TD / Intégrale de chemin (G. MOREAU) TD 1

I) Introduction

① Soit l'observable de position $\hat{X}$. Ses valeurs/vecteurs propres vérifient $\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle$, à l'instant $t=0$. A quelle condition cette relation reste-t-elle vérifiée à un temps ultérieur ? Adopter les points de vue de Schrödinger puis de Heisenberg. (Pour cela montrer l'unitarité de $U(t)$.)

$$\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right)\hat{X}|x\rangle \overset{?}{=} \underbrace{\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right)}_{\hat{U}(t)} x|x\rangle \quad \text{impliquant} \quad \boxed{\hat{X}|x(t)\rangle = x\underbrace{|x(t)\rangle}_{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|x\rangle}} \quad \text{si et seulement si } [\hat{H},\hat{X}]=0 \,.\, (\forall t)$$

(Schrödinger)

(Heisenberg) $\hat{X}(t) = \hat{U}^{+}(t)\hat{X}\hat{U}(t)$ $\quad \hat{U}(t)\times\ldots\times\hat{U}^{+}(t)$ avec à l'ordre t : $\hat{U}^{+}(t) = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(+)}t + O(t^2) \Rightarrow$

$\hat{U}(t)\hat{X}(t)\hat{U}^{+}(t) = \hat{X}$

$$\underbrace{\hat{U}(t)\hat{U}^{+}(t)}_{\hat{U}^{-1}(t)} = \left(1-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t+O(t^2)\right)\left(1+\frac{i}{\hbar}\hat{H}t+O(t^2)\right) = 1 + \cancel{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} - \cancel{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} + O(t^2)$$

d'où $\hat{U}(t)\hat{X}(t)\hat{U}^{+}(t)|x\rangle = x|x\rangle$ impliquant $\boxed{\hat{X}(t)\overbrace{\hat{U}(t)\hat{U}^{+}(t)}^{\mathbb{1}}|x\rangle = x|x\rangle}$ si et seulement si $[\hat{X}(t),\hat{U}(t)] = 0 = \hat{U}^{+}\hat{X}\hat{U}\hat{U} - \hat{U}\overbrace{\hat{U}^{+}}^{\mathbb{1}}\hat{X}\hat{U}$

$= \hat{X}\hat{U} - \hat{X}\hat{U} = 0$

si $[\hat{X},\hat{U}(t)] = 0$ $(\forall t)$

soit $[\hat{X},\hat{H}] = 0$

$\to [\hat{X},\hat{H}^m] = 0$

Interprétation en termes de transformation quantique ici : $\overbrace{\hat{X}'}^{\hat{X}(t)} = \overbrace{\hat{T}}^{\hat{U}^{+}(t)}\hat{X}\overbrace{\hat{T}^{-1}}^{\hat{U}(t)} \overset{\text{invariance}}{=} \hat{X} \iff \hat{T}\hat{X} = \hat{X}\hat{T} \iff [\hat{X},\hat{U}^{+}(t)] = 0\ (\forall t)$

$\ldots\times\hat{T}$

$\iff [\hat{X},\hat{H}] = 0$

$(\hat{H}^m)^{+} = (\hat{H}^{+})^m = \hat{H}^m$

"théorie des groupes : générateur $\hat{H}$"

condition très particulière !

(pas le cas pour une particule : $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\vec{X}})$)

② Soit la fonctionnelle $S[x] = \int dt\, S(x(t)) = \int dt\,(x(t))^m$ où "m" est un entier. Calculer la dérivée de $S[x]$.

$$\frac{\delta S(x(t'))}{\delta x(t)} = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{S(x(t')+\epsilon\,\delta(t'-t)) - S(x(t'))}{\epsilon} = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{(x(t')+\epsilon\,\delta(t'-t))^m - x^m(t')}{\epsilon} = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{\epsilon}\left\{x^m(t')\left(1+\epsilon\frac{\delta}{x(t')}\right)^m - x^m(t')\right\}$$

$$= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{\epsilon}\left\{x^m(t')\left(\cancel{1} + m\,\epsilon\frac{\delta}{x(t')} + O(\epsilon^2)\right) - \cancel{x^m(t')}\right\} = m\,x^{m-1}(t')\,\delta(t'-t) \quad \text{d'où} \quad \frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = \int dt'\, m\,x^{m-1}(t')\,\delta(t'-t) = \boxed{m\,x^{m-1}(t)}$$

③ Soit la fonctionnelle $S[x] = \int_{t_i}^{t_f} dt' L(x(t'), \dot{x}(t'))$ avec $L(x(t'), \dot{x}(t')) = \underbrace{\frac{1}{2} m \dot{x}^2(t')}_{T(\dot{x}(t'))} - V(x(t'))$ → "énergie potentielle"

$T(\dot{x}(t'))$ → "énergie cinétique"

$\boxed{a}$ Calculer sa dérivée. $\boxed{b}$ Déterminer les équations d'Euler-Lagrange.

$\boxed{c}$ Comparer les questions a et b, puis commenter.

$\boxed{a}$ $$\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = \int dt' \frac{\delta L(x, \dot{x}(t'))}{\delta x(t)} \quad \text{avec} \quad \frac{\delta L(x(t'), \dot{x}(t'))}{\delta x(t)} = \frac{\delta T(\dot{x}(t'))}{\delta x(t)} - \frac{\delta V(x(t'))}{\delta x(t)}$$

$$\frac{\delta V(x(t'))}{\delta x(t)} = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ \overbrace{V(x(t') + \epsilon\delta(t'-t))}^{\cancel{V(x(t'))} + \epsilon\delta(t'-t) V'(x(t')) + o(\epsilon^2)} - \cancel{V(x(t'))} \right\}$$

$$= V'(x(t'))\, \delta(t'-t) = \boxed{\frac{\partial V(x(t'))}{\partial x(t')} \delta(t'-t)}$$

$$\frac{\delta T(\dot{x}(t'))}{\delta x(t)} \triangleq \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ T\left(\dot{x}(t') + \frac{d}{dt'}(\epsilon \delta(t'-t))\right) - T(\dot{x}(t')) \right\}$$

$$= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{m/2}{\epsilon} \left\{ \dot{x}^2(t') + 2\dot{x}(t') \frac{d}{dt'}(\epsilon \delta(t'-t)) + o(\epsilon^2) - \dot{x}^2(t') \right\}$$

$$= \boxed{m \dot{x}(t') \frac{d}{dt'} \delta(t'-t)}$$

$$\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = \int dt' \left\{ m \dot{x}(t') \frac{d}{dt'} \delta(t'-t) - V'(x(t')) \delta(t'-t) \right\}$$

$$= \underbrace{m \dot{x}(t') \delta(t'-t) \Big|_{t'=t_i}^{t'=t_f}}_{\text{"termes de bords"}} - \int dt' \, m \underbrace{\left(\frac{d}{dt'} \dot{x}(t')\right)}_{\ddot{x}(t')} \delta(t'-t) - V'(x(t))$$

$$= \boxed{-m \ddot{x}(t) - V'(x(t))}$$

sans considérer les termes de bord
pour des termes de bord nuls
(conditions initiales/finales)

$\boxed{b}$ Equations d'Euler-Lagrange (mécanique analytique) : $$\frac{\partial L(x(t), \dot{x}(t))}{\partial x(t)} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L(x(t), \dot{x}(t))}{\partial \dot{x}(t)} = 0$$

↳ Application ici : $-V'(x(t)) - \frac{d}{dt}[m\dot{x}(t)] = 0$ $\quad \boxed{-V'(x(t)) - m\ddot{x}(t) = 0}$ (équation du mouvement)

$\boxed{c}$ $\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = 0$ & termes de bords nuls $\Longleftrightarrow$ $\delta S = 0$ & termes de bords nuls (principe de moindre action)

↳ FORMALISME DES FONCTIONNELLES (δ)

"équation du mouvement identique"

↳ APPROCHE DES FONCTIONS DE FONCTIONS (∂)

II) Reformulation de la mécanique quantique

1) Afin de calculer l'intégrale d'une gaussienne imaginaire : $\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{\pm i \frac{x^2}{2\sigma^2}}}_{\text{"}G\text{"}}$,

(i) poser l'intégrale au carré sur $\mathbb{R}^+$ (pour $2\sigma^2=1$)

(ii) passer aux coordonnées polaires

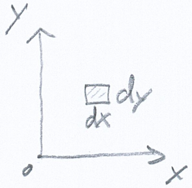
(iii) introduire un paramètre de régularisation

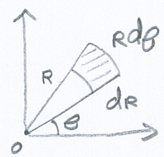
(iv) généraliser à l'intégrale sur $\mathbb{R}$

(v) introduire un écart-type générique.

(i) $$H = G_+^2 = \int_0^{+\infty} dx\, e^{\pm i x^2} \int_0^{+\infty} dy\, e^{\pm i y^2}$$

(ii)





$$H = \int_0^{\pi/2} d\theta \int_0^{+\infty} R\, dR\, \exp\{\pm i R^2\}$$

(iii) $$H \overset{\text{" Forme intégrale calculable "}}{=} \lim_{\substack{\delta\to 0 \\ (\delta<0)\ (\delta>0)}} \frac{\pi}{2}\int_0^{+\infty} dR\, R\, e^{\pm(i+\delta)R^2} = \lim_{\delta\to0} \frac{\pi}{2}\cdot\left[\frac{e^{\pm(i+\delta)R^2}}{\pm 2(i+\delta)}\right]_0^{+\infty} = \lim_{\delta\to0}\frac{\pm\pi}{4(i+\delta)}\left[\underbrace{e^{\pm(i+\delta)\infty}}_{\to 0} - \underbrace{e^{\pm(i+\delta)\cdot 0}}_{=1}\right] = \frac{\mp\pi}{4i}$$

" borne " " nul "

(iv) $$G_+ = \sqrt{H} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\mp i}}$$, et, $$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{\pm i x^2} = \int_{-\infty}^{0} dx\, e^{\pm i x^2} + G_+ \underset{\text{changement de variable : } x' = -x}{=} \int_{+\infty}^{0} (-dx')\, e^{\pm i x'^2} + G_+ = 2G_+ = \sqrt{\frac{\pi}{\mp i}}$$

(v) nouveau changement de variable : $x = \frac{x'}{\underbrace{\sqrt{2}\sigma}_{\geq 0}}$

$$\sqrt{\frac{\pi}{\mp i}} = \int_{-\infty}^{+\infty}\left(dx'\cdot\frac{1}{\sqrt{2}\sigma}\right) e^{\pm i \frac{x'^2}{2\sigma^2}} \underset{\text{Renommer } x' \text{ en } x}{\Longleftrightarrow} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{\pm i\frac{x^2}{2\sigma^2}}}_{G} = \boxed{\sqrt{\frac{2\pi}{\mp i}}\,\sigma} \quad (\sigma \geq 0)$$

② On se propose de calculer l'amplitude $\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle$ (propagateur $K(t_f, x_f ; t_i, x_i)$) pour une particule libre de masse : m.
(C.2)

[a] Ecrire l'amplitude dans le contexte d'un temps discrétisé, en fonction de la variable : $y_m = \left(\frac{m}{2\hbar\epsilon}\right)^{1/2} x_m$.

Page C.8 ⇒

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \lim_{\substack{N\to\infty \\ \epsilon\to 0}} \int dx_1 \ldots dx_{N-1} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{N/2} \exp\left\{\frac{im}{2\hbar\epsilon} \sum_{m=1}^{N} \left[\underset{\substack{\downarrow \\ -V}}{0} + (x_m - x_{m-1})^2\right]\right\}$$

$$= \lim_{N\to\infty} \underbrace{\int dy_1 \cdots dy_{N-1}}_{\subset I_N} \underbrace{\left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{N/2} \left(\frac{2\hbar\epsilon}{m}\right)^{(N-1)/2}}_{\left(\frac{1}{i\pi}\right)^{N/2}\left(\frac{m}{2\hbar\epsilon}\right)^{1/2}} \underbrace{\exp\left\{i \sum_{m=1}^{N} (y_m - y_{m-1})^2\right\}}_{\subset I_N}$$

[b] Calculer l'intégrale obtenue pour les premiers termes de la somme sur "m", puis généraliser à "N".
(calcul de I_m)

$$\cdot \underbrace{\int dy_1\, e^{i[(y_1-y_0)^2 + (y_2-y_1)^2]}}_{(I_2)} = \int dy_1\, e^{i[2(y_1 - \frac{y_0+y_2}{2})^2 + \frac{1}{2}(y_2-y_0)^2]}$$

$$2\left(y_1^2 + \frac{1}{4}\{y_0^2 + y_2^2 + 2y_0 y_2\} - \frac{2}{2} y_1 (y_0+y_2)\right) \qquad \frac{1}{2}(y_2^2 - 2y_2 y_0 + y_0^2)$$

"invariance de l'intégration, par translation, comme la gaussienne réelle"

$$= e^{\frac{i}{2}(y_2-y_0)^2} \underbrace{\int dy_1\, e^{i(\underbrace{y_1 - \frac{y_0+y_2}{2}}_{Y})^2 \underbrace{(+2)}_{\frac{1}{2\sigma^2}}}}_{\text{intégrale de fonction imaginaire (TD3/II ①)}} = \underbrace{\sqrt{\frac{2\pi}{-i}} \underbrace{\left(\frac{1}{4}\right)^{1/2}}_{\sigma}}_{\sqrt{\frac{i\pi}{2}}} e^{\frac{i}{2}(y_2-y_0)^2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy\, e^{iy^2(+2)} \quad \longleftarrow \quad \begin{array}{l} y = y_1 - Y \\ dy = dy_1 \end{array}$$

TD5

- $$\underbrace{\int dy_1 dy_2\, e^{i[(y_1-y_0)^2+(y_2-y_1)^2+(y_3-y_2)^2]}}_{(I_3)} = \int dy_2\, e^{i(y_3-y_2)^2}\left\{\left(\frac{\pi}{-2i}\right)^{1/2} e^{\frac{i}{2}(y_2-y_0)^2}\right\}$$

résultat précédent

$$= \sqrt{\frac{i\pi}{2}}\int dy_2\, e^{i\left[\underbrace{\frac{3}{2}\left(y_2-\frac{y_0+2y_3}{3}\right)^2}_{\frac{3}{2}\left(y_2^2+\frac{1}{9}\{y_0^2+4y_3^2+4y_0y_3\}-\frac{2}{3}y_2(y_0+2y_3)\right)}+\underbrace{\frac{1}{3}(y_3-y_0)^2}_{\frac{1}{3}(y_3^2+y_0^2-2y_0y_3)}\right]}$$

méthode précédente

gaussienne d'écart type tel que, $\frac{1}{2\sigma^2}=+\frac{3}{2}$

$$= \sqrt{\frac{i\pi}{2}}\exp\left\{\frac{i}{3}(y_3-y_0)^2\right\}\sqrt{\frac{2\pi}{-i}}\left(\frac{+1}{3}\right)^{1/2} = \boxed{\frac{(\sqrt{i\pi})^2}{\sqrt{3}}\, e^{\frac{i}{3}(y_3-y_0)^2}}$$

- Soit en généralisant, $$\boxed{I_N = \frac{(\sqrt{i\pi})^{N-1}}{\sqrt{N}}\, e^{\frac{i}{N}(y_N-y_0)^2}}$$

$(\Delta t = t_f - t_i)$

Aimsi, $$\langle x_f t_f | x_i t_i\rangle \overset{\boxed{a}}{=} \lim_{N\to\infty}\left(\frac{1}{i\pi}\right)^{N/2}\left(\frac{m}{2\hbar\epsilon}\right)^{1/2}\frac{(\sqrt{i\pi})^{N-1}}{\sqrt{N}}\, e^{\frac{i}{N}(y_N-y_0)^2} = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2i\pi\hbar \underbrace{N\epsilon}_{\Delta t}}\right)^{1/2} e^{\frac{im}{2\hbar \underbrace{N\epsilon}_{\Delta t}}(\underbrace{x_N}_{x_f}-\underbrace{x_0}_{x_i})^2}$$

(C.5) (C.6)

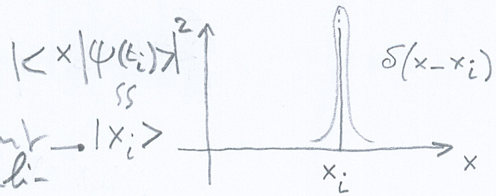
$$\boxed{\langle x_f t_f | x_i t_i\rangle = \underbrace{\left[\frac{m}{2i\pi\hbar(t_f-t_i)}\right]^{1/2}}_{\frac{1}{\sqrt{\frac{2\pi}{-i}}\,.\,\sigma}}\ \underbrace{e^{\frac{im}{2\hbar(t_f-t_i)}(x_f-x_i)^2}}_{\exp\left\{+i(x_f-x_i)^2\frac{1}{2\sigma^2}\right\}}}$$

" gaussienne imaginaire normalisée (intégrale à l'unité) "

avec $\frac{1}{\sigma^2} = +\frac{m}{\hbar(t_f-t_i)}$

$$\sigma = \sqrt{+\frac{\hbar(t_f-t_i)}{m}}$$

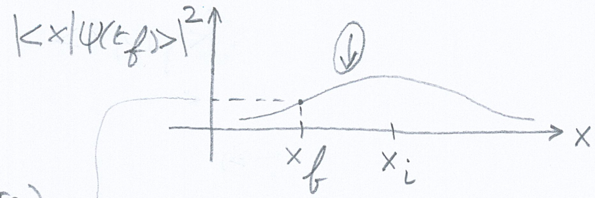
Interprétation : Etalement du paquet d'onde en mécanique quantique, retrouvé pour le cas libre,



(Rigoureusement non normalisable)

$t_i \longrightarrow t_f$

(classiquement : propagation à vitesse constante)



{pour $x_f \sim x_i$} là où approxi.

avec $\int dx\, |\underbrace{\langle x|\psi(t_i)\rangle}_{}|^2 = 1$

$\underbrace{\int dx'\, h_i(x')\, |x'\rangle}_{}$

$\left| \int dx'\, h_i(x') \underset{\delta(x-x')}{\langle x|x'\rangle} \right|^2 = |h_i(x)|^2$

et $|x\, t_i\rangle = |x_i\rangle$ au temps originel

(I A 4.)

$|\langle x_f|\psi(t_f)\rangle|^2 \simeq |\langle x_f t_f|x_i t_i\rangle|^2 = |\sqrt{-i}|^2 \dfrac{m}{2\pi\hbar\, |t_f - t_i|}$

$\langle x_f|\psi(t_f)\rangle = \hat{U}(t_f,t_i)|\psi(t_i)\rangle$

$\hat{U}(t_f,t_i) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{P}^2}{2m}(t_f - t_i)\right\}$, $\quad |\psi(t_i)\rangle \simeq |x_i\rangle$

$|\sqrt{-i}|^2 = \left|\left(e^{-\frac{i\pi}{2}}\right)^{\frac{1}{2}}\right|^2 = 1$

$|t_f - t_i|$ ↗ ↘

C Discuter la normalisation de l'amplitude obtenue en b .

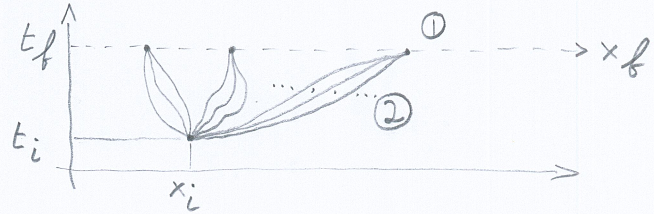
$$\left| \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{dx_f \langle x_f t_f | x_i t_i\rangle}_{\frac{dA}{dx_f}} \right|^2 = \left| \frac{1}{\cancel{\sqrt{\frac{2\pi}{-i}}\,\sigma}} \underbrace{\int dx_f\, e^{+\frac{i}{2\sigma^2}(x_f - x_i)^2}}_{\cancel{\sqrt{\frac{2\pi}{-i}}\,\sigma}} \right|^2 = |1|^2 = \boxed{1}$$ ce qui est cohérent, attendu :

① (C.11)

"probabilité normée"
↓
iDEM pour x_i

et $\dfrac{dP}{dx} = |\langle x|\psi\rangle|^2$

↳ sans dimension (normé : $\langle\psi|\psi\rangle = 1$)



Remarque :

Somme sur les (densités d') amplitudes de probabilité en ① et ② (c.8)

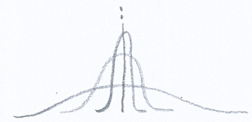
↳ dépendance temporelle → aspect ondulatoire (phénomène d'interférences,...)

$\neq$ Somme des (densités) de probabilité à un temps donné : TH. de la mesure où ex $|\langle\alpha|\psi\rangle|^2 + |\langle\beta|\psi\rangle|^2 = 1$

$\boxed{d}$ Que vaut alors $\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle$ dans la limite $t_i \to t_f$? (on admettra que le résultat de limite sur la fonction gaussienne réelle reste valide dans le cas imaginaire)
Retrouver cette limite en s'appuyant sur la condition d'orthonormalisation de $\langle xt | x't \rangle$.

D'après $\boxed{b}$, $\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \frac{1}{\sqrt{\frac{2\pi}{-i}}\,\sigma} e^{+\frac{i}{2\sigma^2}(x_f - x_i)^2} \xrightarrow[\substack{t_f - t_i \to 0 \\ (\sigma \to 0)}]{} \delta(x_f - x_i)$

(normée, l'intégrale)



Commentaire : on avait aussi démontré (TD3) (par régularisation) que $\int dx\, e^{-\frac{i}{2\sigma^2}x^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{i}}\,\sigma$. "comme pour le cas réel, sans i"

Résultat confirmé par : $\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle \xrightarrow[t_i \to t_f]{} \langle x_f t_f | x_i t_f \rangle = \delta(x_f - x_i)$ d'après (I) $\boxed{A}$ 3.
"général ($\forall$ H)"

fonction — distribution

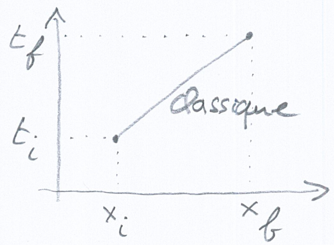
Commentaire : abus mathématique usuel en mécanique quantique car le pic de Dirac intervient systématiquement au sein d'une intégrale (ici, puisque le spectre de position est continu) TD6

$\boxed{e}$ Calculer l'action pour la variable classique de position : $S[x_{cl}]$, en fonction de m, x_f, x_i, t_f et t_i.
Puis exprimer $\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle$ en fonction de $S[x_{cl}]$.

On a vu (TD2, Exercice 3) : $\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = 0 \Rightarrow \left| \begin{array}{l} -m\ddot{x}(t) - V'(x(t)) = 0 \\ \text{conditions limites} \end{array} \right.$ "équation d'Euler Lagrange" soit ici, $\ddot{x}(t) = 0$ car $V(x) = 0$
$\underbrace{\dot{x}(t)}_{\dot{x}_{cl}(t)} = \underbrace{v}_{\text{constante}}$

cas d'un système ponctuel ($\exists$ particule libre)
où $L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)$

Ainsi, $\boxed{S[x_{cl}] = \int_{t_i}^{t_f} dt\, L(x_{cl}, \dot{x}_{cl})} = \int dt\, \frac{1}{2} m\, \dot{x}_{cl}^2(t) = \frac{1}{2} m v^2 \int dt = \frac{1}{2} m v^2 (t_f - t_i)$



or sur le chemin classique à vitesse constante,

$$v = \frac{x_f - x_i}{t_f - t_i}$$

$$\boxed{= \frac{1}{2} m \frac{(x_f - x_i)^2}{t_f - t_i}}$$

b $\longrightarrow$ $$\boxed{\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar (t_f - t_i)} \right)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]}}$$

" illustre le rôle de la physique classique en mécanique quantique " (C.9)

(C.1 Eq.(3))

f Montrer de manière générale que l'équation d'évolution, impliquant l'opérateur d'évolution temporelle $\hat{U}_0(t)$ (point de vue de Heisenberg), s'applique également à l'amplitude $\langle x t | x_0 t_0 \rangle \hat{=} \langle x | \hat{U}_0(t) | x_0 \rangle \equiv \langle x | \hat{U}(t, t_0) | x_0 \rangle$.

(C.2) $\{t \geq t_0\}$

Le vérifier pour la particule libre. (1D)

$\langle x | \widehat{Eq.(3)} | x_0 \rangle$ donne, $\langle x | \left(\frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x}) \right) \underbrace{\hat{U}_0(t) | x_0 \rangle} = \langle x | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_0(t) | x_0 \rangle$ à temps fixé

soit en représentation " x ", $\underbrace{\left(\frac{1}{2m} \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right]^2 + V(x) \right)}_{\hat{H}_{(x)}} \langle x | \hat{U}_0(t) | x_0 \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x | \hat{U}_0(t) | x_0 \rangle$

valeurs propres

"Retrouvé"

$$\boxed{\hat{H}_{(x)} \langle x t | x_0 t_0 \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x t | x_0 t_0 \rangle}$$

Vérifions-le ici ...

$$\hat{H}_{(x)} \langle xt|x_0t_0\rangle = \frac{1}{2m}(-\hbar^2)\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}\right)^{1/2} e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x-x_0)^2}{t-t_0}}$$

$\hat{H}_{(x)}$

$t_i \to t_0$

$t_f \to t$

pour $V(x)=0$, d'après $\boxed{e}$

" via un calcul d'intégrale de chemin "

$$\left(\quad\right)^{1/2} \cdot \frac{im}{\hbar}\frac{x-x_0}{t-t_0}\, e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x-x_0)^2}{t-t_0}}$$

$$\frac{im}{\hbar}\left(\quad\right)^{1/2}\left\{\frac{1}{t-t_0}+\frac{x-x_0}{t-t_0}\frac{im}{\hbar}\frac{x-x_0}{t-t_0}\right\} e$$

"Equation d'évolution vérifiée pour particule libre"

$$= -\frac{i\hbar}{2}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}\right)^{1/2}\left\{\frac{1}{t-t_0}+\frac{im}{\hbar}\frac{(x-x_0)^2}{(t-t_0)^2}\right\} e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x-x_0)^2}{t-t_0}}$$

et,

$$\parallel$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle xt|x_0t_0\rangle = i\hbar\left\{\left(-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)^3}\right)^{1/2} e + \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}\right)^{1/2}\left(-\frac{im}{2\hbar}\right)\frac{(x-x_0)^2}{(t-t_0)^2}\, e\right\}$$

③ On se propose de calculer l'amplitude $\langle x_f t_f | x_i t_i\rangle$ dans le cas de l'oscillateur Harmonique (O.H.).

$\boxed{a}$ Etablir les équations du mouvement pour le Lagrangien : $L(x(t),\dot{x}(t),t) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + J(t)\,x$.
Commenter les deux limites, $J(t)\to 0$, et, $J(t)\to$ constante J.

On a vu (TD2) que,
$$\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = \frac{\partial L(x(t),\dot{x}(t),t)}{\partial x(t)} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L(x(t),\dot{x}(t),t)}{\partial \dot{x}(t)},$$ hors termes de bord.

Les équations du mouvement (classiques) s'écrivent donc, $\underset{///}{\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)}} = 0$, soit :

$$-m\omega^2 x(t) + J(t) - \frac{d}{dt}\{m\dot{x}(t)\} = 0 \iff \boxed{m\ddot{x}_{cl}(t) + m\omega^2 x_{cl}(t) - J(t) = 0} \quad (cl \equiv \text{classique})$$

⊛ $L \xrightarrow[J(t)\to 0]{} \underbrace{\frac{1}{2}m\dot{x}^2}_{T} - \underbrace{\frac{1}{2}m\omega^2 x^2}_{V} \underset{(C.7)}{\longleftrightarrow} H = \underbrace{\frac{1}{2}m\dot{x}^2}_{T} + \underbrace{\frac{1}{2}m\omega^2 x^2}_{V}$: Hamiltonien de l'O.H.

"système ponctuel"

⊛ $L \xrightarrow[J(t)\to J]{} \frac{1}{2}m\dot{\tilde{x}}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2\tilde{x}^2 + \frac{J^2}{2m\omega^2}$, avec $\tilde{x} = x - \frac{J}{m\omega^2}$

Cas d'un O.H. translaté : par exemple une position d'équilibre translatée, d'une masse suspendue à un ressort (effet de la gravité ajouté via J)

DONC $L(x(t), \dot{x}(t), t)$ générique
et intéressant : $J(t)$ est une "source extérieure" interagissant avec l'O.H. comme un champ électrique (chargé)

[b] Développer la série de Taylor de la fonctionnelle d'action $S[x]$ autour de $x(t) = x_{cl}(t)$ et montrer que cette série s'arrête au terme d'ordre 2.

D'après le cours (C.3),

$$S[x] = S[x]\Big|_{x(t)=x_{cl}(t)} + \int dt_2\, \underset{\underset{x(t_2)-x_{cl}(t_2)}{\parallel}}{\eta(t_2)}\, \overbrace{\frac{\delta S[x]}{\delta x(t_2)}\Big|_{x=x_{cl}}}^{=0} + \frac{1}{2}\int dt_2 \int dt_3\, \eta(t_2)\eta(t_3) \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(t_2)\delta x(t_3)}\Big|_{x=x_{cl}} + \dots$$

"quantum fluctuation"

TD 11

Extension de la dérivée fonctionnelle première (TD 9):

$$\boxed{\left.\frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(t_2)\,\delta x(t_3)}\right|_{x=x_{cl}}} = \Bigg[\underbrace{\frac{\partial}{\partial x(t_2)}\underbrace{\left[\frac{\partial L(x(t_3),\dot x(t_3),t_3)}{\partial x(t_3)}\right]}_{J-m\omega^2 x(t_3)}}_{-m\omega^2\frac{\partial x(t_3)}{\partial x(t_2)}} - \underbrace{\frac{d}{dt_2}\left[\frac{d}{dt_3}\underbrace{\frac{\partial^2 L(x(t_3),\dot x(t_3),t_3)}{\partial \dot x(t_2)\,\partial \dot x(t_3)}}_{\frac{\partial}{\partial \dot x(t_2)} m\dot x(t_3)}\right]}_{\frac{d}{dt_2}\frac{d}{dt_3}\left(\frac{\partial \dot x(t_3)}{\partial \dot x(t_2)}m\right)}\Bigg]_{x=x_{cl}}$$

fonctions $x(t)$, $\dot x(t)$: dérivée dans le cas continu (comme c.3)

$$=\left(-m\omega^2-\frac{d}{dt_2}\frac{d}{dt_3}m\right)\delta(t_3-t_2) = \boxed{-m\left(\frac{d^2}{dt_2^2}+\omega^2\right)\delta(t_3-t_2)}$$

"plus de $x(t)$ ni $\dot x(t)$ d'où $\dfrac{\delta^3 S[x]}{\delta x(t_2)\delta x(t_3)\delta x(t_4)}=0$ (ainsi que les termes suivants)"

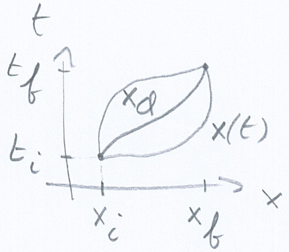
$\odot$ $$\frac{1}{2}\int dt_2\int dt_3\,\eta(t_2)\eta(t_3)\left\{-m\omega^2\delta(t_3-t_2)\right\} = -\frac{1}{2}m\omega^2\int dt_2\,\eta^2(t_2)$$

$\odot$ $$\frac{1}{2}\int dt_2\int dt_3\,\eta(t_2)\eta(t_3)\left\{m\frac{d^2}{dt_2^2}\delta(t_3-t_2)\right\} = -\frac{m}{2}\int dt_2\,\eta(t_2)\frac{d^2}{dt_2^2}\Big[\underbrace{\int dt_3\,\eta(t_3)\delta(t_3-t_2)}_{\eta(t_2)}\Big]$$

$$= -\frac{m}{2}\int dt_2\frac{d}{dt_2}\left\{\eta(t_2)\frac{d}{dt_2}\eta(t_2)\right\}+\frac{m}{2}\int dt_2\frac{d}{dt_2}\eta(t_2)\frac{d}{dt_2}\eta(t_2)$$

$$= -\frac{m}{2}\Big[\eta(t_2)\dot\eta(t_2)\Big]_{t_2=t_i}^{t_2=t_f} + \frac{m}{2}\int dt_2\,\dot\eta^2(t_2)$$

$$x(t_i)-x_{cl}(t_i)\equiv\eta(t_i)=\eta(t_f)=0$$



$\boxed{c}$ Exprimer l'amplitude $\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle$ en terme d'une intégrale de chemin dont la variable d'intégration est la fluctuation quantique.

D'après le cours (C.8), et la question $\boxed{b}$,

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \lim_{\substack{N\to\infty \\ (\epsilon \to 0)}} \underbrace{\int \underset{d\eta_1}{\overset{\|}{dx_1}} \cdots \underset{d\eta_{N-1}}{\overset{\|}{dx_{N-1}}}}_{\int \mathcal{D}\eta} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \epsilon}\right)^{N/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\overbrace{\underbrace{\left[S[x_{cl}] + \frac{m}{2}\int_{t_i}^{t_f} dt_2 \left(\dot{\eta}^2(t_2) - \omega^2 \eta^2(t_2)\right)\right]}_{S[\eta]}}^{S[x]}\right\}$$

$(t \mapsto t_2)$

"exposant quadratique $\Rightarrow$ plusieurs méthodes d'intégration"

$\boxed{d}$ Effectuer le changement de variable : $t' = t_{(2)} - t_i$ pour la variable temporelle.

$dt' = dt_{(2)}$ et $\eta(\underbrace{0}_{t'}) = \eta(\underbrace{t_i}_{t_{(2)}}) = 0 = \eta(\underbrace{t_f}_{t_{(2)}}) = \eta(\underbrace{T}_{t' = t_f - t_i})$ puisque $\eta(t_{(2)}) = \eta(t' + \underset{\text{constante}}{t_i}) = \eta(t')$

$$\boxed{\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \epsilon \int \mathcal{D}\eta \, \exp\left\{\frac{im}{2\hbar}\int_0^T dt' \left(\dot{\eta}^2(t') - \omega^2 \eta^2(t')\right)\right\} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]\right\}}$$

$\boxed{e}$ Justifier l'expression suivante pour la fluctuation quantique de position : $\eta(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} a_n \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right)$.

$\eta(t)$ définie sur un intervalle fini $[0,T]$ $\mapsto$ extension possible à une fonction périodique (de période T) $\mapsto$ ré-écriture en série de Fourier $\mapsto$ restriction à l'intervalle original $[0,T]$ & conditions aux bords : $\eta(0) = \eta(T) = 0$

f Utiliser le résultat précédent pour reformuler l'amplitude.

• $$\boxed{\int_0^T dt\left(-\omega^2\eta^2(t)\right) = -\omega^2\int_0^T dt\left\{\sum_{n,m=-\infty}^{+\infty} a_n a_m \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right)\sin\left(\frac{m\pi t}{T}\right)\right\} = -\omega^2\sum_{n,m} a_n a_m \delta_{nm}\frac{T}{2} = -\omega^2\frac{T}{2}\sum_n a_n^2}$$

car $\int_0^T dt \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right)\sin\left(\frac{m\pi t}{T}\right) =$

pour $n \neq m$: $\int \frac{dt}{2}\left[\cos\left(\frac{\pi t}{T}[n-m]\right) \pm \cos\left(\frac{\pi t}{T}[n+m]\right)\right]$

$$= \frac{1}{2}\left[\frac{\sin\left(\frac{\pi t}{T}[n-m]\right)}{\frac{\pi}{T}[n-m]} \pm \frac{\sin\left(\frac{\pi t}{T}[n+m]\right)}{\frac{\pi}{T}[n+m]}\right]\Bigg|_{t=0}^{t=T} = \boxed{0}$$

pour $n = m$: $\int \frac{dt}{2}\left[1 \pm \cos\left(2\frac{n\pi t}{T}\right)\right] = \frac{1}{2}t\Big|_0^T \pm \frac{1}{2}\frac{\sin\left(2\frac{n\pi t}{T}\right)}{2\frac{n\pi}{T}}\Bigg|_{t=0}^{t=T} = \boxed{\frac{T}{2}}$

sin → cos, sin → cos

"orthonormalisation math."

soit $\boxed{\int_0^T dt \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right)\sin\left(\frac{m\pi t}{T}\right) = \delta_{nm}\frac{T}{2}}$

• $$\boxed{\int_0^T dt\, \dot\eta^2(t) = \int_0^T dt \sum_{n,m} a_n a_m \left(\frac{n\pi}{T}\right)\left(\frac{m\pi}{T}\right)\cos\left(\frac{n\pi t}{T}\right)\cos\left(\frac{m\pi t}{T}\right) = \sum_{n,m} a_n a_m\left(\frac{n\pi}{T}\right)\left(\frac{m\pi}{T}\right)\delta_{nm}\frac{T}{2} = \sum_n a_n^2\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2\frac{T}{2}}$$

g En se basant sur l'hypothèse physique de discrétisation temporelle (présente dans l'expression de l'intégrale de chemin utilisée en d)), discuter le nombre de valeurs prises par l'indice "n" de "a_n".

transform. de Fourier (série) : $\eta(t) \to a_n$

t variable continue : infinité de valeurs → somme infinie sur n

TEMPS DISCRÉTISÉ : ex $N=3$: (t_i), t_1, t_2, (t_f) ; ε ε ε

$\boxed{N-1} = 2$ var. temp.

donc $n = 1, 2$ pour a_n

$\boxed{h}$ Exprimer l'amplitude comme une multi-intégrale sur les variables "a_m". (utiliser $\boxed{f}$, $\boxed{g}$ et $\boxed{c}$, $\boxed{d}$)

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \lim_{N\to\infty} \int d\eta_1 \dots d\eta_{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{N/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]\right\} \exp\left\{\frac{im}{2\hbar} \sum_{m=1}^{N-1} \left(a_m^2 \left(\frac{m\pi}{T}\right)^2 \frac{T}{2} - \omega^2 a_m^2 \frac{T}{2}\right)\right\}$$

forme explicite avec temps discret (avant limite)

(≠ forme explicite de c.8 avec dérivée tempor. dans exp.) → "intégration faite mais somme venant de la série de Fourier"

changement de variable réelle $\eta_m \mapsto a_m$ avec degrés de liberté conservés

$$= \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{N/2} \underbrace{J_a}_{\text{"Jacobien"}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]\right\} \int da_1 \dots da_{N-1} \exp\left\{\frac{imT}{4\hbar} \sum_{m=1}^{N-1} \left(\left[\frac{m\pi}{T}\right]^2 - \omega^2\right) a_m^2\right\}$$

$\mathcal{E}_{Ja}$

"changement de var. conforme le nombre de a_m"

$\mathcal{A}_1 \dots \mathcal{A}_m \dots \mathcal{A}_{N-1}$

$\boxed{i}$ En déduire l'amplitude. Discuter la limite $\begin{cases} T\to 0 \\ \omega \to 0 \end{cases}$.

$$\mathcal{A}_m = \int da_m \exp\left\{\frac{i}{2} \underbrace{\frac{mT}{2\hbar}\left(\left[\frac{m\pi}{T}\right]^2 - \omega^2\right)}_{\frac{1}{\sigma^2}} a_m^2\right\} = \sqrt{\frac{2\pi}{-i}} \underbrace{\left[\frac{mT}{2\hbar}\left[\frac{m\pi}{T}\right]^2\left(1 - \left[\frac{\omega T}{m\pi}\right]^2\right)\right]^{-1/2}}_{\sigma} = \sqrt{\frac{4\pi i \hbar}{mT}} \frac{T}{m\pi} \left(1 - \left[\frac{\omega T}{m\pi}\right]^2\right)^{-1/2}$$

d'où,

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \mathcal{E}_{Ja} \prod_{m=1}^{N-1} \left\{\sqrt{\frac{4\pi i \hbar}{mT}} \frac{T}{m\pi} \left(1 - \left[\frac{\omega T}{m\pi}\right]^2\right)^{-1/2}\right\} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]\right\}$$

$$= \mathcal{E}_{Ja} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]\right\} \prod_{m=1}^{N-1} \left\{\sqrt{\frac{4\pi i \hbar}{mT}} \frac{T}{m\pi}\right\} \frac{1}{\left(\underbrace{\lim_{N\to\infty} \prod_{m=1}^{N-1} \left(1 - \left[\frac{\omega T}{m\pi}\right]^2\right)}_{\sin(\omega T)/\omega T}\right)^{1/2}}$$

"indice de produit"

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \underbrace{\lim_{\substack{N\to\infty \\ (\epsilon\to 0)}} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right)^{N/2} J_a \prod_{m=1}^{N-1} \left\{ \sqrt{\frac{4\pi i\hbar}{mT}}\, \frac{T}{m\pi} \right\}}_{\text{indépendant de } \omega \text{ et } J} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]\right\} \left[\frac{\sin(\omega T)}{\omega T}\right]^{-1/2}$$

$h(t) \mapsto a_m$ (TD12)

(TD9) $\downarrow \; J\to 0,\ \omega\to 0$ $\qquad$ $\downarrow\ \omega\to 0$

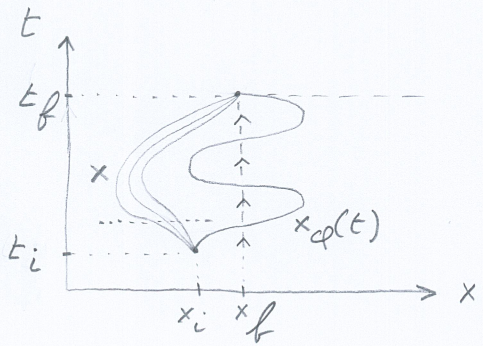
$$\underbrace{\left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f-t_i)}\right)^{1/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_{libre}[x_{cl}]\right\}}_{\langle x_f t_f | x_i t_i\rangle \text{ dans le cas libre (TD8) après limite}} \qquad 1$$

$T = t_f - t_i$ (TD12)

$$\boxed{= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar \cancel{T}}\right)^{1/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]\right\} \left[\frac{\sin(\omega T)}{\omega \cancel{T}}\right]^{-1/2}}$$

Interprétation

O.H. 1D



$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle$ (C.2) : densité d'amplitude de probabilité de présence en x_f (pour un système ponctuel en x_i à t_i) oscillant par rapport à t_f (ou T)

« vérifié dans la limite classique » ($S \gg \hbar \to 0$)
(C.9, C.10)

$$\Big|\underbrace{\int_{\mathbb{R}}}_{\to\ \Delta x_f} \underbrace{dx_f \langle x_f t_f | x_i t_i \rangle}_{\frac{dA}{dx_f}}\Big|^2 = 1$$

(TD6) $\to \neq 1$ $(0 \le \Delta P \le 1)$

« normalisation doit être satisfaite car l'amplitude est bien normalisée » (de la probabilité)

« divergences en $\frac{1}{\sqrt{\sin(\omega T)}}$ ($\to 0$) prises en compte dans cette quantité physique » (basée sur une intégrale finie)

$\boxed{j}$ Calculer $S[x_{cl}]$. (pour $J(t)=0$) $\rightarrow$ "O.H. 1D"

Simplifiant par "m", les équations du mouvement (TD 10 / $\boxed{a}$) s'écrivent : $\ddot{x}_{cl}(t) = -\omega^2 x_{cl}(t)$.
Cette équation différentielle du second ordre, linéaire et homogène a pour solutions génériques :

$$x_{cl}(t) = A e^{i\omega t} + B e^{-i\omega t}, \quad A, B \in \mathbb{C}$$ avec les conditions initiales/finales suivantes,

" voir fig. (TD 15) "

$$\begin{cases} x_{cl}(t_i) = x_i = A e^{i\omega t_i} + B e^{-i\omega t_i} \\ x_{cl}(t_f) = x_f = A e^{i\omega t_f} + B e^{-i\omega t_f} \end{cases}$$

$(T = t_f - t_i)$

soit,

$$\begin{cases} A = \dfrac{1}{2i\sin(\omega T)}\left(x_f e^{-i\omega t_i} - x_i e^{-i\omega t_f}\right) \\ B = \dfrac{1}{2i\sin(\omega T)}\left(x_i e^{i\omega t_f} - x_f e^{i\omega t_i}\right) \end{cases}$$

Vérification...

$$x_i = \frac{1}{2i\sin(\omega T)}\left[\left(\cancel{x_f} - x_i e^{-i\omega T}\right) + \left(x_i e^{i\omega T} - \cancel{x_f}\right)\right] \quad // \quad x_f = \frac{1}{2i\sin(\omega T)}\left[\left(x_f e^{i\omega T} - \cancel{x_i}\right) + \left(\cancel{x_i} - x_f e^{-i\omega T}\right)\right] \checkmark$$

d'où,

$$\boxed{x_{cl}(t)} = \frac{1}{2i\sin(\omega T)}\left\{x_f e^{i\omega(t-t_i)} - x_i e^{i\omega(t-t_f)} + x_i e^{-i\omega(t-t_f)} - x_f e^{-i\omega(t-t_i)}\right\}$$

Réel

$$= \frac{1}{\cancel{(2i)}\sin(\omega T)}\left\{x_f \cancel{(2i)} \sin[\omega(t-t_i)] - x_i \cancel{(2i)} \sin[\omega(t-t_f)]\right\}$$

réel   Réel   Réels

et,

$$\dot{x}_{cl}(t) = \frac{\omega}{\sin(\omega T)}\left\{x_f \cos[\omega(t-t_i)] - x_i \cos[\omega(t-t_f)]\right\}$$

Notons,

$$\begin{cases} \omega(t-t_i) = \tau_i \\ \omega(t-t_f) = \tau_f \end{cases}$$

TD 17

$$\boxed{S[x_{cl}] = \int_{t_i}^{t_f} dt \, \underbrace{\frac{m\,\omega^2}{2\sin^2(\omega T)}}_{C} \Big[x_f^2 \cos^2[\tau_i] + x_i^2 \cos^2[\tau_f] - 2\, x_i x_f \cos[\tau_i]\cos[\tau_f]}$$
$$- \{ x_f^2 \sin^2[\tau_i] + x_i^2 \sin^2[\tau_f] - 2\, x_i x_f \sin[\tau_i] \sin[\tau_f] \} \Big]$$

$\boxed{a}$ / TD 9

$$S[x_{cl}] = C \int dt\, x_f^2 \cos[2\tau_i] + C \int dt\, x_i^2 \cos[2\tau_f] - C \int dt\, x_i x_f\, 2 \cos[\tau_i + \tau_f]$$

$$= C \left(x_f^2 \cdot \frac{\sin[2\omega(t-t_i)]}{2\omega} \Big|_{t=t_i}^{t=t_f} + x_i^2 \cdot \frac{\sin[2\omega(t-t_f)]}{2\omega} \Big|_{t=t_i}^{t=t_f} - 2\, x_i x_f \cdot \frac{\sin[\omega(2t - t_i - t_f)]}{2\omega} \Big|_{t=t_i}^{t=t_f} \right)$$

$$= \frac{m\,\omega}{4 \sin^2(\omega T)} \Big(x_f^2 \underbrace{\sin[2\omega T]}_{\equiv\, 2\sin(\omega T)\cos(\omega T)} - x_i^2 \sin[2\omega(-T)] - 2\, x_i x_f \{ \underbrace{\sin[\omega T] - \sin[-\omega T]}_{2\sin(\omega T)} \} \Big)$$

$$\boxed{= \frac{m\,\omega}{2\sin(\omega T)} \Big\{ [x_f^2 + x_i^2] \cos(\omega T) - 2\, x_i x_f \Big\}}$$

$\longrightarrow$ « à insérer dans l'expression de l'amplitude en TD 15 (densité) : $\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle$ »

III) Interactions fondamentales & graphes de Feynman

1) On se propose d'obtenir l'amplitude de probabilité (densité) de transition quantique entre des états initial et final de moment, lors de la diffusion d'une particule élémentaire sur un champ de potentiel.

a Grâce à la série de Born, exprimer la fonction d'onde $\psi_i(x_f, t_f)$ en termes des propagateurs de Feynman aux ordres "0" et "1", puis à l'ordre "0" uniquement, et de $\psi_i(x_i, t_i)$.

D'après C.2, $\psi_i(x_f,t_f) = \int dx_i \, \langle x_f t_f | x_i t_i \rangle \, \psi_i(x_i, t_i)$

"évolution temporelle de fonction d'onde"

(C.12) 13

$$\simeq \int dx_i \, \langle x_f t_f | x_i t_i \rangle^{(0)} \psi_i(x_i,t_i) + \int dx_i \underbrace{\left\{ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int dx \int dt \, \langle x_f t_f | x t \rangle^{(0)} V(x) \langle x t | x_i t_i \rangle^{(0)} \right\}}_{\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle^{(1)}} \psi_i$$

$x(t)$ val. propre

b La particule est initialement ($t_0 = 0$) dans l'état propre de $\hat{P}$, $|p_i\rangle$.
Ecrire la fonction d'onde au temps t_i antérieur à la traversée du potentiel:

$t_0 = 0$ — t_i — $V(x(t)) \neq 0$ — t_f → t

(en évolution adiabatique)

(C.1) $\underbrace{\langle x | p_i \rangle}_{\text{à } t_0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_i x}$ $\Rightarrow$ cas libre (1D) $\left(\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2m} + 0 \right)$: $\hat{H}_0 \langle x | p_i \rangle = \frac{(2\pi\hbar)^{-1/2}}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 e^{\frac{i}{\hbar} p_i x} = \underbrace{\frac{1}{2m} p_i^2}_{E_i} \langle x | p_i \rangle$

soit $\hat{H}_0 |p_i\rangle = E_i |p_i\rangle$

$$|p_i^{(0)}(t_i)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t_i - \overset{0}{t_0})} \underbrace{|p_i\rangle}_{\text{à } t_0} = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t_i} |p_i\rangle}_{\text{encore état propre de } \hat{H}_0, \hat{P}} \Rightarrow \boxed{\underbrace{\langle x_i | p_i(t_i) \rangle}_{\psi_i^{(0)}(x_i, t_i)} = \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} (p_i x_i - E_i t_i) \right\} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}}$$

$$= \exp\left\{ i (k_i x_i - \omega_i t_i) \right\} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

↓ question suivante...

"onde plane"

$\boxed{c}$ Calculer, grâce aux deux questions précédentes, l'amplitude recherchée : $S = \langle \underbrace{p_f^\circ(t_f)}_{} | p_i(t_f) \rangle$.

[σ : section efficace] ← "état libre" ($V=0$) | propre ($\boxed{b}$)

{physique ; de même temps initial "t_0"}

$$\boxed{S = \int dx_f \underbrace{\langle p_f^\circ(t_f) | x_f \rangle}_{\Psi_f^{\circ *}(x_f,t_f)} \underbrace{\langle x_f | p_i(t_f) \rangle}_{\Psi_i(x_f,t_f)}}$$

"onde plane" — "évolution temporelle donnée en $\boxed{a}$"

$|p_i(t_i)\rangle$ "onde plane" $\Psi_i(x_i,t_i)$ — pure...

$$= \int dx_f\, \Psi_f^{\circ *}(x_f,t_f) \underbrace{\int dx_i \langle x_f t_f | x_i t_i \rangle^{(0)} \overset{\text{"onde plane"}}{\Psi_i(x_i,t_i)}}_{} - \left(\frac{i}{\hbar}\right) \int dx_f \Psi_f^{\circ *}(x_f,t_f) \int dx_i \int dx \int dt \ldots$$

[particule libre initialement, et se propageant sans interaction, reste libre, évidemment (C.12)] : $\underbrace{\Psi_i^\circ(x_f,t_f)}_{\text{"onde plane"}}$ (évol. temp. ⇒ même temps initial "t_i") — (C.2) ($\boxed{a}$) → "ligne 1"

$$\ldots \langle x_f t_f | x t \rangle^{(0)} V(x) \langle x t | x_i t_i \rangle^{(0)} \underbrace{\Psi_i(x_i,t_i)}_{} + \ldots$$

interprétation : $\langle x_i | p_i(t_i) \rangle$

$\boxed{d}$ Calculer le premier terme de S. Commenter le résultat physiquement (et la dimension).

$$\int dx_f \underbrace{\frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{-i}{\hbar}(p_f x_f - E_f t_f)\right\}}_{\Psi_f^{\circ *}(x_f,t_f)} \underbrace{\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p_i x_f - E_i t_f)\right\} \frac{1}{2\pi\hbar}}_{\Psi_i^\circ(x_f,t_f)} \overset{\vec{p}=\hbar\vec{k}}{\underset{\text{T.F.}(1_x) = 2\pi\delta(k)}{=}} \frac{1}{2\pi\hbar} 2\pi \delta(k_f - k_i)\, e^{\frac{i}{\hbar} t_f (E_f - E_i)}$$

dimension : $\left[\frac{1}{\hbar k}\right] = \frac{1}{[p]}$

$(P=1)$ → TD20

"forte amplitude" [• En effet, en cas de non-interaction (ordre 0 ou $V=0$), $S = \langle p_f^\circ(t_f) | p_i^\circ(t_f) \rangle \overset{\boxed{b}}{=} \langle p_f | e^{\frac{i}{\hbar}E_f t_f} e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t_f} | p_i \rangle$

$$= \delta(p_f - p_i)\, e^{\frac{i}{\hbar} t_f (E_f - E_i)}$$

$\overset{(C.2)}{=} \frac{1}{\hbar}\delta(k_f - k_i)$; $E_f - E_i \underset{\text{"onde plane"}}{=} \frac{(\hbar k_f)^2}{2m} - \frac{(\hbar k_i)^2}{2m} = 0$.

"faible amplitude (V faible) sur Δp_f" [• En cas d'interaction, $\underbrace{p_i}_{} \neq \underbrace{p_f}_{}$ d'où le 1^{er} terme s'annule (de S).

état initial // valeur propre de $|p_i\rangle$ à t_0 / t_i | valeur propre de $\exp\{-\frac{i}{\hbar}E_f t_f\}|p_f\rangle$ // état final

Dimension de S d'après $\boxed{c}$: $\underset{\text{C.1}}{[S]} = L\left(\frac{1}{[P]^{1/2}} L^{-1/2}\right)^2 = [p]^{-1}$ ✓ $\underset{(\text{TD6})}{\Rightarrow} \Big| \int_{\Delta p_f} dp_f\, \underbrace{S}\Big|^2 \equiv$ Probabilité (1)

" densité de probabilité dans l'espace du moment "

Normalisation ← (R)

$\{$ cas libre : $\Delta p_f \ni p_i \Rightarrow \left| \int dp_f\, \delta(p_f - p_i) \right|^2 = 1$; $\not\ni$: $= 0$ $\}$

Ainsi la définition de S, et son terme à l'ordre 0 (reposant sur le propagateur de Feynman bien dimensionné/normé : TD6), conduisent à une dimension/normalisation [vérifiée dans le cas libre ici] correctes pour cette amplitude.

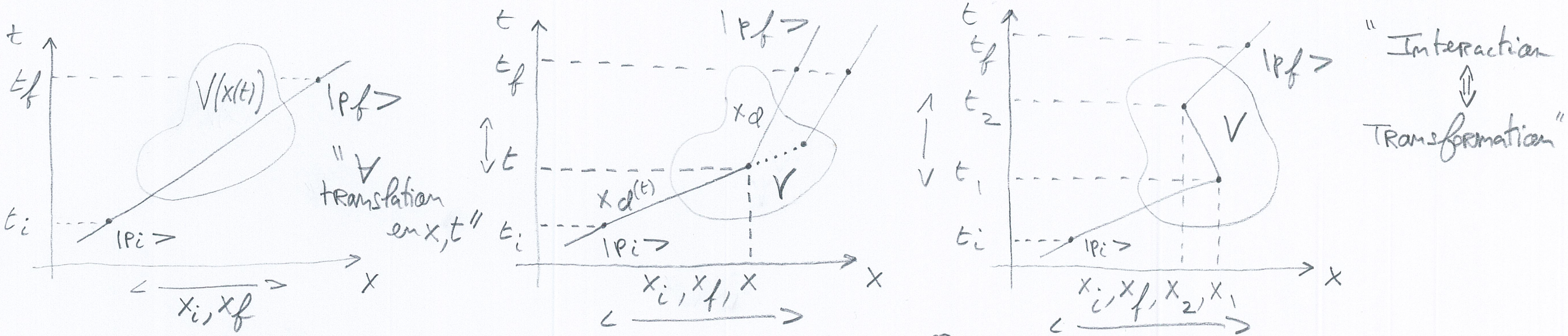
GÉNÉRALISABLE À 3D. $\Big\{$ $|x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle$; $|p_x\rangle \otimes |p_y\rangle \otimes |p_z\rangle$; & $\int d^3p_f\, S$; $\int d^3x_f$ dans S

<u>Remarque</u> ①: $V(x)$ à bien normaliser.

<u>Remarque</u> ②: Construction d'une quantité mesurable probabiliste (taux de désintégration, section efficace, ...) prenant en compte la possibilité de non-interaction
↳ discussion de la densité d'états superposés pour un spectre continu ("p")

$\boxed{e}$ Interpréter graphiquement la densité d'amplitude S obtenue en $\boxed{c}$ & $\boxed{d}$.

Description quantique des interactions VIA Diagrammes de Feynman



$S = \delta(p_f - p_i) + S^{(1)} + S^{(2)} + \dots$

↳ val. propres

$\boxed{f}$ Déduire le terme de la densité d'amplitude à l'ordre deux.

$$S^{(2)} = \int dx_f \int dx_i \int dx_1 \int dt_1 \int dx_2 \int dt_2 \; \varphi_f^{o*}(x_f,t_f) < x_f t_f | x_2 t_2 >^{(0)} \frac{V(x_2(t_2))}{i\hbar} < x_2 t_2 | x_1 t_1 >^{(0)} \frac{V(x_1(t_1))}{i\hbar} < x_1 t_1 | x_i t_i >^{(0)} \ldots$$

$$\ldots \varphi_i(x_i, t_i)$$

Commentaire : Règles de Feynman déjà utiles dans ce contexte de théorie quantique non-relativiste et encore plus utiles en théorie quantique des champs (pour compréhension, calcul, ...)

② Calculons la densité d'amplitude de probabilité, pour une diffusion de particule élémentaire, dans l'espace des impulsions de cette particule. (cas réaliste : 3D)

$\boxed{a}$ Ecrire la densité d'amplitude de probabilité de transition entre états initial et final de moments, de manière analogue à celle pour des états de position.

$S = <\vec{p}_f t_f | \underbrace{\vec{p}_i t_i>}$: probabilité que le système ait le moment $\vec{p}_f$ à t_f, ayant le moment $\vec{p}_i$ à t_i (raisonnement similaire à C.2)

(graphique) IDEM

"état propre de $\hat{\vec{P}}(t_i)$ de valeur propre $\vec{p}_i$"

Généralisation dimensionnelle : $|\vec{p}_i> = |p_{x_i}> \otimes |p_{y_i}> \otimes |p_{z_i}>$ ex $\hat{P}_x(t_i)(\otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}) |\vec{p}_i> = p_{x_i} |\vec{p}_i>$

$\boxed{b}$ Exprimer l'amplitude obtenue en terme de l'opérateur d'évolution temporelle $\hat{U}(t_f, t_i)$, puis de l'amplitude entre états quantiques de positions

C.2 : $S = <\vec{p}_f t_f | \vec{p}_i t_i> = <\vec{p}_f | \hat{U}(t_f, t_i) | \vec{p}_i>$ "relations de fermeture"

$\int dx |x><x| \otimes \int dy |y><y| \otimes \int dz |z><z| = \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}$

$$= \int d^3x_f \int d^3x_i \; <\vec{p}_f | \vec{x}_f> \underbrace{<\vec{x}_f | \hat{U}(t_f, t_i) | \vec{x}_i>}_{<\vec{x}_f t_f | \vec{x}_i t_i>} <\vec{x}_i | \vec{p}_i>$$

"à un temps fixé"

TD22

$\boxed{c}$ Utiliser les fonctions d'onde propres de l'impulsion pour expliciter le résultat précédent.

$$c.1 : \langle \vec{x}|\vec{p}\rangle = (\langle x|\langle y|\langle z|)(|p_x\rangle|p_y\rangle|p_z\rangle) = \langle x|p_x\rangle\langle y|p_y\rangle\langle z|p_z\rangle = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\overbrace{\vec{p}\cdot\vec{x}}^{p_x x + p_y y + p_z z}}$$

$\boxed{b}$: $$\boxed{S = \int d^3x_f \int d^3x_i \; \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_i\cdot\vec{x}_i - \vec{p}_f\cdot\vec{x}_f)\right\} \langle \vec{x}_f t_f|\vec{x}_i t_i\rangle \; h^{-3}}$$

(dimensions ✓ : c.11
$[P]^{-3} = L^6 \cdot L^{-3} \cdot ([P] L)^{-3}$)

$\boxed{d}$ Retrouver l'amplitude obtenue grâce aux questions $\boxed{a}$ $\boxed{b}$ $\boxed{c}$ de l'exercice ① (1D), à une phase près.

$$S \overset{\boxed{c}}{=} \int dx_f \; \psi_f^{o*}(x_f, t_f) \underbrace{\psi_i(x_f, t_f)}$$

(2ème ligne utilisée dans $\boxed{c}$)

$\boxed{a}$ 1ère ligne ↳ $\int dx_i \langle x_f t_f|x_i t_i\rangle \psi_i(x_i, t_i)$

$$\Longrightarrow \quad S \overset{\boxed{b}}{=} \int dx_f \int dx_i \langle x_f t_f|x_i t_i\rangle \frac{1}{h} \cdots$$

"ondes planes" $\cdots \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(E_f t_f - p_f x_f + p_i x_i - E_i t_i)\right\}$

↳ phases globales complexes sans impact dans $\left|\int dp_{f/i} S\right|^2$ = Proba. ← (TD20)

3D ↓

RÉSULTAT PRÉCÉDENT RETROUVÉ

$\boxed{e}$ Généraliser le propagateur libre (TD 8) de Feynman à 3 dimensions.

$$\boxed{\langle \vec{x}_f t_f|\vec{x}_i t_i\rangle^{(0)} = \langle x_f t_f|x_i t_i\rangle^{(0)} \langle y_f t_f|y_i t_i\rangle^{(0)} \langle z_f t_f|z_i t_i\rangle^{(0)}}$$

$$= \left(\frac{m}{ih}\right)^{3/2} (t_f - t_i)^{-3/2} \exp\left\{\frac{im}{2\hbar}(t_f - t_i)^{-1}\left[\overbrace{(x_f - x_i)^2}^{[\vec{x}_f - \vec{x}_i]_x^2} + (y_f - y_i)^2 + (z_f - z_i)^2\right]\right\}$$

$$\boxed{= \left(\frac{m}{ih}\right)^{3/2} (t_f - t_i)^{-3/2} \, e^{\frac{im}{2\hbar(t_f - t_i)}[\vec{x}_f - \vec{x}_i]^2}}$$

$(\cdot\, \theta(t_f - t_i))$

$$\vec{x}_f = \begin{vmatrix} x_f \\ y_f \\ z_f \end{vmatrix} \qquad \vec{x}_i = \begin{vmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{vmatrix}$$

$\boxed{f}$ En déduire la densité d'amplitude obtenue en $\boxed{c}$ dans le cas libre.

$$S^{(0)} = \int d^3x_f \int d^3x_i \; \exp.\left\{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_i\cdot\vec{x}_i - \vec{p}_f\cdot\vec{x}_f)\right\} \underbrace{\langle \vec{x}_f t_f | \vec{x}_i t_i \rangle^{(0)}}_{\left(\frac{m}{i h \Delta t}\right)^{3/2} \exp.\left\{\frac{im}{2\hbar\Delta t}[\vec{x}_f - \vec{x}_i]^2\right\}\theta(\Delta t)} \frac{1}{h^3} \qquad (\text{pour } \Delta t = t_f - t_i)$$

$\boxed{g}$ Effectuer le changement de variables, $\vec{x}_i, \vec{x}_f \longmapsto \vec{k}, \vec{R}$, dans l'intégrale résultante, avec $\vec{k} \hat{=} \vec{x}_i - \vec{x}_f$ et $\vec{R} \hat{=} \vec{x}_i + \vec{x}_f$. Pour cela calculer, $\vec{p}\cdot\vec{R} + \vec{P}\cdot\vec{k}$, où $\vec{p} = \vec{p}_i - \vec{p}_f$ et $\vec{P} = \vec{p}_i + \vec{p}_f$.

$$\boxed{\vec{p}\cdot\vec{R} + \vec{P}\cdot\vec{k} = (\vec{p}_i\cdot\vec{x}_i + \cancel{\vec{p}_i\cdot\vec{x}_f} - \cancel{\vec{p}_f\cdot\vec{x}_i} - \vec{p}_f\cdot\vec{x}_f) + (\vec{p}_i\cdot\vec{x}_i - \cancel{\vec{p}_i\cdot\vec{x}_f} + \cancel{\vec{p}_f\cdot\vec{x}_i} - \vec{p}_f\cdot\vec{x}_f) = 2(\vec{p}_i\cdot\vec{x}_i - \vec{p}_f\cdot\vec{x}_f)}$$

Il reste à calculer le Jacobien : $\int d^3x_f \int d^3x_i \equiv \int d^3k \int d^3R \; J$, avec $\underbrace{(a = 1,2,3\,;\, b = 1,2,3)}_{\text{"composantes des vecteurs"}}$,

$$J = \left| \begin{matrix} \dfrac{\partial x_i^a}{\partial k^b} & \dfrac{\partial x_i^a}{\partial R^b} \\[2mm] \dfrac{\partial x_f^a}{\partial k^b} & \dfrac{\partial x_f^a}{\partial R^b} \end{matrix} \right| = \left| \begin{matrix} \frac{1}{2}\delta_{ab} & \frac{1}{2}\delta_{ab} \\ -\frac{1}{2}\delta_{ab} & \frac{1}{2}\delta_{ab} \end{matrix} \right| = \left| \begin{matrix} A & B \\ C & D \end{matrix} \right|$$

"valeur absolue du déterminant"

a : ligne
b : colonne

puisque $\begin{cases} x_i^a = \frac{1}{2}(k^a + R^a) \\ x_f^a = \frac{1}{2}(R^a - k^a) \end{cases}$. Utilisons la relation, $\mathrm{Det}\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \mathrm{Det}[DA - DBD^{-1}C]$

$$= \mathrm{Det}[D]\cdot\mathrm{Det}[A - BD^{-1}C]$$

$$\text{avec } D = \tfrac{1}{2}\mathbb{1}_{3\times 3},\; A = \tfrac{1}{2}\mathbb{1},\; B = \tfrac{1}{2}\mathbb{1},\; D^{-1} = 2\mathbb{1},\; C = -\tfrac{1}{2}\mathbb{1}$$

$$= \mathrm{Det}[\tfrac{1}{2}\mathbb{1}]\cdot\mathrm{Det}[\underbrace{\mathbb{1}\tfrac{1}{2} + \mathbb{1}\tfrac{1}{2}}_{=\mathbb{1}}]$$

$$= \left(\tfrac{1}{2}\right)^3 = \boxed{\tfrac{1}{8}}.$$

Ainsi, $\boxed{J = \left|\mathrm{Det}\begin{bmatrix} A & B \\ C & D\end{bmatrix}\right| = \left|\tfrac{1}{8}\right| = \tfrac{1}{8}}$.

$$S^{(0)} = \underbrace{\int d^3k \, \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2}\vec{P}\cdot\vec{k} + \frac{1}{2}\frac{m}{\Delta t}\vec{k}^2\right)\right\}}\ \underbrace{\int d^3R \, \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2}\vec{p}\cdot\vec{R}\right)\right\}}_{(2\pi)^3\,\delta^{(3)}\left(\frac{\vec{p}}{2\hbar}\right) = (4\pi\hbar)^3\,\delta(p_x)\delta(p_y)\delta(p_z)} \left(\frac{m}{i\hbar\Delta t}\right)^{3/2} \frac{1}{\cancel{\hbar^3}}\,\theta(\Delta t)\,\frac{1}{\cancel{8}}$$

h Calculer l'intégrale $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \, \exp\{\overbrace{-iax^2+ibx+c}^{q(x)}\}$ à partir de la fonction gaussienne imaginaire, en ramenant le polynôme de l'argument de l'exponentielle à un carré de la variable x.

$$\frac{ib^2}{4a} + c - ia\left(x-\frac{b}{2a}\right)^2 = \cancel{\frac{ib^2}{4a}} + c - ia\left[x^2 + \cancel{\frac{b^2}{4a^2}} - \frac{xb}{a}\right] = q(x) \ ✓$$

d'où, $\boxed{\int dx\,\exp\{q(x)\} = \exp\left\{\frac{ib^2}{4a}+c\right\}\int dx\,\exp\left\{-i\underbrace{a\frac{2}{2}}_{1/2\sigma^2}\left(x-\frac{b}{2a}\right)^2\right\} \underset{(TD3)}{=} e^{(ib^2/4a)+c}\sqrt{\frac{2\pi}{+i}}\cdot\frac{1}{\sqrt{2a}}}$

$$\boxed{= \left(\frac{-i\pi}{a}\right)^{1/2} e^{\left(\frac{ib^2}{4a}+c\right)}}$$

i En déduire la densité d'amplitude de la question **g** en fonction de $\vec{p}_i$ et $\vec{p}_f$. Commenter les dimensions.

$$\boxed{S^{(0)} = \underbrace{\int dk_x \, \exp\left\{-i\underbrace{\left(\frac{-m}{2\hbar\Delta t}\right)}_{a=}k_x^2 + i\underbrace{\left(\frac{P_x}{2\hbar}\right)}_{b=}k_x\right\}}\cdot I_y\cdot I_z\cdot\delta^{(3)}(\vec{p})\,\theta(\Delta t)\left(\frac{m}{i\hbar\Delta t}\right)^{3/2}}$$

$$I_x = \left(\frac{\pi}{i}\,\frac{2\hbar\Delta t}{-m}\right)^{1/2}\exp\left\{i\left(\frac{P_x}{2\hbar}\right)^2\frac{1}{4}\left(\frac{2\hbar\Delta t}{-m}\right)\right\}$$

$$= \delta^{(3)}(\vec{p})\,\theta(\Delta t)\,\exp\left\{-i\frac{\Delta t}{8m\hbar}\vec{P}^2\right\} \underset{\vec{P}\,\hat{=}\,\vec{p}_i+\vec{p}_f = 2\vec{p}_i}{=} \boxed{\theta(t_f-t_i)\,\delta^{(3)}(\vec{p}_i-\vec{p}_f)\,\exp\left\{-i\frac{t_f-t_i}{2m\hbar}\vec{p}_i^{\,2}\right\}}$$

C.U : $\int dp\,|pt\rangle\langle pt| = \mathbb{1}$

d'où $[\,|pt\rangle\,] = [p]^{-1/2}$

soit $[S^{(0)}] \underset{TD21}{=} \left([p]^{-1/2}\right)^6 = [p]^{-3}$

or $[\delta^{(3)}(\vec{p})] = \left([p]^{-1}\right)^3$ ✓

j Exprimer la densité d'amplitude $\langle \vec{x}_f t_f | \vec{x}_i t_i \rangle^{(0)}$ en terme de la densité d'amplitude $S^{(0)}$ (pour les états de moments), grâce à un raisonnement mathématique [via $\boxed{f}$] puis par un cheminement physique — dans le cas libre.

Considérant l'expression de $S^{(0)}$ en $\boxed{f}$ comme une transformée de Fourier, la transformation inverse s'écrit alors,

$$\underbrace{\frac{1}{\hbar^3}}_{1/(2\pi\hbar)^3} \langle \vec{x}_f t_f | \vec{x}_i t_i \rangle^{(0)} \underbrace{=}_{C.1} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^6 \int d^3\left(\frac{p_i}{\hbar}\right) \int d^3\left(\frac{p_f}{\hbar}\right) \exp\left\{-i\left(\frac{\vec{p}_i}{\hbar}\cdot\vec{x}_i - \frac{\vec{p}_f}{\hbar}\cdot\vec{x}_f\right)\right\} \underbrace{S^{(0)}}_{TD21}\left(\vec{p}_f, t_f, \vec{p}_i, t_i\right)$$

2 espaces

$(\hbar)$

$$\underbrace{\langle \vec{x}_f t_f | \vec{x}_i t_i \rangle^{(0)}}_{\substack{(TD21)\\ \langle \vec{x}_f | \hat{U}^{(0)}(t_f,t_i) | \vec{x}_i \rangle}} = \int d^3p_f \int d^3p_i \underbrace{\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_f\cdot\vec{x}_f}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}}_{\langle \vec{x}_f | \vec{p}_f \rangle} \underbrace{S^{(0)}}_{\substack{(TD21)\\ \langle \vec{p}_f | \hat{U}^{(0)}(t_f,t_i) | \vec{p}_i \rangle}} \underbrace{\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}_i\cdot\vec{x}_i}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}}_{(\langle \vec{x}_i | \vec{p}_i \rangle^* =) \langle \vec{p}_i | \vec{x}_i \rangle}$$

(TD21) $\mathbb{1} =$; $= \mathbb{1}$ (TD22)

"espace des impulsions"

k En déduire une autre forme de $\langle \vec{x}_f t_f | \vec{x}_i t_i \rangle^{(0)}$. (Utiliser le résultat de $\boxed{i}$) Analyse dimensionnelle.

$$\underbrace{\langle \vec{x}_f t_f | \vec{x}_i t_i \rangle^{(0)}}_{[(L^{-1/2})^3]^2} = \frac{1}{h^3} \int d^3p_i \int d^3p_f \, e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_i\cdot\vec{x}_i - \vec{p}_f\cdot\vec{x}_f)} \underbrace{\theta(t_f-t_i)\,\delta^{(3)}(\vec{p}_i-\vec{p}_f)\, e^{-i\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m}\frac{(t_f-t_i)}{\hbar}}}_{S^{(0)} \quad (TD24/\text{bas de page})}$$

(C.11)

$$= \frac{1}{h^3} \int d^3p_f \, \theta(t_f-t_i) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}_f\cdot[\vec{x}_i-\vec{x}_f] + \frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m}(t_f-t_i)\right)\right\} \longrightarrow \frac{[p]^3}{([p]L)^3} = L^{-3}$$

✓

$\boxed{l}$ Vérifier le résultat précédent à l'aide du cas libre (étude / TD8) et de $\boxed{h}$. (An. dim.)

$$\boxed{\langle \vec{x}_f t_f | \vec{x}_i t_i \rangle^{(0)}} = \frac{1}{h^3} \underbrace{\int dp_{fx} \exp\left\{ -i \underbrace{\left(\frac{\Delta t}{2m\hbar}\right)}_{a} p_{fx}^2 + i \underbrace{\left(\frac{x_f - x_i}{\hbar}\right)}_{b} p_{fx} \right\}}_{J_x = \left(\frac{\pi}{i}\frac{2m\hbar}{\Delta t}\right)^{1/2} \exp\left\{\frac{i}{4}\left(\frac{x_f-x_i}{\hbar}\right)^2\left(\frac{2m\hbar}{\Delta t}\right)\right\}} \cdot J_y \cdot J_z \; \theta(\Delta t)$$

$(\boxed{h})$

$$L^{-3} = \left[\frac{M}{\left(M\frac{L^2}{T^2}\right)T \cdot T}\right]^{3/2} \longleftarrow \left(\frac{m}{ih\Delta t}\right)^{3/2}$$

$\checkmark$ (C.11)

$$= \boxed{\frac{1}{h^3}\left(\frac{mh}{i\Delta t}\right)^{3/2} \exp\left\{ i \frac{m}{2\hbar} \frac{(\vec{x}_f - \vec{x}_i)^2}{\Delta t}\right\}(\theta(\Delta t))} \longleftarrow \text{3D } \checkmark \text{ TD22 } \boxed{e}$$

[TD8] "cas libre"

$\boxed{m}$ Afin de traiter "t" et "$\vec{x}$" au même niveau (extension relativiste), calculer -via $\boxed{i}$- la transformée de Fourier (inverse) de $S^{(0)}$ par rapport au temps [$\boxed{f}$: T.F.$^{-1}$ // espace].

"$t \longrightarrow E$" ↳ facteur "$\vec{x} \longleftarrow \vec{p}$"

$$\boxed{\underset{(\hbar)}{s^{(0)}(\vec{p}_f, E_f, \vec{p}_i, E_i)}} \overset{(1)}{=} \int dt_f \int dt_i \exp\left\{+i \frac{\overset{\text{réelle}}{E_f}}{\hbar} t_f\right\} \exp\left\{-i\frac{E_i}{\hbar}t_i\right\} S^{(0)}(\vec{p}_f, t_f, \vec{p}_i, t_i)$$

valeurs propres → TD25

↳ espace $\neq t_i$; $\vec{x}_f$ (conventions)

"changement de variable"
$$\overset{\boxed{i}}{=} \int dt_f \int dt_i \, e^{\frac{i}{\hbar}\left(E_f t_f - E_i t_i - \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m}(t_f - t_i)\right)} \delta^{(3)}(\vec{p}_i - \vec{p}_f)\, \theta(t_f - t_i)$$

$(\Delta t =)\ \tau = t_f - t_i$

$d\tau = dt_f$

($t_i \equiv$ "constante" dans $\int dt_f$)

$$= \boxed{\delta^{(3)}(\vec{p}_i - \vec{p}_f) \underbrace{\int dt_i \, e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t_i}}_{2\pi\,\delta\left(\frac{E_f - E_i}{\hbar}\right)} \underbrace{\int d\tau\, \theta(\tau)\, e^{\frac{i}{\hbar}\left(E_f - \frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m}\right)\tau}}_{\int_0^{+\infty} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(E_f - \frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m}\right)\tau\right\} d\tau}}$$

TD27

m Régulariser l'intégrale : $\underbrace{\int_0^{+\infty} d\tau\, e^{i\omega\tau}}_{\mathcal{I}(\omega)}$, où "$\omega$" est un nombre réel.

$$\boxed{\mathcal{I}(\omega) = \lim_{\varepsilon\to 0^+} \int_0^{+\infty} d\tau\, e^{i(\omega+i\varepsilon)\tau} = \lim \left[\frac{e^{i(\omega+i\varepsilon)\tau}}{i(\omega+i\varepsilon)}\right]_0^{\infty} = \lim \left(\frac{e^{i\omega\infty}\, e^{-\varepsilon\infty} - 1}{i\omega - \varepsilon}\right) = \frac{-1}{i\omega - 0} = \frac{i}{\omega}}$$

"non défini" (borné) $\to 0$

$\underbrace{\frac{i}{\omega+i\varepsilon}}$ $\frac{\times(-i)}{\times(-i)}$

"non justifiable par le théorème de convergence dominée"

o En déduire la transformée de Fourier de la question **m** (après changement de variable : $t_f \mapsto \tau = t_f - t_i$).

$$\boxed{s^{(0)} \underset{\boxed{m}}{=} \underbrace{\delta^{(3)}(\vec{p}_i - \vec{p}_f)\, \overbrace{\delta(E_f - E_i)}^{\text{"nouveau"}}}_{\text{(conservation : 4-moment relativiste)}}\, 2\pi\hbar\, \overbrace{\frac{i}{\underbrace{\frac{1}{\hbar}\left(E_f - \frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m}\right)}_{\omega \text{ réel}}(+i\varepsilon)}}^{\mathcal{I}(\omega)}} = \delta^{(3)}(\vec{p}_i - \vec{p}_f)\,\delta(E_f - E_i)\, \frac{2\pi\hbar^2 i}{E_f - \frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m}(+i\hbar\varepsilon)}$$

"propagateur"

(prop. relativiste : $i/\underbrace{(p^\mu p_\mu}_{E^2/c^2 - \vec{p}^{\,2}} - m^2c^2)$)

commentaire n°1 : $[\varepsilon] = [\omega] = \left[\frac{E}{\hbar}\right] = \left[\frac{E}{ET}\right] = T^{-1} \Rightarrow [\underbrace{\varepsilon\hbar}_{\Gamma}] = [E]$: "largeur" en Théorie Quantique des Champs $\Gamma = \hbar/T$, où $T \equiv$ temps de vie de la particule (correction pour $\Gamma \ll \delta E$)

commentaire n°2 : ⊙ formalisme du propagateur $\Rightarrow$ E_f variable de Fourier (**m**)

$\vec{p}_f$ | valeur classique dans $S^{(0)}$ (TD23)
φ | "onde plane" $\downarrow$ $s^{(0)}$ (TD26)

DONC

"fluctuation quantique" $E_f \neq \frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m}|_\varphi$

valeur propre d'état normé $\sum_p g_p |p\rangle$

$\langle \hat{H} \rangle = E_f|_\varphi = \frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m}|_\varphi$ pour état propre libre

$\hat{H}_0 |\vec{p}_f\rangle = \frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m}|_\varphi |\vec{p}_f\rangle$ (TD18)