

Chapitre II: Propagateur relatif aux lagrangiens de forme quadratique. Introduction;

Il existe de nombreuses techniques de calcul du propagateur. Nous pouvons citer parmi ces dernières.

- Le calcul direct des Gaussiennes.
- L'algèbre des matrices où l'argument de l'exponentielle est exprimé en fonction d'un produit de matrices.
- Dans le cas où le potentiel étudié a une forme compliquée, nous utilisons les transformations spatio-temporelle.
- Pour des Lagrangien de forme quadratique nous utilisons la formule de Van-Vleck-Pauli-Morette.

$$K(\vec{n}, t; \vec{n}', t') = \sqrt{\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\delta^2 S_{cl}}{\delta \vec{n}' \delta \vec{n}}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}}$$

2- Développement de la méthode:

Notre but est la détermination du propagateur en fonction de l'action classique. Cette dernière est donnée par:

$$S_{cl} = \int_{t'}^{t''} L(\vec{x}_cl, \dot{\vec{x}}_cl) dt$$

Où $\vec{x}_cl$ satisfait l'équation de Lagrange

$$\left[\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} \right]_{x=\vec{x}_cl} = 0$$

$$\hat{P} \rightarrow \hat{Q}$$

Le changement de variable ~~plus~~ plus simple est de diviser le chemin $x(t)$ en deux parties:

$$x(t) = x_c(t) + y(t)$$

$x_c(t)$ représente le chemin classique $x_c(t)$.

$y(t)$ est considérée comme une fluctuation quantique.

Ceci donne: $\dot{x}(t) = \dot{x}_c(t) + \dot{y}(t)$;

avec la condition aux limites:

$$y(t_i) = y(t_f) = 0$$

Pour cette nouvelle variable d'intégration, nous avons: $\mathcal{D}x(t) = \mathcal{D}y(t)$

En utilisant la définition de la dérivée d'une fonctionnelle, le développement de Taylor de l'action donne:

$$S[x_c(t) + y(t)] = \int_{t_i}^{t_f} L(x_c + y, \dot{x}_c + \dot{y}) dt$$

$$= \int_{t_i}^{t_f} \left[L(x_c, \dot{x}_c) + \frac{\partial L}{\partial x} \bigg|_{x_c} y + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \bigg|_{x_c} \dot{y} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \bigg|_{x_c} y^2 \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \bigg|_{x_c} \dot{y}^2 \right] dt$$

$$= S_c + \frac{\partial L}{\partial x} y \bigg|_{t_i}^{t_f} + \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \right] \bigg|_{x_c} y dt$$

$$+ \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{1}{2} \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \bigg|_{x_c} y^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \bigg|_{x_c} \dot{y}^2 \right] dt$$

Où nous avons utilisé d'intégration par partie suivante:

$$\int \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} \dot{y} dt = \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} y \right|_{t_i}^{t_f} - \int \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{y}} y \right) dt$$

$$u \dot{v} = u \cdot v - \frac{d}{dt} u v$$

Pour un oscillateur harmonique.

$$L = \frac{1}{2} m \dot{y}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 y^2$$

$$S = S_{cl} + \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{1}{2} m \dot{y}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 \right] dt$$

D'une façon générale la relation de Van-Vleck — Pauli — Morette s'écrit comme:

$$K(\vec{r}_f, t_f; \vec{r}_i, t_i) = \left(\frac{1}{2\pi i \hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{\det \left[\frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial \vec{r}_i \partial \vec{r}_f} \right]} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_{cl} \right\}$$

Pour des Lagrangiens de forme quadratiques en $\dot{r}$ et r , l'action du système se réduit à l'action classique, les effets quantiques sont contenues dans le déterminant.

Exemple 1: Particule libre: $\mathcal{L} = m \frac{\dot{x}^2}{2}$

L'équation de Lagrange relative à x Lagrangien est donnée par:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = 0 \text{ et } \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$$

D'où: $\ddot{x} = 0 \Rightarrow x(t) = \alpha t + \beta$

En utilisant les conditions aux limites:

$$x(t'') = x'' \text{ et } x(t') = x' \text{ nous trouvons:}$$

$$\begin{aligned} x' &= \alpha t' + \beta \quad (1) \\ x'' &= \alpha t'' + \beta \quad (2) \end{aligned} \Rightarrow \begin{cases} \alpha = \frac{x'' - x'}{t'' - t'} = \frac{x'' - x'}{T} \\ \beta = x' - \alpha t' \end{cases}$$

nous avons:

$$x_{cl} = \alpha t + \beta \Rightarrow \dot{x}_{cl} = \alpha$$

ou encore: $\frac{m}{2} \dot{x}_{cl}^2 = \frac{m}{2} \alpha^2$

Ceci donne: $S_{cl} = \int \frac{m}{2} \dot{x}_{cl}^2 dt = \frac{m}{2} \alpha^2 (t'' - t')$

$$S_{cl} = \frac{m}{2} \frac{(x'' - x')^2}{T} \text{ , avec } T = t'' - t'$$

$$\boxed{S_{cl} = \frac{m}{2T} (x'' - x')^2}$$

De même: $\frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial x'' \partial x'} = \frac{\partial^2}{\partial x' \partial x''} \left[\frac{m}{2T} (x''^2 + x'^2 - 2x'x'') \right]$

$$= -\frac{m}{T}$$

$$\begin{aligned} K(x'', x', T) &= \sqrt{\frac{1}{2\pi i \hbar} \left| \frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial x'' \partial x'} \right|} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}} \\ &= \sqrt{\frac{1}{2\pi i \hbar} \left| -\frac{m}{T} \right|} e^{\frac{i m}{2\hbar T} (x'' - x')^2} \end{aligned}$$

$$K(x'', \dot{x}', T) = \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar T}} \exp\left[\frac{im}{2\hbar T} (x'' - \dot{x}')^2\right]$$

Exemple 2 : Oscillateur harmonique:

$$L = \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{m}{2} \omega^2 x^2$$

Ceci conduit à

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -m\omega^2 x \quad \text{et} \quad \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) = m\ddot{x}$$

D'où : $m\ddot{x} + m\omega^2 x = 0$, cette équation a pour

solution:

Les conditions aux limites nous permettent d'écrire

$$x(t) = A \sin \omega t + B \cos \omega t$$

$$\dot{x}(t) = A \cos \omega t - B \sin \omega t$$

D'autre part, t''

$$S_a = \int_{t'}^{t''} \left[\frac{m}{2} \dot{x}_a^2 - \frac{m}{2} \omega^2 x_a^2 \right] dt$$

$$\text{or : } \frac{m}{2} \int_{t'}^{t''} \dot{x}^2 dt = \frac{m}{2} \int_{t'}^{t''} \dot{x}_a \dot{x}_a dt$$

$$= \frac{m}{2} \left[\dot{x}_a x_a \right]_{t'}^{t''} - \frac{m}{2} \int_{t'}^{t''} \ddot{x}_a x_a dt$$

$$= \frac{m}{2} \left[\dot{x}_a'' x_a'' - \dot{x}_a' x_a' \right] - \frac{m}{2} \int_{t'}^{t''} \left[\omega^2 x_a^2 + \ddot{x}_a x_a \right] dt$$

$$= \frac{m}{2} \int_{t'}^{t''} (\omega^2 x_a - \ddot{x}_a) x_a dt$$

$$S_a = \frac{m}{2} \left[\dot{x}_a'' x_a'' - \dot{x}_a' x_a' \right]$$

On calcule de A et B pour pouvoir calculer S_a

$$x = x(t') = A \sin \omega t' + B \cos \omega t' \quad (1)$$

$$x'' = x(t'') = A \sin \omega t'' + B \cos \omega t'' \quad (2)$$

$$(1) \Rightarrow A \sin \omega t' \sin \omega t'' + B \cos \omega t' \sin \omega t'' = x' \sin \omega t''$$

$$(2) \times (-\sin \omega t') \Rightarrow$$

$$-A \sin \omega t' \sin \omega t'' - B \cos \omega t' \sin \omega t'' = -x'' \sin \omega t' \quad (4)$$

$$(3) + (4) \Rightarrow B \left[\cos \omega t' \sin \omega t'' - \cos \omega t'' \sin \omega t' \right]$$

$$= x' \sin \omega t'' - x'' \sin \omega t' \quad \sin \omega(t'' - t')$$

Ceci donne :

$$\begin{cases} B = \frac{x' \sin \omega t'' - x'' \sin \omega t'}{\sin \omega T} \\ \text{et} \\ A = \frac{x'' \cos \omega t' - x' \cos \omega t''}{\sin \omega T} \end{cases}$$

$$\text{où } T = t'' - t'$$

$$x'_a = \omega A \cos \omega T - \omega B \sin \omega t'$$

En calculant tout les termes de S_a ,
On aboutit à :

$$S_a = \frac{m\omega}{2\sin \omega T} \left[(x'^2 + x''^2) \cos \omega T - 2x'x'' \right]$$

Le propagateur s'écrit comme :

$$K(x'', x', T) = \frac{1}{\mathcal{N}} e^{\frac{i}{\hbar} S_a}$$

Comme $L = m \frac{\dot{x}^2}{2} - \frac{m\omega^2}{2} x^2$ est quadratique,
nous utilisons la formule de Van Vleck
Pauli - Morette.

$$C_{cl} = \sqrt{\frac{1}{2\pi i \hbar} \left| \frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial \dot{x} \partial \dot{x}'} \right|} = \sqrt{\frac{m \omega}{2 i \hbar \hbar m \omega T}}$$

Ce qui donne:

$$K(x'', \dot{x}'', T) = \sqrt{\frac{m \omega}{2 i \hbar \hbar m \omega T}} e^{\frac{i m \omega}{\hbar} \left[\left(\frac{x''^2 + x'^2}{2} \right) \cos \omega T - 2 x' x'' \right]}$$

Cas limite:

Lorsque $\omega \rightarrow 0$, $L \rightarrow m \frac{\dot{x}^2}{2}$ (Particule libre)

$$C_{cl} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T} \left(\frac{\omega T}{m \omega T} \right)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}}$$

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} S_{cl} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{m}{2T} \frac{\omega T}{m \omega T} \left[\left(\frac{x''^2 + x'^2}{2} \right) \cos \omega T - 2 x' x'' \right]$$

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} S_{cl} = \frac{m}{2T} \left[x''^2 + x'^2 - 2 x' x'' \right] = \frac{m}{2T} (x'' - x')^2$$

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} K_{OH} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2T} (x_b - x_a)^2}$$

= $K_{\text{particule libre}}$