

Rapport de Stage

Intégrale de Chemin sur un cercle

Christian Fey
dirigé par M. Talon du LPTHE

14 juin 2012

Dans ce travail nous traitons une particule chargée sur un cercle soumis à un champ magnétique de type Aharonov-Bohm d'abord comme solution de l'équation Schrödinger et puis avec l'intégrale de chemin. Les résultats sont finalement modifiés pour reproduire les interférences d'Aharonov-Bohm.

Table des matières

1	Présentation du LPTHE	2
2	Présentation du sujet	2
2.1	L'intégrale de chemin	2
2.2	Problématique physique	3
3	Travail réalisé	3
3.1	Représentation de Schrödinger	3
3.1.1	Solution de l'équation Schrödinger	3
3.1.2	Propagateur	5
3.2	Intégrale de chemin	6
3.3	Comparaison	8
4	Lien avec l'effet Aharonov-Bohm	8
5	Conclusion	9

1 Présentation du LPTHE

J'ai fait mon stage au Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Énergies (LPTHE) sous la direction de M. Michel Talon avec deux autres étudiants en Master Physique. Le LPTHE est une Unité Mixte de Recherche de l'UPMC et du CNRS situé sur le campus Jussieu. Y travaillent une trentaine de collaborateurs s'intéressant à la théorie quantique des champs et à des sujets proches. Ces sujets sont entre autres

- Physique Mathématique
- Théorie des cordes et Physique au-delà du Modèle Standard
- Physique Statistique et Matière Condensée
- Physique des Particules Élémentaires
- Cosmologie

2 Présentation du sujet

2.1 L'intégrale de chemin

R. P. Feynman a proposé 1948 une approche de la mécanique quantique très différente de celle de Schrödinger et Heisenberg [1]. L'idée est de généraliser les propriétés de la diffraction d'une particule par des fentes de Young (voir Fig. 1). La fonction d'onde au détecteur est donnée par une superposition des deux fonctions d'onde associées aux particules prenant les deux chemins différents (i). Si l'on imagine maintenant ajouter plus de fentes dans l'espace (ii) on arrive dans la limite où les fentes sont très fines et très proches au résultat que la fonction d'onde au détecteur est donnée par la somme des amplitudes complexes associées aux particules qui prennent tous les chemins possibles (iii).

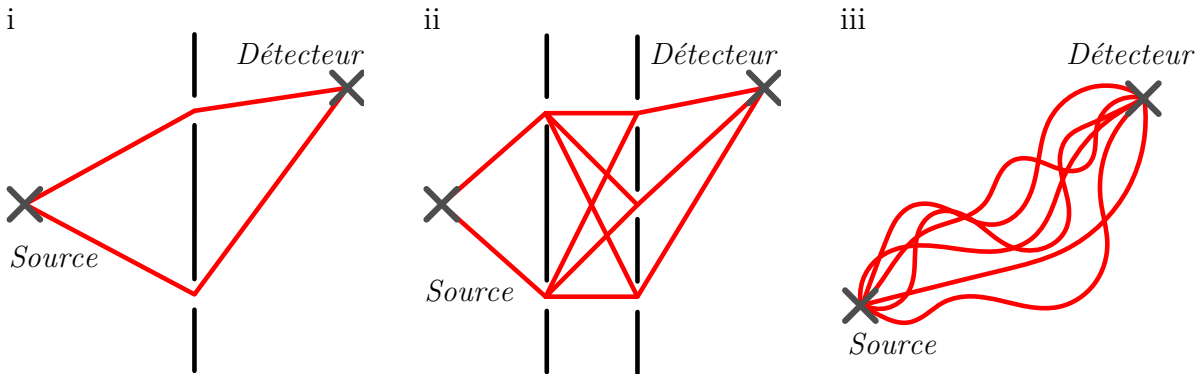


FIGURE 1: L'intégrale de chemin comme généralisation des fentes de Young.

Afin de l'exprimer de manière plus mathématique on regarde le propagateur

$$G(x_2, t_2; x_1, t_1) = \langle x_2 | \hat{U}(t_2, t_1) | x_1 \rangle \quad (1)$$

3 Travail réalisé

C'est la représentation de l'opérateur d'évolution \hat{U} dans la base des états spatiaux $|x\rangle$. Il propage la fonction d'onde de la manière suivante

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, t; x', t') \Psi(x', t') dx' . \quad (2)$$

Feynman nous dit maintenant que G se calcule comme une somme sur tous les chemins possibles $x(t)$ entre $x(t_1) = x_1$ et $x(t_2) = x_2$

$$G(x_2, t_2; x_1, t_1) = \int e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}[x(t)]} dx(t) \quad (3)$$

où $\mathcal{S}[x(t)]$ est la fonctionnelle qui associe au chemin $x(t)$ l'action \mathcal{S} .

$$\mathcal{S}[x(t)] = \int \mathcal{L}(x(t), \dot{x}(t), t) dt \quad (4)$$

ou \mathcal{L} est le Lagrangien. Bien que cette intégrale soit souvent difficile à calculer elle est très intuitive et l'apparition de la grandeur classique \mathcal{S} la rend accessible aux approximations semiclassiques. De plus elle permet une formulation simplifiée et plus intuitive de l'électrodynamique quantique.

2.2 Problématique physique

Durant le stage nous avons eu l'occasion d'apprendre la base de cette théorie de l'intégrale de chemin et le but de ce travail est de l'appliquer à un système physique concret. Nous étudions la dynamique d'une particule quantique de masse m et de charge q contrainte sur un cercle S^1 de rayon r_s dont l'espace $r \leq r_0$ est percé par un champ magnétique unidirectionnel et isotrope $\vec{B} = B(r)\vec{e}_z$ (voir figure 2.2). On l'analyse d'abord avec l'approche usuelle de la représentation de Schrödinger et ensuite en appliquant l'intégrale de chemin afin de comparer les deux approches. C'est intéressant car il s'agit de faire des calculs dans un espace non simplement connexe. Une circonstance qui peut produire des phénomènes étonnants dont l'effet Aharonov-Bohm [2] mais qui a aussi certains inconvénients de calcul que l'on peut éviter avec l'intégrale de chemin comme on le montrera.

3 Travail réalisé

3.1 Représentation de Schrödinger

3.1.1 Solution de l'équation Schrödinger

D'abord nous présentons la solution du système de la Figure 2.2 dans la représentation de Schrödinger. Une description plus détaillée se trouve aussi dans [3].

Avec un système d'unités adapté

$$\hbar = m = q = r_s = 1 \quad (5)$$

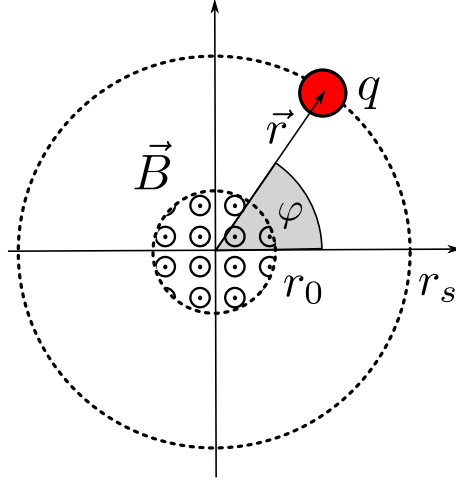


FIGURE 2: Une particule de charge q sur le cercle S^1 de rayon r_s .

le Hamiltonien en coordonnées polaires est donné par

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} (\vec{p} - \vec{A})^2 = \frac{1}{2} \left(i \frac{\partial}{\partial \varphi} + A(\varphi) \right)^2 \quad (6)$$

où \vec{A} est le potentiel magnétique satisfaisant $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ que l'on choisit

$$\vec{A} = \frac{\Phi}{2\pi r} \vec{e}_\varphi \quad \text{pour } r \geq r_0 . \quad (7)$$

En utilisant le Théorème de Stokes on identifie flux magnétique..

$$\Phi = \int \vec{B} d\vec{S} = \int_0^{2\pi} A d\varphi \quad (8)$$

Cela nous amène à l'équation de Schrödinger

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{2} \left(i \frac{\partial}{\partial \varphi} + A(\varphi) \right)^2 \Psi . \quad (9)$$

Pour la résoudre on fait l'hypothèse (inspirée par une transformation de jauge) que

$$\Psi = \tilde{\Psi} \exp \left(i \int_0^\varphi A d\varphi' \right) = \tilde{\Psi} \exp \left(\frac{i\Phi\varphi}{2\pi} \right) \quad (10)$$

qui simplifie (9) en

$$i \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \tilde{\Psi} . \quad (11)$$

3 Travail réalisé

$\tilde{\Psi}$ satisfait donc l'équation de Schrödinger d'une particule libre sur S^1 dont les solutions stationnaires normalisées d'énergie E sont

$$\tilde{\Psi}_E^\pm(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\sqrt{2E}\varphi} \quad (12)$$

La continuité

$$\Psi(0) = \Psi(2\pi) \quad (13)$$

implique en utilisant (10) et (12) la quantification de l'énergie

$$\left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} A d\varphi' \pm \sqrt{2E} \right) = \lambda \in \mathbb{Z} \quad (14)$$

où le signe \pm correspond au sens de propagation. Avec Φ l'équation (14) s'écrit aussi

$$E_\lambda = \frac{1}{2} \left(\lambda - \frac{\Phi}{2\pi} \right)^2. \quad (15)$$

On voit donc que le champ magnétique fait disparaître la dégénérescence des états libres ($\Phi = 0$) dont l'énergie est indépendante du sens de rotation ($\text{sgn}[\lambda - \Phi/2\pi]$). Cette dégénérescence est plausible car on imagine le champ magnétique créé par un courant électrique dans une bobine et les deux cas, tourner avec ou contre le sens de courant, ne sont pas équivalents pour notre particule quantique. Pourtant l'effet reste étonnant car le champ magnétique influence l'énergie bien qu'il se trouve hors de l'espace classiquement accessibles aux particules et aucune force n'est exercée.

Les solutions de (9) sont finalement

$$\Psi_\lambda(\varphi, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{i}{2} \left(\lambda - \frac{\Phi}{2\pi} \right)^2 t \right] e^{i\lambda\varphi} \quad (16)$$

3.1.2 Propagateur

Afin de comparer cette première approche aux résultats qui vont suivre on calcule maintenant le propagateur (1) à l'aide des solutions (16)

$$\begin{aligned} \langle \varphi_2 | \hat{U}(t_2, t_1) | \varphi_1 \rangle &= \sum_\lambda \langle \varphi_2 | \Psi_\lambda \rangle \langle \Psi_\lambda | \hat{U} | \Psi_\lambda \rangle \langle \Psi_\lambda | \varphi_1 \rangle \\ &= \sum_\lambda \Psi_\lambda(\varphi_2) e^{-iE_\lambda(t_2-t_1)} \Psi_\lambda^*(\varphi_1) \\ &= \frac{1}{2\pi} \exp \left(-\frac{i}{2} \left(\frac{\Phi}{2\pi} \right)^2 (t_2 - t_1) \right) \\ &\quad \times \sum_\lambda \exp \left[-\frac{i\lambda^2(t_2 - t_1)}{2} \right] \exp \left[i\lambda \left(-(\varphi_2 - \varphi_1) - \frac{\Phi(t_2 - t_1)}{2\pi} \right) \right] \end{aligned} \quad (17)$$

La somme sur λ se laisse aussi exprimer à l'aide de la fonction Theta de Jacobi

$$\Theta_3(z, t) = \sum_{\lambda \in \mathbb{Z}} e^{i\pi\lambda^2 t} e^{2i\lambda z} \quad (18)$$

et on obtient à la fin

$$G(\varphi_2, \varphi_1; t_2, t_1) = \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{i}{2} \left(\frac{\Phi}{2\pi}\right)^2 (t_2 - t_1)\right) \Theta_3\left(-\frac{\varphi_2 - \varphi_1}{2} - \frac{\Phi(t_2 - t_1)}{4\pi}, -\frac{t_2 - t_1}{2\pi}\right) \quad (19)$$

3.2 Intégrale de chemin

Essayons maintenant d'appliquer l'intégrale de chemin à notre problème (on suit [4] dans les grandes lignes). Pour simplifier le calcul sur tous les chemins possibles (3) on va se servir d'une bijection entre des trajectoires $\varphi(t)$ sur la sphère S^1 et les trajectoires sur la droite \mathbb{R} qui nous permet d'utiliser un résultat déjà connu (démonstration dans [4]), le propagateur d'une particule libre dans \mathbb{R}

$$G_{\text{lib}}^{\mathbb{R}}(x_2, t_2; x_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{2i\pi(t_2 - t_1)}} \exp\left(\frac{i(x_2 - x_1)^2}{2(t_2 - t_1)}\right). \quad (20)$$

L'idée consiste à ajouter à chaque trajectoire $\varphi(t)$ un nombre $\gamma(t)$ qui compte le nombre total de tours effectués. Et puis on transforme

$$\varphi(t) \in S^1 \mapsto \varphi(t) \in \mathbb{R}, \quad \text{tel que} \quad \varphi(t) \mapsto \varphi(t) + 2\pi\gamma(t) \quad (21)$$

En outre on divise l'ensemble de toutes les trajectoires $\{\varphi(t)\}$ entre $\varphi(t_1) = \varphi_1$ et $\varphi(t_2) = \varphi_2$ en sous ensembles $\{\varphi_n(t)\} = \{\varphi(t) \mid \gamma(t_2) = n\}$ définies par le nombre total n de tours effectués à t_2 . Dans la figure 3 on représente deux exemples pour préciser les idées.

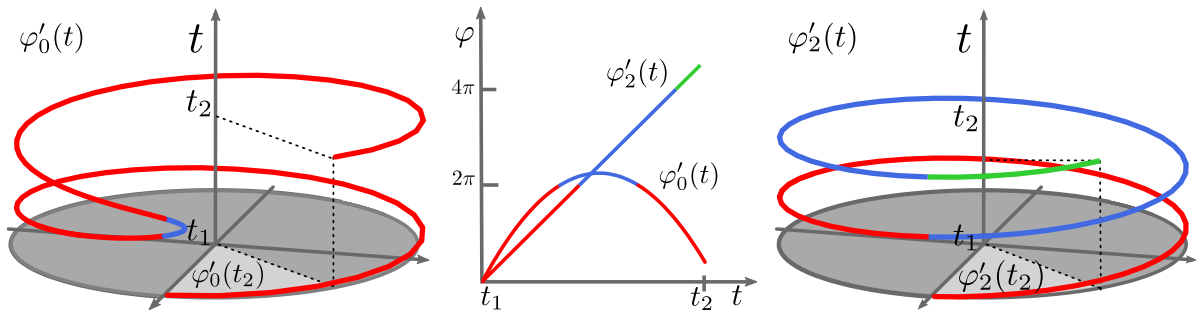


FIGURE 3: Deux trajectoires exemplaires $\varphi'_0(t) \in \{\varphi_0(t)\}$ et $\varphi'_2(t) \in \{\varphi_2(t)\}$ effectuant 0 ou 2 tours et leur image dans l'espace \mathbb{R} .

3 Travail réalisé

De la même façon on décompose le propagateur en sommant sur n

$$G(\varphi_2, t_2; \varphi_1, t_1) = \int_{\{\varphi(t)\}} d\varphi(t) e^{i\mathcal{S}[\varphi(t)]} = \sum_n \underbrace{\int_{\{\varphi_n(t)\}} d\varphi_n(t) e^{i\mathcal{S}[\varphi_n(t)]}}_{:=G_n} = \sum_n G_n . \quad (22)$$

Et grâce à la relation (21) on identifie

$$G_n(\varphi_2, t_2; \varphi_1, t_1) = G^{\mathbb{R}}(\varphi_2 + 2\pi n, t_2; \varphi_1, t_1) \quad (23)$$

ou $G^{\mathbb{R}}$ est le propagateur d'une particule dans \mathbb{R} avec le Lagrangien

$$\mathcal{L}^{\mathbb{R}} = \frac{1}{2}\dot{\varphi}^2 + A(\varphi)\dot{\varphi} . \quad (24)$$

Avec (3) on peut exprimer $G^{\mathbb{R}}$ à l'aide de $G_{\text{lib}}^{\mathbb{R}}$

$$\begin{aligned} G^{\mathbb{R}}(\varphi_2, t_2; \varphi_1, t_1) &= \int_{\{\varphi(t)\}} e^{i\mathcal{S}[\varphi(t)]} d\varphi(t) = \int_{\{\varphi(t)\}} e^{i\mathcal{S}_{\text{lib}}[\varphi(t)] + i \int_{t_1}^{t_2} A\dot{\varphi} dt} d\varphi(t) \\ &= \int_{\{\varphi(t)\}} e^{i\mathcal{S}_{\text{lib}}[\varphi(t)] + i \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} Ad\varphi} d\varphi(t) = e^{i \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} Ad\varphi} G_{\text{lib}}^{\mathbb{R}}(\varphi_2, t_2; \varphi_1, t_1) . \end{aligned} \quad (25)$$

Et en mettant ensemble (22), (23) et (25) on conclue

$$G(\varphi_2, t_2; \varphi_1, t_1) = \sum_n \exp\left(i \int_{\varphi_1}^{\varphi_2 + 2\pi n} Ad\varphi\right) G_{\text{lib}}^{\mathbb{R}}(\varphi_2 + 2\pi n, t_2; \varphi_1, t_1) \quad (26)$$

Et comme

$$\int_{\varphi_1}^{\varphi_2 + 2\pi n} Ad\varphi = \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} Ad\varphi + \int_{\varphi_2}^{\varphi_2 + 2\pi n} Ad\varphi = \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} Ad\varphi + n \int_{\varphi_2}^{\varphi_2 + 2\pi} Ad\varphi = \frac{\Phi(\varphi_2 - \varphi_1)}{2\pi} + n\Phi \quad (27)$$

on obtient

$$G(\varphi_2, t_2; \varphi_1, t_1) = \exp\left(\frac{i\Phi(\varphi_2 - \varphi_1)}{2\pi}\right) \sum_n e^{in\Phi} G_{\text{lib}}^{\mathbb{R}}(\varphi_2 + 2\pi n, t_2; \varphi_1, t_1) \quad (28)$$

En utilisant maintenant l'expression explicite de $G_{\text{lib}}^{\mathbb{R}}$ (20) et en introduisant en nouvelle la fonction Theta (18) on déduit finalement pour le propagateur

$$\begin{aligned} G(\varphi_2, t_2; \varphi_1, t_1) &= \left(\frac{1}{2\pi i(t_2 - t_1)}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i\Phi(\varphi_2 - \varphi_1)}{2\pi}\right) \exp\left(\frac{i(\varphi_2 - \varphi_1)^2}{2(t_2 - t_1)}\right) \\ &\quad \Theta_3\left(\frac{\Phi}{2} + \frac{\pi(\varphi_2 - \varphi_1)}{t_2 - t_1}, \frac{2\pi}{T}\right) . \end{aligned} \quad (29)$$

3.3 Comparaison

- **Coïncidence**

Les deux propagateurs (19) et (29) coïncident bien l'un avec l'autre. Pour le démontrer on se sert d'une propriété remarquable de la fonction Θ_3 , l'invariance modulaire

$$\Theta_3(z, t) = (-it)^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{z^2}{i\pi t}} \Theta_3\left(\frac{z}{t}, -\frac{1}{t}\right) \quad (30)$$

qui permet d'alterner entre les deux représentations (19) et (29).

- **Rôle des conditions aux limites**

Les conditions aux limites sont ici des conditions périodiques. Dans l'approche de Schrödinger on les impose explicitement dans (13). On pourrait objecter que la continuité de Ψ implique la discontinuité de la fonction $\tilde{\Psi}$ dans (10) en $\varphi = 2\pi$. Mais ce n'est pas grave car l'idée était de trouver une solution de (9) dans \mathbb{R} et le rendre **dans la suite** périodique pour obtenir une solution dans S^1 . Au contraire les conditions aux limites arrive plus implicitement dans la section 3.2. C'est l'application entre S^1 et \mathbb{R} en (21) et l'identification (23) qui rend Ψ continue plus naturellement. Un autre exemple de cette propriété se trouve dans le traitement de l'effet d'Aharonov-Bohm dans la section suivante.

4 Lien avec l'effet Aharonov-Bohm

En effet notre système physique discuté est très proche du système présenté dans la figure 4 proposé par Aharonov et Bohm [2] pour illustrer l'effet Aharonov-Bohm. Ils ont montré que la diffraction des électrons par des fentes est influencée par un champ magnétique \vec{B} , même s'il est situé hors de leur espace classiquement accessible (ici on a $B = 0$ partout sauf entre les fentes). Plus précisément la superposition de deux fonctions d'onde Ψ_1 et Ψ_2 est donné par

$$|\Psi_1 + \Psi_2|^2 = |\Psi_1^{(0)}|^2 + |\Psi_2^{(0)}|^2 + 2\Re[\Psi_1^{(0)*}\Psi_2^{(0)}] \cos \Phi \quad (31)$$

où Φ est le flux entouré et $\Psi_1^{(0)}$ et $\Psi_2^{(0)}$ sont les fonction d'onde du système avec $B = \Phi = 0$.

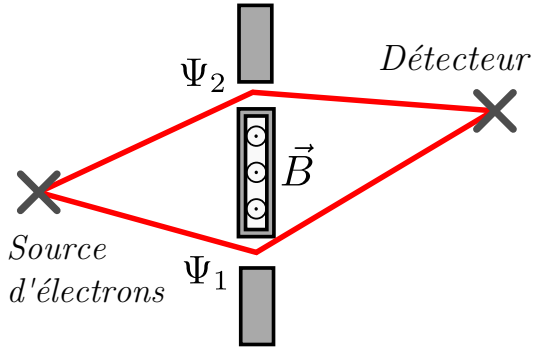


FIGURE 4: Effet Aharonov-Bohm

5 Conclusion

Pour reproduire le même résultat (31) il suffit pour nous de modifier l'expression du propagateur dans (25) seulement un peu [5]. Si l'on garde que les termes pour $n = 0$ et $n = -1$ on obtient

$$G_{AB}(\varphi_2, t_2; \varphi_1, t_1) = \exp\left(\frac{i\Phi(\varphi_2 - \varphi_1)}{2\pi}\right) \left[\underbrace{G_{\text{lib}}^{\mathbb{R}}(\varphi_2, t_2; \varphi_1, t_1)}_{=G_{\text{lib};0}^{\mathbb{R}}} + e^{i\Phi} \underbrace{G_{\text{lib}}^{\mathbb{R}}(\varphi_2 + 2\pi, t_2; \varphi_1, t_1)}_{=G_{\text{lib};-1}^{\mathbb{R}}} \right]. \quad (32)$$

Cela revient à interdire aux particules d'effectuer des tours complets. Prenons maintenant un état initial quelconque $\Psi(\varphi, 0)$. Son évolution est donnée par

$$\begin{aligned} \Psi(\varphi, t) &= \int_0^{2\pi} G_{AB}(\varphi, t; \varphi', 0) \Psi(\varphi', 0) d\varphi' \\ &= \exp\left(\frac{i\Phi(\varphi_2 - \varphi_1)}{2\pi}\right) \left[\int_0^{2\pi} G_{\text{lib};0}^{\mathbb{R}}(\varphi, t; \varphi', 0) \Psi(\varphi', 0) d\varphi' \right. \\ &\quad \left. + e^{i\Phi} \int_0^{2\pi} G_{\text{lib};-1}^{\mathbb{R}}(\varphi, t; \varphi', 0) \Psi(\varphi', 0) d\varphi' \right] \\ &= \exp\left(\frac{i\Phi(\varphi_2 - \varphi_1)}{2\pi}\right) \left[\Psi_1^{(0)} + e^{i\Phi} \Psi_2^{(0)} \right]. \end{aligned} \quad (33)$$

On a alors bien

$$|\Psi|^2 = |\Psi_1^{(0)}|^2 + |\Psi_2^{(0)}|^2 + 2\Re \left[\Psi_1^{(0)*} \Psi_2^{(0)} \right] \cos \Phi \quad (34)$$

5 Conclusion

Nous avons donc vu comment l'intégrale chemin s'applique aux systèmes particuliers et que l'on reproduit des résultats déjà connus. Ainsi, dans notre cas, l'intégrale chemin permet donc une amélioration de la compréhension des phénomènes. Cela est spécialement utile pour l'effet Aharonov-Bohm dont l'existence a été contestée jusqu'à son observation expérimentale [7] par R.G Chambers en 1960 en dépit de sa description théorique. Mais le modèle d'une charge sur un cercle (figure 2.2) est également intéressant. Par exemple on déduit de (15) que le schéma des bandes d'énergie est périodique dans le flux Φ . Celui permet de décrire des courants électriques dans des anneaux de métal très petits, une phénomène étudié dans le cadre de la physique mésoscopique [6] [8]. Compte tenu des défauts cristallins on déduit finalement des structures qui ressemblent à ceux des semi-conducteurs [6].

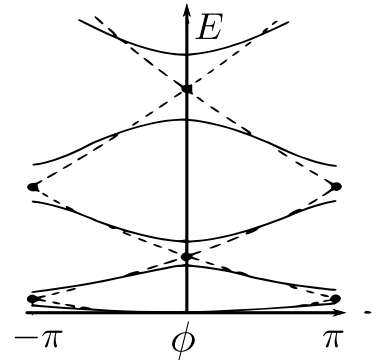


FIGURE 5: Bande d'énergie dans un anneau métallique idéal (courbe hachurée), avec des défauts cristallins (courbe continue) [6].

Mais en plus de ces perspectives intéressantes le bénéfice important de ce stage à été l'acquisition de connaissances approfondies sur l'intégrale de chemin qui vont certainement faciliter ma compréhension de l'électrodynamique quantique l'année prochaine.

Références

- [1] R. P. Feynman. Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics. *Rev. Mod. Phys.*, 20 :367–387, 1948.
- [2] Y. Aharonov and D. Bohm. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *Phys. Rev.*, 115 :485–491, 1959.
- [3] D. J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Prentice Hall, 1995.
- [4] L.S. Schulman. *Techniques and Applications of Path Integration*. Dover Publications, Inc., 1981.
- [5] C. Gerry and V. Singh. Remarks on the effects of topology in the aharonov-bohm effect. *Il Nuovo Cimento B (1971-1996)*, 73 :161–170, 1983. 10.1007/BF02721785.
- [6] Ulrich Eckern. Sind dauerströme noch normal? *Physik in unserer Zeit*, 25(4) :152–157, 1994.
- [7] R. G. Chambers. Shift of an electron interference pattern by enclosed magnetic flux. *Phys. Rev. Lett.*, 5 :3–5, 1960.
- [8] Barbara Goss Levi. Experiments remove resistance to the notion of persistent currents. *Physics Today*, 45(4) :17–19, 1992.