Chapitre 4 : Les transformation de coordonnée et de temps dans le formalisme ~~transformation~~ des intégrales de Feynman.

Introduction : Après le succès du calcul du propagateur de l'OH et de la particule libre, le formalisme des intégrales de chemins ~~est~~ resté coincé, jusqu'à l'introduction ~~de~~, en 1979, de la transformation de Duru-Kleinert afin de résoudre le pbm de l'atome d'Hydrogène.

Nous notons qu'il y a deux types de transformations ~~spa~~ temporelles

1/ tranformation local du temps.

2/ " global du temps. $t \to \tau$

$$d\tau = f(q(t))\,dt$$

La transformation global du temps transforme le paramètre t en un nouveau paramètre τ.

Où t s'écrit en fonction de τ comme suit :

$$t \to g(\tau) \to \tau = g^{-1}(t)$$

~~Pour~~ La transformation local du temps dépend de la position, où $f(q(t))$ est une fonction connue. ~~de~~

Remarque : Comme la notion de trajectoire n'a pas de sens en M.Q, On est obligé, alors, de prendre en considération tous les chemins possibles. Aussi le paramètre τ ne représente pas réellement un temps. Il est appelé pseudo-temps.

Ces deux ~~trajectoires~~ transformations temporelles ne sont applicable que si elles sont combinées à une transformation appropriés des coordonnées

4-2 Transformation local du temps en Mécanique Classique :

La transformation local du temps apparait naturelement en Mécanique classique dans le cas des forces centrales (force de gravitation) ($\delta S = 0$) le principe variationnel conduit en coordonnées polaires aux deux équations

$$\begin{cases} m\ddot{r} - \dfrac{l^2}{mr^3} + \dfrac{dV}{dr} = 0 & (1) \\ mr^2\dot{\theta} = l = c^{te} & (2) \end{cases}$$

L'équation (2) exprime la conservation du moment l, alors que l'équation (1) exprime la conservation de l'énergie E du système.

L'intégration de (1) : $\frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \dfrac{l^2}{2mr^2} + V(r) = E = c^{te}$ — (3)

En intégrant (3), nous trouvons la trajectoire classique $r(t)$

Remarque : On s'interesse souvent en mécanique au calcul de l'équation de l'orbite en fonction de θ. $r = f(\theta)$. Ceci peut se réaliser en réécrivant l'ép (2) comme suit : $d\theta = \dfrac{l}{mr^2}\,dt$

On peut considérer cette équation comme une transformation local du temps.

Cette transformation devient plus intéréssante encore lorsqu'elle est suivie de la transformation de coordonnée $r \rightarrow u = f(r)$ avec $u = \frac{1}{r}$.

L'équation de l'orbite devient alors.

$$\frac{d^2u}{d\theta^2} + u = -\frac{m}{\ell^2}\frac{d}{du}\left[V\left(\frac{1}{u}\right)\right] \quad \text{——— (4)}$$

1) Dans le cas de la gravitation (Pbm de Kepler).

$$V(r) = -\frac{k}{r} \Rightarrow V(u) = -ku.$$

L'équation (4) devient $\frac{d^2u}{d\theta^2} + u = \frac{mk}{\ell^2} = \underline{\underline{cte}}$

Cette équation n'est autre que celle d'un oscillateur harmonique de fréquence unité soumis à une force $\underline{\underline{cte}}$ $\frac{mk}{\ell^2}$

Ainsi le pbm de Kepler a été ramené à celui d'un oscillateur harmonique, via une transformation local de temps et une transformation local des coordonnées.

4-3 Concept du "promotor"

On est contrain, parfois, d'introduire une transformation local du temps suivi d'un changement de cordonnée afin d'arriver à la fonction de Green. Cette fonction nous donnera le spectre de l'énergie à partir de ces pôles et les fonctions d'onde correspondante à partir des résidus aux pôles. Par ailleurs, la fonction ~~de~~ de Green n'est autre que la transformé de Fourier du propagateur

$$G(\vec{q''}, \vec{q'}, T) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^\infty e^{\frac{iET}{\hbar}} K(\vec{q''}, \vec{q'}, T)\, dt$$

$$G(q'', q', E) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^\infty e^{\frac{iET}{\hbar}} K(\vec{q''}, \vec{q'}, T)\, dt$$

Cette équation peut s'écrire comme suit :

$$G(q'', q', E) = \frac{1}{i\hbar} \int P(\vec{q''}, \vec{q'}, T)\, dT$$

Où le Promotor $\underline{P}(\vec{q''}, \vec{q'}, T)$ n'est autre que

$$e^{\frac{iET}{\hbar}}\, K(\vec{q''}, \vec{q'}, T).$$

Sous sa forme intégrale, ce dernier s'écrit comme :

$$P(\vec{q''}, \vec{q'}, T) = \int e^{\frac{i}{\hbar} w}\, \mathcal{D}\vec{q}(t)$$

où $w = \int L\, dt + E(t_f - t_i)$.

(4-4) Les transformations de coordonnées et du temps dans le formalisme de Feynman.

Considérons le cas $D = 1$.

$$K(x'', t'', x', t') = \int \cdots \int \mathcal{D}[x(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} L\, dt\right)$$

où $L = m\frac{\dot{x}^2}{2} - V(x)$

Sous une forme descrète :

$$K(x'', t'', x', t') = \lim_{N \to \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \int \cdots \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N} S_j\right\} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j$$

avec $S_j = \frac{m}{2\varepsilon}(x_j - x_{j-1})^2 - \varepsilon V(x_j)$

Commençons par la transformation de coordonnée $x = f(q)$ qui sera suivi par une transformation local du temps.

À condition d'utiliser le mid-point ; $\tilde{q}_j = \frac{q_j + q_{j-1}}{2}$

Le developpement de Δx_j au $3^{ème}$ ordre conduit à :

$$\Delta x_j = f'(\tilde{q}_j)\, \Delta q_j \left[1 + \frac{1}{24} \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} (\Delta q_j)^2\right]$$

Le terme énergie cinétique aura pour forme :

$$\frac{m}{2\varepsilon}(\Delta x_j)^2 = \frac{m}{2\varepsilon}\left(f'(\tilde{q}_j)(\Delta q_j)\right)^2\left[1+\frac{1}{12}\frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'(q_j)}(\Delta q_j)^2\right]$$

et le terme énergie potentielle s'écrira comme

$$\varepsilon\, V(x_j) = \varepsilon\, V\left[f(\tilde{q}_j)\right] + O(\varepsilon^2)$$

ou encore $\quad \varepsilon V(x_j) = \varepsilon V(f_j)$

Démonstration :

$$\Delta x_j = x_j - x_{j-1} \quad \text{où : } x_j = f(q_j) \text{ et } x_{j-1} = f(q_{j-1})$$

nous avons posé :

$$\tilde{q}_j = \frac{q_{j+1}+q_j}{2} \quad \Rightarrow \quad q_j = \tilde{q}_j + \frac{\Delta q_j}{2}$$

$$q_{j-1} = \tilde{q}_j - \frac{\Delta q_j}{2}$$

$$f(q_j) = f\left(\tilde{q}_j + \frac{\Delta q_j}{2}\right) = f(\tilde{q}_j) + f'(\tilde{q}_j)\frac{\Delta q_j}{2} + f^{(2)}(\tilde{q}_j)\frac{(\Delta q_j)^2}{8}$$

$$+ f^{(3)}(\tilde{q}_j)\frac{(\Delta q_j)^3}{48} + \cdots$$

$$f(q_{j-1}) = f\left(\tilde{q}_j - \frac{\Delta q}{2}\right) = f(\tilde{q}_j) - f'(\tilde{q}_j)\frac{\Delta q_j}{2} + f^{(2)}(\tilde{q}_j)\frac{(\Delta q_j)^2}{8}$$

$$- f^{(3)}(\tilde{q}_j)\frac{(\Delta q_j)^3}{48} + \cdots$$

D'où $\quad \Delta x_j = f(q_j) - f(q_{j-1}) = f'(\tilde{q}_j)\Delta q_j + f^{(3)}(\tilde{q}_j)\frac{(\Delta q_j)^3}{24}$

$$(\Delta x_j)^2 = f'^2(\tilde{q}_j)(\Delta q_j^2)\left[1 + \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)}\frac{(\Delta q_j)^2}{12}\right] + O\left[\varepsilon^2\right]$$

Considérons maintenant la mesure :

$$\prod_{j=1}^{N-1} dx_j = \prod_{j=1}^{N-1} f'(q_j)\, dq_j \quad \text{ou } dx_j = f'(q_j)\, dq_j$$

$$\prod_{j=1}^{N-1} du_j = \left[f'(q_N)\cdot f'(q_0)\right]^{-1/2} \prod_{j=1}^{N} \sqrt{f'(q_j)\, f'(q_{j-1})}\ \prod_{j=1}^{N-1} dq_j$$

Faisons ~~la~~ seconde transformation $t \to s$

où : $dt = \left[f'(q(s))\right]^2 ds$

Le nouvel intervalle de temps est $\sigma_j = s_j - s_{j-1}$

Il est lié à l'ancien intervalle de temps ε par :

$$\varepsilon = \sigma_j\, f'(q_j)\, f'(q_{j-1}) \quad \text{d'où :}$$

$$A_N \prod_{j=1}^{N-1} du_j = \left[f'(q_N)\, f'(q_0)\right]^{-1/2} \prod_{j=1}^{N} \cancel{\sqrt{f'(q_j)\, f'(q_{j-1})}\ \prod_{j=1}^{N-1} dq_j} \left(\frac{m}{2 i \pi \hbar \sigma_j}\right)^{1/2} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j$$

Nous avons : $f'(q_j) = f'(\tilde{q}_j) + f^{(2)}(\tilde{q}_j)\dfrac{\Delta q_j}{2} + f^{(3)}(\tilde{q}_j)\dfrac{(\Delta q_j)^2}{8}$

$$f'(q_{j-1}) = f'(\tilde{q}_j) - f^{(2)}(\tilde{q}_j)\frac{\Delta q_j}{2} + f^{(3)}(\tilde{q}_j)\frac{(\Delta q_j)^2}{8} + \cdots$$

d'où $f'(q_j)\, f'(q_{j-1}) = f'^2(\tilde{q}_j)\left[1 + \dfrac{1}{4}(\Delta q_j)^2 \left\{ \dfrac{f_j^{(3)}}{f'_j} - \left(\dfrac{f_j^{(2)}}{f'_j}\right)^2 \right\}\right]$

Nous pouvons également écrire ε comme :

$$\varepsilon = \sigma_j f_j'^2 \left\{1 + \frac{1}{4}(\Delta q_j)^2 \left[\frac{f_j^{(3)}}{f'_j} - \frac{(f''_j)^2}{f_j'^2}\right]\right\}$$

Le terme énergie cinétique devient :

$$\frac{m}{2\varepsilon}(\Delta x_j)^2 = \frac{m}{2} f'^2 (\Delta q_j)^2 \left(1 + \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{12\, f'(\tilde{q}_j)}(\Delta q_j)^2\right)$$

$$\times \frac{1}{\sigma_j f_j'^2 \left\{1 + \dfrac{(\Delta q_j)^2}{4}\left(\dfrac{f_j^{(3)}}{f'_j} - \dfrac{f_j''^2}{f_j'^2}\right)\right\}}$$

En retenant uniquement les termes en $(\Delta q_j)^4$

il vient :

$$\frac{m}{2\varepsilon}(\Delta x_j)^2 = \frac{m}{2\sigma_j}(\Delta q_j)^2 + \frac{m}{8\sigma_j}(\Delta q_j)^4 \lambda_j$$

où $\lambda_j = \frac{f_j''^2}{f_j'^2} - \frac{2}{3}\frac{f^{(3)}}{f_j'}$

Alors que le terme énergie potentielle devient :

$$\varepsilon V(x_j) = \sigma_j f_j'^2 V(f_j) = \sigma_j f_j'^2 V_j$$

Le terme exponentiel du propagateur est donné par :

$$e^{\frac{i}{\hbar}S_j} = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{m}{2\sigma_j}(\Delta q_j)^2 + \frac{m}{8\sigma_j}\lambda_j(\Delta q_j)^4 - \sigma_j f_j'^2 V_j\right\}\right]$$

En utilisant la relation de la démocratie

$$\prod_{j=1}^{N-1} dq_j = \prod_{j=1}^{N} d(\Delta q_j) \quad \text{et le résultat :}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ax^2 - bx^4)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(-ax^2 - \frac{3b}{4a^2}\right)$$

Pour "a" grand

Dans notre cas $a = \frac{m}{2i\hbar\sigma_j}$ et $b = \frac{m\lambda_j}{8i\hbar\sigma_j}$

On aboutit à :

$$e^{\frac{i}{\hbar}S_j} = e^{\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{m}{2\sigma_j}(\Delta q_j)^2 - \sigma_j\left(f_j'^2 V_j + \frac{3}{8}\frac{\hbar^2}{m}\lambda_j\right)\right\}}$$

Le pseudo temps "s" vérifie la condition :

$$T = t'' - t' = \int_{s'}^{s''} ds\,[f'(q_s)]^2 ,$$ cette condition

peut être formulée comme suit :

$$[f'(q'')f'(q')]\int_0^{\infty} ds\, \delta\left[T - \int_{s'}^{s''} d\tau\, [f'(q(\tau))]^2\right] = 1$$

Aussi, le propagateur global aura pour expression

$$K\left(f(q''), t''; f(q'), t'\right) = \lim_{N \to \infty} f'(q') f(q'') \int_0^\infty \delta\left(T - \int_{s'}^{s''} d\tau \left(f'(q(\tau))\right)^2\right) \times ds$$

$$= \lim_{N \to \infty} f'(q') f'(q'') \int_0^\infty \delta\left(T - \int_{s'}^{s''} d\tau \left(f'(q(s))\right)^2\right) K_N \, ds$$

où K_N est donnée par:

$$K_N = \left[f'(q'') f'(q')\right]^{-1/2} \int \cdots \int \prod_{j=1}^{N} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\sigma_j}\right)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} S_j} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j$$

Partons de la transformée de Fourier d'une fonction

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \Psi(E)\, dE \quad \text{et} \quad \Psi(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{+\infty} e^{\frac{iEt}{\hbar}} \psi(t)\, dt$$

Nous pouvons montrer que $\delta(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{iEt}{\hbar}} dE \qquad \text{d'où alors:}$$

$$\delta\left(T - \int_0^{s'} d\tau f'^2\right) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{iE}{\hbar}\left(T - \int_0^{s'} d\tau f'^2\right)} dE$$

Le Propagateur devient:

$$K\left(f(q''), t''; f(q') t'\right) = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{2\pi\hbar} f'(q') f(q'') \left(\frac{m}{2i\hbar\sigma_j}\right)^{N/2} \int_0^\infty ds \int_{-\infty}^{+\infty} dE\, e^{-\frac{iTE}{\hbar}}$$

$$\times\, e^{\frac{i}{\hbar} E \int_0^{s'} d\tau f'^2} K_N$$

Nous arrivons après développement à:

$$K\left(f(q''), t'', f(q'), t'\right) = \lim_{N \to \infty} \frac{\sqrt{f'(q') f'(q'')}}{2\pi\hbar} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\sigma_j}\right)^{N/2}$$

$$\times \int_0^\infty d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{iET}{\hbar}} dE \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{j=1}^{N-1} dq_j \, e^{\sum_{j=1}^{N} \frac{i}{\hbar} S_j}$$

avec $S_j = \frac{m}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 - \sigma_j \left(f_j'^2 V_j + \frac{3}{8} \frac{\hbar^2}{m} \lambda_j - E f_j'^2\right)$

Nous pouvons extraire la fonction de Green $G(x'', x'; E)$ transformée de Fourier du propagateur

$$K(x'', t''; x', t') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{-iET}{\hbar}}\, G(x'', x', E)\, dE$$

où

$$G(x'', x', E) = \sqrt{f'(q')\, f'(q'')}\int_0^{\infty} ds\, P(q'', q'; S)$$

Après identification :

$$P(q'', q'; S) = \lim_{N\to\infty}\int\cdots\int \prod_{j=1}^{N}\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\,\sigma_j}\right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j\, e^{\frac{i}{\hbar}\sum^{N}\tilde{S}_j}$$

où : $\sum_{j=1}^{N}\tilde{S}_j = \sum_{j=1}^{N}\left\{\frac{m}{2\sigma_j}(\Delta q_j)^2 - \sigma_j\left[f_j'^2(V_j - E) + \frac{3}{8}\frac{\hbar^2}{m}\lambda_j\right]\right\}$

À la limite continue $(N \longrightarrow \infty)$

$$\tilde{S}(q(s)) = \int_0^{S} d\sigma\left[\frac{m}{2}\left(\frac{dq}{d\sigma}\right)^2 - \tilde{V}(q)\right] \text{ avec}$$

$$\tilde{V}(q) = f'^2(q)\left[V(f(q)) - \epsilon\right] + \frac{3}{8}\frac{\hbar^2\lambda}{m}$$

Exemple d'application : potentiel de Morse : $V(x) = (1 - e^{-\alpha x})^2$

Trouver le potentiel transformé $\tilde{V}(q)$ en utilisant les changements de variables

$$x = -\frac{2}{\alpha}\ln q \quad \text{et} \quad \frac{dt}{ds} = [f'(q)]^2$$

Ici $f(q) = -\frac{2}{\alpha}\ln q$

$$f' = \frac{2}{\alpha q}, \quad f'' = \frac{2}{\alpha}\frac{1}{q^2} \quad \text{et} \quad f''' = -\frac{4}{\alpha}\frac{1}{q^3}$$

$$\Rightarrow ds = \frac{\alpha^2 q^2}{4}\, dt$$

$$\tilde{V}(q) = \frac{4}{\alpha^3 q^2}\left[V_0(1-q^2) - E\right] + \frac{3}{8}\frac{\hbar^2}{m}\left\{\frac{1}{q^2} - \frac{4}{3}\frac{1}{q^2}\right]$$

$$\tilde{V}(q) = \frac{4(V_0 - E)}{\alpha^2}\frac{1}{q^2} - \frac{8V_0}{\alpha^2} + \frac{4V_0 q^2}{\alpha^2} - \frac{\hbar^2}{8mq^2}$$

On pose $w^2 = \frac{8V_0}{m\alpha^2}$ et $\nu^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2\alpha^2}$

$$\tilde{V}(q) = \frac{1}{2}mw^2q^2 + \frac{\hbar^2(4\nu^2 - 1/4)}{2mq^2} - mw^2$$