

INTÉGRALES DE CHEMIN DANS UN ESPACE RIEMANNIEN ET AMBIGUITÉ DE QUANTIFICATION

MÉMOIRE DE MASTER 2 DE SAMUEL LEREAH
ENCADRÉ PAR ANDRÉI SMILGA
FÉVRIER 2010 - JUIN 2010

Table des matières

Introduction	2
1 Intégrale de chemin	3
1.1 Origine du concept et mouvement brownien	3
1.2 Application à la mécanique quantique	3
1.3 Intégrales de chemin à partir de l'équation de Schrödinger	6
1.4 Équation de Schrödinger à partir de l'intégrale de chemin	7
2 Problèmes d'ordonnement et symboles	9
2.1 Particule dans un champ magnétique	9
2.2 Symbole d'un opérateur	12
2.3 Lien entre les symboles et l'intégrale stochastique	16
3 Intégrale de chemin dans un espace de Riemann	18
3.1 Équation de Schrödinger dans un espace courbe	18
3.2 Application de la méthode des symboles	19
3.3 Intégrale de chemin covariante	20
4 Conclusion	25
Annexes	26
A Rappels de mécanique quantique	26
B Processus et intégrales stochastiques	28
C Calculs des termes de l'intégrale en espace Riemannien	30
D Exemple : Particule sur une sphère	32
E Formules utiles	36
E.1 Intégrales	36
E.2 Calcul tensoriel	36

Introduction

Introduit dans les années 40 par Richard Feynman, les intégrales de chemin sont, au même titre que l'équation de Schrödinger ou la mécanique matricielle d'Heisenberg, un formalisme pour la mécanique quantique, donnant des résultats identiques à ces deux méthodes.

Elles offrent une interprétation physique relativement plus simple de la mécanique quantique, se basant sur des trajectoires classiques plutôt que sur des fonctions d'ondes, au prix d'une plus grande complexité mathématique - certains des concepts impliqués n'ont pas encore de fondations mathématiques rigoureuses. C'est ainsi qu'elles sont, par exemple, à l'origine des diagrammes de Feynman, expliquant les expansions perturbatives par la somme des probabilités de toutes les interactions possibles.

Utilisant des quantités classiques plutôt que des opérateurs, la transition d'une méthode à l'autre n'est pas triviale. C'est ce qui sera étudié dans ce mémoire, plus particulièrement dans le cadre des espaces de Riemann. Au-delà de l'application évidente de la mécanique quantique dans un espace courbe, on peut également s'en servir pour des transformations de coordonnées, par exemple le passage aux coordonnées sphériques, utiles dans bon nombre de problèmes quantiques.

Dans la première partie, on décrira d'abord l'intégrale de chemin elle-même, d'un point de vue historique, mathématique (sans trop entrer dans les détails), et ses liens avec la mécanique quantique d'un point de vue phénoménologique et par rapport à l'équation de Schrödinger. La seconde partie sera dédiée aux ambiguïtés de quantification, en passant des opérateurs non-commutatifs aux quantités classiques, et deux méthodes de résolution de ces ambiguïtés, les symboles et les intégrales stochastiques, et les liens entre ces deux méthodes. La dernière partie sera l'application de ces méthodes au cas particulier d'un espace courbé, et les différents résultats qu'on obtient par différentes méthodes (plus une application dans le cas simple de la sphère dans l'Annexe D).

Notation utilisée :

\triangleq	:	Égal par définition	
$\mathcal{D}x(t)$:	Élément différentiel de l'intégrale de chemin (variation d'un chemin sur x de paramètre t)	
$\otimes \int f(x(t)) dx(t)$:	Intégrale stochastique de paramètre λ	(cf. Annexe B)
$\int \nabla f(x(t)) \bullet dx(t)$:	Intégrale d'Itô	(cf. Annexe B)
$\int \nabla f(x(t)) \circ dx(t)$:	Intégrale de Stratonovitch	(cf. Annexe B)
$T^{ab}_{,c}$:	Dérivée du tenseur T^{ab} ($\partial_c T^{ab}$)	
$T^{ab}_{;c}$:	Dérivée covariante du tenseur T^{ab}	(cf. Annexe C)

De manière générale, les indices et exposants sont associés à la notation d'Einstein s'ils ne sont pas rattachés à un symbole de somme ou de produit : un indice et un exposant du même symbole correspondent à une somme du tenseur sur toutes les dimensions

$$T^{ab}T_{bc} \triangleq \sum_{b=1}^D T^{ab}T_{bc}$$

sauf pour l'indice i qui correspond à la quantité à l'instant t_i , et a et b peuvent correspondre à la quantité aux bornes t_a et t_b .

1 Intégrale de chemin

1.1 Origine du concept et mouvement brownien

La notion d'intégrale de chemin (aussi appelée intégrale fonctionnelle en mathématique) remonte aux années 20, lorsqu'elle fut appliquée au problème du mouvement brownien par Norbert Wiener.

Le mouvement brownien est un phénomène observé par Robert Brown en 1827, dans lequel des grains de pollen en suspension dans l'eau ont un mouvement aléatoire constant, phénomène qu'on retrouve pour toutes petites particules dans un fluide.

La résolution physique du mouvement Brownien fut faite par Einstein en 1905 et Smoluchowski en 1907, avec comme explication les collisions aléatoires entre ces particules et le fluide environnant.

L'un des résultats de cette analyse est la probabilité qu'une particule passe, entre un temps t_a et t_b , de x_a à x_b ,

$$W(\vec{x}_b, t_b; \vec{x}_a, t_a) = \frac{1}{(4\pi D(t_b - t_a))^{\frac{d}{2}}} e^{-\frac{(\vec{x}_b - \vec{x}_a)^2}{4D(t_b - t_a)}} \quad (1.1)$$

avec D une constante de diffusion et d le nombre de dimensions. Une probabilité qui obéit à la relation d'Einstein-Smoluchowski-Kolmogorov-Chapman

$$W(\vec{x}_b, t_b; \vec{x}_a, t_a) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{x}_c W(\vec{x}_b, t_b; \vec{x}_c, t_c) W(\vec{x}_c, t_c; \vec{x}_a, t_a) \quad (1.2)$$

L'idée de Norbert Wiener[1] fut de décomposer le trajet d'une particule en incréments infinitésimaux à l'aide de cette relation.

$$\begin{aligned} W(b, a) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_{N-1} W(b, N-1) \dots W(1, a) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^{N-1} d\vec{x}_i \prod_{i=1}^N W(\vec{x}_i, \vec{x}_{i-1}) \end{aligned} \quad (1.3)$$

La limite de ce produit correspond à une somme sur les probabilités de chaque parcours individuel d'une particule, qu'on notera par

$$W(\vec{x}_b, t_b; \vec{x}_a, t_a) = \int_{\mathcal{C}[\vec{x}_a, t_a; \vec{x}_b, t_b]} d_w \vec{x}(t) \quad (1.4)$$

qui est l'intégrale sur tous les chemins allant de \vec{x}_a à \vec{x}_b de la mesure de Wiener

$$\begin{aligned} d_w \vec{x}(t) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{i=1}^{N-1} d\vec{x}_i \right) \left(\prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{4\pi D dt}} \right) e^{\sum_{i=1}^N -\frac{d\vec{x}_i^2}{4D dt}} \\ &= e^{-\frac{1}{4D} \int_{t_a}^{t_b} \dot{\vec{x}}^2 dt} \prod_{t=t_a}^{t_b} \frac{d\vec{x}(t)}{\sqrt{4\pi D dt}} \end{aligned} \quad (1.5)$$

1.2 Application à la mécanique quantique

Ce formalisme sera réutilisé par Feynman qui, sur une remarque de Dirac[2] à propos du lien entre l'action d'un système et son propagateur, invente le formalisme des intégrales de chemin pour la mécanique quantique[3]. L'un de ses raisonnements est le suivant[4] :

Dans le cadre de l'expérience des fentes de Young, on a une particule dont la détection dépendra de la somme de deux amplitudes :

$$P = |\phi_1 + \phi_2|^2 \quad (1.6)$$

qui sont les amplitudes du passage de la particule dans chacune des deux fentes.

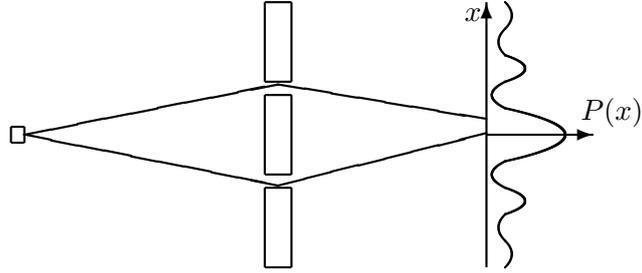


FIGURE 1 – Expérience des fentes de Young : Une source émet des particules vers un écran percé de deux fentes. La probabilité de trouver la particule en un point x de l'écran est le carré des amplitudes de la particule passant par chacune des fentes, ici approximativement un sinus cardinal.

Si maintenant on considère que l'écran possède un nombre infini de fentes, jusqu'à ce qu'il n'y ait plus même d'écran, on aura :

$$P = \lim_{N \rightarrow \infty} \left| \sum_{i=0}^N \phi_i \right|^2 \quad (1.7)$$

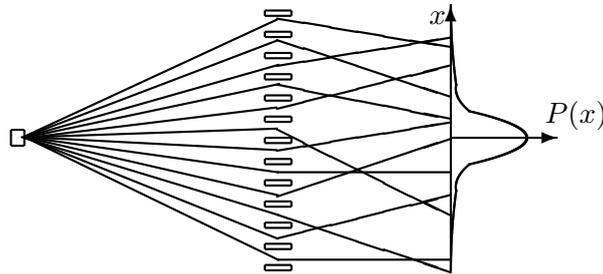


FIGURE 2 – Le nombre de fentes tend vers l'infini, la probabilité s'approche d'une particule libre

On peut ainsi généraliser dans toutes les dimensions. La probabilité qu'une particule arrive en un endroit précis sera la somme des amplitudes de chaque parcours possible de la particule

$$P = \left| \sum_{\text{tous chemins}} \phi_i \right|^2 \quad (1.8)$$

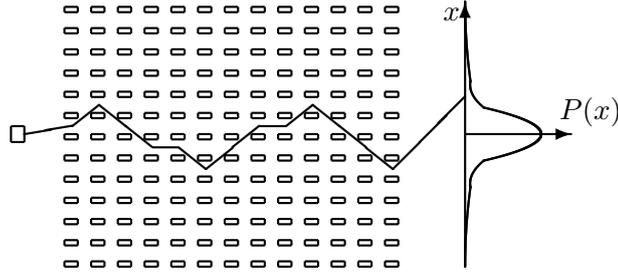


FIGURE 3 – On ajoute un nombre infini d'écrans d'épaisseur infinitésimale, percé d'un nombre infini de fentes. La probabilité est la somme des amplitudes de chaque combinaison de passages à travers toutes les fentes, correspondant à tous les chemins que puisse prendre la particule.

Cette amplitude est justement celle décrite par Dirac, et correspond à $e^{\frac{i}{\hbar}S_{Cl}}$ (plus un facteur de normalisation A), où S_{Cl} correspond à l'action classique de la particule.

Pour construire cette somme, on procède de la manière suivante : l'intervalle de temps entre le départ et l'arrivée de la particule est décomposé en un nombre infini d'intervalles. Sur chacun de ces intervalles, on intègre sur tout l'espace. Ainsi, on prend en compte la possibilité qu'à chaque instant, la particule puisse se trouver à tout endroit, donnant l'ensemble des trajectoires possibles.

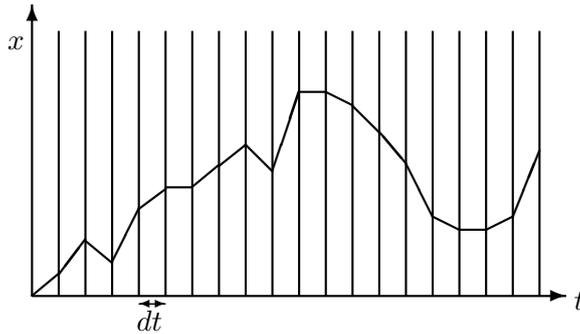


FIGURE 4 – Décomposition du mouvement en tranches de temps infinitésimales. La trajectoire est décomposée en segments infinitésimaux. Pour changer un chemin, il suffit de changer l'un des points d'un instant t . La somme sur tous les chemins correspond à l'intégrale sur tout l'espace de chacun de ces instants, équivalent à tous les segments possibles pour cet instant.

On obtient alors l'intégrale de chemin de Feynman :

$$P = \lim_{N \rightarrow \infty} \left| \int e^{\frac{i}{\hbar}S_{Cl}(x(t))} \prod_{i=1}^{N-1} \frac{dx_i}{A} \right|^2 \quad (1.9)$$

Le propagateur K d'une particule a la propriété $P = KK^*$, on a donc

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int e^{\frac{i}{\hbar}S_{Cl}(x(t))} \prod_{i=1}^{N-1} \frac{dx_i}{A} \quad (1.10)$$

Contrairement à l'intégrale de chemin de Wiener, dont la mesure offre des similarités avec la mesure ordinaire utilisée en théorie de l'intégration, celle de Feynman ne peut pas être qualifiée d'intégrale au sens où on l'entend habituellement. Le facteur i de l'exponentielle est une difficulté, mais l'impossibilité vient du fait que là où l'intégrale de Wiener décrit une probabilité (qui a des analogies avec la mesure d'une intégrale ordinaire), celle de Feynman ne décrit qu'une amplitude, dont la probabilité n'est même pas forcément normalisée. Il existe certaines

tentatives de formalisation mathématique, mais on en restera dans ce mémoire à la définition par limite.

Le passage à la limite classique se produit pour $S \gg \hbar$. De manière similaire à la méthode de la phase stationnaire (*cf.* annexe E), les variations rapides de la phase s'annulent globalement, sauf à proximité de la trajectoire classique, où la variation est faible (puisque $\delta S = 0$)

1.3 Intégrales de chemin à partir de l'équation de Schrödinger

On peut dériver ce propagateur à partir de l'équation de Schrödinger, dans le cas simple où le lagrangien est de la forme :

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 - V(\vec{x}) \quad (1.11)$$

Et ainsi l'hamiltonien

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad (1.12)$$

Dans le formalisme de Schrödinger, pour cet hamiltonien indépendant du temps, l'opérateur d'évolution est

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}} \quad (1.13)$$

On peut bien voir que cet opérateur a la propriété de Markov

$$\hat{U}(t, t_1)\hat{U}(t_1, t_0) = \hat{U}(t, t_0) \quad (1.14)$$

À partir de cette propriété, on peut décomposer l'évolution d'une particule en moments infinitésimaux ε :

$$\hat{U}(t, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} (e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{(t-t_0)}{N} \hat{H}})^N, \quad \frac{(t-t_0)}{N} = \varepsilon \quad (1.15)$$

Le propagateur de la particule du point a au point b est alors

$$K(\vec{x}_b, t; \vec{x}_a, t_a) = \langle \vec{x}_b | \hat{U}(t, t_0) | \vec{x}_a \rangle = \langle \vec{x}_b | \lim_{N \rightarrow \infty} (e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{H}})^N | \vec{x}_a \rangle \quad (1.16)$$

Grâce à la relation $\int_{-\infty}^{\infty} |\vec{x}_i\rangle \langle \vec{x}_i| d\vec{x}_i$, on peut transformer le propagateur en cette expression :

$$\begin{aligned} K(\vec{x}_b, t; \vec{x}_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \vec{x}_b | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{H}} | \vec{x}_{N-1} \rangle \langle \vec{x}_{N-1} | \dots | \vec{x}_1 \rangle \langle \vec{x}_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{H}} | \vec{x}_a \rangle d\vec{x}_{N-1} \dots d\vec{x}_1 \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{i=1}^N K(\vec{x}_i, t_i; \vec{x}_{i-1}, t_{i-1}) \prod_{i=1}^{N-1} d\vec{x}_i \end{aligned} \quad (1.17)$$

Avec $\vec{x}_a = \vec{x}_0$ et $\vec{x}_b = \vec{x}_N$.

Par la formule de Lie-Trotter-Kato[5], on a l'égalité $e^{t(\hat{A}+\hat{B})} = \lim_{N \rightarrow \infty} (e^{\frac{t}{N}\hat{A}} e^{\frac{t}{N}\hat{B}})^N$, permettant de décomposer l'opérateur d'évolution en ses composantes \hat{p} et \hat{x} .

$$\begin{aligned} K(\vec{x}_i, t_i; \vec{x}_{i-1}, t_{i-1}) &= \langle \vec{x}_i | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{\vec{p}^2}{2m}} e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\hat{x})} | \vec{x}_{i-1} \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \vec{x}_i | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{\vec{p}^2}{2m}} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\hat{x})} | \vec{x}_{i-1} \rangle d\vec{x} \end{aligned} \quad (1.18)$$

$$\begin{aligned}
\langle \vec{x}_i | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{\vec{p}^2}{2m}} | \vec{x} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \vec{x}_i | \vec{p}_i \rangle \langle \vec{p}_i | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{\vec{p}^2}{2m}} | \vec{p}'_i \rangle \langle \vec{p}'_i | \vec{x} \rangle d\vec{p}_i d\vec{p}'_i \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_i \cdot \vec{x}_i}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle \vec{p}_i | \vec{p}'_i \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{p_i^2}{2m}} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}'_i \cdot \vec{x}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} d\vec{p}_i d\vec{p}'_i \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_i \cdot \vec{x}_i} \delta(\vec{p}_i - \vec{p}'_i) e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{p_i^2}{2m}} \frac{d\vec{p}_i d\vec{p}'_i}{2\pi\hbar} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} [\vec{p}_i \cdot (\vec{x}_i - \vec{x}) - \varepsilon \frac{p_i^2}{2m}]} \frac{d\vec{p}_i}{2\pi\hbar}
\end{aligned} \tag{1.19}$$

$$\langle \vec{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\hat{x})} | \vec{x}_{i-1} \rangle = \langle \vec{x} | \vec{x}_{i-1} \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\vec{x}_{i-1})} = \delta(\vec{x}_{i-1} - \vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\vec{x}_{i-1})} \tag{1.20}$$

$$\begin{aligned}
K(\vec{x}_i, t_i; \vec{x}_{i-1}, t_{i-1}) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} [\vec{p}_i \cdot (\vec{x}_i - \vec{x}) - \varepsilon \frac{p_i^2}{2m}]} \delta(\vec{x}_{i-1} - \vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\vec{x}_{i-1})} d\vec{x} \frac{d\vec{p}_i}{2\pi\hbar} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} [\vec{p}_i \cdot (\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}) - \varepsilon (\frac{p_i^2}{2m} + V(\vec{x}_{i-1}))]} \frac{d\vec{p}_i}{2\pi\hbar}
\end{aligned} \tag{1.21}$$

L'expression finale du propagateur est la suivante :

$$K(\vec{x}_b, t_b; \vec{x}_a, t_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{i=1}^N e^{\frac{i}{\hbar} [\vec{p}_i \cdot (\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}) - \varepsilon (\frac{p_i^2}{2m} + V(\vec{x}_{i-1}))]} \frac{d\vec{p}_i}{2\pi\hbar} \prod_{i=1}^{N-1} d\vec{x}_i \tag{1.22}$$

qu'on appelle l'intégrale de chemin dans l'espace des phases. On peut le réécrire dans la notation des intégrales de chemin :

$$K(\vec{x}_b, t_b; \vec{x}_a, t_a) = \int_a^b \mathcal{D}\vec{p}(t) \mathcal{D}\vec{x}(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} [\vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - (\frac{p^2}{2m} + V(\vec{x}))] dt} \tag{1.23}$$

Les termes en p étant quadratiques, on pourra facilement les intégrer. Pour chaque tranche de temps infinitésimal, on a

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\vec{p}_i}{2\pi\hbar} d\vec{x}_i e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon [\vec{p}_i \cdot \frac{(\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1})}{\varepsilon} - (\frac{p_i^2}{2m} + V(\vec{x}_i))]} &= \left(\frac{m}{2\hbar\pi i \varepsilon} \right)^{\frac{D}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{x}_i e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon (\frac{1}{2m} \frac{(\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1})^2}{\varepsilon^2} - V(\vec{x}_i))} \\
&= \left(\frac{m}{2\hbar\pi i \varepsilon} \right)^{\frac{D}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{x}_i e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon L}
\end{aligned} \tag{1.24}$$

avec D le nombre de dimensions. On obtient ainsi l'intégrale de chemin dans l'espace des configurations

$$\begin{aligned}
K(x_b, t; x_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{i=1}^N e^{\frac{i}{\hbar} [\varepsilon (\frac{1}{2m} \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{\varepsilon^2} - V(x_{i-1}))]} \sqrt{\frac{m}{2\hbar\pi i \varepsilon}} \prod_{i=1}^{N-1} dx_i \\
&= \int \mathcal{D}x(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} L(x(t), \dot{x}(t)) dt}
\end{aligned} \tag{1.25}$$

1.4 Équation de Schrödinger à partir de l'intégrale de chemin

De la même façon, on peut passer de l'intégrale de chemin à l'équation de Schrödinger, simplement en exploitant la formule

$$\psi(\vec{x}_b, t_b) = \int_{-\infty}^{\infty} K(\vec{x}_b, t_b; \vec{x}_a, t_a) \psi(\vec{x}_a, t_a) d\vec{x}_a \tag{1.26}$$

Si $t_2 = t_1 + \varepsilon$:

$$K(x_b, t; x_a, t_a) = e^{\frac{i}{\hbar} [\varepsilon (\frac{1}{2m} \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{\varepsilon^2} - V(x_{i-1}))]} \left(\frac{m}{2\hbar\pi i \varepsilon} \right)^{\frac{D}{2}}$$

$$\psi(\vec{x}_b, t_a + \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon}\right)^{\frac{D}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\left(\frac{\vec{x}_b - \vec{x}_a}{\varepsilon}\right)^2} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon V} \psi(\vec{x}_a, t_a) d\vec{x}_a \quad (1.27)$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon V} = 1 - \frac{i}{\hbar}\varepsilon V + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (1.28)$$

On procède à un changement de variable pour faire apparaître x_b : $\vec{x}_b + \vec{\eta} = \vec{x}_a$, $d\vec{x}_a = d\vec{\eta}$.

$$\psi(\vec{x}_b, t_a + \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon}\right)^{\frac{D}{2}} \left(1 - \frac{i}{\hbar}\varepsilon V + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\right) e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{\vec{\eta}^2}{\varepsilon}} \psi(\vec{x}_b + \vec{\eta}, t_a) d\vec{\eta} \quad (1.29)$$

On peut donc développer ψ autour de \vec{x}_b

$$\psi(\vec{x}_b + \vec{\eta}, t_a) = \psi(\vec{x}_b, t_a) + \vec{\eta} \vec{\nabla} \psi(\vec{x}_b, t_a) + \frac{\vec{\eta}^2}{2} \Delta \psi(\vec{x}_b, t_a) + \mathcal{O}(\eta^3) \quad (1.30)$$

Avec les intégrales :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon}\right)^{\frac{D}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{\vec{\eta}^2}{\varepsilon}} d\vec{\eta} = 1 \quad (1.31)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon}\right)^{\frac{D}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{\vec{\eta}^2}{\varepsilon}} \vec{\eta} d\vec{\eta} = 0 \quad (1.32)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon}\right)^{\frac{D}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{\vec{\eta}^2}{\varepsilon}} \vec{\eta}^2 d\vec{\eta} = \frac{i\hbar\varepsilon}{m} \quad (1.33)$$

Les termes en $\mathcal{O}(\eta^3)$ et $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ ont soit une intégrale nulle, soit en ε^2 ou plus, devenant négligeables. V peut être sortie des intégrales car sa dépendance en η est du deuxième ordre en ε :

$$V(x), x \in [x_1, x_2] \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon}\right)^{\frac{D}{2}} \frac{i}{\hbar}\varepsilon V(\vec{x}_2 - \lambda\vec{\eta}) e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{\vec{\eta}^2}{\varepsilon}} \psi(\vec{x}_b + \vec{\eta}, t_a) d\vec{\eta} \quad (1.34)$$

$$V(\vec{x}_2 - \lambda\vec{\eta}) = V(\vec{x}_2) - \lambda\vec{\eta} \vec{\nabla} V(\vec{x}_2) + \mathcal{O}(\eta^2) \quad (1.35)$$

Le terme d'ordre η s'intègre en 0, ceux d'ordres supérieurs s'ajoutent à ε déjà présent pour donner des termes d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$. On obtient donc :

$$\psi(\vec{x}_b, t_a + \varepsilon) = \psi(\vec{x}_b, t_a) + 0 + \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} \Delta \psi(\vec{x}_b, t_a) - \frac{i}{\hbar}\varepsilon V(\psi(\vec{x}_b, t_a) + 0 + \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} \Delta \psi(\vec{x}_b, t_a)) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (1.36)$$

$$\frac{\psi(\vec{x}_b, t_a + \varepsilon) - \psi(\vec{x}_b, t_a)}{\varepsilon} = \frac{i\hbar}{2m} \Delta \psi(\vec{x}_b, t_a) - \frac{i}{\hbar} V(\psi(\vec{x}_b, t_a) + \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} \Delta \psi(\vec{x}_b, t_a)) + \mathcal{O}(\varepsilon) \quad (1.37)$$

Si ε tend vers 0 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}_b, t_a) &= \frac{i\hbar}{2m} \Delta \psi(\vec{x}_b, t_a) - \frac{i}{\hbar} V \psi(\vec{x}_b, t_a) \\ -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}_b, t_a) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}_b, t_a) + V \psi(\vec{x}_b, t_a) \end{aligned} \quad (1.38)$$

qui est bien l'équation de Schrödinger.

Avec ces conversions entre le formalisme de Schrödinger et des intégrales de chemin, on pourra ainsi vérifier l'équivalence entre les deux méthodes.

2 Problèmes d'ordonnement et symboles

Dans le formalisme de Schrödinger, le passage d'un système classique à un système quantique n'est pas de manière général triviale, en raison de l'absence de commutativité des observables. Si l'un des termes de l'hamiltonien classique fait intervenir une fonction du type $f(x)f(p)$, par exemple xp , l'hamiltonien quantique pourra être une combinaison linéaire de toutes les permutations possibles des opérateurs. Ici, $\alpha\hat{x}\hat{p} + \beta\hat{p}\hat{x}$.

Pour déterminer la quantification de l'hamiltonien, on peut utiliser l'hermiticité de l'hamiltonien ($\hat{H} = \hat{H}^\dagger$), ou les éventuelles symétries du système (comme les invariances de jauge).

2.1 Particule dans un champ magnétique

Un exemple simple[6] est celui d'une particule dans un champ magnétique. Son lagrangien est de la forme

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 + \frac{e}{c} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}(\vec{x}) \quad (2.1)$$

Avec une impulsion canonique de :

$$\vec{p} = \vec{\nabla} L = m\dot{\vec{x}} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}) \quad (2.2)$$

Et ainsi un hamiltonien classique

$$H = \vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - L = \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 = \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}) \right)^2 \quad (2.3)$$

qui contient le terme $-2\frac{e}{c} \vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{x})$.

L'hamiltonien quantique sera de la forme (avec $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$) :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} [\hat{p}^2 + \left(\frac{e}{c} \vec{A}(\hat{x}) \right)^2 + \frac{e}{c} (\alpha\hat{p}\vec{A}(\hat{x}) + \beta\vec{A}(\hat{x})\hat{p})] \quad (2.4)$$

avec la condition $\alpha + \beta = -2$. Le conjugué du terme mixte donne :

$$\begin{aligned} (\alpha\hat{p}\vec{A}(\hat{x}) + \beta\vec{A}(\hat{x})\hat{p})^\dagger &= \alpha\vec{A}(\hat{x})^\dagger\hat{p}^\dagger + \beta\hat{p}^\dagger\vec{A}(\hat{x})^\dagger \\ &= \alpha\vec{A}(\hat{x})\hat{p} + \beta\hat{p}\vec{A}(\hat{x}) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Pour conserver l'hermiticité, il faut donc $\alpha = \beta = -1$. On peut condenser cet hamiltonien sous la forme

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\hat{x}) \right)^2 \quad (2.6)$$

qui est une forme similaire à (2.3). Les intégrales de chemin n'utilisant pas d'opérateurs, il n'existe à première vue pas d'équivalent direct de ce problème.

En utilisant directement l'intégrale de Feynman, on a la formule :

$$K(\vec{x}_b, t_b; \vec{x}_a, t_a) = \int_a^b \mathcal{D}\vec{x}(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 + \frac{e}{c} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}(\vec{x}) dt} \quad (2.7)$$

$$= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N \frac{m}{2} \frac{(\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1})^2}{\varepsilon} + \frac{e}{c} (\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}) \cdot \vec{A}(\vec{x}_i)} \prod_{i=1}^{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{D}{2}} d\vec{x}_i \quad (2.8)$$

Pour en vérifier la validité, on passera à l'équation de Schrödinger par la méthode habituelle.

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{x}_b, t_a + \varepsilon) &= \int_{-\infty}^{\infty} K(\vec{x}_b, t_a + \varepsilon; \vec{x}_a, t_a) \psi(\vec{x}_a, t_a) d\vec{x}_a \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{D}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \frac{\vec{x}_b - \vec{x}_a}{\varepsilon} + \frac{e}{c} (\vec{x}_b - \vec{x}_a) \cdot \vec{A}(\vec{x}_b) \right)} \psi(\vec{x}_a, t_a) d\vec{x}_a \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{D}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \frac{\eta^2}{\varepsilon} - \frac{e}{c} \vec{\eta} \cdot \vec{A}(\vec{x}_b) \right)} \psi(\vec{x}_b + \vec{\eta}, t_a) d\vec{\eta} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{D}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{\eta^2}{\varepsilon}} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{e}{c} \vec{\eta} \cdot \vec{A}(\vec{x}_b) - \frac{e^2}{2\hbar^2 c^2} \eta^2 A^2(\vec{x}_b) + \mathcal{O}(\eta^3) \right) \\
&\quad \left(\psi(\vec{x}_b, t_a) + \vec{\eta} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{x}_b, t_a) + \frac{1}{2} \eta^2 \Delta \psi(\vec{x}_b, t_a) + \mathcal{O}(\eta^3) \right) d\vec{\eta} \\
&= \psi(\vec{x}_b, t_a) + \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} \Delta \psi(\vec{x}_b, t_a) + \frac{e\varepsilon}{cm} \vec{A}(\vec{x}_b) \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{x}_b, t_a) - \frac{ie^2\varepsilon}{2\hbar c^2 m} A^2(\vec{x}_b) \psi(\vec{x}_b, t_a) \\
\\
-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}_b, t_a) &= i^2 \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{x}_b, t_a) + \frac{i\hbar e}{cm} \vec{A}(\vec{x}_b) \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{x}_b, t_a) + \frac{e^2}{2c^2 m} A^2(\vec{x}_b) \psi(\vec{x}_b, t_a) \\
&= \frac{1}{2m} (i^2 \hbar^2 \vec{\nabla}^2 + 2 \frac{i\hbar e}{c} \vec{A}(\vec{x}_b) \cdot \vec{\nabla} + \frac{e^2}{c^2} A^2(\vec{x}_b)) \psi(\vec{x}_b, t_a) \\
&= \frac{1}{2m} (\hat{p}^2 - 2 \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}_b) \hat{p} + \frac{e^2}{c^2} A^2(\vec{x}_b)) \psi(\vec{x}_b, t_a) \tag{2.9}
\end{aligned}$$

Résultat qui contraste avec le résultat du formalisme de Schrödinger, $(\hat{p} - \frac{e}{A} \vec{A}(\hat{x}))^2$, qui contient un terme en $\vec{\nabla} \cdot \vec{A}$. L'hamiltonien quantique obtenu n'est pas hermitien.

Le problème vient du fait que le trajet de la particule est une fonction entre t_a et t_b complètement arbitraire, une fonction qui ne sera pas forcément dérivable ou intégrable au sens de Riemann. Afin d'obéir au principe d'incertitude, la trajectoire de la particule est une fractale de dimension d'Hausdorff 2 dans l'espace des configurations [7], et discontinue dans l'espace des phases [8]. Ainsi, contrairement à une intégrale de Riemann, le point auquel la fonction est considérée dans la somme de Riemann a son importance. Le principe d'incertitude donne la relation suivante [7] :

$$\Delta x \Delta p \approx \hbar \rightarrow \Delta x^2 \approx \frac{\hbar \Delta t}{m} \tag{2.10}$$

qui permet ainsi d'obtenir l'intégrale nécessaire (*cf.* Annexe B). Ce résultat concorde par ailleurs avec les trajectoires des particules dans le cas de l'intégrale de chemin de Wiener, le théorème de Wiener précisant que les fonctions contribuant à l'intégrale sont les fonctions continues mais non-dérivables en tous points.

L'intégrale finalement trouvée (*cf.* Annexe B) est de la forme :

$$\otimes \int_{t_a}^{t_b} \vec{\nabla} f(\vec{x}(t)) \cdot \dot{\vec{x}}(t) dt = f(\vec{x}_b) - f(\vec{x}_a) - \left(\frac{1}{2} - \lambda \right) D \int_{t_a}^{t_b} \nabla^2 f(\vec{x}(t)) dt$$

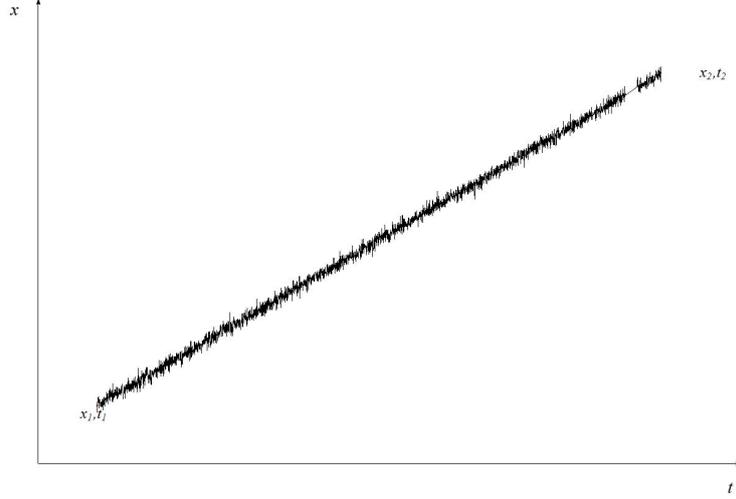


FIGURE 5 – Exemple d'un chemin quantique contribuant à l'intégrale. Qu'importe l'intervalle de temps considéré, la particule n'a pas de position précise dans l'espace.

On prendra ainsi, au lieu de x_i , le point $\tilde{x}_i = x_i - \lambda \Delta x = x_i - \lambda(x_i - x_{i-1})$, où λ sera un paramètre entre zéro et un, situant la fonction quelque part entre les deux points considérés.

L'action sera donc :

$$\begin{aligned}
 S &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_{i=1}^N \frac{m}{2} \frac{(\Delta \vec{x}_i)^2}{\varepsilon} + \frac{e}{c} \Delta \vec{x}_i \cdot \vec{A}(\vec{x}_i + \lambda \Delta \vec{x}_i) \\
 &= \textcircled{\times} \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 + \frac{e}{c} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}(\vec{x}) \right) dt
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

Le terme du potentiel vecteur magnétique correspond à une intégrale stochastique de paramètre λ (*cf.* Annexe B). Le passage à l'équation de Schrödinger devient alors :

$$\begin{aligned}
 \psi(\vec{x}_b, t_a + \varepsilon) &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon} \right)^{\frac{D}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \frac{\eta^2}{\varepsilon} - \frac{e}{c} [\vec{\eta} \cdot \vec{A}(\vec{x}_b) + \lambda \eta^2 \vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{x}_b)] \right)} \psi(\vec{x}_b + \vec{\eta}, t_a) d\vec{\eta} \\
 &= \psi(\vec{x}_b, t_a) + \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} \Delta \psi(\vec{x}_b, t_a) + \frac{e\varepsilon}{cm} \vec{A}(\vec{x}_b) \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{x}_b, t_a) \\
 &\quad - \frac{ie^2\varepsilon}{2\hbar c^2 m} A^2(\vec{x}_b) \psi(\vec{x}_b, t_a) + \frac{e\varepsilon}{mc} \lambda (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{x}_b)) \psi(\vec{x}_b, t_a) \\
 \\
 -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}_b, t_a) &= i^2 \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{x}_b, t_a) + \frac{i\hbar e}{cm} \vec{A}(\vec{x}_b) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}_b, t_a) + \frac{e^2}{2c^2 m} A^2(\vec{x}_b) \psi(\vec{x}_b, t_a) \\
 &\quad - \frac{ie\hbar}{mc} \lambda (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{x}_b)) \psi(\vec{x}_b, t_a) \\
 &= \frac{1}{2m} (\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}_b)) \hat{p} + 2 \frac{ie\hbar}{c} \lambda (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{x}_b)) + \frac{e^2}{c^2} A^2(\vec{x}_b) \psi(\vec{x}_b, t_a)
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

Il faut ainsi avoir $\lambda = \frac{1}{2}$ pour retrouver les résultats ordinaires de l'équation de Schrödinger.

Ce résultat peut par ailleurs se retrouver sans faire appel à Schrödinger, simplement en considérant la transformation de jauge[6] :

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla}\alpha(\vec{x}) \quad (2.13)$$

$$\psi(\vec{x}) \rightarrow e^{\frac{i}{\hbar}\frac{e}{c}\alpha(\vec{x})}\psi(\vec{x}) \quad (2.14)$$

$$K(b, a) \rightarrow e^{\frac{i}{\hbar}\frac{e}{c}\alpha(\vec{x}_b)}K(b, a)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{e}{c}\alpha(\vec{x}_a)} \quad (2.15)$$

L'action se transforme alors suivant

$$S \rightarrow S + \frac{e}{c} \oint_{t_a}^{t_b} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{\nabla}\alpha(\vec{x}) dt \quad (2.16)$$

qui s'intègre stochastiquement pour donner

$$\oint_{t_a}^{t_b} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{\nabla}\alpha(\vec{x}) dt = \alpha(\vec{x}_b) - \alpha(\vec{x}_a) + \left(\frac{1}{2} - \lambda\right) \frac{\hbar}{m} \int_{t_a}^{t_b} \Delta\alpha(\vec{x}) dt \quad (2.17)$$

L'intégrale de chemin obtient ainsi le facteur

$$e^{\frac{ie}{\hbar c}\alpha(\vec{x}_b)} e^{-\frac{ie}{\hbar c}\alpha(\vec{x}_a)} e^{\frac{ie}{m c}(\frac{1}{2}-\lambda) \int_{t_a}^{t_b} \Delta\alpha(\vec{x}) dt} \quad (2.18)$$

Les deux premiers facteurs correspondent à la transformation de jauge du propagateur. Afin d'obtenir le même propagateur, on prendra $\lambda = \frac{1}{2}$ afin d'annuler le troisième terme de l'intégrale stochastique. On arrive ainsi au même résultat pour le paramètre λ afin de conserver l'invariance de jauge.

2.2 Symbole d'un opérateur

Une méthode plus générale pour résoudre ce genre de cas est d'utiliser le formalisme des symboles, qui permet de relier la forme de l'hamiltonien classique à l'ordonnement des opérateurs en mécanique quantique.

Dans les deux cas, les observables du système sont entièrement déterminées par ses coordonnées dans l'espace des phases (on ignorera ici le spin et autres caractéristiques quantiques). Pour peu que l'observable soit une fonction analytique, on a :

$$f(x, p) = \sum_{m, n=0}^{\infty} c_{mn} x^m p^n \quad (2.19)$$

De même, dans le cas de l'opérateur associé à cette observable

$$\hat{f} = \sum_{m, n=0}^{\infty} c'_{mn} \hat{x}^m \hat{p}^n \quad (2.20)$$

Les opérateurs \hat{x} et \hat{p} ne sont pas commutatifs, mais on pourra toujours absorber un éventuel commutateur dans les constantes des termes d'ordre inférieur. Par exemple, $\hat{p}\hat{x}$ pourra se réécrire $\hat{x}\hat{p} - i\hbar$, où l'on remplace simplement le facteur d'ordre 0 par $i\hbar$.

Si l'on veut continuer à utiliser la fonction f dans le cadre de la mécanique quantique, comme c'est le cas pour les intégrales de chemin, il faudra la redéfinir de façon à inclure l'absence générale de commutation entre différentes observables. On introduit pour cela le produit de Moyal, ou produit étoile, défini afin que si la fonction f est associée à l'opérateur \hat{f} (ce qu'on appelle le symbole de \hat{f}), on a :

$$\hat{f} = \hat{f}_1 \hat{f}_2 \rightarrow f = f_1 \star f_2 \quad (2.21)$$

On imposera deux conditions à ce produit afin qu'il corresponde bien à la mécanique classique :

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} f_1 \star f_2 = f_1 f_2 \quad (2.22)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{i}{\hbar} (f_1 \star f_2 - f_2 \star f_1) = \{f_1, f_2\} \quad (2.23)$$

Où $\{ , \}$ sont les crochets de Poisson, et le commutateur du produit de Moyal se nomme les crochets de Moyal.

La relation entre un opérateur et son symbole dépend de l'ordonnement des opérateurs qu'on choisit. Le cas le plus simple est le symbole de Weyl, qui correspond à l'ordonnement suivant :

$$\hat{f} = \sum_{m,n=0}^{\infty} c_{mn}((\hat{x}^m \hat{p}^n)) \quad (2.24)$$

Où $((\dots))$ est le produit symétrique, défini par

$$\left(\sum_i^N \alpha_i \hat{A}_i \right)^k = \sum_{k_1 + \dots + k_N = k} k! \left(A_1^{k_1} \dots A_N^{k_N} \right) \prod_{i=1}^N \frac{\alpha_i^{k_i}}{k_i!} \quad (2.25)$$

Soit, dans le cas de deux opérateurs :

$$(\alpha \hat{A} + \beta \hat{B})^k = \sum_{m+l=k} \frac{k!}{m!l!} \alpha^m \beta^l ((\hat{A}^m \hat{B}^l)) \quad (2.26)$$

Ce qui correspond à toutes les combinaisons possibles de ces opérateurs divisés par le nombre de combinaisons. Pour des cas simples :

$$\begin{aligned} ((\hat{x})) &= \hat{x}, \quad ((\hat{p})) = \hat{p} \\ ((\hat{x}\hat{p})) &= \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) \\ ((\hat{x}^2\hat{p})) &= \frac{1}{3}(\hat{x}^2\hat{p} + \hat{p}\hat{x}^2 + \hat{x}\hat{p}\hat{x}) \end{aligned}$$

Le symbole de Weyl et son opérateur sont liés par la transformée de Fourier d'une même fonction, dans l'espace des phases et l'espace des opérateurs (\hat{p} et \hat{x} sont ici des vecteurs d'opérateurs).

$$\hat{f} = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{s} d\vec{r} e^{i(\vec{s}\hat{p} + \vec{r}\hat{x})} \tilde{f}_w(\vec{s}, \vec{r}) \quad (2.27)$$

$$f(\vec{p}, \vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{s} d\vec{r} e^{i(\vec{s}\vec{p} + \vec{r}\vec{x})} \tilde{f}_w(\vec{s}, \vec{r}) \quad (2.28)$$

Et la relation inverse définie par la transformée inverse de Fourier.

On peut bien vérifier la correspondance entre cette définition de l'opérateur et l'ordonnement de Weyl, simplement en développant l'exponentielle :

$$e^{i(\vec{s}\hat{p} + \vec{r}\hat{x})} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} (\vec{s}\hat{p} + \vec{r}\hat{x})^n \quad (2.29)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m+l=n} \frac{n!}{m!l!} \vec{s}^m \vec{r}^l ((\hat{p}^m \hat{x}^l)) \quad (2.30)$$

Les coefficients de la série de \hat{f} étant donc liés à la fonction \tilde{f}_w .

En appliquant l'opérateur \hat{f} à une fonction d'onde $\psi(x)$, on obtient ce terme :

$$e^{i(\vec{s}\hat{p} + \vec{r}\hat{x})} \psi(\vec{x}) \quad (2.31)$$

Par la formule de Zassenhaus, on a

$$e^{(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]} e^{\frac{1}{6}(2[\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]]+[\hat{A},[\hat{B},\hat{A}]])} \dots \quad (2.32)$$

Le commutateur de \hat{x} et \hat{p} étant un scalaire, les commutateurs d'ordre supérieurs sont tous nuls, et on a donc :

$$e^{i(\vec{s}\hat{p}+\vec{r}\hat{x})} = e^{-i\hbar\frac{\vec{r}\cdot\vec{s}}{2}} e^{i\vec{s}\hat{p}} e^{i\vec{r}\hat{x}} = e^{i\hbar\frac{\vec{r}\cdot\vec{s}}{2}} e^{i\vec{r}\hat{x}} e^{i\vec{s}\hat{p}} \quad (2.33)$$

Appliqué à la fonction d'onde $\psi(\vec{x})$

$$e^{i\vec{s}\hat{p}} f(\vec{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\hbar\vec{s}\cdot\vec{\nabla})^n}{n!} f(\vec{x}) = f(\vec{x} + \hbar\vec{s}) \quad (2.34)$$

$$e^{-i\hbar\frac{\vec{r}\cdot\vec{s}}{2}} e^{i\vec{s}\hat{p}} e^{i\vec{r}\hat{x}} \psi(\vec{x}) = e^{-i\hbar\frac{\vec{r}\cdot\vec{s}}{2}} e^{i\vec{s}\hat{p}} e^{i\vec{r}\cdot\vec{x}} \psi(\vec{x}) \quad (2.35)$$

$$= e^{-i\hbar\frac{\vec{r}\cdot\vec{s}}{2}} e^{i\vec{r}\cdot(\vec{x}+\hbar\vec{s})} \psi(\vec{x} + \hbar\vec{s}) \quad (2.36)$$

$$= e^{i\vec{r}\cdot(\vec{x}+\hbar\frac{\vec{s}}{2})} \psi(\vec{x} + \hbar\vec{s}) \quad (2.37)$$

D'où la formule

$$\hat{f}\psi(\vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{s} d\vec{r} e^{i\vec{r}\cdot(\vec{x}+\hbar\frac{\vec{s}}{2})} \psi(\vec{x} + \hbar\vec{s}) \tilde{f}_w(\vec{s}, \vec{r}) \quad (2.38)$$

On remplace alors f_w par son expression selon le symbole de Weyl de \hat{f}

$$\begin{aligned} \hat{f}\psi(\vec{x}) &= \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{s} d\vec{r} d\vec{x}' d\vec{p} e^{-i(\vec{s}\cdot\vec{p}+\vec{r}\cdot\vec{x}')} e^{i\vec{r}\cdot(\vec{x}+\hbar\frac{\vec{s}}{2})} \psi(\vec{x} + \hbar\vec{s}) f(\vec{p}, \vec{x}') \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{s} d\vec{r} d\vec{x}' d\vec{p} e^{i(\vec{r}\cdot(\vec{x}-\vec{x}'+\hbar\frac{\vec{s}}{2})-\vec{s}\cdot\vec{p})} \psi(\vec{x} + \hbar\vec{s}) f(\vec{p}, \vec{x}') \end{aligned} \quad (2.39)$$

En intégrant sur \vec{r} , on obtient :

$$\begin{aligned} \hat{f}\psi(\vec{x}) &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{s} d\vec{x}' d\vec{p} \delta^d(\vec{x} - \vec{x}' + \hbar\frac{\vec{s}}{2}) e^{-i\vec{s}\cdot\vec{p}} \psi(\vec{x} + \hbar\vec{s}) f(\vec{p}, \vec{x}') \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{s} d\vec{p} e^{-i\vec{s}\cdot\vec{p}} \psi(\vec{x} + \hbar\vec{s}) f(\vec{p}, \vec{x} + \frac{\hbar\vec{s}}{2}) \end{aligned} \quad (2.40)$$

En utilisant la variable $\vec{y} = \vec{x} + \hbar\vec{s}$, avec un jacobien de \hbar^{-d} , on obtient finalement :

$$\hat{f}\psi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{y} d\vec{p} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{x}-\vec{y})\cdot\vec{p}} \psi(\vec{y}) f(\vec{p}, \frac{\vec{x}+\vec{y}}{2}) \quad (2.41)$$

On pourra ainsi définir l'action d'un opérateur sur une fonction d'onde grâce au noyau de l'opérateur \hat{f} ,

$$K_f(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{p} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{x}-\vec{y})\cdot\vec{p}} f(\vec{p}, \frac{\vec{x}+\vec{y}}{2}) \quad (2.42)$$

par la relation habituelle

$$\hat{f}\psi(\vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{y} K_f(\vec{x}, \vec{y}) \psi(\vec{y}) \quad (2.43)$$

On peut remarquer que ce propagateur utilise le symbole pris au point médian. En reprenant l'équation (1.17), on peut voir que dans le cas du propagateur infinitésimal, on aura le symbole de l'hamiltonien pris à $\vec{x} + \frac{d\vec{x}}{2}$, correspondant au cas $\lambda = \frac{1}{2}$ vu précédemment. On peut également le deviner à partir de l'hamiltonien quantique, qui est le carré du potentiel ajouté à l'impulsion,

similaire à la définition du produit symétrique. Le cas $\lambda = \frac{1}{2}$ sera donc le plus simple dans le cas d'un potentiel vecteur qui se traduira par une dérivée covariante du type

$$\hat{H} = (\hat{p} + \sum \vec{V}_i(\hat{x}))^2 \quad (2.44)$$

Pour trouver la transformation de Weyl inverse, on prendra le noyau de f $K_f(\vec{x} - \frac{\vec{y}}{2}, \vec{x} + \frac{\vec{y}}{2})$, qui nous donne une transformée de f . En prenant sa transformée inverse :

$$f(\vec{p}, \vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{y} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{y}\cdot\vec{p}} K_f(\vec{x} - \frac{\vec{y}}{2}, \vec{x} + \frac{\vec{y}}{2})$$

À partir de la définition de K_f et des produits $\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle$, on peut prouver la relation inverse :

$$\hat{f}(\hat{p}, \hat{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{k} d\vec{q} d\vec{u} f(\vec{k}, \vec{q}) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{q}\cdot\vec{u}} |\vec{p} + \frac{\vec{u}}{2}\rangle \langle \vec{p} + \frac{\vec{u}}{2}| \quad (2.45)$$

On a ainsi une relation simple entre un opérateur et son symbole. Grâce à cette formule, on peut ainsi déterminer la formule du produit de Moyal pour deux symboles, simplement en utilisant cette formule pour l'application de deux opérateurs :

$$\hat{f} = \hat{f}_1 \hat{f}_2 \rightarrow K_f(\vec{x}, \vec{y}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{z} K_{f_1}(\vec{x}, \vec{z}) K_{f_2}(\vec{z}, \vec{y})$$

$$\begin{aligned} f(\vec{p}, \vec{x}) &= (f_1 \star f_2)(\vec{p}, \vec{x}) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{y} d\vec{z} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{y}\cdot\vec{p}} K_{f_1}(\vec{x} - \frac{\vec{y}}{2}, \vec{z}) K_{f_2}(\vec{z}, \vec{x} + \frac{\vec{y}}{2}) \\ &= 2^d \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{y} d\vec{z} e^{\frac{i}{\hbar}2\vec{y}\cdot\vec{p}} K_{f_1}(\vec{x} - \vec{y}, \vec{z}) K_{f_2}(\vec{z}, \vec{x} + \vec{y}) \\ &= \frac{1}{2^d(\pi\hbar)^{2d}} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{y} d\vec{z} d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 e^{\frac{i}{\hbar}[(\vec{x}-\vec{y}-\vec{z})\cdot\vec{p}_1 + (\vec{z}-\vec{x}-\vec{y})\cdot\vec{p}_2 + 2\vec{y}\cdot\vec{p}]} f_1(\vec{p}_1, \frac{\vec{x}-\vec{y}+\vec{z}}{2}) f_2(\vec{p}_2, \frac{\vec{z}+\vec{x}+\vec{y}}{2}) \end{aligned}$$

On définit les variables $\vec{x}_1 = \frac{\vec{x}-\vec{y}+\vec{z}}{2}$ et $\vec{x}_2 = \frac{\vec{z}+\vec{x}+\vec{y}}{2}$, avec le Jacobien 2^{-d} , pour donner finalement :

$$(f_1 \star f_2)(\vec{p}, \vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{2d}} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 e^{\frac{i}{\hbar}[(\vec{x}-\vec{x}_2)\cdot\vec{p}_1 + (\vec{x}_1-\vec{x})\cdot\vec{p}_2 + (\vec{x}_2-\vec{x}_1)\cdot\vec{p}]} f_1(\vec{p}_1, \vec{x}_1) f_2(\vec{p}_2, \vec{x}_2)$$

On peut par ailleurs vérifier la limite classique de cette expression, en utilisant la méthode de la phase stationnaire :

$$\int F(x) e^{\frac{i}{\delta}S(x)} dx = (2\pi\delta)^{\frac{n}{2}} |\det D|^{-\frac{1}{2}} [F(x_0) e^{\frac{i}{\delta}S(x_0) + \frac{1}{4}i\pi\nu} + \mathcal{O}(\delta)] \quad (2.46)$$

$$\frac{\partial S(\vec{x}, \vec{p})}{\partial \vec{x}_1} + \frac{\partial S(\vec{x}, \vec{p})}{\partial \vec{x}_2} = \vec{p}_2 - \vec{p} - \vec{p}_1 + \vec{p} = \vec{p}_2 - \vec{p}_1 \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial S(\vec{x}, \vec{p})}{\partial \vec{p}_1} + \frac{\partial S(\vec{x}, \vec{p})}{\partial \vec{p}_2} = \vec{x} - \vec{x}_2 + \vec{x}_1 - \vec{x} = -\vec{x}_2 + \vec{x}_1 \quad (2.48)$$

qui s'annule pour $\vec{x}_1 = \vec{x}_2$ et $\vec{p}_1 = \vec{p}_2$. Pour ces valeurs également, $S(\vec{x}, \vec{p})$ s'annule.

$$(f_1 \star f_2)(p, x) = (2\pi\hbar)^{2d} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{2d}} |\det D|^{-\frac{1}{2}} [f_1(\vec{p}, \vec{x}) f_2(\vec{p}, \vec{x}) e^{\frac{1}{4}i\pi\nu} + \mathcal{O}(\hbar)] \quad (2.49)$$

$$= f_1(\vec{p}, \vec{x}) f_2(\vec{p}, \vec{x}) + \mathcal{O}(\hbar) \quad (2.50)$$

On retrouve donc bien la limite classique dans la limite $\hbar \rightarrow 0$.

Une autre définition du produit de Moyal [9] s'exprime comme la série :

$$f \star g = \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n C_n(f, g) = fg + \frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \frac{\partial g}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial g}{\partial \vec{p}} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \right) + \mathcal{O}(\hbar^2) \quad (2.51)$$

avec laquelle on retrouve immédiatement la limite classique, à la fois pour le produit de Moyal et le crochet de Moyal.

2.3 Lien entre les symboles et l'intégrale stochastique

On a vu pourquoi les symboles de Weyl correspondent au cas $\lambda = \frac{1}{2}$, mais de manière plus générale, on peut définir les symboles pour n'importe quel ordonnement, en remplaçant la transformée de Fourier par

$$\hat{f} = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{s} d\vec{r} e^{i(\vec{s}\hat{p} + \vec{r}\hat{x})} \Omega(\vec{s}, \vec{r}) \tilde{f}(\vec{s}, \vec{r}) \quad (2.52)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{p} d\vec{x} d\vec{s} d\vec{r} e^{i(\vec{s}(\hat{p} - \vec{p}) + \vec{r}(\hat{x} - \vec{x}))} \Omega(\vec{s}, \vec{r}) \tilde{f}(\vec{s}, \vec{r}) \quad (2.53)$$

Pour

$$f(\vec{p}, \vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{s} d\vec{r} e^{i(\vec{s}\vec{p} + \vec{r}\vec{x})} \tilde{f}(\vec{s}, \vec{r}) \quad (2.54)$$

Dans le cas où la fonction \tilde{f} est défini à partir de l'opérateur \hat{f} (comme dans (2.3)), qu'on appellera alors par exemple \tilde{f}_{Ω} , on aura la relation inverse :

$$f(\vec{p}, \vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{s} d\vec{r} e^{i(\vec{s}\vec{p} + \vec{r}\vec{x})} \Omega^{-1}(\vec{s}, \vec{r}) \tilde{f}_{\Omega}(\vec{s}, \vec{r}) \quad (2.55)$$

Une fonction Ω utile est celle définie par

$$\Omega_{\alpha}(\vec{s}, \vec{r}) = e^{i(\frac{1}{2} - \alpha)\vec{s}\vec{r}} \quad (2.56)$$

Le paramètre α correspond au paramètre λ vu précédemment, dont les ordonnements équivalents peuvent être vus par exemple chez Valtakoski[10] dans le cas d'un hamiltonien avec une métrique non-euclidienne et un potentiel vecteur. On voit bien ainsi que $\lambda = \frac{1}{2}$ correspond bien à la fonction Ω de Weyl. D'autres ordonnements utiles sont [10, 6] :

	$\Omega(\vec{s}, \vec{r})$	Action	Ordonnement
Weyl	1	$\lambda = \frac{1}{2}$	$((\hat{x}^n \hat{p}^m))$
Symétrique	$\cos\left(\frac{\vec{s}\vec{r}}{2}\right)$	$\frac{1}{2}(L(x_i) + L(x_{i+1}))$	$\frac{1}{2}(\hat{x}^n \hat{p}^m + \hat{p}^m \hat{x}^n)$
Standard	$e^{-\frac{i\vec{s}\vec{r}}{2}}$	$\lambda = 1$	$\hat{x}^n \hat{p}^m$
Anti-standard	$e^{\frac{i\vec{s}\vec{r}}{2}}$	$\lambda = 0$	$\hat{p}^m \hat{x}^n$

Pour reprendre un exemple vu précédemment, on avait dans le cas du champ magnétique pour $\lambda = 0$ un facteur $e^{\frac{ie}{2mc} \int_a^{t_b} \Delta\alpha(\vec{x}) dt}$ lors d'une transformation de jauge, et on avait l'hamiltonien quantique correspondant :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}^2 - 2\frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}_b) \hat{p} + \frac{e^2}{c^2} A^2(\vec{x}_b)) \quad (2.57)$$

Puisqu'on a $\lambda = 0$, réécrivons cet hamiltonien avec l'ordonnement anti-standard :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}^2 - 2\frac{e}{c} [\hat{p} \vec{A}(\vec{x}_b) - i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{x}_b)] + \frac{e^2}{c^2} A^2(\vec{x}_b)) \quad (2.58)$$

Afin d'arriver au bon lagrangien pour ce cas, partons du cas hermitien de $\lambda = \frac{1}{2}$, et convertissons le vers l'ordonnement anti-standard. On peut remarquer que (2.58) est similaire à (2.6), si ce n'est que le facteur $\vec{\nabla} \cdot \vec{A}$ a un facteur 2. Il faut ainsi ajouter un potentiel avec ce terme afin d'équilibrer l'hamiltonien. On peut le voir simplement en changeant le terme en $\hat{x}^n \hat{p}^m$ de (2.6) en un terme en $\hat{p}^m \hat{x}^n$. Il s'agit ici de $-\frac{e}{2mc} \vec{A}(\hat{x}) \hat{p}$, qui est équivalent à $-\frac{e}{2mc} \hat{p} \vec{A}(\hat{x}) + \frac{i\hbar e}{2mc} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\hat{x}))$. Le terme supplémentaire se retrouve dans l'équation (2.12), correspondant à un potentiel sous la forme d'une divergence du potentiel vecteur magnétique (en se rappelant que $\eta^2 \propto \varepsilon$, pour l'action), donnant ainsi le lagrangien :

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 + \frac{e}{c} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}(\vec{x}) - \frac{\hbar e}{2mc} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \quad (2.59)$$

avec l'action correspondant à une intégrale d'Itô de ce lagrangien. Le nouveau terme a la transformation de jauge :

$$-\frac{\hbar e}{2mc} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \rightarrow -\frac{\hbar e}{2mc} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} - \frac{\hbar e}{2mc} \Delta \alpha(\vec{x}) \quad (2.60)$$

Une fois intégré dans l'action et rajouté à l'exponentielle de l'intégrale des chemins, il s'agit de l'inverse du facteur précédemment obtenu. On obtient ainsi bien une invariance de jauge. Le potentiel lui-même disparaît lors de l'intégration stochastique de l'action :

$$\begin{aligned} \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 + \frac{e}{c} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}(\vec{x}) - \frac{\hbar e}{2mc} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \right] \bullet dt &= \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 + \frac{e}{c} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}(\vec{x}) - \frac{\hbar e}{2mc} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \right] dt \\ &\quad - \frac{\hbar}{2m} \int_{t_a}^{t_b} \frac{e}{c} \vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{x}) dt \\ &= \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 + \frac{e}{c} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}(\vec{x}) \right) dt \end{aligned} \quad (2.61)$$

Au final, on se retrouve avec le même résultat que pour la méthode de Weyl, qui n'ajoute aucun potentiel et dont l'intégrale stochastique est similaire à celle de Riemann.

3 Intégrale de chemin dans un espace de Riemann

3.1 Équation de Schrödinger dans un espace courbe

Un espace courbé est un des exemples où le problème d'ordonnement des opérateurs surgit. Le Lagrangien d'une particule libre est alors de la forme

$$L = \frac{m}{2} g_{ab}(x) \dot{x}^a \dot{x}^b \quad (3.1)$$

(On utilise ici les indices latins car on ne considèrera que la courbure de l'espace et non celle de l'espace-temps)

L'hamiltonien quantique est de sa forme habituelle, mais le laplacien ordinaire d'un espace euclidien doit être remplacé par l'opérateur de Laplace-Beltrami si l'on veut conserver des quantités covariantes.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{LB} \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{LB} &= \frac{1}{\sqrt{g}} \partial_a \sqrt{g} g^{ab} \partial_b \\ &= g^{ab} \partial_a \partial_b + g^{ab} (\partial_a \ln \sqrt{g}) \partial_b + (\partial_a g^{ab}) \partial_b \end{aligned} \quad (3.3)$$

Et le produit scalaire est redéfini par

$$\langle \psi, \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi \phi^* \sqrt{g} d^n x \quad (3.4)$$

avec g le déterminant du tenseur métrique.

On définit l'opérateur d'impulsion sous la forme

$$\hat{p}_a = -i\hbar(\partial_a + \frac{1}{2}\Gamma_a) = -i\hbar(\partial_a + \frac{1}{2}(\partial_a \ln \sqrt{g})) \quad (3.5)$$

qui est bien hermitienne sous le nouveau produit scalaire et respecte la relation de commutation canonique. Pour s'en rendre compte, on intégrera simplement $\int \psi (i\hbar \partial) \psi^* \sqrt{g} d^n x$ par partie :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi (i\hbar \partial_a \psi^*) \sqrt{g} d^n x &= [\psi \psi^* \sqrt{g}]_{-\infty}^{\infty} - i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* ((\partial_a \psi) \sqrt{g} + \psi (\partial_a \sqrt{g})) d^n x \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (-i\hbar(\partial_a + \Gamma_a)) \psi \sqrt{g} d^n x \end{aligned}$$

en ajoutant $i\hbar \frac{1}{2} \Gamma_a$ des deux côtés, on reste bien hermitien. L'hamiltonien quantique du lagrangien $g_{ab}(x) \dot{x}^a \dot{x}^b$ a trois combinaisons possible. La plus simple est

$$g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_a \hat{p}_b = -\hbar^2 g^{ab} (\partial_a \partial_b + \Gamma_a \partial_b + \frac{1}{2} \Gamma_{b,a} + \frac{1}{4} \Gamma_a \Gamma_b) \quad (3.6)$$

Pour obtenir les autres, il suffira de définir la commutation de l'impulsion covariante avec un tenseur quelconque

$$[\hat{p}_a, T^{bc\dots}] = -i\hbar \partial_a T^{bc\dots} = -i\hbar T^{bc\dots, a} \quad (3.7)$$

Ainsi, on peut déduire les autres combinaisons :

$$\hat{p}_a g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_b = g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_a \hat{p}_b - i\hbar g^{ab, a} \hat{p}_b \quad (3.8)$$

$$\hat{p}_a \hat{p}_b g^{ab}(\hat{x}) = \hat{p}_a g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_b - i\hbar \hat{p}_a g^{ab}_{,b} \quad (3.9)$$

$$= g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_a \hat{p}_b - i\hbar (g^{ab}_{,a} \hat{p}_b + g^{ab}_{,b} \hat{p}_a) + i^2 \hbar^2 g^{ab}_{,b} \hat{p}_a \quad (3.10)$$

La symétrie du tenseur métrique donne la relation

$$g^{ab}(A_a B_b + B_a A_b) = 2g^{ab} A_a B_b \quad (3.11)$$

D'où

$$\hat{p}_a \hat{p}_b g^{ab}(\hat{x}) = g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_a \hat{p}_b - 2i\hbar g^{ab}_{,a} \hat{p}_b - \hbar^2 g^{ab}_{,ab} \quad (3.12)$$

On pourra ainsi tenter retrouver l'opérateur de Laplace-Beltrami par une combinaison linéaire de ces trois opérateurs

$$\alpha g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_a \hat{p}_b + \beta \hat{p}_a g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_b + \gamma \hat{p}_a \hat{p}_b g^{ab} \quad (3.13)$$

donnant la formule :

$$\begin{aligned} & -\hbar^2 [(\alpha + \beta + \gamma) g^{ab}(\partial_a \partial_b + \Gamma_a \partial_b) + (\beta + 2\gamma) g^{ab}_{,a} \partial_b \\ & + \frac{\alpha + \beta + \gamma}{2} g^{ab}(\Gamma_{b,a} + \frac{\Gamma_a \Gamma_b}{2}) + (\gamma + \frac{\beta}{2}) g^{ab}_{,a} \Gamma_b + \gamma g^{ab}_{,ab}] \end{aligned} \quad (3.14)$$

On peut néanmoins voir qu'on a des termes surnuméraires si on compare cette formule à (3.3). On rajoutera donc un potentiel $\Delta V(x)$ pour les absorber. Afin de contraindre α , β et γ , on comparera donc cette combinaison linéaire et son potentiel ΔV à l'opérateur de Laplace-Beltrami. Si l'on nomme (3.14) p^2 , on retrouvera l'opérateur de Laplace-Beltrami par cette formule.

$$\frac{p^2}{2m} + \Delta V(\hat{x}) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_{LB} = \frac{-\hbar^2}{2m} [g^{ab} \partial_a \partial_b + g^{ab} \Gamma_a \partial_b + g^{ab}_{,a} \partial_b] \quad (3.15)$$

qui impose ainsi la condition que $\alpha + \beta + \gamma$ et $\beta + 2\gamma$ doivent toujours être égaux à 1, impliquant par ailleurs $\alpha = \gamma$. Les termes ne dépendant que de la métrique sont retirés par le potentiel $\Delta V(x)$, qui vaut alors

$$\Delta V = \frac{\hbar^2}{8m} [g^{ab} \Gamma_a \Gamma_b + (2g^{ab} \Gamma_b)_{,a} + 4\alpha g^{ab}_{,ab}] \quad (3.16)$$

On remarquera qu'il est, pour une métrique générale, impossible d'annuler ce terme par le choix d'un alpha.

L'hamiltonien (3.2) pourra finalement être écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \hat{H} = \frac{1}{2m} & (\alpha (g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_a \hat{p}_b + \hat{p}_a \hat{p}_b g^{ab}(\hat{x}) - 2\hat{p}_a g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_b) + \hat{p}_a g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_b) \\ & + \frac{\hbar^2}{8m} [g^{ab} \Gamma_a \Gamma_b + (2g^{ab} \Gamma_b)_{,a} + 4\alpha g^{ab}_{,ab}] \end{aligned} \quad (3.17)$$

3.2 Application de la méthode des symboles

L'ordonnement de Weyl est ici

$$\hat{H}_w = \frac{1}{4} (g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_a \hat{p}_b + \hat{p}_a g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_b + \hat{p}_b g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_a + \hat{p}_a \hat{p}_b g^{ab}) \quad (3.18)$$

Ce qui revient à $\alpha = \frac{1}{4}$, soit un hamiltonien quantique de la forme

$$\hat{H} = \frac{1}{8m} (g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_a \hat{p}_b + \hat{p}_a \hat{p}_b g^{ab}(\hat{x}) + 2\hat{p}_a g^{ab}(\hat{x}) \hat{p}_b) + \frac{\hbar^2}{8m} (g^{ab} \Gamma_a \Gamma_b + (2g^{ab} \Gamma_b)_{,a} + g^{ab}_{,ab}) \quad (3.19)$$

En réutilisant la démonstration du chapitre 1 avec le nouveau produit scalaire, on a

$$K(x_b, t; x_a, t_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{i=1}^N K(x_i, t_i; x_{i-1}, t_{i-1}) \prod_{i=1}^{N-1} \sqrt{g(x_i)} d^n x_i \quad (3.20)$$

Et on pourra trouver le propagateur infinitésimal à partir de l'équation

$$\langle x_i | \hat{U}(\hat{p}, \hat{x}) | x_{i-1} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{-\infty}^{\infty} dp U(p, \frac{x_i + x_{i-1}}{2}) e^{\frac{i}{\hbar} p(x_i - x_{i-1})}$$

Comme on a affaire à l'évolution infinitésimale, on peut développer cet opérateur

$$\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{H}} = 1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{H} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (3.21)$$

Son symbole pourra donc être décrit comme $e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon H}$, plus un terme d'ordre ε^2 .

$$K(x_i, t_i; x_{i-1}, t_{i-1}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar} (p(x_i - x_{i-1}) - \varepsilon H(p, \frac{x_i + x_{i-1}}{2}))} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

Après passage à la limite et intégration, l'action à utiliser sera finalement :

$$S = \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{m}{2} g_{ab} \dot{x}^a \dot{x}^b - \frac{\hbar^2}{8m} [g^{ab} \Gamma_a \Gamma_b + (2g^{ab} \Gamma_b)_{,a} + g^{ab}{}_{,ab}] \right) \bullet dt \quad (3.22)$$

On peut remarquer que, si l'on prend le lagrangien classique, il faudra alors ajouter à l'hamiltonien quantique covariant le terme ΔV , qui n'est pas une quantité covariante. On peut s'en rendre facilement compte car ΔV peut se réécrire [6]

$$\Delta V = \frac{\hbar^2}{8m} (g^{ab} \Gamma_{ac}^d \Gamma_{bd}^c - R) \quad (3.23)$$

R est bien covariant, mais le produit de deux symboles de Christoffel ne l'est pas. Il faudra ainsi que l'hamiltonien quantique ou l'action prennent un terme non-covariant. On montrera dans la partie suivante comment trouver une formulation où les deux sont covariants.

3.3 Intégrale de chemin covariante

Comme pour le champ magnétique, on peut dériver ces équations naturellement à partir de l'intégrale de chemin. Habituellement, la vitesse infinitésimale s'exprime juste par

$$\dot{x} = \frac{x_i - x_{i+1}}{\varepsilon} \quad (3.24)$$

correspondant à une ligne droite infinitésimale. Mais dans le cas d'un espace courbe, la trajectoire infinitésimale doit être une géodésique. Il faut alors faire une expansion covariante du terme cinétique, à l'aide de l'équation géodésique pour une particule libre.

$$\ddot{x}^a = -\Gamma_{bc}^a \dot{x}^b \dot{x}^c \quad (3.25)$$

On peut ainsi trouver les dérivées de tout ordre. Par exemple, la dérivée troisième :

$$\ddot{\ddot{x}}^a = -(\Gamma_{bc,d}^a - 2\Gamma_{nb}^a \Gamma_{cd}^n) \dot{x}^b \dot{x}^c \dot{x}^d \quad (3.26)$$

On peut ainsi faire un développement de Taylor covariant de chaque point de la somme. Le développement ordinaire est

$$x_i^a(t + \varepsilon) = x_i^a(t) + \varepsilon \dot{x}_i^a(t) + \frac{\varepsilon^2}{2} \ddot{x}_i^a(t) + \frac{\varepsilon^3}{6} \ddot{\ddot{x}}_i^a(t) + \mathcal{O}(\varepsilon^4) \quad (3.27)$$

qui permet d'obtenir un développement de la vitesse

$$\begin{aligned}\dot{x}_i^a(t) &= \frac{x_i^a(t+\varepsilon) - x_i^a(t)}{\varepsilon} - \frac{\varepsilon}{2}\ddot{x}_i^a(t) - \frac{\varepsilon^2}{6}\dddot{x}_i^a(t) + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \\ &= \frac{\Delta x_i^a}{\varepsilon} + \frac{\varepsilon}{2}\Gamma_{bc}^a \dot{x}_i^b(t)\dot{x}_i^c(t) + \frac{\varepsilon^2}{6}(\Gamma_{bc,d}^a - 2\Gamma_{nb}^a\Gamma_{cd}^n)\dot{x}_i^b(t)\dot{x}_i^c(t)\dot{x}_i^d(t) + \mathcal{O}(\varepsilon^3)\end{aligned}$$

On a ainsi une définition récursive de la vitesse à base de Δx . Afin de déterminer les termes à conserver, on se rappellera qu'un chemin quantique a Δx de l'ordre de $\sqrt{\varepsilon}$. Ainsi pour l'action :

$$S \approx \sum \dot{x}^2 \varepsilon \quad (3.28)$$

Il faudra donc veiller à ne garder que les termes de $\dot{x}^2 \varepsilon$ d'ordre ε , Δx ou 1. Le terme de plus haut ordre de \dot{x} est justement $\frac{\Delta x}{\varepsilon}$, qui est d'ordre $\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$. Ainsi, pour éliminer les termes inutiles du développement, on pourra se baser sur la relation

$$\dot{x} \approx \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} + \mathcal{O}(\varepsilon) \quad (3.29)$$

À partir du troisième ordre, les termes sont de l'ordre de $\varepsilon^3 \dot{x}^4 \approx \varepsilon$, qui ne pourront pas être compensés par le $\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$ du premier terme, on pourra donc s'arrêter au second ordre. De manière générale, on coupera les termes à l'ordre ε , puisqu'ils donneront au mieux un terme d'ordre $\varepsilon^{\frac{3}{2}}$ dans l'action.

On peut ainsi développer les termes en \dot{x}

$$\begin{aligned}\frac{\varepsilon}{2}\Gamma_{bc}^a \dot{x}^b \dot{x}^c &= \frac{\Gamma_{bc}^a}{2} \left(\frac{\Delta x^b \Delta x^c}{\varepsilon} + \varepsilon \Gamma_{de}^b \Delta x^c \dot{x}^d \dot{x}^e + \frac{\varepsilon^2}{3} \Delta x^b (\Gamma_{de,f}^c - 2\Gamma_{md}^c \Gamma_{ef}^m) \dot{x}^d \dot{x}^e \dot{x}^f \right. \\ &\quad \left. + \frac{\varepsilon^3}{4} \Gamma_{de}^b \Gamma_{fg}^c \dot{x}^d \dot{x}^e \dot{x}^f \dot{x}^g + \mathcal{O}(\varepsilon^4) \right) \\ &= \frac{\Gamma_{bc}^a}{2} \left(\frac{\Delta x^b \Delta x^c}{\varepsilon} + \varepsilon \Gamma_{de}^b \Delta x^c \dot{x}^d \dot{x}^e + \mathcal{O}(\varepsilon) \right) \\ &= \frac{\Gamma_{bc}^a}{2} \left(\frac{\Delta x^b \Delta x^c}{\varepsilon} + \Gamma_{de}^b \frac{\Delta x^c \Delta x^d \Delta x^e}{\varepsilon} + \mathcal{O}(\varepsilon) \right) \\ \frac{\varepsilon^2}{6} \dot{x}^b \dot{x}^c \dot{x}^d &= \frac{\Delta x^b \Delta x^c \Delta x^d}{6\varepsilon} + \mathcal{O}(\varepsilon)\end{aligned} \quad (3.30)$$

Au final

$$\begin{aligned}\dot{x}^a(t) &= \frac{\Delta x^a}{\varepsilon} + \frac{\Gamma_{bc}^a}{2} \frac{\Delta x^b \Delta x^c}{\varepsilon} + \frac{1}{2} \Gamma_{bc}^a \Gamma_{de}^b \frac{\Delta x^c \Delta x^d \Delta x^e}{\varepsilon} + (\Gamma_{bc,d}^a - 2\Gamma_{nb}^a \Gamma_{cd}^n) \frac{\Delta x^b \Delta x^c \Delta x^d}{6\varepsilon} + \mathcal{O}(\varepsilon) \\ &= \frac{1}{\varepsilon} (\Delta x^a + \frac{1}{2} \Gamma_{bc}^a \Delta x^b \Delta x^c + \frac{1}{6} (\Gamma_{bc,d}^a + \Gamma_{nb}^a \Gamma_{cd}^n) \Delta x^b \Delta x^c \Delta x^d) + \mathcal{O}(\varepsilon)\end{aligned}$$

Le produit de ces deux vecteurs sera alors :

$$\begin{aligned}\dot{x}^a \dot{x}^p &= \frac{1}{\varepsilon^2} (\Delta x^a + \frac{1}{2} \Gamma_{bc}^a \Delta x^b \Delta x^c + \frac{1}{6} (\Gamma_{bc,d}^a + \Gamma_{nb}^a \Gamma_{cd}^n) \Delta x^b \Delta x^c \Delta x^d) \\ &\quad (\Delta x^p + \frac{1}{2} \Gamma_{qr}^p \Delta x^q \Delta x^r + \frac{1}{6} (\Gamma_{qr,s}^p + \Gamma_{mq}^p \Gamma_{rs}^m) \Delta x^q \Delta x^r \Delta x^s) + \mathcal{O}(\varepsilon) \\ &= \frac{1}{\varepsilon^2} (\Delta x^a \Delta x^p + \Delta x^a \Gamma_{qr}^p \Delta x^q \Delta x^r + \Delta x^a \frac{1}{3} (\Gamma_{qr,s}^p + \Gamma_{mq}^p \Gamma_{rs}^m) \Delta x^q \Delta x^r \Delta x^s \\ &\quad + \frac{1}{4} \Gamma_{bc}^a \Delta x^b \Delta x^c \Gamma_{qr}^p \Delta x^q \Delta x^r) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\end{aligned} \quad (3.31)$$

On obtient ainsi l'action pour une particule libre

$$S = \sum \frac{m}{2} g_{ab}(\tilde{x}_i) \frac{1}{\varepsilon} (\Delta x^a \Delta x^b + \Gamma_{cd}^b \Delta x^a \Delta x^c \Delta x^d + \frac{1}{4} \Gamma_{cd}^a \Gamma_{ef}^b \Delta x^c \Delta x^d \Delta x^e \Delta x^f + \frac{1}{3} (\Gamma_{cd,e}^b + \Gamma_{mc}^b \Gamma_{de}^m) \Delta x^a \Delta x^c \Delta x^d \Delta x^e) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (3.32)$$

On conserve ici la liberté de choix de l'intégrale stochastique (le paramètre λ dans $g_{ab}(\tilde{x}_i)$), bien qu'on puisse déjà savoir que le cas $\lambda = \frac{1}{2}$ ne fonctionnera pas, puisqu'il correspond à l'ordonnement de Weyl vu ci-dessus.

Pour abrégier, on rassemblera les termes dûs à la courbure

$$C^{ab} = \Gamma_{cd}^b \Delta x^a \Delta x^c \Delta x^d + \frac{1}{4} \Gamma_{cd}^a \Gamma_{ef}^b \Delta x^c \Delta x^d \Delta x^e \Delta x^f + \frac{1}{3} (\Gamma_{cd,e}^b + \Gamma_{mc}^b \Gamma_{de}^m) \Delta x^a \Delta x^c \Delta x^d \Delta x^e$$

qui sera bien 0 dans le cas d'une métrique euclidienne.

On peut ainsi vérifier la validité de cette formule par la méthode habituelle, en la comparant avec son équation de Schrödinger. En un temps infinitésimal :

$$\psi(x_2, t + \varepsilon) = \sqrt{\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} S(t, t+\varepsilon)} \psi(x_1, t) \sqrt{g(x_1(t))} dx_1 \quad (3.33)$$

On procède au changement de variable habituel (*cf.* la section 1.4), qui nous donne $\Delta x \rightarrow -\eta$, afin de faire apparaître x_2 dans l'intégrale :

$$\begin{aligned} S(t, t + \varepsilon) &= \frac{m}{2} g_{ab}(\tilde{x}) \frac{1}{\varepsilon} (\eta^a \eta^b - \Gamma_{cd}^b \eta^a \eta^c \eta^d + \frac{1}{4} \Gamma_{cd}^a \Gamma_{ef}^b \eta^c \eta^d \eta^e \eta^f + \frac{1}{3} (\Gamma_{cd,e}^b + \Gamma_{mc}^b \Gamma_{de}^m) \eta^a \eta^c \eta^d \eta^e) \\ &= \frac{m}{2} g_{ab}(\tilde{x}) \frac{1}{\varepsilon} (\eta^a \eta^b + C^{ab}) \end{aligned}$$

$$\sqrt{g(x_1)} = \sqrt{g(x_2 + \eta)} = \sqrt{g(x_2)} + \eta^a \sqrt{g(x_2)}_{,a} + \frac{1}{2} \eta^a \eta^b \sqrt{g(x_2)}_{,ab} + \mathcal{O}(\eta^3)$$

$$\psi(x_1, t) = \psi(x_2 + \eta, t) = \psi(x_2, t) + \eta^a \psi(x_2, t)_{,a} + \frac{1}{2} \eta^a \eta^b \psi(x_2, t)_{,ab} + \mathcal{O}(\eta^3)$$

et on développe l'exponentielle des termes de courbure

$$e^{\frac{i}{\hbar} S} = e^{\frac{im}{2\hbar} g_{ab}(\tilde{x}_i) \frac{\eta^a \eta^b}{\varepsilon}} (1 + \frac{im}{2\hbar\varepsilon} g_{ab}(\tilde{x}) C^{ab} - \frac{1}{2} \frac{m^2}{4\hbar^2 \varepsilon^2} g_{ab}(\tilde{x}) g_{pq}(\tilde{x}) C^{ab} C^{pq} + \mathcal{O}(C^3))$$

On devra ainsi intégrer chacun de ces termes. On a les formules

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{im}{2\hbar} g_{ab} \frac{\eta^a \eta^b}{\varepsilon}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon}} d^n \eta = g^{-\frac{1}{2}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{im}{2\hbar} g_{ab} \frac{\eta^a \eta^b}{\varepsilon}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon}} \prod_{i=1}^{2N+1} \eta^{\alpha_i} d^n \eta = 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{im}{2\hbar} g_{ab} \frac{\eta^a \eta^b}{\varepsilon}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon}} \prod_{i=1}^{2N} \eta^{\alpha_i} d^n \eta = \left(\frac{i\hbar\varepsilon}{m}\right)^N g^{-\frac{1}{2}} (\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{2N})$$

où la parenthèse dénote toutes les permutations d'indices du tenseur métrique. Pour les cas qui nous concernent :

$$(ab) = g^{ab} \quad (3.34)$$

$$(abcd) = g^{ac} g^{bd} + g^{ad} g^{bc} + g^{ab} g^{cd} \quad (3.35)$$

$$\begin{aligned}
(abcdef) &= g^{ab}g^{cd}g^{ef} + g^{ac}g^{bd}g^{ef} + g^{ad}g^{bc}g^{ef} + g^{ab}g^{ce}g^{df} + g^{ab}g^{cf}g^{de} \\
&+ g^{cd}g^{ae}g^{bf} + g^{cd}g^{af}g^{be} + g^{ac}g^{be}g^{df} + g^{ac}g^{bf}g^{de} + g^{bd}g^{ae}g^{cf} \\
&+ g^{bd}g^{af}g^{ce} + g^{ad}g^{be}g^{cf} + g^{ad}g^{bf}g^{ce} + g^{bc}g^{ae}g^{df} + g^{bc}g^{af}g^{de} \\
&= g^{de}(abc f) + g^{cd}(abef) + g^{df}(abce) + g^{ad}(bcef) + g^{bd}(acef)
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Le terme $g_{ab}(\tilde{x}_i)$ pourra toujours être développé en

$$g_{ab}(\tilde{x}_i) = g_{ab}(x_2 - \lambda\eta) = g_{ab}(x_2) - \lambda\eta^c g_{ab,c}(x_2) + \frac{\lambda^2}{2}\eta^c\eta^d g_{ab,cd}(x_2) + \mathcal{O}(\eta^3)$$

Et ainsi son exponentiel rajoute le facteur supplémentaire

$$\left(1 - \frac{im}{2\hbar\varepsilon}(\lambda\eta^a\eta^b\eta^c g_{ab,c} - \frac{1}{2}\lambda^2\eta^a\eta^b\eta^c\eta^d g_{ab,cd}) - \frac{1}{2}\frac{m^2}{4\hbar^2\varepsilon^2}\lambda^2\eta^a\eta^b\eta^c\eta^d\eta^e\eta^f g_{de,f}g_{ab,c} + \mathcal{O}(\eta^7)\right)$$

L'intégrale donne finalement

$$\begin{aligned}
\psi(x_2, t + \varepsilon) &= \sqrt{\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{\frac{im}{2\hbar}g_{ab}(x_2)\frac{\eta^a\eta^b}{\varepsilon}} \\
&\left(1 - \frac{im}{2\hbar\varepsilon}(\lambda\eta^c\eta^d\eta^e g_{cd,e}) - \frac{m^2}{8\hbar^2\varepsilon^2}(\lambda^2\eta^c\eta^d\eta^e\eta^f(g_{cd,ef} + \eta^g\eta^h g_{fg,h}g_{cd,e})) + \mathcal{O}(\eta^7)\right) \\
&\left(1 + \frac{im}{2\hbar\varepsilon}g_{ab}(\tilde{x})C^{ab} - \frac{m^2}{8\hbar^2\varepsilon^2}g_{ab}(\tilde{x})g_{pq}(\tilde{x})C^{ab}C^{pq} + \mathcal{O}(C^3)\right) \\
&(\psi(x_2, t) + \eta^r\psi(x_2, t)_{,r} + \frac{1}{2}\eta^r\eta^s\psi(x_2, t)_{,rs} + \mathcal{O}(\eta^3)) \\
&(\sqrt{g(x_2)} + \eta^t\sqrt{g(x_2)}_{,t} + \frac{1}{2}\eta^t\eta^u\sqrt{g(x_2)}_{,tu} + \mathcal{O}(\eta^3))
\end{aligned} \tag{3.37}$$

Les détails de cette intégrale sont dans l'annexe C. On trouve finalement l'hamiltonien suivant

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{LB} + \frac{\hbar^2}{6m}R + \frac{\hbar^2}{m}\lambda(g_{,a}^{ab} - g^{ab}\Gamma_a)(\partial_b + \frac{1}{2}\Gamma_b) \\
&+ \frac{\hbar^2}{2m}[\lambda(\frac{1}{2}g^{cd}\Gamma_m\Gamma_{cd}^m - \frac{1}{2}g^{cd}_{,m}\Gamma_{cd}^m - \frac{1}{2}g^{ac}g^{bd}g_{am,b}\Gamma_{cd}^m - \frac{1}{2}g^{ad}g^{bc}g_{am,b}\Gamma_{cd}^m \\
&- \frac{1}{2}g^{cd}g^{ab}g_{am,b}\Gamma_{cd}^m) - \lambda^2(g^{ab}\Gamma_a\Gamma_b - (g^{ab}\Gamma_a)_{,b} + g_{,ab}^{ab} - \Gamma_a g^{ab}_{,b})]
\end{aligned} \tag{3.38}$$

Les termes en λ semblent avoir une erreur, car $\lambda = \frac{1}{2}$ ne devrait pas avoir de termes en ∂_b , mais autrement, le termes en R correspond bien aux valeurs habituels [13, 14]. Afin de préserver la covariance de cet hamiltonien, on prendra simplement $\lambda = 0$ afin d'éliminer les symboles de Christoffel, bien qu'on puisse également rajouter différents termes au lagrangien, comme dans le cas de l'ordonnement de Weyl vu précédemment, mais il est dans ce cas plus simple de partir de l'équation de Schrödinger covariante (voir [12] à ce propos). Ce choix de $\lambda = 0$ est par ailleurs contraint par le fait que la "mesure" de l'intégrale de chemin $\mathcal{D}x$ est ici $\sqrt{g(x_i)}dx$. Le choix $\lambda = 0$ est donc nécessaire pour avoir la métrique aux mêmes points dans l'intégrale.

L'hamiltonien covariant obtenu est

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{LB} + \frac{\hbar^2}{6m}R \tag{3.39}$$

Cet hamiltonien n'est pas l'hamiltonien originalement considéré, mais il respecte néanmoins les règles qu'on s'est imposées (covariance, hermiticité). On peut, comme dans le cas de la première partie, retrouver l'hamiltonien d'origine en retirant ce potentiel du lagrangien

$$L = \frac{m}{2}g_{ab}\dot{x}^a\dot{x}^b - \frac{\hbar^2}{6m}R \tag{3.40}$$

mais il n'y a à priori pas de raisons de le préférer à celui-ci.

On trouvera d'autres facteurs que $\frac{1}{6}$ par différentes définitions, tel que 0 (couplage minimal) ou $\frac{1}{12}$ (couplage conforme) [13]. On a ainsi toute une classe d'hamiltoniens de la forme

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{LB} + \frac{\hbar^2}{m}\xi R \quad (3.41)$$

avec ξ une constante de couplage, donnant différentes observables dans le cas $R \neq 0$. Ce terme n'est qu'un potentiel, on peut donc facilement le rajouter à l'intégrale de chemin [15]

$$L = g_{ab}\dot{x}^a\dot{x}^b - \frac{\hbar^2}{m}\left(\xi - \frac{1}{6}\right)R(x) \quad (3.42)$$

4 Conclusion

Comme on a pu le voir au cours de ces chapitres, particulièrement lors de la résolution d'une particule sur une sphère, une intégrale de chemin n'est pas, hors des cas les plus simples, d'une résolution simple, reposant souvent pour une résolution analytique sur le fait que les intégrales sur chaque tranche de temps soient de forme similaire (comme pour l'exemple de la particule sur une sphère vu ici, mais également d'autres cas connus comme la particule libre ou l'oscillateur harmonique). La nature stochastique de la trajectoire pose une difficulté supplémentaire, obligeant à porter une attention particulière aux termes infinitésimaux, et à choisir une intégrale stochastique en fonction du lagrangien. Ce choix est rarement évident, et se base généralement sur l'équation de Schrödinger elle-même ou certaines propriétés physiques du système (invariance de jauge et covariance, dans les cas étudiés).

Mais néanmoins, au-delà de son interprétation physique plus simple, l'intégrale de chemin offre certains avantages. L'un d'entre eux est que la méthode est valide pour de nombreux domaines, pour peu qu'on ait la mesure $\mathcal{D}x$ de l'intégrale et son lagrangien. Il est également possible de la simplifier par des expansions perturbatives, donnant ainsi les diagrammes de Feynman [4].

Certains détails n'ont pas été abordés dans ce mémoire. Parmi eux : Qu'obtient-on de l'hamiltonien (3.38) lorsque $\lambda \neq 0$, si cette formule est bien la bonne intégrale ? Quels sont les potentiels, et éventuellement les termes dépendant de l'impulsion à rajouter pour le cas général (qui est la méthode inverse de [12]) ? Et obtient-on le bon résultat pour le propagateur de la sphère en utilisant l'action covariante complète ?

A Rappels de mécanique quantique

Dans le formalisme de Schrödinger et d'Heisenberg, les particules sont décrites par des fonctions d'onde, vecteurs de l'espace de Hilbert L^2 , avec le produit scalaire :

$$\langle f, g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f g^* dx = \langle g, f \rangle^*$$

Ces fonctions d'ondes décrivant une amplitude de probabilité de la particule, avec ainsi la relation de normalisation

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \psi^*(x) dx = 1$$

Ces fonctions d'ondes ne sont pas des objets mesurables. Les observables de ces fonctions d'ondes sont les valeurs propres d'opérateurs sur cet espace de Hilbert.

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$$

Ces opérateurs sont hermitiens, c'est à dire obéissent à la propriété :

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A}f)^* g dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^* (\hat{A}g) dx$$

Ce qui permet d'avoir des observables de valeurs réelles, et des vecteurs propres orthogonaux.

Deux opérateurs importants sont les opérateurs de position et d'impulsion, définis par

$$\begin{aligned} \hat{p}f &= -i\hbar \frac{\partial f}{\partial x} \\ \hat{x}f &= xf \end{aligned}$$

On peut remarquer que l'application de ces deux opérateurs ne commute pas, et on définit ainsi la relation de commutation canonique

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$$

Les vecteurs propres de ces opérateurs sont

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$$

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$$

avec les relations

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} | \hat{p} \rangle &= \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \vec{x} \cdot \vec{p}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \\ \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x| dx &= \int_{-\infty}^{\infty} |p\rangle \langle p| dp = \hat{1} \end{aligned} \tag{A.1}$$

Le noyau K d'un opérateur \hat{A} , défini par

$$K_A(b, a) = \langle \psi_b | \hat{A} | \psi_a \rangle$$

donne les relations suivantes, grâce à (A.1) :

$$\begin{aligned} K_{AB}(b, a) &= \langle \psi_b | \hat{A} \hat{B} | \psi_a \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \psi_b | \hat{A} | \psi_c \rangle \langle \psi_c | \hat{B} | \psi_a \rangle dc \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} K_A(b, c) K_B(c, a) dc \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\hat{A}\psi)(b) &= \langle b|\hat{A}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle b|\hat{A}|a\rangle \langle a|\psi\rangle da \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_a K_A(b, a) da
\end{aligned}$$

L'équation de Schrödinger décrit l'évolution de la fonction d'onde dans le temps

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle &= \hat{H}|\psi\rangle \\
|\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle
\end{aligned}$$

La fonction d'onde à l'instant t_0 est indépendante du temps, l'équation peut donc se réduire à :

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) &= \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \\
\hat{U}(t, t_0) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H} dt}
\end{aligned}$$

Pour un hamiltonien indépendant du temps :

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}$$

On définira le propagateur de la fonction d'onde comme le noyau de l'opérateur d'évolution

$$K(b, a) = \langle a|\hat{U}(t, t_0)|b\rangle = \langle a| e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}} |b\rangle$$

correspondant à l'amplitude du passage de l'état a à l'état b dans l'intervalle de temps $t - t_0$, et ainsi la probabilité en est :

$$P(a \rightarrow b) = K(b, a)K^*(b, a)$$

avec la condition de normalisation

$$\sum_b P(a \rightarrow b) = 1$$

ou à l'aide d'une intégrale dans le cas d'un état continu. Dans le cas d'un hamiltonien indépendant du temps, l'égalité (A.1) nous donne :

$$\begin{aligned}
K(b, a) &= \langle a| e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}} |b\rangle \\
&= \sum_n \sum_m \langle a|\psi_n\rangle \langle \psi_n| e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}} |\psi_m\rangle \langle \psi_m|b\rangle \\
&= \sum_n \sum_m \psi_a \psi_b^* \delta_{nm} e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_n} \\
&= \sum_n \psi_a \psi_b^* e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_n}
\end{aligned}$$

B Processus et intégrales stochastiques

Un processus stochastique est défini par un espace de probabilité, un espace d'état X et un ensemble T . Dans le cas qui nous intéresse, X est un espace de positions \mathbb{R}^n et T représente le temps. Le processus stochastique associe à chaque élément de T un élément de X , représentant ainsi une trajectoire, ou plus exactement un point se déplaçant dans le temps, possiblement de manière discontinue. Chaque trajectoire est associée à une probabilité.

Le cas qui nous concerne est un processus de Wiener W_t , aussi appelé mouvement brownien. Ses propriétés les plus importantes sont que sa probabilité d'être continue est de 1 (il peut y avoir des processus discontinus, mais la mesure de leur probabilité est de 0), et que son incrémentation est indépendante du temps. Ainsi :

$$0 \leq s < t \rightarrow W_t - W_s \approx \mathcal{N}(\mu, \sigma^2(t-s))$$

Où \mathcal{N} est une distribution gaussienne. Cette propriété conduit par ailleurs au fait que la fonction est semblable à toute échelle de temps,

$$c \geq 0 \rightarrow W(ct) = \frac{1}{\sqrt{c}}W(t)$$

donnant une nature fractale au processus (de dimension 2[18]). L'écart type d'un processus vaut \sqrt{t} , ce qui donne au niveau infinitésimal :

$$\sigma = \lim_{c \rightarrow 0} \sigma\left(\frac{1}{\sqrt{c}}W(ct)\right) = \sqrt{t}$$

puisque la fonction est la même à toutes échelles. On a ainsi la relation $dx \approx \sqrt{dt}$, qui implique que la fonction n'est dérivable en aucun point.

(On pourra trouver des démonstrations de ces théorèmes dans par exemple [19])

Puisque c'est une fractale, le processus a une variation infinie (la courbe décrite a une longueur infinie), faisant que l'intégrale de Riemann n'est pas valide, bien qu'elle n'englobe pourtant qu'une aire finie. On définit alors une intégrale stochastique, en se basant sur la définition ordinaire de l'intégrale de Riemann :

$$\int_{x_a}^{x_b} dx(t)f(x(t)) \triangleq \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^{N-1} (x_{j+1} - x_j)f(\tilde{x}_j)$$

Où $x(t)$ est un mouvement brownien. Contrairement à l'intégrale de Riemann, le point \tilde{x}_j (un point entre x_i et x_{i+1}) a son importance. On le définit par un paramètre λ :

$$\tilde{x}_i = x_i + \lambda(x_{i+1} - x_i), (x_{i+1} - x_i) = \Delta x_i$$

On peut ainsi définir toute une classe d'intégrales de paramètre λ . Dans le cas d'une intégrale ordinaire, l'intégrale sera simplement la différence des primitives de la fonction aux bornes. Si l'on décompose cette différence en parties infinitésimales

$$F(x_b) - F(x_a) = \sum_{j=0}^{N-1} F(x_{j+1}) - F(x_j), x_0 = x_a, x_N = x_b$$

Et qu'on développe chaque terme au point \tilde{x}_j

$$F(x_i) = \sum_n \frac{F^{(n)}(\tilde{x}_i)}{n!} (-\lambda)^n \Delta x_i^n$$

$$\begin{aligned}
F(x_{i+1}) &= \sum_n^{\infty} \frac{F^{(n)}(\tilde{x}_i)}{n!} (x_{i+1} - x_i - \lambda \Delta x_i)^n \\
&= \sum_n^{\infty} \frac{F^{(n)}(\tilde{x}_i)}{n!} \Delta x_i^n (1 - \lambda)^n \\
F(x_{i+1}) - F(x_i) &= \sum_n^{\infty} \frac{F^{(n)}(\tilde{x}_i)}{n!} \Delta x_i^n ((1 - \lambda)^n - (-\lambda)^n) \\
&= 0 + F'(\tilde{x}_i) \Delta x_i + \left(\frac{1}{2} - \lambda\right) F''(\tilde{x}_i) \Delta x_i^2 + \mathcal{O}(\Delta x_i^3)
\end{aligned}$$

La différence des primitives donne finalement

$$F(x_b) - F(x_a) = \sum_{j=0}^{N-1} F'(\tilde{x}_j) \Delta x_j + \left(\frac{1}{2} - \lambda\right) F''(\tilde{x}_j) \Delta x_j^2 + \mathcal{O}(\Delta x_j^3)$$

Dans le cas de l'intégrale de Riemann, les termes en $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ s'annuleraient et on retrouverait bien ainsi le théorème fondamental de l'analyse. Mais dans le cas d'un processus de Wiener, Δx est de l'ordre de $\sqrt{\Delta t}$. On obtient ainsi la formule de l'intégrale stochastique de paramètre λ , qu'on peut généraliser à toutes dimensions :

$$\otimes \int_{t_a}^{t_b} \vec{\nabla} f(\vec{x}(t)) d\vec{x}(t) = f(\vec{x}_b) - f(\vec{x}_a) - \left(\frac{1}{2} - \lambda\right) \int_{t_a}^{t_b} \nabla^2 f(\vec{x}(t)) dt$$

Les deux valeurs les plus utilisées pour λ sont 0, donnant l'intégrale de Itô

$$\int_{t_a}^{t_b} \vec{\nabla} f(\vec{x}(t)) \bullet d\vec{x}(t) = f(\vec{x}_b) - f(\vec{x}_a) - \frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} \nabla^2 f(\vec{x}(t)) dt$$

et $\frac{1}{2}$, donnant l'intégrale de Stratonovitch, ayant l'avantage d'avoir une forme similaire à l'intégrale de Riemann.

$$\int_{t_a}^{t_b} \vec{\nabla} f(\vec{x}(t)) \circ d\vec{x}(t) = f(\vec{x}_b) - f(\vec{x}_a)$$

Dans un cas physique, la relation sera plutôt de la forme

$$\Delta^2 x = D \Delta t$$

avec D une constante afin de respecter les dimensions, l'intégrale stochastique sera finalement

$$\otimes \int_{t_a}^{t_b} \nabla f(\vec{x}(t)) d\vec{x}(t) = f(\vec{x}_b) - f(\vec{x}_a) - \left(\frac{1}{2} - \lambda\right) D \int_{t_a}^{t_b} \nabla^2 f(\vec{x}(t)) dt$$

Puisqu'on a la relation $\dot{\vec{x}}(t) dt = d\vec{x}(t)$, on pourra également définir

$$\otimes \int_{t_a}^{t_b} \vec{\nabla} f(\vec{x}(t)) \cdot \dot{\vec{x}}(t) dt = f(\vec{x}_b) - f(\vec{x}_a) - \left(\frac{1}{2} - \lambda\right) D \int_{t_a}^{t_b} \nabla^2 f(\vec{x}(t)) dt$$

Le lien entre les processus stochastiques et les équations différentielles, comme pour la mécanique quantique ou le mouvement brownien, est la formule de Feynman-Kac, qui dit que pour une équation différentielle de la forme

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{2} \sigma(\vec{x}, t) \frac{\partial^2 f}{\partial \vec{x}^2} = V(\vec{x}, t) f$$

avec σ et V des fonctions connues et f une fonction connue pour $t = T$, la fonction f peut se trouver à l'aide d'une intégrale fonctionnelle sur le processus stochastique $X(t)$ tel que $dX(t) = \sigma(\vec{x}, t) dW(t)$, $W(t)$ un processus de Wiener. C'est cette formule qui permet de relier par exemple le mouvement brownien ou la mécanique quantique à des intégrales de chemin, puisque les deux ont une équation de forme similaire (respectivement l'équation de diffusion et l'équation de Schrödinger).

C Calculs des termes de l'intégrale en espace Riemannien

Les termes qui ne s'annuleront pas sont ceux d'ordre ε ou d'ordre unité. Il ne reste donc que

$$\begin{aligned}
\psi(x_2, t + \varepsilon) &= \sqrt{\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{\frac{im}{2\hbar}g_{ab}(x_2)\frac{\eta^a\eta^b}{\varepsilon}} (\psi\sqrt{g} + \eta^a\eta^b(\psi_{,a}\sqrt{g}_{,b} + \frac{\psi}{2}\sqrt{g}_{,ab} + \psi_{,ab}\frac{\sqrt{g}}{2}) \\
&\quad + \frac{im}{2\hbar\varepsilon}\eta^a\eta^b\eta^c\eta^d((\psi\sqrt{g}_{,d} + \psi_{,d}\sqrt{g}))(g_{ae}\Gamma_{bc}^e - \lambda g_{ab,c}) \\
&\quad + (\frac{1}{4}g_{pq}\Gamma_{ab}^p\Gamma_{cd}^q + \frac{1}{3}g_{ae}(\Gamma_{bc,d}^e + \Gamma_{mb}^e\Gamma_{cd}^m) - \lambda g_{ae,b}\Gamma_{cd}^e + \frac{\lambda^2}{2}g_{ab,cd})\psi\sqrt{g}) \\
&\quad + \frac{m^2}{8\hbar^2\varepsilon^2}\eta^a\eta^b\eta^c\eta^d\eta^e\eta^f(\lambda g_{ab,c}g_{dg}\Gamma_{ef}^g - \lambda^2 g_{ab,c}g_{de,f} - g_{ap}\Gamma_{bc}^p\Gamma_{de}^q g_{fq})\psi\sqrt{g}) \quad (C.1)
\end{aligned}$$

Le tout premier terme s'intègre simplement pour donner $\psi(x_2, t)$. Les autres termes sont :

$$\begin{aligned}
&\sqrt{\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{\frac{im}{2\hbar}g_{ab}(x_2)\frac{\eta^a\eta^b}{\varepsilon}} \frac{m^2}{8\hbar^2\varepsilon^2}\eta^a\eta^b\eta^c\eta^d\eta^e\eta^f(\lambda g_{ab,c}g_{dg}\Gamma_{ef}^g - \lambda^2 g_{ab,c}g_{de,f} - g_{ap}\Gamma_{bc}^p\Gamma_{de}^q g_{fq})\psi\sqrt{g} \\
&= (\frac{i\hbar\varepsilon}{m})^3 \frac{m^2}{8\hbar^2\varepsilon^2}(abcdef)(\lambda g_{ab,c}g_{dg}\Gamma_{ef}^g - \lambda^2 g_{ab,c}g_{de,f} - g_{ap}\Gamma_{bc}^p\Gamma_{de}^q g_{fq})\psi \\
&= -\frac{i\hbar\varepsilon}{8m}(abcdef)(\lambda g_{ab,c}g_{dg}\Gamma_{ef}^g - \lambda^2 g_{ab,c}g_{de,f} - g_{ap}\Gamma_{bc}^p\Gamma_{de}^q g_{fq})\psi \\
&= -\frac{i\hbar\varepsilon}{8m}\psi((abc f)(\lambda g_{ab,c}\Gamma_f - 2\lambda^2 g_{ab,c}\Gamma_f - g_{ap}\Gamma_{bc}^p\Gamma_{de}^q g_{fq}g^{de}) \\
&\quad + (abef)(\lambda g_{ab,c}\Gamma_{ef}^c - \lambda^2 g_{ab,c}g_{de,f}g^{cd} - g^{cd}g_{ap}\Gamma_{bc}^p\Gamma_{de}^q g_{fq}) \\
&\quad + (abce)(\lambda g_{ab,c}\Gamma_e - \lambda^2 g_{ab,c}g_{de,f}g^{df} - g_{ap}\Gamma_{bc}^p\Gamma_e) \\
&\quad + (bcef)(\lambda g_{ab,c}\Gamma_{ef}^a - \lambda^2 g_{ab,c}g_{de,f}g^{ad} - \Gamma_{bc}^d\Gamma_{de}^q g_{fq}) \\
&\quad + (acef)(\lambda g_{ab,c}\Gamma_{ef}^b - \lambda^2 g_{ab,c}g_{de,f}g^{bd} - g_{ap}g^{bd}\Gamma_{bc}^p\Gamma_{de}^q g_{fq}) \\
&= -\frac{i\hbar\varepsilon}{8m}\psi(abcd)(\lambda(2g_{ab,c}\Gamma_d + g_{ab,m}\Gamma_{cd}^m + 2g_{am,b}\Gamma_{cd}^m) \\
&\quad - \lambda^2(g^{mn}(g_{ab,m}g_{nc,d} + g_{ab,c}g_{md,n} + 2g_{am,b}g_{nc,d}) + 2g_{ab,c}\Gamma_d) \\
&\quad - g_{ap}(\Gamma_{bc}^p(\Gamma_d + \Gamma_{fe}^q g_{dq}g^{fe}) + 2g^{mn}\Gamma_{mb}^p\Gamma_{nc}^q g_{dq}) - \Gamma_{ab}^n\Gamma_{nc}^q g_{dq})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\sqrt{\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{\frac{im}{2\hbar}g_{ab}(x_2)\frac{\eta^a\eta^b}{\varepsilon}} \frac{im}{2\hbar\varepsilon}\eta^a\eta^b\eta^c\eta^d((\psi\sqrt{g}_{,d} + \psi_{,d}\sqrt{g})(g_{ae}\Gamma_{bc}^e - \lambda g_{ab,c}) \\
&\quad + (\frac{1}{4}g_{pq}\Gamma_{ab}^p\Gamma_{cd}^q + \frac{1}{3}g_{ae}(\Gamma_{bc,d}^e + \Gamma_{mb}^e\Gamma_{cd}^m) - \lambda g_{ae,b}\Gamma_{cd}^e + \frac{\lambda^2}{2}g_{ab,cd})\psi\sqrt{g}) \\
&= (\frac{i\hbar\varepsilon}{m})^2 \frac{im}{2\hbar\varepsilon} \frac{1}{\sqrt{g}}(abcd)((\psi\sqrt{g}_{,d} + \psi_{,d}\sqrt{g})(g_{ae}\Gamma_{bc}^e - \lambda g_{ab,c}) \\
&\quad + (\frac{1}{4}g_{pq}\Gamma_{ab}^p\Gamma_{cd}^q + \frac{1}{3}g_{ae}(\Gamma_{bc,d}^e + \Gamma_{mb}^e\Gamma_{cd}^m) - \lambda g_{ae,b}\Gamma_{cd}^e + \frac{\lambda^2}{2}g_{ab,cd})\psi\sqrt{g}) \\
&= -\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}(abcd)(\psi_{,d}(g_{ae}\Gamma_{bc}^e - \lambda g_{ab,c}) + (\frac{1}{4}g_{pq}\Gamma_{ab}^p\Gamma_{cd}^q + \Gamma_d g_{ae}\Gamma_{bc}^e \\
&\quad + \frac{1}{3}g_{ae}(\Gamma_{bc,d}^e + \Gamma_{mb}^e\Gamma_{cd}^m) - \lambda(g_{ae,b}\Gamma_{cd}^e + \Gamma_d g_{ab,c}) + \frac{\lambda^2}{2}g_{ab,cd})\psi)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sqrt{\frac{m}{2\hbar\pi i\varepsilon}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{\frac{im}{2\hbar}g_{ab}(x_2)\frac{\eta^a\eta^b}{\varepsilon}} \eta^a\eta^b (\psi_{,a}\sqrt{g}_{,b} + \frac{\psi}{2}\sqrt{g}_{,ab} + \psi_{,ab}\frac{\sqrt{g}}{2}) \\
&= \frac{i\hbar\varepsilon}{m} \frac{g^{ab}}{\sqrt{g}} (\psi_{,a}\sqrt{g}_{,b} + \frac{\psi}{2}\sqrt{g}_{,ab} + \psi_{,ab}\frac{\sqrt{g}}{2}) \\
&= \frac{i\hbar\varepsilon}{m} g^{ab} (\psi_{,a}\Gamma_b + \frac{\psi}{2}(\Gamma_{a,b} + \Gamma_a\Gamma_b) + \frac{\psi_{,ab}}{2}) \tag{C.2}
\end{aligned}$$

On peut ainsi regrouper les facteurs des différentes dérivées de ψ .

Pour la dérivée seconde :

$$\frac{i\hbar\varepsilon}{2m} g^{ab} \psi_{,ab}$$

Pour la dérivée première :

$$\frac{i\hbar\varepsilon}{m} (g^{ab}\Gamma_b - \frac{1}{2}(-g_{,b}^{ab} + g^{ab}\Gamma_b - \lambda(g^{ab}\Gamma_b - 2g_{,b}^{ab})))\psi_{,a} = \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} (g^{ab}\Gamma_b + g_{,b}^{ab} + 2\lambda(g^{ab}\Gamma_b - g_{,b}^{ab}))\psi_{,a}$$

Les deux réunis donnent :

$$\frac{i\hbar\varepsilon}{2m} (\Delta_{LB}\psi + 2\lambda(g^{ab}\Gamma_b - g_{,b}^{ab})\psi_{,a}) = \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} \Delta_{LB}\psi + \frac{i\hbar\varepsilon}{m} \lambda(g^{ab}\Gamma_b - g_{,b}^{ab})\psi_{,a}$$

Les termes en ψ sont :

$$\begin{aligned}
& \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} (g^{ab}\Gamma_{a,b} + g^{ab}\Gamma_a\Gamma_b) - \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} (abcd)(g_{ae}\Gamma_d\Gamma_{bc}^e + \frac{1}{4}g_{pq}\Gamma_{ab}^p\Gamma_{cd}^q + \frac{1}{3}g_{ae}(\Gamma_{bc,d}^e + \Gamma_{mb}^e\Gamma_{cd}^m)) \\
& - \lambda(g_{ae,b}\Gamma_{cd}^e + g_{ab,c}\Gamma_d) + \frac{\lambda^2}{2}g_{ab,cd} + \frac{1}{4}\lambda(2g_{ab,c}\Gamma_d + g_{ab,m}\Gamma_{cd}^m + 2g_{am,b}\Gamma_{cd}^m) \\
& - \frac{1}{4}\lambda^2(g^{mn}(g_{ab,m}g_{nc,d} + g_{ab,c}g_{md,n} + 2g_{am,b}g_{nc,d}) + 2g_{ab,c}\Gamma_d) \\
& - \frac{1}{4}g_{ap}(\Gamma_{bc}^p(\Gamma_d + \Gamma_{fe}^q g_{dq}g^{fe}) + 2g^{mn}\Gamma_{mb}^p\Gamma_{nc}^q g_{dq}) - \frac{1}{4}\Gamma_{ab}^n\Gamma_{nc}^q g_{dq} \\
& = \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} (g^{ab}\Gamma_{a,b} + g^{ab}\Gamma_a\Gamma_b) - \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} (abcd)(\frac{1}{4}\lambda(g_{ab,m}\Gamma_{cd}^m - 2g_{am,b}\Gamma_{cd}^m - 2g_{ab,c}\Gamma_d) \\
& - \frac{1}{4}\lambda^2(g^{mn}(g_{ab,m}g_{nc,d} + g_{ab,c}g_{md,n} + 2g_{am,b}g_{nc,d}) + 2g_{ab,c}\Gamma_d - 2g_{ab,cd}) \\
& - \frac{1}{4}(-3g_{ap}\Gamma_d\Gamma_{bc}^p + g_{ap}\Gamma_{bc}^p\Gamma_{fe}^q g_{dq}g^{fe} + 2g^{mn}g_{ap}\Gamma_{mb}^p\Gamma_{nc}^q g_{dq} + \Gamma_{ab}^n\Gamma_{nc}^q g_{dq} \\
& - g_{pq}\Gamma_{ab}^p\Gamma_{cd}^q) + \frac{1}{3}g_{ae}\Gamma_{bc,d}^e + \frac{1}{3}g_{ae}\Gamma_{mb}^e\Gamma_{cd}^m) \\
& = -\frac{i\hbar\varepsilon}{2m} (\frac{1}{4}\lambda(2g^{cd}\Gamma_m\Gamma_{cd}^m - 4g^{cd}\Gamma_c\Gamma_d + 4g^{cd}_{,c}\Gamma_d - 2g^{cd}_{,m}\Gamma_{cd}^m) \\
& - 2g^{ac}g^{bd}g_{am,b}\Gamma_{cd}^m - 2g^{ad}g^{bc}g_{am,b}\Gamma_{cd}^m - 2g^{cd}g^{ab}g_{am,b}\Gamma_{cd}^m) \\
& - \frac{1}{4}\lambda^2(g^{mn}g^{ab}g^{cd}(g_{ab,m}g_{nc,d} + g_{ab,c}g_{md,n} + 2g_{am,b}g_{nc,d} + g_{ac,m}g_{nb,d} + g_{ac,b}g_{md,n} \\
& + 2g_{am,c}g_{nb,d} + g_{ad,m}g_{nc,b} + g_{ad,c}g_{mb,n} + 2g_{am,d}g_{nc,b}) + 4g^{cd}\Gamma_c\Gamma_d - 2g^{ab}g^{cd}g_{ab,cd} \\
& - 4g^{cd}_{,c}\Gamma_d - 4g^{ad}g^{bc}g_{ab,cd}) + \frac{1}{3}g^{ab}(\Gamma_{ab,d}^d - \Gamma_{a,b} + \Gamma_m\Gamma_{ab}^m - \Gamma_{ma}^c\Gamma_{bc}^m))
\end{aligned}$$

D Exemple : Particule sur une sphère

Un exemple simple d'une métrique avec une courbure non-nulle est une sphère. La métrique est :

$$ds^2 = r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2) \quad (\text{D.1})$$

avec r le rayon de la sphère. Les composantes non-nulles du symbole de Christoffel sont :

$$\Gamma_{\phi\phi}^{\theta} = -\sin\theta \cos\theta, \quad \Gamma_{\theta\theta}^{\phi} = \Gamma_{\phi\theta}^{\phi} = \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \quad (\text{D.2})$$

et sa courbure scalaire :

$$R = \frac{2}{r^2} \quad (\text{D.3})$$

Le laplacien est celui des coordonnées sphériques auquel on retire la composante radiale (on peut montrer que c'est équivalent à l'opérateur de Laplace-Beltrami). Son équation de Schrödinger, basée sur (3.41), est donc :

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} - 4\xi\psi \right) \quad (\text{D.4})$$

Comme il s'agit d'une équation indépendante du temps, on pourra utiliser l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} - 4\xi\psi \right) \quad (\text{D.5})$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \alpha\psi = 0, \quad \alpha = \left(\frac{2mr^2}{\hbar^2} E - 4\xi \right) \quad (\text{D.6})$$

Il s'agit d'une équation différentielle d'harmoniques sphériques, avec

$$\frac{2mr^2}{\hbar^2} E - 4\xi = l(l+1) \quad (\text{D.7})$$

donnant les solutions :

$$\psi(\theta, \phi) = Y_m^l(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \frac{(-1)^m}{2^l l!} e^{im\phi} \sin^m\theta \frac{d^{m+l}}{d(\cos\theta)^{m+l}} (-\sin^{2l}\theta) \quad (\text{D.8})$$

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2mr^2} (l(l+1) + 4\xi) \quad (\text{D.8})$$

Cette fonction n'est normalisée que sur une intégration sur l'angle solide Ω . Il faut donc rajouter une constante de normalisation de $\frac{1}{r}$ pour éliminer le r^2 de \sqrt{g} . Le propagateur de cette fonction d'onde est la somme sur tous les états de :

$$K(b, a) = \sum_{l=0}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} E_l t} \sum_{m=-l}^l \frac{1}{r^2} Y_m^l(\theta_b, \phi_b) Y_m^{l*}(\theta_a, \phi_a) \quad (\text{D.9})$$

Grâce au théorème d'addition des harmoniques sphériques, on a l'égalité :

$$\sum_{m=-l}^l Y_m^l(\theta_b, \phi_b) Y_m^{l*}(\theta_a, \phi_a) = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\gamma), \quad \cos\gamma = \cos\theta_b \cos\theta_a + \sin\theta_b \sin\theta_a \cos(\phi_b - \phi_a)$$

Avec P_l le polynôme de Legendre de degré l .

$$K(b, a) = \frac{e^{-i\frac{\hbar}{ma^2}2\xi(t_2-t_1)}}{4\pi r^2} \sum_{l=0}^{\infty} e^{-\frac{i\hbar}{2ma^2}l(l+1)(t_2-t_1)} (2l+1) P_l(\cos \gamma) \quad (\text{D.10})$$

Pour l'action classique, l'équation géodésique nous donne :

$$\ddot{\theta} - \sin \theta \cos \theta \dot{\phi}^2 = 0 \quad (\text{D.11})$$

$$\ddot{\phi} + 2 \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \dot{\phi} \dot{\theta} = 0 \quad (\text{D.12})$$

La solution de ces équations est : [16]

$$\theta(t) = \arctan\left(\frac{\alpha \tan(\omega t)}{\sqrt{\alpha^2 + \sec^2(\omega t)}}\right) + \frac{\pi}{2} \rightarrow \dot{\theta}(t) = \frac{\alpha \omega}{\sqrt{\alpha^2 + \sec^2 \omega t}} \quad (\text{D.13})$$

$$\phi(t) = \arctan\left(\frac{\tan(\omega t)}{\sqrt{\alpha^2 + 1}}\right) \rightarrow \dot{\phi}(t) = \frac{\omega \sqrt{1 + \alpha^2}}{1 + \alpha^2 \cos^2(\omega t)} \quad (\text{D.14})$$

Pour simplifier les calculs, on prendra le cas où $\dot{\phi} = 0$ (la particule se déplace sur un méridien de la sphère), qui nous donne $\dot{\phi} = 0$ et $\dot{\theta} = \frac{\theta_2 - \theta_1}{t_2 - t_1}$, et l'action classique se réduit ainsi à :

$$\begin{aligned} S_{Cl} &= \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{m}{2} r^2 \dot{\theta}^2 - \frac{2\hbar^2}{mr^2} \left(\xi - \frac{1}{6} \right) \right) dt \\ &= \frac{m}{2} r^2 \frac{(\theta_2 - \theta_1)^2}{t_2 - t_1} - \frac{2\hbar^2(t_2 - t_1)}{mr^2} \left(\xi - \frac{1}{6} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

L'intégrale de chemin est donc :

$$K(\theta_b, \phi_b, t_b; \theta_a, \phi_a, t_a) = e^{-i\frac{2\hbar(t_2-t_1)}{mr^2}(\xi-\frac{1}{6})} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{i=1}^N e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} r^2 \frac{(\theta_i - \theta_{i-1})^2}{\varepsilon}} \frac{m}{2\hbar\pi i \varepsilon} \prod_{i=1}^{N-1} r^2 \sin \theta \, d\theta_i d\phi_i$$

À l'aide de l'égalité

$$\cos(\theta_i - \theta_{i-1}) = 1 - \frac{(\theta_i - \theta_{i-1})^2}{2} + \mathcal{O}(\Delta^4 \theta) \quad (\text{D.16})$$

On peut changer le terme $\Delta^2 \theta$ en $2(1 - \cos(\theta_i - \theta_{i-1}))$, les termes restants n'étant que d'ordre ε^2 . Dans le cas présent, $\cos(\theta_i - \theta_{i-1})$ n'est autre que le $\cos \gamma$ vu précédemment. Ce qui permet d'utiliser la formule

$$\begin{aligned} e^{z \cos \gamma} &= \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) J_{l+\frac{1}{2}}(z) P_l(\cos \gamma) \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2z}} 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} J_{l+\frac{1}{2}}(z) \sum_{m=-l}^l Y_m^l(\theta_b, \phi_b) Y_m^{l*}(\theta_a, \phi_a) \end{aligned} \quad (\text{D.17})$$

avec J_n la fonction de Bessel modifiée. L'intégrale devient alors

$$\begin{aligned} K(b, a) &= e^{-i\frac{2\hbar(t_2-t_1)}{mr^2}(\xi-\frac{1}{6})} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{i=1}^N e^{-\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}} e^{\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon} \cos(\theta_i - \theta_{i-1})} \frac{m}{2\pi\hbar i \varepsilon} \prod_{i=1}^{N-1} r^2 \sin \theta \, d\theta_i d\phi_i \\ &= \frac{e^{-i\frac{2\hbar(t_2-t_1)}{mr^2}(\xi-\frac{1}{6})}}{r^2} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{i=1}^N \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l -e^{-\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}} \sqrt{\frac{2\pi imr^2}{\hbar\varepsilon}} J_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}\right) \right. \\ &\quad \left. Y_m^l(\theta_i, \phi_i) Y_m^{l*}(\theta_{i-1}, \phi_{i-1}) \right) \left(\prod_{i=1}^{N-1} \sin \theta \, d\theta_i d\phi_i \right) \end{aligned}$$

Il y aura toujours une intégrale du type $\int YY^*d\Omega$ pour chaque variable, et comme les harmoniques sphériques sont orthonormées :

$$\int Y_m^l(\theta, \phi) Y_{m'}^{l'*}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{mm'} \delta_{ll'} \quad (\text{D.18})$$

Les seules exceptions sont les bornes, θ_a et θ_b , qui sont fixes. Ainsi, une intégrale sur une variable donnera :

$$\begin{aligned} & \int \left(\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l -e^{-\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}} \sqrt{\frac{2\pi imr^2}{\hbar\varepsilon}} J_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}\right) Y_m^l(\theta_{i+1}, \phi_{i+1}) Y_m^{l'*}(\theta_i, \phi_i) \right) \\ & \left(\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=-n}^n -e^{-\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}} \sqrt{\frac{2\pi imr^2}{\hbar\varepsilon}} J_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}\right) Y_p^n(\theta_i, \phi_i) Y_p^{n*}(\theta_{i-1}, \phi_{i-1}) \right) \sin \theta d\theta_i d\phi_i \\ & = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=-n}^n \left(-e^{-\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}} \sqrt{\frac{2\pi imr^2}{\hbar\varepsilon}} \right)^2 J_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}\right) J_{n+\frac{1}{2}}\left(\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}\right) \\ & Y_m^l(\theta_{i+1}, \phi_{i+1}) Y_p^{n*}(\theta_{i-1}, \phi_{i-1}) \int Y_m^{l*}(\theta_i, \phi_i) Y_p^n(\theta_i, \phi_i) \sin \theta d\theta_i d\phi_i \\ & = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=-n}^n \left(-e^{-\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}} \sqrt{\frac{2\pi imr^2}{\hbar\varepsilon}} \right)^2 J_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}\right) J_{n+\frac{1}{2}}\left(\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}\right) \delta_{lm} \delta_{mp} \\ & Y_m^l(\theta_{i+1}, \phi_{i+1}) Y_p^{n*}(\theta_{i-1}, \phi_{i-1}) \\ & = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left(-e^{-\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}} \sqrt{\frac{2\pi imr^2}{\hbar\varepsilon}} J_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}\right) \right)^2 Y_m^l(\theta_{i+1}, \phi_{i+1}) Y_p^{n*}(\theta_{i-1}, \phi_{i-1}) \end{aligned}$$

On se retrouve avec le même type de somme, mais avec un facteur

$$-e^{-\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}} \sqrt{\frac{2\pi imr^2}{\hbar\varepsilon}} J_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}\right) \quad (\text{D.19})$$

Ce terme sera répété $N - 1$ fois, auquel il faut rajouter le facteur de la somme $i = N$. On se retrouve finalement avec :

$$K(b, a) = \frac{e^{-i\frac{2\hbar(t_2-t_1)}{mr^2}\left(\xi-\frac{1}{6}\right)}}{r^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \lim_{N \rightarrow \infty} \left(-e^{-\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}} \sqrt{\frac{2\pi imr^2}{\hbar\varepsilon}} J_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{imr^2}{\hbar\varepsilon}\right) \right)^N Y_m^l(\theta_b, \phi_b) Y_m^{l*}(\theta_a, \phi_a)$$

On a la limite :

$$\lim_{z \rightarrow \infty} J_n(z) = \sqrt{\frac{1}{2\pi z}} e^{z - \frac{n^2 - \frac{1}{4}}{2z}} \quad (\text{D.20})$$

qui nous permet finalement d'avoir le propagateur

$$\begin{aligned} K(b, a) & = \frac{e^{-i\frac{2\hbar(t_2-t_1)}{mr^2}\left(\xi-\frac{1}{6}\right)}}{r^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l e^{i\frac{l(l+1)\hbar(t_2-t_1)}{2mr^2}} Y_m^l(\theta_b, \phi_b) Y_m^{l*}(\theta_a, \phi_a) \\ & = \frac{e^{-i\frac{2\hbar(t_2-t_1)}{mr^2}\left(\xi-\frac{1}{6}\right)}}{4\pi r^2} \sum_{l=0}^{\infty} e^{i\frac{l(l+1)\hbar(t_2-t_1)}{2ma^2}} (2l+1) P_l(\cos \gamma) \end{aligned}$$

Il reste une exponentielle de $\frac{1}{6}$, possiblement dûe au fait qu'on a utilisé la définition habituelle de l'action plutôt que la formule (3.32) : Grosche et Steiner trouvent un résultat similaire à Schrödinger avec $L = \frac{m}{2} g_{ab} \dot{x}^a \dot{x}^b$ et $\lambda = \frac{1}{2}$ (pour le cas à trois dimensions), la seule différence qui pourrait ici absorber le $\frac{1}{6}$ est un λ différent, qui pourrait ainsi changer les termes d'ordre supérieur à dx . Le terme en θ n'a pas d'intégrale stochastique différente, car c'est une constante, et ainsi :

$$\int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} r^2 \dot{\theta}^2 \circ dt = \frac{m}{2} r^2 \left[\int_{t_a}^{t_b} \dot{\theta}^2 dt - \frac{\hbar}{m} \int_{t_a}^{t_b} \partial_\theta \dot{\theta} dt \right], \quad \partial_\theta \dot{\theta} = 0 \quad (\text{D.21})$$

On peut remarquer que le terme de couplage ξ n'a ici aucune influence - c'est un terme de phase qui disparaîtra lors du calcul de probabilité proprement dit. Cela vient du fait que la courbure est ici constante, et qu'elle n'implique donc aucune différence d'énergie lors du déplacement. Pour voir apparaître ξ dans la probabilité, il faudrait prendre par exemple le cas d'un ellipsoïde ou toute autre forme de courbure variable.

E Formules utiles

E.1 Intégrales

Gaussienne :

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\alpha(ax^2+bx)} dx &= \sqrt{-\frac{\pi}{\alpha a}} e^{-\frac{\alpha b^2}{4a}} \\ \int_{-\infty}^{\infty} x e^{\alpha(ax^2+bx)} dx &= -\frac{b}{4a} \sqrt{-\frac{\alpha\pi}{a}} e^{-\frac{\alpha b^2}{4a}} \\ \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{\alpha(ax^2+bx)} dx &= \left(\frac{\alpha b^2}{4a^2} - \frac{1}{2a}\right) \sqrt{-\frac{\alpha\pi}{a}} e^{-\frac{\alpha b^2}{4a}}\end{aligned}$$

Méthode de la phase stationnaire (en n dimensions) :

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} F(x) e^{\frac{i}{\delta} S(x)} dx &= (2\pi\delta)^{\frac{n}{2}} |\det D|^{-\frac{1}{2}} [F(x_0) e^{\frac{i}{\delta} S(x_0) + \frac{1}{4} i\pi\nu} + \mathcal{O}(\delta)] \\ \frac{\partial S}{\partial x} \Big|_{x=x_0} &= 0, \quad D^{ab} = \frac{\partial^2 S}{\partial x_a \partial x_b} \Big|_{x=x_0}\end{aligned}\tag{E.1}$$

ν est l'indice de D (la différence entre le nombre de valeurs propres positives et négatives)

E.2 Calcul tensoriel

Contraction du symbole de Ricci :

$$\begin{aligned}\Gamma_{ab}^b &\triangleq \Gamma_a = \partial_a \ln(\sqrt{g}) = \frac{1}{2} g^{mn} g_{mn,a} \\ \partial_a \sqrt{g} &= \sqrt{g} \Gamma_a, \quad \partial_b \partial_a \sqrt{g} = \sqrt{g} (\Gamma_{a,b} + \Gamma_a \Gamma_b) \\ \Gamma_{a,b} &= \frac{1}{2} (g_{,b}^{mn} g_{mn,a} + g^{mn} g_{mn,ab}) \rightarrow g^{mn} g_{mn,ab} = 2\Gamma_{a,b} - g_{,b}^{mn} g_{mn,a}\end{aligned}$$

Dérivées du tenseur métrique :

$$\begin{aligned}\partial_d (g^{ab} g_{bc}) &= \partial_d (\delta_c^a) = 0 \rightarrow g^{ab} g_{bc,d} = -g_{,d}^{ab} g_{bc} \\ g^{ma} g^{nb} g_{mn,d} &= -g_{,d}^{ab} \\ g^{ma} g^{nb} g_{mn,cd} &= -(g_{,cd}^{ab} + g_{,d}^{ma} g^{nb} g_{mn,c} + g^{ma} g_{,d}^{nb} g_{mn,c})\end{aligned}$$

Scalaire de Ricci :

$$\begin{aligned}R &= g^{ab} (\Gamma_{ab,d}^d - \Gamma_{a,b} + \Gamma_{ab}^d \Gamma_d - \Gamma_{ad}^c \Gamma_{bc}^d) \\ &= \frac{1}{2} g_{ab,c} g_{de,f} (g^{ac} g^{de} g^{bf} - g^{ab} g^{de} g^{cf} + 2g^{dc} g^{be} g^{af} + 2g^{df} g^{be} g^{ac}) \\ &\quad + g_{ab,cd} (g^{ac} g^{bd} - g^{ab} g^{cd})\end{aligned}$$

Références

- [1] Norbert Wiener, The Average Value of a Functional, Proceedings of the London Mathematical Society, S2-22 (1924)
- [2] Dirac P.A.M., The Principles of Quantum Mechanics, Oxford Science Publication (1947)
- [3] R. P. Feynman, Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics, Reviews of Modern Physics, vol. 20, Issue 367 (1948)
- [4] R. P. Feynman, A.R. Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals, McGraw-Hill (1965)
- [5] H.R. Trotter, On the Product of Semigroups of Operators, Proceedings of the American Mathematical Society, vol. 10, pp.545-551 (1959)
- [6] M. Chaichian, A. Demichev, Path Integrals in Physics, Institute of Physics Publishing (2000)
- [7] L.F.Abbott, M.B. Wise, The Dimension of a Quantum-Mechanical Path, American Journal of Physics, vol. 48, Issue 1, (1979)
- [8] F.A. Berezin, Feynman Path Integrals in a Phase Space, Soviet Physics Uspekhi, vol. 23, Issue 11(1980)
- [9] José Enrique Moyal, Quantum Mechanics as a Statistical Theory, Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, vol. 45 (1949)
- [10] Aku Valtakoski, Mathematical Aspects of Functional Integration, Université d'Helsinki (2000)
- [11] M.S. Marinov, Path Integrals in Quantum Theory : An Outlook of Basic Concepts, Physics Report, vol. 60, Issue 1 (1979)
- [12] Allen C. Hirshfeld, Canonical and Covariant Path Integrals, Physics Letters, vol. 67A, Issue 1 (1978)
- [13] Bryce S. DeWitt, Dynamical Theory in Curved Spaces. I. A Review of the Classical and Quantum Action Principles, Reviews of Modern Physics, vol. 29, Issue 3 (1957)
- [14] K.S. Cheng, Quantization of a General Dynamical System by Feinman's Path Integration Formulation, Journal of Mathematical Physics, vol. 13, Issue 11 (1972)
- [15] Leonard Parker, Path Integrals for a Particle in Curved Space, Physical Review D, vol. 19, Issue 2 (1979)
- [16] James Callahan, The Geometry of Space-Time, Springer (1999)
- [17] Christian Grosche, Frank Steiner, Path Integrals on Curved Manifolds, Deutsches Elektronen-Synchrotron, vol. 87-014 (1987)
- [18] Narn-Rueih Shieh, Some Fractal Properties of Brownian Paths, Taiwanese Journal of Mathematics, vol. 4, Issue 1 (2000)
- [19] Alan Bain, Stochastic Calculus, <http://www.chiark.greenend.org.uk/~alanb> (2008)