

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**UNIVERSITE MENTOURI, CONSTANTINE  
FACULTE DES SCIENCES EXACTES  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE**

**N° d'ordre :  
N° de Série :**

**THESE :  
PRESENTEE POUR L'OBTENTION DU DIPLÔME  
DE  
DOCTORAT EN SCIENCES PHYSIQUES  
SPECIALITE : PHYSIQUE THEORIQUE**

**PAR**

**Abdennacer TILBI**

**THEME**

**Intégrale de Chemin Semi-Classique et Théorie de  
de Broglie-Bohm**

**Soutenu le : 01/07/2007**

**Devant le jury :**

<b>Président</b>	<b>N. Boukheit</b>	<b>M.C.</b>	<b>Université Mentouri, Constantine</b>
<b>Rapporteur</b>	<b>L. Chetouani</b>	<b>Prof.</b>	<b>Université Mentouri, Constantine</b>
<b>Examineurs</b>	<b>N. Mebarki</b>	<b>Prof.</b>	<b>Université Mentouri, Constantine</b>
	<b>A. Bouda</b>	<b>Prof.</b>	<b>Université de Bejaia</b>
	<b>T. Boudjedaa</b>	<b>Prof.</b>	<b>Université de Jijel</b>
	<b>K. Khounfais</b>	<b>M.C.</b>	<b>Université de Skikda</b>

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Théorie de de Broglie-Bohm</b>	<b>6</b>
2.1	Introduction : . . . . .	6
2.2	Méthode de Hamilton-Jacobi en mécanique classique : . . . . .	7
2.2.1	Mécanique statistique classique . . . . .	12
2.2.2	L'équation d'onde en mécanique classique . . . . .	14
2.2.3	Potentiel interne . . . . .	17
2.3	Eléments de la théorie quantique de mouvement . . . . .	20
2.3.1	Les postulats de base . . . . .	20
2.3.2	Équations de mouvement d'onde et de particule . . . . .	21
2.3.3	Introduction de la particule . . . . .	23
<b>3</b>	<b>Transformation Spatio-Temporelle dans la théorie de de Broglie-Bohm</b>	<b>26</b>
3.1	Introduction . . . . .	26
3.2	Théorie de de Broglie-Bohm avec masse dépendante du temps . . . . .	31
3.3	Propagateur via la théorie de de Broglie Bohm . . . . .	32
3.3.1	Approximation semi-classique : . . . . .	32
3.3.2	Construction du propagateur . . . . .	36
3.4	Applications . . . . .	40
3.4.1	Particule libre . . . . .	40

3.4.2	Potentiel linéaire . . . . .	42
3.4.3	Oscillateur harmonique . . . . .	44
3.4.4	Oscillateur harmonique forcé . . . . .	46
3.4.5	Modèle de Kanai-Caldirola . . . . .	49
3.4.6	Modèle de Kanai-Caldirola forcé . . . . .	52
3.5	Transformation Spatio-Temporelle dans la théorie de de Broglie-Bohm . .	56
3.6	Conclusions . . . . .	61
<b>4</b>	<b>L'effet Tunnel</b>	<b>66</b>
4.1	Approximation WKB . . . . .	66
4.2	Applications . . . . .	72
4.2.1	Transmission à travers une barrière . . . . .	72
4.2.2	Dédoublement du niveau d'énergie . . . . .	75
4.3	Propagateur suivant l'approximation WKB . . . . .	79
4.4	Propagateur via la méthode algorithmique . . . . .	83
<b>5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>95</b>
<b>6</b>	<b>Bibliographie</b>	<b>96</b>

# Chapitre 1

## Introduction

La mécanique quantique standard telle qu'elle a été formulée par l'école de Copenhague reste à notre opinion l'une des théories scientifiques la plus crédible de l'histoire des sciences. Amplement testée, ses prédictions sont d'un parfait accord avec les résultats de l'expérience. Basée sur l'hypothèse que l'état du système est complètement déterminé par la donnée de la fonction d'onde permettant les prévisions des résultats de mesure et étant interprétée d'une manière statistique, elle est sévèrement critiquée par des imminents physiciens contemporains tels Einstein, Schrödinger, de Broglie et Bohm. Sans entrer dans les détails ni départager les opinions, à notre avis leurs critiques essayent de rétablir le concept inhérent à la physique classique, macroscopique et déterministe, qui est celui de la trajectoire, l'ultime trace d'une forte réalité objective et extérieure. Leurs objections exposées dans une forme d'expériences idéalisées essayent de piéger la structure axiomatique de la mécanique quantique en tentant de montrer son incomplétude. La seule conclusion qu'on peut extraire de ses tentatives est que le monde de la physique quantique est non local. La théorie de de Broglie-Bohm est un exemple parfait illustrant cette conclusion. Sa principale signification émane de la caractéristique et l'originalité de la mécanique quantique suivante : bien que généralisant la mécanique classique, sa formulation est fondamentalement impossible sans l'intervention des concepts classiques. Le passage entre les deux est analogue à celui qui se fait entre l'optique ondu-

latoire et l'optique géométrique illustrant la parfaite dualité onde-particule. La théorie de de Broglie-Bohm a la prétention de vouloir expliciter cette étrange double réalité onde-particule. Nous pouvons la définir brièvement comme une théorie causale qui essaye de donner un sens physique à la notion de trajectoire mais au même temps d'expliquer la nature des phénomènes quantiques tel l'effet tunnel. En conséquence, la dynamique de la particule est décrite par une trajectoire déterministe soumise en plus à un potentiel quantique à l'origine de cette non localité du phénomène quantique. Ce point de vue nous permet de considérer contrairement à l'usuelle interprétation de la mécanique quantique, tout système physique dans un état bien défini est régi par des lois classiques généralisées. En parallèle il ya aussi un formalisme de la mécanique quantique qui utilise la description classique combinée avec l'étrange principe de superposition, c'est le formalisme intégrale de chemins de Feynman. Evidemment, la théorie de de Broglie-Bohm a déjà prouvé sa fiabilité dans la plupart des domaines de la physique comme les interférences quantiques, l'effet Aharonov-Bohm et le processus de mesure en mécanique quantique, mais comparativement au formalisme de Feynman les solutions des équations de de Broglie-Bohm ne sont données que dans des cas limités, parmi citons la diffusion dépendante du temps à travers une barrière carré et le puit carré dans une forme numérique, et l'analyse de l'oscillateur harmonique amorti. Pendant ces dernières années ce domaine de recherche connaît une intense activité. Le but de cette thèse est de montrer l'efficacité du concept de chemin dans le traitement des problèmes quantiques :

- en adaptant la technique des transformations spatio-temporelles au chemin de la théorie de de Broglie-Bohm pour calculer des propagateurs quantiques.

- en usant des propriétés du chemin de Feynman pour simplifier l'intégrale de chemin de Feynman à un algorithme informatique.

Cette thèse regroupe trois éléments essentiels : théorie de de Broglie-Bohm, effet tunnel et l'intégrale de chemin de Feynman. Le deuxième chapitre est consacré à un brief exposé des idées de la théorie de de Broglie-Bohm partant du formalisme classique de Hamilton-Jacobi. Le troisième chapitre présente la technique des transformations spatio-

temporelle couramment utilisée en intégrale de chemin. Le propagateur est reconstruit dans le cadre de la théorie dans un schéma semi-classique et les exemples quadratiques sont traités. Par ailleurs, le cas de la masse dépendante du temps est reconsidéré et il est converti moyennant cette technique au cas de la masse constante. Le modèle de Kanai-Caldirola est traité en l'occurrence. L'effet tunnel est traité dans le quatrième chapitre via l'approximation semi-classique (WKB). Le chemin classique est utilisé comme moyen d'investigation de cet étrange effet quantique. Quelques exemples illustratifs sont exposés. Enfin le propagateur est reconsidéré dans ce cadre d'approximation et un algorithme approprié est établi. Cette démarche fait intervenir un coefficient combinatoire formellement non calculable et a nécessité l'utilisation d'un langage information évolué et par conséquent l'élaboration d'un programme. Une conclusion générale est donnée au dernier chapitre.

# Chapitre 2

## Théorie de de Broglie-Bohm

### 2.1 Introduction :

Il est difficile de juger de la compatibilité de deux théories sans pouvoir les réunir et les affronter dans un même terrain de concepts expérimentaux ou formels. Le formalisme mathématique est pour beaucoup dans notre approche des lois de la nature. Un tel langage existe en général sous deux aspects, le formel et l'informel. Le formel est une suite de propositions mathématiques établies suivant un schéma logique conduisant à un rapport vérifiable expérimentalement entre les éléments de la théorie. L'informel est une approximation grossière du formel mais guidée par le sens commun appréhendant la nature, ce schéma est dit "réalité". Ces deux aspects sont étroitement reliés par la nature de la finitude du quantum de Planck. Historiquement, c'est l'informel qui a été développé comme langage mathématique des théories physiques telles la mécanique de Newton, l'électromagnétisme de Maxwell et la relativité d'Einstein. Ce schéma informel a fait ses preuves dans presque la totalité des phénomènes macroscopiques, cependant il est resté impuissant à donner une explication aux phénomènes microscopiques. Dans ce cas, le grand mérite revient à la méthode formelle appelée par les physiciens modernes "la mécanique quantique".

Cette mécanique quantique, d'une part possède un langage formel sophistiqué et forte-

ment développé des opérateurs linéaires dans l'espace de Hilbert mais, dans l'interprétation orthodoxe de l'école de Copenhague, elle complète ce schéma formel par l'inéluctable relation intime existante entre les deux aspects à l'origine de la finitude du quantum de Planck, c'est le principe de complémentarité.

La théorie de de Broglie-Bohm [1, 2], émane des représentations informelles mais tente d'appréhender les phénomènes quantiques en enrichissant cet informel par la complexité de la non-localité un équivalent irréfutable à la superposition quantique, propriété importante de l'espace de Hilbert et par conséquent de la nature quantique.

Dans ce qui suit, nous allons partir de la mécanique classique et essayer de présenter cette théorie de de Broglie-Bohm comme son prolongement naturel mais aussi complexe.

## 2.2 Méthode de Hamilton-Jacobi en mécanique classique :

On commence par revoir quelques résultats de base de la mécanique classique, en particulier comment une certaine fonction, solution de l'équation différentielle de Hamilton-Jacobi, facilite la solution des équations du mouvement. Cette méthode est due à Jacobi.

De nombreux systèmes physiques peuvent être décrit à un instant donné par un ensemble de  $N$  paramètres indépendants  $q_i (i = 1, 2, \dots, N)$ , appelés *coordonnées généralisées*, les dérivées par rapport au temps  $\dot{q}_i(t)$  sont dites *vitesses généralisées*. L'état du système à un instant donné  $t_0$  est donc défini par l'ensemble des  $q_i(t)$  et  $\dot{q}_i(t)$ , et si les forces agissant sur le système dérivent d'une énergie potentielle  $V(q_1, q_2, \dots, q_N)$ , le lagrangien du système  $L(q_1, \dots, q_N; \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N, t)$  est la différence entre l'énergie cinétique totale  $T$  et l'énergie potentielle  $V$  :

$$L(q, \dot{q}, t) = T - V \quad , \quad (2.1)$$

on définit le moment conjugué de la coordonnée généralisée  $q_i$  par :

$$p_i = \partial L / \partial \dot{q}_i, \quad (2.2)$$

$p_i$  est aussi appelé *répulsion généralisée*. Les quantités  $(q_i, p_i)$  sont les variables canoniques. Le passage des variables  $(q_i, \dot{q}_i, t)$  aux variables  $(q_i, p_i, t)$  se fait à l'aide de la transformation de Lagrange qui introduit l'hamiltonien du système :

$$H(q, p, t) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q}, t). \quad (2.3)$$

Les équations du mouvement sont déterminées de la manière suivante, considérant deux points de l'espace des états  $(q_0, t_0)$  et  $(q, t)$ , parmi les chemins d'espace-temps joignant les deux points, le chemin qui est effectivement suivi par le système est celui qui rend minimale la fonction intégrale suivante :

$$I(q, t; q_0, t_0) = \int_{q_0, t_0}^{q, t} L(q, \dot{q}, t) dt. \quad (2.4)$$

C'est le principe de Hamilton, qu'on peut le traduire par :

$$\delta I = 0, \quad (2.5)$$

ce qui donne les  $N$  équations d'Euler-Lagrange de second ordre :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.6)$$

En utilisant (2.3), on obtient une nouvelle expression pour  $I$  :

$$I(q, t; q_0, t_0) = \int \sum_i p_i dq_i - H dt, \quad (2.7)$$

ce qui donne, le système de Hamilton de  $2N$  équations différentielles de premier ordre à  $2N$  fonctions inconnues, les  $q_i(t)$  et  $p_i(t)$  :

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \Big|_{q_i=q_i(t), p_i=p_i(t)} \quad , \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \Big|_{q_i=q_i(t), p_i=p_i(t)} \quad . \quad (2.8)$$

Dans la théorie de formulation hamiltonienne, nous pouvons remplacer les variables indépendantes par un nouveau ensemble de  $2N$  variables indépendantes  $Q_i, P_i$  :

$$Q = (q, p, t) \quad , \quad P = P(q, p, t) \quad . \quad (2.9)$$

Dans le développement de la mécanique hamiltonienne, seuls les transformations pour lesquelles les nouvelles coordonnées  $Q, P$  sont des coordonnées canoniques, peuvent présenter de l'intérêt. Cette condition sera remplie pourvu que les équations de Hamilton (2.8) maintiennent leur forme sous la transformation. Si  $K = K(Q, P, t)$  est le nouveau hamiltonien, alors on doit avoir :

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \Big|_{Q=Q(t), P=P(t)} \quad , \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} \Big|_{Q=Q(t), P=P(t)} \quad , \quad (2.10)$$

ces coordonnées canoniques, doivent satisfaire le principe de Hamilton appliqué à la fonction d'action (2.7) :

$$I = \int \sum_i P_i dQ_i - K dt, \quad (2.11)$$

les intégrands des deux intégrales (2.7 et 2.11) ne diffèrent dans ce cas, que par une dérivée totale par rapport au temps d'une fonction arbitraire  $F$  :

$$\sum_i P_i \dot{Q}_i - K = \sum_i p_i \dot{q}_i - H - \frac{dF}{dt}. \quad (2.12)$$

La fonction arbitraire  $F$  s'appelle *fonction génératrice* de la transformation canonique (2.9). Dans le cas où  $F = (q, Q, t)$  alors à partir de (2.12), on déduit :

$$p_i = \frac{\partial F}{\partial q_i} \quad (2.13)$$

$$P_i = -\frac{\partial F}{\partial Q_i} \quad (2.14)$$

$$K = H + \frac{\partial F}{\partial t}. \quad (2.15)$$

Si  $F = (q, Q, t)$  est donnée, on peut reconstruire la transformation canonique (2.9), en effet (2.13) donnera  $Q$  en fonction de  $q$ ,  $p$  et  $t$ , par contre (2.14) donnera  $P$ , enfin (2.15) fournira le nouveau hamiltonien  $K$ , d'où l'appellation fonction génératrice. Il existe une technique différente qui revient à rechercher une transformation canonique faisant passer des coordonnées et moments  $(q, p)$  au temps  $t$ , à un nouveau système de quantités constantes qui peuvent être les  $2N$  valeurs initiales  $(q_0, p_0)$  à  $t = 0$  [3] :

$$q = q(q_0, p_0, t) \quad (2.16)$$

$$p = p(q_0, p_0, t). \quad (2.17)$$

Donc si nous imposons à l'hamiltonien transformé  $K$  d'être nul, alors les nouvelles variables sont constantes dans le temps :

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} = 0 \quad (2.18)$$

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} = 0, \quad (2.19)$$

or  $K$  est relié à l'ancien hamiltonien et la fonction génératrice par la relation (2.15) :

$$K = H + \frac{\partial F}{\partial t},$$

par suite  $K$  sera nul si  $F$  satisfait à l'équation :

$$H(p, q, t) + \frac{\partial F}{\partial t} = 0, \quad (2.20)$$

il est d'usage de désigner la solution de l'équation (2.20) par  $S$  appelée *fonction principale de Hamilton*. Si on suppose que  $F$  est une fonction de  $q$ ,  $Q$  et  $t$ , et en remplaçant  $p$  dans  $H$  par (2.13), on obtient l'équation d'Hamilton-Jacobi :

$$\frac{\partial S(q, Q, t)}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) = 0. \quad (2.21)$$

L'examen de la dérivée totale par rapport au temps de  $S(q, t)$  nous permet de mieux comprendre sa signification physique ; elle est donnée par :

$$\frac{dS}{dt} = \sum_i \frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial S}{\partial t}, \quad (2.22)$$

d'après les équations (2.13 et 2.21), on peut écrire (2.22) sous la forme suivante :

$$\frac{dS}{dt} = \sum_i p_i \dot{q}_i - H = L, \quad (2.23)$$

de sorte que la fonction principale de Hamilton ne diffère au plus de l'intégrale indéfinie prise sur le temps du lagrangien que par une constante :

$$S = \int L dt + const. \quad (2.24)$$

Or, le principe de Hamilton est un énoncé portant sur l'intégrale définie de  $L$ , et on a vu que la solution du problème est obtenue à partir des équations de Lagrange. Ici la même intégrale, sous une forme indéfinie, fournit un autre moyen pour la solution du problème.

Comme exemple, on prend le cas d'une seule particule de masse  $m$  dans un champ scalaire externe  $V$  et décrit par un système de coordonnées cartésiennes, le lagrangien est donné par :

$$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 - V(\mathbf{x}, t), \quad (2.25)$$

d'où on tire le moment conjugué  $\mathbf{p}$ , d'après (2.2) :

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} = m\dot{\mathbf{x}} \quad (2.26)$$

et l'hamiltonien est (2.3) :

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}, t) \quad (2.27)$$

l'équation (2.27) représente l'énergie totale de la particule. Les équations d'Euler-Lagrange (2.6) donnent l'équation du mouvement sous la forme Newtonienne :

$$m\ddot{\mathbf{x}} = -\nabla V |_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)}. \quad (2.28)$$

et à partir de (2.27) on obtient l'équation de Hamilton-Jacobi :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (\mathbf{p} = \nabla S) \quad (2.29)$$

### 2.2.1 Mécanique statistique classique

La mécanique statistique classique est une théorie dans laquelle le mouvement est déterministe mais imprévisible. Nous avons vu que la théorie de Hamilton-Jacobi est naturellement reliée à une description d'ensemble. La solution de l'équation de Hamilton-Jacobi détermine le champ de vitesse par la relation (pour une seule particule) :

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \nabla S(\mathbf{x}, t)/m. \quad (2.30)$$

Intégrant l'équation  $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}}$  nous obtenons un ensemble infini de mouvements possibles, correspondant à la même fonction  $S$ , marquée par la position initiale :  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)$ .

La mécanique statistique classique affecte une fonction de distribution de probabilité

à l'espace de phase d'un système mécanique. Ici nous supposons que les moments initiaux d'un ensemble de particules sont fixés une fois pour toutes par un choix défini de fonction de Hamilton-Jacobi et nous sommes seulement libres pour choisir les coordonnées initiales de position. Nous supposons que la variable  $\mathbf{x}_0$  est distribuée selon une certaine loi de probabilité et on étudiera l'évolution en temps de cette distribution.

On suppose que la densité des particules par unité de volume dans un élément  $d^3x$  autour du point  $x$  est donnée par la fonction  $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$  ( $\geq 0$ ). On veut trouver une équation qui sera satisfaite par cette fonction qui traduit la conservation locale des particules dans l'élément  $d^3x$ . Soit le volume  $\Omega$  fixé dans l'espace, inclus par une surface  $A$ , le nombre total des particules au temps  $t$  dans ce volume est  $\int_{\Omega} \rho d^3x$ . Le nombre de particules traversant l'élément de surface  $d\mathbf{A}$  par unité de temps est  $\rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{A}$ , donc le nombre totale qui s'écoule du volume  $\Omega$  par unité de temps est  $\int_A \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{A}$ . Comme il n'y a aucune création ou destruction des particules, ce nombre doit être égale à la diminution par unité de temps des particules contenus dans  $\Omega$  :

$$-\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho d^3x = \int_A \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{A} \quad , \quad (2.31)$$

le théorème de Green-Ostrogradsky permettant d'écrire :

$$\int_A \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{A} = \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) d^3x \quad , \quad (2.32)$$

il vient :

$$\int_{\Omega} \left[ \partial \rho / \partial t + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right] d^3x = 0 \quad , \quad (2.33)$$

comme cette condition est valable quelque soit  $\Omega$ , on a alors :

$$\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (2.34)$$

C'est l'équation locale exigée par la conservation [4]. Elle détermine l'évolution de  $\rho$  en

fonction du temps  $t$ , correspondante à un champ de vitesse, une fois que nous avons indiqué la fonction initiale  $\rho_0(\mathbf{x})$ . La fonction  $\rho$  doit être vue comme une densité de probabilité, la probabilité de particule de se trouver entre les points  $\mathbf{x}$  et  $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$  au temps  $t$  est donnée par  $\rho d^3x$ , puisque la particule doit être quelque part dans l'espace, ce qui exige qu'on doit avoir :

$$\int_{\text{tout l'espace}} \rho d^3x = 1. \quad (2.35)$$

La densité  $\rho$  reflète simplement l'ampleur de notre connaissance sur le système et n'entre pas dans la détermination du mouvement. Le comportement de  $\rho(\mathbf{x}, t)$  est déterminé par le champ de vitesse  $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$  et par conséquent par  $S$  [4].

### 2.2.2 L'équation d'onde en mécanique classique

Les équations de la mécanique statistique d'une particule simple dans un potentiel scalaire externe, exprimés en formalisme de Hamilton-Jacobi, sont :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + (\nabla S)^2 / 2m + V(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.36)$$

$$\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot (\rho \nabla S / m) = 0. \quad (2.37)$$

Pour obtenir une solution nous devons indiquer  $S(\mathbf{x}, 0) = S_0(\mathbf{x})$  et  $\rho(\mathbf{x}, 0) = \rho_0(\mathbf{x})$ . Le choix de  $S_0(\mathbf{x})$  fixe le champ initial des moments et la trajectoire est déterminée en résolvant la loi de mouvement :

$$\dot{\mathbf{x}} = (1/m) \nabla S |_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)}, \quad (2.38)$$

avec la position initiale  $\mathbf{x}_0$ . La dynamique est indépendante du choix de la distribution initiale  $\rho_0$ , mais le développement de cette dernière est conditionné par  $S_0$ . Dans cette formulation, la mécanique statistique classique devient une théorie de champ dans

l'espace-temps, (2.36) et (2.37) étant des équations du champ déterminant l'évolution des champs partiellement couplés  $S(\mathbf{x}, t)$  et  $\rho(\mathbf{x}, t)$ .

En termes d'analogie avec l'hydrodynamique,  $S/m$  joue le rôle du potentiel de vitesse, et  $\rho$  la densité, d'un fluide compressible et irrotationnel. Les lois fondamentales de l'hydrodynamique sont l'équation de continuité (2.37) (évolution de  $\rho$ ) et de l'équation d'Euler (2.36) (évolution de  $\mathbf{v}$ ). Ce sont des équations aux dérivées partielles couplées.

Nous pouvons dériver les équations des champs (2.36) et (2.37) par des techniques standard du principe variationnel dans lequel les champs  $S(\mathbf{x}, t)$  et  $-\rho(\mathbf{x}, t)$  sont traités comme des variables canoniques conjuguées avec une densité lagrangienne égale à [4] :

$$L = -\rho \left[ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V \right]. \quad (2.39)$$

Il serait intéressant de continuer dans cette approche en écrivant la mécanique classique dans le langage de la mécanique quantique, par l'introduction de *la fonction d'onde classique* :

$$\Psi = R \exp \left( \frac{i}{\hbar} S \right), \quad (2.40)$$

où  $R = \sqrt{\rho}$  et  $\hbar$  une constante qui a la dimension de l'action. La fonction  $\Psi$  et son complexe conjugué  $\Psi^*$  forment le nouveau ensemble de variables canoniques; l'équation (2.40) et son complexe conjugué définissent des transformations canoniques des anciennes coordonnées canoniques  $(S, -\rho)$  au nouveau ensemble proportionnel à  $(\Psi, \Psi^*)$ .

En termes de ces variables de champ, la densité lagrangienne (2.39) devienne :

$$L = (i\hbar/2) [\Psi^* \partial \Psi / \partial t - \Psi \partial \Psi^* / \partial t] + (\hbar^2 |\Psi|^2 / 8m) [\Psi^{-1} \nabla \Psi - \Psi^{*-1} \nabla \Psi^*]^2 - V |\Psi|^2. \quad (2.41)$$

En faisant la variation suivant  $\Psi$  et  $\Psi^*$ , nous déduisons *l'équation d'onde de la mécanique classique* [5] :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 |\Psi|}{|\Psi|} \Psi, \quad (2.42)$$

et son conjugué complexe, avec  $|\Psi| = R$ . Substituant (2.40) dans (2.42) et séparant les parties réelles et imaginaires, nous retrouvons les équations (2.36) et (2.37).

L'équation (2.42) est semblable à l'équation de Schrödinger, et diffère d'elle seulement par le dernier terme du côté droit. Une caractéristique évidente et importante de (2.42) est son non-linéarité, c'est à dire, si on a deux solutions  $\Psi_1$  et  $\Psi_2$  données au même point de l'espace temps, nous ne pouvons pas généralement construire une troisième solution  $\Psi_3$  par une combinaison linéaire d'eux. En fait, c'est le dernier terme du côté droit qui est responsable de cette non-linéarité, il est proportionnelle au potentiel quantique.

On introduit une fonction de champ,  $\Psi(\mathbf{x}, t)$ , qui satisfait l'équation d'onde (2.42). La phase de la fonction d'onde,  $S(\mathbf{x}, t)$ , est la fonction classique de Hamilton-Jacobi et les normals à la surface  $S = \text{constant}$  sont les chemins physiques. Le carré de l'amplitude de la fonction d'onde,  $R^2(\mathbf{x}, t)$ , donne la densité de probabilité d'un ensemble de trajectoires liés à la même fonction  $S$ . En particulier, le courant classique de probabilité, défini comme  $\mathbf{j} = \rho \nabla S / m$ , est identique à sa forme quantique :

$$\mathbf{j} = (\hbar/2mi) \Psi^* \overleftrightarrow{\nabla} \Psi. \quad (2.43)$$

Le formalisme canonique basé sur la densité lagrangienne (2.41) peut être développé afin de définir un tenseur des densités de champ, d'énergie et des moments. Tout ceci peut être aisément généralisé au cas de plusieurs corps où on introduit la fonction  $\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t)$ .

Dans cet approche  $\Psi$  a une signification purement descriptive ou mathématique. Il y a une dualité onde-particule dans la mécanique classique, mais l'onde est purement passive. Nous pouvons penser à  $\Psi$  comme réellement distribué dans l'espace, mais ce n'est pas un agent causal de changement, et ne contribue pas à l'état physique d'un système, qui est complètement défini par sa position et son moment à chacun instant.

### 2.2.3 Potentiel interne

Nous souhaitons proposer que la théorie de Hamilton-Jacobi des ondes et des trajectoires offre une approche plus profonde à la théorie de mouvement que les formulations lagrangienne et hamiltonienne dont elle peut être dérivée. Elle a suggéré que nous inversions le procédé habituel par lequel la dynamique de particules est définie : au lieu de présenter la trajectoire par le lagrangien ou hamiltonien et puis de prouver que la formule :

$$p(x, \dot{x}, t) = \partial S / \partial \dot{x} \Big|_{x=x(t)}, \quad (2.44)$$

est conforme à ceci, nous commençons par l'équation de Hamilton-Jacobi et définissons la trajectoire pour être les solutions  $x(t)$  de (2.44). Une telle approche fournit alors le point de départ pour la généralisation normale de la mécanique classique où on considère les systèmes de Hamilton-Jacobi qui ne peuvent pas, en général, être transformés en problème lagrangien ou hamiltonien équivalent. Le dernier sera défini dans un sens formel, et est en effet nécessaire afin d'assurer l'uniformité (par exemple, afin de donner  $p$  en termes de  $x$ ,  $\dot{x}$  et  $t$  de sorte que (2.44) puisse être résolue), mais elles ne sont pas complètement définies jusqu'à ce que l'équation de Hamilton-Jacobi ait été résolue. Nous dénoterons cette conception plus générale "théorie généralisée de Hamilton-Jacobi" afin de la distinguer du cas classique où ce mécanisme n'existe pas, ça revient à supposer que, en plus du potentiel externe habituel  $V$ , un nouveau type d'énergie  $V'$  intervient dans l'équation de Hamilton-Jacobi qui dépend explicitement de  $S$  et de divers ordres des dérivés de  $S$  :

$$\partial S / \partial t + (\nabla S)^2 / 2m + V + V'(S, \partial_i S, \partial_{ij} S, \partial_{ijk} S, \dots) = 0 \quad , \quad (2.45)$$

où  $\partial_{ij} S = \partial^2 S / \partial x_i \partial x_j$ ,  $i, j = 1, 2, 3$ , etc. Des conditions sont imposées à  $V'$  de sorte qu'il satisfasse les propriétés habituelles de symétrie, par exemple, qu'il se transforme comme grandeur scalaire sous des transformations galiléennes de coordonnées, et nous devons indiquer la fonction initiale  $S_0(\mathbf{x})$ . Si nous continuons à définir les trajectoires comme

solutions de l'équation :

$$\dot{\mathbf{x}} = (1/m) \nabla S |_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)}, \quad (2.46)$$

alors, il se peut la présence de  $V'$  provoquera des déviations dans le mouvement trouvé dans le cas classique analogue (où  $V' = 0$ ), puisque  $S$  satisfait maintenant une équation différente et d'ailleurs entre explicitement dans l'équation du mouvement comme genre de force. Pour voir ceci, nous prenons le gradient de (2.45), avec  $\dot{\mathbf{x}} = (1/m) \nabla S$ , on obtient :

$$m\ddot{\mathbf{x}} = -\nabla (V + V') |_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)}. \quad (2.47)$$

En ce qui concerne le mouvement des particules,  $V'$  est considéré comme une énergie potentielle à l'instar de  $V$ , c'est à dire, semblable dans son action à un potentiel "externe" qui provoque une force  $-\nabla V'$  à l'endroit de la particule. Noter qu'une particule qui est classiquement libre ( $V = 0$ ) ne le sera pas ici, puisque elle est sujet à  $V'$ . La limite classique est obtenue quand  $V' \rightarrow 0$ .

$V'$  n'est pas un potentiel externe du type habituel, qui est une fonction affectée des coordonnées et indépendant de la dynamique qu'il détermine, il dépend de la fonction  $S$  par convention liée au mouvement de la particule à travers le moment ( $\nabla S$ ) et l'énergie cinétique ( $1/2m (\nabla S)^2$ ). C'est donc plus convenable d'appeler  $V'$  potentiel interne afin de le distinguer des potentiels plus communs de la dynamique classique, il est plus conforme cependant de maintenir le mot potentiel puisque, comme nous avons vu,  $V'$  entre formellement dans l'équation du mouvement (2.47) comme  $V$ .

Afin de nous donner à une interprétation physique cohérente de  $V'$ , on généralise notre concept de ce qui constitue la matière, nous supposons qu'elle est associée à une particule poursuivant une trajectoire bien définie dans une certaine région de l'espace, un nouveau type de champ physique, mathématiquement décrit par des fonctions de  $S(\mathbf{x}, t)$ . Mais ce champ n'est pas externe à la particule dans le sens qu'il peut ou ne peut pas être présent. Il

est objectivement vrai et accompagne toujours la particule dans son mouvement, en effet il l'a guide selon les lois du mouvement (2.46) ou (2.47). Quand nous parlons d'un système matériel, nous voulons dire donc une entité composée comportant simultanément une vraie onde et des aspects corpusculaires. La valeur du champ à un point de l'espace-temps contribue autant à la définition de l'état d'un système qu'à la position de la particule. En fait, étant donné que le champ  $S$  doit maintenant être considéré comme composant d'un système physique, il est arbitraire d'associer  $(1/2m(\nabla S)^2)$  juste à l'énergie cinétique du corpuscule et  $V'$  à l'énergie potentielle. Du point de vue du système dans l'ensemble (onde plus particule) cette division est arbitraire et il vaut mieux traiter  $V'$  comme nouvelle forme d'énergie qui n'est pas réductible aux énergies cinétiques ou potentielles du type courant. Néanmoins, il est utile de distinguer formellement l'énergie cinétique et potentielle comme des limites dans (2.45) en liaison avec le mouvement de particules. Noter qu'en cela, le plus simple est la généralisation possible de la théorie classique de Hamilton-Jacobi où la particule joue un rôle passif. La fonction  $S$  a été élevée d'un rôle passif à un rôle actif et agit maintenant physiquement en affectant le mouvement des particules, mais la particule n'influence pas alternativement l'onde [4].

Terminons cette section par les remarques suivantes :

- on devrait souligner que la présentation classique et quantique de la mécanique en termes de même structure théorique n'est pas une tentative à réduire la dernière dans l'ancienne version.

- la notion d'une trajectoire bien définie de particules n'est pas un concept particulier au model classique.

- la mécanique quantique peut être cernée dans le cadre d'une théorie généralisée de Hamilton-Jacobi, mais elle ne peut pas être certainement incluse dans un cadre classique dans lequel la fonction  $S$  est physiquement "affaiblie".

Les exigences de cette nouvelle conception conduisent à une "nouvelle théorie de mouvement", c'est la conception de Broglie-Bohm que nous allons présenter maintenant. Ceci mène à une synthèse des caractéristiques d'onde et de particule de la matière.

Ces propriétés ne sont pas mutuellement exclusives, mais simultanément existantes. La généralisation envisagée ici n'a pas un caractère statistique. C'est une théorie causale déterministe d'individus. Le potentiel interne est une forme d'organisation d'énergie qui provoque une tension intérieure dans le système matériel auquel les points de masse répondent [4].

## 2.3 Eléments de la théorie quantique de mouvement

### 2.3.1 Les postulats de base

L'élément additionnel que nous présentons indépendamment de la fonction d'onde est la particule, conçue dans le sens classique en tant que poursuite d'une voie continue définie dans l'espace et le temps. Dans la section précédente, nous avons vu comment la théorie de Hamilton-Jacobi fournit une théorie générale des ondes et trajectoires et leurs corrélations qui dépasse son association historique particulière avec la mécanique classique. Notre but dans cette section est de développer ce point de vue et de montrer à quel point la mécanique quantique fondamentale est une théorie causale du mouvement des ondes et des particules. Il est commode d'exposer les postulats de base de l'approche de la théorie [1] :

- un système physique individuel comporte une onde se propageant dans l'espace et le temps ainsi qu'une particule de point qui se déplace sans interruption sous le pilotage de l'onde.

- l'onde est mathématiquement décrite par  $\Psi(\mathbf{x}, t)$ , une solution de l'équation d'onde de Schrödinger.

- le mouvement de la particule est obtenu comme solution  $\mathbf{x}(t)$  à l'équation :

$$\dot{\mathbf{x}} = (1/m) \nabla S |_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)}, \quad (2.48)$$

où  $S$  est la phase de  $\Psi$ . Pour résoudre cette équation nous devons indiquer l'état initial

$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0$ . Cette spécification constitue la seule information supplémentaire présentée par la théorie qui n'est pas contenue dans  $\Psi$ .

Ces trois postulats constituent une théorie cohérente de mouvement. A fin d'assurer la compatibilité des mouvements de l'ensemble de particules avec les résultats de la mécanique quantique, nous faisons un autre postulat :

- la probabilité qu'une particule de l'ensemble se trouve entre les points  $\mathbf{x}$  et  $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$  au temps  $t$  est donnée par :

$$R^2(\mathbf{x}, t) d^3x \quad , \quad (2.49)$$

où  $R^2 = |\Psi|^2$ .

Ce postulat a l'effet de choisir parmi tous les mouvements possibles implicites par la loi (2.48) ceux qui sont compatibles avec la première distribution  $R^2(\mathbf{x}, 0) = R_0^2(\mathbf{x})$ . Ce postulat est formulé en termes de probabilité qu'une particule soit réellement à un endroit au moment  $t$ . L'interprétation habituelle de  $|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2$  est qu'elle détermine la densité de probabilité de trouver une particule en volume  $d^3x$  au temps  $t$  si une mesure appropriée est effectuée.

### 2.3.2 Équations de mouvement d'onde et de particule

Afin de motiver l'introduction du concept de particule dans la mécanique quantique nous décomposerons l'équation de Schrödinger en deux équations réelles, d'une manière particulière, en exprimant la fonction d'onde en forme polaire :

$$\Psi = R \cos(S/\hbar) + iR \sin(S/\hbar) \quad (2.50)$$

$$\Psi = R \exp(iS/\hbar) \quad , \quad (2.51)$$

ici  $R = R(\mathbf{x}, t)$  est une réelle fonction d'amplitude, et  $S$  est une réelle fonction de phase, de l'espace et de temps, et  $\hbar = h/2\pi$ , est la constante de Planck.  $S$  a ainsi la dimension

de l'action et est mesuré dans les unités de  $\hbar$ . Ecrivons  $\Psi$  en termes de ses réelle et imaginaire parties :

$$\Psi = \Psi_1 + i\Psi_2. \quad (2.52)$$

On a :

$$R = (\Psi_1^2 + \Psi_2^2)^{\frac{1}{2}} \quad (2.53)$$

$$S/\hbar = \tan^{-1}(\Psi_2/\Psi_1) = (1/2i) \ln(\Psi/\Psi^*) \quad , \quad (2.54)$$

par définition, l'amplitude de la fonction est positive, donc :

$$R \geq 0 \quad \forall \mathbf{x}, t. \quad (2.55)$$

Dorénavant par l'expression d'onde  $\Psi$ , nous voudrions dire la paire réelle des champs  $\Psi_1$  et  $\Psi_2$  (qui sont couplés par l'équation d'onde). Le mot d'onde est justifiée parce que  $\Psi$  est une fonction continue qui obéit au principe linéaire de superposition. La fonction d'onde est une solution de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi, \quad (2.56)$$

insérant (2.51) dans (2.56) et séparant les parties réelles et imaginaires, nous obtenons les équations de champ suivantes pour les champs  $R$  et  $S$  :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} + V = 0 \quad (2.57)$$

$$\frac{\partial R^2}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \frac{R^2 \nabla S}{m} \right) = 0 \quad , \quad (2.58)$$

les équations (2.57) et (2.58) sont une paire d'équations aux dérivées partielles couplées dans lesquelles les champs  $R$  et  $S$  se déterminent mutuellement. Pour obtenir une solution unique à (2.56)  $\forall t$ , on doit indiquer la fonction d'onde initiale  $\Psi_0(\mathbf{x}) = \Psi(\mathbf{x}, 0) \forall \mathbf{x}$ . Ceci est équivalent à indiquer les fonctions initiales indépendantes :

$$R_0(\mathbf{x}) = R(\mathbf{x}, 0), \quad S_0(\mathbf{x}) = S(\mathbf{x}, 0). \quad (2.59)$$

### 2.3.3 Introduction de la particule

On a récrit l'équation de champ (2.56) pour l'amplitude complexe  $\Psi$  comme une paire de réelles équations (2.57) et (2.58). Dans cette partie, on essaye de présenter une certaine interprétation physique à l'équation de Schrödinger.

On propose, d'associer à l'onde physique  $\Psi$  propageant dans l'espace, une particule de masse  $m$  poursuivant une trajectoire  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t)$ . L'équation (2.57) a la forme de l'équation classique de Hamilton-Jacobi indépendamment d'un terme supplémentaire :

$$V_q(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R}. \quad (2.60)$$

La fonction  $V_q$  s'appelle " l'énergie potentielle quantique" ou simplement le potentiel quantique, avec cette notation l'équation (2.57) devient :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V + V_q = 0. \quad (2.61)$$

A partir du champ de vecteur  $\mathbf{p} = \nabla S$  on construit le champ de vecteur  $\mathbf{v} = (1/m)\mathbf{p}$ , ce dernier est tangent à une trajectoire possible de particules passant par ce point. Ceci fournit naturellement une description d'un ensemble de particules, qui est fictive dans le sens où seulement une voie est réalisée dans n'importe quel champ donné. Les trajectoires sont orthogonales à la surface  $S = constant$ , et peuvent être trouvées en intégrant les équations :

$$m\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{p}(\mathbf{x}, t) |_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)}, \quad (2.62)$$

où, en termes de champ de vitesse  $\mathbf{v}$ ,

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) |_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)} = (1/m) \nabla S |_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)}, \quad (2.63)$$

pour donner  $\mathbf{x}$ , on doit indiquer la position initiale  $\mathbf{x}_0$ . On peut alors interpréter (2.61) comme équation de l'énergie totale, cette dernière est définie par :

$$E[\mathbf{x}(t), t] = -\partial S(\mathbf{x}, t)/\partial t |_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)}, \quad (2.64)$$

et elle est donnée par la somme de l'énergie cinétique :

$$(\nabla S)^2 / 2m |_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)} = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 \quad (2.65)$$

et l'énergie potentielle totale (classique et quantique) :

$$[V(\mathbf{x}, t) + V_q(\mathbf{x}, t)] |_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)} = V(\mathbf{x}(t), t) + V_q(\mathbf{x}(t), t). \quad (2.66)$$

De cette façon nous présentons un espace de phase, avec les coordonnées  $(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ , dans la mécanique quantique. La trajectoire de système est définie par l'équation  $\mathbf{p} = \nabla S(\mathbf{x}, t)$ .

Pour prouver, qu'on peut considérer  $V_q$  comme un potentiel au même niveau que  $V$ , en ce qui concerne le mouvement de la particule, on applique l'opérateur  $\nabla$  à (2.61) et on trouve, après un certain réarrangement, l'équation de champ :

$$[\partial/\partial t + (1/m) \nabla S \cdot \nabla] \nabla S = -\nabla(V + V_q). \quad (2.67)$$

En identifiant  $\nabla S/m$  avec la vitesse de la particule comme dans (2.63), on trouve par évaluation de (2.67) le long de la trajectoire :

$$\frac{d}{dt} (m\dot{\mathbf{x}}) = -\nabla (V + V_q) |_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)}, \quad (2.68)$$

où

$$\frac{d}{dt} = \partial/\partial t + \dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla, \quad (2.69)$$

représente la dérivée totale par rapport au temps pour un point se déplaçant avec la particule. L'équation (2.68) a la forme de la deuxième loi de Newton, dans laquelle la particule est soumise à une force quantique  $-\nabla V_q$  en plus de la force classique  $-\nabla V$ . Le potentiel efficace agissant sur la particule est  $(V + V_q)$ , pas  $V$ .

Dans le chapitre suivant, nous allons utiliser cette approche comme moyen de calcul des propagateurs de la mécanique quantique. Nous adopterons la technique des transformations spatio-temporelles qui permettent de convertir les problèmes "difficiles" aux plus simples. Cette technique a été déjà amplement développée dans le formalisme des intégrales de chemins de Feynman.

# Chapitre 3

## Transformation Spatio-Temporelle dans la théorie de de Broglie-Bohm

### 3.1 Introduction

L'oscillateur harmonique et l'atome d'hydrogène sont deux problèmes bien connus dans la mécanique quantique. La formulation intégrale du chemin de Feynman est aisément applicable sans difficultés considérables au premier cas mais pose quelques difficultés pour le second. Duru et Kleinert ont appliqués pour la première fois la transformation de Kustaanheimo-Stiefel (KS) dans l'intégral de chemin pour le cas du potentiel de coulomb [6]. La transformation de KS, se compose d'une transformation de l'espace suivie d'une transformation de temps. Cette technique est employée dans l'intégral de chemin pour un certain nombre de potentiels sans compter le potentiel de coulomb.

Le changement des variables est une technique standard dans le calcul ordinaire mais crée des problèmes dans le calcul d'intégrale de chemin. Car l'intégrale de chemin assume une forme plus compliquée après un changement des coordonnées. Cependant, si en outre, nous faisons une transformation du temps, elle aide à simplifier l'intégrale de chemin. En d'autres termes, un changement des variables de l'intégration dans une intégrale de chemin consiste, généralement en un changement des coordonnées ainsi qu'une

transformation de temps et apporte ainsi le calcul d'intégral de chemin à un calcul ordinaire [7].

En dépit de l'attraction esthétique de la formulation intégrale de chemin de Feynman en mécanique quantique, l'évaluation du propagateur pour certains systèmes dépendants du temps peut devenir primordialement une tâche laborieuse. A fin de parer ainsi à ces difficultés apparentes, les techniques de transformation spatio-temporelle ont prouvé utile dans plusieurs exemples.

Présentons brièvement la technique employée par A B Nassar [8] pour obtenir facilement le propagateur de l'oscillateur harmonique avec une masse dépendante du temps à partir du propagateur libre. Commençons par écrire le lagrangien du système comme :

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2}m(t)\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m(t)\omega^2(t)x^2, \quad (3.1)$$

le propagateur pour les systèmes quadratiques peut être écrit sous la forme suivante [9] :

$$K(x, t; x_0, t_0) = \phi(t, t_0) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S(x, t; x_0, t_0) \right] \quad (3.2)$$

où

$$\begin{aligned} S(x, t; x_0, t_0) &= S[x(t^*)] = \int_{x_0, t_0}^{x, t} dt^* L[x(t^*), \dot{x}(t^*), t^*] \\ &= \int_{x_0, t_0}^{x, t} dt^* \left[ \frac{1}{2}m(t^*)\dot{x}^2(t^*) - \frac{1}{2}m(t^*)\omega^2(t^*)x^2(t^*) \right], \end{aligned} \quad (3.3)$$

et

$$\phi(t, t_0) = \phi(t_0) \exp \left( -\frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt^* \frac{1}{m(t^*)} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right), \quad (3.4)$$

en effectuant la variation sur (3.3), nous obtenons :

$$\ddot{x} + \left(\frac{\dot{m}}{m}\right)\dot{x} + \omega^2 x = 0, \quad (3.5)$$

maintenant, on utilise la transformation spatio-temporelle  $x(t) \leftrightarrow y(s)$  :

$$y(s) = \frac{x(t)}{C(t)} + A(t) \quad \text{et} \quad s(t) = \int^t \mu(\tau) d\tau. \quad (3.6)$$

En utilisant les notations suivantes :  $y(s^* = s) = y$ ,  $y(s^* = s_0) = y_0$ ,  $y'(s) = dy(s^*)/ds|_{s^*=s}$ ,  $y''(s) = d^2y(s)/ds^{*2}|_{s^*=s}$ , et après avoir remplacer (3.6) dans (3.5), avec :

$$y'' = 0, \quad (3.7)$$

à condition que :

$$2\dot{C}\mu + C\dot{\mu} + C\mu\dot{m}/m = 0, \quad (3.8)$$

ce qui mène à :

$$\mu = 1/mC^2 \quad (3.9)$$

$$\ddot{C} + \left(\dot{m}/m\right)\dot{C} + \omega^2 C = 0, \quad (3.10)$$

et

$$\ddot{A} + \left(\frac{2\dot{C}}{C} + \frac{\dot{m}}{m}\right)\dot{A} = 0, \quad (3.11)$$

l'action correspondante et le lagrangien pour (3.7) sont :

$$\bar{S}(y, s; y_0, s_0) = \bar{S}[y(s^*)] = \int_{y_0, s_0}^{y, s} ds^* \bar{L}[y'(s^*)], \quad (3.12)$$

où

$$\bar{L} = \frac{1}{2}y'^2 \quad (3.13)$$

parce que les variations respectives  $\delta S = 0$  et  $\delta \bar{S} = 0$  sont équivalentes, leurs actions correspondantes peuvent différer juste par :

$$S = \bar{S} + [g(x, t) - g(x_0, t_0)], \quad (3.14)$$

où nous devons avoir  $\delta g = 0$ ; c'est à dire  $g$  est une fonction des points initial et final seulement.

L'équation (3.14) peut être réécrite sous la forme :

$$\int dt^* L = \int \frac{dt^*}{mC^2} \bar{L} + \int dt^* \frac{dg}{dt^*}, \quad (3.15)$$

ce qui implique que :

$$L [x(t^*), \dot{x}(t^*), t] = \frac{\bar{L}[y'(t^*)]}{mC^2} \Big|_{y'(t^*)=(d/dt^*)[x(t^*)/C(t^*)+A(t^*)]} + \frac{dg}{dt^*}, \quad (3.16)$$

par la substitution de (3.1, 3.13 et 3.6) dans (3.16), nous trouvons :

$$\frac{dg}{dt^*} = \frac{d}{dt^*} \left[ \left( \frac{m\dot{C}}{2C} \right) x^2 - (mC\dot{A}) x - \int^{t^*} F(\tau) d\tau \right], \quad (3.17)$$

avec  $F = m\dot{A}^2 C^2/2$ , ce qui donne à partir de (3.12, 3.14, 3.13 et 3.17) :

$$S = \frac{1}{2} \frac{(y - y_0)^2}{(s - s_0)} + \left[ \left( \frac{m\dot{C}x^2}{2C} - \frac{m_0\dot{C}_0x_0^2}{2C_0} \right) - (mC\dot{A}x - m_0C_0\dot{A}_0x_0) - \int_{t_0}^t F(\tau) d\tau \right], \quad (3.18)$$

en employant (3.4, 3.6, 3.9 et 3.18) nous trouvons aisément :

$$K = \frac{\phi_0}{\sqrt{C(s-s_0)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right), \quad (3.19)$$

le facteur constant  $\phi_0$  peut être déterminé par la condition :

$$\lim_{t \rightarrow t_0} K(x, t; x_0, t_0) = \delta(x - x_0), \quad (3.20)$$

on obtient :

$$\phi_0 = \left(\frac{1}{2\pi i \hbar C_0}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.21)$$

Finalement, l'expression finale du propagateur est donnée par :

$$\begin{aligned} K(x, t; x_0, t_0) &= \frac{1}{\sqrt{CC_0}} \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \left( \frac{m\dot{C}x^2}{2C} - \frac{m_0\dot{C}_0x_0^2}{2C_0} \right) - \left( mC\dot{A}x - m_0C_0\dot{A}_0x_0 \right) \right. \\ &\quad \left. - \int_{t_0}^t F(\tau) d\tau \right\} \\ &\times K_{free}(y, s; y_0, s_0), \end{aligned} \quad (3.22)$$

où

$$K_{free}(y, s; y_0, s_0) = \left(\frac{1}{2\pi i \hbar (s-s_0)}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{i}{2\hbar} \frac{(y-y_0)^2}{(s-s_0)}\right). \quad (3.23)$$

On voit bien que la technique de transformation spatio-temporelle employée a permis d'évaluer le propagateur d'une particule avec masse dépendante du temps, sujet à un potentiel harmonique, à partir du propagateur d'une particule libre.

Dans les sections suivantes, on présentera la technique de transformation spatio-temporelle dans la théorie de de Broglie-Bohm pour retrouver le propagateur de Kanai-Caldirola à partir du propagateur de l'oscillateur harmonique, avant ça présentant la théorie de de Broglie-Bohm dans le cas d'une masse dépendante du temps.

## 3.2 Théorie de de Broglie-Bohm avec masse dépendante du temps

Avant de construire la technique de transformation spatio-temporelle dans la théorie de de Broglie-Bohm, exposons brièvement cette dernière dans le cas où la masse dépend du temps. Le langragien du système est donné par :

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2}m(t)\dot{x}^2 - V(x, t), \quad (3.24)$$

où  $m(t)$  est une masse dépendante du temps. Bien que le problème contient une masse variable, on adopte une extension naïve de la théorie de de Broglie-Bohm. En effet, partons de l'équation correspondante de Schrödinger qui déduit l'évolution quantique et posons comme d'habitude pour la fonction d'onde la forme suivante :

$$\psi(x, t) = \sqrt{\rho(x, t)} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S(x, t) \right], \quad (3.25)$$

on obtient le système d'équations suivant :

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\rho(x, t)v(x, t)] = 0, \quad (3.26)$$

$$\frac{\partial S(x, t)}{\partial t} + \frac{1}{2m(t)} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x, t) + V_q(x, t) = 0, \quad (3.27)$$

où  $V_q$  représente le potentiel quantique donné par l'expression habituelle :

$$V_q(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m(t)} \frac{\partial^2 \sqrt{\rho}}{\partial x^2}, \quad (3.28)$$

et la vitesse est définie dans ce cas par :

$$v(x, t) = \frac{1}{m(t)} \frac{\partial S}{\partial x}. \quad (3.29)$$

On voit bien que le fait d'introduire une masse dépendante du temps dans la théorie de de Broglie-Bohm, ne change rien dans les équations de cette dernière [10].

Dans la section suivante, on présentera une technique de construction du propagateur de Feynman suivant la théorie de de Broglie-Bohm.

### 3.3 Propagateur via la théorie de de Broglie Bohm

#### 3.3.1 Approximation semi-classique :

Si les dimensions caractéristiques du problème sont très grandes comparées aux longueurs d'onde des ondes des particules, alors le système peut être décrit d'une manière satisfaisante par la méthode semi-classique. C'est à dire, quand  $\hbar \rightarrow 0$ , la trajectoire de Bohm  $x(t)$  se développe au voisinage de  $X(t)$  "solution classique" et en l'occurrence  $V, V_q$  et  $S$ . Cette approximation est semblable à celle employée lorsqu'on passe de l'optique ondulatoire à l'optique géométrique où l'équation de propagation est réduite à celle de l'eikonale. La théorie de de Broglie-Bohm et l'intégrale de chemin de Feynman, établies sur la base de la trajectoire, contiennent ce passage implicitement et la méthode semi-classique peut être appliquée d'une manière satisfaisante. Voyons d'abord comment cette approximation semi-classique s'explique dans le cas du formalisme de Feynman. Le propagateur est défini par l'intégrale de chemin suivante :

$$K(y, t, x, 0) = \int_{(x,0)}^{(y,t)} \mathcal{D}x \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(\tau)]\right), \quad (3.30)$$

où l'intégrale est faite sur tous les chemins possibles reliant les points  $(x, 0)$  et  $(y, t)$ ,  $S[x(\tau)]$  est la phase de l'amplitude de probabilité de chaque trajectoire connue sous le nom d'action :

$$S[x(\tau)] = \int_{(x,0)}^{(y,t)} d\tau \left[ \frac{1}{2} m(\tau) \left( \frac{dx}{d\tau} \right)^2 - V(x, \tau) \right], \quad (3.31)$$

et  $\mathcal{D}x$  est la mesure de l'intégrale de chemin. On introduit le changement de variable suivant :

$$x = X(t) + \eta, \quad (3.32)$$

où  $X(t)$  est le chemin classique, solution de l'équation d'Euler-Lagrange :

$$\ddot{X} + \frac{\dot{m}(t)}{m(t)}\dot{X} = -\frac{1}{m(t)}\frac{\partial V}{\partial x}[X(t), t], \quad (3.33)$$

et  $\eta$  c'est la déviation par rapport au chemin classique  $X(t)$ . Un simple calcul des variations donne [11] :

$$K(y, t, x, 0) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[X(\tau)]\right) \int_{(0,0)}^{(0,t)} \mathcal{D}\eta \exp\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2!}\delta^2 S[\eta] + \frac{1}{3!}\delta^3 S[\eta] + \dots\right), \quad (3.34)$$

dans l'équation (3.34),  $S[X(\tau)]$  représente l'action classique calculée le long de la trajectoire classique  $X(t)$  qui vérifie l'équation (3.33). On peut montrer que :

$$\eta \sim \sqrt{\hbar}, \quad \frac{\delta^2 S[\eta]}{\hbar} \sim 1, \quad \text{et que } \frac{\delta^n S[\eta]}{\hbar} \ll 1 \quad (n \geq 3) \quad \text{quand } \hbar \rightarrow 0. \quad (3.35)$$

Donc c'est seulement le terme  $\delta^2 S[\eta]$  qui contribue dans le calcul du propagateur, c'est le résultat de la méthode semi-classique et le propagateur est alors donné par :

$$K(y, t, x, 0) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[X(\tau)]\right) \int_{(0,0)}^{(0,t)} \mathcal{D}\eta \exp\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2!}\delta^2 S[\eta]\right), \quad (3.36)$$

comme l'action  $\delta^2 S[\eta]$  est quadratique en  $\eta$ , l'intégrale de chemin restante peut être facilement calculée et nous obtenons alors :

$$K(y, t, x, 0) = \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 S[X(\tau)]}{\partial y \partial x}} \exp\frac{i}{\hbar}S[X(\tau)]. \quad (3.37)$$

Maintenant, on va présenter et développer l'approximation semi-classique dans le cadre de la théorie de de Broglie-Bohm. En mécanique ondulatoire, il est facile de montrer que

lorsque  $\hbar \rightarrow 0$ , et si la fonction d'onde est concentrée à  $t = 0$  autour des valeurs moyennes  $x_0$  et  $p_0$  alors elle a la forme [11] :

$$\Psi(x, 0) = (2\pi a_0^2)^{-1/4} \exp \left[ \frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{(x - x_0)^2}{4a_0^2} \right] \quad (3.38)$$

où  $a_0$  représente la largeur du paquet d'onde, après un temps  $t$ , la fonction d'onde sera concentrée autour des valeurs moyennes  $x(t)$  et  $p(t)$  qui sont reliées aux  $x(0) = x_0$  et  $p(0) = p_0$  par une transformation canonique produite par l'action classique. Ceci nous motive de choisir pour la solution semi-classique dans le cas de de Broglie -Bohm la forme suivante [12] :

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\rho(x, t)} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S(x, t) \right] \quad (3.39)$$

où  $S(x, t)$  représente l'action, avec une densité de probabilité :

$$\sqrt{\rho(x, t)} = (2\pi a^2(t))^{-1/4} \exp \left[ -\frac{(x - X(t))^2}{4a^2(t)} \right], \quad (3.40)$$

$a(t)$  c'est la largeur du paquet d'onde à l'instant  $t$  et  $X(t)$  représente le chemin classique solution de l'équation (3.33), ceci implique que le potentiel quantique  $V_q$  défini par (3.28) aura la forme Gaussienne suivante :

$$V_q(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m(t)} \left[ \frac{(x - X(t))^2}{4a^4(t)} - \frac{1}{2a^2(t)} \right], \quad (3.41)$$

l'insertion de (3.40) dans (3.26) donne l'équation différentielle suivante pour la vitesse  $v$  :

$$\frac{\partial v}{\partial x} = v \frac{[x - X(t)]}{a^2(t)} - \frac{\dot{a}(t)}{a^3(t)} [x - X(t)]^2 - \frac{\dot{X}(t)}{a^2(t)} [x - X(t)] + \frac{\dot{a}(t)}{a(t)}, \quad (3.42)$$

l'équation (3.42) admet comme solution générale :

$$v(x, t) = \frac{\dot{a}(t)}{a(t)} [x - X(t)] + \dot{X}(t) + h(t) \exp \left[ \frac{(x - X(t))^2}{2a^2(t)} \right], \quad (3.43)$$

où  $h(t)$  est une fonction arbitraire du temps.

Procédons comme auparavant, en ne considérant que les petites déviations par rapport au chemin classique et écrivons alors pour la vitesse  $v(x, t)$ , le potentiel  $V(x, t)$  et l'action  $S(x, t)$ , le développement suivant :

$$v(x, t) = \frac{\dot{a}(t)}{a(t)} [x - X(t)] + \dot{X}(t) + h(t) + \dots \quad (3.44)$$

$$V(x, t) = V(X(t), t) + \frac{\partial V}{\partial X}(X(t), t) [x - X(t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial X^2}(X(t), t) [x - X(t)]^2 + \dots \quad (3.45)$$

$$S(x, t) = S(X(t), t) + \frac{\partial S}{\partial X}(X(t), t) [x - X(t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial X^2}(X(t), t) [x - X(t)]^2 + \dots \quad (3.46)$$

En utilisant (2.41 et 3.44), nous déduisons :

$$S(x, t) = S(X(t), t) + m(t) [\dot{X}(t) + h(t)] [x - X(t)] + \frac{m(t)\dot{a}(t)}{2a(t)} [x - X(t)]^2 + \dots, \quad (3.47)$$

où  $S(X(t), t)$  représente l'action le long du chemin classique, insèrent maintenant (3.41, 3.45, et 3.47) dans (3.27) et en égalisant suivant l'ordre de puissance de  $[x - X(t)]$ , on obtient les équations suivantes :

$$\dot{S}[X(t), t] = \frac{m(t)}{2} \dot{X}^2(t) - V[X(t), t] - \frac{\hbar^2}{4m(t)a^2(t)} - \frac{m(t)}{2} h^2(t) \quad (3.48)$$

$$\dot{h}(t) + \left[ \frac{\dot{m}(t)}{m(t)} + \frac{\dot{a}(t)}{a(t)} \right] h(t) = 0 \quad (3.49)$$

$$\ddot{a}(t) + \frac{\dot{m}(t)}{m(t)} \dot{a}(t) + \left( \frac{1}{m(t)} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2}[X(t), t] \right) a(t) = \frac{\hbar^2}{4m^2(t)a^3(t)}. \quad (3.50)$$

Il est clair que les contributions proportionnelles à  $\hbar^2$  dans les équations (3.48) et (3.50) sont dues au potentiel quantique  $V_q$ , ceci représente la non localité du phénomène quantique. La solution de la deuxième équation (3.49) est immédiate :

$$h(t) = \frac{c}{m(t)a(t)}, \quad (3.51)$$

imposons les conditions initiales suivantes :

$$\begin{aligned} X(0) = x_0 \quad \dot{X}(0) = v_0, \quad a(0) = a_0 \quad \dot{a}(0) = 0, \\ S[X(0), 0] = m_0 x_0 v_0 \quad \text{avec} \quad m_0 = m(0), \quad \text{et} \quad h(0) = 0 \quad , \end{aligned} \quad (3.52)$$

la dernière condition implique que  $h(t) = 0$ . Ce choix garantit qu'à  $t = 0$ , la vitesse de la particule suivant la trajectoire quantique est égale à la vitesse classique, c'est à dire l'effet du potentiel quantique n'a pas été encore propagé.

Le problème est alors réduit à la recherche de  $X(t)$ ,  $a(t)$  et  $S[X(t), t]$  vérifiant respectivement les équations (3.33), (3.50) et (3.48), la solution du problème de de Broglie-Bohm sera donnée donc par :

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = [2\pi a^2(t)]^{-\frac{1}{4}} \exp \left[ \left( \frac{im\dot{a}(t)}{2\hbar a(t)} - \frac{1}{4a^2(t)} \right) [x - X(t)]^2 \right] \times \\ \exp \left[ \frac{im\dot{X}(t)}{\hbar} [x - X(t)] + \frac{imv_0 x_0}{\hbar} \right] \times \\ \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left( \frac{1}{2} m \dot{X}^2(t') - V[X(t')] - \frac{\hbar^2}{4ma^2(t')} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.53)$$

### 3.3.2 Construction du propagateur

Maintenant il serait intéressant de voir comment on pourrait relier cette solution (3.53) au propagateur habituel de la mécanique quantique. A cet effet, soit la méthode déjà établie par Berstein [13] pour une fonction d'onde localisée de faible longueur d'onde dans la limite  $\hbar \rightarrow 0$ . Dans notre cas la masse dépend du temps et cela ne pose aucun problème comme nous allons le voir. Le propagateur est défini par la relation :

$$\Psi(y, t) = \int dx K(y, t, x, 0) \Psi(x, 0) \quad (3.54)$$

avec  $x = x_0$ , on a :

$$\Psi(x, 0) = [2\pi a_0^2]^{-1/4} \exp\left[\frac{im_0 v_0 x}{\hbar}\right], \quad (3.55)$$

définissons maintenant

$$\Phi(v_0, y, t) = [2\pi a_0^2]^{1/4} \Psi(y, t), \quad (3.56)$$

et à partir de l'équation (3.54) calculons l'intégrale suivante :

$$\int dv_0 \Phi^*(v_0, y, t) \Phi(v_0, y', t) = \int dv_0 \int dx' dx K^*(y, t, x, 0) K(y', t, x', 0) \quad (3.57)$$

$$\times \exp\left[\frac{im_0 v_0 (x' - x)}{\hbar}\right]. \quad (3.58)$$

Comme le propagateur qu'on voulait calculer est semblable à celui de la mécanique quantique standard où l'évolution de la propagation est indépendante de la vitesse initiale  $v_0$ , par conséquent, intégrons par rapport à la variable  $v_0$  :

$$\int dv_0 \Phi^*(v_0, y, t) \Phi(v_0, y', t) = \frac{2\pi\hbar}{m_0} \int dx K^*(y, t, x, 0) K(y', t, x, 0), \quad (3.59)$$

remplaçons maintenant le propagateur par l'expression obtenue dans le cadre de l'approximation semi-classique :

$$\int dv_0 \Phi^*(v_0, y, t) \Phi(v_0, y', t) = \frac{1}{m_0} \int dx \sqrt{\frac{\partial^2 S(y, x, t)}{\partial y \partial x} \frac{\partial^2 S(y', x, t)}{\partial y' \partial x}} \exp\frac{i}{\hbar} [S(y', x, t) - S(y, x, t)], \quad (3.60)$$

avec

$$S[X(\tau)] = \int_{(x,0)}^{(y,t)} d\tau \left[ \frac{1}{2} m(\tau) \left( \frac{dX(\tau)}{d\tau} \right)^2 - V(X(\tau), \tau) \right] \equiv S(y, x, t). \quad (3.61)$$

Pour calculer l'intégrale (3.60) appliquons la méthode de la phase stationnaire qui stipule que dans la limite  $\hbar \rightarrow 0$ , on doit avoir  $y \sim y'$ . En conséquence (3.60) devient :

$$\int dv_0 \Phi^*(v_0, y, t) \Phi(v_0, y', t) = \frac{1}{m_0} \int dx \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial S(y, x, t)}{\partial y} \right] \exp -\frac{i}{\hbar} \left[ \frac{\partial S(y, x, t)}{\partial y} (y - y') \right] = \frac{2\pi\hbar}{m_0} \delta(y - y') \quad (3.62)$$

A partir de l'équation de continuité (3.26), il suit :

$$\frac{\partial (\Phi^*(v_0, x, t) \Psi(x, t))}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\Phi^*(v_0, x, t) \Psi(x, t) v(x, t)] = 0, \quad (3.63)$$

on peut écrire (3.63) sous la forme intégrale suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int dx (\Phi^*(v_0, x, t) \Psi(x, t)) = 0, \quad (3.64)$$

où on a utilisé le fait que la fonction d'onde est localisée [13]. L'équation (3.64) implique que

$$\int dx' \Phi^*(v_0, x', t) \Psi(x', t) = \int dx \Phi^*(v_0, x, 0) \Psi(x, 0). \quad (3.65)$$

Multiplions (??) par  $\Phi(v_0, y, t)$  puis intégrons sur  $v_0$  en utilisant (??), on trouve :

$$\Psi(y, t) = \int dx \left[ \frac{m_0}{2\pi\hbar} \int dv_0 \Phi(v_0, y, t) \Phi^*(v_0, x, 0) \right] \Psi(x, 0), \quad (3.66)$$

où on identifie le propagateur

$$K(y, t, x, 0) = \frac{m_0}{2\pi\hbar} \int dv_0 \Phi(v_0, y, t) \Phi^*(v_0, x, 0). \quad (3.67)$$

Par conséquent, insérant  $\Phi(v_0, y, t)$  dans (3.67), nous obtenons le propagateur sous la forme explicite suivante :

$$K(y, t, x, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dv_0 \Theta(y, x, x_0, v_0) \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[X(t)] \right), \quad (3.68)$$

avec

$$S[X(\tau)] = \int_0^t d\tau \left[ \frac{m(\tau)}{2} \dot{X}^2(\tau) - V[X(\tau), \tau] \right], \quad (3.69)$$

et

$$\begin{aligned} \Theta(y, x, x_0, v_0) &= \frac{m_0}{2\pi\hbar} \left( \frac{a(t)}{a_0} \right)^{-1/2} \exp \left\{ \left( \frac{im(t)\dot{a}(t)}{2\hbar a(t)} - \frac{1}{4a^2(t)} \right) (y - X(t))^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{im(t)\dot{X}(t)}{\hbar} [y - X(t)] - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \frac{\hbar^2}{4m(\tau)a^2(\tau)} d\tau \right\}. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Il faut noter que pour les cas explicites les calculs sont longs et donc au lieu de varier la vitesse initiale du chemin classique, on introduit son extrémité libre. Cette manière nous permet d'abrégier les calculs et éventuellement de trouver une certaine affinité avec l'approche intégrale de Feynman. Alors en remplaçant la vitesse initiale  $v_0$  par la position finale  $X(t)$ , nous écrivons le propagateur sous la forme suivante :

$$K(x, x_0, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dX(t) \left( \frac{dv_0}{dX(t)} \right) \Theta(y, x, x_0, X(t)) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S[X(t)] \right], \quad (3.71)$$

$X(t)$  étant l'extrémité finale du chemin classique.

Notons que la trajectoire classique est incompatible avec l'évolution quantique. En effet la trajectoire est définie par des conditions initiales à  $t = 0 : (x_0, v_0)$  alors que la transition quantique est assujettie aux conditions aux limites  $(x_0, 0)$  et  $(y, t)$ . Par ailleurs, cette trajectoire  $X(\tau)$  ne pourra décrire une transition possible dans le schéma de Feynman puisque à l'instant  $t = 0$ , on connaît  $v$  et  $x$  ce qui viole l'incertitude d'Heisenberg.

Donc,  $X(\tau)$  est un chemin classique fictif qui laisse simuler l'évolution quantique à la Feynman au moyen de son extrémité libre  $X(t)$ . En d'autres termes :

$$\int_{\substack{X(0)=x_0 \\ \dot{X}(0)=v_0}}^{X(t)=x} dX(t). \text{ponderation} \sim \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x} Dx(t) \quad (3.72)$$

Cette formule présente une ressemblance remarquable avec celle obtenue par l'intermédiaire de la méthode de Hamilton-Jacobi où le facteur de pondération joue le rôle du Jacobien de la transformation entre les impulsions [14]. En conséquence ce choix de variable permet en plus d'une simplification des calculs de nous rapprocher de plus en plus de la méthode de Feynman .

## 3.4 Applications

### 3.4.1 Particule libre

Pour la particule libre le potentiel est nul

$$V(x, t) = 0, \quad (3.73)$$

l'équation (3.33) devient :

$$\ddot{X}(t) = 0, \quad (3.74)$$

qui admet la solution

$$X(t) = v_0 t + x_0 \quad (3.75)$$

$$\dot{X}(t) = v_0 \quad (3.76)$$

d'où

$$\dot{X}(T) = v_0 = \frac{X(T) - x_0}{T} = \frac{X - x_0}{T} \quad (3.77)$$

le propagateur s'écrit alors :

$$K(x, x_0, T) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dX}{T} \Theta(x, x_0, X, \dot{X}(X)) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S[X] \right], \quad (3.78)$$

où

$$\Theta(x, x_0, X, \dot{X}(X)) = \frac{m}{2\pi\hbar} \left( \frac{a(T)}{a_0} \right)^{-1/2} \exp \left\{ \left( \frac{i m \dot{a}(T)}{2\hbar a(T)} - \frac{1}{4a^2(T)} \right) (x - X)^2 + \frac{i m (X - x_0)}{\hbar T} (x - X) - \int_0^T \frac{\hbar^2}{4m a^2(T)} dt \right\}, \quad (3.79)$$

avec

$$S[X(\tau)] = \int_0^T d\tau \left[ \frac{m}{2} \dot{X}^2(\tau) - V[X(\tau), \tau] \right] \quad (3.80)$$

$$S[X] = \frac{m}{2} [X(T)\dot{X}(T) - x_0 v_0] \quad (3.81)$$

$$S[X] = \frac{m}{2} \frac{(X - x_0)^2}{T}. \quad (3.82)$$

L'intégration sur  $X$  étant Gaussienne, le résultat est :

$$K(x, x_0, T) = \frac{1}{T} \frac{m}{2\pi\hbar} \left( \frac{a(T)}{a_0} \right)^{-1/2} \sqrt{\frac{\pi}{F_1(T)}} \exp(F_2(T)) \exp\left(\frac{i m (x - x_0)^2}{2\hbar T}\right), \quad (3.83)$$

avec

$$F_1(T) = \frac{i m}{2\hbar T} - \left[ \frac{i m \dot{a}(T)}{2\hbar a(T)} - \frac{1}{4a^2(T)} \right] \quad (3.84)$$

$$F_1(T) = \frac{i m}{2\hbar T} \frac{\left[ 1 - i \frac{T}{\alpha} \right]}{\left[ 1 + \left( \frac{T}{\alpha} \right)^2 \right]} \quad (3.85)$$

$$F_2(T) = - \int_0^T \frac{\hbar^2}{4m a^2(T)} dt \quad (3.86)$$

$$F_2(T) = \frac{\sqrt{1 - i \left(\frac{T}{\alpha}\right)}}{\left[1 + \left(\frac{T}{\alpha}\right)^2\right]^{\frac{1}{4}}} \quad (3.87)$$

un calcul direct avec  $a(T)$  solution de l'équation (3.50) :

$$a(T) = a_0 \sqrt{1 + \frac{T^2}{\alpha^2}} \quad (3.88)$$

où  $\alpha = \frac{2ma_0^2}{\hbar}$  donne immédiatement :

$$K(x, x_0, T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \exp i \frac{m(x - x_0)^2}{2\hbar T} \quad (3.89)$$

Ce résultat concorde exactement avec le résultat obtenu par la méthode intégrale de chemin de Feynman [15].

### 3.4.2 Potentiel linéaire

Dans ce cas le potentiel est donné par :

$$V(x) = -fx, \quad (3.90)$$

l'équation (3.33) devient :

$$\ddot{X}(t) = \frac{f}{m} \quad (3.91)$$

qui admet la solution

$$X(t) = \frac{f}{2m} t^2 + v_0 t + x_0, \quad (3.92)$$

d'où on tire :

$$v_0 = \frac{X - x_0}{T} + \left(\frac{f}{2m}\right) T, \quad (3.93)$$

le propagateur s'écrit alors

$$K(x, x_0, T) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dX}{T} \Theta(x, x_0, X, \dot{X}(X)) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S[X] \right], \quad (3.94)$$

où maintenant :

$$\begin{aligned} \Theta(x, x_0, X, \dot{X}(X)) &= \frac{m}{2\pi\hbar} \left(\frac{a(T)}{a_0}\right)^{-1/2} \exp \left\{ \left( \frac{ima(T)}{2\hbar a(T)} - \frac{1}{4a^2(T)} \right) (x - X)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{im}{\hbar T} (X - x_0)(x - X) + \frac{ifT}{2\hbar} (x - X) - \frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{\hbar^2}{4ma^2(T)} dt \right\}, \end{aligned} \quad (3.95)$$

avec

$$S[X] = \frac{m}{2} (X\dot{X} - x_0v_0) + \frac{f}{2} \int_0^T X(t) dt \quad (3.96)$$

$$S[X] = \frac{m}{2T} (X - x_0)^2 + \frac{f}{2} (X + x_0) T - \frac{f^2 T^3}{24m}, \quad (3.97)$$

l'intégration sur X étant là encore une Gaussienne on aura :

$$K(x, x_0, T) = \frac{1}{T} \frac{m}{2\pi\hbar} \left(\frac{a(T)}{a_0}\right)^{-1/2} \sqrt{\frac{\pi}{F_1(T)}} \exp F_2(T) \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar T} (x - x_0)^2 + \frac{ifT}{2\hbar} (x - x_0) - \frac{if^2 T^3}{24m\hbar} \right\} \quad (3.98)$$

avec

$$F_1(T) = \frac{im}{2\hbar T} - \left[ \frac{ima(T)}{2\hbar a(T)} - \frac{1}{4a^2(T)} \right] \quad (3.99)$$

$$F_1(T) = \frac{im}{2\hbar T} \frac{\left[1 - i\frac{T}{\alpha}\right]}{\left[1 + \left(\frac{T}{\alpha}\right)^2\right]} \quad (3.100)$$

$$F_2(T) = -\int_0^T \frac{\hbar^2}{4ma^2(T)} dt \quad (3.101)$$

$$F_2(T) = \frac{\sqrt{1 - i\left(\frac{T}{\alpha}\right)}}{\left[1 + \left(\frac{T}{\alpha}\right)^2\right]^{\frac{1}{4}}}. \quad (3.102)$$

Un calcul direct avec la même solution pour  $a(T)$

$$a(T) = a_0 \sqrt{1 + \left(\frac{T}{\alpha}\right)^2} \quad (3.103)$$

donne le résultat exact pour le propagateur du potentiel linéaire :

$$K(x, x_0, T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar T} (x - x_0)^2 + \frac{ifT}{2\hbar} (x - x_0) - i\frac{f^2 T^3}{24\hbar m} \right]. \quad (3.104)$$

### 3.4.3 Oscillateur harmonique

Pour le potentiel harmonique le potentiel est donné par :

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (3.105)$$

l'équation (3.33) devient

$$\ddot{X}(t) + \omega^2 X = 0, \quad (3.106)$$

qui admet la solution suivante :

$$X(t) = x_0 \cos(\omega t) + \frac{v_0}{\omega} \sin(\omega t)$$

d'où on tire :

$$v_0 = \frac{\omega [X - x_0 \cos(\omega T)]}{\sin(\omega T)}. \quad (3.107)$$

Le propagateur s'écrit alors :

$$K(x, x_0, T) = \int_{-\infty}^{+\infty} dX \frac{\omega}{\sin(\omega T)} \Theta(x, x_0, X, \dot{X}(X)) \exp\left[\frac{i}{\hbar} S[X]\right], \quad (3.108)$$

où

$$\begin{aligned} \Theta(x, x_0, X, \dot{X}(X)) = & \frac{m}{2\pi\hbar} \left(\frac{a(T)}{a_0}\right)^{-1/2} \exp\left\{\left(\frac{ima(T)}{2\hbar a(T)} - \frac{1}{a^2(T)}\right) (x - X)^2\right. \\ & \left. + \frac{im\omega [X \cos(\omega T) - x_0]}{\hbar \sin(\omega T)} (x - X) - \frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{\hbar^2}{4ma^2(t)} dt\right\}, \end{aligned} \quad (3.109)$$

avec

$$S[X] = \frac{m}{2} (X\dot{X} - x_0 v_0) \quad (3.110)$$

$$S[X] = \frac{m}{2} \frac{\omega}{\sin(\omega T)} [(X^2 + x_0^2) \cos(\omega T) - 2x_0 X]. \quad (3.111)$$

L'intégration sur  $X$  étant toujours une Gaussienne, elle donne comme résultat :

$$\begin{aligned} K(x, x_0, T) = & \frac{\omega}{\sin(\omega T)} \frac{m}{2\pi\hbar} \left(\frac{a(T)}{a_0}\right)^{-1/2} \sqrt{\frac{\pi}{F_1(T)}} \exp\{F_2(T)\} \\ & \times \exp\left\{\frac{im}{2\hbar} \frac{\omega}{\sin(\omega T)} (x^2 + x_0^2) \cos(\omega T) - 2xx_0\right\}, \end{aligned} \quad (3.112)$$

avec

$$\overline{F}_1(T) = \frac{im\omega \cos(\omega T)}{2\hbar \sin \omega T} - \left( \frac{ima(T)}{2\hbar a(T)} - \frac{1}{4a^2(T)} \right) \quad (3.113)$$

$$\overline{F}_1(T) = \frac{im\omega \left[ 1 - \frac{i}{\alpha\omega} \tan(\omega T) \right]}{2\hbar \sin(\omega T) \cos(\omega T)}, \quad (3.114)$$

et

$$F_2(T) = - \int_0^T \frac{\hbar^2}{4ma^2(T)} dt \quad (3.115)$$

$$F_2(T) = \frac{\sqrt{1 - \frac{i}{\alpha\omega} \tan(\omega T)}}{\left[ 1 + \left( \frac{\tan(\omega T)}{\alpha\omega} \right)^2 \right]^{\frac{1}{4}}}, \quad (3.116)$$

pour ce type de potentiel l'équation (3.50) prend la forme :

$$\ddot{a}(t) + \omega^2 a(t) = \frac{\hbar^2}{4m^2 a^3(t)}, \quad (3.117)$$

qui admet la solution :

$$a(T) = a_0 \sqrt{\cos^2 \omega T + \frac{1}{\alpha^2 \omega^2} \sin^2(\omega T)} \quad (3.118)$$

ce qui donne finalement, le propagateur de l'oscillateur harmonique :

$$K(x, x_0, T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}} \exp \left( \frac{im}{2\hbar} \frac{\omega}{\sin \omega T} [(x^2 + x_0^2) \cos(\omega T) - 2xx_0] \right). \quad (3.119)$$

### 3.4.4 Oscillateur harmonique forcé

Dans le cas de l'oscillateur harmonique forcé, le potentiel est donné par :

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 - f(t)x, \quad (3.120)$$

l'équation (3.33) devient :

$$\ddot{X}(t) + \omega^2X = \frac{f(t)}{m}, \quad (3.121)$$

qui admet la solution :

$$X(t) = x_0 \cos(\omega t) + \frac{v_0}{\omega} \sin(\omega t) + \frac{1}{m\omega} \int_0^t f(s) \sin \omega(t-s) ds, \quad (3.122)$$

d'où on tire :

$$v_0 = \frac{\omega [X - x_0 \cos(\omega T)]}{\sin(\omega T)} - \frac{1}{m \sin(\omega T)} \int_0^T f(s) \sin \omega(T-s) ds, \quad (3.123)$$

et le propagateur s'écrit alors :

$$K(x, x_0, T) = \int_{-\infty}^{+\infty} \omega \frac{dX}{\sin(\omega T)} \Theta(x, x_0, X, \dot{X}(X)) \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(X)\right], \quad (3.124)$$

avec

$$\begin{aligned} \Theta(x, x_0, X, \dot{X}(X)) &= \frac{m}{2\pi\hbar} \left(\frac{a(T)}{a_0}\right)^{-1/2} \exp\left\{\left(\frac{im\dot{a}(T)}{2\hbar a(T)} - \frac{1}{4a^2(T)}\right)(x-X)^2\right. \\ &\quad + \frac{im\omega [X \cos(\omega T) - x_0]}{\hbar \sin(\omega T)}(x-X) + \frac{i(x-X)}{\hbar m \sin(\omega T)} \int_0^T f(s) \sin(\omega s) ds \\ &\quad \left. - \frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{\hbar^2}{4ma^2(t)} dt\right\} \end{aligned} \quad (3.125)$$

et

$$\begin{aligned}
S[X] &= \frac{m}{2}[X\dot{X}(T) - x_0v_0] + \frac{1}{2} \int_0^T f(t)X(t)dt \\
&= \frac{m\omega}{2\sin(\omega T)} \{ (X^2 + x_0^2) \cos(\omega T) - 2Xx_0 \} + \frac{X}{\sin(\omega T)} \int_0^T f(s) \sin(\omega s) ds \\
&\quad + \frac{x_0}{\sin(\omega T)} \int_0^T f(s) \sin \omega(T-s) ds \\
&\quad - \frac{1}{m\omega \sin(\omega T)} \int_0^T \int_0^t f(t)f(s) \sin(\omega s) \sin \omega(T-s) dt ds \quad . \quad (3.126)
\end{aligned}$$

L'intégration sur X est toujours une Gaussienne, ce qui donne le résultat suivant pour le propagateur :

$$\begin{aligned}
K(x, x_0, T) &= \frac{\omega}{\sin(\omega T)} \frac{m}{2\pi\hbar} \left( \frac{a(T)}{a_0} \right)^{-1/2} \sqrt{\frac{\pi}{\overline{F}_1(T)}} \exp(F_2(T)) \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \frac{\omega}{\sin(\omega T)} [(x^2 + x_0^2) \cos(\omega T) - 2xx_0] \right. \\
&\quad + \frac{2x}{m\omega} \int_0^T f(t) \sin(\omega t) dt + \frac{2x_0}{m\omega} \int_0^T f(t) \sin \omega(T-t) dt \\
&\quad \left. - \frac{2}{m^2\omega^2} \int_0^T \int_0^t f(t)f(s) \sin(\omega s) \sin \omega(T-t) ds dt \right\}, \quad (3.127)
\end{aligned}$$

avec

$$\overline{F}_1(T) = \frac{im\omega \cos(\omega T)}{2\hbar \sin(\omega T)} - \left( \frac{im\dot{a}(T)}{2\hbar a(T)} - \frac{1}{4a^2(T)} \right) = \frac{im\omega \left( 1 - i \frac{\tan \omega T}{\alpha\omega} \right)}{2\hbar \sin(\omega T) \cos(\omega T)} \quad (3.128)$$

$$F_2(T) = - \int_0^T \frac{\hbar^2}{4ma^2(T)} dt = \frac{\sqrt{1 - i \frac{\tan \omega T}{\alpha\omega}}}{[1 + (\frac{\tan \omega T}{\alpha\omega})^2]^{1/4}}, \quad (3.129)$$

avec la même solution pour  $a(T)$  comme celle donnée dans le cas de l'oscillateur har-

monique :

$$a(T) = a_0 \sqrt{\cos^2 \omega T + \frac{1}{\alpha^2 \omega^2} \sin^2 (\omega T)}. \quad (3.130)$$

Le résultat final pour le propagateur est alors donné par :

$$\begin{aligned} K(x, x_0, T) = & \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \frac{\omega}{\sin(\omega T)} [(x^2 + x_0^2) \cos(\omega T) - 2xx_0] \right. \\ & + \frac{2x}{m\omega} \int_0^T f(t) \sin(\omega t) dt + \frac{2x_0}{m\omega} \int_0^T f(t) \sin \omega(T-t) dt \\ & \left. - \frac{2}{m^2 \omega^2} \int_0^T \int_0^t f(t)f(s) \sin(\omega s) \sin \omega(T-t) ds dt \right\} \end{aligned} \quad (3.131)$$

résultat identique à celui qu'on trouve dans la référence [16].

### 3.4.5 Modèle de Kanai-Caldirola

Dans ce modèle, la masse dépend du temps suivant la relation  $m(t) = m_0 e^{\eta t}$  et dans ce cas le potentiel aura la forme suivante [24, 25] :

$$V(x, t) = \frac{1}{2} m_0 e^{\eta t} \omega_0^2 x^2, \quad (3.132)$$

$\eta$  représente le facteur de dissipation, les équations différentielles de  $X(t)$  et  $a(t)$  deviennent :

$$\ddot{X} + \eta \dot{X} + \omega_0^2 X = 0, \quad (3.133)$$

et

$$\ddot{a} + \eta \dot{a} + \omega_0^2 a = \frac{\hbar^2}{4m_0^2 e^{2\eta t} a^3}. \quad (3.134)$$

Par rapport aux cas précédents, notons la présence des termes  $\eta\dot{X}$  et  $\eta\dot{a}$  dans les équations (3.133) et (3.134), ceci provient de la dissipation, la solution de (3.133) est :

$$X(t) = e^{-\frac{\eta t}{2}} \left[ x_0 \cos(\omega t) + \frac{1}{\omega} \left( v_0 + \frac{\eta}{2} x_0 \right) \sin(\omega t) \right], \quad (3.135)$$

avec  $\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\eta^2}{4}}$ , de (3.135) on tire la vitesse initiale  $v_0$  :

$$v_0 = \frac{\omega}{\sin \omega T} \left[ X e^{\frac{\eta T}{2}} - (\cos \omega T + \frac{\eta}{2\omega} \sin \omega T) x_0 - \frac{1}{m_0 \sin \omega T} \int_0^T f(s) e^{\frac{\eta s}{2}} \sin \omega(T-s) ds \right], \quad (3.136)$$

le propagateur s'écrit alors suivant la relation suivante :

$$K(x, x_0, T) = \int_{-\infty}^{+\infty} dX \frac{\omega}{\sin(\omega T)} e^{\frac{\eta T}{2}} \Theta(x, x_0, X, \dot{X}(X)) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(X)\right), \quad (3.137)$$

avec

$$\begin{aligned} \Theta(x, x_0, X, \dot{X}(X)) = & \frac{m(T)}{2\pi\hbar} \left( \frac{a(T)}{a_0} \right)^{-1/2} \exp \left\{ \left( \frac{im(T)\dot{a}(T)}{2\hbar a(T)} - \frac{1}{4a^2(T)} \right) (x-X)^2 \right. \\ & + \frac{im_0 e^{\eta T}}{\hbar} \left( \frac{\omega \cos(\omega T)}{\sin(\omega T)} - \frac{\eta}{2} \right) X(x-X) \\ & \left. - \frac{im_0 \omega x_0 (x-X)}{\hbar \sin(\omega T)} e^{\frac{\eta T}{2}} - \frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{\hbar^2}{4m(t)a^2(t)} dt \right\}, \end{aligned} \quad (3.138)$$

le calcul de l'action classique donne :

$$\begin{aligned}
S[X] &= \frac{m_0}{2} \left( e^{\eta T} X(T) \dot{X}(T) - x_0 v_0 \right) \\
&= \frac{m_0}{2} \left\{ e^{\eta T} \left( \frac{\omega \cos(\omega T)}{\sin(\omega T)} - \frac{\eta}{2} \right) X^2 - \frac{2\omega x_0 X}{\sin(\omega T)} e^{\frac{\eta}{2} T} \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\omega \cos(\omega T)}{\sin(\omega T)} + \frac{\eta}{2} \right) x_0^2 \right\}, \tag{3.139}
\end{aligned}$$

l'intégration sur  $X$  est toujours Gaussienne, ce qui donne pour le propagateur le résultat suivant :

$$\begin{aligned}
K(x, x_0, T) &= \frac{m_0}{2\pi\hbar} \frac{\omega e^{\frac{\eta}{2} T}}{\sin(\omega T)} \left( \frac{a(T)}{a_0} \right)^{-1/2} \sqrt{\frac{\pi}{F_1(T)}} \exp[F_2(T)] \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{im_0}{2\hbar} \frac{\omega e^{\frac{\eta}{2} T}}{\sin(\omega T)} [x^2 \left( \cos(\omega T) - \frac{\eta}{2\omega} \sin(\omega T) \right) e^{\frac{\eta}{2} T} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + x_0^2 \left( \cos(\omega T) + \frac{\eta}{2\omega} \sin(\omega T) \right) e^{-\frac{\eta}{2} T} - 2x_0 x] \right\}, \tag{3.140}
\end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}
F_1(T) &= \frac{im_0 e^{\eta T}}{2\hbar} \left( \frac{\omega \cos(\omega T)}{\sin(\omega T)} - \frac{\eta}{2} \right) - \left[ \frac{im_0 e^{\eta T} \dot{a}(T)}{2\hbar a(T)} - \frac{1}{4a^2(T)} \right] \\
F_2(T) &= \frac{im_0 \omega e^{\eta T} \left[ 1 + \frac{\eta}{\alpha\omega} \tan(\omega T) - \frac{i}{\alpha\omega} \tan(\omega T) \right]}{2\hbar \sin(\omega T) \cos(\omega T) \left[ 1 + \frac{\eta}{\omega} \tan(\omega T) + \left( \frac{1}{\alpha^2 \omega^2} + \frac{\eta^2}{4\omega^2} \right) \tan^2(\omega T) \right]}, \tag{3.141}
\end{aligned}$$

et

$$\exp [F_2(T)] = \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{\hbar^2}{4m(t)a^2(t)} dt \right) \quad (3.142)$$

$$\exp [F_2(T)] = \frac{\left[ 1 + \alpha^2 \omega^2 \left[ \frac{\eta}{2\omega} + \left( \frac{1}{\alpha^2 \omega^2} + \frac{\eta^2}{4\omega^2} \right) \tan(\omega T) \right]^2 \right]^{\frac{1}{4}} \left[ 1 + \frac{i\eta\alpha}{2} \right]^{\frac{1}{2}}}{\left[ 1 + \left( \frac{\eta\alpha}{2} \right)^2 \right]^{\frac{1}{4}} \left[ 1 + i\alpha\omega \left[ \frac{\eta}{2\omega} + \left( \frac{1}{\alpha^2 \omega^2} + \frac{\eta^2}{4\omega^2} \right) \tan(\omega T) \right] \right]^{\frac{1}{2}}}, \quad (3.143)$$

la solution  $a(T)$  de l'équation (3.134) est :

$$a(T) = a_0 e^{-\frac{\eta T}{2}} \sqrt{\cos^2(\omega T) + \frac{1}{\alpha^2 \omega^2} \sin^2(\omega T) + \frac{\eta}{2\omega} \left[ \sin 2(\omega T) + \frac{\eta}{2\omega} \sin^2(\omega T) \right]} \quad (3.144)$$

avec toujours  $\alpha = \frac{2m_0 a_0^2}{\hbar}$ . Après insertion de  $a(t)$ ,  $X(t)$  et  $S[X(T)]$  dans la relation du propagateur, on obtient le résultat suivant :

$$K(x, x_0, T) = \sqrt{\frac{m_0 \omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}} e^{\frac{\eta T}{4}} \exp \left\{ \frac{i m_0 \omega e^{\frac{\eta T}{2}}}{2\hbar \sin(\omega T)} [x^2 \left( \cos(\omega T) - \frac{\eta}{2\omega} \sin(\omega T) \right) e^{\frac{\eta T}{2}} + x_0^2 \left( \cos(\omega T) + \frac{\eta}{2\omega} \sin(\omega T) \right) e^{-\frac{\eta T}{2}} - 2x_0 x] \right\} \quad (3.145)$$

qui est le résultat exacte du propagateur du modèle de Kanai-Caldirola [16].

### 3.4.6 Modèle de Kanai-Caldirola forcé

Dans ce modèle le potentiel est donné par :

$$V(x, t) = \frac{1}{2} m_0 e^{\eta t} \omega_0^2 x^2 - f(t)x, \quad (3.146)$$

les équations différentielles de  $X(t)$  et  $a(t)$  deviennent alors :

$$\ddot{X} + \eta\dot{X} + \omega_0^2 X = \frac{f(t)}{m_0}, \quad (3.147)$$

et

$$\ddot{a} + \eta\dot{a} + \omega_0^2 a = \frac{\hbar^2}{4m_0^2 e^{2\eta t} a^3} \quad (3.148)$$

La solution de (3.147) est :

$$X(t) = e^{-\frac{\eta t}{2}} \left[ x_0 \cos(\omega t) + \frac{1}{\omega} \left( v_0 + \frac{\eta}{2} x_0 \right) \sin(\omega t) + \frac{1}{m_0 \omega} \int_0^t f(s) e^{\frac{\eta s}{2}} \sin \omega(t-s) ds \right] \quad (3.149)$$

avec  $\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\eta^2}{4}}$ , d'où on tire :

$$v_0 = \frac{\omega}{\sin \omega T} \left[ X e^{\frac{\eta T}{2}} - \left[ \cos(\omega T) + \frac{\eta}{2\omega} \sin(\omega T) \right] x_0 - \frac{1}{m_0 \sin(\omega T)} \int_0^T f(s) e^{\frac{\eta s}{2}} \sin \omega(T-s) ds \right] \quad (3.150)$$

et le propagateur est alors donné par :

$$K(x, x_0, T) = \int_{-\infty}^{+\infty} dX \frac{\omega}{\sin(\omega T)} e^{\frac{\eta T}{2}} \Theta \left( x, x_0, X, \dot{X}(X) \right) \exp \left( \frac{i}{\hbar} S(X) \right), \quad (3.151)$$

avec

$$\begin{aligned}
\Theta(x, x_0, X, \dot{X}(X)) &= \frac{m(T)}{2\pi\hbar} \left( \frac{a(T)}{a_0} \right)^{-1/2} \exp \left\{ \left( \frac{im(T)\dot{a}(T)}{2\hbar a(T)} - \frac{1}{4a^2(T)} \right) (x - X)^2 \right. \\
&\quad + \frac{im_0 e^{\eta T}}{\hbar} \left( \frac{\omega \cos(\omega T)}{\sin(\omega T)} - \frac{\eta}{2} \right) X (x - X) \\
&\quad - \frac{im_0 \omega x_0 (x - X)}{\hbar \sin(\omega T)} e^{\frac{\eta T}{2}} + \frac{ie^{\frac{\eta T}{2}}}{\hbar \sin(\omega T)} \int_0^T f(s) e^{\frac{\eta s}{2}} \sin(\omega s) ds \\
&\quad \left. - \frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{\hbar^2}{4m(t)a^2(t)} dt \right\} \tag{3.152}
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
S[X] &= \frac{m_0}{2} \left( e^{\eta T} X(T) \dot{X}(T) - x_0 v_0 \right) \\
&= \frac{m_0}{2} \left\{ e^{\eta T} \left( \frac{\omega \cos(\omega T)}{\sin(\omega T)} - \frac{\eta}{2} \right) X^2 - \frac{2\omega x_0 X}{\sin(\omega T)} e^{\frac{\eta T}{2}} \right. \\
&\quad + \left. \left( \frac{\omega \cos(\omega T)}{\sin(\omega T)} + \frac{\eta}{2} \right) x_0^2 \right\} + \frac{e^{\frac{\eta T}{2}} X}{\sin(\omega T)} \int_0^T f(s) e^{\frac{\eta s}{2}} \sin(\omega s) ds \\
&\quad + \frac{x_0}{\sin(\omega T)} \int_0^T f(s) e^{\frac{\eta s}{2}} \sin \omega (T - s) ds \\
&\quad - \frac{1}{m_0 \omega \sin(\omega T)} \int_0^T \int_0^t f(t) f(s) e^{\frac{\eta(t+s)}{2}} \sin \omega (T - t) \sin(\omega s) ds dt \tag{3.153}
\end{aligned}$$

L'intégration sur  $X$  est toujours Gaussienne, le propagateur est alors égale à :

$$\begin{aligned}
K(x, x_0, T) &= \frac{m_0}{2\pi\hbar} \frac{\omega e^{\frac{\eta}{2}T}}{\sin(\omega T)} \left( \frac{a(T)}{a_0} \right)^{-1/2} \sqrt{\frac{\pi}{F_1(T)}} \exp[F_2(T)] \\
&\times \exp \left\{ \frac{im_0}{2\hbar} \frac{\omega e^{\frac{\eta}{2}T}}{\sin(\omega T)} [x^2 \left( \cos(\omega T) - \frac{\eta}{2\omega} \sin(\omega T) \right) e^{\frac{\eta}{2}T} \right. \\
&+ x_0^2 \left( \cos(\omega T) + \frac{\eta}{2\omega} \sin(\omega T) \right) e^{-\frac{\eta}{2}T} - 2x_0x] + \frac{2x}{m_0\omega} \int_0^T f(s) e^{\frac{\eta s}{2}} \sin(\omega s) ds \\
&+ \frac{2x_0 e^{-\frac{\eta}{2}T}}{\sin(\omega T)} \int_0^T f(s) e^{\frac{\eta s}{2}} \sin \omega(T-s) ds \\
&\left. - \frac{2e^{-\frac{\eta}{2}T}}{m_0^2\omega^2} \int_0^T \int_0^t f(t)f(s) e^{\frac{\eta(t+s)}{2}} \sin \omega(T-t) \sin(\omega s) ds dt \right\} \quad (3.154)
\end{aligned}$$

Avec les mêmes expressions pour  $F_1(T)$ ,  $\exp[F_2(T)]$  et  $a(T)$  obtenues dans le cas du Kanai-caldirola (non forcé), on obtient le résultat suivant pour le propagateur :

$$\begin{aligned}
K(x, x_0, T) &= \sqrt{\frac{m_0\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}} e^{\frac{\eta T}{4}} \exp \left\{ \frac{im_0}{2\hbar} \frac{\omega e^{\frac{\eta}{2}T}}{\sin(\omega T)} [x^2 \left( \cos(\omega T) - \frac{\eta}{2\omega} \sin(\omega T) \right) e^{\frac{\eta}{2}T} \right. \\
&+ x_0^2 \left( \cos(\omega T) + \frac{\eta}{2\omega} \sin(\omega T) \right) e^{-\frac{\eta}{2}T} - 2x_0x] + \frac{2x}{m_0\omega} \int_0^T f(s) e^{\frac{\eta s}{2}} \sin(\omega s) ds \\
&+ \frac{2x_0 e^{-\frac{\eta}{2}T}}{\sin(\omega T)} \int_0^T f(s) e^{\frac{\eta s}{2}} \sin \omega(T-s) ds \\
&\left. - \frac{2e^{-\frac{\eta}{2}T}}{m_0^2\omega^2} \int_0^T \int_0^t f(t)f(s) e^{\frac{\eta(t+s)}{2}} \sin \omega(T-t) \sin(\omega s) ds dt \right\} \quad (3.155)
\end{aligned}$$

c'est le même résultat que celui donné dans la référence [16].

On voit bien que les calculs se compliquent d'avantage lorsqu'on passe d'une masse constante à une masse dépendante du temps (cas Kanai-Caldirola et Kanai-Caldirola forcé). Pour simplifier les calculs, on va appliquer la technique de transformation spatio-

temporelle et on va voir l'efficacité de cette technique qui va relier les deux propagateurs celui de Kanai-Caldirola (masse dépendante du temps) à celui de l'oscillateur harmonique (masse constante) par des calculs plus simples.

### 3.5 Transformation Spatio-Temporelle dans la théorie de de Broglie-Bohm

Nous avons montré dans la section précédente que le support physique de la théorie de de Broglie-Bohm reste le même malgré l'introduction d'une masse dépendante du temps. Dans cette intention, on présente la technique de la transformation spatio-temporelle bien connue dans le formalisme d'intégrale de chemin de Feynman.

On introduit alors la transformation spatio-temporelle suivante :

$$x = \lambda(s) y \quad \text{et} \quad s(t) = \int^t d\tau \mu(\tau), \quad (3.156)$$

où  $\lambda(s)$  et  $\mu(\tau) > 0$  sont des fonctions arbitraires. En plus, nous imposons à ce changement qu'il décrit la même physique, en d'autres termes, selon l'interprétation de probabilité, nous avons :

$$dP = \rho(x, t) dx \quad \text{et} \quad d\bar{P} = \bar{\rho}(y, s) dy, \quad (3.157)$$

$d\bar{P}$  c'est la nouvelle interprétation de probabilité (la même interprétation physique) et  $\bar{\rho}(y, s)$  sa densité dans le nouveau système de coordonnées.

A partir de l'égalité  $dP = d\bar{P}$ , on déduit :

$$\rho[x(y, s), t(y, s)] = \frac{\bar{\rho}(y, s)}{\lambda(s)}. \quad (3.158)$$

Il est facile de s'assurer que  $\bar{\rho}(y, s)$  vérifie l'équation de conservation de probabilité suivante :

$$\frac{\partial \bar{\rho}(y, s)}{\partial s} + \frac{\partial}{\partial y} [\bar{\rho}(y, s) \bar{v}(y, s)] = 0, \quad (3.159)$$

avec  $\bar{v}(y, s) = \frac{dy}{ds}$  la nouvelle vitesse.

En effet, nous avons :

$$\frac{\partial}{\partial t} = \mu \left( \frac{\partial}{\partial s} - \frac{\lambda'}{\lambda} y \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \text{avec} \quad \lambda' = \frac{d\lambda}{ds}, \quad (3.160)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{\lambda} \frac{\partial}{\partial y}, \quad (3.161)$$

$$v = \mu (\lambda' y + \lambda \bar{v}). \quad (3.162)$$

En remplaçant ces changements  $(\rho, v, \frac{\partial}{\partial t}$  et  $\frac{\partial}{\partial x})$  dans l'équation de continuité (3.26), un calcul direct donne la nouvelle équation (3.159). Maintenant, voyons comment va devenir l'équation d'évolution de l'action  $S(x, t)$  (3.27). Restant dans l'esprit de la théorie de de Broglie-Bohm, nous devons faire le changement suivant  $(v, S) \rightarrow (\bar{v}, \bar{S})$  conditionné par :

$$v(x, t) = \frac{1}{m(t)} \frac{\partial S}{\partial x} \quad \text{et} \quad \bar{v}(y, s) = \frac{1}{M_0} \frac{\partial \bar{S}}{\partial y}, \quad (3.163)$$

où  $M_0$  est une masse constante, à partir des équations (3.161), (3.162) et (3.163), nous identifions :

$$\frac{\partial S}{\partial y} = \frac{\mu m \lambda^2}{M_0} \frac{\partial \bar{S}}{\partial y} + \mu m \lambda \lambda' y, \quad (3.164)$$

un choix naturel de

$$\frac{\mu m \lambda^2}{M_0} = 1, \quad (3.165)$$

donne

$$S = \bar{S} + \frac{M_0 \lambda'}{2\lambda} y^2, \quad (3.166)$$

et la nouvelle équation d'évolution de  $S(x, t)$  est alors donnée par :

$$\frac{\partial \bar{S}(y, s)}{\partial s} + \frac{1}{2M_0} \left( \frac{\partial \bar{S}}{\partial y} \right)^2 + \bar{V}_{eff}(y, s) + \bar{V}_q(y, s) = 0, \quad (3.167)$$

avec

$$\bar{V}_q(y, s) = V_q[x(y, s), t(y, s)] = -\frac{\hbar^2}{2M_0\sqrt{\bar{\rho}}} \frac{\partial^2 \sqrt{\bar{\rho}}}{\partial y^2}, \quad (3.168)$$

$$\bar{V}_{eff}(y, s) = \frac{1}{\mu} V[x(y, s), t(y, s)] + \frac{M_0}{2} \left[ \frac{d}{ds} \left( \frac{\lambda'}{\lambda} \right) - \left( \frac{\lambda'}{\lambda} \right)^2 \right] y^2. \quad (3.169)$$

En bref, le problème est réduit à la résolution du système d'équations(3.159, 3.163, 3.167, 3.168 et 3.169) qui est le même que celui de la théorie de de Broglie-Bohm avec une masse constante  $M_0$ . La relation entre l'ancienne et la nouvelle fonction d'onde est établie à partir de (2.56, 3.158 et 3.166) :

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \sqrt{\rho(x, t)} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S(x, t) \right] = \sqrt{\frac{\bar{\rho}(y, s)}{\lambda(s)}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( \bar{S}(y, s) + \frac{M_0 \lambda'(s)}{2\lambda(s)} y^2 \right) \right], \\ &= \sqrt{\frac{1}{\lambda(s)}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \frac{M_0 \lambda'(s)}{2\lambda(s)} y^2 \right] \bar{\Psi}(y, s), \end{aligned} \quad (3.170)$$

avec

$$\bar{\Psi}(y, s) = \sqrt{\bar{\rho}(y, s)} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \bar{S}(y, s) \right]. \quad (3.171)$$

Nous sommes en mesure maintenant d'établir la relation entre les deux propagateurs, celui de Kanai-Caldirola (masse dépendante du temps) et celui de l'oscillateur harmonique (masse constante).

En effet à partir de (3.162) et (3.170) nous avons :

$$\Phi(v_0, x, t) = [2\pi a_0^2]^{1/4} \sqrt{\frac{1}{\lambda(s)}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \frac{M_0 \lambda'(s)}{2\lambda(s)} y^2 \right] \bar{\Psi}(y, s), \quad (3.172)$$

avec

$$\begin{aligned} v_0 &= \mu(0) [\lambda'(0)y(0) + \lambda(0)\bar{v}_0], \\ dv_0 &= \mu(0)\lambda(0)d\bar{v}_0, \end{aligned}$$

et à partir de l'équation (3.67) qui définit le propagateur :

$$K_{KC}(x_2, t; x_1, 0) = \frac{m_0}{2\pi\hbar} \int dv_0 \Phi(v_0, x_2, t) \Phi^*(v_0, x_1, 0), \quad (3.173)$$

nous déduisons

$$K_{KC}(x_2, t; x_1, 0) = \sqrt{\frac{1}{\lambda(s)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{M_0 \lambda'(s)}{2\lambda(s)} y_2^2\right] K_{HO}(y_2, s; y_1, 0) \sqrt{\frac{1}{\lambda(0)}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \frac{M_0 \lambda'(0)}{2\lambda(0)} y_1^2\right], \quad (3.174)$$

avec

$$K_{HO}(y_2, s; y_1, 0) = \left[ \frac{M_0}{2\pi\hbar} \int d\bar{v}_0 \bar{\Phi}(\bar{v}_0, y_2, s) \bar{\Phi}^*(\bar{v}_0, y_1, 0) \right], \quad (3.175)$$

et

$$\bar{\Phi}(\bar{v}_0, y, s) = \left[ 2\pi \left( \frac{a_0}{\lambda(0)} \right)^2 \right]^{1/4} \bar{\Psi}(y, s), \quad (3.176)$$

notons que dans (3.173)  $m_0 = m(0)$  est une conséquence de la conservation du volume de l'espace des phases due au théorème de Liouville.

Pour finir, déterminons les fonctions  $\lambda(s)$  et  $\mu(s)$  qui rendent possible de ramener le problème à celui de l'oscillateur harmonique. On impose aux équations (3.165) et (3.169) les conditions suivantes :

$$\mu m_0 e^{nt} \lambda^2 = M_0, \quad (3.177)$$

$$\bar{V}_{eff}(y, s) = \frac{\lambda^2 m_0 e^{nt}}{\mu} \frac{1}{2} \omega_0^2 y^2 + \frac{M_0}{2} \left[ \frac{d}{ds} \left( \frac{\lambda'}{\lambda} \right) - \left( \frac{\lambda'}{\lambda} \right)^2 \right] y^2 = \frac{1}{2} M_0 \Omega_0^2 y^2, \quad (3.178)$$

avec  $M_0$  et  $\Omega_0$  constants. Il est facile de montrer qu'on peut écrire (3.178) suivant la forme suivante :

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\dot{\lambda}}{\lambda} \right) - \frac{\dot{\mu}}{\mu} \left( \frac{\dot{\lambda}}{\lambda} \right) - \left( \frac{\dot{\lambda}}{\lambda} \right)^2 = \Omega_0^2 \mu^2 - \omega_0^2, \quad (3.179)$$

avec  $\dot{\lambda} = \frac{d\lambda}{dt}$ .

Dans (3.179), nous choisissons  $\frac{\dot{\mu}}{\mu} = 0$ , ce qui donne :

$$\mu = \mu(0) \quad \text{et} \quad \lambda = \sqrt{\frac{M_0}{\mu(0)m_0}} \exp(-\eta t/2). \quad (3.180)$$

Comme nous l'avons vu dans la section précédente, le propagateur de l'oscillateur harmonique est donné par :

$$K(y, y_0, s) = \sqrt{\frac{M_0 \Omega_0}{2\pi i \hbar \sin(\Omega_0 s)}} \exp\left(\frac{i M_0 \Omega_0}{2\hbar \sin(\Omega_0 s)} [(y^2 + y_0^2) \cos(\Omega_0 s) - 2yy_0]\right), \quad (3.181)$$

Maintenant on utilise la relation entre les deux propagateurs :

$$K_{KC}(x, t; x_0, 0) = \sqrt{\frac{1}{\lambda(s)\lambda(0)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(\frac{M_0 \lambda'(s)}{2 \lambda(s)} y^2 - \frac{\lambda'(0)}{\lambda(0)} y_0^2\right)\right) K_{HO}(y, s; y_0, 0) \quad (3.182)$$

avec :

$$\frac{\lambda'(s)}{\lambda(s)} = \frac{\lambda'(0)}{\lambda(0)} = -\frac{\eta}{2\mu(0)} \quad (3.183)$$

$$x = \lambda(s)y \quad \text{et} \quad x_0 = \lambda(0)y_0 \quad (3.184)$$

$$s(t) = \mu(0)t \quad (3.185)$$

Après calcul, on retrouve le même résultat du propagateur du modèle de Kanai-Caldirola que celui trouvé dans la section précédente (3.145) :

$$K(x, x_0, t) = \sqrt{\frac{m_0 \omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)}} e^{\frac{\eta t}{4}} \exp \left\{ \frac{i m_0 \omega e \frac{\eta t}{2}}{2 \hbar \sin(\omega t)} \left[ x^2 \left( \cos(\omega t) - \frac{\eta}{2\omega} \sin(\omega t) \right) e^{\frac{\eta t}{2}} + x_0^2 \left( \cos(\omega t) + \frac{\eta}{2\omega} \sin(\omega t) \right) e^{-\frac{\eta t}{2}} - 2x_0 x \right] \right\}, \quad (3.186)$$

avec

$$\omega = \Omega_0 \mu(0) = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\eta^2}{4}}, \quad (3.187)$$

et

$$\Omega_0 s = \Omega_0 \mu(0) t = \omega t. \quad (3.188)$$

### 3.6 Conclusions

1- La technique des transformations spatio-temporelles a été appliquée en analogie avec la version intégrale de chemins. Effectivement, les calculs ont été réduits d'une façon considérable et le modèle de Kanai-Caldirola a été simplement converti en celui de l'oscillateur harmonique. Ce qui montre l'efficacité du formalisme.

2- Cette même technique pourrait être appliquée au cas d'un potentiel non quadratique défini par le lagrangien :

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x, t). \quad (3.189)$$

En effet, en introduisant la transformation spatio-temporelle suivante :

$$x = f(y), \quad \frac{dt}{ds} = \left[ f'(y(s)) \right]^2$$

et en suivant les mêmes étapes que précédemment on arrive en principe à

$$\frac{\partial \bar{\rho}(y, s)}{\partial s} + \frac{\partial}{\partial y} [\bar{\rho}(y, s) \bar{v}(y, s)] = 0, \quad (3.190)$$

$$\frac{\partial \bar{S}(y, s)}{\partial s} + \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial \bar{S}}{\partial y} \right)^2 + \bar{V}_{eff}(y, s) + \bar{V}_q(y, s) = 0, \quad (3.191)$$

où

$$\bar{V}_q(y, s) = V_q[x(y, s), t(y, s)] = -\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{\bar{\rho}}} \frac{\partial^2 \sqrt{\bar{\rho}}}{\partial y^2}, \quad (3.192)$$

$$\bar{V}_{eff}(y, s) = \left[ f'(y(s)) \right]^2 V[y(s), s] + \frac{3\hbar^2}{8m} \left[ \left( \frac{f''(y(s))}{f'(y(s))} \right)^2 - \frac{2}{3} \frac{f'''(y(s))}{f'(y(s))} \right]. \quad (3.193)$$

Le choix de  $f(y)$  se fait de manière à simplifier le problème. Cette technique est bien connue dans les cas de l'intégrale de chemin et a été amplement exploitée et a permis à la technique de Feynman de se développer. En fait, la correction apportée par cette transformation est purement quantique puisqu'elle est de l'ordre de  $\hbar^2$  et elle pourrait être incorporée dans le potentiel quantique de Bohm, ie,

$$W_q(y, s) = -\frac{\hbar^2}{2M_0\sqrt{\bar{\rho}}} \frac{\partial^2 \sqrt{\bar{\rho}}}{\partial y^2} + \frac{3\hbar^2}{8m} \left[ \left( \frac{f''(q(s))}{f'(q(s))} \right)^2 - \frac{2}{3} \frac{f'''(q(s))}{f'(q(s))} \right] \quad (3.194)$$

Ceci peut être compris en considérant le cas de la masse variable puisque la transformation  $x = f(y)$  est à l'origine de cette variation de la masse dite masse locale.

3- Considérons alors le cas de la particule dotée d'une masse dépendante de la position, modèle intéressant et utile pour l'étude de beaucoup de problèmes physiques. L'équation de Schrödinger associée à cette particule s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad (3.195)$$

où l'opérateur hamiltonien  $\hat{H}$  est donné par [17] :

$$\hat{H} = \hat{\mathbf{p}} \left( \frac{1}{2m(\mathbf{r})} \right) \hat{\mathbf{p}} + V(\mathbf{r}, t). \quad (3.196)$$

à partir de (3.25, 3.195 et 3.196) on obtient le système d'équations suivant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left[ \rho \frac{\nabla S}{m(\mathbf{r})} \right] = 0 \quad (3.197)$$

et

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m(\mathbf{r})} + V + \bar{V}_q = 0 \quad (3.198)$$

où le potentiel quantique est donné par :

$$\bar{V}_q = V_q + V_m \quad (3.199)$$

avec

$$V_q(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar^2}{2m(\mathbf{r})} \left\{ \frac{1}{4\rho^2} (\nabla \rho)^2 - \frac{1}{2\rho} \nabla^2 \rho \right\}, \quad (3.200)$$

et

$$V_m(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{4\rho} (\nabla \rho) \cdot \nabla \left( \frac{1}{m} \right). \quad (3.201)$$

On voit bien que le potentiel quantique  $\bar{V}_q$  contient deux contributions, la première c'est le potentiel quantique ordinaire  $V_q$  tandis que la deuxième  $V_m$  elle est due à la dépendance de la masse de position, contribution analogue à ce qui a été dit précédemment. L'équation (3.198) a la forme de l'équation de Hamilton-Jacobi pour une particule classique décrite par l'hamiltonien :

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m(\mathbf{r})} + V(\mathbf{r}) + \bar{V}_q(\mathbf{r}), \quad (3.202)$$

4-Il est vrai que dans la construction du propagateur nous avons employé la limite semi-classique, la fonction d'onde localisée (de courte longueur d'onde) et les résultats de

la mécanique quantique standard, dû au fait qu'on cherche un propagateur qui satisfait le principe de superposition. Si on impose un esprit Bohmien, on devrait établir le propagateur entre deux points infinitésimaux partant de l'onde de de Broglie-Bohm comme suit [18] :

$$\Psi(x + dx, t + dt) \simeq \left[ 1 + \frac{i}{\hbar} \mathcal{L}_q dt - \frac{1}{2} \frac{\partial v}{\partial x} dt \right] \Psi(x, t) \quad (3.203)$$

avec  $\mathcal{L}_q$  représentant le Lagrangien quantique de la théorie défini par :

$$\mathcal{L}_q = \frac{1}{2m(t)} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 - [V(x, t) + V_q(x, t)]$$

Pour avoir (3.203) nous avons employé les équations (3.26, 3.27, 3.28, 3.29). Une intégration formelle de cette équation donne ce qu'on appelle l'évolution globale ou "intégrale de chemin" de Bohm, et on écrit :

$$\Psi(x, t) = \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{L}_q dt - \frac{1}{2} \int_0^t \frac{\partial v}{\partial x} dt \right] \Psi(x(0), 0). \quad (3.204)$$

Cette formule est sémiilaire à celle de l'intégrale de chemin de Feynman où l'interférence des chemins est remplacée par une propriété non locale inhérente à la théorie, qu'on peut écrire sous la forme suivante :

$$\Psi(x, t) = \int dx(t) \delta(x - x(t)) J^{-1/2} [x(t), x(0)] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S [x(t), x(0)] \right] \Psi(x(0), 0), \quad (3.205)$$

où  $J [x(t), x(0)]$  représente le Jacobien de transformation du volume  $dx(0)$  au  $dx(t)$  donné par :

$$J [x(t), x(0)] = \exp \left( \int_0^t \frac{\partial v}{\partial x} dt \right), \quad (3.206)$$

et  $S [x(t), x(0)]$  est l'action quantique :

$$S [x(t), x(0)] = \int_0^t \mathcal{L}_q dt \quad (3.207)$$

Dans cette approche globale  $\mathcal{L}_q$  est responsable de l'évolution quantique et assure l'équation quantique de Hamilton-Jacobi (3.27) et le jacobien  $J$  assure la conservation de probabilité, c'est à dire l'équation de continuité (3.29).

# Chapitre 4

## L'effet Tunnel

### 4.1 Approximation WKB

Trois classes de méthodes d'approximation sont généralement utilisées en mécanique quantique, les techniques de perturbation, les méthodes variationnelles et en fin les approximations semi-classiques. Parmi ces dernières on cite la méthode WKB (Wentzel, Kramers et Brillouin). C'est une technique puissante pour acquérir une approximation globale à la solution des équations différentielles linéaires, son application la plus popularisée c'est à la mécanique quantique et à l'équation de Schrödinger en particulier elle est couramment employée pour résoudre les problèmes liés à l'effet tunnel à une dimension, la méthode peut être également appliquée aux problèmes bidimensionnels et tridimensionnels [19]

Supposons que nous voulons trouver une solution approximative de l'équation de Schrödinger :

$$\Psi''(x) + Q(x)\Psi(x) = 0, \quad (4.1)$$

avec

$$Q^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]. \quad (4.2)$$

L'idée de base est simple, si  $V(x)$  est constant, (4.1) admet la solution  $e^{\pm ik(x)}$ , ceci suggère que si  $V(x)$  change lentement avec  $x$ , alors on pourra choisir une solution de la forme :

$$\Psi(x) = \exp[\Phi(x)] \quad (4.3)$$

introduisons (4.3) dans (4.1), on obtient :

$$\Phi''(x) + [\Phi'(x)]^2 + \Phi(x) = 0 \quad (4.4)$$

Maintenant on transforme (4.4) à l'équation de Riccati en faisant le changement suivant :

$$\Phi'(x) = y(x) \quad (4.5)$$

ce qui donne :

$$y'(x) + y^2(x) + Q(x) = 0 \quad (4.6)$$

Il faut noter que dans les problèmes de l'effet tunnel,  $y(x)$  est en général une fonction complexe, donc on l'écrit suivant la forme :

$$y(x) = \alpha(x) + i\beta(x) \quad (4.7)$$

remplaçons (4.7) dans (4.6) et séparant les parties réelle et imaginaire, nous obtenons deux équations différentielles de premier ordre :

$$\alpha'(x) + \alpha^2 - \beta^2 + Q(x) = 0, \quad (4.8)$$

et

$$\beta'(x) + 2\alpha\beta = 0, \quad (4.9)$$

l'équation (4.9) peut être intégrée, elle donne :

$$\int \alpha(x) dx = \ln \left( \frac{1}{\sqrt{\beta(x)}} \right) + C, \quad (4.10)$$

à partir des équations (4.5, 4.7, et 4.3), nous trouvons  $\Phi(x)$  et  $\Psi(x)$  :

$$\Phi(x) = \ln \left( \frac{1}{\sqrt{\beta(x)}} \right) + i \int \beta(x) dx, \quad (4.11)$$

et

$$\Psi(x) = \exp[\Phi(x)] = \frac{1}{\sqrt{\beta(x)}} \left[ A_1 \cos \left( \int \beta(x) dx \right) + A_2 \sin \left( \int \beta(x) dx \right) \right]. \quad (4.12)$$

Cette expression de  $\Psi(x)$  est une solution exacte de l'équation (4.1), on observe que si dans (4.8) on ignore  $\alpha$  et  $\alpha'$ , on aura une équation algébrique pour la fonction inconnue  $\beta(x)$  :

$$\beta(x) = \sqrt{Q(x)} \quad (4.13)$$

si  $Q(x) > 0$ , on a :

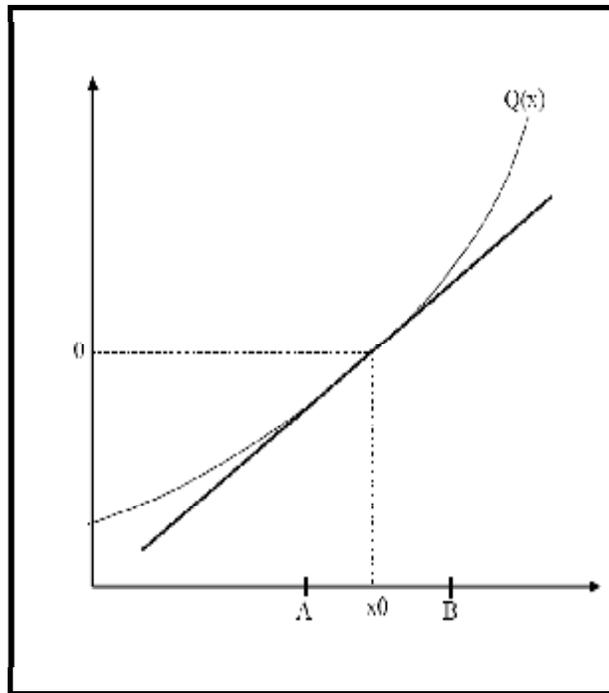
$$\Psi(x) = \frac{1}{[Q(x)]^{\frac{1}{4}}} \exp \left[ i \int \sqrt{Q(x)} dx - \theta \right] \quad (4.14)$$

dans le cas contraire, c'est à dire  $Q(x) < 0$ , on a alors :

$$\Psi(x) = \frac{1}{[-Q(x)]^{\frac{1}{4}}} \left[ A_1 \exp \left( \int \sqrt{-Q(x)} dx \right) + A_2 \exp \left( - \int \sqrt{-Q(x)} dx \right) \right]. \quad (4.15)$$

Les équations (4.8) et (4.9) montrent que cette approximation n'est plus valide lorsque  $Q(x)$  est petite ou nulle, mais acceptable tant que  $Q(x)$  reste grande.

Dans les problèmes de l'effet tunnel  $Q(x)$  qui est égale à  $\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]}$  change de signe lorsque la particule traverse la barrière, comme  $Q(x)$  est une fonction continue, donc automatiquement elle passera par la valeur zéro. On suppose que la méthode WKB n'est pas valide pour tous les points de l'axe des  $x$  compris entre A et B, c'est à dire l'intervalle où  $Q(x)$  change de signe (figure1).



**Figure 01 :** Le potentiel est remplacé approximativement par une fonction linéaire entre les points A et B

FIG. 4-1 –

Si  $Q(x)$  varie lentement, on peut l'écrire sous la forme suivante :

$$Q(x) = a(x - x_0) \quad A \leq x \leq B \quad (4.16)$$

L'équation de Schrödinger sur ce segment  $AB$  (avec l'origine des coordonnées coïncidant avec  $x_0$ ) s'écrit :

$$\Psi''(x) + ax\Psi(x) = 0 \quad A \leq x \leq B, \quad (4.17)$$

la solution de (4.17) est donnée par la fonction de Bessel de type [19] :

$$\Psi(x) = x^\nu J_p(\beta x^\alpha) \quad (4.18)$$

insérant (4.18) dans (4.17), on obtient :

$$\Psi''(x) + \left(\frac{1-2\gamma}{x}\right)\Psi'(x) + \left(\alpha^2\beta^2x^{2\alpha-2} + \frac{\gamma^2 - \alpha^2p^2}{x^2}\right)\Psi(x) = 0 \quad (4.19)$$

En comparant (4.19) avec (4.18), on tire :

$$\alpha = \frac{3}{2}, \quad \gamma = \frac{1}{2}, \quad p = \frac{1}{3} \quad \text{et} \quad \alpha^2\beta^2 = a \quad (4.20)$$

si on pose  $\beta = 1$ , on aura alors  $a = \frac{9}{4}$ .

Ainsi nous pouvons écrire la solution de l'équation (4.18) en termes de fonctions de Bessel :

$$\Psi(x) = \sqrt{x} [A_1 J_{1/3}(x^{3/2}) + A_2 J_{-1/3}(x^{3/2})] \quad (4.21)$$

Maintenant, on essaye de trouver la formule de raccordement de la fonction d'onde entre les deux régions, de la région où  $Q(x)$  est négative à la région où  $Q(x)$  est positive.

Nous avons :

$$Q(x) = \frac{9}{4}x, \quad (4.22)$$

donc

$$\int_0^x \sqrt{Q(x)} = \frac{3}{2} \int_0^x x^{\frac{1}{2}} dx = x^{3/2}, \quad (4.23)$$

de la même manière si  $Q(x) < 0$ , on fait le changement  $x = -z$ , et on trouve :

$$\int_0^{-x} \sqrt{-Q(x)} = -z^{3/2}. \quad (4.24)$$

On choisit le point  $x = x_0$  où  $Q(x_0) = 0$  comme référence. Donc pour  $Q(x) < 0$ , on écrit  $\Psi(x)$  suivant :

$$\Psi(x) = \frac{1}{[-Q(x)]^{\frac{1}{4}}} \left[ A_1 \exp \left( \int_{x_0}^x \sqrt{-Q(x)} dx \right) + A_2 \exp \left( - \int_{x_0}^x \sqrt{-Q(x)} dx \right) \right] \quad (4.25)$$

de la même façon, lorsque  $Q(x) > 0$ ,  $\Psi(x)$  aura la forme suivante :

$$\Psi(x) = \frac{1}{[Q(x)]^{\frac{1}{4}}} \left[ A'_1 \exp \left( i \int_{x_0}^x \sqrt{Q(x)} dx \right) + A'_2 \exp \left( -i \int_{x_0}^x \sqrt{Q(x)} dx \right) \right] \quad (4.26)$$

Notons que les constantes  $A_1, A_2, A'_1$  et  $A'_2$  sont reliés entre eux par les relations suivantes :

$$A'_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ (1-i) A_1 + \frac{1}{2} (1+i) A_2 \right] \quad (4.27)$$

$$A'_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ (1+i) A_1 + \frac{1}{2} (1-i) A_2 \right] \quad (4.28)$$

## 4.2 Applications

### 4.2.1 Transmission à travers une barrière

On peut utiliser la fonction d'onde WKB pour calculer le coefficient de transmission à travers une barrière. La particule arrive de la gauche avec une énergie insuffisante classiquement pour franchir la barrière. On écrit la solution de l'équation de Schrödinger dans les trois régions indiquées sur la figure 2 :

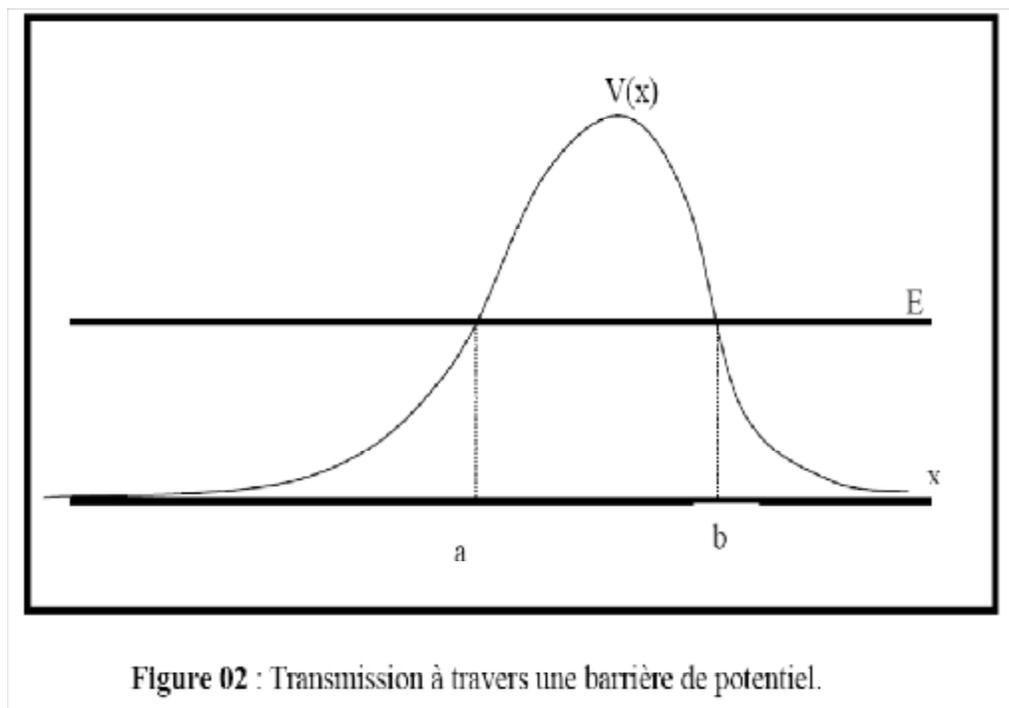


FIG. 4-2 –

$$\Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \exp i \int_a^x k(x) dx + \frac{B}{\sqrt{k(x)}} \exp -i \int_a^x k(x) dx, \quad (x < a) \quad (4.29)$$

$$= \frac{C}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp - \int_a^x \kappa(x) dx + \frac{D}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp + \int_a^x \kappa(x) dx, \quad (a < x < b) \quad (4.30)$$

$$= \frac{F}{\sqrt{k(x)}} \exp i \int_b^x k(x) dx + \frac{B}{\sqrt{k(x)}} \exp -i \int_b^x k(x) dx \quad , \quad (b < x) \quad (4.31)$$

En utilisant les formules de connection (raccordement aux points tournants), c'est-à-dire l'égalité entre les fonctions d'ondes et leurs dérivées premières aux points de rebroussement, nous trouvons les relations entre les coefficients  $A, B, C, D, F$  et  $G$  via la matrice suivante [20] :

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 \exp \sigma + \frac{1}{2 \exp \sigma} & i \left( 2 \exp \sigma - \frac{1}{2 \exp \sigma} \right) \\ -i \left( 2 \exp \sigma - \frac{1}{2 \exp \sigma} \right) & 2 \exp \sigma + \frac{1}{2 \exp \sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

avec

$$\exp \sigma = \exp \int_a^b \sqrt{\kappa(x)} dx \quad , \quad \kappa(x) = ik(x) \quad (4.33)$$

$\exp \sigma$  mesure la taille et l'épaisseur de la barrière en fonction de l'énergie.

Il faut noter que pour trouver le résultat (4.32), il faut faire attention lors de l'application des relations de connection aux points tournants, en effet à ces points  $E = V$  et l'application de l'approximation WKB n'est plus valide, c'est pour cette raison qu'il faut utiliser le développement asymptotique aux points de rebroussement. Lorsque le point tournant est à gauche de la barrière (figure3), on a :

$$\frac{2}{\sqrt{k(x)}} \cos \left( \int_x^a k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right) \leftarrow \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left( - \int_a^x \kappa(x) dx \right) \quad (4.34)$$

$$\frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin \left( \int_x^a k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right) \rightarrow \frac{-1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left( + \int_a^x \kappa(x) dx \right) \quad (4.35)$$

dans le cas où le point tournant est à droite de la barrière ( figure4), on a :

$$\frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left( - \int_x^b \kappa(x) dx \right) \rightarrow \frac{2}{\sqrt{k(x)}} \cos \left( \int_b^x k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right) \quad (4.36)$$

$$\frac{-1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left( + \int_x^b \kappa(x) dx \right) \leftarrow \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin \left( \int_b^x k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right) \quad (4.37)$$

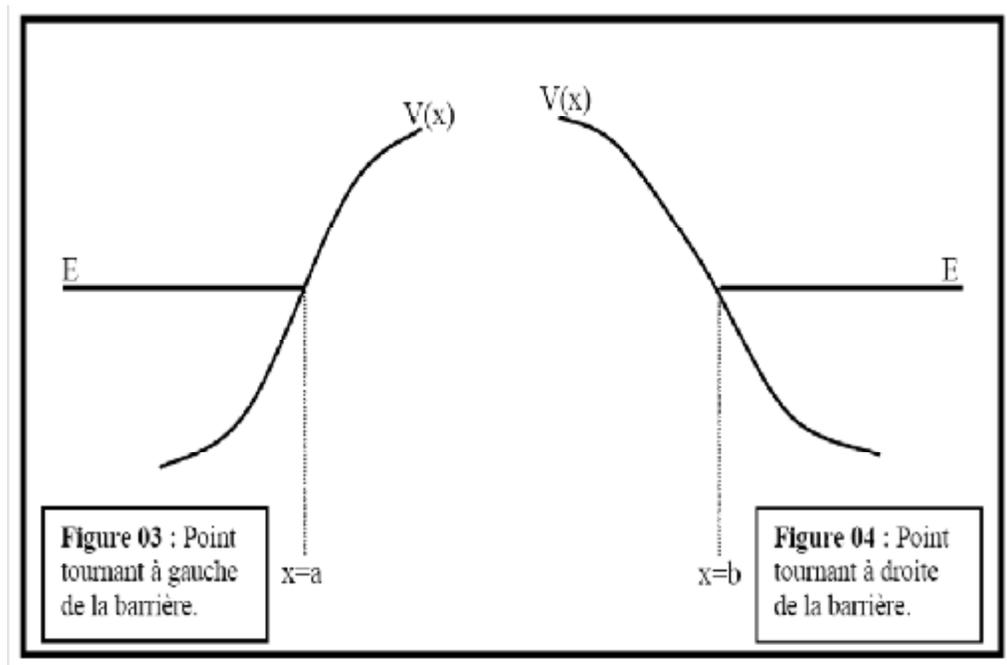


FIG. 4-3 –

Le coefficient de transmission est défini par :

$$T = \frac{|\Psi_{tran}|^2 v_{tran}}{|\Psi_{inc}|^2 v_{inc}} = \frac{|\Psi_{tran} \sqrt{\kappa_{tran}}|^2}{|\Psi_{inc} \sqrt{\kappa_{inc}}|^2} = \frac{|F|^2}{|A|^2}. \quad (4.38)$$

En supposant qu'il n'y a pas d'onde incidente de la droite de la barrière, c'est à dire  $G = 0$  et à partir de (4.32), on a alors :

$$T = \frac{4}{\left(2 \exp \sigma + \frac{1}{2 \exp \sigma}\right)^2} = \frac{\exp -2\sigma}{\left(1 + \frac{1}{4} \exp -2\sigma\right)^2} \quad (4.39)$$

pour une barrière large et grande,  $\exp \sigma \gg 1$ , et le coefficient de transmission est égale dans ce cas :

$$T \simeq \exp \left( -2 \int_a^b \kappa(x) dx \right) \quad (4.40)$$

### 4.2.2 Dédoublément du niveau d'énergie

Une autre application de la fonction d'onde WKB, c'est le calcul de dédoublement des niveaux d'énergie d'un double puit de potentiel symétrique. Soit le double puit de potentiel représenté dans la figure 5 où les deux puits sont séparés par la barrière centrale. Si la barrière était impénétrable (hauteur infinie), alors les niveaux d'énergie correspondraient au mouvement de la particule dans un des deux puits. Mais si la barrière était de hauteur finie, alors l'affranchissement de la barrière par effet tunnel est possible, dans ce cas chaque niveau se divise en deux niveaux qui correspondent au mouvement de la particule dans les deux puits en même temps.

On note par  $E_0$  le niveau fondamental (le plus bas) et par  $\Psi_0$  la fonction d'onde correspondante dans le puit de gauche. La fonction d'onde entre les deux points tournants est donnée par :

$$\Psi_0(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[ \frac{1}{\hbar} \int_{-b}^x p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right], \quad -b \leq x \leq a \quad (4.41)$$

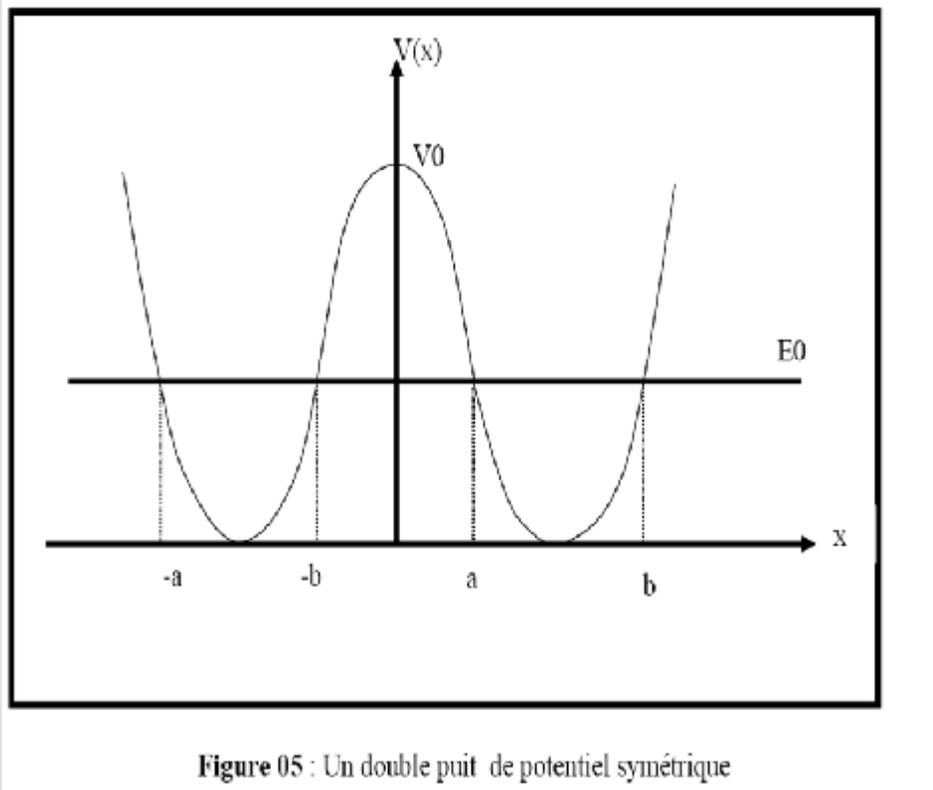


FIG. 4-4 –

et à l'intérieur de la barrière par :

$$\Psi_0(x) = \frac{-iC}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[ \frac{1}{\hbar} \left| \int_{-a}^x p(x) dx \right| \right], \quad x \geq -a \quad (4.42)$$

avec  $p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$ . La constante  $C$  est déterminée par la condition de normalisation :

$$\int_{-b}^{-a} |\Psi_0(x)|^2 dx = 1 \quad (4.43)$$

ce qui donne :

$$C^2 \int_{-b}^{-a} \frac{dx}{p(x)} \sin^2 \left[ \frac{1}{\hbar} \int_{-b}^x p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right] = 1, \quad (4.44)$$

comme  $\sin^2 \left[ \frac{1}{\hbar} \int_{-b}^x p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right]$  change rapidement (oscille très vite), on l'a remplacé par sa valeur moyenne  $1/2$ .

$$\frac{1}{2} C^2 \int_{-b}^{-a} \frac{dx}{p(x)} = 1. \quad (4.45)$$

On définit  $T_0$  par la relation :

$$T_0 = 2m \int_{-b}^{-a} \frac{dx}{p(x)} \quad (4.46)$$

$T_0$  est la période d'oscillation et  $\omega = \frac{2\pi}{T_0}$  c'est la fréquence d'oscillation dans le puit de gauche.

Tenant compte de la faible probabilité de franchissement de la barrière, le niveau d'énergie  $E_0$  se dédouble en niveaux  $E_1$  et  $E_2$  de fonctions d'onde linéaires symétrique et antisymétrique de  $\Psi_0(x)$  et  $\Psi_0(-x)$  [21]:

$$\Psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_0(x) + \Psi_0(-x)] \quad (4.47)$$

$$\Psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_0(x) - \Psi_0(-x)]. \quad (4.48)$$

Notons que les fonctions d'onde  $\Psi_1(x)$  et  $\Psi_2(x)$  sont normalisées. Ecrivons les équations de Schrödinger pour les fonctions d'onde  $\Psi_0(x)$  et  $\Psi_1(x)$  :

$$\Psi_0''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E_0 - V] \Psi_0(x) = 0 \quad (4.49)$$

$$\Psi_1''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E_1 - V] \Psi_1(x) = 0, \quad (4.50)$$

multiplions (4.49) par  $\Psi_1(x)$  et (4.50) par  $\Psi_0(x)$  :

$$\Psi_1(x) \Psi_0''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E_0 - V] \Psi_1(x) \Psi_0(x) = 0 \quad (4.51)$$

$$\Psi_0(x) \Psi_1''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E_0 - V] \Psi_0(x) \Psi_1(x) = 0, \quad (4.52)$$

retranchons membre à membre, on obtient :

$$\frac{2m}{\hbar^2} [E_1 - E_0] \Psi_0(x) \Psi_1(x) + \Psi_0(x) \Psi_1''(x) - \Psi_1(x) \Psi_0''(x) = 0, \quad (4.53)$$

intégrons maintenant sur  $dx$  de 0 à l' $\infty$  :

$$\frac{2m}{\hbar^2} [E_1 - E_0] \int_0^\infty \Psi_0(x) \Psi_1(x) dx + \int_0^\infty [\Psi_0(x) \Psi_1''(x) - \Psi_1(x) \Psi_0''(x)] dx = 0, \quad (4.54)$$

notons qu'au point  $x = 0$ , on a  $\Psi_1(0) = \sqrt{2}\Psi_0(0)$  et  $\Psi_1'(0) = 0$ , ce qui donne :

$$\int_0^\infty \Psi_0(x) \Psi_1(x) dx \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^\infty |\Psi_0(x)|^2 dx = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (4.55)$$

après intégration par parties du deuxième terme de l'équation (4.54), on obtient :

$$E_1 - E_0 = -\frac{\hbar^2}{m} \Psi_0(0) \Psi_0'(0). \quad (4.56)$$

De la même manière, on écrit les équations de Schrödinger pour les fonctions d'ondes  $\Psi_0(x)$  et  $\Psi_2(x)$  :

$$\Psi_0''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E_0 - V] \Psi_0(x) = 0 \quad (4.57)$$

$$\Psi_2''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E_2 - V] \Psi_2(x) = 0. \quad (4.58)$$

On adopte la même démarche et on obtient :

$$E_2 - E_0 = \frac{\hbar^2}{m} \Psi_0(0) \Psi_0'(0) \quad (4.59)$$

ce qui donne finalement, le dédoublement du niveau d'énergie (splitting)  $\Delta E$  :

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{2\hbar^2}{m} \Psi_0(0) \Psi_0'(0), \quad (4.60)$$

de (4.42) on a :

$$\Psi_0(0) = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi v_0}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^a |p(x)| dx\right), \quad (4.61)$$

et donc :

$$\Psi_0'(0) = \frac{mv_0}{\hbar} \Psi_0(0), \quad (4.62)$$

où  $v_0 = \sqrt{\frac{2[V(0) - E_0]}{m}}$ , ce qui donne finalement :

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{\omega\hbar}{\pi} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p(x)| dx\right). \quad (4.63)$$

### 4.3 Propagateur suivant l'approximation WKB

Dans les sections précédentes, nous avons vu certains problèmes liés à l'effet tunnel, calcul du coefficient de transmission pour l'affranchissement d'une barrière, le dédoublement des niveaux d'énergie dans un double puit de potentiel, en utilisant les fonctions d'ondes WKB via l'équation de Schrodinger.

Dans cette section, on va utiliser l'approche d'intégrale de chemin de Feynman pour étudier l'effet tunnel mais en restant toujours dans le cadre de l'approximation WKB. Au début, voyons comment va s'écrire le propagateur de Feynman via cette approximation. Partons de la définition du propagateur :

$$K(x_2, t; x_1, 0) = \langle x_2 | \exp(-iHt/\hbar) | x_1 \rangle \quad (4.64)$$

l'insertion de la relation de fermeture donne :

$$K(x_2, t; x_1, 0) = \sum_n \langle x_2 | n \rangle \langle n | x_1 \rangle \exp(-iHt/\hbar) \quad (4.65)$$

$$K(x_2, t; x_1, 0) = \sum_n \Psi_n(x_2) \Psi_n^*(x_1) \exp(-iHt/\hbar), \quad (4.66)$$

où :

$$H | n \rangle = E_n | n \rangle \quad (4.67)$$

dans l'approximation WKB , les états propres dans la région classiquement permise sont donnés par [20] :

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{k_n(x)}} \exp\left(\pm i \int_a^x dx' k_n(x')\right) = \Psi_{E_n}(x) \quad (4.68)$$

où  $a$  est un paramètre arbitraire et  $k_n(x) = (1/\hbar) \{2m[E_n - V(x)]\}^{1/2}$ . En l'absence des états liés le spectre d'énergies est continu, et on a donc :

$$K(x_2, t; x_1, 0) = \int dE h(E) \exp(-iEt/\hbar) \Psi_E(x_2) \Psi_E^*(x_1) \quad (4.69)$$

$$= \sum_{\epsilon=\pm 1} \int \frac{dE h(E)}{\sqrt{k(x_1)k(x_2)}} \exp(-iEt/\hbar) \exp\left(i\epsilon \int_{x_1}^{x_2} k(x) dx\right) \quad (4.70)$$

la somme sur  $\epsilon = \pm 1$  tient compte de la dégénérescence double des états d'énergie. La mesure  $h(E)$  peut être déterminée à partir de la condition de normalisation :

$$\lim_{t \rightarrow 0} K(x_2, t; x_1, 0) = \delta(x_2 - x_1) \quad (4.71)$$

Puisque  $h(E)$  est indépendant de la position, nous pouvons choisir  $x_1$  et  $x_2$  dans une région où le potentiel est négligeable, donc  $k(x_1) = k(x_2) = \sqrt{2mE}$ , on remplace  $\Psi_{WKB}(x, E)$  donnée par (4.68) dans (4.69), on obtient :

$$\lim_{t \rightarrow 0} K(x_2, t; x_1, 0) = \sum_{\epsilon = \pm 1} \int_0^{\infty} \frac{dE}{k} h(E) \exp i \epsilon [k(x_2 - x_1)] \quad (4.72)$$

par conséquent :

$$\lim_{t \rightarrow 0} K(x_2, t; x_1, 0) = \sum_{\epsilon = \pm 1} \int_0^{\infty} dk \left| \frac{dE}{k dk} \right| h(E) \exp i \epsilon [k(x_2 - x_1)] \quad (4.73)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left| \frac{dE}{k dk} \right| h(E) \exp i [k(x_2 - x_1)] = \delta(x_2 - x_1) \quad (4.74)$$

ce qui donne pour  $h(E)$  la relation suivante :

$$\frac{1}{k} \frac{dE}{dk} h(E) = \frac{1}{2\pi} \quad (4.75)$$

comme,  $dE/dk = \hbar^2 k/m$ , alors la fonction  $h(E)$  est donnée par :

$$h(E) = \frac{m}{2\pi \hbar^2} \quad (4.76)$$

maintenant on remplace  $h(E)$  par son expression dans (4.70), on obtient l'expression suivante pour le propagateur :

$$K(x_2, t; x_1, 0) = \frac{m}{2\pi \hbar^2} \int dE \exp \left( -\frac{i}{\hbar} E t \right) \frac{1}{\sqrt{k(x_1) k(x_2)}} \exp \left( i \int_{x_1}^{x_2} k(x') dx' \right) \quad (4.77)$$

Pour évaluer l'intégrale, on utilise l'approximation de la phase stationnaire [22]. En général cette approximation signifie que si on a une intégrale de la forme :

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx g(x) \exp(i f(x)) \quad (4.78)$$

là où  $g(x)$  change lentement, alors les contributions à l'intégrale tendent à s'annuler si  $f(x)$  change rapidement avec la variation de  $x$ , seulement à proximité des points  $x$  où  $f'(x_0) = 0$ , les phases s'ajoutent avec cohérence et ont des contributions significatives à l'intégrale. Supposons, qu'il y a un seul point  $x_0$ , nous pouvons développer  $f(x)$  dans cette région :

$$f(x) = f(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^2 f''(x_0) + \dots \quad (4.79)$$

ce qui donne pour  $I$  le résultat suivant :

$$I \simeq g(x_0) \exp(i f(x_0)) \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(i \frac{1}{2}(x - x_0)^2 f''(x_0)\right) \quad (4.80)$$

$$I = \sqrt{\frac{2\pi i}{f''(x_0)}} g(x_0) \exp(i f(x_0)) \quad (4.81)$$

Dans notre cas  $x \sim E$ , et

$$f(E) = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{2m[E - V(x)]} - \frac{1}{\hbar} Et \quad (4.82)$$

nous déterminons l'énergie  $E_0$  de la phase stationnaire par la condition :

$$0 = \frac{\partial f}{\partial E} = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx' \sqrt{\frac{m}{2[E_0 - V(x')]}} - \frac{t}{\hbar} \quad (4.83)$$

donc  $E_0$  est déterminé par :

$$t = \int_{x_1}^{x_2} dx' \sqrt{\frac{m}{2[E_0 - V(x')]}]} \quad (4.84)$$

$$t = \int_{x_1}^{x_2} dx' \frac{1}{\dot{x}_{cl}(x')} \quad (4.85)$$

En d'autres termes  $E_0 = E_{cl}$ , donc c'est l'énergie classique du chemin  $x_{cl}(t)$  reliant  $(x_1, 0)$  et  $(x_2, t)$  qui domine dans l'intégrale donnée par l'équation (4.77), on a :

$$\begin{aligned} f''(E_{cl}) &= -\frac{m^2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\{2m[E_{cl} - V(x)]\}^{3/2}} \\ &= -\frac{m^2}{\hbar^4} \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{k^3(x)} \end{aligned} \quad (4.86)$$

Finalement on obtient le propagateur suivant l'approximation WKB :

$$K(x_2, t; x_1, 0) = \left( \frac{1}{2\pi i k(x_2)k(x_1) \int_{x_1}^{x_2} dx k^{-3}(x)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left( i \int_{x_1}^{x_2} k(x) dx - \frac{i}{\hbar} E_{cl} t \right) \quad (4.87)$$

## 4.4 Propagateur via la méthode algorithmique

Dans ce qui suit nous allons appliquer l'approximation WKB (semi-classique) donnée par [23] :

$$G(x_i, x_f, E) = \left( \frac{m^2}{k(x_i)k(x_f)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_{x_i}^{x_f} k(x) dx \right) \quad (4.88)$$

où  $k(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$ , pour calculer la fonction de Green d'une particule traversant une barrière. Commençons par le cas d'une seule barrière (figure 6). En fait quand  $E < V$ ,  $k(x)$  prend des valeurs imaginaires qui, correspond du point de vue classique à la région interdite. Cependant en mécanique quantique, la particule peut franchir la

barrière par effet tunnel, et dans ce cas l'amplitude de transition est proportionnelle à  $\exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^b |k(x)| dx\right)$ .

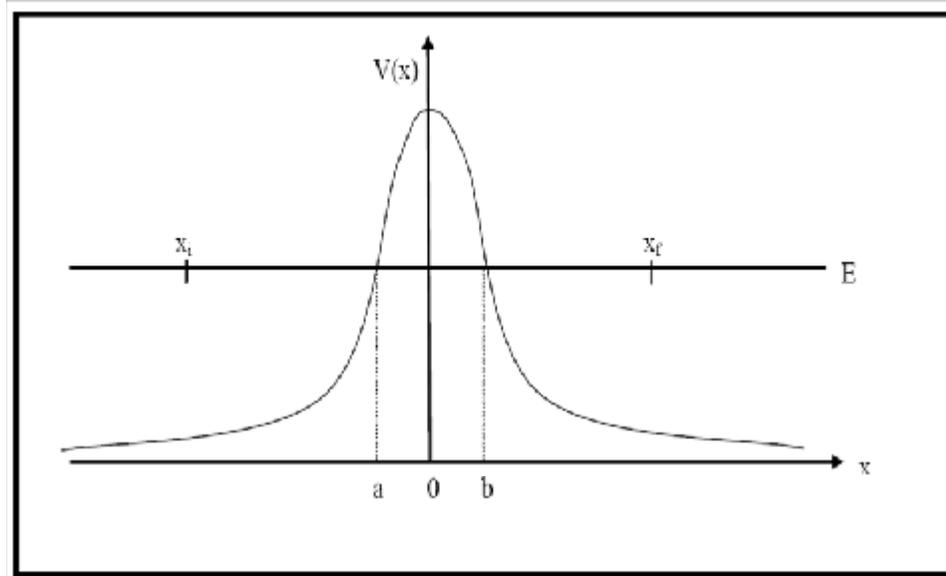


Figure 06 : Une seule barrière de potentiel

FIG. 4-5 –

Pour aller du point initial  $x_i$  au point final  $x_f$  il y'a plusieurs chemins possibles : le chemin direct, chemin avec une boucle (un aller-retour à l'intérieur de la barrière), chemin avec deux boucles,.....etc, ce qui donne pour la fonction de Green l'expression suivante :

$$G(x_i, x_f, E) = G_0 + G_1 + G_2 + \dots + G_N + \dots \quad (4.89)$$

où  $G_N$  représente la fonction de Green pour un passage avec  $N$  boucles, qui est égale à :

$$G_N = G_0 [\lambda^{2N} \exp(-2NW)] \quad (4.90)$$

avec

$$G_0 = \left( \frac{m^2}{k(x_i)k(x_f)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left( \frac{i}{\hbar} \left[ \int_{x_i}^a k(x) dx + \int_b^{x_f} k(x) dx \right] \right) \exp(-W) \quad (4.91)$$

et

$$W = \frac{1}{\hbar} \int_a^b |k(x)| dx \quad (4.92)$$

$\lambda$  est un facteur approprié aux points tournants de la barrière, qui est égale à  $-i/2$  [23].

Dans ce cas  $G(x_i, x_f, E)$  se calcule explicitement :

$$G(x_i, x_f, E) = \left( \frac{m^2}{k(x_i)k(x_f)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left( \frac{i}{\hbar} \left[ \int_{x_i}^a k(x) dx + \int_b^{x_f} k(x) dx \right] \right) \times \sum_{N=0}^{\infty} \lambda^{2N} \exp[-(2N+1)W] \quad (4.93)$$

$$= \left( \frac{m^2}{k(x_i)k(x_f)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left( \frac{i}{\hbar} \left[ \int_{x_i}^a k(x) dx + \int_b^{x_f} k(x) dx \right] \right) \times \frac{\exp(-2W)}{1 - \lambda^2 \exp(-2W)}. \quad (4.94)$$

Le coefficient de transmission est défini par :

$$T(E) = \left( \frac{\exp(-2W)}{1 - \lambda^2 \exp(-2W)} \right)^2 \quad (4.95)$$

$$= \left( \frac{\exp(-2W)}{1 + \frac{1}{4} \exp(-2W)} \right)^2 \quad (4.96)$$

c'est le même résultat obtenu en utilisant l'équation de Schrödinger (4.39).

En suivant la même démarche, établissons le cas de deux barrières (figure 7). Dans ce cas, la contribution à la fonction de Green est due à la présence de deux barrières et un puit. Bien sur, on a toujours :

$$G(x_i, x_f, E) = G_0 + G_1 + G_2 + \dots + G_N + \dots$$

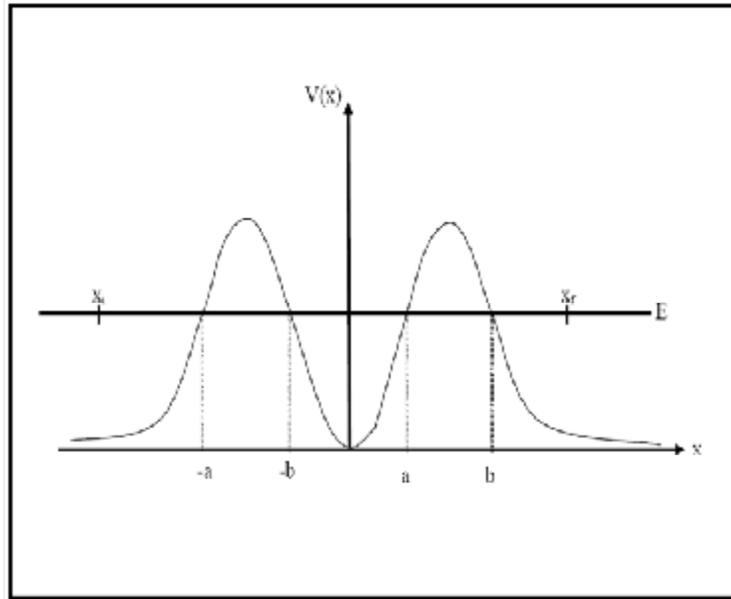


Figure 07 : Deux barrières de potentiel

FIG. 4-6 –

où  $G_N$  représente la fonction de Green avec  $N$  boucles, mais dans ce cas à la différence du cas précédent, il y'a différentes manières de distribuer les  $N$  boucles ; de sorte que  $n_1 + n_2 + n_3 = N$ , avec  $(n_1, n_2, n_3)$  une configuration possible. Soit  $Card\{n_1, n_2, n_3\}$  le cardinal d'une telle configuration, qui est égale à :

$$Card\{n_1, n_2, n_3\} = \frac{N!}{\prod_{n_i} \{n_i\}!}, \quad (4.97)$$

alors naïvement  $G_N$  sera égale à :

$$G_N = \sum_{\{n_i\}} Card \{n_1, n_2, n_3\} [\lambda^{2n_1} \exp(-2n_1 w_1) \cdot \eta^{2n_2} \exp(+2in_2 w_2) \cdot \lambda^{2n_3} \exp(-2n_3 w_3)] , \quad (4.98)$$

avec la condition  $\sum n_i = N$ , et  $\lambda = -i/2$  représente comme précédemment le coefficient approprié à la barrière et  $\eta = +i$ , c'est un coefficient approprié au puit [23]. Notons, que cette formule (4.98) contient des contributions de configuration qui du point de vue physique ne sont pas réalisables, car la configuration  $(n_1, n_2, n_3)$  doit remplir la condition suivante :

-Le maximum sur  $n_1, n_2, n_3$  est atteint progressivement suivant la direction de propagation de la particule, qu'on appelle *condition de remplissage*.

Par la suite, ce cardinal  $Card \{n_1, n_2, n_3\}_{C.R}$  sera calculé d'une manière algorithmique, ce qui nous impose un calcul algorithmique de la fonction de Green.

Remarque :

Cette méthode peut être généralisée systématiquement au cas d'un potentiel ayant  $p$  barrière et  $p - 1$  puit et le résultat est :

$$G = G_0 \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}} Card \{n_1, n_2, n_3\}_{C.R} \prod_{k \in \{n\}_{imp}} \lambda^{2k} \exp(-2kw_k) \prod_{k \in \{n\}_{pair}} \eta^{2k} \exp(+2ikw_k) , \quad (4.99)$$

avec  $\sum n_i = N$

### Programme principal :

Class Principale :

class Principale

{

double GreenGlob,Green,W1,W2,W3,LAMBDA,RHO ;

int Infinity,N,N1,N2,N3,Card,nConf,nbrCAct,nbrConfTrouv ;

```

Configuration nouvConf,confAct,confRech,nCG,nCD;
TabConfPoss TabNbc;
TabConfPoss TabGNbc [ ] = new TabConfPoss [10000];
Configuration tabCAct [ ]=new Configuration[10000];
double calcGreenGlob()
{
Infinity=Integer.parseInt(jTextInfinity.getText( ));
for(i=0 ;i<(Infinity+1);i++)
{
TabGNbc [i] = new TabConfPoss( );
}
for (N1=0;N1<(Infinity+1);N1++)
{
for (N2=0;N2<(Infinity+1);N2++)
{
for (N3=0;N3<(Infinity+1);N3++)
{
if ((N1+N2+N3) <= Infinity)
{
nouvConf=new Configuration(N1,N2,N3);
TabGNbc[(N1+N2+N3)].ajouter(nouvConf);
}
}
}
}
GreenGlob=0;
for (N=0; N<(Infinity+1); N++ )
{

```

```

TabNbc= new TabConfPoss ( );
TabNbc= TabGNbc[N];
for (nConf=0; nConf<(TabNbc.nbrConfPoss);nConf++)
{
confRech=new Configuration( );
confRech=TabNbc.tabConf[nConf];
confAct=new Configuration( );
tabCAct[0]=confAct;
nbrCAct=1;
nbrConfTrouv=0;
while(nbrCAct >0 )
{
confAct = tabCAct[nbrCAct - 1];
tabCAct[nbrCAct - 1] = null;
nbrCAct = nbrCAct - 1;
if(confAct.PossdepGauche(confRech)==true)
{
nCG = new Configuration(confAct,"gauche");
tabCAct[nbrCAct]= nCG;
nbrCAct=nbrCAct+1;
}
if(confAct.PossdepDroite(confRech)==true)
{
nCD = new Configuration(confAct,"droite");
if (nCD.egale(confRech)==true)
{
nbrConfTrouv = nbrConfTrouv + 1;
}
}
}

```

```

else
{
tabCAct[nbrCAct] = nCD;
nbrCAct=nbrCAct+1;
}
}
}
N1=confRech.tab[1];
N2=confRech.tab[2];
N3=confRech.tab[3];
Card=nbrConfTrouv;
Green= Card* ( Math.pow (LAMBDA,N1))* (Math.exp(-((2*N1)+1)*W1))* (Math.pow(RHO, 1
(Math.pow(LAMBDA,N3))* (Math.exp(-((2*N3)+1)*W3)));
GreenGlob=GreenGlob+Green;
}
}
return GreenGlob;
}
}
Classe TabConfPoss :
public class TabConfPoss
{
Configuration tabConf [] = new Configuration [10000];
int nbrConfPoss;
public TabConfPoss()
{
int i;
for(i=0; i<10000; i++)

```

```

{
tabConf [i]=null ;
nbrConfPoss=0;
}
}
public void ajouter(Configuration confg)
{
tabConf[nbrConfPoss]=confg ;
nbrConfPoss=nbrConfPoss+1 ;
}
}
Classe Configuration :
public class Configuration
{
int tab [] = new int [5];
int indice ;
String chemin ;
public Configuration()
{
int i;
for (i=0 ;i<5 ;i++)
{
tab[i]=0;
}
indice=1;
chemin = "";
}
public Configuration(int nb1,int nb2,int nb3)

```

```

{
tab[0]=0;
tab[1]=nb1;tab[2]=nb2;tab[3]=nb3;
tab[4]=0;
indice=5;
chemin="";
}
public Configuration(Configuration config,String dep)
{
int i;
for (i=0;i<5;i++)
{
tab[i]=config.tab[i];
}
indice=config.indice;
chemin=config.chemin;
if (dep.equals("gauche"))
{
indice=indice-1;
tab[indice]=tab[indice]+1;
chemin=chemin+indice+"gauche";
}
if (dep.equals("droite"))
{
chemin=chemin+indice+"droite";
indice=indice+1;
}
public boolean PossdepGauche(Configuration confRech)

```

```

{
boolean possible = true;
if (indice == 1)
{
possible= false;
}
if (indice == 5)
{
possible= false;
}
if (tab[indice-1]==confRech.tab[indice-1])
{
possible= false;
}
return possible;
}
public boolean PossdepDroite(Configuration confRech)
{
boolean possible = true;
int i;
if (indice == 5)
{
possible= false;
}
if(tab[indice]==confRech.tab[indice])
{
for(i=1;i<indice;i++)
{

```

```

if (tab[i] < confRech.tab[i])
{
possible= false;
}
}
}
return possible;
}
public boolean egale(Configuration config)
{
boolean egalite=true;
int i;
for (i=1 ;i<4 ;i++)
{
if(tab[i] !=config.tab[i])
{
egalite=false;
}
}
if (indice !=config.indice)
{
egalite=false;
}
return egalite;
}
}

```

# Chapitre 5

## Conclusion

Dans ce travail, nous avons présenté le concept de trajectoire dans diverses situations. Dans le cas de la théorie de de Broglie Bohm, nous lui avons adapté la technique des transformations spatio-temporelles dans le cadre d'un calcul de propagateur quantique. Cette technique a permis de convertir le problème d'une masse dépendante du temps (modèle de Kanai-Caldirola) à un problème de masse constante (oscillateur harmonique). La construction du propagateur est basée sur la transformée de Fourier généralisée et le résultat est réduit à une somme sur un chemin à extrémité libre. Cette manière nous a permis d'établir une connection avec le formalisme de quantification de Feynman. Les systèmes quadratiques sont traités comme des exemples de cette méthode. D'autre part la construction du propagateur quantique via la méthode semi-classique est revue selon un point de vue exploitant davantage le concept de trajectoire. L'intégrale de chemin de Feynman est ainsi simplifiée en prenant en compte l'effet tunnel. L'écriture est traduite en un algorithme efficace de calcul permettant d'évaluer le coefficient de transmission d'une barrière quelconque. la méthode fait intervenir un coefficient combinatoire de forme non calculable, ce qui a nécessité l'introduction d'un langage informatique évolué. Des exemples simples et pratiques sont exposés.

## **Chapitre 6**

## **Bibliographie**

# Bibliographie

- [1] D. Bohm, Phys. Rev. **85** (1952) 166; **85** (1952) 180.
- [2] L. de Broglie, Compt. Rend. **183** (1926) 447; **184** (1927) 273; **185** (1927) 380.
- [3] H. Goldstein, "Classical Mechanics", Addison-Wesley Publishing Company, Second ed (1981).
- [4] P. R. Holland, "The Quantum Theory of Motion", Cambridge University Press (1993).
- [5] N. Rosen, Am. J. Phys. **32** (1964) 597; **33** (1965) 146.
- [6] I. H. Duru and H. Kleinert, Phys. Lett. **84B** (1979) 185.
- [7] D. C. Khandekar, S. V. Lawande and K. V. Bhagwat, "Path-Integral Methods and their Applications", World Scientific, Singapore (1993).
- [8] A. B. Nassar, J. M. Bassalo and H. A. Neto, J. Phys. A : Math.Gen. **19** (1986) L891.
- [9] A. B. Nassar, J. M. Bassalo and P. T. S. Alencar, Phys. Lett. **113A** (1986) 365.
- [10] M. A. Vandyck, J. Phys. A : Math. Gen. **27** (1994) 1743.
- [11] L. S. Schulman, "Techniques and Applications of Path Integration", John Wiley & Sons, New York (1981).
- [12] A. B. Nassar et al, Phys. Rev. **E56** (1997) 1230.
- [13] I. B. Bernstein, Phys. Rev. **A32** (1985) 1.
- [14] A. O. Barut and I. H. Duru, Phys. Rev. **A38** (1988) 5906.

- [15] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, "Quantum Mechanics and Path Integrals", New York, McGraw-Hill (1965).
- [16] B. K. Cheng, J. Math. Phys. **27** (1986) 217.
- [17] A. R. Plastino, M. Casas and A. P. Plastino, Phys. Lett. **A281** (2001) 297.
- [18] M. Abolhasni and M. Golshani, Annales de la Fondation Louis de Broglie. **V28** (2003) 1.
- [19] M. Razavy, "Quantum Theory of Tunneling", World Scientific, Singapor (2003).
- [20] E. Merzbacher, "Quantum Mechanics", Willey Inter Edition (1970).
- [21] L. Landau and E. Lifshitz, "Mécanique Q uantique", Editions Mir, Moscou (1967).
- [22] B. R. Holstein, "Topics In Advanced Quantum Mechanics", Addison-Wesley Publishing Company (1992).
- [23] B. R. Holstein, Am. J. Phys. 52 (1984) 321.
- [24] P. Calderola, Nuovo Cimento. **18** (1941) 393.
- [25] E. Kanai, Prog. Theor. Phys. **3** (1948) 440.