HAL open science

Méthodes fonctionnelles en Mécanique Quantique : Une présentation simple

Mabrouk Benhamou

To cite this version:

Mabrouk Benhamou. Méthodes fonctionnelles en Mécanique Quantique : Une présentation simple. DEA. Année 2004Faculté des Sciences Ben M'sik, 2007. cel-00140579

HAL Id: cel-00140579

https://cel.hal.science/cel-00140579v1

Submitted on 6 Apr 2007

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

METHODES FONCTIONNELLES EN MECANIQUE QUANTIQUE : UNE PRESENTATION SIMPLE

Mabrouk Benhamou

Laboratoire de Physique des Polymères et Phénomènes Critiques

Faculté des Sciences Ben M'sik, B.P. 9755, Casablanca, Maroc

(Année académique 2002 - 2003)

Résumé

Le but de ce cours dispensé en DEA est d'esquisser, d'une manière pédagogique, les méthodes fonctionnelles (intégrales de chemins) en Mécanique Quantique. D'entrée de jeu, je commence par un rappel des fondements de la Mécanique Analytique et de la Mécanique Quantique. En suite, je rappelle la quantification par la méthode des "Intégrales de Chemins". Il s'agit d'une méthode plus élégante que la quantification canonique usuelle, qui se base sur la notion importante du propagateur. Parmi les vertus d'une telle méthode est qu'elle est à la base de l'approximation semi-classique de la Mécanique Quantique. Aussi, elle constitue le point de départ du formalisme fonctionnel de la Théorie Quantique des Champs, qui mène aux techniques de perturbation par rapport à la constante de couplage et à la théorie de la renormalisation.

Chapitre 1

Fondements de la Mécanique Analytique.

Nous nous proposons de passer en revue les différents formalismes de la Mécanique Classique. Nous insisterons sur les plus couramment utilisés, à savoir les formalismes de Newton, de Lagrange ou de Hamilton. Cela veut dire que nous ignorerons le formalisme de Hamilton-Jacobi, qui est basé sur l'action de Maupertuis. Nous signalons que ce dernier est également intéressant, surtout quand on veut évaluer les corrections semi-classiques de la Mécanique Quantique.

Nous notons que tous ces formalismes sont équivalents pour la description de la physique. Le choix du formalisme adéquat est décrit par la nature du problème à étudier.

Formalisme Newtonien.

Pour simplifier, considérons une particule de masse m, qui est soumise à l'action d'une force dérivant d'un potentiel V. Nous supposons que l'espace dans lequel est plongée cette particule est de dimension 1. Le mouvement de la particule est alors régi par l'équation de Newton

$$m\,\ddot{x} = -\frac{dV}{dx}\ , \tag{1.1}$$

où le second membre décrit l'action de la force, et $\ddot{x}$ désigne la dérivée seconde de la position x par rapport au temps t.

En dimension quelconque d, nous aurons naturellement

$$m\frac{d^2\overrightarrow{r}}{dt^2} = -\overrightarrow{\nabla}V \ . \tag{1.2}$$

Ici, $\overrightarrow{r} \in \mathbf{R}^d$ est le vecteur position et $\overrightarrow{\nabla}$ l'opérateur gradient à d dimensions.

Formalisme Lagrangien.

Equation d'Euler-Lagrange. Désignons par

$$T\left(\dot{x}\right) = \frac{m}{2}\,\dot{x}^2 \ , \tag{1.3}$$

l'énergie cinétique de la particule, où $\dot{x}$ représente la dérivée première de la position x par rapport au temps t (vitesse).

Considérons la fonction à deux variables $\left(x, \dot{x}\right)$

$$L\left(x, \dot{x}\right) = T\left(\dot{x}\right) - V\left(x\right) \ . \tag{1.4}$$

La dérivation de la relation (1.4) par rapport à la variable x, nous donne

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -\frac{dV}{dx} \ . \tag{1.5}$$

La dérivée de L par rapport à la vitesse $\dot{x}$ est

$$\frac{\partial L}{\partial\,\dot{x}} = m\,\dot{x} \ . \tag{1.6}$$

D'après la relation (1.1) de Newton, nous avons

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\,\dot{x}}\right) = -\frac{dV}{dx} \ . \tag{1.7}$$

En tenant compte de la relation (1.5), nous obtenons l'équation dite d'Euler-Lagrange

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\,\dot{x}}\right) = 0 \ . \tag{1.8}$$

La fonction L est appelée "fonction de Lagrange" ou encore "Lagrangien".

Il est à noter que si la force ne dérive pas d'un potentiel (c'est le cas des forces de frottement), le Lagrangien n'est pas de la forme (1.4). Dans la section qui va suivre, nous dériverons précisément les équations d'Euler-Lagrange pour des situations quelconques.

Principe de moindre action. Un siècle après que Newton énonca sa fameuse loi fondamentale, Lagrange élabora sa mécanique analytique (1787). Au lieu de chercher la position $x(t)$ et la vitesse $v(t)$ de la particule, connaissant sa position et sa vitesse initiales $x(0)$ et $v(0)$, Lagrange se posa la question sous un autre angle. Quelle serait la trajectoire réellement suivie par la particule, sachant qu'à l'instant initial t_i, sa position est x_i, et à l'instant final t_f, sa position est x_f ? A priori, on peut imaginer plusieurs chemins possibles, mais quelle serait la loi qui détermine la bonne trajectoire ?

Pour ce faire, l'on suppose qu'il existe une fonction $L\left(x, \dot{x}; t\right)$, qui dépend de la position x et de la vitesse $\dot{x}$, et éventuelement du temps d'une manière explicite[1]. L est la fonction de Lagrange ou encore Lagrangien. A titre d'exemple, pour une force conservative, nous avons la relation simple reliant le Lagrangien L aux énergies cinétique T et potentielle V : $L = T - V$.

A toute trajectoire émaginée, l'on associe la quantité

$$A[x] = \int_{t_i}^{t_f} dt L\left(x, \dot{x}; t\right) \ , \tag{1.9}$$

appelée "action", qui est une fonctionnelle de la position x.

Désignons par $X(t)$ la trajectoire réellement suivie par la particule. D'après Lagrange, la trajectoire effectivement suivie par la particule est celle qui rend l'action extrêmale (voire minimale).

Soit $x(t)$ une trajectoire infiniment voisine de la trajectoire réelle, nous écrivons

$$x(t) = X(t) + \delta x(t) \ . \tag{1.10}$$

[1] C'est le cas, par exemple, d'une charge dans un champ électrique alternatif.

Nous avons aussi

$$\dot{x}\ (t) = \dot{X}\ (t) + \delta\ \dot{x}\ (t)\ . \tag{1.11}$$

Par la suite, nous admettrons la commutativité

$$\delta\ \dot{x}\ (t) = \frac{d}{dt}\left[\delta x\,(t)\right]\ . \tag{1.12}$$

Par hypothèse, nous avons

$$\delta x\,(t_i) = \delta x\,(t_f) = 0\ . \tag{1.13}$$

La variation de l'action s'écrit

$$\delta A\,[x] = A\,[X + \delta x] - A\,[X] = \int_{t_i}^{t_f} dt\left[L\left(X + \delta x, \dot{X} + \delta\ \dot{x}; t\right) - L\left(X, \dot{X}; t\right)\right]\ . \tag{1.14}$$

Par ailleurs,

$$L\left(X + \delta x, \dot{X} + \delta\ \dot{x}; t\right) = L\left(X, \dot{X}; t\right) + \delta x\frac{\partial L}{\partial X} + \delta\ \dot{x}\ \frac{\partial L}{\partial\ \dot{X}} + ...\ . \tag{1.15}$$

Soit

$$\delta A\,[x] = \int_{t_i}^{t_f} dt\left[\delta x\frac{\partial L}{\partial X} + \delta\ \dot{x}\ \frac{\partial L}{\partial\ \dot{X}}\right]\ . \tag{1.16}$$

Par intégration par parties du deuxième terme du second membre de la relation (1.16), nous obtenons

$$\delta A\,[x] = \int_{t_i}^{t_f} dt\delta x\left[\frac{\partial L}{\partial X} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\ \dot{X}}\right)\right]\ . \tag{1.17}$$

L'action est stationnaire, c'est-à-dire que nous devons avoir : $\delta A\,[x] = 0$. Ceci doit avoir lieu pour toute variation δx. D'où l'équation d'Euler-Lagrange

$$\frac{\partial L}{\partial X} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\ \dot{X}}\right) = 0\ . \tag{1.18}$$

Pour un système conservatif où $L = T - V$, l'on retrouve bien la relation (1.18).

L'équation d'Euler-Lagrange précédente s'étend aisément à un système à s degrés de liberté de nature quelconque. Nous désignons par $(q_1, ..., q_s)$ les coordonnées généralisées associées. Ainsi, pour un système à N particules, nous avons $s = 3N$

degrés de liberté, qui sont les coordonnées (x_i, y_i, z_i) des particules. Pour un pendule simple, nous avons *un* seul degré de liberté, qui est l'angle θ que fait le fil avec l'axe vertical. Pour l'étude de la mécanique d'un solide, l'on a besoin de 6 degrés de liberté, qui sont les 3 coordonnées (x_G, y_G, z_G) du son centre de masse G et les 3 angles d'Euler (θ, φ, ψ).

Pour un système dynamique quelconque, on se donne une fonction de Lagrange : $L\left(q_1, ..., q_s, \dot{q}_1, ..., \dot{q}_s; t\right)$, et on construit une action par intégration sur la variable temps, qui est une fonctionnelle des coordonnées généralisées

$$A\left[q_1, ..., q_s\right] = \int_{t_i}^{t_f} dt L\left(q_1, ..., q_s, \dot{q}_1, ..., \dot{q}_s; t\right) \ . \tag{1.19}$$

La loi de mouvement d'un tel système s'obtient par application du Principe de Moindre Action, c'est-à-dire $\delta A = 0$. Ceci fournit les équations d'Euler-Lagrange généralisées

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = 0 \ , \qquad (i = 1, ..., s) \ . \tag{1.20}$$

Remarque 1 : *Sans doute, l'avantage principal du formalisme Lagrangien réside dans le fait que les équations d'Euler-Lagrange sont valables dans n'importe quel système de coordonnées. Par exemple, pour une particule de position (x, y, z), ces équations restent vraies lorsqu'on passe aux coordonnées sphériques (r, θ, φ). Mais, d'une manière générale, comme nous l'avons noté ci-dessus, ces équations s'appliquent à n'importe quel système, pour lequel on peut définir une fonction de Lagrange.*

Remarque 2 : *Malgré cet avantage, ce formalisme souffre d'un inconvénient majeur, à savoir que le Lagrangien n'est pas une quantité intrinsèque, en ce sens qu'il est défini à un arbitraire près. Plus précisément, si l'on ajoute au Lagrangien la quantité : $\dot{q}_i \ f\left(q_i\right)$ relative à une coordonnée généralisée q_i, les équations d'Euler-Lagrange restent inchangées, et ceci pour toute fonction arbitraire dérivable f.*

Pour s'affranchir de cet arbitraire, nous allons introduire le formalisme canonique de Hamilton. Pour cela, nous définirons l'énergie du système, ensuite nous ferons une transformation de Legendre sur L.

Formalisme Hamiltonien.

Energie du système. D'entrée de jeu, supposons que le système est isolé, auquel cas : $\partial L/\partial t = 0$. Cela veut dire que le Lagrangien n'est pas une fonction explicite du temps, mais il en dépend implicitement à travers les coordonnées généralisées q_i et leurs dérivées $\dot{q}_i$. Calculons alors la dérivée totale de L par rapport à t

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{i=1}^{s} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \, \dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial \, \dot{q}_i} \, \ddot{q}_i \right) \ , \tag{1.21}$$

qui vaut, en tenant compte des équations d'Euler-Lagrange (20),

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{i=1}^{s} \frac{d}{dt} \left(\dot{q}_i \, \frac{\partial L}{\partial \, \dot{q}_i} \right) \ . \tag{1.22}$$

Soit

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^{s} \dot{q}_i \, \frac{\partial L}{\partial \, \dot{q}_i} - L \right) = 0 \ . \tag{1.23}$$

Posons

$$E = \sum_{i=1}^{s} \dot{q}_i \, \frac{\partial L}{\partial \, \dot{q}_i} - L \ , \tag{1.24}$$

qui est une intégrale première de mouvement (ou constante de mouvement). C'est l'énergie du système. Ceci nous conduit immédiatement au formalisme Hamiltonien.

Remarquer, en passant, que la quantité E est intrinsèque : si l'on ajoute à L la fonction arbitraire $\dot{q}_i \, f(q_i)$, E ne change pas.

Moments conjugués. Nous posons

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \, \dot{q}_i} \ , \qquad\qquad (i = 1, ..., s) \ , \tag{1.25}$$

qui est la quantité intervenant dans l'expression (1.24) de l'énergie, elle est appelée *moment conjugué* de la variable q_i. Ainsi, pour une particule de masse m et de position x, $p = m\,\dot{x}$, c'est-à-dire que ce moment conjugué coïncide avec la quantité de mouvement (ou impulsion). En revanche, si les forces s'exerçant sur le système dépendent des vitesses (forces de frottement, etc.), ou si l'on se place dans un système de coordonnées autre que le système cartésien, le moment conjugué ne coïncide pas avec la quantité de mouvement.

Au lieu de travailler avec les coordonnées $\left(q_1, ..., q_s, \dot{q}_1, ..., \dot{q}_s\right)$, il serait commode de travailler plutôt avec les variables $(q_1, ..., q_s; p_1, ..., p_s)$, qui vont définir l'état du système.

Lorsqu'on passe des premières coordonnées aux dernières, comment se transforme la fonction de Lagrange L ? La réponse est que cette fonction se transforme en lui appliquant une transformée de Legendre. Nous regardons L comme une fonction des vitesses $\left(\dot{q}_1, ..., \dot{q}_s\right)$ (les coordonnées généralisées sont fixées). Les variables conjuguées de Legendre de ces variables sont simplement les moments conjugués $(p_1, ..., p_s)$. La transformée de Legendre de L est alors

$$H\left(q_1, ..., q_s; p_1, ..., p_s\right) = \sum_{i=1}^{s} p_i\,\dot{q}_i - L\left(q_1, ..., q_s, \dot{q}_1, ..., \dot{q}_s\right) \ , \tag{1.26}$$

où la fonction H est appelée fonction de Hamilton ou encore Hamiltonien. Pour un système conservatif, cette fonction coïncide avec l'énergie E, définie par l'expression (1.24). Nous avons les conditions de stationnarité

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial\,\dot{q}_i} \ , \qquad\qquad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \ . \tag{1.27}$$

$(i = 1, ..., s)$.

Equations de Hamilton. En tenant compte des relations précédentes, il est facile de voir que la dérivée totale du Hamiltonien H est

$$dH = \sum_{i=1}^{s}\left(\dot{q}_i\,dp_i - \dot{p}_i\,dq_i\right) - \frac{\partial L}{\partial t}dt \ , \tag{1.28}$$

soit

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \ , \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \ , \tag{1.29}$$

qui constituent les équations de Hamilton. Elles sont de premier ordre en q_i et p_i, et symétriques (au signe près) dans ces mêmes variables.

Nous faisons remarquer que les équations précédentes peuvent être obtenues également par le Principe de Moindre Action. En effet, d'après la relation (1.27), nous avons

$$Ldt = \sum_{i=1}^{s} p_i dq_i - Hdt \ . \tag{1.30}$$

L'action s'écrit alors comme

$$A\left[q_1, ..., q_s; p_1, ..., p_s\right] = \int_{t_i}^{t_f} \left(\sum_{i=1}^{s} p_i dq_i - Hdt \right) \ . \tag{1.31}$$

Exigeons que cette action soit stationnaire par rapport à ses variables $q_k(t)$ et $p_k(t)$, avec les conditions aux bords : $\delta q_k(t_i) = \delta q_k(t_f) = 0$. Aucune condition n'est imposée aux variables $p_k(t)$. Nous avons alors la variation de l'action

$$\delta A = \int_{t_i}^{t_f} dt \sum_{i=1}^{s} \left[\delta p_i \left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) + \left(p_i \frac{d\delta q_i}{dt} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i \right) \right] \ . \tag{1.32}$$

Par intégration par parties du terme en $d\delta q_i/dt$, l'on trouve

$$\delta A = \int_{t_i}^{t_f} dt \sum_{i=1}^{s} \left[\delta p_i \left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) - \delta q_i \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \right] \ . \tag{1.33}$$

L'action est stationnaire, auquel cas : $\delta I = 0$, et ceci pour toutes variations δq_i et δp_i ; d'où les équations de Hamilton (1.29).

Evolution dans le temps. Considérons une grandeur $F(q_1, ..., q_s; p_1, ..., p_s; t)$ quelconque définie sur l'espace des phases $\mathcal{E}_P$. Nous nous proposons d'étudier l'évolution dans le temps d'une telle grandeur. Sa dérivée totale s'écrit

$$dF = \sum_{i=1}^{s} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} dp_i \right) + \frac{\partial F}{\partial t} dt \ . \tag{1.34}$$

En utilisant les équations de Hamilton (29), nous obtenons

$$\dot{F}=\sum_{i=1}^{s}\left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial p_i}\right)+\frac{\partial F}{\partial t}\ . \tag{1.35}$$

Par définition, le crochet de Poisson de deux grandeurs F et G est la quantité

$$\{F,G\}=\sum_{i=1}^{s}\left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i}-\frac{\partial G}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial p_i}\right)\ . \tag{1.36}$$

En terme du crochet de Poisson, la relation (1.35) se réécrit

$$\dot{F}=\{F,H\}+\frac{\partial F}{\partial t}\ . \tag{1.37}$$

C'est l'équation d'évolution de la grandeur F. Remarquer que cette évolution est régie par le Hamiltonien qui reflète la physique. Si la grandeur F ne dépend pas explicitement du temps et son crochet de Poisson avec le Hamiltonien est nul, alors elle est une constante de mouvement.

Les équations de Hamilton peuvent se réécrire d'une manière symétrique en terme du crochet de Poisson

$$\dot{q}_i=\{q_i,H\}\ , \qquad \dot{p}_i=\{p_i,H\}\ . \tag{1.38}$$

$(1\leq i\leq s)$.

Nous dressons, ici, une liste de propriétés du crochet de Poisson

$$\{F,G\}=-\{G,F\}\,, \qquad \text{(antisymétrie)}\ , \tag{1.39}$$

$$\{\alpha F+\beta G,H\}=\alpha\{F,H\}+\beta\{G,H\}\ , \qquad \text{(bilinarité)}\ , \tag{1.40}$$

$$\{FG,H\}=F\{G,H\}+\{F,H\}G\ , \tag{1.41}$$

$$\{q_i,F(p_j)\}=\partial F/\partial p_i\ , \tag{1.42}$$

$$\{F(q_j),p_i\}=\partial F/\partial q_i\ , \tag{1.43}$$

$$\{q_i,q_j\}=\{p_i,p_j\}=0\ , \qquad \{q_i,p_j\}=\delta_{ij}\ , \tag{1.44}$$

$$\{F,\{G,H\}\}+\{G,\{F,H\}\}+\{H,\{G,F\}\}=0\ , \qquad \text{(Identité de Jacobi)}\ , \tag{1.45}$$

$$\frac{d}{dt}\{F,G\}=\left\{\dot{F},G\right\}+\left\{F,\dot{G}\right\}\ . \tag{1.46}$$

Quantification canonique.

Le principe de correspondance stipule que le passage de la Mécanique Classique à la Mécanique Quantique se fait en remplaçant les positions q_i et les impulsions p_i par les opérateurs position $\widehat{q}_i$ et impulsion $\widehat{p}_i$, qui agissent sur l'espace de Hilbert $\mathcal{E}_H$.

Donc, toute grandeur physique classique $F(q_i, p_i)$ définie sur l'espace des phases $\mathcal{E}_P$ devient un opérateur $\widehat{F}(\widehat{q}_i, \widehat{p}_i)$ agissant sur $\mathcal{E}_H$. D'un autre côté, le crochet de Poisson devient un commutateur

$$\{F, G\} \quad \rightarrow \quad \frac{1}{i\hbar}\left[\widehat{F}, \widehat{G}\right] \ . \tag{1.47}$$

Ici, $\hbar$ est la constante de Planck divisée par 2π et i ($i^2 = -1$) est l'imaginaire pur.

Nous signalons, enfin, que les propriétés précédentes du crochet de Poisson restent valables pour le commutateur. ■

Chapitre 2

Fondements de la Mécanique Quantique.

Dans ce chapitre, nous retraçons les fondements de la Mécanique Quantique. D'entrée de jeu, nous introduisons la notion de la fonction d'onde. Ensuite, nous esquissons le théorème d'Ehrenfest et l'opérateur évolution. Nous terminons par le rappel de la notion importante du *propagateur*.

2.1 Fonction d'onde.

Il s'est avéré que les particules les plus infimes ou élémentaires (atomes, éléctrons, noyaux...) n'obéissant pas aux lois de la Mécanique Classique. Leur description s'inscrit donc dans une nouvelle mécanique, à savoir la Mécanique Quantique. Dans cette mécanique, la trajectoire n'a plus aucun sens et l'on parle de la probabilité de présence. En fait, une particule élémentaire se manifeste dans l'espace comme une onde. Soit $\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right)$ la fonction d'onde associée, où $\overrightarrow{r}$ est la position de la particule dans l'espace et t le temps. La probabilité de présence dans un élément de volume autour de $\overrightarrow{r}$ est tout simplement le carré du module de la fonction d'onde : $\left|\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right)\right|^2$.

Comme pour toute onde, ψ doit satisfaire une équation d'onde. C'est l'équation

de Schrödinger, définie par

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(\overrightarrow{r},t\right)=H\psi\left(\overrightarrow{r},t\right)\ , \tag{2.1}$$

où H est le Hamiltonien du système et $\hbar$ la fameuse constante de Planck, divisée par 2π. Pour une particule de masse m, subissant l'action d'un potentiel $V\left(\overrightarrow{r}\right)$, l'on a

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\overrightarrow{r}}+V\left(\overrightarrow{r}\right)\ , \tag{2.2}$$

où $\Delta_{\overrightarrow{r}}$ est l'opérateur Laplacien.

Il est souvent commode de se placer dans la représentation de Dirac. Au lieu de décrire la particule par une fonction d'onde $\psi\left(\overrightarrow{r},t\right)$, on la décrit par un vecteur instantané $|\psi\left(t\right)\rangle$, appelé *vecteur état.* Les vecteurs état sous-tendent un espace de Hilbert, $\mathcal{E}_H$. Le vecteur $|\psi\rangle$ est appelé "vecteur ket", qui est construit à partir de la fonction d'onde de la façon suivante

$$\langle\overrightarrow{r}\mid\psi\left(t\right)\rangle=\psi\left(\overrightarrow{r},t\right)\ . \tag{2.3}$$

Cela veut dire que la projection du ket sur la base continue $\{|\overrightarrow{r}\rangle\}$ est la fonction d'onde. De l'équation d'onde (2.1), l'on déduit l'équation de Schrödinger pour le ket

$$i\hbar\frac{d\left|\psi\left(t\right)\right\rangle}{dt}=\widehat{H}\left|\psi\left(t\right)\right\rangle\ , \tag{2.4}$$

où cette fois-ci le Hamiltonien $\widehat{H}$ est un opérateur agissant sur l'espace de Hilbert $\mathcal{E}_H$. A côté du ket, l'on définit le "bras", comme le conjugué hermitique du ket

$$\left\langle\psi\left(t\right)\right|=\left|\psi\left(t\right)\right\rangle^{\dagger}\ . \tag{2.5}$$

Comme le Hamiltonien est un opérateur hermicien $\left(\widehat{H}^{\dagger}=\widehat{H}\right)$, l'on déduit de la relation (2.4) l'équation de Schrödinger pour le bras

$$-i\hbar\frac{d\left\langle\psi\left(t\right)\right|}{dt}=\left\langle\psi\left(t\right)\right|\widehat{H}\ . \tag{2.6}$$

2.2 Théorème d'Ehrenfest.

2.2.1 Valeur moyenne.

En Mécanique Quantique, les grandeurs physiques sont représentées par des observables (opérateurs hermiciens). Vu le caractère probabiliste des états du système, ces grandeurs physiques sont des valeurs moyennes des observables associées, sur l'état dans lequel se trouve le système. Soit $|\psi(t)\rangle$ l'état de la particule. Par définition, la valeur moyenne d'une grandeur physique A (énergie, quantité de mouvement, moment cinétique, polarisation...), sachant que le système est dans l'état $|\psi(t)\rangle$, est

$$\langle A(t)\rangle = \left\langle \psi(t) \mid \widehat{A} \mid \psi(t) \right\rangle = \int d\overrightarrow{r} d\overrightarrow{r}' \psi(\overrightarrow{r}, t)^* A(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r}', t) \psi(\overrightarrow{r}', t) \ , \quad (2.7)$$

où $A(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r}', t) = \left\langle \overrightarrow{r} \mid \widehat{A}(t) \mid \overrightarrow{r}' \right\rangle$, $\widehat{A}$ étant l'observable associée à la grandeur physique A.

2.2.2 Evolution dans le temps.

Considérons une observable $\widehat{A}(t)$ et cherchons la loi d'évolution de sa valeur moyenne dans le temps. Intéressons-nous à la dérivée de $\langle A(t)\rangle$, par rapport au temps,

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{d}{dt}\left\langle \psi \mid \widehat{A} \mid \psi \right\rangle = \left(\frac{d\langle\psi|}{dt}\right)\widehat{A}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\widehat{A}}{\partial t}|\psi\rangle + \left\langle \psi \mid \widehat{A} \mid \frac{d\psi}{dt} \right\rangle \ . \quad (2.8)$$

D'après les équations de Schrödinger (2.4) et (2.6), l'on a

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\left[\widehat{A}, \widehat{H}\right]|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\widehat{A}}{\partial t}|\psi\rangle \ . \quad (2.9)$$

L'on déduit le résultat (*Théorème d'Ehrenfest*)

$$\widehat{\dot{A}} = \frac{1}{i\hbar}\left[\widehat{A}, \widehat{H}\right] + \frac{\partial\widehat{A}}{\partial t} \ , \quad (2.10)$$

qui représente l'équation d'évolution temporelle de l'observable $\widehat{A}$. Nous avons introduit l'observable $\widehat{\dot{A}}$, telle que : $\left\langle \widehat{\dot{A}} \right\rangle = d\langle A\rangle/dt$.

2.3 Lien entre Mécanique Analytique et Mécanique Quantique.

La comparaison des équations d'évolution (1.37) (du Chapitre 1) et (2.8) nous font découvrir une chose étonnante : il y a une analogie de structure frappante entre la Mécanique Analytique et la Mécanique Quantique. Notons aussi l'analogie entre crochets de Poisson et commutateurs canoniques

$$\{x_k, p_l\} = \delta_{kl} \quad \leftrightarrow \quad [\widehat{x}_k, \widehat{p}_l] = i\hbar\delta_{kl} \ . \tag{2.11}$$

Cette identité de structure des deux mécaniques fut une des premières grandes découvertes de Dirac. Bien entendu, la nature mathématique et l'interprétation physique des êtres manipulés sont différentes, mais les équations qui les relient sont les mêmes à condition de faire la correspondance suivante :

Règle de quantification. On remplace les crochets de Poisson de la Mécanique Analytique par les commutateurs des observables correspondantes de la Mécanique Quantique, divisés par $i\hbar$

$$\{F, G\} \quad \longrightarrow \quad \frac{1}{i\hbar}\left[\widehat{F}, \widehat{G}\right] \ . \tag{2.12}$$

Voilà la véritable forme du *Principe de Correspondance.*

2.4 Opérateur évolution.

2.4.1 Définition.

L'on suppose que l'on connaît l'état du système, $|\psi(t_0)\rangle$, à l'instant t_0. La solution de l'équation de Schrödinger (2.4) peut s'écrire

$$|\psi(t)\rangle = \widehat{U}(t, t_0)\,|\psi(t_0)\rangle \ , \tag{2.13}$$

où $\widehat{U}(t,t_0)$ est l'opérateur "évolution", qui fait passer l'état du système de t_0 à t. Il doit satisfaire l'équation

$$i\hbar\frac{d\widehat{U}}{dt} = \widehat{H}\widehat{U} \ . \tag{2.14}$$

L'opérateur $\widehat{U}$ caractérise la "propagation" dans le temps.

2.4.2 Propriétés de l'opérateur $\widehat{U}$.

Rappelons les principales propriétés de l'opérateur $\widehat{U}$:

(i) $\widehat{U}(t_0,t_0) = \widehat{I}$: il n'y a pas de propagation.
(ii) $\widehat{U}(t,t_0)^{-1} = \widehat{U}(t_0,t)$: propagation dans le sens opposé.
(iii) $\widehat{U}(t,t').\widehat{U}(t',t'') = \widehat{U}(t,t'')$: propagation progressive.
(iv) $\widehat{U}(t,t_0).\widehat{U}(t,t_0)^{\dagger} = \widehat{I}$: conservation des probabilités de transition.

2.5 Propagateur.

Ecrivons la relation (2.13) dans la représentation x (nous nous restreignons à une particule se mouvant dans un espace à une dimension)

$$\langle x \mid \psi(t)\rangle = \left\langle x \mid \widehat{U}(t,t_0) \mid \psi(t_0)\right\rangle = \int dx_0 \left\langle x \mid \widehat{U}(t,t_0) \mid x_0\right\rangle \langle x_0 \mid \psi(t_0)\rangle \ . \tag{2.15}$$

Nous avons utilisé la relation de fermeture

$$\int dx_0 \left|x_0\right\rangle \left\langle x_0\right| = \widehat{I} \ . \tag{2.16}$$

Posons

$$G(x,t;x_0,t_0) = \left\langle x \mid \widehat{U}(t,t_0) \mid x_0\right\rangle \ , \tag{2.17}$$

appelé "propagateur", qui fait passer la particule de la position x_0, à l'instant t_0, à la position x, à l'instant t.

Finalement, nous avons la relation fondamentale

$$\psi(x,t) = \int dx_0 G(x,t;x_0,t_0)\,\psi(x_0,t_0) \ , \tag{2.18}$$

qui se généralise aisément au cas de plusieurs degrés de liberté. Il en ressort clairement que tout le problème de la Mécanique Quantique revient à la détermination du propagateur ; c'est l'objet fondamental. L'on a la relation évidente

$$G\left(x, t_0; x_0, t_0\right) = \delta\left(x - x_0\right) \ , \tag{2.19}$$

qui exprime l'absence de propagation, pour des instants initial et final égaux. ■

Chapitre 3

Quantification par la Méthode des Intégrales de Chemins.

Le but de ce chapitre est de rappeler l'esprit de la quantification par la méthode des intégrales de chemins. Il s'agit d'une méthode équivalente à la quantification canonique usuelle, mais plus élégante.

3.1 Essence de la méthode.

Pour simplifier la discussion, nous considérons une particule dans un espace à une dimension, subissant l'action d'un potentiel $V(\widehat{x})$. La physique de cette particule est gouvernée par le Hamiltonien

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + V(\widehat{x}) \ . \tag{3.1}$$

Ici, $\widehat{x}$ et $\widehat{p}$ sont, respectivement, les opérateurs position et impulsion.

La particule part de la position x_i, à l'instant t_i, et arrive à la position x_f, à l'instant t_f. Essayons d'exprimer le propagateur en termes de positions et instants intermédiaires. Pour ce faire, nous subdivisons l'intervalle de temps $[t_i, t_f]$ en $n+1$ segments de même longueur

$$\epsilon = \frac{t_f - t_i}{n+1} \ . \tag{3.2}$$

Partons de la définition (3.3) du propagateur. Par utilisation de la propriété de progressivité de l'opérateur évolution et l'introduction de n relations de fermeture, nous trouvons

$$\begin{aligned} G(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \int dx_1(t_1) ... dx_n(t_n) \left\langle x_f \mid \widehat{U}(t_f, t_n) \mid x_n \right\rangle \times \\ &\left\langle x_n \mid \widehat{U}(t_n, t_{n-1}) \mid x_{n-1} \right\rangle \times .... \times \left\langle x_1 \mid \widehat{U}(t_1, t_i) \mid x_i \right\rangle \quad ,(3.3) \end{aligned}$$

qui peut s'écrire encore comme

$$\begin{aligned} G(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \int dx_1(t_1) ... dx_n(t_n) G(x_f, t_f; x_n, t_n) \times \\ &G(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) \times .... \times G(x_1, t_1; x_i, t_i) \quad . \end{aligned} \tag{3.4}$$

Les x_i et t_i $(i = 1, ..., n)$ sont, respectivement, les positions et instants intermédiaires. Ainsi, nous avons réécrit le propagateur sous forme d'une somme sur tous les "chemins brisés" possibles.

Par ailleurs, pour un système isolé, l'opérateur évolution s'écrit simplement comme

$$\widehat{U}(t, t') = \exp\left\{ -\frac{i}{\hbar}(t - t')\widehat{H} \right\} \quad , \tag{3.5}$$

avec $t \geq t'$. Dans ces conditions, l'on a

$$G(x, t; x', t') = \langle x| e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t')\widehat{H}} |x'\rangle \quad . \tag{3.6}$$

Comme le Hamiltonien contient l'opérateur impulsion $\widehat{p}$, nous aurons besoin de nous placer dans la représentation p, telle que

$$\widehat{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad . \tag{3.7}$$

Le passage de la représentation x à la représentation p se fait moyennant la transformation de Fourier

$$|x\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-ipx/\hbar} |p\rangle \quad . \tag{3.8}$$

Nous aurons aussi besoin de la formule

$$V(\widehat{x})|x'\rangle = V(x')|x'\rangle \quad . \tag{3.9}$$

Il s'ensuit que

$$\left\langle x \mid \widehat{H}\left(\widehat{x},\widehat{p}\right) \mid x'\right\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(x-x')/\hbar}\left[\frac{p^2}{2m} + V\left(\frac{x+x'}{2}\right)\right] . \tag{3.10}$$

Ceci nous permet de réécrire (3.6) sous la forme

$$G\left(x,t;x',t'\right) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(x-x')/\hbar} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left(t-t'\right)\left[\frac{p^2}{2m} + V\left(\frac{x+x'}{2}\right)\right]\right\} . \tag{3.11}$$

Donc, la relation (3.4) se réécrit, en appliquant la formule (3.11) aux $n+1$ propagateurs, comme suit

$$G\left(x_f,t_f;x_i,t_i\right) = \left(\prod_{j=1}^{n}\int dx_j\right)\left(\prod_{j=1}^{n+1}\int \frac{dp_j}{2\pi\hbar}\right)\exp\left\{\begin{array}{c} \frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{n+1} p_j\left(x_j - x_{j-1}\right) \\ -\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{n+1}\left(t_j - t_{j-1}\right) H\left(\frac{x_j+x_{j-1}}{2}, p_j\right) \end{array}\right\} , \tag{3.12}$$

avec les notations $x_0 = x_i$ et $x_{n+1} = x_f$. La formule (3.12) est évidemment indépendante du nombre de subdivisions n.

Maintenant, nous allons passer à la limite continue, qui consiste à augmenter indéfiniment le nombre de points intermédiaires ($n \to \infty$), tout en diminuant leur intervalle ($\epsilon \to 0$). D'une manière compacte, le propagateur, défini par (3.12), se réécrit comme

$$G\left(x_f,t_f;x_i,t_i\right) = \int \left[\frac{dxdp}{2\pi\hbar}\right] \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\left[p\,\dot{x} - H\left(x,p\right)\right]\right\} , \tag{3.13}$$

avec la notation

$$\left[\frac{dxdp}{2\pi\hbar}\right] = \lim_{n\to\infty}\prod_{j=1}^{n} dx_j \prod_{k=1}^{n+1}\frac{dp_k}{2\pi\hbar} . \tag{3.14}$$

L'intégration sur les impulsions se fait immédiatement, puisque le Hamiltonien est quadratique dans ces mêmes impulsions. Utilisant la formule

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ipx/\hbar} e^{-i\epsilon p^2/2m\hbar} = \left[\frac{2\pi i\epsilon\hbar}{m}\right]^{-1/2} e^{-mx^2/2i\epsilon\hbar} . \tag{3.15}$$

Après intégration sur les impulsions, la relation (3.12) devient

$$G\left(x_f,t_f;x_i,t_i\right) = \lim_{n\to\infty}\left[\frac{2\pi i\epsilon\hbar}{m}\right]^{-n/2}\int\prod_{j=1}^{n} dx_j \exp\left\{i\frac{\epsilon}{\hbar}\sum_{j=1}^{n+1}\left[\begin{array}{c} \frac{m}{2}\left(\frac{x_j-x_{j-1}}{2}\right)^2 \\ -V\left(\frac{x_j+x_{j-1}}{2}\right) \end{array}\right]\right\} , \tag{3.16}$$

qui s'écrit encore comme

$$G\left(x_f,t_f;x_i,t_i\right)=\int_{x(t_i)=x_i}^{x\left(t_f\right)=x_f}\mathcal{D}x\exp\left\{\frac{i}{\hbar}A\left[x\right]\right\}\ , \tag{3.17}$$

où

$$A\left[x\right]=\int_{t_i}^{t_f}dtL\left(x,\dot{x};t\right) \tag{3.18}$$

est l'action classique. Nous avons utilisé la notation

$$\mathcal{D}x\equiv\lim_{n\to\infty}\left[\frac{2\pi i\left(t_f-t_i\right)\hbar}{\left(n+1\right)m}\right]^{-(n+1)/2}\prod_{j=1}^{n}dx_j\ . \tag{3.19}$$

L'intégrale dans l'égalité (3.17) porte sur tous les chemins possibles partant de x_i, à l'instant t_i, et arrivant à x_f, à l'instant t_f, avec la "mesure" (3.19). Notons la présence de l'action classique dans l'argument de l'exponentiel figurant dans la relation (3.17).

Ainsi, nous avons exprimé le propagateur en termes d'*intégrales de chemins*. Ces intégrales portent non seulement sur le chemin classique (celui qui minimise l'action), mais sur tous les chemins possibles. Un chemin non classique est un chemin fluctuant. Notons que la relation (3.17) s'étend aisément au cas de plusieurs degrés de liberté.

Dans ce qui suivra, nous allons donner des exemples, pour illustrer la relation trouvée (3.17).

3.2 Exemples.

3.2.1 Propagateur d'une particule libre à une dimension.

Pour cette particule, l'action est donnée par

$$A\left[x\right]=\int_{t_i}^{t_f}dt\frac{m}{2}\ \dot{x}^2\ \ , \tag{3.20}$$

et le propagateur par

$$G\left(x_f,t_f;x_i,t_i\right)=\int_{x(t_i)=x_i}^{x\left(t_f\right)=x_f}\mathcal{D}x\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt\frac{m}{2}\ \dot{x}^2\ (t)\right\}\ . \tag{3.21}$$

Pour calculer G, nous passerons aux chemins discrets, et écrivons

$$G\left(x_f,t_f;x_i,t_i\right)=\left[\tfrac{2\pi i\epsilon\hbar}{m}\right]^{-(n+1)/2}\int\prod_{j=1}^{n+1}dx_j\delta\left(x_{n+1}-x_f\right)\delta\left(x_0-x_i\right)\times \\ \exp\left\{\tfrac{im}{2\hbar\epsilon}\sum_{j=1}^{n+1}\left(x_j-x_{j-1}\right)^2\right\}\ , \tag{3.22}$$

avec $x_{n+1}=x_f$ et $x_0=x_i$. Il est commode de passer aux variables "maillons"

$$u_j=x_j-x_{j-1}\ ,\qquad\qquad j=1,...,n+1\ . \tag{3.23}$$

En termes de ces nouvelles variables d'intégration, le propagateur se réécrit

$$G\left(x_f,t_f;x_i,t_i\right)=\left[\tfrac{2\pi i\epsilon\hbar}{m}\right]^{-(n+1)/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\prod_{j=1}^{n+1}du_j\delta\left(x_f-x_i-\sum_{k=1}^{n+1}u_k\right)\times \\ \exp\left\{\tfrac{im}{2\hbar\epsilon}\sum_{j=1}^{n+1}u_j^2\right\}\ . \tag{3.24}$$

Ecrivons

$$\delta\left(x_f-x_i-\sum_{k=1}^{n+1}u_k\right)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dk}{2\pi}e^{ik.\left(x_f-x_i-\sum_{k=1}^{n+1}u_k\right)}\ . \tag{3.25}$$

Soit,

$$G\left(x_f,t_f;x_i,t_i\right)=\left[\frac{2\pi i\epsilon\hbar}{m}\right]^{-(n+1)/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dk}{2\pi}e^{ik.\left(x_f-x_i\right)}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}due^{-ik.u}e^{imu^2/2\hbar\epsilon}\right]^{n+1}\ . \tag{3.26}$$

Or

$$\int_{-\infty}^{+\infty}due^{-ik.u}e^{imu^2/2\hbar\epsilon}=e^{i\pi/4}\sqrt{\frac{2\pi\epsilon\hbar}{m}}e^{-i\epsilon\hbar k^2/2m}\ . \tag{3.27}$$

Finalement, G se présente comme une intégrale d'une gaussienne dans la variable k. Après intégration, l'on obtient

$$G\left(x_f,t_f;x_i,t_i\right)=\left[\frac{2\pi i\left(t_f-t_i\right)\hbar}{m}\right]^{-1/2}\exp\left\{im\left(x_f-x_i\right)^2/2\hbar\left(t_f-t_i\right)\right\}\ . \tag{3.28}$$

Remarquer que G ne dépend que de la distance entre extrémités x_f-x_i et de l'intervalle de temps t_f-t_i, il est donc invariant par translation dans l'espace et dans le temps. En plus, notons que, dans la limite $t_f\to t_i$, l'on retrouve bien la propriété

$$G\left(x_f,t_i;x_i,t_i\right)=\delta\left(x_f-x_i\right)\ ,\qquad\qquad (\textit{absence de propagation})\ . \tag{3.28a}$$

Celle-ci découle de la formule

$$\delta\left(x\right)=\lim_{\lambda\to\infty}\left[2\pi\lambda\right]^{-1/2}\exp\left\{-x^2/2\lambda\right\}\ . \tag{3.29}$$

3.2.2 Propagateur d'une particule libre à d dimensions.

Le résultat précédent se généralise immédiatement lorsque la particule se meut dans un espace euclidien à d dimensions. Le propagateur associé est simplement un produit de propagateurs à une dimension. Soit,

$$G\left(\overrightarrow{x}_f, t_f; \overrightarrow{x}_i, t_i\right) = \left[\frac{2\pi i\left(t_f - t_i\right)\hbar}{m}\right]^{-d/2} \exp\left\{im\left(\overrightarrow{x}_f - \overrightarrow{x}_i\right)^2 / 2\hbar\left(t_f - t_i\right)\right\} \ , \tag{3.30}$$

qui est manifestement invariant par translation dans l'espace et dans le temps. Aussi, l'on a la propriété, pour des instants égaux ($t_f = t_i$),

$$G\left(\overrightarrow{x}_f, t_i; \overrightarrow{x}_i, t_i\right) = \delta_d\left(\overrightarrow{x}_i - \overrightarrow{x}_f\right) \ , \tag{3.30a}$$

qui découle de la limite

$$\delta_d\left(\overrightarrow{x}\right) = \lim_{\lambda\to\infty}\left[2\pi\lambda\right]^{-d/2} \exp\left\{-\overrightarrow{x}^2/2\lambda\right\} \ . \tag{3.31}$$

3.2.3 Oscillateur harmonique à une dimension.

L'action décrivant ce système est donnée par

$$A\left[x\right] = \int_{t_i}^{t_f} dt\left[\frac{m}{2}\,\dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2}x^2\right] \ , \tag{3.32}$$

où ω est la pulsation et m la masse de la particule oscillante.

Cherchons tout d'abord le chemin classique, c'est-à-dire celui décrit par l'équation de mouvement

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \ , \tag{3.33}$$

avec les conditions : $x\left(t_i\right) = x_i$, $x\left(t_f\right) = x_f$. Un calcul simple donne comme solution de l'équation différentielle précédente

$$x_{cl}\left(t\right) = x_i \cos\omega\left(t - t_i\right) + \frac{x_f - x_i\cos\omega\left(t_f - t_i\right)}{\sin\omega\left(t_f - t_i\right)} \times \sin\omega\left(t - t_i\right) \ . \tag{3.34}$$

Le propagateur associé à cet oscillateur est le suivant

$$G\left(x_f, t_f; x_i, t_i\right) = \int_{x(t_i)=x_i}^{x\left(t_f\right)=x_f} \mathcal{D}x \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\left(\frac{m}{2}\,\dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\right\} \ . \tag{3.35}$$

Pour son calcul, nous posons

$$x(t) = x_{cl}(t) + y(t) \ , \tag{3.36}$$

où $y(t)$ est un chemin décrivant les fluctuations quantiques, qui satisfait : $y(t_i) = y(t_f) = 0$. Avec cette nouvelle variable, l'action s'écrit

$$A[x] = \frac{m\omega}{2\sin\omega(t_f - t_i)}\left[\left(x_i^2 + x_f^2\right)\cos\omega(t_f - t_i) - 2x_i x_f\right] + \int_{t_i}^{t_f} dt\left(\frac{m}{2}\dot{y}^2 - \frac{m\omega^2}{2}y^2\right) \ . \tag{3.37}$$

Le propagateur devient alors

$$G(x_f, t_f; x_i, t_i) = f(t_f - t_i) \times \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega(t_f - t_i)}\left[\left(x_i^2 + x_f^2\right)\cos\omega(t_f - t_i) - 2x_i x_f\right]\right\} \ , \tag{3.38}$$

avec la notation

$$f(t_f - t_i) = \int_{y(t_i)=0}^{y(t_f)=0} \mathcal{D}y \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\left(\frac{m}{2}\dot{y}^2 - \frac{m\omega^2}{2}y^2\right)\right\} \ , \tag{3.39}$$

qui ne dépend pas des valeurs x_i et x_f.

Par ailleurs, chaque chemin $y(t)$ peut être représenté par une série de Fourier

$$y(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin\left(n\pi\frac{t - t_i}{t_f - t_i}\right) \ . \tag{3.40}$$

Cette substitution donne

$$\int_{t_i}^{t_f} dt\left(\frac{m}{2}\dot{y}^2 - \frac{m\omega^2}{2}y^2\right) = \frac{m}{2}(t_f - t_i) \times \sum_{n=1}^{\infty}\left[\left(\frac{n\pi}{t_f - t_i}\right)^2 - \omega^2\right]a_n^2 \ . \tag{3.41}$$

Les intégrales sur y dans la relation (3.39), pour des instants intermédiaires, peuvent être remplacées par des intégrales sur les coefficients de Fourier a_n. Soit,

$$f(t_f - t_i) = \mathcal{A} \times \prod_{n=1}^{\infty}\left[\int_{-\infty}^{+\infty} da_n \exp\left\{\frac{im}{2\hbar}(t_f - t_i) \times \left[\left(\frac{n\pi}{t_f - t_i}\right)^2 - \omega^2\right]a_n^2\right\}\right] \ . \tag{3.42}$$

La constante $\mathcal{A}$ n'est rien d'autre que le Jacobien de la transformation (3.40), qui est d'ailleurs indépendante de la pulsation ω. L'intégration sur les a_n dans l'égalité (3.42) se fait immédiatement, et l'on obtient

$$f(t_f - t_i) = \mathcal{B} \times \prod_{n=1}^{\infty}\left[1 - \omega^2\left(\frac{t_f - t_i}{n\pi}\right)^2\right]^{-1/2} \ , \tag{3.43}$$

où $\mathcal{B}$ est une constante qui reste à déterminer. Le produit précédent a la valeur

$$\prod_{n=1}^{\infty}\left[1-\omega^{2}\left(\frac{t_f-t_i}{n\pi}\right)^{2}\right]^{-1/2}=\left[\frac{\sin\omega\left(t_f-t_i\right)}{\omega\left(t_f-t_i\right)}\right]^{-1/2}. \tag{3.44}$$

Comme le coefficient $\mathcal{B}$ ne dépend pas de ω, il peut être déterminé par le fait que l'actuel propagateur, lorsque $\omega\rightarrow 0$, doit tendre vers le propagateur libre (3.28). Soit,

$$\mathcal{B}=\left[\frac{2\pi i\hbar\left(t_f-t_i\right)}{m}\right]^{-1/2}. \tag{3.45}$$

Finalement, le propagateur recherché est alors donné par

$$G\left(x_f,t_f;x_i,t_i\right)=\left[\frac{2\pi i\hbar}{m\omega}\sin\omega\left(t_f-t_i\right)\right]^{-1/2}\exp\left\{\begin{array}{c}\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega\left(t_f-t_i\right)}\times\\ \left[\left(x_i^2+x_f^2\right)\cos\omega\left(t_f-t_i\right)-2x_ix_f\right]\end{array}\right\}. \tag{3.46}$$

Remarquer que G n'est pas invariant par translation dans l'espace. En fait, il ne l'est que dans la limite $\omega\rightarrow 0$, où il se réduit à un propagateur d'une particule libre. Il est facile de voir que, dans la limite $t_f\rightarrow t_i$, le propagateur précédent se réduit à la distribution de Dirac $\delta\left(x_i-x_f\right)$.

3.2.4 Oscillateur harmonique anisotrope.

Considérons un oscillateur harmonique à d dimensions, soumis à un potentiel anisotrope

$$V\left(x_1,...,x_d\right)=\frac{m}{2}\sum_{j=1}^{d}\omega_jx_j^2. \tag{3.47}$$

Le propagateur sera un produit de d facteurs, dont chacun a la forme (3.46), avec les pulsations respectives $\omega_1,...,\omega_d$. ■