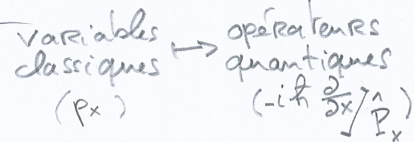


I Introduction

A Notions quantiques

1. Evolution temporelle

"Bromalisme"



Point de vue de Schrödinger:

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \quad (\text{éq. de Schr.})$$

$$\text{ex Particule: } \hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{X})$$

Solution:  $|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle$  car  $\frac{d}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} = \frac{d}{dt} (1 - \frac{i}{\hbar} \hat{H}t + \frac{1}{2!} (\frac{-i}{\hbar} \hat{H})^2 t^2 + \dots) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} - \frac{1}{\hbar^2} \hat{H}^2 t + \dots = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} (1 - \frac{i}{\hbar} \hat{H}t + \dots) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}$

$\hat{U}(t, t_0)$ : "opérateur d'évolution temporelle"

Point de vue de Heisenberg:

$$\hat{H} \hat{U}_0(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_0(t) \quad \text{puisque } |\psi(t_0)\rangle \neq 0 \quad (\text{état physique normalisé})$$

$$\langle \psi_0 | \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{O} \hat{U}_0(t) | \psi_0 \rangle$$

Expte:  $\hat{U}_0(t) = \theta(t-t_0) \exp\{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)\}$  avec  $\theta(t-t_0) \begin{cases} = 1, & t-t_0 \geq 0 \\ = 0, & t-t_0 < 0 \end{cases}$  "O. Heaviside"

Solution de:  $(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}) \hat{U}_0(t) = i\hbar \delta(t-t_0)$  [4(4) → (3)]

$$i\hbar \theta(t-t_0) \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_0(t) + i\hbar \delta(t-t_0) \hat{U}_0(t) - \hat{H} \theta(t-t_0) \hat{U}_0(t) = i\hbar \delta(t-t_0) \left( e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \right) \Rightarrow (3), t \geq t_0$$

2. Espace des moments

$$\langle x | \hat{P}_x | p_x \rangle = \frac{p_x \langle x | p_x \rangle}{\langle x | p_x | p_x \rangle} \Rightarrow \langle x | p_x \rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

convention pour T.F. (état non normalisé ⇒ superposition quant.)

"transformées de Fourier"

(principe d'incertitude d'Heisenberg)

$$\langle x | \psi \rangle = \psi(x) = \langle x | \int dp_x | p_x \rangle \langle p_x | \psi \rangle = \int dp_x \langle x | p_x \rangle \psi(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dk e^{ikx} \tilde{\psi}(k) \equiv \text{T.F.} [\tilde{\psi}(k)]$$

$$\Delta \hat{X} \cdot \Delta \hat{P}_x \geq \frac{\hbar}{2} = \frac{1}{2} \langle [\hat{X}, \hat{P}_x] \rangle = i\hbar$$

$$\tilde{\psi}(k) = \text{T.F.}^{-1}[\psi(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-ikx} \psi(x), \text{ avec T.F.}^{-1}[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \delta(x)] = 1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-ikx} \delta(x)$$

ou  $\Delta \hat{O} \equiv \sqrt{\langle \hat{O}^2 \rangle - \langle \hat{O} \rangle^2}$   
"écart type"

$$\langle \hat{P}_x \rangle_{\psi} = \langle \psi | \hat{P}_x | \psi \rangle = \int dp_x p_x |\psi(p_x)|^2$$

3. Etats propres de position Motivation: construire les états propres (de position) de l'observable de position à tout instant.

Exercice 11

Considérons l'état quantique:  $|x(t)\rangle \hat{=} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |x\rangle$  (via l'état)  $|x(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |x(t_0)\rangle$  : solution de l'équation de Schrödinger

idem  $\hat{X}(t) |x(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \hat{X}(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |x(t_0)\rangle = \hat{X}(t_0) |x(t_0)\rangle = x |x(t_0)\rangle$   
 "si même  $t_0 \Rightarrow t \geq t_0$ " état propre à  $t_0$  de  $\hat{X}(t_0)$  / ex de  $\hat{X}(0) \equiv \hat{X}$  (sans dépendance temporelle)  
 "relation de Baker-Campbell-Hausdorff pour  $[\hat{H}, \hat{X}] = 0$ "  $\int e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} = 1$   
 $\hat{X} |x\rangle = x |x\rangle$  valeur propre constante!  
 $\Rightarrow |x(t)\rangle$  état propre de  $\hat{X}(t)$ ,  $\forall t!$  (maths)  
 $|x(t)\rangle$  état physique  $\forall t$  & état propre à  $t=t_0$ .  
 $\hat{X}(t_0) |x(t_0)\rangle = x |x(t_0)\rangle \Leftrightarrow \hat{X}(t_0) |x\rangle = x |x\rangle \checkmark$

Propriétés:  $\langle x(t) | x'(t) \rangle \hat{=} \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | x' \rangle = \langle x | x' \rangle = \delta(x-x')$  selon l'orthonormalisation pour une base continue ( $\exists$  au moins 1 B.O.N. de vecteurs propres d'un op. hermitique) à  $t=t_0$ .  
 $\int dx |x(t)\rangle \langle x(t)| \hat{=} \int dx e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |x\rangle \langle x| e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} = 1$  pour un temps "t" donné  
 "intégration sur valeurs propres!" = 1 (B.O.N.)

4. Propagateurs de Feynman

$\langle x(t) | x'(t') \rangle \hat{=} \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t'-t_0)} | x' \rangle \hat{=} \langle x | \hat{U}(t, t') | x' \rangle \hat{=} K(t, x; t', x')$   
 final initial "même origine  $t_0$ "  
 formalisme quantique: projection au m temps (probabilité d'être en  $x$  à  $t$  étant en  $x'$  au temps  $t' [t-t_0: \hat{X}]$ )  
 (pour le système): amplitude

1.(2)  $\Rightarrow \Psi(x, t) \hat{=} \langle x | \Psi(t) \rangle = \langle x | \hat{U}(t, t') | \Psi(t') \rangle = \int dx' \langle x | \hat{U}(t, t') | x' \rangle \langle x' | \Psi(t') \rangle = \int dx' K(t, x; t', x') \Psi(x', t')$

Un cas simple...  $\Psi(x, t) = \int dx' K(t, x; t', x') [\delta(x_0 - x') \Psi(x', t')]$  "  $\Psi(x, t)$  pris en  $x_0$  ( $[\mathcal{D}^2] = L^{-1}$ )"  
 $= \frac{\partial}{\partial x'} K(t, x; t', x_0) \Psi(x_0, t')$  "transition de fonctions d'onde"

probabilités: soit  $\langle x | \Psi(t) \rangle = \langle x(t) | x_0, t' \rangle \langle x_0 | \Psi(t') \rangle$  (1/2)  
 $\Rightarrow \Rightarrow \Rightarrow \checkmark$

$\int dx' \langle x(t) | x', t' \rangle \langle x' | \Psi(t') \rangle$   
 Somme continue des amplitudes de probabilité qui contribuent

# B Fonctionnelle

(fin XIX<sup>ème</sup> siècle)

"for externe"

Définition: Application d'un espace vectoriel (de fonctions) vers son corps de scalaires (nombres réels multipliant les vecteurs).

Exemple pertinent:

"dépend de la trajectoire"  $\uparrow$   $\mathbb{R}$

$$S[x] = \int_{t_i}^{t_f} dt L(x, \dot{x}) \quad \text{avec} \quad L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} m \dot{x}^2(t) - V(x(t)) \quad \text{fonction de fonctions}$$

$S(x(t))$  "écriture géométrique"

$\uparrow$  variable réelle!  
 $\uparrow$  espace vectoriel  
 "dépend de la valeur de la variable"  
 $\hookrightarrow$  en un point particulier (explète)

Dérivation fonctionnelle:  $\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} \stackrel{(*)}{=} \int dt' \frac{\delta S(x(t'))}{\delta x(t)}$     où  $\frac{\delta S(x(t))}{\delta x(t)} \hat{=} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{S(x(t') + \epsilon \delta(t-t')) - S(x(t'))}{\epsilon}$

Conséquence: cas  $S(x(t)) = x(t)$      $\frac{\delta x(t')}{\delta x(t)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{x(t') + \epsilon \delta(t'-t) - x(t')}{\epsilon} = \delta(t'-t)$

également pour  $\frac{\delta S(x(t'))}{\delta x(t)}$

Propriétés: "linéarité"  $\frac{\delta}{\delta x(t)} (S_1[x] + S_2[x]) = \frac{\delta S_1[x]}{\delta x(t)} + \frac{\delta S_2[x]}{\delta x(t)}$  , "associativité"  $\frac{\delta}{\delta x(t)} (S_1[x] S_2[x]) = \frac{\delta S_1[x]}{\delta x(t)} S_2[x] + S_1[x] \frac{\delta S_2[x]}{\delta x(t)}$

Expansion de Taylor:

$$S[x] = \int dt S(x(t)) \Big|_{x(t)=0} + \frac{1}{1!} \int dt_2 x(t_2) \frac{\delta S[x]}{\delta x(t_2)} \Big|_{x(t)=0} + \frac{1}{2!} \int dt_2 \int dt_3 x(t_2) x(t_3) \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(t_2) \delta x(t_3)} \Big|_{x(t)=0} + \dots$$

$\stackrel{(*)}{=} \int dt_1 \frac{\delta S(x(t_1))}{\delta x(t_2)} \Big|_{x(t)=0}$                        $\stackrel{(**)}{=} \int dt_1 \frac{\delta^2 S(x(t_1))}{\delta x(t_2) \delta x(t_3)} \Big|_{x(t)=0}$

Analogie avec une fonction:  $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (x-x_0)^n \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}$      $\hookrightarrow$  également pour  $S(x(t))$

# II Reformulation de la mécanique quantique

## A Amplitude de probabilité de transition

### 1. Ordre des opérateurs

Classique  $\mapsto$  Quantique

$H(x,p) \mapsto \hat{H}(\hat{x}, \hat{p})$  : problème de l'ordre dans les produits d'opérateurs non-commutants

Ordre normal :  $\begin{cases} px, xp \mapsto \hat{p}\hat{x} \\ x^2p, xp^2 \mapsto \hat{p}\hat{x}^2 \end{cases}$

Ordre de Weyl :  $\begin{cases} xp, px \mapsto \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) \\ x^2p, xp^2 \mapsto \frac{1}{3}(\hat{p}\hat{x}^2 + \hat{x}\hat{p}\hat{x} + \hat{x}^2\hat{p}) \end{cases}$  "symétrisation satisfaisante en général"

Ordre normal  $\langle x' | \hat{H}_{ON} | x \rangle = \langle x' | \int dp |p\rangle \langle p | \hat{H}_{ON} | x \rangle = \int dp \langle x' | p \rangle \langle p | x \rangle H(x, p)$  car  $\hat{x}^2 |x\rangle = \hat{x} \hat{x} |x\rangle = x^2 |x\rangle$   
 $\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle \Rightarrow \langle p | \hat{p} = \langle p | p$   
 $\langle x' | \hat{H}_{ON} | x \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} p(x' - x) \right\} H(x, p)$   $\oplus$  A2.

Ordre de Weyl Remarquons que,  $\left[ (\alpha \hat{x} + \beta \hat{p})^N \right]_{OW} = \sum_{n+m=N} \frac{N!}{n!m!} \alpha^n \beta^m (\hat{x}^n \hat{p}^m)_{OW}$

cas  $N=0$ :  $\underline{1} = \underline{1}$   
 cas  $N=1$ :  $\alpha \hat{x} + \beta \hat{p} = \frac{1!}{0!1!} \alpha^0 \beta^1 \hat{x}^0 \hat{p}^1 + \frac{1!}{1!0!} \alpha^1 \beta^0 \hat{x}^1 \hat{p}^0$

cas  $N=2$ :  $(\alpha \hat{x} + \beta \hat{p})(\alpha \hat{x} + \beta \hat{p}) = \frac{2!}{0!2!} \beta^2 \hat{p}^2 + \frac{2!}{2!0!} \alpha^2 \hat{x}^2 + \frac{2!}{1!1!} \alpha\beta (\hat{x}\hat{p})_{OW}$   
 $\hat{x}^2 + \alpha\beta \hat{x}\hat{p} + \alpha\beta \hat{p}\hat{x} + \beta^2 \hat{p}^2$   $\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})$

$\hookrightarrow e^{\alpha \hat{x} + \beta \hat{p}}$  "contient" toute puissance  $(\hat{x}^n \hat{p}^m)_{OW} : \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(\alpha \hat{x} + \beta \hat{p})^N}{N!}$

valeurs propres  
 $\hat{x}^2 |x\rangle = x^2 |x\rangle$   
 $\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle \Rightarrow \langle p | \hat{p} = \langle p | p$   
 $\hat{p}^2 |x\rangle = p^2 |x\rangle$   
 $\hat{p}^2 |x\rangle + \alpha \hat{x} |x\rangle = \langle p | \hat{p}^2 |x\rangle + \langle p | \alpha \hat{x} |x\rangle$   
 $= p^2 \langle p | x \rangle + \alpha x \langle p | x \rangle$   
 $= (p^2 + \alpha x) \langle p | x \rangle$

Re-exprimons cet opérateur exponentiel grâce à la formule de Baker-Campbell-Hausdorff [BCH],

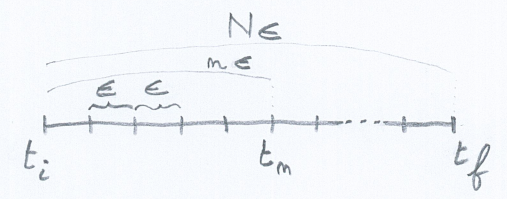
$$\begin{aligned}
 e^{\frac{\alpha \hat{X}}{2}} e^{\beta \hat{P}} e^{\frac{\alpha \hat{X}}{2}} &= e^{\frac{\alpha \hat{X}}{2}} e^{\beta \hat{P} + \frac{\alpha \hat{X}}{2} + \frac{1}{2} [\beta \hat{P}, \frac{\alpha \hat{X}}{2}] + \text{c.l.}([\hat{X}, [\hat{X}, \hat{P}]] + \text{c.l.}([\hat{X}, [\hat{X}, [\hat{X}, \hat{P}]]]) + \dots} \\
 &= e^{\frac{\alpha \hat{X}}{2}} e^{\beta \hat{P} + \frac{\alpha \hat{X}}{2} - \frac{\alpha \beta}{2} i \hbar} \\
 &= \exp\left\{ \frac{\alpha \hat{X}}{2} + \beta \hat{P} + \frac{\alpha \hat{X}}{2} - \frac{\alpha \beta}{2} i \hbar + \frac{1}{2} \left[ \frac{\alpha \hat{X}}{2}, \beta \hat{P} + \frac{\alpha \hat{X}}{2} - \frac{\alpha \beta}{2} i \hbar \right] \right\} = e^{\alpha \hat{X} + \beta \hat{P}}
 \end{aligned}$$

Ce résultat permet de calculer :

$$\begin{aligned}
 \langle x' | e^{\alpha \hat{X} + \beta \hat{P}} | x \rangle &= \langle x' | e^{\frac{\alpha \hat{X}}{2}} \left( \int dp |p\rangle \langle p| \right) e^{\beta \hat{P}} e^{\frac{\alpha \hat{X}}{2}} | x \rangle = \int dp \underbrace{\langle x' | e^{\frac{\alpha \hat{X}}{2}} | p \rangle}_{=1} \underbrace{\langle p | e^{\beta \hat{P}} e^{\frac{\alpha \hat{X}}{2}} | x \rangle}_{\text{"prescription de point moyen"}} \\
 &= \int \frac{dp}{2\pi \hbar} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} p(x'-x) \right\} \exp\left\{ i \frac{x+x'}{2} p + \beta p \right\} \quad \leftarrow \text{"voir exemples page C.4"} \\
 &\quad \leftarrow \text{E.A.2.}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle x' | \hat{H}_{0w} | x \rangle &= \int \frac{dp}{2\pi \hbar} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} p(x'-x) \right\} H\left(\frac{x+x'}{2}, p\right) \\
 \hat{H}_{0w}(\hat{x}, \hat{p}) &\quad \text{pas d'ordonnement} \Rightarrow \text{forme classique (C.4)} \quad \leftarrow \text{"valeurs propres"} \\
 &\quad \left| \text{puisque } \hat{H}_{0w} \text{ peut inclure de manière générique, dans ses termes, toute puissance } (\hat{x}^m \hat{p}^m)_{0w} \text{ (généralisation: puissances négatives)} \right.
 \end{aligned}$$

**B** Discretisation du temps



Pour la transition  $\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle$ :  $\frac{t_f - t_i}{N} = \epsilon (\geq 0) \Leftrightarrow \left. \begin{aligned} t_f &= t_i + N\epsilon = t_N \\ t_i + m\epsilon &= t_m \\ t_i &= t_i + 0\epsilon = t_0 \end{aligned} \right\}$

( $m$  entier:  $0 \leq m \leq N$ )

$$\langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int dx_{N-1} |x_{N-1}, t_{N-1}\rangle \langle x_{N-1}, t_{N-1}| \dots \int dx_m |x_m, t_m\rangle \langle x_m, t_m| \dots \int dx_1 |x_1, t_1\rangle \langle x_1, t_1| x_i, t_i \rangle$$

= 1 (I)A3.

"x<sub>1</sub> et x<sub>m</sub> différentes variables sur un même intervalle de valeurs"

"Revenir au temps continu"

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int dx_{N-1} dx_{N-2} \dots dx_2 dx_1 \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \dots \langle x_m, t_m | x_{m-1}, t_{m-1} \rangle \dots \langle x_1, t_1 | x_0, t_0 \rangle$$

(I)A3. "autre"

OR  $A_m = \langle x_m | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_m - t_0)} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_{m-1} - t_0)} | x_{m-1} \rangle = \langle x_m | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_m - t_0 - [t_{m-1} - t_0])} | x_{m-1} \rangle = \langle x_m | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \epsilon} | x_{m-1} \rangle$

"état propre de  $\hat{X}(t_0)$ "

Formule BCH

"car exp.  $\{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \epsilon\}$  contient des puissances supérieures à  $(\hat{x}^m \hat{p}^m)$  or d'après la page C.4"

C.5

forme classique

"valeurs propres"

temps fixé ✓

$$A_m = \int \frac{dp_m}{2\pi\hbar} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} p_m (x_m - x_{m-1}) - \epsilon H\left(\frac{x_m + x_{m-1}}{2}, p_m\right) \right\}$$

avec le choix de variable d'intégration "p<sub>m</sub>" que l'on peut, de même, associer à "t<sub>m</sub>" via un état propre " $| p_m, t_m \rangle$ ".

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \int \frac{dp_N}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} [p_N(x_N - x_{N-1}) - \epsilon H(\frac{x_N + x_{N-1}}{2}, p_N)]} \dots \int \frac{dp_m}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} [p_m(x_m - x_{m-1}) - \epsilon H(\frac{x_m + x_{m-1}}{2}, p_m)]} \dots \int \frac{dp_1}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} [p_1(x_1 - x_0) - \epsilon H(\frac{x_1 + x_0}{2}, p_1)]}$$

"forme brute et mathématiquement explicite de l'intégrale de chemin (x<sub>0</sub>, x<sub>N</sub>) dans l'espace des phases"

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \int \frac{dp_1 \dots dp_N}{(2\pi\hbar)^N} \exp\left\{ \sum_{m=1}^N \frac{i}{\hbar} \left[ p_m (x_m - x_{m-1}) - \epsilon H\left(\frac{x_m + x_{m-1}}{2}, p_m\right) \right] \right\}$$

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \int \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_N}{2\pi\hbar} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \exp. \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{m=1}^N \left[ p_m \frac{x_m - x_{m-1}}{\epsilon} - H\left(\frac{x_m + x_{m-1}}{2}, p_m\right) \right] \right\}$$

$$\lim_{t_m \rightarrow t_{m-1}} \frac{x(t_m) - x(t_{m-1})}{t_m - t_{m-1}} = \dot{x}(t_m) \Rightarrow \exp. \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt (p(t)\dot{x}(t) - H(x, p)) \right\}$$

(toujours) valeurs propres

forme classique

3. Cas d'un système ponctuel

(1D)

Mécanique classique  $\rightarrow$

$$L(x(t), \dot{x}(t)) \stackrel{\text{TDQ}}{\uparrow} = \frac{1}{2} m \dot{x}^2(t) - V(x(t)) \quad \Rightarrow \quad \pi \stackrel{p^{2/m}}{\hat{=}} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}(t)} = m \dot{x}(t) \quad \text{"moment conjugué"}$$

$$H(x(t), \dot{x}(t)) \hat{=} \pi \dot{x}(t) - L(x, \dot{x}(t)) = \frac{1}{2} m \dot{x}^2(t) + V(x(t)) \quad \text{"classe d'Hamiltoniens"}$$

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \int \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_N}{2\pi\hbar} \exp. \left\{ \frac{i}{\hbar} \int dt L(x(t), \dot{x}(t)) \right\}$$

"valeurs propres"

$S[x] \rightarrow$  Fonctionnelle d'action de forme classique

Intégrons sur les moments, de manière générique, comme cela est possible ici,

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \int \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_N}{2\pi\hbar} \exp. \left\{ \frac{i}{\hbar} \int dt \left[ p(t)\dot{x}(t) - \frac{p^2(t)}{2m} - V(x(t)) \right] \right\}$$

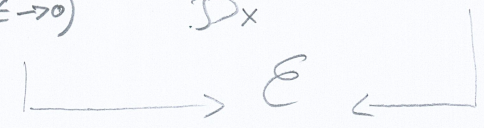
$$\epsilon \sum_{m=1}^N \left[ p_m \frac{x_m - x_{m-1}}{\epsilon} - \frac{p_m^2}{2m} - V\left(\frac{x_m + x_{m-1}}{2}\right) \right]$$

$$-\frac{1}{2m} \left( p_m - m \frac{x_m - x_{m-1}}{\epsilon} \right)^2 + \frac{1}{2m} \left( m \frac{x_m - x_{m-1}}{\epsilon} \right)^2$$

OR,  $\int \frac{dp_m}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i\epsilon}{2m\hbar} (p_m - \frac{m}{\epsilon} (x_m - x_{m-1}))^2} = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{2\pi \frac{\sigma^2}{i}} = \frac{\sqrt{-i}}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{m\hbar}{\epsilon}} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \epsilon}\right)^{1/2}$ , d'au (N fois),  
 généralisation d'intégrale de gaussienne imaginaire (TD3)

$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{D}_x} dx_1 \dots dx_{N-1} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \epsilon}\right)^{N/2} \exp. \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \sum_{m=1}^N \left[ -V\left(\frac{x_m + x_{m-1}}{2}\right) + \frac{m}{2} \left(\frac{x_m - x_{m-1}}{\epsilon}\right)^2 \right] \right\}$   
 (E → 0)

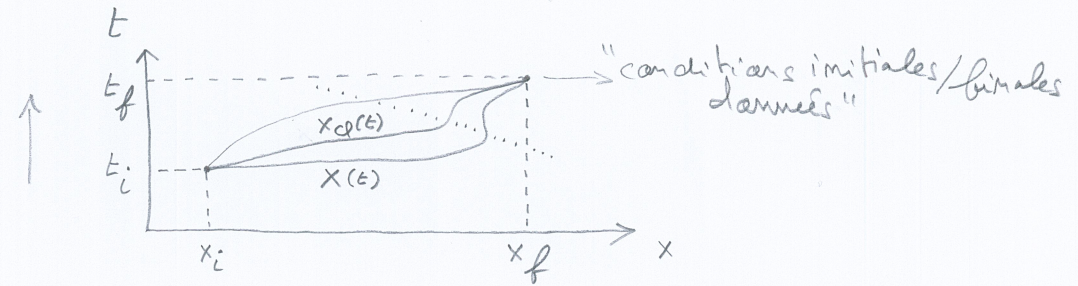
En fait vrai ∀ H, L!



$\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left[ -V(x(t)) + \frac{1}{2} m \dot{x}^2(t) \right] \equiv \frac{i}{\hbar} S[x]$   
 (forme classique de L; x toujours valeur propre)

$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \int_{\mathcal{D}_x} \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar} S[x]}$  "chemin"

"Intégrale de..."



**B** Discussion

1. Intérêts

\* Aspect calculatoire: l'expression de l'amplitude impliquant l'intégrale de chemin ne fait pas intervenir d'opérateurs quantiques.

\* Aspect conceptuel: compréhension du rôle de "l'action" en Mécanique Quantique (la mécanique analytique comme vision globale des physiques classique & quantique).

<p>Physique Classique</p>	<p>Minimisation de l'action</p> $\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = 0$ <p>eq. Euler-Lagrange</p>	<p>Détermination du chemin unique <math>x(t)</math></p>	<p>Physique quantique</p> $\int_{\mathcal{D}_x} \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar} S[x]}$ <p>Amplitude de probabilité d'observer un chemin <math>x(t)</math></p> <p>nouveau!</p>
---------------------------	---	---	---



## 2. Interprétation

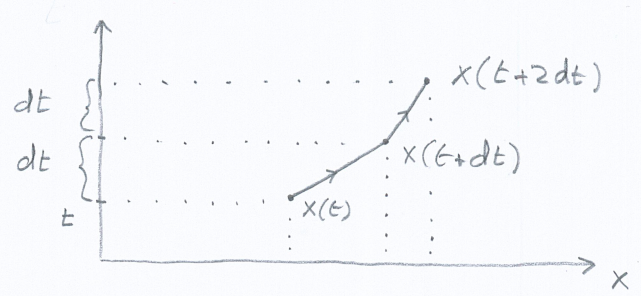
"amplitude de proba. de passer de  $x(t_i)$  à  $x(t_f)$ "

$$\int_{x_i}^{x_f} \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} = e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt L(x(t), \dot{x}(t), t)} \mathcal{D}x$$

$$\sim \dots e^{\frac{i}{\hbar} L(t) dt} e^{\frac{i}{\hbar} L(t+dt) dt} \dots (\mathcal{D}x)^N$$

"amplitude de probabilité de passer de  $x(t)$  à  $x(t+dt)$ "

"amplitude de probabilité de passer de  $x(t+dt)$  à  $x(t+2dt)$ "



$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle \sim \dots + e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} \mathcal{D}x + e^{\frac{i}{\hbar} S[x+dx]} \mathcal{D}x + \dots$$

"amplitude de probabilité d'emprunter le chemin  $x(t)$ "

SOMME DES AMPLITUDES DE PROBABILITÉ ✓

## 3. Limite classique

Formalisme quantique basé sur la mécanique classique

- forme du Hamiltonien classique en M.Q.
- rôle du Lagrangien classique en M.Q.
- $\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \equiv$  valeur classique de  $O$

Limite classique de la mécanique quantique |  $S \gg \hbar$  ( $\rightarrow 0$ )

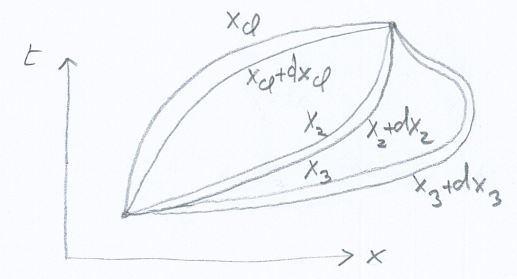
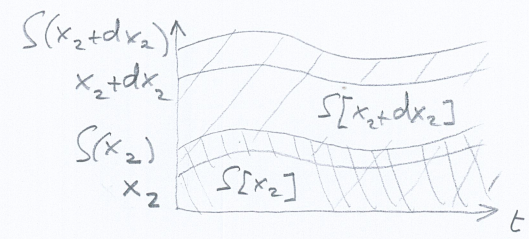
Pour un chemin  $|x_2(t)| = |x_d(t) + \Delta x_d(t)| \gg |x_d(t)|$ ,

$$\left| x_2 \left( 1 + \frac{dx_2}{x_2} \right) \right| = |x_2 + dx_2|$$

"même si faible... important"

$$S[x_2] \neq S[x_2 + dx_2]$$

"significativement"

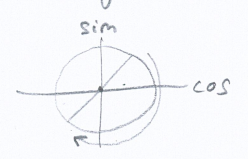


(argumentaire heuristique générique)

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle \sim \dots + \underbrace{Dx e^{\frac{i}{\hbar} S[x_\varphi]} + Dx e^{\frac{i}{\hbar} S[x_\varphi + dx_\varphi]} + \dots + Dx e^{\frac{i}{\hbar} S[x_2]} + Dx e^{\frac{i}{\hbar} S[x_2 + dx_2]} + \dots + Dx e^{\frac{i}{\hbar} S[x_3]} + Dx e^{\frac{i}{\hbar} S[x_3 + dx_3]} + \dots}_{\sim 2 Dx e^{\frac{i}{\hbar} S[x_\varphi]} \neq}$$

car,  $S[x_\varphi(1 + \frac{dx_\varphi}{x_\varphi})] \sim S[x_\varphi]$   $\rightarrow$  faible  
 pour,  $\frac{\delta S[x_\varphi]}{\delta x(t)} = 0$  "stationnarité"

phénomène de compensation des phases : fluctuations rapides



Vrai car,  $\frac{S[x_2 + dx_2]}{\hbar} \rightarrow 1$   
 en particulier

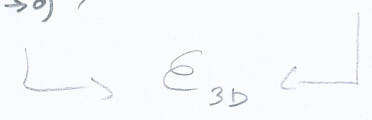
Donc les chemins proches du chemin classique contribuent de manière dominante à l'amplitude car ils ne subissent pas un phénomène d'annulation entre eux (dans la limite classique) interférences destructives.

Analogie avec la théorie de la décohérence en M.Q. : au niveau macroscopique, les nombreuses interactions (sub)atomiques, entre le système et son environnement, font tendre vers zéro la probabilité d'avoir des états quantiques superposés : limite classique (interactions  $\sim$  mesures).

Généralisation à 3D:  $\langle \vec{R}_f t_f | \vec{R}_i t_i \rangle = \langle x_f t_f | x_i t_i \rangle \langle y_f t_f | y_i t_i \rangle \langle z_f t_f | z_i t_i \rangle$

$$= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ (\epsilon \rightarrow 0)}} \int Dx Dy Dz \left( \frac{m}{2\pi\hbar i \epsilon} \right)^{\frac{3}{2}N} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{\vec{R}}^2(t) - V(\vec{R}(t)) \right] \right\}$$

Remarque (C.8) compensation de phases induit des faibles amplitudes pour transitions telles que  $|x_n| \gg |x_{n-1}|$



$$= \|\dot{\vec{R}}\|^2$$

$S[x, y, z]$  "généralisation"

$$V(x(t)) + V(y(t)) + V(z(t))$$

# C Dimensions & Normalisations

## 1. Dimensions

B.O.N.

$$(C.2) \int dx |x\rangle\langle x| = 1 \Rightarrow [|x\rangle] = \left[\frac{1}{x}\right]^{1/2} = L^{-1/2} (= [|x\rangle])$$

"différent pour un spectre discret"

$$\int dp |p\rangle\langle p| = 1 \Rightarrow [|p\rangle] = \left[\frac{1}{p}\right]^{1/2}$$

DONC  $[\langle x|p\rangle] = \left[\frac{1}{px}\right]^{1/2} = \left[\frac{1}{\hbar}\right]^{1/2}$  ce qui est compatible avec l'expression de  $\langle x|p\rangle$  en  $\text{E A 2}$ .

De même, on vérifie l'homogénéité de l'expression de l'intégrale de chemin (C.8),

$$[E \mathcal{D}x] = \underbrace{[dx_1 \dots dx_{N-1}]}_{L^N \cdot L^{-1}} \cdot \underbrace{\left(\frac{M}{[E]T}\right)^{N/2}}_{\hbar \cdot \epsilon} = \frac{1}{L} \cdot \underbrace{\left(\frac{ML^2}{[E]T^2}\right)^{N/2}}_{=1} = \left(\frac{1}{L}\right) = (L^{-1/2})^2 = [\langle x_t|x_t\rangle] \checkmark$$

## 2. Normalisations

$$(C.2) \begin{aligned} \langle x_t|x'_t\rangle &= \delta(x'-x) \\ \langle x|x'\rangle &= \delta(x'-x) \\ \langle p|p'\rangle &= \delta(p'-p) \end{aligned}$$

"conditions d'orthonormalisation"  $\Leftarrow$  Formalisme proba. (opérateurs hermitiques)

(dim.)  $\int dx$

T.F.  $(\tilde{\psi}(k)) = \psi(x)$  motive...

(C.1)

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

C.6

Normalisation correcte pour  $\langle x_f t_f|x_i t_i\rangle$  (en C.8)

(voir TD 6: discussion sur la probabilité)

# II Interactions fondamentales & graphes de Feynman

## A Introduction

Motivation : application de l'intégrale de chemin au calcul d'amplitude de probabilité pour des réactions entre particules élémentaires (Physique des hautes énergies:  $\Delta \hat{x} \Delta \hat{p} \approx \hbar$ )

Réactions : - interaction entre une particule et un champ (cas de la diffusion de Rutherford)  
 - diffusion entre particules élémentaires [mention du cas relativiste]

Méthode : théorie des perturbations

## B Interaction d'une particule avec un champ (associé à $V(x)$ ) $\rightarrow 1D$

"une définition de l'exponentielle imaginaire"

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle \underset{(C.8)}{\approx} \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ (\epsilon \rightarrow 0)}} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{N/2} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{1}{2} m \dot{x}^2(t) \right\} \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt V(x(t)) - \frac{1}{2\hbar^2} \left( \int dt V(x(t)) \right)^2 + \dots \right]$$

pour  $\frac{\int dt V}{\hbar} \ll 1 \leftarrow$

$$\approx \langle x_f t_f | x_i t_i \rangle^{(0)} + \langle x_f t_f | x_i t_i \rangle^{(1)} + \langle x_f t_f | x_i t_i \rangle^{(2)} + \dots$$

"SÉRIE DE BORN"

cas libre (TD5)  $\leftarrow$

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle^{(1)} \underset{N=m+1}{=} \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ (\epsilon \rightarrow 0)}} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{m+1}{2}} \left( -\frac{i}{\hbar} \right) \sum_{k=1}^m \epsilon \int dx_1 \dots dx_m \exp \left\{ \sum_{j=0}^m \frac{i m}{2\hbar \epsilon} \left( \frac{x_j - x_{j-1}}{\hbar} \right)^2 \right\} V(x_k)$$

discretisation (C.8) : de  $x_0$  à  $x_N$   
 $x_i$   $\leftarrow$   $x_f$

$[2\pi\hbar = h]$

discretisation (C.8) : somme de  $x_1$  à  $x_{N-1}$  (associé à  $t_{N-1}$ )

$$(C.5) \quad \epsilon \rightarrow 0 \quad \begin{matrix} \xrightarrow{\epsilon} x_0 \\ x_i \end{matrix} \quad \begin{matrix} \xrightarrow{\epsilon} x_N \\ x_f \end{matrix} \quad \begin{matrix} \xrightarrow{\epsilon} t_N \end{matrix}$$

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle^{(1)} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{k=1}^m \epsilon \int dx_{\frac{k}{\epsilon}} \left\{ \left(\frac{m}{i\hbar\epsilon}\right)^{\frac{m-k+1}{2}} \int dx_{\frac{k+1}{\epsilon}} \dots dx_{\frac{m}{\epsilon}} \exp\left\{ \sum_{j=k}^m \frac{im}{2\hbar\epsilon} (x_{j+1} - x_j)^2 \right\} \right\}$$

$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \dots \langle x_f t_f | x_{\frac{k}{\epsilon}} t_{\frac{k}{\epsilon}} \rangle^{(0)}$       " $x_{m+1} \equiv x_N \equiv x_f$  pas intégré"

"introduction d'une séparation en  $k$  de la somme sur  $j$  (pour chaque terme de la somme sur  $k$ ) n'affectant pas l'amplitude"

$$\cdot V(x_k) \left\{ \left(\frac{m}{i\hbar\epsilon}\right)^{\frac{k}{2}} \int dx_1 \dots dx_{\frac{k-1}{\epsilon}} \exp\left\{ \sum_{j=0}^{k-1} \frac{im}{2\hbar\epsilon} (x_{j+1} - x_j)^2 \right\} \right\}$$

$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \dots \langle x_{\frac{k}{\epsilon}} t_{\frac{k}{\epsilon}} | x_i t_i \rangle^{(0)}$       " $x_i \equiv x_0$  non intégré"

"Renommer  $x_k$  en  $x$ "

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x_f t_f | x t \rangle^{(0)} V(x(t)) \langle x t | x_i t_i \rangle^{(0)}$$

$\begin{matrix} \uparrow & \uparrow \\ t_{k=1} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} t_0 \equiv t_i & \uparrow \\ t_{k=m} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} t_N \equiv t_f & \uparrow \end{matrix}$

"correction au 1<sup>er</sup> ordre au propagateur libre (C.2) de Feynman"

"passage au temps continu à nouveau"

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x_f t_f | x t \rangle^{(0)} V(x(t)) \langle x t | x_i t_i \rangle^{(0)}$$

"car  $\langle x_f t_f | x t \rangle^{(0)} = 0$  pour  $t > t_f$  et  $\langle x t | x_i t_i \rangle^{(0)} = 0$  pour  $t_i > t$  puisque  $t_i < t < t_f$  pris nul (non défini)"

$\begin{matrix} t_0 & & t_N \\ \uparrow & & \uparrow \end{matrix}$

"possibly  $V(x(t), t)$  si non-relativiste"

De même, on montre qu'à l'ordre suivant,

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle^{(2)} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int dt_1 \int dt_2 \int dx_1 \int dx_2 \langle x_f t_f | x_2 t_2 \rangle^{(0)} V(x_2(t_2)) \langle x_2 t_2 | x_1 t_1 \rangle^{(0)} V(x_1(t_1)) \langle x_1 t_1 | x_i t_i \rangle^{(0)}$$

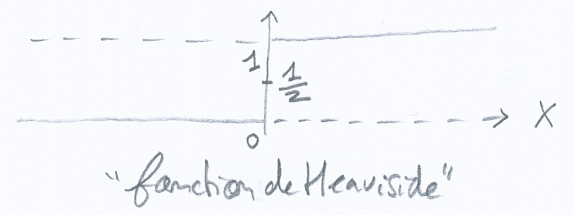
(C.13)

Remarque: plus de facteurs "1/2" dans  $\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle^{(2)}$  alors que présent dans le développement (C.12) car,

$$\left[ \frac{1}{2} \left( \int dt V(x(t)) \right)^2 \right] = \frac{1}{2} \iint V(x(t)) V(x(t')) dt dt' = \frac{1}{2} \iint V(x(t)) V(x(t')) \theta(t-t') dt dt'$$

$$\theta(-x) = \begin{cases} 1 & -x > 0 \\ 1/2 & -x = 0 \\ 0 & -x < 0 \end{cases}$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 1/2 & x = 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$



$$= \frac{1}{2} \iint V(x(t)) V(x(t')) \theta(t-t') dt dt' + \text{IDEM} \{ \text{avec } t < t' \}$$

① calcul (C.12-13)      ② ③

$V(x(t_2)) \langle x_2 t_2 | x_1 t_1 \rangle^{(0)} V(x(t_1))$

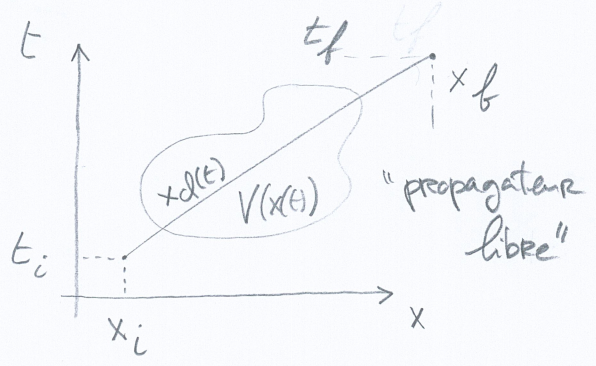
"commutent car  $x(t) \equiv \text{val. propre}$ "  
(C.8) .12

C Interprétation physique ( $\Rightarrow$  permet prédiction de l'expression de l'amplitude!)

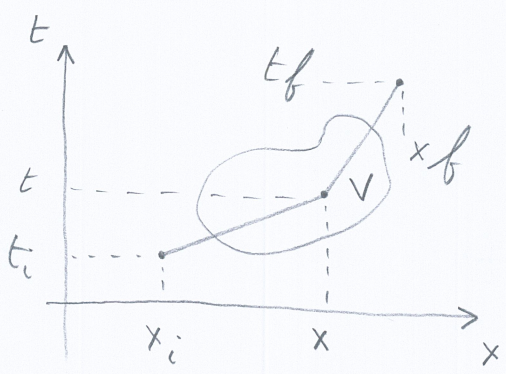
L'intégrale de chemin conduit à une interprétation graphique des interactions au niveau fondamental: les graphes de Feynman. Il s'agit d'une description quantique:

non-Relativiste:

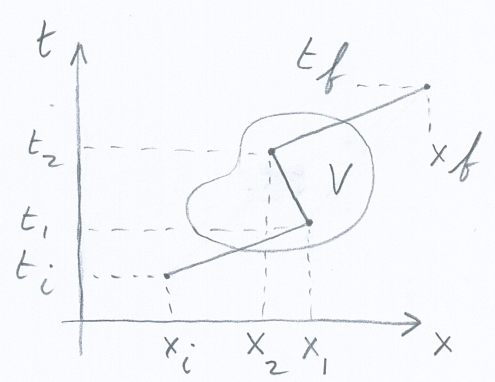
$$V(x(t), t) \equiv V(t)$$



$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle \textcircled{1}$        $\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle^{(0)}$



$\textcircled{2}$        $\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle^{(1)}$



$\textcircled{3}$        $\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle^{(2)}$

! (Warning symbol)

Interaction  $\leftrightarrow$  "Transformation" de particules (systèmes ponctuels: C.7)

