

Chapitre 03: Intégrales de Parcours

dans un système de coordonnées généralisées:
(cas de coordonnées polaires).

Nous nous proposons de calculer le propagateur relatif à un potentiel $V(\vec{q})$ à deux dimensions

$$V(\vec{q}) = V(x, y)$$

Le propagateur relatif à ce potentiel a pour forme:

$$K(\vec{q}'' , \vec{q}' , T) = \lim_{N \rightarrow \infty} A_N \int \dots \int_{j=1}^{N-1} d\vec{q}_j \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N S_j \right]$$

$$\text{où } S_j = \frac{m}{2\varepsilon} (\vec{q}_j - \vec{q}_{j-1})^2 - \varepsilon V(\vec{q}_j)$$

$$\text{avec } \vec{q}' = \vec{q}_0 \text{ et } \vec{q}'' = \vec{q}_N$$

$$\text{La constante de normalisation } A_N = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{N/2}$$

Pour passer des coordonnées (x, y) aux coordonnées (r, θ) nous devons utiliser la règle du point milieu (mid-point) où toutes les quantités doivent être calculées au point milieu.

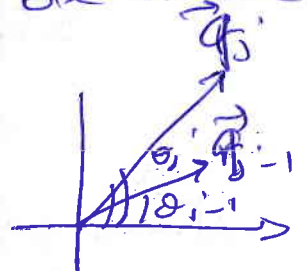
Nous devons également garder dans la transformation les termes au plus de même ordre que ε .

Nous pouvons écrire:

$$(\Delta \vec{q}_j)^2 = (\vec{q}_j - \vec{q}_{j-1})^2$$

$$= \vec{q}_j^2 + \vec{q}_{j-1}^2 - 2\vec{q}_j \cdot \vec{q}_{j-1} \cos \Delta \theta_j \quad (\Delta \theta_j = \theta_j - \theta_{j-1})$$

$$= \vec{q}_j^2 + \vec{q}_{j-1}^2 - 2\vec{q}_j \cdot \vec{q}_{j-1} + 2\vec{q}_j \cdot \vec{q}_{j-1} (1 - \cos \Delta \theta_j)$$



En coordonnées polaire, nous avons :

$$\begin{aligned}
 (\Delta \vec{q}_j)^2 &= \cancel{(\Delta \vec{r}_j)^2} \\
 &= \underbrace{r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2r_j r_{j-1}}_{(r_j - r_{j-1})^2} + 2r_j r_{j-1} (1 - \cos \Delta \theta_j) \\
 &= (\Delta r_j)^2 + 2r_j r_{j-1} (1 - \cos \Delta \theta_j) \quad \text{or } q_j = |\vec{q}_j| = r_j
 \end{aligned}$$

La notion de mid-point, nous permet d'écrire :

$$\tilde{r}_j = \frac{r_j + r_{j-1}}{2},$$

$$\begin{aligned}
 \text{alors : } 4\tilde{r}_j^2 &= r_j^2 + r_{j-1}^2 + 2r_j r_{j-1} \\
 &= (r_j - r_{j-1})^2 + 4r_j r_{j-1}
 \end{aligned}$$

$$r_j r_{j-1} = \tilde{r}_j^2 - (\Delta r_j)^2$$

$$\begin{aligned}
 (\Delta \vec{q}_j)^2 &= (\Delta r_j)^2 + \left[2\tilde{r}_j^2 - \frac{(\Delta r_j)^2}{2} \right] \left[\frac{(\Delta \theta_j)^2}{2!} - \frac{(\Delta \theta_j)^4}{4!} + \dots \right] \\
 (\Delta \vec{q}_j)^2 &= (\Delta r_j)^2 + \tilde{r}_j^2 (\Delta \theta_j)^2 - \frac{1}{12} \tilde{r}_j^2 (\Delta \theta_j)^4 - \frac{1}{4} (\Delta r_j)^2 (\Delta \theta_j)^2
 \end{aligned}$$

On ne peut pas prendre les termes supérieurs car ils conduisent à des contributions en $\epsilon^2, \epsilon^3, \dots$

D'où alors :

$$\begin{aligned}
 S_j &= \frac{m}{2\epsilon} \left[(\Delta r_j)^2 + \tilde{r}_j^2 (\Delta \theta_j)^2 \right] - \epsilon \tilde{V}_j - \frac{m}{8\epsilon} \left[(\Delta r_j)^2 (\Delta \theta_j)^2 \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{3} \tilde{r}_j^2 (\Delta \theta_j)^4 \right].
 \end{aligned}$$

Nous pouvons développer $\exp \frac{i}{\hbar} S_j$ comme suit :

$$\begin{aligned}
 \exp \frac{i}{\hbar} S_j &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2\epsilon} \left[(\Delta r_j)^2 + \tilde{r}_j^2 (\Delta \theta_j)^2 \right] - \epsilon \tilde{V}_j \right\} \right] \\
 &\times \left\{ 1 - \frac{i m}{8\hbar \epsilon} \left[(\Delta r_j)^2 (\Delta \theta_j)^2 + \frac{1}{3} \tilde{r}_j^2 (\Delta \theta_j)^4 \right] \right\}
 \end{aligned}$$

Il nous a donc permis que les termes $(\Delta r_j)^2 (\Delta \theta_j)^2$ et $(\Delta \theta_j)^4$ dont la contribution donne des termes en ϵ^4

Transformons maintenant la mesure du système

$$\prod_{j=1}^{N-1} dr_j d\theta_j = \prod_{j=1}^{N-1} r_j dr_j d\theta_j$$

$$\prod_{j=1}^{N-1} r_j = r_1 r_2 r_3 \dots r_{N-1} = \frac{r_0^{1/2}}{r_0^{1/2}} (r_1^{1/2} r_1^{1/2}) (r_2^{1/2} r_2^{1/2}) \dots (r_{N-1}^{1/2} r_{N-1}^{1/2}) \frac{r_N^{1/2}}{r_N^{1/2}}$$

$$\frac{1}{\sqrt{r_0 r_N}} \prod_{j=1}^N (r_j r_{j-1})^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{r_0 r_N}} \prod_{j=1}^N \left(r_j^2 - \frac{(\Delta r_j)^2}{4} \right)^{1/2}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{r_0 r_N}} \prod_{j=1}^N \tilde{r}_j \left(1 - \frac{(\Delta r_j)^2}{8 \tilde{r}_j^2} \right)$$

D'où :

$$\prod_{j=1}^{N-1} dr_j d\theta_j = \frac{1}{\sqrt{r_0 r_N}} \prod_{j=1}^N \tilde{r}_j \left(1 - \frac{(\Delta r_j)^2}{8 \tilde{r}_j^2} \right) \times \prod_{j=1}^{N-1} dr_j d\theta_j$$

Le "time sliced" propagateur s'écrit comme :

$$K(r'', \theta''; r', \theta'; T) = \frac{1}{\sqrt{r' r''}} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{A}{N} \int \prod_{j=1}^{N-1} dr_j d\theta_j$$

$$\times \prod_{j=1}^N \tilde{r}_j \left[\exp \left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2\epsilon} (\Delta r_j)^2 + \tilde{r}_j^2 (\Delta \theta_j)^2 - \epsilon \tilde{V}_j \right\} \right] \right]$$

$$\times \prod_{j=1}^N \left\{ 1 - \frac{1}{8} \frac{(\Delta r_j)^2}{\tilde{r}_j^2} - \frac{i m}{8 \hbar \epsilon} \left[(\Delta r_j)^2 (\Delta \theta_j)^2 + \frac{\tilde{r}_j^2}{3} (\Delta \theta_j)^4 \right] \right\}$$

L'intégration sur $dr_j d\theta_j$ sera remplacée par celle relative à $d\Delta r_j d\Delta \theta_j$ (relation de 3)

la dérivée).

On utilise la méthode de McLaurghlin-Schulman qui consiste à intégrer sur (Δr_j) et $(\Delta \theta_j)$ via la relation :

$$\int u^{2n} e^{-\frac{\alpha}{2\beta} u^2} du = \frac{(2n-1)!!}{\left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^n} \int e^{-\frac{\alpha u^2}{2\beta}} du$$

Dans notre cas :

$$\beta = -\frac{\hbar \varepsilon}{im} \text{ et } \alpha = \begin{cases} \frac{1}{m \tilde{r}_j^2} \\ \frac{1}{m \tilde{r}_j^2} \end{cases}$$

La contribution de terme :

$$(\Delta r_j)^2 \rightarrow i \frac{\hbar \varepsilon}{m} ; (\Delta \theta_j)^2 \rightarrow \frac{i \hbar \varepsilon}{m \tilde{r}_j^2}$$

$$(\Delta \theta_j)^4 \rightarrow \frac{3}{\tilde{r}_j^2} \left(\frac{i \hbar \varepsilon}{m} \right)^2$$

En rassemblant toutes les contributions, on obtient,

$$1 + \frac{i \hbar \varepsilon}{8m \tilde{r}_j^2} + \dots \sim \exp \left(\frac{i \hbar \varepsilon}{8m \tilde{r}_j^2} \right)$$

Nous obtenons finalement pour propagateur :

$$K(r''^N, \theta''^N, r'^1, \theta'^1, T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{r''^N r'^1}} A_N \int \prod_{j=1}^{N-1} dr_j d\theta_j$$

$$\prod_{j=1}^N \tilde{r}_j \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2\varepsilon} ((\Delta r_j)^2 + \tilde{r}_j^2 (\Delta \theta_j)^2) - \varepsilon (\tilde{V}_j + \Delta \tilde{V}_j) \right\} \right]$$

avec $\Delta \tilde{V}_j = -\frac{\hbar^2}{8m \tilde{r}_j^2}$

En passant à la limite $\epsilon \rightarrow 0$, l'action S devient:

$$S = \int^T \left[\frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) - V(r, \theta) \right] dt$$

Le terme correctif ΔV est contenu dans l'expression de $V(r, \theta)$.

Le terme $-\frac{\hbar^2}{8mr^2}$ est appelé correction quantique.

il permet au nouveau propagateur en (r, θ) de décrire le même problème quantique que celui décrit par les variables x et y .

Nous pouvons, par ailleurs, expliquer $-\frac{\hbar^2}{8mr^2}$ comme suit:

L'Hamiltonien classique en r et θ est donné par:

$$H = \frac{1}{2m} [P_r^2 + P_\theta^2] + V(r, \theta)$$

$\hat{H}$ en mécanique quantique est donné par:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r, \theta) \text{ où } \Delta \text{ est}$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$$

En utilisant les opérateurs hermitiques

$$P_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} \right), \quad P_\theta = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta}$$

Nous obtenons:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[P_r^2 + \frac{P_\theta^2}{r^2} \right] + \overbrace{V(r, \theta)}^{V + \Delta V} \text{ où } \Delta V = -\frac{\hbar^2}{8mr^2}$$