar{\xi}(T) = 0$,

pour calculer la trace $\int_0^T (\phi\psi + \bar{\phi}\bar{\psi})dt$ on doit se restreindre à de tels espaces. Or avec nos conditions aux bords sur ϕ et ψ nous ne sommes pas dans le même espace, puisque $\bar{\phi}(T)$ et $\psi(0)$ sont libres.

Il nous faut donc compléter l'espace des solutions ϕ et ψ , en introduisant un paramètre par fonction, α (resp. β) pour ϕ (resp. ψ) à ajuster en fonction de la condition au bord pour T (resp. 0).

Déterminons le paramètre α pour $\phi(t)$ en $t = T$:

Puisque $\begin{bmatrix} \phi \\ \bar{\phi} \end{bmatrix}$ est solution de (7.1.8) on peut poser qu'il existe α tel que

$$\partial_\lambda \begin{bmatrix} \phi \\ \bar{\phi} \end{bmatrix} := (K - \lambda)^{-1} \begin{bmatrix} \phi \\ \bar{\phi} \end{bmatrix} + \alpha \begin{bmatrix} \phi \\ \bar{\phi} \end{bmatrix} \quad (7.1.27)$$

On calcul alors la quantité suivante, en $t = T$, on se souvient que $\bar{\psi}(T) = 0$

$$\partial_\lambda \bar{\phi}(T) = (K - \lambda)^{-1} \frac{1}{W} \bar{\psi}(T) \int_0^T (\phi^2(t') + \bar{\phi}^2(t')) dt' + \alpha \bar{\phi} \quad (7.1.28)$$

d'où

$$\alpha = \frac{\partial_\lambda \bar{\phi}(T)}{\bar{\phi}(T)} \quad (7.1.29)$$

On calcul alors de la même façon le paramètre β pour $\psi(t)$ en $t = 0$. On évaluera $\partial_\lambda \psi(0)$, et on obtiendra

$$\beta = \frac{\partial_\lambda \psi(0)}{\psi(0)} \quad (7.1.30)$$

Maintenant que α et β sont déterminés, l'espace des solutions est complété.

Bibliographie

- [1] L.S Schulman : *Techniques and Applications of Path Integration*, Dover Publication, 2005
- [2] R.P Feynman : *Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics* Rev. of Mod. Phys., Vol 20, No.367, 1948
- [3] L.Landau et E.Lifchitz : *Théorie des champs*, Mir, 1970
- [4] Baym : *Lectures on Quantum Mechanics*,W.A. Benjamin Inc. Publishers, 1973
- [5] W.Pauli : *Pauli Lectures on Physics Vol.5 Wave Mechanics*, The MIT Press , 1973
- [6] R.Dashen, B.Hasslacher et A.Neveu : *Nonperturbative methods and extended-hadron models in field theory*, *Physical Review*, Vol 10, No.12,1974
- [7] I.M Gel'Fand, A.M Yaglom : *Integration in Functional Spaces and its Applications in Quantum Physics*, *J.Math.Phy*, Vol 1, No.9,1995
- [8] Messiah : *Mécanique Quantique Tome 1*, Dunod, 1969
- [9] M.Talon : *Quantum theory for the Standard Model*, 1993
- [10] J.Zinn-Justin : *Intégrale de chemin en mécanique quantique : Introduction*, Dover Publication, 2005
- [11] T.D. Lee *Particle physics and introduction to field theory*, Harwood, 1981
- [12] J.E. Moyal : *Quantum mechanics as a statistical theory*, Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, Vol 45, page 99-124, 1949
- [13] E.A Kochetov : *SU(2) coherent-state path integral* J.Math.Phy, Vol 36, No.9, 1995
- [14] M.Stone and K-S Park : *The semiclassical propagator for spin coherent states*, J.Math.Phys, Vol 41, No.12, 2000