

Chapitre 01 : Introduction sur les intégrales de chemins :

- Introduction :

L'introduction au début du 20^{ème} siècle de la MQ a permis la compréhension de nombreux phénomènes naturels se produisant à l'échelle atomique ou subatomique.

Avant la physique était décrite par les lois de Newton pour la matière et les équations de Maxwell pour le rayonnement, jusqu'au jour où cette physique a montré ses limites.

En effet les physiciens n'ont pas pu donner une explication rigoureuse à plusieurs phénomènes physiques tels que :

- L'Effet photo-électrique.
- Effet Compton
- Rayonnement du corps noir.

Trois formalismes mathématiques de la théorie quantique non-relativiste ont été élaborés afin d'expliquer ces phénomènes.

1.2 Naissances de la mécanique quantique

- Introduction du quant (Planck). (quantification de l'énergie) 1900
- Quanta d'énergie photoélectrique (Einstein 1905)
- Dualité onde-corpustule (De Broglie 1924).

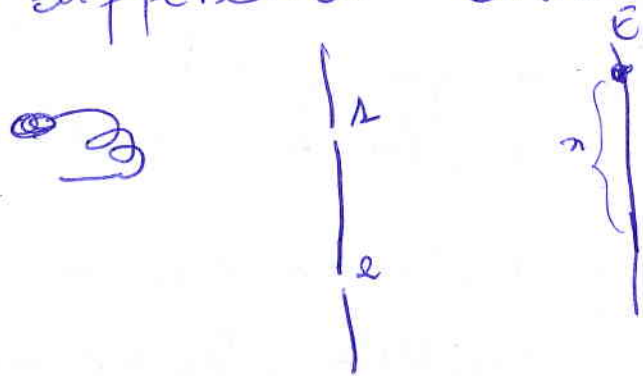
Les trois arrivent des trois formulations de la mécanique quantique.

1. Formalisme de Schrödinger. $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \hat{H} \Psi(x,t)$
2. Formalisme de Heisenberg. $i\hbar \frac{d\hat{O}}{dt} = [\hat{O}, \hat{H}]$
3. Formalisme de Feynman

Si Heisenberg et Schrödinger ont proposé des théories basées sur la notion d'Hamiltonien, Feynman a, ~~en~~ proposé une formulation Lagrangienne de la mécanique quantique non-relativiste.

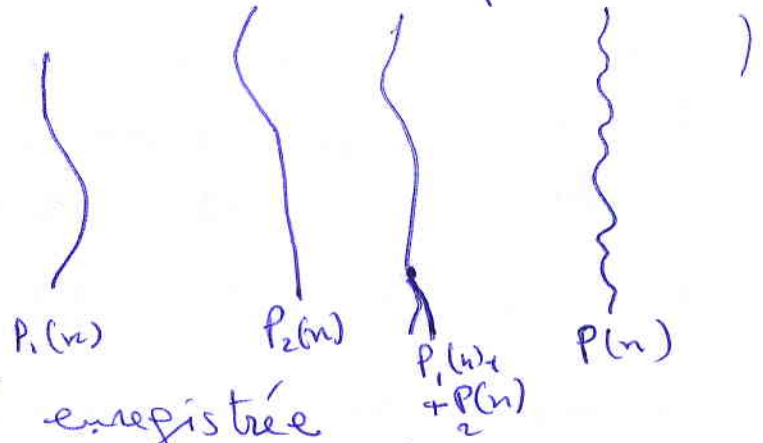
C'est en étudiant la relation entre les dynamiques classiques et quantique que Dirac a montré que la fonction de Green solution de l'équation de Schrödinger peut s'exprimer dans un intervalle de temps infinitésimal, comme l'exponentiel de l'action :

Inspiré de l'expérience des interférences de Young, Feynman a imaginé un dispositif expérimental dans lequel la source lumineuse est remplacée par un canon à électrons. Les électrons sont captés par un détecteur placé à différentes distances x du centre de l'écran E .



Expérience de Feynman

Les résultats enregistrés sur l'écran sont représentés sur la figure suivante



$P(n)$ donne l'intensité enregistrée par le détecteur le long de l'écran lorsque les deux fentes sont ouvertes.

$P_1(n)$ représente l'intensité enregistrée en fermant la fente 1 et en laissant la fente 2 ouverte.

$P_2(n)$ concerne le cas où nous ouvrons la première fente et en laissant la seconde fermée.

Les résultats ~~enregistrés~~ obtenus nous permettent de constater que: $P(n) \neq P_1(n) + P_2(n)$

Ceci nous conduit à conclure que les électrons ont un comportement ondulatoire. Dans le but de donner un sens physique à ces résultats, Feynman a introduit la notion d'amplitude de probabilité complexe $\phi(n)$ où $P(n)$ n'est autre que son module au carré:

$$P(n) = |\phi(n)|^2$$

$$\text{D'où } \begin{cases} P_1(n) = |\phi_1(n)|^2 \\ P_2(n) = |\phi_2(n)|^2 \end{cases}$$

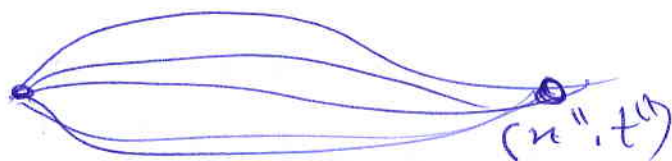
L'amplitude de probabilité pour que l'électron passe en un point situé à une distance x du centre de l'écran est donné par la somme des deux amplitudes $\phi = \phi_1 + \phi_2$

$$|\phi|^2 = |\phi_1|^2 + |\phi_2|^2 + 2\phi_1\phi_2^*$$

L'expérience précédente peut être étendue au cas ~~d'un~~ d'un écran comportant un grand nombre de fentes. L'amplitude de probabilité totale, correspondant à tout les chemins possibles, est donné par la somme des contributions des amplitudes partielles relatives à toutes les fentes.

Feynman a appliqué ces résultats au cas d'une particule se déplaçant d'un point espace-temps (x', t') à un autre (x'', t'') .

(x', t')



L'amplitude de probabilité totale est la somme de toute les probabilité relative à tout les chemins possibles.

$$\phi = \phi_1 + \phi_2 + \dots + \phi_n$$

$$K(x'', t'', x', t') = \sum_{\text{sur tout les chemins possibles}} \phi_i(x'')$$

Postulat de Feynman

Dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste et avec les notions de propagateur et de chemin d'espace-temps, Feynman donne une nouvelle formulation du postulat concernant l'évolution des systèmes physiques ~~pour~~ afin de calculer la probabilité pour passer entre deux points espace-temps:

Postulat 1:

L'amplitude totale est donnée par la contribution des amplitudes relatives à toutes les trajectoires.

Postulat 2:

La contribution de tous les chemins est identique, elle diffère uniquement par la phase:

$$K(x'', t''; x', t') = \text{cte} \exp\left\{\frac{iS}{\hbar}\right\};$$

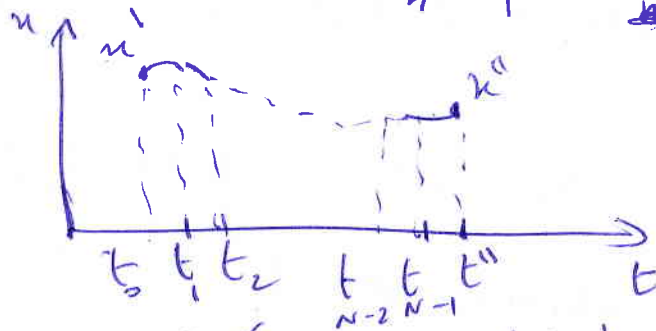
Où $K(x'', t''; x', t')$ est le propagateur, définissant l'amplitude de probabilité pour que la particule passe du point espace-temps (x', t') à (x'', t'')



La difficulté qui surgit est le calcul de la fonction d'onde $\psi(x(t))$ relative au chemin $x(t)$, pour cela, Feynman propose de discrétiser chaque chemin, en divisant l'intervalle $[t', t'']$ en N intervalles s'égal de largeur ϵ ,

où $t_0 = t'$
 $t_N = t''$ tel que $\epsilon = t_{i+1} - t_i$, ie $N\epsilon = t'' - t'$

notons par $x(t_n) = x_n$ pour $n=0, 1, \dots, N$



$\phi(x)$ est remplacée par $\phi(x_0, x_1, \dots, x_{N-1}, x_N)$

ϕ est une fonctionnelle qui dépend d'une infinité de variable.

En exploitant le résultat de Dirac, selon lequel le propagateur relatif à une particule se mouvant entre deux points très voisins et soumise à un potentiel $V(x)$ peut s'écrire comme [4]:

$$K(x_{n+1}, t_{n+1}; x_n, t_n) = k(x_{n+1}, x_n; \varepsilon)$$

$$= \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{\varepsilon^2} - V(x_n) \right] \right\}$$

Le propagateur s'écrit en fonction de U l'opérateur évolution dans le temps comme:

$$K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \langle x_2 | U(t_2, t_1) | x_1 \rangle$$

Où $U(t_2, t_1)$ est l'opérateur évolution dans le temps.

$$|\psi(t_2)\rangle = U(t_2, t_1) |\psi(t_1)\rangle$$

$$\langle x_2 | \psi(t_2) \rangle = \langle x_2 | U(t_2, t_1) | \psi(t_1) \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} |x_1\rangle \langle x_1 | \psi(t_1) \rangle dx_1$$

[4]: R.A.M. Dirac, The principles of Quantum mechanics (Oxford University press (1985)).

$$\psi(u_2, t_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle u_2 | u(t_2, t_1) | u_1 \rangle \langle u_1 | \psi(t_1) \rangle du_1$$

$$\psi(u_2, t_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(u_2, t_2; u_1, t_1) \psi(u_1, t_1) du_1$$

Quand t_2 est voisin de t_1 , c.à.d. $t_2 = t_1 + \varepsilon$

$$\psi(u_2, t_1 + \varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(u_2, t_2; u_1, t_1) \psi(u_1, t_1) du_1$$

La décomposition de l'intervalle de temps $[t^0, t^1]$ en N intervalles de temps égaux, nous permet à partir de l'équation précédente, d'exprimer le propagateur global sous la forme:

$$K(u^0, t^0; u^1, t^1) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \int \cdots \int K(u_N, u_{N-1}; \varepsilon) \prod_{j=1}^{N-1} K(u_j, u_{j-1}; \varepsilon) du_j$$

Le remplacement de chaque propagateur $K(u_j, u_{j-1}; \varepsilon)$ par son expression conduit à:

$$K(u^0, t^0; u^1, t^1) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{1/2} \int \cdots \int \prod_{j=1}^{N-1} \frac{du_j}{\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{1/2}} \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \varepsilon \sum_{k=1}^N S(u_k, u_{k-1}; \varepsilon) \right]$$

$$\text{où } S(u_k, u_{k-1}; \varepsilon) = \frac{m}{2} \frac{(u_k - u_{k-1})^2}{\varepsilon} - V(u_k)$$

D'une manière condensée:

$$K(x'', t'', x', t') = \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[x(t)] \right] \mathcal{D}[x(t)]$$

① $\mathcal{D}[x(t)]$ est la mesure différentielle relative
à tous les chemins ~~possibles~~ $x(t)$

3 - Intégrale de chemin en coordonnées cartésiennes et dans l'espace des phases par le produit de Lie Trotter:

En partant du fait que le propagateur de Feynman n'est autre que l'élément de matrice de l'opérateur évolution dans le temps, entre deux états $|n\rangle$ et $|n'\rangle$ de l'espace des configurations.

$$K(n'', t''; n', t') = \langle n'' | e^{-i\hat{H}T/\hbar} | n' \rangle \quad (3-1)$$

$$T = t'' - t' \text{ et } \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(n) \quad (3-2)$$

T est le temps dans lequel il s'effectue le passage $|n', t'\rangle \longrightarrow |n'', t''\rangle$

$\hat{V}(n)$ a pour états propres $|n\rangle$: $\hat{V}(n)|n\rangle = V(n)|n\rangle \quad (3.3)$

$T = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ a pour états propres $|p\rangle$: $\frac{\hat{p}^2}{2m}|p\rangle = \frac{p^2}{2m}|p\rangle \quad (3.4)$

En utilisant la formule de Lie Trotter.

$$e^{A+B} = \lim_{N \rightarrow \infty} (e^{A/N} e^{B/N})^N \quad (3.1)$$

Ceci nous permet de mettre le propagateur (3.1) sous forme d'une intégrale multiple de Riemann de dimension N, il en résulte:

$$K(n'', t''; n', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle n'' | e^{-\frac{\lambda \hat{p}^2}{2m}} e^{-\lambda \hat{V}_N} \dots e^{-\frac{\lambda \hat{p}^2}{2m}} e^{-\lambda \hat{V}_N} | n' \rangle \quad (3.6)$$

$$\text{avec: } \lambda = i \frac{(t'' - t')}{\hbar} = i \frac{T}{\hbar} \quad (3.7)$$

En injectant (n-1) fois la relation de fermeture

$$\int |n_j\rangle \langle n_j| dn_j = 1; \text{ cela donne:}$$

$$K(x^0, t^0, u^0, t^0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \dots \int dx_{N-1} \langle x^0 | e^{-\frac{\lambda \hat{P}_{N-1}^2}{2mN}} e^{-\lambda \hat{V}_{N-1}} | x_{N-1} \rangle$$

$$\times \int dx_{N-2} \langle x_{N-1} | e^{-\frac{\lambda \hat{P}_{N-2}^2}{2mN}} e^{-\lambda \hat{V}_{N-2}} | x_{N-2} \rangle \dots$$

$$\int dx^0 \langle x^0 | e^{-\frac{\lambda \hat{P}_1^2}{2mN}} e^{-\lambda \hat{V}_1} | x^0 \rangle \quad - (3.8)$$

ou encore $K = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \dots \int \prod_{j=1}^N \frac{1}{\pi} \exp \left[-\lambda V(x_{j-1}^0) \right]$

$$\langle x_j | \exp \left\{ -\lambda \frac{\hat{P}_{j-1}^2}{2mN} \right\} | x_{j-1} \rangle = \frac{1}{\pi} \int dx_j \quad (3.9)$$

Nous pouvons calculer l'élément de matrice de l'opérateur énergie cinétique, en injectant la relation de fermeture de l'espace des impulsions

$$\langle x_j | \exp \left[-\lambda \frac{\hat{P}_{j-1}^2}{2mN} \right] | x_{j-1} \rangle = \int \langle x_j | \exp \left[-\lambda \frac{P^2}{2mN} \right] | p_j \rangle \langle p_j | x_{j-1} \rangle dp_j \quad - (3.10)$$

En remplaçant $\langle p_j | x_{j-1} \rangle$ par son expression, il vient :

$$\langle x_j | p_j \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i p_j x_j / \hbar} \quad - (3.11)$$

$$\langle p_j | x_{j-1} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i p_j x_{j-1} / \hbar} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \langle x_j | \exp \left\{ -\lambda \frac{\hat{P}_{j-1}^2}{2mN} \right\} | x_{j-1} \rangle &= \int \langle x_j | \exp \left\{ -\lambda \frac{P_j^2}{2mN} \right\} | p_j \rangle \langle p_j | x_{j-1} \rangle dp_j \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[\left(\frac{P_j^2}{2mN} - p_j (x_j - x_{j-1}) \right) \right] \right\} dp_j \quad (3.13) \end{aligned}$$

En utilisant la relation suivante :

$$\int e^{-\alpha n^2 - \beta n} dn = e^{\beta^2/4\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (3.14)$$

la relation (3.13) devient:

$$\begin{aligned} & \langle n_j | \exp \left[-i \frac{\hat{P}^2}{2m\hbar\epsilon} \right] | n_{j-1} \rangle \\ &= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon}} \exp \left[\frac{im}{2\hbar\epsilon} (n_j - n_{j-1})^2 \right] \end{aligned} \quad (3.15)$$

La substitution de (3.15) dans (3.9) nous conduit à :

$$K(x'', t'', x', t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \dots \int \prod_{j=1}^N \left[\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon} \right]^{1/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{m(n_j - n_{j-1})^2}{2\epsilon} - \epsilon V(n_j) \right] \right\} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \quad (3.16)$$

$$\text{Or : } \prod_{j=1}^N e^{i\omega_j} = \exp \left\{ i \sum_{j=1}^N \omega_j \right\} \quad (3.17)$$

Il en découle :

$$\begin{aligned} K(x'', t'', x', t) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon} \right)^{N/2} \int \dots \int \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\sum_{j=1}^N \frac{m}{2\epsilon} (n_j - n_{j-1})^2 - \epsilon V(n_j) \right] \right\} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \end{aligned} \quad (3.18)$$

Parfois, il est avantageux de travailler avec des propagateurs contenant l'Hamiltonien $\hat{H}$ au lieu du Lagrangien $\mathcal{L}$.

4 Exemples d'application:

Le lagrangien relatif à la particule libre est donné par: $L(x, \dot{x}) = m \frac{\dot{x}^2}{2} - U$ (4.1)

En utilisant la forme discrétisée du propagateur

$$K(x'', t'', x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{A} \int \prod_{k=1}^{N-1} \frac{dx_k}{A} e^{\frac{iS}{\hbar}} \quad (4.2)$$

avec $\epsilon = \frac{t'' - t'}{N}$ et $S = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{2} m (\frac{x_{k+1} - x_k}{\epsilon})^2 -$

$x_0 = x' \quad x_N = x'' \quad , \quad A = \left(\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m} \right)^{1/2}$

Prenons la première intégrale:

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 e^{\frac{i m}{2 \hbar \epsilon} [(x_1 - x_0)^2 + (x_2 - x_1)^2]} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 e^{\frac{i m}{2 \hbar \epsilon} [2(x_1 - \frac{1}{2}(x_0 + x_2))^2 + \frac{1}{2}(x_2 - x_0)^2]} \\ &= \sqrt{\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m} \frac{1}{2}} e^{\frac{i m}{2 \hbar \epsilon} \frac{1}{2} (x_2 - x_0)^2} \end{aligned}$$

Nous remarquons que x_1 a disparu

Prenons la deuxième intégrale:

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 e^{\frac{i m}{2 \hbar \epsilon} [\frac{1}{2}(x_2 - x_0)^2 + (x_3 - x_2)^2]} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 e^{\frac{i m}{2 \hbar \epsilon} [\frac{3}{2}(x_2 - \frac{1}{3}x_0 - \frac{2}{3}x_3)^2 + \frac{1}{3}(x_3 - x_0)^2]} \\ &= \sqrt{\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m} \frac{2}{3}} e^{\frac{i m}{2 \hbar \epsilon} \frac{1}{3} (x_3 - x_0)^2} \end{aligned}$$

En raisonnant par récurrence, nous pouvons démontrer que:

$$\int dx_n e^{\frac{im}{2\epsilon\hbar} \left[\frac{1}{n} (x_n - x_0)^2 + (x_{n+1} - x_n)^2 \right]}$$

$$= \int dx_n e^{\frac{im}{2\epsilon\hbar} \left[\frac{n+1}{n} \left(x_n - \left(\frac{1}{n+1} x_0 + \frac{n}{n+1} x_{n+1} \right) \right)^2 + \frac{1}{n+1} (x_{n+1} - x_0)^2 \right]}$$

$$= \underbrace{\sqrt{\frac{2\pi i \epsilon \hbar}{m} \frac{n}{n+1}}}_A e^{\frac{im}{2\epsilon\hbar} \frac{1}{n+1} (x_{n+1} - x_0)^2}$$

Donc en calculant tout les termes, on trouve le propagateur relative à la particule libre

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{A} \sqrt{\frac{1}{2} \frac{2}{3} \dots \frac{N-1}{N}} e^{\frac{im}{2\epsilon\hbar N} (x'' - x')^2}$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t'' - t')}} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{(x'' - x')^2}{t'' - t'}}$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{(x'' - x')^2}{T}}$$

2^e méthode: En utilisant la forme

Hamiltonienne. $H = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, $1 = \int |p\rangle \langle p| dp$

$$K(x'', x', T) = \langle x'' | e^{-\frac{i}{\hbar} H T} | x' \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \langle x'' | p \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} T \frac{p^2}{2m}} \langle p | x' \rangle$$

En utilisant la relation: $\frac{i}{\hbar} p x''$

$$\langle x'' | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p x''}$$

$$\langle p | x' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} p x'}$$

Le propagateur devient:

$$K(x'', x', T) = \frac{1}{2\pi i \hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\alpha} e^{\frac{i}{\hbar} \left[p(x'' - x') - T \frac{p^2}{2m} \right]}$$

En utilisant l'intégrale:

$$I_1[\alpha, j] = \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{-\alpha u^2 + j u} \quad j \in \mathbb{R}$$

$$= \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{j^2 / 4\alpha}$$

$$\text{avec } \begin{cases} j = \frac{i}{\hbar} (x'' - x') \\ \alpha = \frac{i}{m} \frac{1}{\hbar} \end{cases}$$

On aura :

$$K(x'', x', T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} e^{\frac{i m}{2\hbar T} (x'' - x')^2}$$