Zeitschrift: Helvetica Physica Acta

Band: 28 (1955)

Heft: II-III

Artikel: Traitement semi-classique des forces générales dans la représentation de Feynman

Autor: Choquard, Ph.

DOI: https://doi.org/10.5169/seals-112603

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Mehr erfahren

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. En savoir plus

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. Find out more

Download PDF: 15.01.2026

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, https://www.e-periodica.ch

Copyright 1955 by Schweizerische Physikalische Gesellschaft.
Société Suisse de Physique. – Società Fisica Svizzera.
Nachdruck verboten. – Tous droits réservés. – Printed in Switzerland.

Traitement semi-classique des forces générales dans la représentation de Feynman[1])

par **Ph. Choquard**[2]) E. P. F., Zurich, et Université, Berne.

(19. I. 1955.)

Résumé. Dans son approche spatio-temporelle à la Mécanique quantique[3]), M. FEYNMAN fait une restriction[4]) quant à la validité de ses équations en imposant aux potentiels la condition de ne pas contenir des puissances de x supérieures à deux. Que se passe-t-il lorsque les potentiels sont quelconques, en particulier fortement anharmoniques ?

C'est l'objet d'une partie de ce travail que d'y répondre. On utilise à cet effet la solution semi-classique des noyaux de FEYNMAN que M. PAULI a donnée[5]). On montre (II.1) que dans le cas de forces anharmoniques, tout un spectre de trajectoires conduisent d'une position initiale à une position finale données, dans un temps donné. On développe (II.2) une méthode de calcul des actions correspondant à ces trajectoires, on étudie l'allure de ces actions en fonction de la position initiale et, par le truchement des noyaux associés aux actions, on évalue (III) l'effet quantique de ces forces de réflexion. Cet effet est mesuré par la contribution de ces noyaux à la fonction d'onde finale. On montre alors que, pour de petits intervalles de temps (petit au sens précisé par l'équation 12), seul le noyau associé à la trajectoire directe importe, que ce noyau a déjà les mêmes propriétés que le noyau exact et que les forces de réflexion ont un effet négligeable. Ces résultats sont résumés dans un théorème à la fin du chapitre III.

On généralise sous IV la construction des noyaux de FEYNMAN au cas de systèmes quelconques, conservatifs ou non, au cas de systèmes possédant des particules douées de spin et au cas de systèmes donnés en coordonnées curvilignes. Jusqu'ici d'une manière non relativiste. Enfin on développe deux méthodes de détermination relativiste de ces noyaux, la première où l'on utilise la représentation en fonction du temps propre due à M. FOCK; la seconde plus directe, évitant de passer par une intégration sur une variable auxiliaire. Ces constructions semi-classiques constituent de bonnes approximations aux solutions exactes, dans certains domaines de leurs arguments; ces domaines sont définis par la règle (64).

Ces résultats permettent de conclure que les noyaux donnés par les équations (1′, 28, 33, 55, 63, 55.I, 63.I) sont les instruments d'une méthode générale de traitement des problèmes non stationnaires, méthode applicable dans le cadre défini par la règle (64) et ses cas particuliers.

[1]) Thèse de doctorat présentée à l'Ecole Polytechnique Fédérale, Zurich.

[2]) Actuellement à «Battelle Memorial Institute» à Genève.

[3]) Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics. R. P. FEYNMAN, Rev. of Mod. Phys. **20**, 367 (1948).

[4]) Note 15, p. 376.

[5]) Ausgewählte Kapitel aus der Feldquantisierung. Prof. Dr. W. PAULI. Cours donné à l'E.P.F. de Zurich en 1950/51.

I. Introduction.

Dans la représentation de FEYNMAN, ce ne sont pas les fonctions d'onde, mais les noyaux $K(1,0)$ définis par cet auteur qui sont déterminants. Ces noyaux sont reliés à la représentation habituelle par la définition

$$K(1,0) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(1)\, \psi_n^*(0)$$

où les ψ_n seraient les solutions stationnaires d'un problème donné. Posons $1 \equiv \vec{q}, t$, $0 \equiv \vec{q}_0, t_0$; K est la solution de l'équation de SCHROEDINGER

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{H}\right) K = 0$$

qui, pour $t = t_0$, se réduit à la fonction δ de DIRAC:

$$K(\vec{q}, \vec{q}_0, t_0, t_0) = \delta^N(\vec{q} - \vec{q}_0)\,,$$

où N est le nombre de dimensions. Ce noyau fournit la solution $\psi(\vec{q}, t)$ correspondant à toute fonction initiale donnée $\psi(\vec{q}_0, t_0)$:

$$\psi(\vec{q}, t) = \int d^N q_0\, K(\vec{q}, t, \vec{q}_0, t_0)\, \psi(\vec{q}_0, t_0)\,.$$

Si $\boldsymbol{H}$ ne contient pas le temps explicitement, ce que nous supposerons jusqu'à nouvel avis, ce noyau ne dépend que de la différence des temps $t - t_0 = \tau$.

M. FEYNMAN a donné de ce noyau une solution semi-classique approchée. Par un procédé analogue à la méthode W. K. B., M. PAULI[1]) en a fondé une construction semi-classique reposant sur l'essai

$$K_c = R \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S\right\}.$$

En introduisant cet essai dans l'équation de SCHROEDINGER, en ordonnant les termes suivant les puissances croissantes de $\hbar$ et en annulant les coefficients de $\hbar^0$ et $\hbar^1$, on trouve pour S l'équation d'HAMILTON-JACOBI:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(\frac{\partial S}{\partial \vec{q}}, \vec{q}\right) = 0 \qquad S = \int_{t_0}^{t = t_0 + \tau} L\, dt'$$

et, avec

$$R^2 = C \cdot D, \qquad C = (2\pi i \hbar)^{-N}$$

---

[1]) Loc. cit. (3), p. 139 et suiv.

étant une constante de normalisation, une équation de continuité pour la densité D:

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{q}} (\vec{v} \cdot D) = 0 .$$

On en dérive la solution, appelée formule de VAN HOVE:

$$D(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau) = (-1)^N \text{ dét. } \left\| \frac{\partial^2 S}{\partial q_{0\,i}\, \partial q_k} \right\| .$$

La solution ainsi construite

$$K_c(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau) = \left(\frac{1}{2\pi i \hbar}\right)^{N/2} D^{1/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau)\right\} \tag{1}$$

satisfait l'équation de SCHROEDINGER jusqu'aux termes en $\hbar^2$ non-compris, soit:

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \tau} + \boldsymbol{H}\right) K_c = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta R}{R} \cdot K_c . \tag{2}$$

En général K_c est différent du noyau exact K. On se demande si, pour de petits intervalles de temps τ, soit pour $\tau \ll \tau_1$, τ_1 étant une limite supérieure, mesure de l'inhomogénéité des forces et que l'on déterminera quantitativement plus loin (voir chapitre III), cette fonction K_c a les mêmes propriétés que la fonction exacte K, c'est-à-dire si

$$K_c(\vec{q}, \vec{q}_0, 0) = \delta^N(\vec{q} - \vec{q}_0)$$

et

$$\lim_{\tau \to 0} \frac{K - K_c}{\tau} = 0 .$$

Ces deux propriétés peuvent être formulées simultanément par l'équation

$$\int d^N q_0 K_c(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau)\, \psi(\vec{q}_0, 0) = \psi(\vec{q}, 0) + i\frac{\tau}{\hbar} \boldsymbol{H} \psi(\vec{q}) + \tau \cdot g(\vec{q}, \psi, \tau) \tag{3}$$

où

$$g(\vec{q}, \psi, \tau) \underset{\tau \to 0}{\longrightarrow} 0 .$$

Si ce théorème est vrai, on peut construire la fonction K exacte par le procédé connu:

$$K(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau) = \lim_{\substack{\varepsilon \to 0 \\ n \to \infty}} \int \prod_{\nu=0}^{n} K_c(\vec{q}_{\nu+1}, \vec{q}_\nu, \varepsilon)\, dq_1 \cdots dq_\nu \cdots dq_n$$

où $\tau =$ const. est divisé en n intervalles ε: $\tau = n \cdot \varepsilon$.

Dans les cas où $\Delta R = 0$, K_c est la solution exacte et l'on vérifie aisément l'équation (3). Donnons quelques exemples:

Particule libre (N dim.)

$$K_c = K = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}\right)^{N/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m(\vec{q} - \vec{q}_0)^2}{2\tau}\right\} .$$

Particule dans un champ électrostatique homogène (3 dim.)[1])

$$K_c = K = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}\right)^{3/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m(\vec{q}-\vec{q}_0)^2}{2\tau} + \tau e \frac{(\vec{E},(\vec{q}+\vec{q}_0))}{2} - \tau^3 \frac{e^2 \vec{E}^2}{24 m}\right)\right\}$$

Particule dans un champ magnétostatique homogène (2 dim.) $\vec{H} = (0, 0, H)$, $\omega = eH/2mc$.

$$K_c = K = \frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin\omega\tau} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(m\omega \frac{(\vec{q}-\vec{q}_0)^2 \cos\omega\tau}{2\sin\omega\tau} + \frac{e}{2mc}\left(\vec{H},[\vec{q},\vec{q}_0]\right)\right)\right\}$$

Oscillateur harmonique (1 dim.)

$$K_c = K = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin\omega\tau}\right)^{1/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(m\omega \frac{(q^2+q_0^2)\cos\omega\tau - 2qq_0}{2\sin\omega\tau}\right)\right\}.$$

Dans ces exemples, le potentiel est «faible», c'est-à-dire que dans le sens de la restriction de M. Feynman, il ne contient pas de puissance de x supérieure à deux.

Que se passe-t-il lorsque le potentiel est quelconque, en particulier lorsqu'il est fortement anharmonique?[2])

C'est sous II et III que l'on répond à cette question. Sous II.1, on analyse les forces de réflexion dérivant de potentiels anharmoniques; sous II.2 on développe une méthode de calcul des actions S; sous III on construit les noyaux K_c et analyse leur comportement, en fonction de la variable d'intégration q_0, on évalue les termes en h^2 de l'équation (2), on détermine la limite supérieure τ_1 de τ et l'on calcule les contributions des noyaux K_c à l'intégrale (3). On est alors conduit à formuler le théorème qui clôt la première partie de ce travail.

Ce théorème démontré, on développe sous IV une série de généralisations. Sous IV.1, on étend la construction de K_c au cas de forces dérivant de potentiels scalaires et vectoriels, ceci pour des systèmes conservatifs ou non; cela revient à généraliser le calcul des actions. Ensuite, en prévision d'une construction semi-classique relativiste des noyaux, on calcule les actions relativistes. Sous IV.2, on traite le cas de coordonnées curvilignes, le cas non-relativiste de particules douées de spin s, enfin le cas relativiste de particules douées de spin ½ et 0. On établit pour finir une règle générale, exprimée sous forme d'une inégalité, que $\Theta = (\tau^2 - x^2/c^2)^{\frac{1}{2}}$ (τ à la limite non-relativiste) doit satisfaire pour que l'emploi des noyaux

[1]) L. de Broglie: Introduction à l'étude de la Mécanique ondulatoire, Ch. XIII, p. 191, Paris, Hermann 1930.

[2]) C'est cette question que nous a posée M. Pauli et qui a été l'origine de ce travail.

semi-classiques construits par les différentes formules soit justifié, c'est-à-dire pour que ces noyaux constituent de bonnes approximations aux noyaux exacts.

Le théorème et la règle finale nous permettent de formuler la conclusion de ce travail.

II. Systèmes anharmoniques.

II.1. Forces de réflexion.

Répondons qualitativement à la question posée dans l'introduction. Le mouvement d'un système, prenons pour simplifier une particule de masse m dans un potentiel quelconque $V(\vec{x})$, mouvement effectué en partant de $\vec{q}_0$ à $t = 0$ pour arriver en $\vec{q}$ à $t = \tau$, n'est en général *pas* unique. Les trajectoires sont les extrémales correspondant à un problème de variation en grand avec condition isopérimétrique ($\tau = \text{const.}$) relatif à l'action S. L'existence d'un ensemble de trajectoires est évidemment liée à la forme du potentiel donné, et pour illustrer ce phénomène nous donnerons plus bas deux exemples. L'une de ces extrémales a une longueur minimum: c'est la trajectoire directe qui conduit de $\vec{q}_0$ à $\vec{q}$; c'est le mouvement le plus «économique», c'est-à-dire celui qui se réalise avec le minimum d'énergie. Les autres extrémales fournissent des trajectoires «indirectes»; par «indirect» nous entendons que la particule subit des réflexions avant d'aboutir en $\vec{q}$ et l'énergie de la particule croît avec le nombre de réflexions qu'elle subit. Nous appellerons «forces de réflexion» les forces qui permettent de telles trajectoires. Pour définir les points de réflexion d'une trajectoire, nous remarquerons que ce sont ceux où s'effectue un certain rebroussement du mouvement de la particule; décomposons l'impulsion $\vec{p}$ en deux composantes $\vec{p}_{//}$ et $\vec{p}_{\perp}$ appartenant au plan $\vec{p}, \vec{K}$ ($\vec{K} = -\text{grad V}$), $\vec{p}_{//}$ étant parallèle et $\vec{p}_{\perp}$ perpendiculaire à $\vec{K}$. Un point de réflexion $\vec{\zeta}$ sera caractérisé par le fait que $\vec{p}_{//}(\vec{\zeta}) = 0$, c'est-à-dire $\vec{p}(\vec{\zeta}) \perp \vec{K}(\vec{\zeta})$. En ces points l'énergie cinétique n'est pas nécessairement nulle. On peut établir la condition d'orthogonalité $(\vec{p}(\vec{\zeta}), \vec{K}(\vec{\zeta})) = 0$ en partant d'un principe d'extremum pour l'énergie cinétique $T(\vec{\zeta})$:

$$T = \frac{\vec{p}^2}{2m} \qquad \delta T = 0 = (\vec{p}\,\delta\vec{p}) = (\vec{p}, \dot{\vec{p}})\,\delta t = \delta t\left(\vec{p}(\vec{\zeta}), \vec{K}(\vec{\zeta})\right) = 0\,.$$

La solution $\vec{K} = 0$ est évidemment à exclure; de même le cas des forces centrifuges, où $(\vec{p}(\vec{\zeta}), \vec{K}(\vec{\zeta})) \equiv 0$. La solution $\vec{p} = 0$ est valable pour les problèmes à une dimension ou bien à N dimensions dans le cas des points de rebroussement. Enfin, si l'on a des potentiels vectoriels, le principe s'applique à $T = \frac{1}{2}\, m\, \dot{\vec{x}}^2$: $\delta T = 0 \rightarrow (\dot{\vec{x}}, \vec{K}) = 0$.

Exemples.

a) La «boule de billard». C'est le modèle bidimensionnel d'une particule se mouvant dans un potentiel nul à l'intérieur d'un rectangle et infini à partir des bords. Suivant la grandeur et la direction de l'impulsion initiale donnée à la particule, on se rend compte qu'il y a une double infinité de manières d'arriver en $\vec{q}$ au temps $t = \tau$ grâce aux réflexions possibles aux parois. Ces trajectoires s'obtiennent en reliant $\vec{q}_0$ successivement à toutes les images-miroir de $\vec{q}$. L'énergie cinétique admet un spectre de valeurs dépendant de deux paramètres m et n, ces nombres entiers quelconques indiquant le nombre de réflexions aux parois du potentiel.

b) Mouvement à une dimension d'une particule dans un potentiel de la forme

$$V(x) = V_0 \cdot (x/L)^{2k} \text{ [1]}.$$

Nous supposerons pour simplifier k entier; l'exposant $2k$ exprime une condition préalable de périodicité; en effet, si l'exposant était impair, on aurait la trajectoire directe et éventuellement une et une seule trajectoire indirecte, ce qui nous intéresse peu. Exprimons la période T du mouvement en fonction de l'énergie:

$$T = \oint \frac{dx}{v} = \oint \frac{dx}{\sqrt{2/m\,(E - V(x))}} = \frac{\partial}{\partial E} \oint dx \sqrt{m/2\,(E - V(x))}$$

et en introduisant $V(x)$, il vient

$$T = \left(\frac{m}{2\,V_0}\right)^{1/2} \cdot L \cdot C_k \left(1 + \frac{1}{k}\right) \left(\frac{V_0}{E}\right)^{1/2\,(1-1/k)}$$

avec

$$C_k = \oint \mathrm{d}u \sqrt{1 - u^{2k}} = 4 \cdot \frac{\Gamma(3/2) \cdot \Gamma(1/k)}{\Gamma(3/2 + 1/k)}$$

pour $k > 0$. Cette formule met en évidence la relation entre la période d'un oscillateur anharmonique et son énergie. Analysons la fonction $T = T\,(E, k)$ où k est paramètre.

$k = 1$. C'est l'oscillateur harmonique, T est indépendant de l'énergie E, comme il se doit. Cela signifie qu'avec nos variables (q, q_0, τ) une et une seule trajectoire est possible.

$k > 1$. La période diminue quand l'énergie augmente; les trajectoires indirectes sont possibles; il y en a une infinité! On peut en effet décomposer le temps τ donné comme suit:

$$\tau = \tau_n^0 + n \cdot T_n$$

---

[1]) Nous traiterons plus loin en détail (II.2) ce cas «standard».

ce qui correspond à une trajectoire n fois réfléchie à laquelle est associée une énergie E_n donnée implicitement par l'équation

$$\tau = \int_{q_0}^{q} dx \left[\frac{2}{m}(E_n - V(x))\right]^{-1/2} + n \oint dx \left[\frac{2}{m}(E_n - V(x))\right]^{-1/2}.$$

$k < 0$. Soit alors $V(x) = -|V_0| \cdot (x/L)^{-2|k|}$. La position q étant fixée d'avance et pour autant qu'elle ne se situe pas à la singularité (ce que nous exclurons dorénavant), il y a un nombre fini de trajectoires car $W = -|E|$ est limité par $W_{\max} \leqslant |V(q)|$. Cet exemple ne doit pas nous inciter à croire que la périodicité soit une condition nécessaire pour l'existence des réflexions. En effet, périodicité est liée à séparabilité du système envisagé. Dans le cas de systèmes non séparables, les réflexions demeurent alors que toute périodicité disparaît. On peut se poser la question du dénombrement des trajectoires; il y en a une infinité: quel est l'ordre de cet infini? Dans un espace à N dimensions, cet ordre est égal à N, s'il existe un référentiel particulier où le système est séparable, c'est-à-dire si

$$V(\vec{x}) = \sum_{1}^{N}{}_i V_i(x_i),$$

ce que nous ne pouvons supposer. Dans l'exemple (a) si l'on remplace le rectangle par un polygone à n côtés, l'ordre dépendra de n. On en conclut que la forme du potentiel joue un rôle prépondérant et qu'ainsi on ne peut répondre à la question dans toute sa généralité.

L'essentiel est toutefois qu'on ait reconnu l'existence d'un ensemble de trajectoires. Comme à chacune d'elles est associée une action S, donc d'après la définition (1) un noyau K_c aussi, la question posée dans l'introduction devient: comment se manifeste ce phénomène de réflexion par l'intermédiaire des noyaux K_c, autrement dit: quelle est la contribution de cet ensemble de K_c au membre de droite de l'équation (3)?

II.2. Intégrales d'action.

La prochaine étape consiste à développer une méthode de calcul des intégrales d'action. Nous appellerons S_n l'action associée à une trajectoire possédant n points de réflexions; S_0 sera donc l'action correspondant à la trajectoire directe de $\vec{q}_0$ à $\vec{q}$. Il convient de traiter le calcul des actions en deux phases, soit de déterminer d'abord S_0 et de déterminer ensuite les S_n.

L'action S_0. Elle est identique à l'action habituelle S sans indice. $S = S(\vec{q}, t, \vec{q}_0, t_0)$ satisfait les équations d'Hamilton-Jacobi:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(\frac{\partial S}{\partial \vec{q}}, \vec{q}, t\right) = 0 \qquad -\frac{\partial S}{\partial t_0} + H\left(\frac{-\partial S}{\partial \vec{q}_0}, \vec{q}_0, t_0\right) = 0. \tag{4}$$

Considérons t et t_0 fixés; S est une fonction régulière de $\vec{q}$, $\vec{q}_0$, $\vec{x} = \vec{q} - \vec{q}_0$, pour autant que ces positions ne se situent pas aux singularités des champs de forces donnés (s'il y en a!), ce que nous avons déjà exclu. Cette condition de régularité est nécessaire pour déterminer univoquement la solution de (4). Il faut en plus connaître la condition initiale $S(\vec{q}, \vec{q}_0, t_0, t_0)$ qu'il est commode de formuler ainsi:

A la limite $t \to t_0$ la fonction $(t - t_0) \cdot S$ a un zéro de forme ponctuelle pour $\vec{q} = \vec{q}_0$; plus exactement:

$$\lim_{t \to t_0} (t - t_0) \cdot S(\vec{q}, \vec{q}_0, t, t_0) = \frac{1}{2} \cdot m \cdot (\vec{q} - \vec{q}_0)^2.$$

Pour établir cette condition initiale, montrons d'abord que:

$$\lim_{t \to t_0} (t - t_0) \cdot \vec{v}_0(\vec{q}, \vec{q}_0, t, t_0) = \vec{q} - \vec{q}_0$$

où $\vec{v}_0(\,.\,.)$ est la vitesse initiale de la particule soumise à une force $\vec{K}(\vec{q}_0, t_0)$ quelconque. Posons $t_0 = 0$, $t - t_0 = \tau$ et partons de l'équation du mouvement

$$m \ddot{\vec{\xi}}(t) = \vec{K}(\vec{\xi}, t)$$

dont on peut écrire la solution sous la forme

$$\vec{\xi}(t') = \vec{q}_0 + \int_0^{t'} \vec{v}(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau, t)\, dt \qquad m \dot{\vec{v}} = \vec{K}$$

pour des valeurs de $t' \leqslant \tau < T$ période du mouvement s'il y en a une. Pour $t' = \tau$ on a $\vec{\xi} = \vec{q}$, donc

$$\vec{q} - \vec{q}_0 = \int_0^{\tau} \vec{v}(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau, t)\, dt\,.$$

Développons $\vec{v}(t)$ par rapport à la variable t; en utilisant l'équation du mouvement, il vient

$$\vec{v}(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau, t) = \vec{v}_0(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau) + t \frac{\vec{K}(\vec{q}_0, 0)}{m} + \frac{t^2}{2m} \left[(\vec{v}_0, \vec{\nabla}) \vec{K} + \frac{\partial \vec{K}}{\partial t} \right] + \cdots$$

que l'on introduit sous la dernière intégrale; on a alors:

$$\vec{q} - \vec{q}_0 = \vec{v}_0 \cdot \tau + \frac{\tau^2}{2m} \vec{K}(\vec{q}_0, 0) + \frac{\tau^3}{2m} \left[(\vec{v}_0, \vec{\nabla}) K + \frac{\partial K}{\partial t} \right] + \cdots.$$

Passons à la limite $\tau \to 0$, le 2^0 et 3^0 terme étant de la forme $0(\tau^2)$, il reste

$$\lim_{\tau \to 0} \vec{v}_0 \cdot \tau = \overline{q - \vec{q}_0}\,.$$

Ce résultat intermédiaire nous permet de poser

$$\vec{v}_0(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau) = \frac{\overline{q-q}}{\tau} + \vec{v}'(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau)$$

où $\vec{v}'$ est une fonction régulière de τ. Calculons maintenant

$$\int_0^\tau T dt' \quad \text{avec} \quad T = \frac{1}{2} m v^2,$$

où nous introduisons le développement de $\vec{v}(t)$ et de $\vec{v}_0(\tau)$, il vient:

$$T = \frac{m}{2}\left(\frac{\overline{q-q_0}}{\tau}\right)^2 + m\left(\frac{\overline{q-q_0}}{\tau}, \vec{v}'\right) + \frac{m}{2}\vec{v}'^2 + 0\left(\frac{t}{\tau}\right)$$

et

$$\int_0^\tau dt\, T = \frac{m}{2}\frac{(\overline{q-q_0})^2}{\tau} + m(\overline{q-q_0}, \vec{v}') + 0(\tau);$$

ensuite

$$\int_0^\tau dt\, V(\vec{\xi}(t), t) = \tau \int_0^1 V(\vec{q}_0 + (\vec{q}-\vec{q}_0)u + \tau\vec{v}'u + \cdots, \tau u)\, du$$

avec $t/\tau = u$ et la solution $\vec{\xi}(t)$. Avec la définition de

$$S = \int_0^\tau L dt, \quad L = T - V,$$

formons $\tau \cdot S$:

$$\tau S = \frac{m}{2}(\overline{q-q_0})^2 + m(\overline{q-q_0}, \vec{v}')\tau - \tau^2 \int_0^1 V(u)\, du$$

et passons à la limite $\tau \to 0$, on a bien la condition énoncée:

$$\lim_{\tau \to 0} \tau S(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau) = \frac{m}{2}(\overline{q-q_0})^2.$$

Ce résultat nous permet de poser:

$$\underline{S = \frac{m}{2}\frac{(\overline{q-q_0})^2}{\tau} + S'(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau)}$$

où $S'(\vec{q}, \vec{q}_0, t, t_0)$ est une fonction *régulière de* $\tau = t - t_0$. Cette condition est générale, elle est valable dans un espace de dimension quelconque et pour des systèmes conservatifs ou non. Si le système est conservatif, S ne dépend que de la différence des temps τ, et si les forces ne dépendent pas des vitesses, $\partial S/\partial\tau\,(+\tau) = \partial S/\partial\tau\,(-\tau)$, c'est-à-dire S est une fonction impaire de τ. Revenons à nos forces

de réflexion. Soit $V(\vec{q})$ un potentiel quelconque contenant des puissances de $\vec{q}$ supérieures à deux. L'action S_0 satisfait les équations

$$\frac{\partial S_0}{\partial \tau} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S_0}{\partial \vec{q}}\right)^2 + V(\vec{q}) = 0 \qquad \frac{\partial S}{\partial \tau} + \frac{1}{2m}\left(-\frac{\partial S_0}{\partial \vec{q}}\right)^2 + V(\vec{q}_0) = 0; \quad (4')$$

les remarques précédentes sont valables et le fait que S_0' est une fonction régulière de τ nous incite à chercher la solution de (4') sous la forme de la série

$$S_0 = \sum_0^\infty{}_n\, \sigma_{2n-1}(\vec{q}, \vec{q}_0) \cdot \tau^{2n-1} \tag{5}$$

où les σ_{2n-1} ne dépendent que de $\vec{q}$, $\vec{q}_0$ et non de τ. Introduisons cet essai dans les équations (4'), il vient

$$\Sigma_n (2n-1)\, \sigma_{2n-1}\, \tau^{2n-2} + \frac{1}{2m}\left(\Sigma_n \frac{\partial \sigma_{2n-1}}{\partial \vec{q}}\, \tau^{2n-1}\right)^2 + V(\vec{q}) = 0$$

et

$$\Sigma_n (2n-1)\, \sigma_{2n-1}\, \tau^{2n-2} + \frac{1}{2m}\left(\Sigma_n - \frac{\partial \sigma_{2n-1}}{\partial \vec{q}_0}\, \tau^{2n-1}\right)^2 + V(\vec{q}_0) = 0.$$

Ces équations devant être identiquement satisfaites en τ, on annule les coefficients de τ^{2n-1}, ce qui conduit à écrire deux systèmes d'équations différentielles dont le premier est:

$$\left(\frac{\partial}{\partial \vec{q}}\, \sigma_{-1}\right)^2 = 2m\, \sigma_{-1} \tag{6.0}$$

$$\left\{1 \quad + \frac{1}{m}\left(\frac{\partial \sigma_{-1}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial}{\partial \vec{q}}\right)\right\} \sigma_1 \quad = -V(q) \tag{6.1}$$

$$\left\{3 \quad + \frac{1}{m}\left(\frac{\partial \sigma_{-1}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial}{\partial \vec{q}}\right)\right\} \sigma_3 \quad = -\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial \sigma_1}{\partial \vec{q}}\right)^2 \tag{6.2}$$

$$\left\{5 \quad + \frac{1}{m}\left(\frac{\partial \sigma_{-1}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial}{\partial \vec{q}}\right)\right\} \sigma_5 \quad = -\frac{1}{m}\left(\frac{\partial \sigma_1}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial \sigma_3}{\partial \vec{q}}\right) \tag{6.3}$$

$$\left\{7 \quad + \frac{1}{m}\left(\frac{\partial \sigma_{-1}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial}{\partial \vec{q}}\right)\right\} \sigma_7 \quad = -\frac{1}{m}\left(\frac{\partial \sigma_1}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial \sigma_5}{\partial \vec{q}}\right) - \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial \sigma_3}{\partial \vec{q}}\right)^2 \tag{6.4}$$

$$\left\{2n-1 + \frac{1}{m}\left(\frac{\partial \sigma_{-1}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial}{\partial \vec{q}}\right)\right\} \sigma_{2n-1} = -\frac{1}{2m}\sum_1^{n-1}{}_\nu \left(\frac{\partial \sigma_{2\nu-1}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial \sigma_{2(n-\nu)-1}}{\partial \vec{q}}\right). \tag{6.n}$$

Quant au second il n'est pas nécessaire de l'écrire, car on remplace simplement $\partial/\partial\vec{q}$ par $-\partial/\partial\vec{q}_0$ et $V(\vec{q})$ par $V(\vec{q}_0)$ dans (6). La première équation mise à part, on a un système d'équations aux dérivées partielles linéaires et du premier ordre. L'intérêt de l'essai (5) réside dans le fait qu'il «linéarise» l'équation d'Hamilton-Jacobi. On peut résoudre le système par récurrence.

Solution. —

$$\left(\frac{\partial \sigma_{-1}}{\partial \vec{q}}\right)^2 = 2\, m\, \sigma_{-1} \qquad \left(-\frac{\partial \sigma_{-1}}{\partial \vec{q}_0}\right)^2 = 2\, m\, \sigma_{-1} \tag{6.0}$$

d'où

$$\sigma_{-1} = \sigma_{-1}(\vec{q} - \vec{q}_0)\,.$$

Posons $\vec{x} = \vec{q} - \vec{q}_0$; $x = |\vec{q} - \vec{q}_0|$ et $\sigma_{-1} = (m/2)\, F^2$

$$\left(\frac{\partial \sigma_{-1}}{\partial x}\right)^2 = m^2 F^2 \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{x}}\right)^2 = 2\, m\, \sigma_{-1} = m^2 F^2$$

l'équation (6.0) devient

$$F^2\left(\left(\frac{\partial F}{\partial \vec{x}}\right)^2 - 1\right) = 0;$$

la solution triviale $F = 0$ étant exclue, on a

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \vec{x}}\right)^2 = 1$$

dont une intégrale complète, dépendant de N constantes, est:

$$F = \sum_1^N{}_k\, n_k\, x_k + C \equiv (\vec{n}, \vec{x}) + C$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \vec{x}}\right)^2 = \vec{n}^2 = 1 \qquad\qquad \sigma_{-1} = \frac{m}{2}\left((\vec{n}, \vec{x}) + C\right)^2.$$

La condition initiale exige $\tau_{-1}(\vec{x} = 0) = 0$, donc $C = 0$; cette même condition exige que $\tau_{-1}(\vec{x} \neq 0) \neq 0$ pour tout $\vec{x}$. Or, la solution ci-dessus est nulle sur toute la surface $\vec{x} \,\underline{\odot}\, \vec{n}$, on obtiendra la solution cherchée, appelée solution des caractéristiques, qui en $\vec{x} = 0$ a un zéro ponctuel, en éliminant les n_k entre

$$\sigma_{-1} = \frac{m}{2}(\vec{n}, \vec{x})^2 \quad \text{et} \quad \vec{n}^2 = 1$$

par la méthode des multiplicateurs de Lagrange.

$$\Phi = \sigma_{-1} - \lambda\, \vec{n}^2$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n_k} = 0 \qquad \frac{\partial \sigma_{-1}}{\partial n_k} - \lambda \frac{\partial \vec{n}^2}{\partial n_k} = m\,(\vec{n}, \vec{x})\, x_k - 2\,\lambda\, n_k = 0$$

$$\sum_1^N{}_k\, m^2 (\vec{n}, \vec{x})^2\, x_k^2 = \sum_k 4\,\lambda^2\, n_k^2 = 4\,\lambda^2 \;\rightarrow\; \lambda = \pm \frac{m}{2}\, x\, (\vec{n}, \vec{x})$$

$$\frac{m}{2}(\vec{n}, \vec{x})\,[x_k \mp x\, n_k] = 0 \;\rightarrow\; n_k = \pm \frac{x_k}{x}$$

$$\sigma_{-1} = \frac{m}{2}\left(\sum_1^N{}_k \frac{x_k\, x_k}{x}\right)^2 = \frac{m}{2}\, \vec{x}^2$$

$$\sigma_{-1} = \frac{m}{2}(\vec{q} - \vec{q}_0)^2. \tag{8.0}$$

Avec $1/m\,(\partial\sigma_{-1}/\partial\vec{q}) = \vec{x}$, le système d'équations (6) devient:

$$\left\{1 + \left(\vec{x}, \frac{\partial}{\partial\vec{x}}\right)\right\}\sigma_1 = -V(\vec{q}_0 + \vec{x}) \tag{7.1}$$

$$\left\{3 + \left(\vec{x}, \frac{\partial}{\partial\vec{x}}\right)\right\}\sigma_3 = -\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial\sigma_1}{\partial\vec{x}}\right)^2 \tag{7.2}$$

$$\left\{5 + \left(\vec{x}, \frac{\partial}{\partial\vec{x}}\right)\right\}\sigma_5 = -\frac{1}{m}\left(\frac{\partial\sigma_1}{\partial\vec{x}}, \frac{\partial\sigma_3}{\partial\vec{x}}\right) \tag{7.3}$$

$$\left\{7 + \left(\vec{x}, \frac{\partial}{\partial\vec{x}}\right)\right\}\sigma_7 = -\frac{1}{m}\left(\frac{\partial\sigma_1}{\partial\vec{x}}, \frac{\partial\sigma_5}{\partial\vec{x}}\right) - \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial\sigma_3}{\partial\vec{x}}\right)^2 \tag{7.4}$$

$$\left\{2n-1 + \left(\vec{x}, \frac{\partial}{\partial\vec{x}}\right)\right\}\sigma_{2n-1} = -\frac{1}{2m}\sum_{1}^{n-1}{}_{\nu}\left(\frac{\partial\sigma_{2\nu-1}}{\partial\vec{q}}, \frac{\partial\sigma_{2(n-\nu)-1}}{\partial\vec{x}}\right). \tag{7.n}$$

Chaque σ_{2n-1} se compose en principe de la solution générale de son équation homogène et d'une solution particulière de son équation inhomogène. La première étant singulière en $\vec{x} = 0$ (et ceci pour tout $n > 0$), la condition de régularité l'exclut et l'on ne doit ainsi tenir compte que de la solution régulière en $\vec{x} = 0$ de l'équation inhomogène. Ceci est mécaniquement évident, car si $V(\vec{x}) = 0$ (particule libre),

$$S_0 = \frac{m}{2}\frac{(\vec{q}-\vec{q}_0)^2}{\tau} = \frac{\sigma_{-1}}{\tau},$$

$\sigma_{2n-1} = 0$ pour tout $n \geqq 1$ et si $V(\vec{x}) \neq 0$, les σ_{2n-1} du système (7) répondent de la perturbation due au potentiel. En résumé, l'unicité de la solution S_0, donc de chaque coefficient σ_{2n-1}, est bien garantie par la condition initiale et la condition de régularité énoncées plus haut. Résolvons (7.n):

$$\left\{2n-1 + \left(\vec{x}, \frac{\partial}{\partial\vec{x}}\right)\right\}\sigma_{2n-1}(\vec{q}_0, \vec{q}_0 + \vec{x}) = f_{2n-1}(\vec{q}_0, \vec{q}_0 + \vec{x});$$

en remplaçant $\vec{x}$ par $\vec{x}\cdot u$, $\vec{x}\,\partial/\partial\vec{x} = u\,d/du$ pour $u = 1$ et l'équation devient:

$$\left\{2n-1 + u\frac{d}{du}\right\}\sigma_{2n-1}(\vec{q}_0, \vec{q}_0 + \vec{x}\,u) = f_{2n-1}(\vec{q}_0, \vec{q}_0 + \vec{x}\,u)$$

or

$$\left\{2n-1 + u\frac{d}{du}\right\}\cdot \equiv \frac{1}{u^{2n-2}}\frac{d}{du}u^{2n-1}.$$

donc

$$\frac{1}{u^{2n-2}}\frac{d}{du}u^{2n-1}\sigma_{2n-1}(u) = f_{2n-1}(u)$$

$$u^{2n-1}\sigma_{2n-1}(u)\Big|_0^1 = \int_0^1 du\,u^{2n-2}f_{2n-1}(u)$$

enfin

$$\sigma_{2n-1}(\vec{q}, \vec{q}_0) = \int_0^1 du\,u^{2n-2}f_{2n-1}(\vec{q}_0, \vec{q}_0 + \vec{x}\,u).$$

Cette équation générale appliquée au système (7), on a, en posant $\partial y/\partial \vec{x} = \vec{y}'$:

$$\sigma_1 = -\int_0^1 du\, V(\vec{q}_0 + \vec{x}\cdot u) \tag{8.1}$$

$$\sigma_3 = -\frac{1}{2m}\int_0^1 du\, u^2 \left(\vec{\sigma}_1'(u)\right)^2 \tag{8.2}$$

$$\sigma_5 = -\frac{1}{m}\int_0^1 du\, u^4 (\vec{\sigma}_1', \vec{\sigma}_3') \tag{8.3}$$

$$\sigma_7 = -\frac{1}{2m}\int_0^1 du\, u^6 [(\vec{\sigma}_3')^2 + 2(\vec{\sigma}_1', \vec{\sigma}_5')] \tag{8.4}$$

$$\sigma_{2n-1} = -\frac{1}{2m}\int_0^1 du\, u^{2n-2}\left[\sum_1^{n-1}{}_\nu (\vec{\sigma}'_{2\nu-1}, \vec{\sigma}'_{2(n-\nu)-1})\right]. \tag{8.n}$$

On peut ainsi calculer

$$\underline{S_0(\vec{q}, \vec{q}_0, \vec{\tau}) = \sum_0^\infty{}_n\, \sigma_{2n-1}(\vec{q}, \vec{q}_0)\, \tau^{2n-1}} \tag{5}$$

dans toute approximation de τ désirée, et ceci pour tout espace et tout potentiel. Nous généraliserons sous IV cette méthode au cas de potentiels vectoriels et au cas de systèmes nonconservatifs et relativistes. Il est à peine besoin de souligner que les équations (8) offrent un moyen rapide de calculer l'action $S(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau)$.

Remarque. – On peut dégager le principe sur lequel repose la méthode développée: au lieu d'intégrer

$$S = \int_0^\tau L\, dt$$

le long de la trajectoire effective reliant $\vec{q}_0$ à $\vec{q}$, on a fait un certain développement en série et chaque terme s'obtient en intégrant le long de la droite $\overline{\vec{q}_0\vec{q}}$.

Convergence. – Supposons $\vec{q}_0$ fixe, origine d'un système de coordonnées et $\vec{x} = \overrightarrow{q - q_0}$ variable N-dimensionnelle. On peut poser la question suivante: dans quel domaine de l'espace à $N + 1$ dimensions (la $N + 1^e$ étant la variable τ) la série S_0 converge-t-elle?

Il convient de se libérer de la dimension de S_0 $(m \cdot 1^2 \cdot t^{-1})$ en extrayant $\sigma_1 \cdot \tau$ de la série amputée de son premier terme:

$$S_0 = \sum_0^\infty \sigma_{2n-1} \tau^{2n-1} = \frac{m x^2}{2\tau} + \sigma_1 \cdot \tau \cdot \Phi$$

$$\Phi \equiv \sum_1^\infty \varphi_{n-1}(\vec{q}_0, \vec{x}, \tau) \qquad \varphi_{n-1} = \frac{\sigma_{2n-1}}{\sigma_1} \cdot \tau^{2n-2}$$

les termes φ_{n-1} de la série Φ sont alors sans dimension. On a le droit de mettre $\sigma_1 \cdot \tau$ en évidence, car $\sigma_1(\vec{q}_0, \vec{x})$ est une fonction régulière de $\vec{x}$. S_0 converge avec Φ et Φ converge si

$$\lim_{n \to \infty} (\varphi_{n-1})^{1/2(n-1)} = \varrho(\vec{q}_0, \vec{x}, \tau) < 1 .$$

L'équation $\varrho(\vec{q}_0, \vec{x}, \tau) = 1$ représente une surface dans notre espace à $N + 1$ dimensions et la série S_0 converge à l'intérieur du domaine limité d'une part par le plan $\tau = 0$ (à cause du premier terme $mx^2/2\tau$) et d'autre part par cette surface. On ne peut donner plus de détails sans connaître le comportement des σ_{2n-1}, c'est-à-dire sans spécifier le potentiel $V(\vec{x})$. Etant principalement intéressé aux potentiels anharmoniques, nous supposerons par exemple

$$V(\vec{x}) = V_{2k}(\vec{x}) = 1/2 \cdot m \cdot \omega^2 \cdot L^2 \cdot p_{2k}(\vec{x}/L)$$

polynome de degré $2k$ en $\vec{x}/L$, la parité assurant l'existence des réflexions. Soit $y_m(u)$ une forme de degré m en u, on a d'après les équations (8) et la définition de φ_{n-1}:

$$\varphi_{n-1} = (\omega\tau)^{2(n-1)} y_{2(n-1)(k-1)}(\vec{x}/L)$$

et

$$\varrho(\vec{q}_0 x, \tau) = \omega \tau \, y_{k-1}(\vec{q}_0, x/L) .$$

Si $k = 1$, le domaine consiste en une tranche (limitée par $\tau = 0$ et $\omega\tau = \pi$ soit $\tau = \pi/\omega$) d'épaisseur indépendante de $\vec{x}$, ce qui est confirmé par l'exemple page 92 de l'oscillateur harmonique dont l'action est connue sous forme finie. En revanche, si $k > 1$ la surface-limite est $\varrho(\vec{x}/L, \tau) = 1$ qui pour $|x| \gg L$ est asymptotiquement donnée par l'hyperboloïde

$$\omega\tau \cdot (|x|/L)^{k-1} = \text{Const.}$$

On clôt ici l'analyse de l'action S_0 et entreprend celle des S_n.

Les actions S_n. Avant de procéder au calcul des actions S_n dans le cas général (N dimensions, potentiel quelconque), il est indiqué

de traiter le cas standard de l'oscillateur anharmonique à une dimension. Soit

$$V(x) = V_0 \cdot (x/L)^{2k}$$

le potentiel, et soit λ, l'abscisse d'un point de réflexion

$$V(\lambda) = E \quad \text{d'où} \quad \lambda = (E/V_0)^{1/2k} \cdot L$$

où E est l'énergie de la particule. Soit ensuite F, l'action maupertuisienne prise sur une période

$$F = \oint p\, dx = \sqrt{2mE} \oint \sqrt{1 - V(x)/E}\, dx = \sqrt{2mE} \cdot \lambda \cdot C_k$$

où

$$C_k = \oint \sqrt{1 - u^{2k}}\, du = 4 \frac{\Gamma(3/2)\, \Gamma(1/2 \cdot k)}{\Gamma(3/2 + 1/2 \cdot k)}.$$

La période T est donnée par

$$T = \frac{\partial F}{\partial E} = \sqrt{2m}\, L\, V_0^{-1/2k}\, C_k \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2k}\right) E^{-(k-1)/2k}$$

d'où inversement on exprime l'énergie E en fonction de T. Formons l'action

$$\chi = F - ET$$

il vient

$$\chi = \gamma_k \left(\frac{1}{T}\right)^{k+1/(k-1)}$$

avec

$$\gamma_k = \frac{k-1}{k+1} \left\{\sqrt{2m} \cdot L \cdot V_0^{-1/2k} \cdot C_k \cdot \frac{k+1}{2k}\right\}^{2k/(k-1)}.$$

Jusqu'ici T est une variable indépendante; si maintenant on pose

$$T = \tau/\nu \quad \text{où} \quad \nu = 1/2, 1, 3/2, 2, \cdots$$

l'expression

$$\chi_\nu = \nu \cdot \gamma_k \left(\frac{\nu}{\tau}\right)^{(k+1)/(k-1)}$$

représente l'action d'une particule partie de l'origine 0 à $t = 0$ et revenue en 0 à $t = \tau$ après $n = 2 \cdot \nu$ réflexions ($n = 1, 2, ..$). On voit ainsi comment s'exprime mathématiquement le phénomène de réflexion: la fonction initiale $S(0, 0, \tau)$ de l'action S qui admet, en l'absence des réflexions, une seule valeur, en admet maintenant tout un spectre

$$S(0, 0, \tau) \rightarrow S_n(0, 0, \tau) = \nu \cdot \gamma_k \left(\frac{\nu}{\tau}\right)^{(k+1)/(k-1)} = \chi_\nu(\tau); \; n = 2 \cdot \nu.$$

A partir de ces fonctions initiales, on va construire le spectre d'actions $S_n(q, q_0, \tau)$. Etablissons d'abord l'action $S_n(q_0, 0, \tau)$. Pour

chaque n entier donné, on aura deux actions correspondant aux deux réalisations possibles du mouvement, suivant que celui-ci commence dans le sens + ou — de l'axe x, soit:

$$S_n(q_0, 0, \tau) = \begin{cases} \chi_\nu(T_\nu^-) - S_{0,n}(0, q_0, \tau_{0\nu}^-) \\ \chi_\nu(T_\nu^-) + S_{0,n}(q_0, 0, \tau_{0\nu}^+) \end{cases}$$

où l'on a

$$\nu T_\nu^- - \tau_{0\nu} = \tau \qquad \nu T_\nu^+ + \tau_{0\nu} = \tau .$$

Enfin pour établir $S_n(q, q_0, \tau)$ on remarque qu'indépendamment du sens du mouvement, il faut encore distinguer deux cas, suivant que n est pair ou impair. On trouve:

n pair, ν entier

$$S_n(q, q_0, \tau) = \begin{cases} \chi_\nu(T_\nu^-) - S_{0,n}(q_0, q, \tau_{0\nu}^-) & (9.1) \\ \chi_\nu(T_\nu^+) + S_{0,n}(q, q_0, \tau_{0\nu}^+) & (9.2) \end{cases}$$

où

$$\nu T_\nu^- - \tau_{0\nu}^- = \tau \quad \text{et} \quad \nu T_\nu^+ + \tau_{0\nu}^+ = \tau ;$$

n impair, ν demi-entier

$$S_n(q, q_0, \tau) = \begin{cases} \chi_\nu(T_\nu^-) - S_{0,n}(q_0, 0, \tau_{0\nu}^{1-}) - S_{0,n}(0, q, \tau_{0\nu}^{2-}) & (9.3) \\ \chi_\nu(T_\nu^+) + S_{0,n}(0, q_0, \tau_{0\nu}^{2+}) + S_{0,n}(q, 0, \tau_{0\nu}^{2+}) & (9.4) \end{cases}$$

où

$$\nu T_\nu^- - \tau_{0\nu}^{1-} - \tau_{0\nu}^{2-} = \tau \quad \text{et} \quad \nu T_\nu^+ + \tau_{0\nu}^{1+} + \tau_{0\nu}^{2+} = \tau .$$

Toutes les $S_{0,n}(\,.\,.)$ des formules (9) sont données avec leurs arguments respectifs par des séries du type S_0 (équation 5 et 8); ces séries convergent pour $\tau_{0\nu}^{\cdot\cdot} < T_\nu^{\cdot\cdot}/\nu$. On remarque en outre que les fonctions initiales $S_n(0,0, \tau)$ contiennent τ à la puissance $-(k+1)/(k-1) < -1$, qu'il eût été ainsi illusoire d'en chercher le développement par rapport à des puissances entières de τ. On en conclut que dans le cas où les points de réflexion sont du type λ, c'est-à-dire des points où l'energie cinétique est nulle

$$V(\lambda) = E, \qquad \lambda \sim E^{1/2k}, \qquad \lambda \sim (1/\tau)^{1/k-1}$$

le calcul de $S(\lambda, 0, \tau)$ ne peut se faire avec la série (5). Une telle série divergerait, car λ se trouve sur la surface limitant le domaine de convergence. Nous avons conservé jusqu'ici explicitement les deux variables $T_\nu^{\cdot\cdot}$ et $\tau_{0\nu}^{\cdot\cdot}$, liées par une seule équation à τ. Etant donné que seules τ, n, q, q_0 sont les variables indépendantes, il faut exprimer T_ν et $\tau_{0\nu}$ en fonction de ces dernières. Une seconde relation

nous est fournie par le théorème d'énergie: les réflexions étant élastiques, les trajectoires sont situées sur des niveaux d'énergie qui s'élèvent avec le nombre des réflexions et forment un spectre discontinu pour q, q_0, τ fixés. Prenons alors un des quatre cas de S_n

$$n = 2\nu \qquad S_n = \nu \cdot \gamma_k \left(\frac{1}{T_\nu^+}\right)^{(k+1)/(k-1)} + S_{0,n}(q, q_0, \tau_{0\nu}^+) \tag{9.2}$$

avec

$$S_{0,n} = \sum_{0}^{\infty}{}_\mu \, \sigma_{2\mu-1}^{0,n}(q, q_0)\, \tau_{0,\nu}^{+\,2\mu-1}; \quad \nu T_\nu^+ + \tau_{0\nu} = \tau\,,$$

on a

$$\frac{\partial S_n}{\partial \tau} = -E = \frac{\partial}{\partial T_\nu^+}\, \nu\, \gamma_k \left(\frac{1}{T_\nu^+}\right)^{(k+1)/(k-1)} = \frac{\partial S_{0,n}}{\partial \tau_{0\nu}^+}$$

donc deux équations pour calculer T_ν et $\tau_{0\nu}$:

$$\frac{k+1}{k-1} \cdot \nu \cdot \gamma_k \left(\frac{1}{T_\nu^+}\right)^{2k/(k-1)} = \frac{m}{2}\, \frac{(q-q_0)^2}{\tau_{0\nu}^{+\,2}} - \sum_{1}^{\infty}{}_\mu \, (2\mu - 1)\, \sigma_{2\mu-1}\, \tau_{0\nu}^{+\,2\mu-2}$$

et

$$\nu T_\nu^+ + \tau_{0\nu}^+ = \tau\,.$$

Si la question est résolue en principe, pratiquement le calcul est malaisé et ne pourra se faire que par approximations: de la seconde, on tire T_ν^+ que l'on introduit dans la première, et l'on évalue $\tau_{0\nu}^+$ fonction de τ en considérant que $\tau_{0\nu}^+ \ll \tau$. N'ayant toutefois pas besoin des solutions explicites, nous n'irons pas plus loin dans cette voie. Démontrons pour finir une propriété des S_n, propriété qui jouera un certain rôle par la suite: Les fonctions S_n ne s'annulent pas dans tout l'espace des q, q_0. En effet, q et q_0 étant toujours plus petits que λ, point de réflexion,

$$S_{0,n}(q, q_0, \tau_{0\nu}) < \frac{\chi_\nu}{2\nu} \qquad \text{et} \qquad S_{0,n}(q, 0, \tau_{0\nu}) < \frac{\chi_\nu}{4\nu}$$

ces inégalités introduites dans les équations (9), on voit immédiatement que dans tous les cas $S_n(q, q_0, \tau) > 0$, pour $n > 0$.

L'analyse de notre exemple standard, l'oscillateur anharmonique, étant terminée, passons au cas général: soit un potentiel quelconque et N dimensions. Nous avions déjà remarqué sous II. 1, page 93 que, dans un espace à N dimensions, les points de réflexion $\vec{\zeta}_i$ ne sont en général pas des points du type λ, c'est-à-dire des points où l'énergie cinétique s'annule. Ce fait est important, car l'inégalité $|\vec{\zeta}_i| < \lambda$ est une condition suffisante pour pouvoir calculer $S(\vec{\zeta}_i, \vec{\zeta}_k, \tau_{ik})$ à l'aide d'une série du type (5). Soient donc $\vec{\zeta}_i$ les points de réflexion,

$i = 1, 2, .. n$ et posons pour simplifier l'écriture $\vec{q}_0 = \vec{\zeta}_0$, $\vec{q} = \vec{\zeta}_{n+1}$. L'action étant additive, on peut écrire

$$S_n = S_{0,1} + S_{1,2} + \cdots S_{n-1,n} + S_{n,n+1}$$

$$S_n = \sum_0^n{}_i\, S_{i,i+1} \qquad \tau = \sum_0^n{}_i\, \tau_{i,i+1}.$$

Par cette décomposition, on introduit explicitement les $\vec{\zeta}_i$ définis sous II.1 et $n + 2$ nouvelles variables $\tau_{i,i+1}$; on pourra plus bas éliminer ces dernières en utilisant comme précédemment le théorème d'énergie qui fournit les $n + 1$ relations suivantes

$$-E = \frac{\partial S_{0,1}}{\partial \tau_{0,1}} = \frac{\partial S_{1,2}}{\partial \tau_{1,2}} = \cdots = \frac{\partial S_{n-1,n}}{\partial \tau_{n-1,n}} = \frac{\partial S_{n,n+1}}{\partial \tau_{n,n+1}};$$

avec $\tau = \sum_0^n{}_i\, \tau_{i,i+1}$ on a $n + 2$ relations pour les $n + 2$ variables auxiliaires $\tau_{i,i+1}$. Il serait en outre utile de connaître la dépendance des $\vec{\zeta}_i$ en fonction de $\vec{q}, \vec{q}_0$, τ et d'un paramètre indiquant le nombre de réflexions. Bien qu'on ait la définition

$$\left(\vec{p}\,(\vec{\zeta}_i), \vec{k}(\vec{\zeta}_i)\right) = 0, \text{ avec } \vec{p} = \frac{\partial S}{\partial \vec{\zeta}_i}$$

cette détermination est malaisée, même en spécialisant les champs de forces. Si $2\,k$ est le degré d'un polynome pris comme potentiel, on n'a d'immédiat que la relation qualitative, valable asymptotiquement

$$\left|\vec{\zeta}_i\right| < \lambda_i \sim \left(\frac{1}{T_i}\right)^{1/(k-1)}$$

où T_i est lui-même fonction de $\vec{q}$, $\vec{q}_0$ et τ. Cette connaissance explicite des $\vec{\zeta}_i$ ne sera heureusement pas nécessaire par la suite, on conservera donc ces points de réflexion tels quels. L'essentiel est que ces points se trouvent à l'intérieur du domaine de convergence permettant le calcul de $S_{i,i+1}$ par une série du type (5), soit:

$$S_{i,i+1} = \sum_0^\infty{}_\mu\, \sigma_{2\mu-1}^{i,i+1}\, \tau_{i,i+1}^{2\mu-1}$$

$$\sigma_{-1}^{i,i+1} = \frac{m}{2}\,\frac{(\vec{\zeta}_{i+1} - \vec{\zeta}_i)^2}{\tau_{i,i+1}}$$

$$\sigma_1^{i,i+1} = -\int_0^1 du\, V\left(\vec{\zeta}_i + \left(\vec{\zeta}_{i+1} - \vec{\zeta}_i\right) u\right)$$

etc. Eliminons, comme prévu, les $\tau_{i,i+1}$, ceci par approximations

successives en se basant sur l'inégalité $\tau_{i,\,i+1} < \tau$. Posons pour simplifier l'écriture

$$\vec{v}_i = \vec{\zeta}_{i+1} - \vec{\zeta}_i \qquad v_i = \left|\vec{\zeta}_{i+1} - \vec{\zeta}_i\right|$$

il vient en première approximation de τ

$$\tau_{i,\,i+1} = \tau \frac{v_i}{\Sigma v_i}$$

et en seconde approximation

$$\tau_{i,\,i+1} = \tau\, v_i \left(1 + \frac{2}{m}\tau^2 \frac{\Phi_i}{(\Sigma v_k)^2}\right)^{1/2} \Big/ \Sigma_k v_k \left(1 + \frac{2}{m}\tau^2 \frac{\Phi_k}{(\Sigma v_k)^2}\right)^{1/2}$$

développons les $\sqrt{}$ et la fraction, on a

$$\tau_{i,\,i+1} = \tau \frac{v_i}{\Sigma_k v_k} \cdot \left\{1 + \frac{\tau^2}{m\,(\Sigma v_k)^2}\left[\Phi_i - \frac{\Sigma_k v_k \Phi_k}{\Sigma_k v_k}\right] + 0\,(\tau^5) \cdots\right.$$

où l'on a défini

$$\Phi_i \equiv \int_0^1 du\, V\left(\vec{\zeta}_i + \left(\vec{\zeta}_{i+1} - \vec{\zeta}_i\right) u\right).$$

On a besoin de l'inverse

$$\frac{1}{\tau_{i,\,i+1}} = \frac{\Sigma_k v_k}{\tau\;\; v_i}\left\{1 - \frac{\tau^2}{m\,(\Sigma_k v_k)^2}\left[\Phi_i - \frac{\Sigma_k v_k \Phi_k}{\Sigma_k v_k}\right]\right\} + 0\,(\tau^3) \cdots$$

que l'on introduit dans la série $S_{i,\,i+1}$

$$S_{i,\,i+1} = \frac{m}{2}\frac{v_i^{\,2}}{\tau_{i,\,i+1}} - \tau_{i,\,i+1}\,\Phi_i - \tau^3 \cdots$$

$$= \frac{m}{2}\frac{v_i\,\Sigma_k v_k}{\tau} - \frac{1}{2}\tau\frac{v_i}{\Sigma_k v_k}\left[\Phi_i - \frac{\Sigma_k v_k \Phi_k}{\Sigma_k v_k}\right] - \tau\frac{v_i\,\Phi_i}{\Sigma_k v_k} + \cdots$$

$$S_{i,\,i+1} = \frac{m}{2}\frac{v_i\,\Sigma_k v_k}{\tau} - \tau\frac{v_i}{\Sigma v_k}\left[\frac{3}{2}\Phi_i - \frac{1}{2}\frac{\Sigma_k v_k \Phi_k}{\Sigma v_k}\right] + 0(\tau^3) \cdots.$$

L'action S_n est alors

$$S_n = \sum_0^n{}_i\, S_{i,\,i+1} = \frac{m}{2}\frac{(\Sigma v_i)^2}{\tau} - \tau\frac{\Sigma_i v_i \Phi_i}{\Sigma_i v_i} + \tau^3 + \cdots$$

soit, en réintroduisant les définitions de Φ_i et v_i:

$$S_n\,(\vec{q}_0 \cdots \vec{\zeta}_i \cdots \vec{q}, \tau) = \frac{m}{2}\frac{\left(\sum_0^n{}_i \left|\vec{\zeta}_{i+1} - \vec{\zeta}_i\right|\right)^2}{\tau} - \tau\frac{\sum_0^n{}_i \left|\vec{\zeta}_{i+1} - \vec{\zeta}_i\right| \int_0^1 du\, V(u)}{\sum_0^n{}_i \left|\vec{\zeta}_{i+1} - \vec{\zeta}_i\right|} +$$

$$+ \tau^3 \cdots + \cdots \qquad (10)$$

Par analogie avec la série (5) on est tenté d'écrire S_n sous la forme

$$S_n = \sum_0^\infty{}_\mu \, \sigma_{2\mu-1}^{(n)} (\vec{q}_0 \cdots \vec{\zeta}_i \cdots \vec{q}) \, \tau^{2\mu-1}$$

et l'on pourrait chercher la construction générale des $\sigma_{2\mu-1}^{(n)}$. N'ayant pas besoin par la suite des approximations supérieures, nous ne pousserons pas plus loin ce développement. Pour finir, mettons en évidence une propriété de $\sigma_{-1}^{(n)}$, propriété que nous utiliserons plus bas; en posant $\sigma_{-1}^{(n)} = \frac{1}{2} \cdot m \cdot F^2$, on a:

$$F = \sum_0^n{}_i \, | \, \vec{\zeta}_{i+1} - \vec{\zeta}_i \, | > 0$$

dans tout l'espace de $\vec{q}$ et $\vec{q}_0$. En effet, F n'est nul que si $\vec{q}_0 = \vec{\zeta}_1 = \vec{\zeta}_2 = \ldots \vec{\zeta}_n = \vec{q}$. Ce cas très particulier correspond à une immobilité complète de la particule, ce qui peut se réaliser si la particule se trouve en une des singularités mêmes du potentiel, possibilité que nous avons exclue.

Avec les formules établies dans ce § (5, 8, 9 et 10) nous sommes maintenant en mesure de construire les fonctions K_c définis par (1), de préciser quantitativement le sens qu'il faut attribuer à «τ petit» et d'évaluer les contributions des noyaux au membre de droite de l'équation (3); ainsi nous répondre à la question posée dans l'introduction et précisée à la fin du § II.1. C'est le programme du prochain §.

III. Effets quantiques des forces de réflexion.

A chaque action S_n on associe un noyau K_c^n défini par la relation

$$K_c^n = \left(\frac{1}{2\pi i \hbar}\right)^{N/2} D_n^{1/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_n\right\}. \tag{1.n}$$

Pour mesurer l'effet des phénomènes de réflexion, la somme de ces noyaux est à substituer au noyau K_c de l'équation (3) et l'on a à évaluer

$$I(\vec{q}, \tau) = \int d^N q_0 \sum_0^\infty{}_n \, K_c^n (\vec{q}, \vec{q}_0, \tau) \, \psi(\vec{q}_0, 0) \tag{11}$$

dans le sens de contributions ordonnées par rapport aux puissances croissantes de τ. Ce développement permettra de conclure dans quelle mesure les noyaux construits semi-classiquement se rapprochent des noyaux exacts.

Le noyau K_c^0. C'est celui qui est associé à l'action S_0 de la trajectoire directe. Pour de petits intervalles $\vec{q} - \vec{q}_0$ (domaine dont l'im-

portance se révélera par la suite), on peut construire ce noyau d'après (5) et (8):

$$S_0 = \sum_0^\infty{}_n\, \sigma_{2n-1}\, \tau^{2n-1} = \frac{m}{2}\,\frac{(\vec{q}-\vec{q}_0)^2}{\tau} - S'$$

où l'on définit

$$S' = -\sum_1^\infty{}_n\, \sigma_{2n-1}\, \tau^{2n-1};$$

formons D_0

$$D_0 = (-1)^N \text{ dét. } \left\| \frac{\partial^2 S_0}{\partial q_{0i}\, \partial q_k} \right\|$$

avec

$$\frac{\partial^2 S_0}{\partial q_{0i}\, \partial q_k} = -\frac{m}{\tau}\,\delta_{ik} - S'_{ik} \qquad S'_{ik} \equiv \frac{\partial^2 S'}{\partial q_{0i}\, \partial q_k}$$

il vient

$$||D_0| = (-1)^N \cdot \left\| \begin{matrix} -\frac{m}{\tau} - S'_{11} & \cdots & -S'_{1N} \\ \vdots & & \\ -S'_{N1} & \cdots & -\frac{m}{\tau} - S'_{NN} \end{matrix} \right\| =$$

$$= + \left(\frac{m}{\tau}\right)^N \left\| \begin{matrix} 1 + \frac{\tau}{m} S'_{11} & \cdots & \frac{\tau}{m} S'_{1N} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\tau}{m} S'_{N1} & \cdots & 1 + \frac{\tau}{m} S'_{NN} \end{matrix} \right\|.$$

Evaluons ce déterminant par rapport aux puissances de τ, il vient:

$$D_0 = + \left(\frac{m}{\tau}\right)^N \left\{ 1 + \frac{\tau}{m} \sum_1^N{}_i\, S'_{ii} + \left(\frac{\tau}{m}\right)^2 \sum_{i,k}^{\binom{N}{2}} \text{dét.} \left\| \begin{matrix} S'_{ii} & S'_{ik} \\ S'_{ki} & S'_{kk} \end{matrix} \right\| + \right.$$

$$\left. + \left(\frac{\tau}{m}\right)^3 \sum_{i,k,l}^{\binom{N}{3}} \text{dét.} \left\| \begin{matrix} S'_{ii} & S'_{ik} & S'_{il} \\ S'_{ki} & S'_{kk} & S'_{kl} \\ S'_{li} & S'_{lk} & S'_{ll} \end{matrix} \right\| + \cdots + \left(\frac{\tau}{m}\right)^N \text{dét.} \left\| \begin{matrix} S'_{11} & \cdots & S'_{1N} \\ \vdots & & \\ S'_{N1} & \cdots & S'_{NN} \end{matrix} \right\| \right\}$$

$$\equiv \left(\frac{m}{\tau}\right)^N \left\{ 1 + \frac{\tau}{m} F(q, q_0, \tau) \right\}$$

où l'on a posé

$$F = \sum{}_i S'_{ii} + \frac{\tau}{m} \sum_{ik}^{\binom{N}{2}} \text{dét.} \left\| \begin{matrix} \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{matrix} \right\| + \cdots \left(\frac{\tau}{m}\right)^{N-1}_{\text{dét.}} \left\| \begin{matrix} \cdots\cdots \\ \vdots \\ \cdots\cdots \end{matrix} \right\|,$$

ceci introduit dans la définition de K_c^0, on a:

$$\underline{K_c^0 = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}\right)^{N/2} \cdot \left\{1 + \frac{\tau}{m} F\right\}^{1/2} \exp. \left\{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m x^2}{2\tau} - S'\right)\right\}}. \qquad (1)'$$

Détermination de τ_1. Sous I nous avons introduit qualitativement la notion de «τ petit», c'est-à-dire $\tau \ll \tau_1$, τ_1 devant donner une mesure de l'inhomogénéité des forces et fixer une limite supérieure au choix de la variable τ, limite au-dessus de laquelle K_c n'est plus une bonne approximation de K exact, autrement dit son emploi n'est plus justifié. La connaissance explicite de K_c^0 nous permet de déterminer τ_1. On sait en effet que K_c^0 satisfait l'équation de SCHROEDINGER jusqu'aux termes en h^2:

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \tau} + \boldsymbol{H}\right) K_c^0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{D_0}}{\sqrt{D_0}} \cdot K_c^0 \equiv -U_0 \cdot K_c^0 \qquad (2)$$

U_0, «potentiel quantique» est en général fonction de $\vec{q}$, $\vec{q}_0$ et τ; il n'est nul que dans quelques cas particuliers, ceux où K_c est déjà le noyau exact K (voir exs. sous I).

Nous disons que l'emploi de K_c est justifié dans la mesure où

$$\underline{\tau \cdot U_0 \ll S'}$$

c'est-à-dire dans la mesure où l'action due aux «forces quantiques» est plus petite que l'action due aux forces classiques, cette dernière étant la différence entre l'action d'une particule libre

$$S_{\text{p. l.}} = m\,\frac{(\vec{q} - \vec{q}_0)^2}{2\tau}$$

et l'action générale donnée par (5). Considérant $\vec{q}$ et $\vec{q}_0$ fixés, cette inégalité nous fournit une condition pour τ. Calculons U_0:

$$D_0 = \left(\frac{m}{\tau}\right)^N \left(1 + \frac{\tau}{m} F\right) \qquad \frac{1}{D_0}\frac{\partial D_0}{\partial \vec{q}} \equiv \frac{\vec{\nabla} D_0}{D_0} = \frac{\tau/m\,\vec{\nabla} F}{1 + \tau/m \cdot F}$$

$$\frac{\Delta\sqrt{D_0}}{\sqrt{D_0}} = -\frac{1}{4}\left(\frac{\vec{\nabla} D_0}{D_0}\right)^2 + \frac{1}{2}\frac{\Delta D_0}{D_0} = -\frac{1}{4}\left(\frac{\tau/m \cdot \vec{\nabla} F}{1 + \tau/m \cdot F}\right)^2 + \frac{1}{2}\frac{\tau/m \cdot \Delta F}{1 + \tau/m \cdot F}$$

$$U_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{D_0}}{\sqrt{D_0}} = \hbar^2 \frac{\tau}{(2m)^2}\,\Delta F \cdot \frac{\{1 + \tau/m\,[F - 1/2\,(\vec{\nabla} F)^2/\Delta F]\}}{(1 + \tau/m\,F)^2}$$

$$\tau\, U_0 = \left(\frac{\hbar\tau}{2m}\right)^2 \Delta F \cdot \frac{\{1 + \tau/m\,[F - 1/2\,(\vec{\nabla} F)^2/\Delta F]\}}{(1 + \tau/m\,F)^2}$$

en divisant par $\Delta F \cdot \frac{\{\cdot\cdot\}}{(\ )^2}$, la condition devient:

$$\left(\frac{\hbar\tau}{2m}\right)^2 \ll \frac{S'}{\Delta F}\left\{\frac{(1 + \tau/m \cdot F)^2}{1 + \tau/m\,[F - 1/2\,(\vec{\nabla} F)^2/\Delta F]}\right\}.$$

Nous sommes naturellement conduit à définir la limite supérieure de τ comme étant la solution de l'égalité

$$\left(\frac{\hbar\tau}{2m}\right)^2 = \frac{S'}{\Delta F}\left\{\frac{(1+\tau/m\cdot F)^2}{1+\tau/m\,[F-1/2\,(\vec{\nabla}F)^2/\Delta F]}\right\}$$

correspondant à la première intersection entre la parabole (membre de gauche) et la fonction du membre de droite qui est croissante en τ et > 0 pour $\tau = 0$. Le choix de τ_1 étant dans une certaine marge arbitraire, il est commode d'adopter pour cette valeur la première approximation de la solution exacte, soit

$$\tau_1 = \frac{2m}{\hbar}\left(\frac{S'}{\Delta F}\left\{\frac{\ldots}{\ldots}\right\}\right)^{1/2}_{/\tau=0};$$

l'erreur étant faite par défaut, ce choix est convenable. Introduisons maintenant les définitions de S' et F, il vient:

$$\underline{\tau_1 = 2\frac{m}{\hbar}\lambda^2} \tag{12}$$

où

$$\underline{\lambda^2 = \left(\frac{\sigma_1}{\Delta\cdot(\vec{V}_0, \vec{V})\,\sigma_1}\right)^{1/2}} \quad \text{et} \quad \sigma_1 = -\int_0^1 \mathrm{d}u \quad V(\vec{q}_0 + \vec{x}\,u).$$

Si $V(x)$ est proportionnel à x ou x^2, le potentiel quantique U_0 étant nul, τ n'est pas limité supérieurement, τ_1 est donc infini ce que l'on peut vérifier immédiatement avec la formule (12). λ est directement proportionnel à l'inhomogénéité des forces; prenons par exemple $V(x)$ proportionnel à $\exp(-kx)$ ou $\sin(kx)$, l'opérateur $\Delta(\vec{V}_0, \vec{V})$ est alors essentiellement proportionnel à k^4 et $\lambda \cong 1/k$. τ_1 ainsi défini jouit bien des propriétés désirées: il est une mesure de l'inhomogénéité des forces et il est d'autant plus petit que celle-ci est plus grande. C'est dans le sens indiqué par la formule (12) qu'il faut entendre «τ petit», soit

$$\underline{\tau \ll 2\frac{m}{\hbar}\lambda^2.}$$

Ceci précisé, revenons au calcul des contributions des noyaux à l'intégrale (11).

Contributions des noyaux. La coordonnée $\vec{q}_0$ étant variable d'intégration, il faut connaître le comportement de D et S en fonction de $\vec{q}_0$ non seulement dans le voisinage de $\vec{q}$ (équation 1'), mais dans tout le domaine d'intégration. Nous nous bornerons essentiellement à décrire l'allure de S et D en fonction de $\vec{q}_0$ et à indiquer comment on évalue les contributions des noyaux. Pour fixer les idées, nous traiterons ensuite un cas simple dont le résultat pourra être généralisé progressivement.

Considérons les cas où les forces sont attractives et dérivent d'un potentiel $V = V(\vec{q}_0)$, la généralisation au cas de potentiels vectoriels étant renvoyée à la fin de ce paragraphe. On pourra tirer des informations intéressantes concernant D et S si l'on considère d'abord la fonction donnant l'énergie du système $E = -\partial S/\partial\tau = E(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau)$. Regardant l'énergie comme $(N+1)$' dimension ajoutée au N de l'espace $\vec{q}_0$, elle est représentée par une surface que nous appellerons surface-E par la suite. Si, dans ce même espace, on représente la surface potentiel $E = V(\vec{q}_0)$ (surface-V), cette dernière enveloppera ou, si l'on veut, contiendra la surface-E. En inversant $E = E(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau)$ on peut écrire $\vec{q}_0 = \vec{q}_0(\vec{q}, E, \tau)$ ou encore $\tau = \tau(\vec{q}, \vec{q}_0, E)$. La dernière façon d'écrire conduit à interpréter la surface-E comme surface des énergies et positions initiales $\vec{q}_0$, compatibles avec la condition $\tau =$ const. donnée, la position finale $\vec{q}$ étant supposée fixe.

Où la surface-E est tangente à la surface-V, la vitesse initiale $-\partial S/\partial\vec{q}_0$ est nulle; le point de contact est donc un point d'extremum pour l'action S. Comme S se trouve à l'exposant de la fonction à intégrer, ces points d'extremum jouent un rôle essentiel. Nous verrons qu'en l'un d'eux, S est minimum et qu'aux autres, S est maximum. Dans le cas de forces anharmoniques, ces derniers peuvent exister en nombre infini; ce sont des points du type λ dont nous avons parlé sous II; ils jouissent de la propriété particulière de tendre vers l'infini quand $\tau \to 0$. Pour déterminer le caractère de l'extremum de S, il convient de calculer

$$\left(\frac{\partial^2 S}{\partial q_{0k}\,\partial q_{0i}}\right)_\tau \quad \text{pour} \quad \frac{\partial S}{\partial q_{0i}} = 0 \qquad (i = 1 \ldots N),$$

étant sous-entendu que seuls les points où S est extremum absolu (c'est-à-dire relativement à toutes les composantes q_{0i}) nous intéressent. Ces secondes dérivées partielles peuvent s'obtenir comme suit: soit $\vec{q}_0$ une position d'extremum, pour un tel point $\tau = T(\vec{q}, \vec{q}_0)$; pour tout autre $\vec{q}_0$ on peut poser: $\tau = T(\vec{q}, \vec{q}_0) + \tau_1$. Nous nous intéressons à $(\partial^2 S/\partial q_{0i}\,\partial q_{0k})_\tau$ pour $\tau_1 = 0$; cette valeur étant un choix particulier de $\tau_1 =$ const., il est indiqué de changer de variable et de poser après la différentiation $\tau_1 = 0$. On a:

$$\left(\frac{\partial\cdot}{\partial\vec{q}_0}\right)_{\tau_1} = \left(\frac{\partial\cdot}{\partial\vec{q}_0}\right)_\tau + \left(\frac{\partial\tau}{\partial\vec{q}_0}\right)_{\tau_1} \cdot \frac{\partial\cdot}{\partial\tau}$$

$$= \left(\frac{\partial\cdot}{\partial\vec{q}_0}\right)_\tau + \left(\frac{\partial T}{\partial\vec{q}_0}\right) \cdot \frac{\partial\cdot}{\partial\tau}$$

d'où

$$\left(\frac{\partial\cdot}{\partial\vec{q}_0}\right)_\tau = \left(\frac{\partial\cdot}{\partial\vec{q}_0}\right)_{\tau_1} - \frac{\partial T}{\partial\vec{q}_0} \cdot \frac{\partial\cdot}{\partial\tau}$$

et de même pour $(\partial/\partial\vec{q})\tau$. Si l'on applique cette opération à S que l'on peut poser $= S_0(\vec{q}, \vec{q}_0) + S_1(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau_1)$, on trouve:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \vec{q}_0}\right)_{\tau/\tau_1=0} = 0 = \frac{\partial S_0}{\partial \vec{q}_0} - \frac{\partial T}{\partial \vec{q}_0} \cdot \frac{\partial S_1}{\partial \tau_1}$$

avec

$$\frac{\partial S_1}{\partial \tau_1} = \frac{\partial S}{\partial \tau} = -V(\vec{q}_0) \text{ pour } \tau_1 = 0$$

il vient

$$\frac{\partial S_0}{\partial \vec{q}_0} = -\frac{\partial T}{\partial \vec{q}_0} \cdot V(\vec{q}_0).$$

L'opération $(\partial/\partial q_{0k})_\tau$ appliquée maintenant à $\partial S/\partial q_{0i}$ donne, pour $\tau_1 = 0$, la seconde dérivée cherchée:

$$\left(\frac{\partial^2 S}{\partial q_{0k}\,\partial q_{0i}}\right)_{\tau/\tau_1=0} = \frac{\partial T}{\partial q_{0k}} \cdot \frac{\partial V}{\partial q_{0i}}.$$

Cette équation suppose $T = T(\vec{q}, \vec{q}_0)$ connu. En l'appliquant au cas traité plus bas, on trouvera que cette seconde dérivée est négative (S max.) pour les points du type λ. Quant au point, que nous appellerons $\vec{\bar{q}}_0$, où S est minimum, c'est le seul qui demeure dans le cas de forces harmoniques ou constantes, comme l'indique l'exemple suivant:

Soit $V = 1/2\, m\omega^2\, \vec{q}_0^2$; la surface-$V$ est un paraboloïde et la surface-E (voir exemple sous I)

$$E = -\frac{\partial S}{\partial \tau} = \frac{m\omega^2}{2} \frac{\vec{q}^2 + \vec{q}_0^2 - 2(\vec{q}, \vec{q}_0)\cos\omega\tau}{\sin^2\omega\tau}$$

l'est aussi. Ces deux surfaces ont un seul point commun (dans le fini) en $\vec{q}_0 = \vec{\bar{q}}_0$, solution de $\partial S/\partial\vec{q}_0 = 0$ pour lequel on trouve aisément

$$\vec{\bar{q}}_0 = \vec{q} \cdot \frac{1}{\cos\omega\tau}$$

et

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q_{0i}\,\partial q_{0k}} = +\,\delta_{ik} \frac{m\omega}{\operatorname{tg}\omega\tau}.$$

Remarquons que $\vec{\bar{q}}_0 \big/_{\vec{q}\to 0} \to 0$ et que $\vec{\bar{q}}_0 \big/_{\tau\to 0} \to \vec{q}$; pour de petits τ, on a $\vec{\bar{q}}_0 \cong q(1+\frac{1}{2}\,\omega^2\tau^2) = q + (\tau^2/2m)\,(\partial V/\partial\vec{q})$, résultats que l'on trouve en résolvant $\partial S/\partial\vec{q}_0 = 0$ par rapport à $\vec{q}_0$ pour de petits τ en utilisant la série (5) donnant S pour un potentiel quelconque. Mentionnons encore le fait que la surface-E est minimum en $\vec{q}_0 = \vec{\boldsymbol{q}}_0$ (solution de $\partial S/\partial\vec{q} = 0$) pour lequel on trouve

$$\vec{\boldsymbol{q}}_0 = \vec{q}\cos\omega\tau \qquad -\frac{\partial S}{\partial \tau}\Big/_{\vec{q}_0 = \vec{\boldsymbol{q}}_0} = V(\vec{q}).$$

Si $V = V_n(\vec{q}_0)$ (par exemple Cq_0^n, $C > 0$, $q_0 = |\vec{q}_0|$, $n > 2$ et pair), la surface-V est un paraboloïde d'ordre n mais la surface-E se transforme entièrement. Rappelons en effet que pour un certain $\vec{q}_0$ donné, une infinité de trajectoires, caractérisées par leur nombre de points de réflexion, conduisent de cette position initiale à la position finale donnée dans le temps τ. Ces trajectoires sont situées sur des «niveaux d'énergie» croissant avec le nombre des points de réflexion. Considérant la surface-E résolue par rapport à $\vec{q}_0$, cette fonction manifeste une certaine periodicité en fonction de E, car $\vec{q}_0(E_0, \vec{q}, \tau) = \vec{q}_0(E_1, \vec{q}, t) = \ldots \vec{q}_0(E_n, \vec{q}, \tau) \ldots, E_1 .. E_n$ étant les énergies des trajectoires $1\,x .. n\,x$ réfléchies. En variant E de façon continue, on voit donc que $\vec{q}_0$ oscille, mais en restant toujours intérieure à la fonction inverse de V

$$\vec{q}_0\,(q, E, \tau) \subset \vec{q}_0(V)_{/V=E},$$

l'égalité ayant précisément lieu pour les points de contact $\vec{\bar{q}}_0$, $\vec{\lambda}$ où S est extremum. $\vec{q}_0$ étant continue et oscillante, il existe une série de lieux géométriques caractérisés par l'équation

$$\left(\frac{\partial \vec{q}_0}{\partial E}\right)_\tau = 0\,.$$

Cet ensemble de lieux délimite des portions de la surface-E et l'on se rend compte que tous les niveaux d'énergie associés aux trajectoires possédant le même nombre de points de réflexion sont situés dans une de ces portions. Entre le point $(\vec{q}_0, E_{\min} = V(\vec{q}))$ et le premier lieu $(\partial\vec{q}_0/\partial E)_\tau^0 = 0$, on a le domaine correspondant aux trajectoires dites directes (les plus «économiques»). Le lieu $(\partial\vec{q}_0/\partial E)_\tau^0 = 0$ représente celui des amplitudes maxima que la position initiale $\vec{q}_0$ est susceptible d'admettre, afin qu'un mouvement direct jusqu'en $\vec{q}$ soit réalisé dans le temps τ. La projection de ce lieu dans l'espace $\vec{q}_0$ est représenté par une certaine surface $F = F_0$ enfermant un volume Ω_0 où l'action $S_0(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau)$ sera définie. En dehors de Ω_0, S_0 n'existe pas. Les énergies des trajectoires $1\,x$ réfléchies se situent entre le premier lieu $(\partial\vec{q}_0/\partial E)_\tau^0 = 0$ et le second $(\partial\vec{q}_0/\partial E)_\tau^1 = 0$. La projection de $(\partial\vec{q}_0/\partial E)_\tau^1 = 0$ dans l'espace $\vec{q}_0$ est représentée par une surface F_1 enfermant un volume Ω_1 où $S_1(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau)$ sera définie, et ainsi de suite.

Nous n'avons encore rien dit de $D(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau)$. Formé avec le déterminant dont les éléments sont $(\partial^2 S/\partial q_k \partial q_{0\,i})_\tau$, on peut calculer ces derniers aux points d'extremum avec la même technique que $\partial^2 S/\partial q_{0\,k} \partial q_{0\,i}$; on trouve:

$$\left(\frac{\partial^2 S}{\partial q_k\, \partial q_{0\,i}}\right)_{\tau/\tau_1 = 0} = + \frac{\partial T}{\partial q_k} \frac{\partial V}{\partial q_{0\,i}}\,.$$

Nous allons montrer que D, qui est régulier dans le domaine Ω_0, est singulier à la surface F_0. En effet, dérivons l'équation d'HAMILTON-JACOBI $\partial S/\partial\tau + 1/2\, m\, (\partial S/\partial\vec{q})^2 + V(\vec{q}) = 0$ par rapport à q_{0k}; on a:

$$\frac{\partial}{\partial q_{0k}} \cdot \frac{\partial S}{\partial \tau} + \frac{1}{m} \sum_i \frac{\partial S}{\partial q_i} \frac{\partial^2 S}{\partial q_i\, \partial q_{0k}} = 0$$

avec

$$\frac{\partial S}{\partial \tau} = -E, \quad -\frac{\partial q_{0k}}{\partial E} = \frac{\partial q_{0k}}{\partial(\partial S/\partial \tau)} = \frac{1}{\partial^2 S/\partial q_{0k}\, \partial \tau}$$

il vient

$$\frac{1}{(\partial q_{0k}/\partial E)_\tau} + \frac{1}{m} \sum_i \frac{\partial S}{\partial q_i} \frac{\partial^2 S}{\partial q_i\, \partial q_{0k}} = 0$$

d'où $\frac{1}{m} \sum_i \frac{\partial S}{\partial q_i} \frac{\partial S^2}{\partial q_i\, \partial q_{0k}} = \infty$ pour $\frac{\partial q_{0k}}{\partial E} = 0$. Puisque $\frac{\partial S}{\partial q_i}$ est fini, un des éléments $\frac{\partial^2 S}{\partial q_i\, \partial q_{0k}}$ au moins est infini, ce qui prouve notre proposition. Ce même phénomène se répète pour D_n à la surface F_n de son domaine de définition Ω_n.

Ces faits nous amènent à définir chaque noyau $K_c^n = \text{Cte}\, \sqrt{D_n} \exp i/\hbar\, S_n$ dans un domaine Ω_n limité par une surface F_n, projection dans l'espace $\vec{q}_0$ du n^{me} lieu $(\partial \vec{q}_0/\partial E)_\tau^n = 0$, et à interpréter l'équation fondamentale (11) de la façon suivante:

$$I(\vec{q}, \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} d^N q_0 \sum_0^\infty{}_n K_c^n \psi = \sum_0^\infty{}_n \int_{\Omega_n} d^N q_0\, K_c^n \psi. \tag{11.1}$$

Pour évaluer l'effet quantique des forces de réflexion, nous traiterons plus bas un cas particulier en détail, le plus simple qui soit, puis, en généralisant progressivement, nous montrerons que $I(\vec{q}, \tau)$ est donné par la formule suivante

$$\begin{aligned} I(\vec{q}, \tau) = {} & \exp \frac{i}{\hbar} S(\vec{q}, \vec{\bar{q}}_0, \tau) \cdot \left\{ \psi(\vec{\bar{q}}_0) - \frac{\hbar \tau}{2\, i\, m} \psi''(\vec{\bar{q}}_0) + 0(\tau^2) \right\} \\ & + 0\left(\tau^{3/2} \exp \frac{i}{\hbar} \frac{m\, \vec{\varepsilon}^2}{2\, \tau} \cdot \psi(0) \right) + \sum_{\lambda_n} \exp \frac{i}{\hbar} S(\vec{q}, \vec{\lambda}_n, \tau) \cdot \\ & \cdot\, \psi(\vec{\lambda}_n) \big(1 + f(\lambda_n)\big) \end{aligned} \tag{11.2}$$

où $\sum_{\lambda n}$ représente une sommation discrète et/ou continue sur le spectre des points d'extremum $\vec{\lambda}_n$.

Comme exemple nous allons traiter le cas très instructif d'une dimension, avec $V = C \cdot q_0^n$, $C > 0$, $n > 2$ et pair et poser pour simplifier au maximum $q = 0$. De ce fait on a aussi $\boldsymbol{q}_0 = \bar{q}_0 = 0$, les minimas de la surface-E et de l'action S coïncident à l'origine. Cette simplification n'a pas d'autre conséquence que de permettre des

calculs aussi exacts que possible et les généralisations s'avéreront aisées. Nous allons donner les valeurs de S et D pour toutes les classes de trajectoires et pour les points q_0 importants tels que $q_0 = \overline{q}_0 = 0$ (S min.), $q_0 = \lambda$ (S max.) et $q_0 = Q_0$ (D infini); ceci sans entrer dans le détail des calculs, ce qui nous entraînerait trop loin.

En ce qui concerne K_c^0, on a:

pour $q_0 \cong 0$ (voir équation 1′) $\quad S_0(0, q_0, \tau) = \frac{m\, q_0^2}{2\,\tau} - \frac{C\, q_0^n}{n+1}\,\tau \cdots$

$$\tau\sigma = S' \text{ de } (1)' \qquad = \frac{m\, q_0^2}{2\,\tau}\left[1 - \tau^2\,\sigma\right]$$

$$\tau\Delta = \frac{F}{m} \text{ de } (1)' \qquad D_0(0, q_0, \tau) = \frac{m}{\tau}\left[1 + \tau^2\,\Delta\right];$$

pour $q_0 = \pm\,\lambda_0$, λ_0 étant donné grâce à

$$T = \sqrt{\frac{m}{2}} \int_0^{\lambda} \frac{dx}{\sqrt{C\,\lambda^n - c\,x^n}} = \sqrt{\frac{m}{2\,C}}\,\lambda^{1-n/2}\,\alpha_n$$

$$\alpha_n = \int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{1-t^n}} = \frac{\Gamma(1+1/n/)\,\Gamma(1/2)}{\Gamma(1/2+1/n)}$$

avec $T = \tau$

$$\lambda_0 = \left(\frac{\alpha_n \sqrt{m/2\,C}}{\tau}\right)^{\frac{2}{n-2}} \qquad E_0 = C\,\lambda_0^n$$

$$S_0(0, \lambda_0) = S_0 = \frac{n-2}{n+2}\,\alpha_n \sqrt{\frac{m\,C}{2}}\,\lambda_0^{\frac{n}{2}+1}$$

$$S_0'(0, \lambda_0) = 0$$

$$S_0''(0, \lambda_0) = S_0'' = -\,n\left(\frac{n}{2} - 1\right)\alpha_n^2\,\frac{m}{2\,\tau}$$

$$D_0(0, \lambda_0) = \frac{n\,\alpha_n}{2}\,\frac{m}{\tau}$$

et pour $q_0 \cong \lambda_0$

$$S(0, q_0, \tau) = S_0(0, \lambda_0) - \frac{1}{2}\,(q_0 - \lambda_0)^2\,\frac{m}{2\,\tau}\,n\left(\frac{n}{2} - 1\right)\alpha_n^2 + \cdots.$$

Pour le point $q_0 = Q_0$ solution de $(\partial q_0/\partial E)_\tau^0 = 0$, le calcul donne approximativement

$$Q_0 = \lambda_0\big(1 + \delta_0(n)\big) \qquad \delta_0(n) = 0\left(\frac{1}{n^2\,\alpha_n^2}\right),$$

et si l'on calcule D pour $q_0 = Q_0$, on trouve en partant de la formule

$$D = \sqrt{\frac{m}{2\,E}}\left(\frac{\partial E}{\partial q_0}\right)_\tau \text{ et en posant } q_0 = \lambda_0(1 + u):$$

$$D_0(0, u, \tau) = \frac{m}{\tau}\,\frac{\Delta_0(u)}{\sqrt{\delta_0 - u}}$$

où Δ_0 est une fonction régulière de u, et tend vers une constante quand u tend vers δ_0. C'est tout ce dont nous aurons besoin en ce qui concerne le noyau K_c^0.

En désignant par ν le nombre de réflexions (au lieu de n utilisé auparavant, ceci pour éviter toute confusion avec n actuellement degré du potentiel), on a

pour $q_0 = 0$, avec

$$T_\nu = \frac{1}{2\nu}\tau, \qquad \lambda_\nu = (2\nu)^{\frac{2}{n-2}} \lambda_0:$$

$$S_\nu(0,0,\tau) = (2\nu)^{\frac{2n}{n-2}} S_0$$

$$S'_\nu(0,0,\tau) = \pm\sqrt{2mC}\,\lambda_0^{\frac{n}{2}} (2\nu)^{\frac{n}{n-2}}$$

$$\left.\begin{aligned} S''_\nu(0,0,\tau) &= \frac{n}{n-2}\frac{m}{\tau} \\ D_\nu(0,0,\tau) &= \frac{n}{n-2}\frac{m}{\tau} \end{aligned}\right\} \text{ indépendant de } \nu! \quad \nu \neq 0$$

$$\neq D_0(0,0,\tau) = \frac{m}{\tau};$$

pour $q_0 = \pm\lambda_\nu$, avec

$$T_\nu = \frac{1}{2\nu+1}\tau, \qquad \lambda_\nu = (2\nu+1)^{\frac{2}{n-2}} \lambda_0:$$

$$S_\nu(0,\lambda_\nu) = (2\nu+1)^{\frac{2n}{n-2}} S_0$$

$$S'_\nu(0,\lambda_\nu) = 0$$

$$\begin{aligned} S''_\nu(0,\lambda_\nu) &= -n(n-2)\,\alpha_n^2 \frac{m}{4\tau}(2\nu+1)^2 \\ &= (2\nu+1)^2 S''_0(0,\lambda_0) \end{aligned}$$

$$D_\nu(0,\lambda_\nu) = (-1)^\nu (2\nu+1)\frac{n}{2}\alpha_n \frac{m}{\tau};$$

et pour $q_0 \cong Q_\nu$, en remarquant que

$$\lambda_\nu < Q_\nu < \lambda_{\nu+1} \qquad \text{soit} \qquad 1 < \frac{Q_\nu}{\lambda_\nu} < \left(1 + \frac{1}{2\nu+1}\right)^{\frac{2}{n-2}}$$

et avec

$$Q_\nu = \lambda_\nu(1+\delta_\nu)$$

$$q_0 = \lambda_\nu(1+u)$$

$$D\ (0,u,\tau) = (-1)^\nu \frac{m}{\tau}(2\nu+1)\frac{\Delta_\nu(u)}{\sqrt{\delta_\nu - u}}.$$

Il sera utile par la suite de connaître S dans le voisinage immédiat de son maximum en $q_0 = \lambda_\nu$:

$$S_\nu(0, q_0, \tau) = S_\nu(0, \lambda_\nu) + \frac{1}{2}(q_0 - \lambda_0)^2 S''_\nu(0, \lambda_\nu) + \cdots$$

avec $q_0 = \lambda_\nu(1 + u)$, u variable, on peut mettre S sous la forme

$$S_\nu(0, q_0, \tau) = \frac{a}{\chi_\nu} - \frac{1}{2} u^2 \frac{b}{\chi_\nu} + \cdots$$

où

$$a \equiv \frac{n-2}{n+2} \alpha_n^2 \frac{m}{\tau} \left(\alpha_n \sqrt{\frac{m}{2C}}\right)^{\frac{4}{n-2}} = \text{const.}$$

$$b \equiv \frac{n(n-2)}{2} \alpha_n^2 \frac{m}{2} \left(\alpha_n \sqrt{\frac{m}{2C}}\right)^{\frac{4}{n-2}} = \text{const.}$$

$$\chi_\nu^{-1} = (2\nu + 1)^{\frac{2n}{n-2}} \left(\frac{1}{\tau}\right)^{\frac{n+2}{n-2}}$$

$$= (2\nu + 1)^{\frac{2n}{n-2}} \cdot \chi_0^{-1}, \qquad \chi_0 \equiv \tau^{\frac{n+2}{n-2}}.$$

Les formules données ci-dessus permettent de construire les fonctions S, D et la surface-E qui se réduit à une courbe. Dans un plan (q_0, E), la courbe $q_0(E, \tau)$ s'inscrit dans la courbe $q_0 = (E/C)^{1/n}$, elle lui est tangente aux points 0, $\pm \lambda_\nu$, et a ses extrema aux points $\pm Q_\nu$. Dans un plan (S, q_0), S_0 croît comme une parabole pour de petits q_0, puis sa pente décroît; S_0 passe ensuite par un maximum en $q_0 = \pm \lambda_0$, puis décroît légèrement jusqu'en $q_0 = \pm Q_0$; au-delà de $|Q_0|$, S_0 n'est *plus* définie. A partir de $+Q_0$ une branche de S_1 commence avec une même valeur et une même tangente que S_0, puis augmente pour q_0 *décroissant*, passe par $S_1(0,0)$, puis atteint son maximum en $q_0 = -\lambda_1$ enfin décroît et est définie jusqu'en $q_0 = -Q_1$, d'où s'embranche l'action S_2 définie de $-Q_1$ à $+Q_2$; de même pour la seconde branche de S_1 qui est définie de $-Q_0$ à $+Q_1$ et ainsi de suite. Quant à D, son analyse montre que dans le plan (D, q_0), D_0 est symétrique par rapport à 0, positif, croît lentement jusqu'à $\pm \lambda_0$, puis de là tend vers l'infini comme $1/\sqrt{|q_0 - Q_0|}$; il y a ensuite changement de signe, D_1 est négatif, vient de $-\infty$ en $+Q_0$, croît pour q_0 décroissant, passe par un maximum (< 0), puis tend de nouveau vers $-\infty$ en $-Q_1$; il y a alors nouveau changement de signe et ainsi de suite. De même pour la seconde branche de D_1 également négative et qui est définie de $-Q_0$ à $+Q_1$. En désignant par (a, b) l'intervalle $a \leqq q_0 \leqq b$, et en posant $Q_\nu^{+,-} = \pm |Q_\nu|$,

on obtient le schéma suivant donnant les domaines de définition de S et D, donc aussi des noyaux:

$$\begin{array}{lll} & (Q_0^-, Q_0^+) & \to S_0,\ D_0,\ K_c^0 \\ \nu = 1, 2\ldots & (Q_{\nu-1}^-, Q_\nu^+) & \to S_\nu^+, D_\nu^+, K_c^{\nu+} \\ & (Q_\nu^-, Q_{\nu-1}^+) & \to S_\nu^-, D_\nu^-, K_c^{\nu-}. \end{array}$$

Remarquons que l'existence des singularités de la densité D a une conséquence importante en ce qui concerne les «potentiels quantiques» U_ν, qui pour $q_\nu \cong Q_0$ ont le comportement suivant:

$$U_\nu = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{D_\nu}}{\sqrt{D_\nu}} \sim \frac{1}{(Q_\nu - q_0)^2}.$$

Nous pouvons procéder maintenant à l'intégration de l'équation (11.1), où $\sum\limits_{\lambda_\nu} = \sum\limits_{+,-} \cdot \sum\limits_0^\infty{}_\nu$:

$$I(0,\tau) = \int\limits_{Q_0^-}^{Q_0^+} dq_0\, K_c^0 \psi + \sum_1^\infty{}_\nu \left[\int\limits_{Q_{\nu-1}^-}^{Q_\nu^+} K_c^{\nu+} + \int\limits_{Q_\nu^-}^{Q_{\nu-1}^+} K_c^{\nu-} \right] \psi(q_0)\, dq_0. \tag{11.3}$$

Contribution de K_c^0: étant donné le comportement de S_0 et D_0, il convient de séparer le domaine d'intégration comme suit:

$$I_0 = \int\limits_{-Q_0}^{+Q_0} dq_0 \sqrt{\frac{D_0}{2\pi i\hbar}} \exp\frac{i}{\hbar} S_0 \cdot \psi = \left(\int\limits_{-Q_0}^{-\varepsilon_2} + \int\limits_{-\varepsilon_2}^{-\varepsilon_1} + \int\limits_{-\varepsilon_1}^{+\varepsilon_1} + \int\limits_{+\varepsilon_1}^{+\varepsilon_2} + \int\limits_{+\varepsilon_2}^{+Q_0} \right) K_c^0 \psi\, dq_0$$
$$\equiv I_0^{-2} + I_0^{-1} + I_0^0 + I_0^{+1} + I_0^{+2}$$

où ε_1 est choisi aussi près de l'origine que l'on veut, mais indépendant de τ et ε_2 est choisi $= \lambda_0(1-\delta_0)$ par symétrie avec $Q_0 = \lambda_0 \cdot (1+\delta_0)$. Calculons d'abord I_0^0; dans le petit intervalle $2\varepsilon_1$, on a

$$S_0 = S_0(0,0,\tau) + \frac{m q_0^2}{2\tau}[1 - \tau^2\sigma]$$

$$D_0 = \frac{m}{\tau}(1 + \tau^2\Delta);$$

posons

$$q_0(1-\tau^2\sigma)^{1/2} \Big/_{-\varepsilon_1}^{+\varepsilon_1} = W \Big/_{-\varepsilon_1\sqrt{\ }}^{+\varepsilon_1\sqrt{\ }}$$

$$dq_0 = \frac{dw}{(1-\tau^2\sigma)^{1/2} - \frac{1}{2}\tau^2 W(\sigma'/(1-\tau^2\sigma)^{1/2})}$$

afin de simplifier l'évaluation de I_0^0, évaluons

$$\Big/ \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}} \int_{-\varepsilon_1\sqrt{\ }}^{+\varepsilon_1\sqrt{\ }} dw\, e^{\frac{imW^2}{2\hbar\tau}} \left[\frac{(1+\tau^2\Delta)^{1/2}}{(1-\tau^2\sigma)^{1/2}-\frac{1}{2}\tau^2 W(\sigma'/(1-\tau^2\sigma)^{1/2})}-1\right]\psi(W/\sqrt{\ })\Big/$$

$$\leqslant 2\,\varepsilon_1 \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}} \cdot \mathrm{Max}/(\Delta+\sigma)\,\psi/\cdot\,\tau^2 = 0\cdot(\varepsilon_1\cdot\tau^{3/2}\cdot M)$$

d'où

$$I_0^0 = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_0(0,0,\tau)\right\}\cdot \int_{-\varepsilon_1}^{+\varepsilon_1} dw\, e^{\frac{imW^2}{2\hbar\tau}}\,\psi(W) + \varepsilon_1\, 0\,(\tau^{3/2})\cdot M.$$

Afin d'obtenir par intégration partielle la compensation des termes de la forme $\sqrt{\tau}\,\exp i\,\varepsilon_1^2/\tau\cdot\psi(0)$, il convient de poser

$$\psi(W) = \psi(0) + (\psi(W) - \psi(0))$$

et avec $2\,\hbar\tau/m \equiv \vartheta$, on a

$$\sqrt{\frac{1}{\pi i\vartheta}} \int_{-\varepsilon_1}^{+\varepsilon_1} dw\, e^{\frac{iW^2}{\vartheta}}\,\psi(0) = \psi(0)\left[1+2\sqrt{\frac{1}{\pi i\vartheta}}\cdot\frac{\vartheta}{2i\varepsilon}\exp\frac{i\varepsilon_1^2}{\vartheta}\cdot\big(1+0(\vartheta)\big)\right]$$

$$\sqrt{\frac{1}{\pi i\vartheta}} \int_{-\varepsilon_1}^{+\varepsilon_1} dw\, e^{\frac{2iW^2}{\vartheta}}\,\frac{2iW}{\vartheta}\,\frac{\psi(W)-\psi(0)}{2iW/\vartheta} = \sqrt{\frac{1}{\pi i\vartheta}}\, e^{\frac{iW^2}{\vartheta}}\,\frac{\psi(W)-\psi(0)}{2iW/\vartheta}\Bigg|_{-\varepsilon_1}^{+\varepsilon_1}$$

$$-\sqrt{\frac{1}{\pi i\vartheta}} \int_{-\varepsilon_1}^{+\varepsilon_1} dw\, e^{\frac{iW^2}{\vartheta}}\,\frac{\vartheta}{2iW}\left\{\psi'(W) - \frac{\psi(W)-\psi(0)}{W}\right\},$$

en développant sous la dernière intégrale

$$\psi(0) = \psi(W) - W\psi(W) + \frac{W^2}{2}\psi''(\Theta W)$$

avec $0 \leqq \Theta \leqq 1$, $\Theta = \Theta(W)$, il vient

$$= \sqrt{\frac{1}{\pi i\vartheta}}\, e^{\frac{i\varepsilon_1^2}{\vartheta}}\,\frac{\vartheta}{2i\varepsilon_1}\{\psi(+\varepsilon_1) + \psi(-\varepsilon_1) - 2\,\psi(0)\} -$$

$$-\sqrt{\frac{1}{\pi i\vartheta}} \int_{-\varepsilon_1}^{+\varepsilon_1} dw\, e^{\frac{iW^2}{\vartheta}}\,\frac{\vartheta}{2iW}\,\frac{1}{2}\,W\psi''(\Theta W);$$

en développant à nouveau

$$\psi''(\Theta W) = \psi''(0) + \Theta W\psi'''(\Theta' W)$$

avec $0 < \Theta' < \Theta$, $\Theta'(W)$, on obtient

$$= \sqrt{\frac{1}{\pi i\vartheta}}\, e^{\frac{i\varepsilon_1^1}{\vartheta}}\,\frac{\vartheta}{2i\varepsilon_1}\{\psi(+\varepsilon_1) + \psi(-\varepsilon_1) - 2\psi(0) -\}$$

$$-\frac{\vartheta}{4i}\psi''(0)\left(1+2\sqrt{\frac{1}{\pi i\vartheta}}\cdot\frac{\vartheta}{2i\varepsilon_1}\, e^{\frac{i\varepsilon_1^2}{\vartheta}}\,\big(1+0(\vartheta)\big)\right).$$

En tenant compte de la compensation des termes $\sim \sqrt{\vartheta}\, \psi(0)$ la contribution de I_0^0 est donnée par

$$I_0^0 = \psi(0) - \frac{\hbar\tau}{2im}\psi''(0) + \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}}\, e^{\frac{im\varepsilon_1^2}{\hbar 2\tau}} \frac{\hbar\tau}{im\varepsilon_1}[\psi(+\varepsilon_1) + \psi(-\varepsilon_1)] + 0(\tau^{3/2}).$$

Calculons I_0^{+1}

$$I_0^{+1} = \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} dq_0 \sqrt{\frac{D_0}{2\pi i\hbar}} \exp\frac{i}{\hbar} S_0 \cdot \psi(q_0)$$

par intégration partielle:

$$I_0^{+1} = e^{\frac{i}{\hbar}S} \cdot \frac{\sqrt{\frac{D}{2\pi i\hbar}}}{\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial q_0}} \psi \Big/_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} - \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} dq_0\, e^{\frac{i}{\hbar}S} \frac{\partial}{\partial q_0} \frac{\sqrt{\frac{D}{2\pi i\hbar}}\psi}{\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial q_0}};$$

avec

$$\left(\frac{\partial S}{\partial q_0}\right)_{/\varepsilon_1} = \frac{m\varepsilon_1}{\tau}(1 + 0(\tau^2)) \left(\frac{\partial S}{\partial q_0}\right)_{/\varepsilon_2} = \text{const.}\, \tau^{-\frac{n}{n-2}}$$

$$D_{/\varepsilon_1} = \frac{m}{\tau}(1 + 0(\tau^2)) \qquad D_{/\varepsilon_2} = \frac{n}{2}\alpha_n \frac{m}{\tau}[1 + 0(\tau^2)]$$

il vient

$$I_0^{+1} = -\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\varepsilon_1^2}{2\tau}} \cdot \frac{\hbar\tau}{mi\varepsilon_1}\psi(+\varepsilon_1)[1 + 0(\tau^2)] + 0\left(\tau^{\frac{n}{n-1} - \frac{1}{2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}S(\varepsilon_2)} \cdot \psi(\varepsilon_2)\right).$$

De même pour la contribution de I_0^{-1}, on a

$$I_0^{-1} = -\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\varepsilon_1^2}{2\tau}} \frac{\hbar\tau}{mi\varepsilon_1}\psi(-\varepsilon_1)[1 + 0(\tau^2)] + 0\left(\tau^{\frac{2}{n-2} - \frac{1}{2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}S(-\varepsilon_2)} \cdot \psi(-\varepsilon_2)\right).$$

Si l'on additionne $I_0^{-1} + I_0^0 + I_0^{+\prime}$, on voit que les termes

$$\sim \sqrt{\tau}\, e^{\frac{im\varepsilon_1^2}{2\hbar\tau}} (\psi(+\varepsilon_1) + \psi(-\varepsilon_1))$$

se compensent de sorte que

$$\int_{-\varepsilon_2}^{+\varepsilon_2} dq_0 K_c^0 \psi = e^{\frac{i}{\hbar}S(0,0,\tau)} \left[\psi(0) - \frac{\hbar\tau}{2im}\psi''(0) + 0(\tau^{3/2})\right] + 0\left(\tau^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\varepsilon_1^2}{2\tau}} \psi(0)\right) + 0\left(\chi_0^{\frac{1}{2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}S(\varepsilon_2)} \cdot \psi(\varepsilon_2)\right).$$

*

Il reste à intégrer I_0^{+2}, I_0^{-2}; avec $q_0 = \lambda_0(1+u)$, il vient

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}}\,\lambda_0 \int_{-\delta_0}^{+\delta_0} du \sqrt{\frac{\Delta_0}{\sqrt{\delta_0 - u}}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{a}{\chi_0} - \frac{1}{2}u^2\frac{b}{\chi_0}\cdots\right)}$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i k}}\left(\alpha_n\sqrt{\frac{m}{2c}}\right)^{\frac{2}{n-2}} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\frac{a}{\chi_0}}}{\sqrt{\chi_0}} \cdot \int_{-\delta_0}^{+\delta_0} du \sqrt{\frac{\Delta_0}{\sqrt{\delta_0 - u}}}\, e^{-\frac{1}{2}u^2\frac{b}{\chi_0}\cdots};$$

à cause de la singularité $u = \delta_0$, il faut encore séparer l'intégration; on pose

$$\int_{-\delta_0}^{+\delta_0} = \int_{-\delta_0}^{+\delta_0'} + \int_{\delta_0'}^{+\delta_0}$$

et il convient de choisir $\delta_0' = \delta - \alpha\cdot\chi_0$, alors, avec $\delta_0 - u = v$,

$$\text{const.}\,\frac{1}{\sqrt{\chi}}\int_0^{\alpha\chi} dv\, v^{-\frac{1}{4}} \sqrt{\Delta_0(\delta - v)}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{b(\delta_0 - v)^2}{\chi_0}} \cdot \psi = 0\left(\chi_0^{1/4}\psi(\lambda_0)\right).$$

La singularité ayant été éliminée, il reste

$$\text{const.}\,\frac{1}{\sqrt{\chi}}\int_{-\delta_0}^{+\delta_0'} du \sqrt{\frac{\Delta}{\sqrt{\delta_0 - u}}}\, e^{-\frac{iu^2}{\hbar 2\chi_0}}\,\psi\cdot\left(\lambda_0(1+u)\right) =$$

$$= \psi(\lambda_0)\left[1 + 0\left(\sqrt{\chi_0}\cdot e^{\frac{i\delta^2}{\chi_0}}\right)\right]$$

de sorte que

$$I_0^{+2} = \int_{\varepsilon_2}^{Q_0} dq_0\, K_c^0\, \psi = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{a}{\chi_0}}\,\psi(\lambda_0)\left[1 + 0(\chi_0^{1/4}) + 0(\chi_0^{1/2})\right]$$

et il en est de même pour la contribution de I_0^{-2}. Ainsi la contribution de K_c^0 est donnée par

$$\int_{-Q_0}^{+Q_0} dq_0\, K_c^0\,\psi = \exp\frac{i}{\hbar}\,S_0(0,0,\tau)\cdot\left[\psi(0) - \frac{\hbar\tau}{2im}\psi''(0) + 0(\tau^{3/2})\,\psi\right]$$

$$+ 0\left(\tau^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\varepsilon_1^2}{2\tau}}\,\psi(0)\right) + e^{\frac{i}{\hbar}S(0,\pm\lambda_0)}\,\psi(\pm\lambda_0)\left[1 + 0(\chi_0^{1/4}) + 0(\chi_0)^{1/2}\right].$$

Contribution de K_c^ν; on pose

$$\int_{Q_{\nu-1}^-}^{Q_\nu^+} K_c^{\nu+}\,\psi\, dq_0 = \left(\int_{Q_{\nu-1}^-}^{\varepsilon_2^\nu} + \int_{\varepsilon_2^\nu}^{Q_\nu^+}\right) K_c^{\nu+}\,\psi\, dq_0$$

où $\varepsilon_2^\nu = \lambda_\nu(1 - \delta_\nu)$. On calcule la première par intégration partielle comme pour I_0^1 et la seconde comme I_0^2; on trouve

$$I_\nu = + C^{te}\, e^{\frac{i}{\hbar} S(-\lambda_{\nu-1}{}^0)}\, \psi(-\lambda_{\nu-1})\,[1 + 0\,(\chi_{\nu-1})^{1/2}]$$

$$+ e^{\frac{i}{\hbar} S(\lambda_\nu)}\, \psi(\lambda_\nu)\,[1 + 0\,(\chi_\nu)^{1/4} + 0\,(\chi_\nu)^{1/2}]$$

où

$$\chi_\nu = \chi_0 \frac{1}{(2\,\nu+1)^{2\,n/n-2}} \qquad S(0, \lambda_\nu) = \frac{a}{\chi_\nu}.$$

Pour l'exemple traité l'équation (11) devient ainsi

$$I(0, \tau) = e^{\frac{i}{\hbar} S_0(0,0,\tau)} \left[\psi(0) - \frac{\hbar\tau}{2\,i\,m}\,\psi''(0) + 0\,(\tau^{3/2})\,\psi\right]$$

$$+ 0\left(\tau^{3/2}\, e^{\frac{i m \varepsilon_1{}^2}{2\,\tau}}\, \psi(0)\right) + \sum_{+,-} \cdot \sum_{0}^{\infty}{}_\nu\, e^{\frac{i}{\hbar} S(0, \pm\lambda_\nu)}\, \psi(\pm\lambda_\nu)\,[1 + 0(\chi_\nu^{\frac{1}{4}}) + 0(\chi_\nu^{\frac{1}{2}})]. \quad (11.4)$$

En admettant que $\psi(x) \underset{|\,x\to\infty}{\to} 0$, donc que $\psi(\lambda_\nu) < \psi(\lambda_0)$, la dernière somme peut être évaluée à

$$2 \sum_{\nu=0}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{a}{\chi_\nu}}\, \psi(\lambda_0) \cong 0\left(\frac{\hbar\chi_0}{a}\, e^{\frac{i}{\hbar}\frac{a}{\chi_0}}\, \psi(\lambda_0) = 0\left(\tau^{\frac{n+2}{n-2}}\, e^{\frac{i\,\text{const.}}{\tau^{n+2/n-2}}}\, \psi(\lambda_0)\right)\right).$$

Ces résultats correspondent au cas d'une dimension. Pour un potentiel analogue et à N dimensions, on intègre l'équation (11) en entourant les extrema de S de petits éléments de volume appropriés et la $\sum_{\lambda_\nu}$ devient $\prod_1^N{}_i \sum_{\lambda_\nu^i}$. La généralisation du cas précédent donne ainsi

$$I(0, \tau) = e^{\frac{i}{\hbar} S_0(0,0,\tau)} \left[\psi(0) - \frac{\hbar\tau}{2\,i\,m}\,\psi''(0) + 0\,(\tau^2)\right]$$

$$+ 0\left(\tau^{\frac{3N}{2}}\, e^{\frac{i m \vec{\varepsilon}_1{}^2}{2\hbar\tau}}\, \psi(0)\right) + 0\left(\tau^{N\frac{n+2}{n-2}}\, e^{\frac{i\,\text{const.}}{\tau^{n+2/n-2}}}\, \psi(\lambda_0)\right). \quad (11.5)$$

Si maintenant $\vec{q}$ est différend de 0, il faut se souvenir qu'en $\vec{q}_0 = \vec{\bar{q}}_0(\vec{q}, \tau)$ S était minimum et qu'ainsi l'équation (1) devient, en intégrant I_0^0 de $\vec{\bar{q}}_0 - \vec{\varepsilon}_1$ à $\vec{\bar{q}}_0 + \vec{\varepsilon}_1$

$$I(\vec{q}, \tau) = e^{\frac{i}{\hbar} S_0(\vec{q}, \vec{\bar{q}}_0, \tau)} \left\{\psi(\vec{\bar{q}}_0) - \frac{\hbar\tau}{2\,i\,m}\,\psi''(\vec{\bar{q}}_0)\right\} + \tau f_N(\tau, \vec{q}, \psi) \quad (11.6)$$

où

$$|\,f_N(\tau, \vec{q}, \psi)\,| \underset{|\,\tau\to 0}{\to} 0.$$

Ce n'est qu'en procédant à un développement en τ plus poussé que l'on retrouve le résultat conventionnel, comme le montre ce qui suit:

$$S_0(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau) = \frac{m}{2} \frac{(\vec{q} - \vec{q}_0)^2}{\tau} - \tau \int_0^1 du\, V(\vec{q}_0 + \vec{x}\, u) + 0(\tau^3).$$

$$\frac{\partial S}{\partial \vec{q}_0} = -m \frac{(\vec{q} - \vec{q}_0)}{\tau} - \tau \frac{\partial}{\partial \vec{q}_0} \int_0^1 du\, V$$

$$\frac{\partial S}{\partial \vec{q}_0} = 0 \rightarrow \vec{\bar{q}}_0 = \vec{q} + \frac{\tau^2}{2m} \frac{\partial V}{\partial \vec{q}} + \cdots$$

$$S(\vec{q}, \vec{\bar{q}}_0, \tau) = -\tau V(q) + 0(\tau^3) \cdots$$

$$\psi(\vec{\bar{q}}_0) = \psi(\vec{q}) + (\vec{\bar{q}}_0 - \vec{q}) \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}} \psi(\vec{\xi}) \qquad q < \xi(\tau) < \bar{q}_0$$

$$= \psi(q) + 0\big(\tau^2 \psi'(\xi)\big);$$

avec ces valeurs, il vient

$$e^{\frac{i}{\hbar} S_0(\vec{q}, \vec{\bar{q}}_0, \tau)} \left\{\psi(\vec{\bar{q}}_0) - \frac{\hbar \tau}{2 i m} \psi''(\vec{\bar{q}}_0)\right\} = \psi(\vec{q}) - \frac{i\tau}{\hbar} \left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(q)\right) \psi(\vec{q})$$
$$+ (\vec{\bar{q}}_0 - \vec{q})\, \psi'(\xi) + \left[e^{\frac{i}{\hbar} S} - \left(1 - \frac{i}{\hbar} \tau V(\vec{q})\right)\right] \psi(\vec{\bar{q}}_0).$$

Ainsi, $I(\vec{q}, \tau)$ devient

$$I(\vec{q}, \tau) = \psi(\vec{q}) - \frac{i\tau}{\hbar} \boldsymbol{H}_q \psi(\vec{q}) + \tau g(\vec{q}, \psi, \tau) \tag{11.7}$$

où

$$g = (\vec{\bar{q}}_0 - \vec{q})\, \psi'(\xi) + \left[e^{\frac{i}{\hbar} S} - \left(1 - \frac{i}{\hbar} \tau V(q)\right)\right] \psi(\vec{q}_0) + f_N(\vec{q}, \tau, \psi).$$

$$|g| \underset{/\,\tau \to 0}{\rightarrow} 0$$

Si l'on se reporte à l'équation (3), on remarque que la formule ci-dessus lui est identique. Toutefois, avant de formuler le théorème, nous allons encore traiter le cas général de forces dérivant de potentiels scalaires et vectoriels ainsi que du temps. La définition (1) de K_c demeure valable, mais le temps initial t_0 et le temps final t interviennent explicitement en plus de $\tau = t - t_0$. L'action S est solution des équations

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial \vec{q}} + A(\vec{q}, t)\right)^2 + V(\vec{q}, t) = 0$$

et

$$-\frac{\partial S}{\partial t_0} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial \vec{q}_0} + A(\vec{q}_0, t_0)\right)^2 + V(\vec{q}_0, t_0) = 0.$$

Nous prenons du chapitre IV (Généralisations) les formules (18.0, .1, ..) donnant l'action S pour de petits intervalles τ et $\vec{x} = \vec{q} - \vec{q}_0$:

$$S(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau) = \sum_1^N{}_i\, m \frac{x_i^2}{2\tau} - \int_0^1 dv[x_i A_i(\vec{q} - \vec{x}v, t - \tau v) + \tau V(\vec{q} - \vec{x}v, t - \tau v)] + \cdots.$$

On a

$$\frac{\partial S}{\partial q_{0i}} = -\frac{m x_i}{\tau} + \int_0^1 dv A_i - \sum_k x_k \frac{\partial}{\partial q_{0i}} \int_0^1 dv A_k - \tau \frac{\partial}{\partial q_{0i}} \int_0^1 dv V$$

et le minimum de S est atteint en $\vec{q}_0 = \vec{\bar{q}}_0$ solution de $\partial S / \partial \vec{q}_0 = 0$, pour laquelle on trouve

$$\vec{\bar{q}}_0 = \vec{q} - \frac{\tau}{m} \vec{A}(\vec{q}, t) + 0(\tau^2);$$

ainsi

$$S(\vec{q}, \vec{\bar{q}}_0, \tau) = -\tau \left(V(\vec{q}, t) + \frac{1}{2m} \vec{A}^2(\vec{q}, t) \right) + 0(\tau^2).$$

Pour connaître S dans le voisinage de son minimum, calculons ses secondes dérivées partielles

$$\left.\frac{\partial^2 S}{\partial q_{0i} \partial q_{0k}}\right|_{q_{0k} = \bar{q}_{0k}} = \frac{m}{\tau} \delta_{ik} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial A_i}{\partial q_k} + \frac{\partial A_k}{\partial q_i} \right) + 0(\tau),$$

ainsi, pour $\vec{q}_0 \cong \vec{\bar{q}}_0$ et avec $\vec{q}_0 - \vec{\bar{q}}_0 = \vec{\bar{x}}$

$$S(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau) = S(\vec{q}, \vec{\bar{q}}_0, \tau) + \sum_{i,k} \frac{1}{2} \bar{x}_i \left(\frac{m}{\tau} \delta_{ik} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial A_i}{\partial q_k} + \frac{\partial A_k}{\partial q_i} \right) + \cdots \right) \bar{x}_k \cdots.$$

Evaluons aussi $D(\vec{q}, \vec{q}_0)$; avec

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial q_{0k}} = -\frac{m}{\tau} \delta_{ik} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial A_i}{\partial q_k} - \frac{\partial A_k}{\partial q_i} \right) + 0(\tau)$$

et les formules établies au début de ce chapitre, il vient

$$D = \left(\frac{m}{\tau}\right)^N \left\{ 1 + \frac{\tau}{m} \sum_i^N{}_1 \frac{\partial^2 S'}{\partial q_i \partial q_{0i}} + 0(\tau^2) \cdots \right\}$$
$$= \left(\frac{m}{\tau}\right)^N \{1 + \tau^2 F\}.$$

Ces relations introduites dans la définition du noyau K_c^0 permettent de calculer $I_0(\vec{q}, \tau, t_0)$. Par une rotation convenable des axes x_i, rotation telle que

$$\frac{1}{2} \sum_{i,k} \bar{x}_i \alpha_{ik} \bar{x}_k = \sum_i \frac{1}{2} \beta_i \xi_i^2$$

et en appliquant la même technique que celle utilisée à une dimension, on établit aisément que

$$I_0(\vec{q}, \tau) = \int K_c^0 \, \psi \, d^N q_0 =$$

$$= \sqrt{\frac{(-1)^N \left\| \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \, \partial q_{0k}} \right\|}{\left\| \frac{\partial^2 S}{\partial q_{0i} \, \partial q_{0k}} \right\|_{/q_{0k} = \bar{q}_{0k}}}} \, e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{q}, \vec{\bar{q}}_0, \tau)} \left(1 - \frac{i\tau}{2\hbar m} \vec{\boldsymbol{p}}^2\right) \psi + \tau f_0(\vec{q}, \psi, \tau). \quad (11.8)$$

Quant à la contribution des noyaux K_c^ν, elle est du même ordre que celle établie précédemment et nous n'y reviendrons pas. En revanche nous allons développer en détail le résultat ci-dessus. Avec

$$\left\| \frac{\partial^2 S}{\partial q_{0i} \, \partial q_{0k}} \right\|_{/q_{0i} = \bar{q}_{0i}} = \left(\frac{m}{\tau}\right)^N \left[1 + \frac{\tau}{m} \sum_i \frac{\partial A_i}{\partial q_i} + 0(\tau^2)\right]$$

et $D(\vec{q}, \vec{q}_0)$, il vient

$$\sqrt{\frac{1 + \tau^2 F}{1 + \frac{\tau}{m} \frac{\partial A_i}{\partial q_i}}} = 1 - \frac{1}{2} \frac{\tau}{m} \frac{\partial \vec{A}}{\partial \vec{q}} + 0(\tau^2);$$

avec

$$\exp \frac{i}{\hbar} S(\vec{q}, \vec{\bar{q}}_0, \tau) = \exp - \frac{i}{\hbar} \tau \left(V + \frac{1}{2m} \vec{A}^2\right) =$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar} \tau \left((V(\vec{q}) + \frac{1}{2m} \vec{A}^2\right) + 0(\tau^2)$$

et enfin

$$\psi(\vec{\bar{q}}_0, t_0) = \psi(\vec{q}, t_0) + (\vec{\bar{q}}_0 - \vec{q}) \frac{\partial \psi}{\partial \vec{q}} (\vec{q}, t_0) + 0(\tau^2)$$

$$= \psi(\vec{q}, t_0) - \frac{\tau}{m} \left(\vec{A}, \frac{\partial}{\partial \vec{q}}\right) \psi(\vec{q}, t_0) + 0(\tau^2)$$

l'équation donnant I_0 devient

$$I_0 = \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\tau}{m} \frac{\partial \vec{A}}{\partial \vec{q}}\right) \left(1 - \frac{i}{\hbar} \tau \left(V(\vec{q}, t) + \frac{1}{2m} \vec{A}^2(\vec{q}, t)\right)\right) \left(\psi(\vec{q}) - \right.$$

$$\left. - \frac{\tau}{m} \left(\vec{A}, \frac{\partial}{\partial \vec{q}}\right) \psi - \frac{\hbar \tau}{2 i m} \Delta \psi\right) + 0(\tau^2) = \left\{1 - \frac{i\tau}{\hbar} \left[V(\vec{q}, t) + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \vec{A}}{\partial \vec{q}} + \frac{1}{m} \left(\vec{A} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{q}}\right) + \frac{1}{2m} \vec{A}^2 + \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \Delta\right]\right\} \psi + 0(\tau)^2$$

et en remarquant que

$$(\vec{\boldsymbol{p}} + \vec{A})^2 = \vec{\boldsymbol{p}}^2 + \vec{\boldsymbol{p}} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{\boldsymbol{p}} + A^2 = \vec{\boldsymbol{p}}^2 + 2 \, \vec{A} \cdot \vec{\boldsymbol{p}} + \vec{A}^2 + (\vec{\boldsymbol{p}}, \vec{A})$$

on a le résultat final:

$$I_0(\vec{q}, \tau, t_0) = \int d^N q_0 K_c^0 \psi = \left\{1 - \frac{i\tau}{\hbar}\left[\frac{1}{2m}(\vec{\boldsymbol{p}} + \vec{A})^2 + V\right]\right\} \psi(q, t_0) + \\ + \tau f(q, \psi, \tau, t) \qquad (11)'$$

et

$$I(\vec{q}, \tau, t_0) = \int \sum_{0n}^{\infty} K_c^n \psi d^N q_0 = \left\{1 - \frac{i\tau}{\hbar} \boldsymbol{H}\right\} \psi(\vec{q}, t_0) + \tau g(\vec{q}, \psi, \tau) \qquad (11)''$$

où

$$|g| \underset{/\tau \to 0.}{\to} 0$$

La contribution essentielle des noyaux est fournie par l'équation (11)′ (c'est-à-dire par K_c^0) et l'équation (11)″ remplit les conditions exprimées par l'équation (3), relatives aux propriétés des noyaux semi-classiques; d'où:

Théorème. Sous l'hypothèse de petits intervalles de temps, l'effet quantique des forces de réflexion est négligeable, les noyaux semi-classiques ont les mêmes propriétés que les noyaux exacts et seule importe la connaissance du noyau K_c^0 dans le voisinage du minimum de l'action S_0.

IV. Généralisations.

Sachant maintenant qu'il importe de connaître K_c^0 seul, on peut se proposer d'en généraliser la construction pour les cas susceptibles de se présenter pratiquement. On supprimera dorénavant l'indice 0 de K_c^0, toute confusion étant exclue pour la raison citée plus haut.

IV.1. Généralisation du calcul des actions.

Dans le cadre de la définition (1) de K_c, les cas non-relativistes de systèmes conservatifs et non conservatifs sont inclus. On va les traiter explicitement.

Cas des systèmes conservatifs. Prenons l'exemple courant d'une particule de masse m douée d'une charge $+e$ soumise aux forces dérivant des potentiels $e\,\Phi(\vec{q})$ et $e/c \cdot \vec{A}(\vec{q})$. L'action S suffisant à déterminer K_c, on a à résoudre les équations:

$$\frac{\partial S}{\partial \tau} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial \vec{q}} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{q})\right)^2 + e\,\Phi(\vec{q}) = 0$$

et

$$\frac{\partial S}{\partial \tau} + \frac{1}{2m}\left(-\frac{\partial S}{\partial \vec{q}_0} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{q}_0)\right)^2 + e\,\Phi(\vec{q}_0) = 0. \qquad (4'')$$

Le temps jouant un rôle particulier, il est indiqué de chercher S sous forme d'une série en τ, mais les forces dépendant de la vitesse,

$\partial S/\partial \tau$ ne possède plus l'invariance par rapport à l'inversion du temps; la série possédera donc des puissances impaires et paires de τ, soit

$$S = \sum_{-1}^{\infty}{}_n \, \sigma_n(\vec{q}, \vec{q}_0) \, \tau^n. \tag{13}$$

En introduisant cet essai dans les équations (4″) et en annulant les coefficients des puissances successives de τ, on est conduit à écrire deux systèmes d'équations dont le premier est:

$$\left(\frac{\partial \sigma_{-1}}{\partial \vec{q}}\right)^2 = 2\, m\, \sigma_{-1} \tag{13.–1}$$

$$\left(\frac{\partial \sigma_{-1}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial \sigma_0}{\partial \vec{q}} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{q})\right) = 0 \tag{13.0}$$

$$\left\{1 + \frac{1}{m}\left(\frac{\partial \sigma_{-1}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial}{\partial \vec{q}}\right)\right\} \sigma_1 = -e\Phi - \frac{1}{2\,m}\left(\frac{\partial \sigma_0}{\partial \vec{q}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \tag{14.1}$$

$$\left\{2 + \frac{1}{m}\left(\frac{\partial \sigma_{-1}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial}{\partial \vec{q}}\right)\right\} \sigma_2 = -\frac{1}{m}\left(\frac{\partial \sigma_1}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial \sigma_0}{\partial \vec{q}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) \tag{14.2}$$

$$\left\{n + \frac{1}{m}\left(\frac{\partial \sigma_{-1}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial}{\partial \vec{q}}\right)\right\} \sigma_n = -\frac{1}{m}\left(\frac{\partial \sigma_{n-1}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial \sigma_0}{\partial \vec{q}} - \frac{e}{c}A\right) - $$
$$- \frac{1}{2\,m}\sum_{1}^{n-2}{}_\nu \left(\frac{\partial \sigma_\nu}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial \sigma_{n-\nu}}{\partial \vec{q}}\right). \tag{14.n}$$

Quant au second, il n'est pas nécessaire de l'écrire: on remplace simplement dans (14) $\vec{q}$ par $\vec{q}_0$ et $\partial/\partial\vec{q}$, par $-\partial/\partial\vec{q}_0$.

Solution. La condition de régularité imposée à S et la condition initiale $S(\vec{q}, \vec{q}_0, 0)$ établie sous II.2 pour des forces quelconques déterminent l'unicité de la solution. On a:

$$\sigma_{-1} = \frac{m}{2}(\vec{q} - \vec{q}_0)^2; \tag{15.–1}$$

en introduisant

$$\frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial \vec{q}}\,\sigma_1 = \overrightarrow{q - q_0} = \vec{x}$$

dans (14), on obtient un système analogue au système (7), il n'est donc pas nécessaire de l'écrire. Toutefois, une équation est d'un type nouveau: c'est (14.1) qui devient

$$\left(\vec{x}, \frac{\partial \sigma_0}{\partial \vec{q}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) = 0.$$

Notons que la solution $\partial \sigma_0/\partial \vec{q} = e/c\, \vec{A}$ est exclue, car on aurait la contradiction

$$\text{rot grad}\, \sigma_0 = 0 = e/c \text{ rot } \vec{A} = e/c\, \vec{H}!$$

posons donc

$$\frac{\partial \sigma_0}{\partial \vec{q}} = \frac{e}{c}\vec{A} + \frac{e}{c}\vec{\chi}$$

alors

$$(\vec{x}, \vec{\chi}) = 0 \quad \text{et} \quad \operatorname{rot}\vec{\chi} = -\vec{H}.$$

Formons

$$\vec{\nabla}(\vec{x}, \vec{\chi}) = \{1 + (\vec{x}, \vec{\nabla})\}\vec{\chi} + [\vec{x}, \operatorname{rot}\vec{\chi}] = 0$$

$$\{1 + (\vec{x}, \vec{\nabla})\}\vec{\chi} = +[\vec{x}, \vec{H}];$$

on retrouve un type d'équation connu dont la solution est

$$\vec{\chi} = \int_0^1 du[\vec{x}\cdot u, \vec{H}(\vec{q}_0 + \vec{x}u)]$$

d'où

$$\frac{\partial \sigma_0}{\partial \vec{q}} = \frac{e}{c}\vec{A} + \frac{e}{c}\int_0^1 du[\vec{x}\cdot u, H(\vec{q}_0 + \vec{x}u)] \tag{15.0'}$$

et l'on peut maintenant intégrer σ_0. Exemple:

$$\vec{H} = \text{const.}\ \vec{A} = -\frac{1}{2}[\vec{q}, \vec{H}]$$

$$\frac{\partial \sigma_0}{\partial \vec{q}} = -\frac{e}{2c}[\vec{q}, \vec{H}] + \frac{e}{c}[\overline{q - \vec{q}_0}, \vec{H}] = -\frac{1}{2}\frac{e}{c}[\vec{q}_0, \vec{H}]$$

$$\vec{\chi} = \frac{e}{2c}[\vec{x}, \vec{H}] \qquad \sigma_0 = -\frac{e}{2c}(\vec{H}, [\vec{q}, \vec{q}_0]);$$

et dans le cas général:

$$\sigma_0 = \frac{e}{c}\int_0^1 du\big(\vec{x}, \vec{A}(\vec{q}_0 + \vec{x}u)\big). \tag{15.0}$$

On remarquera que dans toutes les équations (14.n) suivantes, $\partial\sigma_0/\partial\vec{q}$ et $e/c\,\vec{A}$ ne se manifestent que par leur différence $e/c\,\vec{\chi}$. La solution de σ_1 et des σ_n suivants ne comporte pas de nouvelles difficultés et l'on a:

$$\sigma_1(\vec{q}, \vec{q}_0) = -\int_0^1 du\left[e\,\Phi(\vec{q}_0 + \vec{x}u) + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{\chi}^2(u)\right] \tag{15.1}$$

$$\sigma_n(\vec{q}, \vec{q}_0) = -\int_0^1 du\, u^{n-1}\left[\left(\frac{\partial\sigma_{n-1}}{\partial\vec{q}}, \frac{e}{c}\vec{\chi}\right) + \frac{1}{2m}\sum_1^{n-2}{}_\nu\left(\frac{\partial\sigma_\nu}{\partial\vec{q}}, \frac{\partial\sigma_{n-\nu}}{\partial\vec{q}}\right)\right]_{/\,\vec{q}=\vec{q}_0+\vec{x}u} \tag{15.n}$$

pour $n > 1$. La convergence de la série (13) se discute d'une façon analogue à celle de la série (5) en spécialisant les champs. Dans l'exemple précédent où $\vec{H} = \text{const.}$ et $\Phi = 0$ on trouve évidemment que (13) converge pour $\tau < \pi/\omega$ $\omega = e|\vec{H}|/2mc$. Sous III, page 111,

nous avons calculé la limite τ_1 de τ pour un potentiel scalère. En adoptant les mêmes conventions dans le cas d'un potentiel vectoriel, on trouve

$$\underline{\tau_1 = \frac{2\,m}{\hbar}\,\lambda^2}$$

avec

$$\underline{\lambda^2 = \left(\frac{\sigma_0}{\Delta(\vec{V}_0\,\vec{V})\,\sigma_0}\right)^{\frac{1}{2}}} \qquad \sigma_0 = \frac{e}{c}\int_0^1 du\,\vec{x}\,\vec{A}(\vec{q}_0 + \vec{x}\,u)\,.$$

S connue, on peut calculer D, construire K_c avec (1) et l'utiliser pour des temps $\tau \ll \tau_1$ évalué ci-dessus.

Cas des systèmes non-conservatifs. Si l'hamiltonien dépend explicitement du temps, $S = S(\vec{q}, t, \vec{q}_0, t_0)$ et le noyau K_c dépend de t, t_0 et non seulement de leur différence τ; toutefois sa définition demeure

$$K_c(\vec{q}, t, \vec{q}_0\, t_0) = (-2\,\pi\,i\,\hbar)^{-N/2}\left(\text{dét.}\left\|\frac{\partial^2 S}{\partial q_{0i}\,\partial q_k}\right\|\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\,S\right\}.$$

Reprenons l'exemple d'une particule chargée dans un champ électromagnétique quelconque, on a alors à calculer S, solution des équations:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2\,m}\left(\frac{\partial S}{\partial \vec{q}} - \frac{e}{c}\,\vec{A}(\vec{q}, t)\right)^2 + e\,\Phi(\vec{q}, t) = 0$$

et

$$-\frac{\partial S}{\partial t_0} + \frac{1}{2\,m}\left(-\frac{\partial S}{\partial \vec{q}_0} - \frac{e}{c}\,\vec{A}(\vec{q}_0, t_0)\right)^2 + e\,\Phi(\vec{q}_0, t_0) = 0\,. \tag{4'''}$$

Dans ce cas, le temps ne jouant plus un rôle particulier, un essai du type (5) ou (13) n'est plus justifié. Mais l'intérêt des développements en série de τ était du au fait que ces essais «linéarisaient» les équations d'Hamilton-Jacobi. C'est cette linéarisation que l'on recherche et que l'on peut obtenir comme suit: constatant que si, dans la série (5), on pose $V = e \cdot \Phi$, le développement en τ est simultanément un développement en puissances de e, on supposera dans notre dernier cas que S peut s'exprimer en une série de puissances de e, soit

$$S = S_0 + S_1 + S_2 + \cdots + S_n + \cdots \quad \text{où} \quad S_n \sim e^n. \tag{16}$$

En introduisant cet essai dans les équations (4''') et en admettant qu'elles doivent être satisfaites pour toute valeur de e, on est conduit à écrire deux systèmes d'équations dont le premier est:

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} + \frac{1}{2\,m}\left(\frac{\partial S_0}{\partial \vec{q}}\right)^2 = 0 \tag{17.0}$$

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} + \frac{1}{m}\left(\frac{\partial S_0}{\partial \vec{q}}\,\frac{\partial S_1}{\partial \vec{q}}\right) = \frac{e}{m\,c}\left(\frac{\partial S_0}{\partial \vec{q}}\,,\,\vec{A}\right) - e\,\Phi \tag{17.1}$$

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} + \frac{1}{m}\left(\frac{\partial S_0}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial S_2}{\partial \vec{q}}\right) = -\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S_1}{\partial \vec{q}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \tag{17.2}$$

$$\frac{\partial S_3}{\partial t} + \frac{1}{m}\left(\frac{\partial S_0}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial S_n}{\partial \vec{q}}\right) = -\frac{1}{m}\left(\frac{\partial S_{n-1}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial S_1}{\partial \vec{q}} - \frac{e}{c}A\right) + \\ -\frac{1}{2m}\sum_{\nu=2}^{n-2}\left(\frac{\partial S_{n-\nu}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial S_\nu}{\partial \vec{q}}\right) \tag{17.n}$$

et le second que l'on obtient de la façon connue.

Solution. Les mêmes conditions de régularité et conditions initiales sont encore valables et l'on peut résoudre le système par récurrence. Donnons-en les solutions:

$$S_0 = \frac{m(\vec{q}-\vec{q}_0)^2}{2(t-t_0)} = \frac{m}{2}\frac{x^2}{\tau} = \frac{\sigma_{-1}}{\tau} \tag{18.0}$$

$$S_1 = \int_0^1 du\left[-e\tau\Phi(\vec{q}, t) + \frac{e}{c}\vec{x}\vec{A}(\vec{q}, t)\right]_{\substack{\vec{q}=\vec{q}_0+\vec{x}\cdot u \\ t=t_0+\tau\cdot u}} \tag{18.1}$$

$$S_2 = -\frac{\tau}{2m}\int_0^1 du\left(\frac{\partial S_1}{\partial \vec{q}} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{q}, t)\right)^2_{\substack{\vec{q}=\vec{q}_0+\vec{x}\cdot u \\ t=t_0+\tau\cdot u}} \tag{18.2}$$

$$S_n = -\frac{\tau}{m}\int_0^1 du\left(\frac{\partial S_{n-1}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial S_1}{\partial \vec{q}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) + \\ + \frac{1}{2}\sum_2^{n-2}{}_\nu\left(\frac{\partial S_{n-\nu}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial S_\nu}{\partial \vec{q}}\right)\Bigg]_{\substack{\vec{q}=\vec{q}_0+\vec{x}\cdot u \\ t=t_0+\tau\cdot u}}. \tag{18.n}$$

La convergence de cette série se traite de la façon connue; il nous reste à déterminer la limite supérieure de l'intervalle $t - t_0$ au-dessous de laquelle l'emploi de K_c est autorisé. Cette limite sera fonction du temps initial t_0. En appliquant la méthode habituelle, on trouve:

$$t - t_0 \ll \tau_1(t_0) = 2\frac{m}{\hbar}\lambda^2$$

$$\lambda(t_0) = \left(\frac{S_1(t=t_0)}{\Delta(\vec{V}_0, \vec{V})\, S_1(t_1=t_0)}\right)^{1/2} \qquad S_1(t=t_0) = \frac{e}{c}\int_0^1 du\left(\vec{x}\vec{A}(\vec{q}_0+\vec{x}\cdot u, t_0)\right).$$

Cas des systèmes relativistes. En prévision d'une construction relativiste des noyaux K_c, calculons l'action $S(q_\lambda, q_{0\lambda})$ qui satisfait les équations

$$\sum_1^4{}_\lambda\left(\frac{\partial S}{\partial q_\lambda} - \frac{e}{c}\Phi_\lambda\right)^2 + m_0^2c^2 = 0$$

et

$$\sum_1^4{}_\lambda\left(-\frac{\partial S}{\partial q_{0\lambda}} - \frac{e}{c}\Phi_\lambda\right)^2 + m_0^2c^2 = 0. \tag{19}$$

La même hypothèse d'un développement (16) en puissances de e permet de linéariser les équations (19). On obtient un premier système (la sommation sur λ est sous-entendue)

$$\left(\frac{\partial S_0}{\partial q_\lambda}\right)^2 + m_0^2 c^2 = 0 \tag{20.0}$$

$$2\left(\frac{\partial S_0}{\partial q_\lambda}, \left(\frac{\partial S_1}{\partial q_\lambda} - \frac{e}{c}\Phi_\lambda\right)\right) = 0 \tag{20.1}$$

$$\left(\frac{\partial S_0}{\partial q_\lambda}, \frac{\partial S_2}{\partial q_\lambda}\right) = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial S_1}{\partial q_\lambda} - \frac{e}{c}\Phi_\lambda\right)^2 \tag{20.2}$$

$$\left(\frac{\partial S_0}{\partial q_\lambda}, \frac{\partial S_n}{\partial q_\lambda}\right) = -\left(\frac{\partial S_{n-1}}{\partial q_\lambda}, \left(\frac{\partial S_1}{\partial q_\lambda} - \frac{e}{c}\Phi_\lambda\right)\right) + \frac{1}{2}\sum_{2}^{n-2}{}_\nu\left(\frac{\partial S_{n-\nu}}{\partial q_\lambda}, \frac{\partial S_\nu}{\partial q_\lambda}\right) \tag{20.n}$$

et un second associé au premier de la façon connue.

Solution. S est une fonction régulière de q_λ et $q_{0\lambda}$, dont la condition initiale est donnée par $S(q_{0\lambda}, q_{0\lambda}) = 0$. Le premier terme de la série représente l'action d'une particule libre. Posons

$$x_\lambda = q_\lambda - q_{0\lambda}, \qquad s = \overset{+}{\sqrt{\Sigma_\lambda x_\lambda^2}}, \qquad s = \text{ic. } \Theta, \qquad \Theta = \overset{+}{\sqrt{\tau^2 - \frac{\vec{x}^2}{c^2}}}\,;$$

il vient

$$S_0^{+-} = \pm i \cdot m_0 \cdot c \cdot s = \mp m_0 \cdot c^2 \cdot \Theta; \tag{21.0}$$

on a deux solutions correspondant aux énergies + et —. Il est commode de les réunir en posant

$$S_0 = \varepsilon \cdot m_0 \cdot c \cdot s \qquad \text{où} \qquad \varepsilon = \pm i.$$

Le second terme, solution de

$$\left(x_\lambda, \frac{\partial S_1}{\partial q_\lambda} - \frac{e}{c}\Phi_\lambda\right) = 0 \quad \text{et} \quad \left(x_\lambda, -\frac{\partial S_1}{\partial q_{0\lambda}} - \frac{e}{c}\Phi_\lambda\right) = 0$$

peut se calculer comme suit. Soit

$$F_{\lambda\mu} = \frac{\partial \Phi_\mu}{\partial q_\lambda} - \frac{\partial \Phi_\lambda}{\partial q_\mu},$$

posons

$$\frac{\partial S_1}{\partial q_\lambda} = \frac{e}{c}\Phi_\lambda + \frac{e}{c}\chi_\lambda,$$

alors

$$\frac{\partial \chi_\mu}{\partial q_\lambda} - \frac{\partial \chi_\lambda}{\partial q_\mu} = -F_{\lambda\mu} = F_{\mu\lambda}$$

et

$$(x_\lambda\, \chi_\lambda) = 0.$$

Formons

$$\frac{\partial}{\partial q_\mu}(x_\lambda \chi_\lambda) = \delta_{\lambda\mu}\chi_\lambda + x_\lambda \frac{\partial \chi_\lambda}{\partial q_\mu} = 0\,,$$

avec

$$\frac{\partial \chi_\lambda}{\partial q_\mu} = \frac{\partial \chi_\mu}{d q_\lambda} - F_{\mu\lambda}\,,$$

il vient

$$\delta_{\lambda\mu}\chi_\lambda + x_\lambda \frac{\partial \chi_\mu}{\partial q_\lambda} - x_\lambda F_{\mu\lambda} = 0$$

$$\left\{1 + x_\lambda \frac{\partial}{\partial q_\lambda}\right\}\chi_\mu = (x_\lambda F_{\mu\lambda})\,.$$

C'est une équation de type connu dont la solution est

$$\chi_\mu = +\int_0^1 du \cdot u\; x_\lambda F_{\mu\lambda}(q_0 + x u)$$

compte tenu des conditions citées plus haut. Avec ce résultat, il vient

$$\frac{\partial S_1}{\partial q_\mu} = \frac{e}{c}\left[\Phi_\mu + \int_0^1 du\; u\, x_\lambda F_{\mu\lambda}(q_0 + x u)\right]$$

et

$$S_1 = \frac{e}{c}\int_0^1 du\big(x_\lambda \Phi_\lambda(q_{0\nu} + x_\nu \cdot u)\big)\,. \tag{21.1}$$

Si, par exemple, $F_{\mu\lambda} = \text{const.}_{\mu\nu} = F^0_{\mu\nu}$, on trouve

$$S_1 = -\frac{e}{2c} q_\mu F^0_{\mu\lambda} q_{0\lambda}\,.$$

Si l'on introduit S_0 dans (20.n), on a à résoudre des équations du type

$$\varepsilon m_0 c \frac{x_\lambda}{s}\frac{\partial}{\partial q_\lambda} S_n = f_n(q)$$

dont la solution qui nous convient est

$$S_n = \frac{s}{\varepsilon m_0 c}\int_0^1 du\, f_n(q_{\sigma\nu} + x_\nu \cdot u)\,;$$

cette formule générale donne les solutions cherchées:

$$S_2 = -\frac{1}{2}\frac{s}{\varepsilon m_0 c}\left(\frac{e}{c}\right)^2 \int_0^1 du\, \Sigma_\lambda \chi_\lambda^2 \tag{21.2}$$

$$S_3 = -\frac{s}{\varepsilon m_0 c}\frac{e}{c}\int_0^1 du\left(\frac{\partial S_2}{\partial q_\lambda}, \chi_\lambda\right)_{/\, q_\nu = q_{0\nu} + x_\nu \cdot u} \tag{21.3}$$

$$S_n = -\frac{s}{\varepsilon m_0 c}\int_0^1 du\left[\left(\frac{\partial S_{n-1}}{\partial q_\lambda}, \frac{e}{c}\chi_\lambda\right) + \frac{1}{2}\sum_2^{n-2}{}_\nu\left(\frac{\partial S_{n-\nu}}{\partial q_\lambda}, \frac{\partial S_\nu}{\partial q_\lambda}\right)\right]. \tag{21.n}$$

On remarque que les S_n dépendent explicitement de s, de x_λ, de q_λ et $q_{0\lambda}$, que d'autre part $\partial S_1/\partial q_\lambda$ et $(e/c)\,\Phi_\lambda$ ne se manifestent que par leur différence $(e/c)\,\chi_\lambda$. On voit ensuite aisément que

$$S_n \sim \left(\frac{-s}{\varepsilon\, m_0\, c}\right)^{n-1}\left(\frac{e}{c}\right)|\bar{\chi}|)^n \quad \text{où} \quad |\bar{\chi}| \approx |x_\mu F_{\mu\lambda}|$$

ou

$$S_n \sim \left(\mp \frac{\Theta}{m_0}\right)^{n-1}\left(\frac{e}{c}\,|\bar{\chi}|\right)^n;$$

et l'on utilise cette forme pour discuter de la convergence de la série (21); on procède de la même façon que pour la série (5). Enfin, si l'on écrit séparément les deux solutions de (19), on a:

$$S^+ = -\,m_0 c^2\,\Theta + S_1 + \cdots + S_n^+; \quad S_n^+ \sim \left(\frac{-\Theta}{m_0}\right)^{n-1}\left(\frac{e}{c}|\bar{\chi}|\right)^n \qquad (21)_+$$

$$S^- = +\,m_0 c^2\,\Theta + S_1 + \cdots + S_n^-; \quad S_n^- \sim \left(\frac{+\Theta}{m_0}\right)^{n-1}\left(\frac{e}{c}|\bar{\chi}|\right)^n. \qquad (21)_-$$

On va développer une seconde méthode de calcul de l'action relativiste, méthode dont nous aurons besoin par la suite, et qui ne repose pas sur l'hypothèse d'un développement de S en puissances de e, mais qui fait intervenir explicitement le temps propre ϑ comme variable auxiliaire. On substitue à l'équation

$$\left(\frac{\partial S}{\partial q_\lambda} - \frac{e}{c}\,\Phi_\lambda\right)^2 + m_0^2 c^2 = 0$$

le système

$$\frac{\partial \bar{S}}{\partial \vartheta} + \frac{1}{2\,m_0}\left[\sum\nolimits_\lambda \left(\frac{\partial \bar{S}}{\partial q_\lambda} - \frac{e}{c}\,\Phi_\lambda\right) + m_0^2 c^2\right] = 0 \qquad (22.1)$$

$$\frac{\partial \bar{S}}{\partial \vartheta} = 0. \qquad (22.2)$$

La première équation est du type Hamilton-Jacobi, avec $V = 1/2\, m_0 c^2$, et la seconde exprime la condition qui garantit l'équivalence des deux formes[1]). Grâce à cette substitution, on peut calculer formellement $\bar{S}(q_\lambda, q_{0\lambda}, \vartheta)$, comme on avait calculé $S(\vec{q}, \vec{q}_0, \tau)$:

$$S = \int_0^\tau L\,dt \quad \text{devient} \quad \bar{S} = \int_0^\vartheta d\vartheta'\,\bar{L}(\vartheta')$$

avec

$$\bar{L} = \frac{m_0}{2}\,\dot{\zeta}_\lambda^2 - \frac{m_0 c^2}{2} - \frac{e}{c}\,(\Phi_\lambda\,\zeta_\lambda)\,\dot{\zeta} \equiv \frac{d}{d\vartheta'},\ \zeta$$

[1]) (22.2) exprime la conservation de m_0 dans le passage $S \to \bar{S}$.

Les équations du mouvement sont

$$\ddot{\zeta}_\lambda = \frac{e}{m_0 c} F_{\lambda\mu} \dot{\zeta}_\mu$$

avec les conditions initiale et finale

$$\vartheta' = 0 : \zeta_\lambda = q_{0\lambda} \qquad \vartheta' = \vartheta : \zeta_\lambda = q_\lambda .$$

A l'aide de ces équations et de la définition de $\bar{S}$, on établit la condition initiale $\bar{S}(q_\lambda, q_{0\lambda}, 0)$ comme dans le cas non relativiste, on trouve:

$$\lim_{\vartheta \to 0} \vartheta \, \bar{S}(q_\lambda, q_{0\lambda}, 0) = \frac{m_0}{2} \Sigma \, x_\lambda^2 .$$

On en déduit que

$$\bar{S} = \frac{m_0 \, x_\lambda{}^2}{2 \, \vartheta} + \text{fonction régulière de } \vartheta .$$

Cette propriété permet de chercher S sous forme d'une série:

$$\bar{S} = \sum_{-1}^{\infty} \bar{\sigma}_n \, \vartheta^n \tag{23}$$

où les $\bar{\sigma}_n$ sont fonction de q_λ et $q_{0\lambda}$ et non de ϑ. On introduit (23) dans (22.1) et celle-ci devant être identiquement satisfaite en ϑ, on annule les coefficients des puissances successives de ϑ, ce qui fournit le système:

$$\frac{1}{2 m_0} \left(\frac{\partial \bar{\sigma}_{-1}}{\partial q_\lambda} \right)^2 + \bar{\sigma}_1 = 0 \tag{24.–1}$$

$$\left(\frac{\partial \bar{\sigma}_{-1}}{\partial q_\lambda} , \frac{\partial \bar{\sigma}_0}{\partial q_\lambda} - \frac{e}{c} \Phi_\lambda \right) = 0 \tag{24.0}$$

$$\left\{ 1 + \frac{1}{m_0} \left(\frac{\partial \bar{\sigma}_{-1}}{\partial q_\lambda} , \frac{\partial}{\partial q_\lambda} \right) \right\} \bar{\sigma}_1 = - \frac{m_0 c^2}{2} - \frac{1}{2 m_0} \left(\frac{\partial \bar{\sigma}_0}{\partial q_\lambda} - \frac{e}{c} \Phi_\lambda \right)^2 \tag{24.1}$$

$$\left\{ 2 + \frac{1}{m_0} \left(\frac{\partial \bar{\sigma}_{-1}}{\partial q_\lambda} , \frac{\partial}{\partial q_\lambda} \right) \right\} \bar{\sigma}_2 = - \frac{1}{m_0} \left(\frac{\partial \bar{\sigma}_1}{\partial q_\lambda} , \frac{\partial \bar{\sigma}_0}{\partial q_\lambda} - \frac{e}{c} \Phi_\lambda \right) \tag{24.2}$$

$$\left\{ n + \frac{1}{m_0} \left(\frac{\partial \bar{\sigma}_{-1}}{\partial q_\lambda} , \frac{\partial}{\partial q_\lambda} \right) \right\} \bar{\sigma}_n = - \frac{1}{m_0} \left(\frac{\partial \bar{\sigma}_{n-1}}{\partial q_\lambda} , \frac{\partial \bar{\sigma}_0}{\partial q_\lambda} - \frac{e}{c} \Phi_\lambda \right) - \\ - \frac{1}{2 m_0} \sum_{1}^{n-2} {}_\nu \left(\frac{\partial \bar{\sigma}_{n-\nu}}{\partial q_\lambda} , \frac{\partial \bar{\sigma}_\nu}{\partial q_\lambda} \right) . \tag{24.n}$$

On obtient un deuxième système en remplaçant $\partial/\partial q_\lambda$ par $\partial/\partial q_{0\lambda}$ et q_λ par $q_{0\lambda}$.

Solution. La condition de régularité imposée à $\bar{S}$ et la condition initiale $\bar{S}(\vartheta = 0)$ déterminent univoquement la solution. Seules

interviennent les solutions régulières pour $x_\lambda = 0$ des équations inhomogènes du système (24). Avec

$$\bar{\sigma}_{-1} = \frac{m_0}{2} \sum_1^4{}_\lambda\, x_\lambda^2; \qquad \frac{1}{m_0} \frac{\partial \bar{\sigma}_{-1}}{\partial q_\lambda} = x_\lambda$$

et

$$\frac{\partial \bar{\sigma}_0}{\partial q_\lambda} = \frac{e}{c} (\Phi_\lambda + \chi_\lambda)$$

le système d'équations devient

$$x_\lambda \chi_\lambda = 0 \tag{25.0}$$

$$\left\{1 + x_\lambda \frac{\partial}{\partial q_\lambda}\right\} \bar{\sigma}_1 = -\frac{m_0 c^2}{2} - \frac{1}{2 m_0} \cdot \left(\frac{e}{c}\right)^2 \sum_1^4{}_\lambda\, \chi_\lambda^2 \tag{25.1}$$

$$\left\{2 + x_\lambda \frac{\partial}{\partial q_\lambda}\right\} \bar{\sigma}_2 = -\frac{e}{m_0 c} \left(\frac{\partial \bar{\sigma}_1}{\partial q_\lambda}, \chi_\lambda\right) \tag{25.2}$$

$$\left\{n + x_\lambda \frac{\partial}{\partial q_\lambda}\right\} \bar{\sigma}_n = -\frac{e}{m_0 c} \left(\frac{\partial \bar{\sigma}_{n-1}}{\partial q_\lambda}, \chi_\lambda\right) - \frac{1}{2 m_0} \sum_1^{n-2}{}_\nu \left(\frac{\partial \bar{\sigma}_{n-\nu}}{\partial q_\lambda}, \frac{\partial \bar{\sigma}_\nu}{\partial q_\lambda}\right) \tag{25.n}$$

dont les solutions sont

$$\bar{\sigma}_0 \equiv S_1 \text{ (voir équation 21.1)} \tag{26.0}$$

$$\bar{\sigma}_1 = -\frac{m_0 c^2}{2} - \frac{1}{2 m_0} \left(\frac{e}{c}\right)^2 \int_0^1 du \sum_1^4{}_\lambda\, \chi_\lambda^2 \tag{26.1}$$

$$\bar{\sigma}_2 = -\frac{e}{m_0 c} \int_0^1 u\, du \left(\frac{\partial \bar{\sigma}_1}{\partial q_\lambda}, \chi_\lambda\right) \tag{26.2}$$

$$\bar{\sigma}_n = -\frac{1}{m_0} \int_0^1 du\, u^{n-1} \left[\left(\frac{\partial \bar{\sigma}_{n-1}}{\partial q_\lambda}, \frac{e}{c} \chi_\lambda\right) + \frac{1}{2} \sum_1^{n-2}{}_\nu \left(\frac{\partial \bar{\sigma}_{n-\nu}}{\partial q_\lambda}, \frac{\partial \bar{\sigma}_\nu}{\partial q_\lambda}\right)\right]_{/q_\mu = q_{0\mu} + x_\mu \cdot u} \tag{26.n}$$

La convergence de la série (26) se discute d'une manière analogue à celle de la série (5). Nous avons jusqu'ici fait abstraction de l'équation (22.2) qui nous assure de l'équivalence des deux formes. En fait, l'action habituelle $S(q_\lambda, q_{0\lambda})$ s'obtiendra en éliminant ϑ entre $\bar{S}$ et la condition $\partial \bar{S}/\partial \Theta = 0$. Remarquons que, mis à part l'exemple que nous donnerons ci-dessous, la possibilité de cette élimination est toute théorique; elle n'est en général pas possible d'une façon exacte.

Exemple: Considérons le cas de la particule libre:

$$\bar{S} = \frac{m_0 s^2}{2\vartheta} - \frac{m_0 c^2}{2}\vartheta$$

$$\frac{\partial \bar{S}}{\partial \vartheta} = -\frac{m_0 s^2}{2\vartheta^2} - \frac{m_0 c^2}{2} = 0$$

d'où

$$\vartheta^2 = -\frac{s^2}{c^2} = \Theta^2 \rightarrow \vartheta^{+,-} = \pm\Theta$$

introduit dans $\bar{S}$, il vient

$$\bar{S} = -\frac{m_0 c^2 \Theta^2}{\pm 2\Theta} - \frac{m_0 c^2}{2}(\pm)\Theta = \mp m_0 c^2 \Theta = S^{+,-}.$$

Cet exemple nous apprend qu'à $\vartheta > 0$ correspond une énergie positive et à $\vartheta < 0$ une énergie négative.

Pour traiter les problèmes relativistes, on a donc les deux méthodes:

$$S = \sum_0^\infty S_n, \quad S_n \sim e^n \qquad \text{donnée par (21.n)} \tag{16}$$

$$S = \sum_{-1}^\infty \bar{\sigma}_n . \vartheta^n, \quad \bar{\sigma}_n \qquad \text{donnée par (26.n)}. \tag{23}$$

Ces calculs des actions relativistes ont pour but d'une part de préparer l'approche semi-classique des noyaux relativistes et d'autre part de compléter l'analyse des systèmes donnés avec les variables $(\vec{q}, t, \vec{q}_0, t_0)$, ce choix de variables étant quelque peu inhabituel en mécanique ordinaire.

IV.2. Généralisation de la construction des noyaux.

Cas des coordonnées curvilignes. Tout au long de ce travail nous avons utilisé la métrique cartésienne. Cette restriction doit être levée ici. Soit $\| g_{ik}(q) \|$ le tenseur symétrique d'une métrique donnée, dans laquelle nous supposerons que $ds^2 = g_{ik} dq_i dq_k$ est une forme définie positive. Nous supposons en outre que les masses sont déjà distribuées sur les g_{ik} et adoptons par la suite la convention d'Einstein, relative aux sommations.

Soit $g^{ik} = G_{ik}/g$, G_{ik} est le sous-déterminant de $g =$ dét. $\| g_{ik} \|$; on a la propriété $g^{ik} \cdot g_{im} = \delta^k_m$. Dans ce cas l'équation d'Hamilton-Jacobi s'écrit:

$$\frac{\partial S}{\partial \tau} + \frac{1}{2} \cdot \pi_i \cdot g^{ik} \cdot \pi_k + V = 0 = \frac{\partial S}{\partial \tau} + H_0$$

avec

$$\pi_i = \frac{\partial S}{\partial q_i} + A_i, \quad H_0 = \frac{1}{2} \pi_i g^{ik} \pi_k + V.$$

*

En posant $\varrho = \sqrt{g}$, l'hamiltonien de l'équation de SCHROEDINGER

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\tau} + \boldsymbol{H}\right)\psi = 0$$

devient

$$\boldsymbol{H} = \frac{1}{2\varrho}\boldsymbol{\pi}_i \cdot \varrho \cdot g^{ik} \cdot \boldsymbol{\pi}_k + V$$

avec

$$\boldsymbol{\pi}_i = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_i} + A_i\,.$$

Dans cette représentation, la normalisation est donnée par

$$\int \varrho\, d^N q\, \psi^* \psi = \text{const.}$$

En vue d'obtenir pour le noyau K_c une formule générale, indépendante de la métrique, il convient d'introduire une nouvelle fonction ψ, soit

$$\widehat{\psi} = \sqrt{\varrho} \cdot \psi$$

telle que

$$\int \widehat{\psi}^* \psi\, d^N q = \text{const.}$$

et que

$$\widehat{\psi}(1) = \int d^N q_0\, K(1, 0, \tau)\, \widehat{\psi}(0)\,.$$

Dans cette nouvelle représentation, l'équation de SCHROEDINGER est

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\tau} + \widehat{\boldsymbol{H}}\right)\widehat{\psi} = 0 \qquad \text{où} \qquad \widehat{\boldsymbol{H}} = \sqrt{\varrho}\,\boldsymbol{H}\,\frac{1}{\sqrt{\varrho}}$$

$$\widehat{\boldsymbol{H}} = \boldsymbol{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{\sqrt{\varrho}}\frac{\partial}{\partial q_i}\left(g^{ik}\frac{\partial\sqrt{\varrho}}{\partial q_k}\right) \tag{27}$$

avec

$$\boldsymbol{H}_0 = \frac{1}{2}\boldsymbol{\pi}_i\, g^{ik}\, \boldsymbol{\pi}_k + V.$$

K satisfait cette même équation; on en cherche l'approximation semi-classique par l'essai

$$K_c = c \cdot \sqrt{D}\; e^{\frac{i}{\hbar}\cdot S}$$

que l'on introduit dans l'équation précédente; il vient:

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} + \widehat{\boldsymbol{H}}\right)K_c = \left\{\left(\frac{\partial S}{\partial\tau} + H_0\right) + \frac{\hbar}{2i}\left[\frac{1}{D}\frac{\partial D}{\partial\tau} + \frac{1}{D}\frac{\partial}{\partial q_i}(D g^{ik}\pi_k)\right] + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left[\frac{1}{\sqrt{D}}\frac{\partial}{\partial q_i}\left(g^{ik}\frac{\partial\sqrt{D}}{\partial q_k}\right) - \frac{1}{\sqrt{\varrho}}\frac{\partial}{\partial q_i}\left(g^{ik}\frac{\partial\sqrt{\varrho}}{\partial q_k}\right)\right]\right\}K_c\,.$$

Le coefficient de h^0, équation d'HAMILTON-JACOBI, est nul; le coefficient de h^1 posé égal à 0 fournit l'équation suivante pour la densité D:

$$\frac{\partial D}{\partial\tau} + \frac{\partial}{\partial q_i}(D\, g^{ik}\pi_k) = 0\,.$$

ϱ n'intervient pas explicitement dans cette équation; l'influence de ϱ se trouve déplacée en des termes proportionnels à h^2 et c'est ce qui fait l'intérêt de cette représentation. On va montrer que cette équation est satisfaite avec

$$D = \text{dét.} \left\| \frac{\partial^2 S}{\partial q_m \partial q_{0l}} \right\| \qquad \frac{\partial^2 S}{\partial q_n \partial q_{0l}} \equiv S_{nl}.$$

En effet, partons de

$$\frac{\partial S}{\partial \tau} + \frac{1}{2} g^{ik}_{(q)} \left(\frac{\partial S}{\partial q_i} + A_i\right)\left(\frac{\partial S}{\partial q_k} + A_k\right) + V(q) = 0,$$

dérivons par rapport à q_{0l}

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial S}{\partial q_{0l}} + \frac{1}{2} g^{ik}_{(q)} \left[\frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial q_{0l}} \left(\frac{\partial S}{\partial q_k} + A_k\right) + \left(\frac{\partial S}{\partial q_i} + A_i\right) \frac{\partial^2 S}{\partial q_k \partial q_{0l}}\right] = 0,$$

avec $g_{ik} = g_{ki}$ il vient

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial S}{\partial q_{0l}} + g^{ik} \left(\frac{\partial S}{\partial q_i} + A_i\right) \frac{\partial^2 S}{\partial q_k \partial q_{0l}} = 0;$$

dérivons maintenant par rapport à q_m

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial^2 S}{\partial q_m \partial q_{0l}} + \left\langle \frac{\partial}{\partial q_m} g^{ik} \left(\frac{\partial S}{\partial q_i} + A_i\right)\right\rangle \frac{\partial^2 S}{\partial q_k \partial q_{0l}} + \\ + g^{ik} \left(\frac{\partial S}{\partial q_i} + A_i\right) \frac{\partial^3 S}{\partial q_m \partial q_k \partial q_{0l}} = 0$$

en posant

$$S_{ml} \equiv \frac{\partial^2 S}{\partial q_m \partial q_{0l}}$$

il vient

$$\frac{\partial}{\partial \tau} S_{ml} + \left\langle \frac{\partial}{\partial q_m} g^{ik} \left(\frac{\partial S}{\partial q_i} + A_i\right)\right\rangle S_{kl} + g^{ik} \left(\frac{\partial S}{\partial q_i} + A_i\right) \frac{\partial S_{ml}}{\partial q_k}.$$

Multiplions par S^{ml}, sommons sur l, puis sur m; avec $S^{ml} S_{kl} = \delta^m_k$ on a

$$S^{ml} \frac{\partial S_{ml}}{\partial \tau} + \left\langle \frac{\partial}{\partial q_m} g^{ik} \pi_i \right\rangle \delta^m_k + g^{ik} \pi_i S^{ml} \frac{\partial S_{ml}}{\partial q_k};$$

enfin, par définition

$$\frac{\partial D}{\partial u} = D S^{lm} \frac{\partial S_{lm}}{\partial u}$$

donc

$$\frac{1}{D} \frac{\partial D}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial q_i} (g^{ik} \pi_i) + g^{ik} \pi_i \frac{1}{D} \frac{\partial D}{\partial q_k} = 0$$

$$\frac{\partial D}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial q_i} (D g^{ik} \pi_k) = 0.$$

On a donc formellement pour toute métrique la même définition de K_c, mais les termes proportionnels à h^2, que l'on néglige dans l'appro-

ximation semi-classique, dépendent de cette métrique et ne prennent pas la forme $\Delta \sqrt{\cdots}/\sqrt{\cdots}$; d'autre part les fonctions d'onde de cette représentation sont les $\widehat{\psi}$ et l'hamiltonien est $\widehat{\boldsymbol{H}}$.

Inversement, on peut conserver la représentation habituelle dans laquelle

$$\int \psi^* \psi \varrho \, d^N q = \text{const.}$$

mais alors définir un nouveau noyau $\mathfrak{K}$ tel que

$$\psi(1) = \int \varrho(0) \, d^N q_0 \, \mathfrak{K}(1,0) \, \psi(0) \, .$$

Avec l'essai

$$\mathfrak{K}_c = c \sqrt{\mathfrak{D}} \, \exp \frac{i}{\hbar} S$$

introduit dans l'équation de SCHROEDINGER, on trouve

$$\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{H}\right\} \mathfrak{K}_c = \left\{\left(\frac{\partial S}{\partial \tau} + H_0\right) + \frac{\hbar}{2i}\left[\frac{1}{\mathfrak{D}}\frac{\partial \mathfrak{D}}{\partial \tau} + \frac{1}{\varrho \mathfrak{D}}\frac{\partial}{\partial q_i}(\varrho g^{ik} \mathfrak{D} \pi_k)\right] + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{\Delta \sqrt{\mathfrak{D}}}{\sqrt{\mathfrak{D}}}\right\} \mathfrak{K}_c \quad \text{où} \quad \Delta = \frac{1}{\varrho}\frac{\partial}{\partial q_i} \varrho g^{ik} \frac{\partial}{\partial q_k} \, .$$

Le coefficient de h^1 a pour solution

$$\mathfrak{D} = \frac{D(q, q_0, \tau)}{\varrho(q) \cdot \varrho(q_0)}$$

donc

$$\underline{\mathfrak{K}_c = [\varrho(q) \, \varrho(q_0)]^{-\frac{1}{2}} \cdot K_c \, .} \tag{28}$$

Dans les deux cas, la métrique étant donnée, on peut construire les noyaux à partir de l'action S. Pour calculer celle-ci, on fait un développement analogue à la série (5) où (16), mais la donnée explicite des σ_n n'est possible qu'en spécialisant les g_{ik}. Enfin, on adaptera la constante de normalisation à la métrique en question.

Cas non relativiste de particules douées de spin. Avec le spin on introduit une nouvelle variable: $\vec{s}$. Si l'on considérait celle-ci au même titre que les coordonnées de position $\vec{q}$ et $\vec{q}_0$, on devrait établir l'équation du mouvement du vecteur $\vec{s}$ en se donnant sa position initiale et finale, c'est-à-dire à $t = 0$ et $t = \tau$. Ce serait considérer $\vec{s}$ comme une grandeur classique de longueur constante et de direction continûment variable. Cette manière de voir n'est évidemment pas adéquate. Il faut laisser au spin son sens quantique et utiliser la représentation matricielle. Soit ψ la fonction d'onde d'une particule de spin s; elle est donnée par une matrice à une colonne et $2s + 1$ lignes de composantes ψ_ν. Soit σ_i $(i = 1, 2, 3)$ les matrices du spin

s à $2s+1$ lignes et colonnes; on choisira les fonctions propres ψ_ν^0 telles que dans cette représentation σ_3 et $\vec{\sigma}^2$ soient des matrices diagonales. ψ satisfait l'équation de SCHROEDINGER

$$\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{1}{2m}\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2+e\Phi-\frac{\hbar e}{2mc}(\vec{\sigma},\vec{H})\right\}\psi=0. \tag{29}$$

Il existe un noyau K, matrice de transformation, qui fournit la solution $\psi_\mu(\vec{q},t)$ correspondant à toute fonction initiale donnée:

$$\psi_\mu(\vec{q},t)=\int d^N q_0\, K_{\mu\nu}(\vec{q},t,\vec{q}_0,t_0)\,\psi_\nu(\vec{q}_0,t_0).$$

Ce noyau est aussi solution de l'équation (29): c'est la solution de l'équation de SCHROEDINGER qui pour $t\to t_0$ tend vers $\delta(\vec{q}-\vec{q}_0)\cdot I$ (I = matrice unité)

$$K_{\mu\nu}(\vec{q},t_0,\vec{q}_0,t_0)=\delta(\vec{q}-\vec{q}_0)\cdot\delta_{\mu\nu}. \tag{30}$$

Par analogie avec les cas sans spin traités précédemment, on peut chercher à construire un noyau K_c, approximation semi-classique de K (semi-classique au sens: négligence des termes $\sim\hbar^2$) par l'essai

$$K_c=R\exp\frac{i}{\hbar}S$$

où maintenant R est une matrice. Introduisons cet essai dans l'équation (29), il vient en posant $\vec{\pi}=\vec{p}-e/c\,\vec{A}$,

$$\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}+\boldsymbol{H}\right\}K_c=\left\{\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}\vec{\pi}^2+V\right\}K_c+$$
$$+\frac{\hbar}{i}\left\{\frac{\partial R}{\partial t}+\left(\frac{\vec{\pi}}{m}\frac{\partial R}{\partial\vec{q}}\right)+\frac{1}{2m}\frac{\partial\vec{\pi}}{\partial\vec{q}}\cdot R-\frac{ie}{2mc}\left(\vec{\sigma},\vec{H}\right)R\right\}e^{\frac{i}{\hbar}S}+$$
$$+\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2(\Delta R)\cdot e^{\frac{i}{\hbar}S}.$$

Le coefficient de $\hbar$ contient un nouveau terme dû au spin. Il est indiqué de scinder R en un produit de deux facteurs

$$R=(-2\pi i\hbar)^{-N/2}\sqrt{D}\cdot Q$$

où D est un scalère et Q une matrice; ce coefficient annulé devient alors:

$$\frac{1}{2\sqrt{D}}\left(\frac{\partial D}{\partial\tau}+\frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial\vec{q}}(\vec{\pi}D)\right)Q+\sqrt{D}\left(\frac{\partial Q}{\partial t}+\frac{\vec{\pi}}{m}\frac{\partial Q}{\partial\vec{q}}-\frac{ie}{2mc}(\vec{\sigma},\vec{H})Q\right)=0.$$

On a ainsi séparé les termes responsables du spin des termes habi-

tuels et l'on exige que les deux (...) s'annulent séparément. On a pour D la solution connue et Q satisfait l'équation

$$\frac{\partial}{\partial t} Q + \frac{\vec{\pi}}{m} \frac{\partial Q}{\partial \vec{q}} - \frac{i e}{2 m c} (\vec{\sigma}, \vec{H}) Q = 0$$

qui est identique à

$$\frac{d}{dt} Q - \frac{i e}{2 m c} (\vec{\sigma}, \vec{H}) Q = 0,$$

et en composantes

$$\frac{d}{dt} Q_{\mu\nu} - \frac{i e}{2 m c} (\vec{\sigma}_{\mu\lambda}, \vec{H}) Q_{\lambda\nu} = 0.$$

Etant donnée la condition initiale (équation 30)

$$Q_{\mu\nu} (t = t_0) = \delta_{\mu\nu}$$

on a le droit d'écrire la solution formellement comme suit:

$$Q = \exp \left\{ \frac{i e}{2 m c} \left(\vec{\sigma} \int_{t_0}^{t} \vec{H}(q(t'), t') \, dt' \right) \right\} \cdot I$$

où I est la matrice-unité. On peut mettre ce résultat sous la forme rationnelle plus pratique

$$Q = I \cdot \cos \left(\frac{e}{2 m c} \left| \int_{t_0}^{t} H' dt' \right| \right) + i \frac{(\vec{\sigma} \int \vec{H} dt')}{\left| \int H dt' \right|} \sin \left(\frac{e}{2 m c} \left| \int \vec{H} dt' \right| \right). \tag{31}$$

Calculons explicitement la phase

$$\Phi = \frac{e}{2 m c} \int_{t_0}^{t} (\vec{\sigma}, \vec{H}(t')) \, dt'$$

par exemple pour des champs $\vec{H} = \vec{H}(q)$; $\Phi_{\mu\nu}$ satisfait l'équation

$$\frac{\partial \Phi_{\mu\nu}}{\partial \tau} + \frac{\vec{\pi}}{m} \frac{\partial \Phi_{\mu\nu}}{\partial q} - (\vec{\sigma}_{\mu\nu} \vec{H}) = 0;$$

supposons Φ_μ, développée en puissances de τ

$$\Phi_{\mu\nu} (\vec{q}, \vec{q}_0, \tau) = \Phi^1_{\mu\nu} \tau + \cdots \Phi^n_{\mu\nu} \tau^n;$$

en introduisant ce développement et la définition de

$$\vec{\pi} = \frac{\partial S}{\partial \vec{q}} - \frac{e}{c} \vec{A} = \frac{m \vec{x}}{\tau} + \frac{e}{c} \vec{\chi} + \tau \frac{\partial \sigma_1}{\partial \vec{q}} + \cdots \quad \text{(voir équation 15)}$$

dans l'équation précédente et en annulant les coefficients des τ^n, on est conduit à écrire le système

$$\left\{1+\vec{x}\frac{\partial}{\partial\vec{q}}\right\}\Phi_{\mu\nu}=(\vec{\sigma}_{\mu\nu}\vec{H})$$

$$\left\{2+\vec{x}\frac{\partial}{\partial\vec{q}}\right\}\Phi^2_{\mu\nu}=-\frac{e}{mc}\left(\vec{\chi},\frac{\partial\Phi^1_{\mu\nu}}{\partial\vec{q}}\right)$$

$$\left\{n+\vec{x}\frac{\partial}{\partial\vec{q}}\right\}\Phi^n_{\mu\nu}=-\frac{e}{mc}\left(\vec{\chi},\frac{\partial\Phi^{n-1}_{\mu\nu}}{\partial\vec{q}}\right)-\sum_1^{n-2}{}_l\frac{1}{m}\left(\frac{\partial\sigma_l}{\partial\vec{q}},\frac{\partial\Phi^{n-l}_{\mu\nu}}{\partial\vec{q}}\right).$$

Solution. On a $\Phi_{\mu\nu}(q, q_0, 0)=0$ et $\Phi_{\mu\nu}$ est une fonction régulière, d'où l'on conclut que seules les solutions régulières pour $\vec{q}=\vec{q}_0$ du système inhomogène ci-dessus interviennent. Il vient

$$\Phi^1_{\mu\nu}=\int du\left(\vec{\sigma}_{\mu\nu}\vec{H}(\vec{q}_0+\vec{x}\cdot u)\right)$$

$$\Phi^2_{\mu\nu}=-\frac{e}{mc}\int du\,u\left(\vec{\chi}\frac{\partial\Phi^1_{\mu\nu}}{\partial\vec{q}}\right)_{/\vec{q}=\vec{q}_0+\vec{x}\cdot u} \tag{32}$$

$$\Phi^n_{\mu\nu}=-\frac{1}{m}\int du\,u^{n-1}\left[\left(\frac{e}{c}\vec{\chi},\frac{\partial\Phi^{n-1}_{\mu\nu}}{\partial\vec{q}}\right)+\sum_1^{n-2}{}_l\left(\frac{\partial\sigma_l}{\partial\vec{q}},\frac{\partial\Phi^{n-l}_{\mu\nu}}{\partial\vec{q}}\right)\right]_{/\vec{q}=\vec{q}_0+\vec{x}\cdot u}.$$

On a donc pour le noyau cherché la formule

$$\underline{K_c=\left(\frac{-1}{2\pi i\hbar}\right)^{N/2}\sqrt{\det\left\|\frac{\partial^2 S}{\partial q_{0i}\,\partial q_k}\right\|}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S\right\}\cdot\left(I\cos|\Phi|+i\frac{\Phi}{|\Phi|}\sin|\Phi|\right)}. \tag{33}$$

Dans le cas particulier d'un champ magnétostatique homogène $\vec{H}=0,0,H$ (voir exemple page 92), $\omega=eH/2\,mc$, le noyau K_c est le noyau exact K:

$$K_c=K=\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega\tau}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S\right\}\cdot(I\cos\omega\tau+i\,\sigma_3\sin\omega\tau).$$

Quant à la détermination de τ_1, celle-ci n'est pas aussi aisée que dans les cas précédents, où seules des grandeurs scalères interviennent. R étant une matrice $c\sqrt{D}\,Q$, $Q=e^{i\Phi}$, on peut formellement traiter ce cas en remplaçant τ_1 par $\tau_1\,e^{i\alpha}$ où α est une phase-matrice. S'intéressant à la valeur absolue qui physiquement nous intéresse, on retrouve pour τ_1 la formule connue.

Cas relativistes de particules douées de spin 1/2 *et* 0. Considérons le cas d'une particule de charge e et spin 1/2 dans un champs électro-

magnétique Φ_λ ($\lambda = 1..4$). Soient ψ_ν ($\nu = 1..4$) les composantes de sa fonction d'onde et $\vec{\alpha}$, β les matrices de DIRAC. Posons:

$$q_\lambda = (\vec{q}, ict) \equiv 1 \qquad q_{0\lambda} = (\vec{q}_0, ict_0) \equiv 0 \qquad \Phi_4 = i\Phi_0 \qquad \pi_4 = i\pi_0$$

$$\pi_0 = -\frac{\hbar\partial}{ic\partial t} - \frac{e}{c}\Phi_0 \qquad \pi_\lambda = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_\lambda} - \frac{e}{c}\Phi_\lambda .$$

ψ satisfait l'équation de DIRAC

$$\left(-\pi_0 + (\vec{\alpha}, \vec{\pi}) + \beta mc\right)\psi = 0. \tag{34}$$

On s'intéresse à la matrice

$$(\vec{q}, t \mid \mathfrak{K} \mid \vec{q}_0, t_0)$$

qui permet de résoudre le problème des conditions initiales ($\psi_\nu(0)$ données)

$$\psi_\mu(1) = \int d^3 q_0\, \mathfrak{K}_{\mu\nu}(1,0)\, \psi_\nu(0) . \tag{35}$$

$\mathfrak{K}$ est la solution de l'équation de DIRAC (34) qui satisfait à la condition initiale

$$t = t_0 \qquad \mathfrak{K}_{\mu\nu}(\vec{q}, t_0, \vec{q}_0, t_0) = \delta^3(\vec{q} - \vec{q}_0)\, \delta_{\mu\nu} . \tag{36}$$

La connaissance de cette matrice dans le cas de champs quelconques est l'objet central de notre recherche. Conformément à la méthode d'approche semi-classique, on pourrait faire l'essai

$$\mathfrak{K}_{\mu\nu}(1,0) = \mathfrak{R}_{\mu\nu}(1,0) \exp \frac{i}{\hbar} S(1,0)$$

et traiter le problème comme il l'a été dans le cas des composantes ψ_ν[1]). Etant données les complications dues au nombre des composantes $\mathfrak{K}_{\mu\nu}$ (4×4), il n'est pas indiqué de suivre cette voie. On peut poser:

$$\psi(1) = \left\{+\pi_0 + (\vec{\alpha}, \vec{\pi}) + mc\beta\right\} \Psi(1) ; \tag{37}$$

Ψ (1) satisfait alors l'équation du second ordre

$$\left\{\pi_\lambda^2 + m_0^2 c^2 - \frac{e\hbar}{c} M\right\} \Psi(1) \equiv \Lambda(1)\, \Psi(1) = 0 \tag{38}$$

où

$$M = \left((\vec{\sigma}', H) + i(\vec{\alpha}, E)\right) \quad \text{avec} \quad \vec{\sigma}' = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$

σ_i ($i = 1, 2, 3$) étant les matrices de PAULI. Ψ est une matrice uni-

---

[1]) Voir W. PAULI, Helv. Phys. Acta **5**, 179 (1932).

colonne à deux composantes. Pour déterminer ψ (1), il *suffit* de trouver la solution Ψ de (38) satisfaisant aux conditions initiales

$$\Psi = 0 \quad \text{et} \quad -\frac{\hbar}{ic}\frac{\partial \Psi}{\partial t} \equiv -\frac{\hbar}{ic}\dot{\Psi}_0 = \psi(0) \qquad \text{pour } t = t_0 . \tag{39}$$

On peut mettre cette solution cherchée sous la forme

$$\Psi(1) = \int d^3 q_0 \, K(1,0) \, \dot{\Psi}_0(0) ; \tag{40}$$

le noyau $K(1,0)$ est la solution de l'équation du second ordre (38) qui satisfait aux conditions initiales

$$\Lambda(1) \, K(1,0) = 0 ; \qquad K = 0 \quad \frac{\partial K}{\partial t} = \delta^3(\vec{q} - \vec{q}_0) \qquad \text{pour } t = t_0 . \tag{41}$$

La matrice cherchée $\mathfrak{K}$ est donnée par

$$\underline{\mathfrak{K}(1,0) = -\frac{ic}{\hbar}\{+\pi_0(1) - (\vec{\alpha}, \vec{\pi}(1)) + mc\beta\} K(1,0).} \tag{42}$$

En effet, appliquons l'opérateur $\{\pi_0 + (\vec{\alpha}\,\vec{\pi}) + mc\beta\}$ par la gauche à l'équation (40), il vient

$$\{\pi_0 + (\vec{\alpha}, \vec{\pi}) + mc\beta\}\Psi(1) = \int d^3 q_0 \{\pi_0 + (\vec{\alpha}, \vec{\pi}) + mc\beta\} K(1,0) \, \dot{\Psi}_0(0) =$$

$$= \psi(1) = \int d^3 q_0 \underbrace{(\pi_0 + \vec{\alpha}\,\vec{\pi} + mc\beta) \, K(1,0) - \frac{ic}{\hbar}} \cdot \psi(0) =$$

$$= \int d^3 q_0 \, \mathfrak{K}(1,0) \, \psi(0) ;$$

et les conditions initiales (41) et (36) coïncident:

$$t = t_0 \;\; \mathfrak{K} = \delta^3(\vec{q} - \vec{q}_0) \cdot I = -\frac{ic}{\hbar}(\pi_0 + (\vec{\alpha}, \vec{\pi}) + mc\beta) \, K = \frac{\partial K}{\partial t} + 0 \,_{/\, t = t_0} .$$

L'intérêt se concentre donc sur la connaissance du noyau $K(1,0)$, d'où l'on peut tout dériver. Il est en général une matrice à deux lignes et deux colonnes. Dans le cas particulier où les champs Φ_λ sont nuls, on connaît la solution exacte.

$$(p_\lambda^2 + m_0^2 c^2) \, K = 0 \;\rightarrow\; (\Box_1 - \varkappa^2) \, K(1,0) = 0$$

$$t = t_0 ; \qquad K = 0 \qquad \frac{\partial K}{\partial t} = \delta^3(\vec{q} - \vec{q}_0) ; \quad \varkappa = \frac{m_0 c}{\hbar} .$$

C'est, au signe près, la fonction Δ connue en théorie des champs: $K = -\Delta \cdot I$ (I, matrice unité);

$$K = \left(-\frac{m}{4\pi\hbar u} J_1(\varkappa u)\cdot \varepsilon(u^2) + \frac{1}{2\pi c}\,\delta(u^2)\right)\cdot I \tag{43}$$

où

$$\varepsilon(u^2) = \begin{cases} 1 & u^2 > 0 \\ {}^1/_2 & u^2 = 0 \\ 0 & u^2 < 0 \end{cases} ; \quad \begin{matrix} u^2 = -s^2 = -\sum_1^4 x_\lambda^2 = c^2\Theta^2 \\ x_\lambda = q_\lambda - q_{0\lambda} \end{matrix}$$

et dans ce cas

$$\mathfrak{K} = \left\{\frac{\partial}{\partial t} - c\left(\vec{\alpha}, \frac{\partial}{\partial \vec{q}}\right) - \frac{i}{\hbar} m c \beta\right\} K .$$

Nous aurons besoin par la suite de la forme asymptotique de (43); pour $\varkappa u \gg 1$ on a:

$$K_{as} = -\frac{m}{4\pi\hbar u}\sqrt{\frac{1}{2\pi\varkappa u}}\left[(-i)^{3/2} e^{-i\varkappa u} + (i)^{3/2} e^{+i\varkappa u} + 0\left(\frac{1}{\varkappa u}\right)\right] = \\ = K_{as}^{+} + K_{as}^{-} . \tag{43$_{as}$}$$

Dans le cas général, la solution peut s'exprimer sous la forme

$$K(1,0) = K_1(1,0)\ \varepsilon(u^2) + K_2 \cdot \delta(u^2) \tag{44}$$

où K_1 et K_2 sont des fonctions continues, $K_1(1,0)$ étant appelée la fonction de Riemann de l'équation différentielle (38). Exprimons que K est solution de (38); avec

$$\Box\ \varepsilon(u^2) = -4\ \delta(u^2) \qquad \Box\ \delta(u^2) = 0$$

on a

$$\Lambda(1)\ K(1,0) = \big(\Lambda(1)\ K_1(1,0)\big)\cdot\varepsilon + \big(\Lambda(1)\ K_2 + 4\ \hbar^2(\Omega+1)K_1\big)\delta - \\ -4\ \hbar^2\ \Omega\ K_2 \cdot \delta' = 0 \tag{45}$$

où l'on a posé

$$\Omega \equiv \left(x_\lambda \frac{\partial}{\partial q_\lambda} + \frac{e}{i\hbar c}\, x_\lambda \Phi_\lambda\right).$$

Cette équation est satisfaite si l'on pose

$$\Lambda(1)\ K_1(1,0) = 0 \tag{46.1}$$

$$\Lambda(1)\ K_2(1,0) + 4\ \hbar^2(\Omega+1)\ K_1 = 0 \qquad \text{pour } u^2 = 0 \tag{46.2}$$

$$\Omega\ K_2 = 0 \tag{46.3}$$

où (46.2) n'est nécessairement nulle que sur le cône caractéristique $u^2 = 0$. Il est aisé de résoudre (46.3), posons

$$K_2 = c\, e^{\frac{i}{\hbar}\cdot\alpha}$$

il vient

$$x_\lambda \frac{\partial}{\partial q_\lambda}\alpha = \frac{e}{c}\, x_\lambda \Phi_\lambda ;$$

étant donné que $K_2 = \text{const.} = 1/2\,\pi\,c$ si $\Phi_\lambda = 0$, on a univoquement

$$\alpha = \frac{e}{c}\int_0^1 du\left(x_\lambda,\ \Phi_\nu(q_{0\nu} + x_\nu \cdot u)\right).$$

Reportons-nous au calcul de l'action S relativiste, on remarque que $\alpha = S_1$, donné par l'équation (21.1); en effet, on avait (page 133)

$$\left(x_\lambda, \frac{\partial S_1}{\partial q_\lambda} - \frac{e}{c}\Phi_\lambda\right) = 0 \quad \frac{\partial S_1}{\partial q_\lambda} = \frac{e}{c}(\Phi_\lambda + \chi_\lambda) \quad S_1 = \frac{e}{c}\int du\left(x_\lambda, \Phi_\lambda(u)\right)$$

ainsi

$$K_2(1,0) = \frac{1}{2\,\pi\,c}\, e^{\frac{i}{\hbar}S_1}. \tag{47.3}$$

Si l'on introduit (47.3) dans (46.2), on peut déterminer K_1, mais seulement sur le cône caractéristique $u^2 = -\Sigma_\lambda(q_\lambda - q_{0\lambda})^2 = 0$. Le problème consiste maintenant à déterminer la fonction de Riemann $K_1\,(1,0)$ solution de (46.1). On ne connaît évidemment pas la solution exacte dans le cas général de champs quelconques. On va développer deux méthodes d'approche semi-classique de ce noyau, l'une directe et l'autre indirecte, et préciser dans quel domaine de leurs arguments ces approximations sont utilisables.

Pour la méthode indirecte, on utilisera la représentation en fonction du temps propre due à M. Fock[1]).

Cet auteur part de l'équation du second ordre

$$\Lambda(1)\cdot\Psi(1) = 0 \tag{38}$$

et pose la solution $\Psi\,(1)$ sous la forme de l'intégrale

$$\Psi(1) = \int_C d\,\vartheta\,\Psi_F(1,\vartheta) \tag{48}$$

où ϑ est une variable auxiliaire, C un chemin d'intégration qui dépend de la solution désirée. L'équation (38) sera satisfaite si $\Psi_F\,(1,0)$ satisfait l'équation

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\Psi_F = \frac{1}{2\,m}\Lambda\,\Psi_F \tag{49}$$

et si le chemin d'intégration est choisi de telle sorte que la condition

$$\frac{\partial}{\partial\vartheta}\Psi(1) = 0 = \int_C \frac{\partial\Psi_F}{\partial\vartheta}\,d\vartheta = \Psi_{F\,/C} \tag{49'}$$

soit remplie. Comme on le verra plus loin, la variable ϑ joue le rôle du temps propre et l'équation (49) est appelée l'équation de Dirac

[1]) V. Fock, Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion **12**, 404 (1937).

avec le temps propre. (48) est valable pour toute solution de (38), donc aussi pour la fonction de RIEMANN K_1 (1,0). M. FOCK pose donc

$$K_1(1,0) = \int_C K_F(1,0,\vartheta)\, d\vartheta$$

et montre, en se basant sur des recherches de HADAMARD[1]), qu'en choisissant pour K_F la solution dite solution élémentaire de l'équation (49), la fonction de RIEMANN K_1 est donnée en prenant comme chemin d'intégration C un petit cercle entourant l'origine du plan de ϑ complexe; soit

$$\underline{K_1(1,0) = \oint K_F(1,0,\vartheta)\, d\vartheta\,.} \tag{50}$$

L'auteur traite explicitement le cas d'une particule libre ($\Phi_\lambda = 0$), donne la solution exacte de K_F dans le cas de forces constantes, mais restreint l'étude du cas général au comportement de K_F et K_1 sur le cône caractéristique.

En nous basant sur l'équation (50) qui permet de calculer K_1, avec l'équation (49) et la définition de K_F, on va chercher, conformément à l'approche semi-classique de M. FEYNMAN, une approximation $K_{F\cdot c}$ de K_F sous la forme

$$K_{F\cdot c}(1,0\ \vartheta) = \bar{R}(1,0,\ \vartheta)\exp\frac{i}{\hbar}\bar{S}(1,0,\ \vartheta)\,.$$

Introduisons cet essai dans (49), il vient

$$\begin{aligned}\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vartheta}+\frac{1}{2m}\Lambda\right\}K_{F\cdot c} &= \left\{\frac{\partial\bar{S}}{\partial\vartheta}+\frac{1}{2m_0}(\pi_\lambda^2+m_0^2c^2)\right\}K_{F\cdot c}+\\ &+\frac{\hbar}{i}\left\{\frac{\partial\bar{R}}{\partial\vartheta}+\frac{1}{2m_0}\frac{\partial\pi_\lambda}{\partial q_\lambda}\cdot\bar{R}+\frac{1}{m_0}\pi_\lambda\frac{\partial\bar{R}}{\partial q_\lambda}-\frac{e}{2mc}iM\bar{R}\right\}e^{\frac{i}{\hbar}\bar{S}}+\\ &+\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\frac{1}{2m_0}\cdot\Box\,\bar{R}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\bar{S}}\,.\end{aligned} \tag{51}$$

Le coefficient de h^0 annulé est précisément l'équation de l'action relativiste dans la représentation en fonction du temps propre (p.134 et suiv.) dont la solution qui nous convient est donnée par le système (26). La condition (22.2) se traduit dans la définition de K_F par la condition (49′). Le coefficient de h annulé donne l'équation

$$\frac{\partial\bar{R}}{\partial\vartheta}+\frac{1}{m_0}\pi_\lambda\frac{\partial\bar{R}_\lambda}{\partial q_\lambda}+\frac{1}{2m_0}\frac{\partial\pi_\lambda}{\partial q_\lambda}\cdot\bar{R}-\frac{e}{2mc}iM\bar{R}=0\,, \tag{52}$$

que l'on va résoudre. Ce qui suit est formellement analogue à ce qui

[1]) J. HADAMARD, Le problème de Cauchy et les équations aux dérivées partielles linéaires hyperboliques. Paris, Hermann, 1932.

a été fait dans le cas non relativiste d'une particule douée de spin. On pose

$$\bar{R} = C \cdot \sqrt{\bar{D}} \cdot \bar{Q}, \qquad C = -\frac{1}{8\pi^2 m_0 \hbar c}$$

ce qui donne

$$\frac{1}{2\sqrt{\bar{D}}}\left(\frac{\partial \bar{D}}{\partial \vartheta} + \frac{1}{m_0}\frac{\partial}{\partial q_\lambda}(\pi_\lambda \cdot \bar{D})\right) \cdot \bar{Q}$$

$$+ \sqrt{\bar{D}}\left(\frac{\partial \bar{Q}}{\partial \vartheta} + \frac{1}{m_0}\pi_\lambda \frac{\partial \bar{Q}}{\partial q_\lambda} - \frac{e\,i}{2\,m\,c} M \bar{Q}\right) = 0$$

et l'on exige que chaque (..) s'annule séparément, pour la même raison que dans le cas susdit. La solution de la première est donnée par l'équation connue

$$\bar{D} = \text{dét.} \left\| \frac{\partial^2 \bar{S}}{\partial q_\mu \, \partial q_{0\nu}} \right\|.$$

Quant à la seconde, on peut écrire formellement

$$\frac{d}{d\vartheta} Q - i \frac{e}{2\,m\,c} M Q = 0 \qquad Q = e^{i \frac{e}{2\,m\,c} \int_0^\vartheta d\vartheta' M} \cdot I.$$

En imaginant la phase développée en une série de puissances de ϑ, on peut calculer les coefficients de ϑ^n par la méthode habituelle:

$$\bar{\Phi} = \frac{e}{2\,m\,c} \int_0^\vartheta M(\vartheta')\, d\vartheta' \qquad \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \vartheta} + \frac{1}{m_0}\pi_\lambda \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial q_\lambda} = \frac{e}{2\,m\,c} M$$

on pose

$$\bar{\Phi} = \sum_0^\infty \bar{\Phi}_n \vartheta^n$$

et avec

$$\pi_\lambda = \frac{\partial \bar{S}}{\partial q_\lambda} - \frac{e}{c}\Phi_\lambda = \frac{m\,x_\lambda}{\vartheta} + \frac{e}{c}\chi_\lambda + \sum_2^\infty \frac{\partial \bar{\sigma}_n}{\partial q_\lambda}\vartheta^n$$

l'équation ci-dessus devient le système d'équations:

$$\left(1 + \left(x_\lambda \frac{\partial}{\partial q_\lambda}\right)\right)\bar{\Phi}_1 = \frac{e}{2\,m\,c} M(q_\lambda)$$

$$\left(2 + \left(x_\lambda \frac{\partial}{\partial q_\lambda}\right)\right)\bar{\Phi}_2 = -\frac{1}{m_0}\frac{e}{c}\chi_\lambda \frac{\partial \bar{\Phi}_1}{\partial q_\lambda}$$

$$\left(n + \left(x_\lambda \frac{\partial}{\partial q_\lambda}\right)\right)\bar{\Phi}_n = -\frac{e}{m_0 c}\chi_\lambda \frac{\partial \Phi_{n-1}}{\partial q_\lambda} - \frac{1}{m_0}\sum_2^{n-1}{}_\nu \left(\frac{\partial \bar{\sigma}_\nu}{\partial q_\lambda}, \frac{\partial \bar{\Phi}_{n-\nu}}{\partial q_\lambda}\right),$$

dont les solutions sont, en tenant compte de la condition de régularité:

$$\bar{\Phi}_1 = \frac{e}{2mc}\int_0^1 du\, M(q_{0_\lambda} + x_\lambda u) \tag{53.1}$$

$$\bar{\Phi}_2 = -\frac{e}{m_0 c}\int_0^1 du\, u\left(\chi_\lambda \frac{\partial \bar{\Phi}_1}{\partial q_\lambda}\right)_{/\, q_\lambda = q_{0\lambda} + x_\lambda u} \tag{53.2}$$

$$\bar{\Phi}_n = -\frac{1}{m_0}\int_0^1 du\, u^{n-1}\left[\frac{e}{c}\chi_\lambda \frac{\partial \bar{\Phi}_n}{\partial q_\lambda} + \sum_1^{n-1}{}_\nu \left(\frac{\partial \bar{\sigma}_\nu}{\partial q_\lambda}, \frac{\partial \bar{\Phi}_{n-\nu}}{\partial q_\lambda}\right)\right]. \tag{53.n}$$

Evaluons encore le déterminant D. En posant

$$\bar{S} = \bar{S}_{\text{p.l.}} - \bar{S}', \quad \bar{S}_{\text{p.l.}} = \frac{m_0 s^2}{2\vartheta} - \frac{m_0 c^2}{2}\vartheta$$

$$\bar{S}' = -\frac{m_0 c^2}{2}\vartheta - \sum_0^\infty{}_n\, \bar{\sigma}_n \vartheta^n, \quad \bar{S}'_{ik} \equiv \frac{\partial^2 \bar{S}'}{\partial q_i\, \partial q_{0k}},$$

on a

$$\bar{D} = \left(\frac{m_0}{\vartheta}\right)^4 \left\{ 1 + \frac{\vartheta}{m}\sum_1^4{}_i\, \bar{S}'_{ii} + \left(\frac{\vartheta}{m}\right)^2 \sum_{i,k}^{\binom{4}{2}} \begin{Vmatrix} \bar{S}'_{ii} & \bar{S}'_{ik} \\ \bar{S}'_{ki} & \bar{S}'_{kk} \end{Vmatrix} + \right.$$

$$\left. + \left(\frac{\vartheta}{m}\right)^3 \sum_{i,k,l}^{\binom{4}{3}} \begin{Vmatrix} S'_{ii} & S'_{ik} & S'_{il} \\ S'_{ki} & S'_{kk} & S'_{kl} \\ S'_{li} & S'_{lk} & S'_{ll} \end{Vmatrix} + \left(\frac{\vartheta}{m}\right)^4 \begin{Vmatrix} S'_{11} \cdots S'_{14} \\ S'_{41} \cdots S'_{44} \end{Vmatrix} \right\} = \left(\frac{m_0}{\vartheta}\right)^4 \left\{1 + \frac{\vartheta}{m}\bar{F}\right\}. \tag{54}$$

On a ainsi construit l'approximation cherchée

$$K_{F\cdot c} = \frac{1}{2\, m_0\, c\, \hbar (2\pi i)^2}\, \bar{D}^{1/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\bar{S} + i\bar{\Phi}\right\}, \tag{55}$$

où $\bar{S}$, $\bar{D}$, $\bar{\Phi}$ sont donnés par les équations (26), (54) et (53). Remarquons que $\bar{\Phi}$ est complexe

$$\bar{\Phi} = \frac{e}{2mc}\int M\, d\vartheta' = \frac{e}{2mc}\left[\left(\vec{\sigma}', \int_0^\vartheta \vec{H}\, d\vartheta'\right) + i\left(\vec{\alpha}, \int_0^\vartheta d\vartheta' \vec{E}\right)\right] = \bar{\Phi}_1 + i\,\bar{\Phi}_2$$

et que l'on peut exprimer $Q = I\cdot \exp i\, \bar{\Phi} = I\cdot \exp i\, \bar{\Phi}_1 \cdot \exp - \bar{\Phi}_2$ sous forme rationnelle

$$Q = \left\{\cos|\bar{\Phi}_1|\cdot I + i\frac{\bar{\Phi}_1}{|\bar{\Phi}_1|}\sin|\bar{\Phi}_1|\right\}\left\{I\cdot Ch\,\bar{\Phi}_2 - \frac{\bar{\Phi}_2}{|\bar{\Phi}_2|}\, Sh\,|\bar{\Phi}_2|\right\},$$

cette manière d'écrire étant plus adéquate que la manière symbolique de (54). Il faut encore déterminer la limite ϑ_1 de ϑ au-dessous

de laquelle $K_{F.c}$ est une bonne approximation de K_F exact. Il est commode d'adopter textuellement les mêmes conventions que dans le cas non relativiste et de poser la condition ainsi

$$\vartheta \frac{\hbar^2}{2\,m_0} \frac{\Box\sqrt{D}}{\sqrt{D}} \ll \bar{S}' = \bar{S}_{\text{p.l.}} - \bar{S};$$

il vient alors

$$\vartheta_1 = \frac{2\,m_0}{\hbar}\,\lambda^2 \tag{56}$$

avec

$$\lambda^2 = \sqrt{\frac{\bar{S}_0}{\Box\cdot\left(\frac{\partial}{\partial q_\lambda}, \frac{\partial}{\partial q_{0\lambda}}\right)\bar{S}_0}} \quad \text{et} \quad \bar{S}_0 = \int_0^1 du\; x_\lambda\, \Phi_\lambda(q_{0_\nu} + x_\nu u)\,.$$

Dans le cas particulier de forces homogènes: $F_{\mu\nu} = \text{const.}_{\mu\nu}$, $\lambda = \infty$, ϑ n'est pas limité supérieurement; c'est le seul cas avec celui d'une particule libre où l'on peut exprimer $\bar{S}$ donc aussi K_F sous forme finie. Dans le cas général, ϑ_1 est bien une mesure de l'inhomogénéité des forces. Revenons à l'équation (50). En y substituant $K_{F.c}$ de (55) à K_F et en intégrant sur ϑ, on pourra déterminer l'approximation correspondante de K_1, c'est-à-dire exacte jusqu'aux termes en h^2; puis on formera celle de K avec l'équation (44) et enfin celle de $\mathfrak{K}$ avec l'équation (42). Cette méthode est féconde, elle possède l'avantage d'être valable pour des arguments de $K(1,0)$, situés jusque sur le cône caractéristique $u^2 = 0$.

On va développer une seconde méthode qui aura l'avantage d'être plus directe que la précédente, mais qui ne sera pas applicable pour des arguments se situant sur le cône caractéristique. On part de l'équation

$$\Lambda(1)\; K_1(1,0) = 0 \tag{36.1}$$

où, répétons-le, K_1 est une fonction continue possédant une singularité non essentielle au point $1 = 0$, et l'on cherche son approximation semi-classique directement par l'essai

$$K_{1c}(1,0) = R \exp \frac{i}{\hbar}\, S(1,0)\,.$$

Introduisons cet essai dans (36.1), il vient

$$\begin{aligned} \Lambda\, K_{1c}(1,0) = \Big\{ &(\pi_\lambda^2 + \mathrm{m}_0^2 c^2)\, K_{1c} + \\ &+ \frac{\hbar}{i}\left[2\,\pi_\lambda \frac{\partial R}{\partial q_\lambda} + \frac{\partial \pi_\lambda}{\partial q_\lambda}\cdot R - i\frac{e}{c}\, M R\right] e^{\frac{i}{\hbar} S(1,0)} + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \Box R\cdot e^{\frac{i}{\hbar} S} \Big\}. \end{aligned} \tag{57}$$

Le coefficient de h^0 annulé est l'équation (19) de l'action relativiste,

dont les solutions qui nous conviennent sont précisément les actions S^+ et S^- données par les équations $(21)_{+,-}$. On va mettre l'approximation K_{1c} sous la forme

$$K_{1c} = C^+ K_{1c}^+ + C^- K_{1c}^-$$

où les constantes C^+ et C^- seront déterminées plus bas en traitant un cas particulier, de façon à ce que K_{1c} soit bien l'approximation de la fonction de RIEMANN K_1. Pour alléger l'écriture, on va continuer les calculs avec l'essai général sans indice en nous réservant le droit de spécifier au moment voulu les deux solutions fondamentales. Pour résoudre l'équation obtenue en annulant le coefficient de h, il convient de poser

$$R \sim \sqrt{D} \cdot Q\,,$$

le premier terme étant un scalaire et le second une matrice responsable des termes provenant du spin; il vient alors:

$$\frac{1}{\sqrt{D}}\left(\frac{\partial}{\partial q_\lambda}(\pi_\lambda D)\right)\cdot Q + 2\sqrt{D}\left(\pi_\lambda \frac{\partial Q}{\partial q_\lambda} - \frac{e\,i}{2\,c} M\cdot Q\right) = 0 \qquad (58)$$

et l'on exige que les deux (..) s'annulent séparément, soit:

$$\frac{\partial}{\partial q_\lambda}(\pi_\lambda D) = 0 \qquad (58)'$$

$$\pi_\lambda \frac{\partial Q}{\partial q_\lambda} - i\,\frac{e}{2\,c} M Q = 0\,. \qquad (58)''$$

Résolvons la première. Nous n'avons pas trouvé pour D de solution analogue à celle de VAN HOVE; toutefois, S étant connue sous forme d'une série de puissances de e, il convient de supposer un tel développement pour D, ce qui nous permettra de résoudre (58)′ par récurrence. Posons

$$D = \sum_0^\infty D^n \qquad D_n \sim e^n\,,$$

avec

$$S = \sum_0^\infty S_n \qquad \pi_\lambda = \sum_0^\infty \pi_\lambda^n \qquad \pi_\lambda^n \sim e^n$$

formons le produit $(\pi_\lambda \cdot D)$ en groupant les termes de même puissance en e; il vient

$$\frac{\partial}{\partial q_\lambda}\left((\Sigma\,\pi_\lambda^n)\,(\Sigma\,D^n)\right) = \frac{\partial}{\partial q_\lambda}\sum_0^\infty{}_n\left(\sum_0^n{}_\nu\,\pi_\lambda^\nu\,D_{n-\nu}\right) = 0\,.$$

Cette équation devant être identiquement satisfaite par rapport à e, on est conduit à écrire le système:

$$\frac{\partial}{\partial q_\lambda}(\pi_\lambda^0 D_0) = 0 \qquad \frac{\partial}{\partial q_\lambda}(\pi_\lambda^0 D_1) = -\frac{\partial}{\partial q_\lambda}(\pi_\lambda^1 D_0)$$

$$\frac{\partial}{\partial q_\lambda}(\pi_\lambda^0 D_n) = -\frac{\partial}{\partial q_\lambda}\left(\sum_1^n{}_\nu\, \pi_\lambda^\nu D_{n-\nu}\right),$$

que l'on peut résoudre par récurrence. La première équation est celle que l'on obtient dans le cas d'une particule libre; D_0 doit être fonction de l'invariant s. Avec

$$\pi_\lambda^0 = \frac{\partial}{\partial q_\lambda} S_0 = \pm i\, m_0\, c\, \frac{x_\lambda}{s} \equiv \varepsilon\, m_0\, c\, \frac{x_\lambda}{s}, \qquad \varepsilon = \pm i$$

il vient

$$\frac{\partial}{\partial q_\lambda}\left(\frac{x_\lambda}{s} D_0\right) = 0 \quad \rightarrow \quad D_0 = \frac{1}{s^3}. \tag{59.0}$$

Dans le cas susdit $D_1 = \ldots = D_n = \ldots = 0$; dans le cas général, les D_n répondent de la perturbation due aux champs extérieurs; si l'on écrit

$$D = \Sigma D_n = D_0\left(1 + \Sigma \frac{D_n}{D_0}\right) = D_0 \cdot D'$$

D' doit être une fonction régulière de x. Dans ces conditions on peut aisément intégrer les D_n. On a:

$$\frac{\partial}{\partial q_\lambda}(\pi_\lambda^0 D_n) = \varepsilon\, \frac{m_0\, c}{s}\, \frac{1}{u^3}\, \frac{d}{du}(u^3 D_n) = y_n$$

d'où

$$D_n = \frac{s}{\varepsilon\, m_0\, c} \int_0^1 du\, u^3\, y_n(u);$$

ainsi

$$\underline{D_1 = \frac{1}{\varepsilon\, m_0\, c\, s^2} \int_0^1 du\, \frac{e}{c}\left(\frac{\partial \chi_\lambda}{\partial q_\lambda}\right)_{/\, q = q_0 + x \cdot u}} \tag{59.1}$$

et

$$\underline{D_n = -\frac{s}{\varepsilon\, m_0\, c} \int_0^1 du\, u^3 \left[\frac{\partial}{\partial q_\lambda}\left(\sum_1^n{}_\nu\, \pi_\lambda^\nu D_{n-\nu}\right)\right]_{/\, q = q_0 + x \cdot u}}. \tag{59.n}$$

Pour discuter la convergence de la série obtenue, on utilise l'expression

$$s = i\, c\, \Theta \quad \varepsilon = \pm i; \; \frac{D_n}{D_0} \sim \left(\frac{\pm e\, \Theta}{m_0\, c} F\right)^n \quad \text{où} \quad F \approx \begin{pmatrix} \vec{H}, i\vec{E} \\ i\vec{E}, \vec{H} \end{pmatrix}$$

*

et l'on est ramené à un cas connu avec la différence que

$$\Theta = \overset{+}{\sqrt{\tau^2 - \frac{\vec{x}^2}{c^2}}}$$

a pris la place de τ. Quant à l'équation (58)'' pour la matrice Q, il vient en posant formellement $Q = \exp i\,\varphi(1,0)$

$$\pi_\lambda \frac{\partial \varphi}{\partial q_\lambda} - \frac{e}{c} M(q) = 0 \quad \text{et} \quad \pi_{\lambda_0} \frac{(-)\partial \varphi}{\partial q_{\lambda_0}} - \frac{e}{c} M(q_0) = 0;$$

$\varphi(1,0)$ est une fonction régulière et $\varphi(0,0) = 0$. Ces conditions déterminent univoquement la solution que l'on imagine développée en une série de puissances de e

$$\varphi = \sum_1^\infty \varphi_n \qquad \varphi_n \sim e^n .$$

Introduisons ce développement et celui de π_λ dans l'équation ci-dessus; en annulant les termes de même puissance de e, on obtient le système

$$\varepsilon\, m_0\, c \frac{x_\lambda}{s} \frac{\partial \varphi_1}{\partial q_\lambda} = \frac{e}{2c} M$$

$$\varepsilon\, m_0\, c \frac{x_\lambda}{s} \frac{\partial \varphi_2}{\partial q_\lambda} = -\pi_\lambda^1 \frac{\partial \varphi_1}{\partial q_\lambda}$$

$$\varepsilon\, m_0\, c \frac{x_\lambda}{s} \frac{\partial \varphi_n}{\partial q_\lambda} = -\sum_1^{n-1}{}_\nu\, \pi_\lambda^\nu \frac{\partial \varphi_{n-\nu}}{\partial q_\lambda} .$$

Les conditions prescrites excluant les solutions du système homogène (singulières pour $x_\lambda = 0$) on a les solutions:

$$\varphi_1 = \frac{e}{c} \frac{s}{\varepsilon\, m_0\, c} \int_0^1 du\, M(u) = \pm \frac{\Theta e}{2\, m_0\, c} \left[\left(\vec{\sigma}' \int_0^1 \vec{H}(u)\, du \right) + i \left(\vec{\alpha} \int_0^1 \vec{E}\, du \right) \right] \tag{60.1}$$

$$\varphi_2 = -\frac{s}{\varepsilon\, m_0\, c} \int_0^1 du \left(\pi_\lambda^1 \frac{\partial \varphi_1}{\partial q_\lambda} \right) \tag{60.2}$$

$$\varphi_n = -\frac{s}{\varepsilon\, m_0\, c} \int_0^1 du \left[\sum_1^n{}_\nu\, \pi_\lambda^\nu \frac{\partial \varphi_{n-\nu}}{\partial q_\lambda} \right]_{q = q_0 + x\, u} \quad |\varphi_n| \sim \left(\frac{\pm e\, \Theta\, |M|^n}{2\, m_0\, c} \right). \tag{60.n}$$

De l'équation (36.1), nous avons donc les deux solutions indépendantes semi-classiques, c'est-à-dire exactes jusqu'aux termes en h^2 non-compris:

$$K_{1\cdot c}^+ = \sqrt{D^+} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S^+ + i\Phi^+ \right); \quad K_{1\cdot c}^- = \sqrt{D^-} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S^- + i\varphi^- \right) \tag{61}$$

où les actions S^+, S^- (correspondant aux énergies + et —), les densités D^+, D^-, et les phases dues au spin φ^+, φ^-, sont données respectivement par les systèmes d'équations (21), (59) et (61) où l'on pose $\varepsilon = +i, -i$. Remarquons que la phase φ est complexe

$$\varphi = \varphi_1 + i\,\varphi_2; \qquad \varphi_1 = \varphi_1\big((\vec{\sigma}', \vec{H})\big) \qquad \varphi_2 = \varphi_2\big((\vec{\alpha}, \vec{E})\big)$$

où φ_1 est linéaire en σ' et ne contient qu'elle, et φ_2 linéaire en $\vec{\alpha}$ et ne contient que cette matrice; on peut mettre la matrice $Q = \exp i\varphi$ sous la forme plus adéquate:

$$Q = \left\{ \cos|\varphi_1|\cdot I + i\frac{\varphi_1}{|\varphi_1|}\sin|\varphi_1| \right\} \left\{ Ch\,|\varphi_2|\cdot I - \frac{\varphi_2}{|\varphi_2|}\,Sh\,|\varphi_2| \right\}.$$

L'approximation semi-classique à la fonction de RIEMANN est donnée par

$$K_{1\cdot c} = C^+ K^+_{1\cdot c} + C^- K^-_{1\cdot c}$$

où les constantes d'intégration sont encore à déterminer, ce qu'on va faire dans ce qui suit. La question fondamentale qui se pose maintenant est: dans quel intervalle de temps Θ les approximations (61) sont-elles utilisables?

Un premier test nous est fourni par le cas d'une particule libre où, au contraire du cas non relativiste, K^{+-}_{1c} n'est pas la solution exacte K^{+-}_1. (61) donne:

$$K^+_{1\cdot c} = \left(\frac{1}{i\,c\,\Theta}\right)^{3/2} \exp -\frac{i}{\hbar}\,m_0\,c^2\,\Theta \qquad K^-_{1\cdot c} = \left(\frac{-1}{i\,c\,\Theta}\right)^{3/2} \exp +\frac{i}{\hbar}\,m_0\,c^2\,\Theta$$

et pour juger de la validité de l'approximation, on peut utiliser le critère suivant: il faut que le terme en h^2 de (57)

$$\hbar^2\frac{\Box R}{R} \ll m_0^2\,c^2; \qquad R = \frac{1}{s^{3/2}} \qquad \frac{\Box R}{R} = -\frac{3}{4}\cdot\frac{1}{S^2} = +\frac{3}{4\,c^2\,\Theta^2}$$

$$\frac{3}{4}\,\frac{\hbar^2}{c^2\,\Theta^2} \ll m_0^2\,c^2 \;\rightarrow\; \Theta \gg \frac{\hbar}{m_0\,c^2} = \Theta_0, \quad c\,\Theta \gg \lambda_0 = \frac{1}{\varkappa} \qquad (62)$$

Θ est donc limité inférieurement! On obtient plus vite le même résultat en comparant $K^{+-}_{1\cdot c}$ au développement de K exact:

$$K_{\text{as}} = K_{1\,\text{as}} = -\frac{m}{4\pi\hbar u}\frac{1}{\sqrt{2\pi\varkappa u}}\left[(-i)^{3/2}\,e^{-i\varkappa u} + (i)^{3/2}\,e^{+i\varkappa u} + 0\left(\frac{1}{\varkappa u}\right)\right] \qquad (43_{\text{as}})$$

qui est valable pour

$$\varkappa u \gg 1 \;\rightarrow\; \Theta \gg \frac{\hbar}{m_0\,c^2} \qquad u = c\,\Theta\,.$$

Cette comparaison nous permet de fixer les constantes d'intégration C^+ et C^-; on trouve

$$C^+ = -\left(\frac{m\hbar}{8\pi^3 c}\right)^{1/2} \qquad C^- = i\left(\frac{m\hbar}{8\pi^3 c}\right)^{1/2}.$$

Enfin, d'après la définition de K

$$K(1,0) = K_1(1,0)\ \varepsilon(u^2) + K_2(1,0)\ \delta(u^2) = K_1 \text{ pour } u > 0 \tag{44}$$

on a donc l'approximation sous forme définitive

$$\underline{K_c = K_{1c} = -\left(\frac{m\hbar}{8\pi^3 c}\right)^{1/2}\left[\sqrt{D^+}\, e^{\frac{i}{\hbar}S^+ + i\varphi^+} - i\sqrt{D^-}\, e^{\frac{i}{\hbar}S^- + i\varphi^-}\right].} \tag{63}$$

Il nous reste à déterminer la limite Θ_1 de Θ au-dessous de laquelle l'approximation (63) est une bonne approximation du noyau exact K. On cherche à formuler un critère qui fournisse un résultat sous une forme invariante. On est naturellement conduit à utiliser la formule (56) donnant la limite ϑ_1 et à introduire Θ en exprimant $\vartheta = \vartheta(\Theta)$ au moyen de l'équation (22.2) $\partial\overline{S}/\partial\vartheta = 0$, ou bien de la définition

$$\vartheta = \int_0^\tau \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}\, dt.$$

Désirant établir une *règle* valable en ordre de grandeur, on se contentera de la première approximation qui donne $\vartheta \approx \Theta$. La formule (63) est donc utilisable dans l'intervalle

$$\frac{\hbar}{m_0 c^2} = \Theta_0 \ll \Theta = \sqrt[+]{\tau^2 - \frac{\overline{x}^2}{c^2}} \ll \Theta_1 \approx \vartheta_1 = \frac{2 m_0}{\hbar}\lambda^2. \tag{64}$$

Nous avons traité jusqu'ici le cas des particules douées de spin $^1/_2$. Traitons brièvement le cas du spin 0. M étant nul, il suffit de supprimer dans toutes les formules dérivées la matrice Q ou $\overline{Q}$. On a en particulier:

$$\underline{K^{\mathrm{I}}_{F\cdot c} = \frac{1}{2 m_0 c \hbar (2\pi i)^2}\sqrt{\overline{D}}\cdot\exp\left(\frac{i}{\hbar}\overline{S}\right)} \tag{55$_{\mathrm{I}}$}$$

$$\underline{K^{\mathrm{I}}_c = K^{\mathrm{I}}_{1\cdot c} = -\left(\frac{m\hbar}{8\pi^3 c}\right)^{1/2}\left[\sqrt{D^+}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S^+\right) - i\sqrt{D^-}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S^-\right)\right]} \tag{63$_{\mathrm{I}}$}$$

et la formule (56) donnant ϑ_1 demeure inchangée.

En résumé, on emploiera la première méthode, qui utilise la représentation en fonction du temps propre, pour des valeurs de Θ plus petites ou de l'ordre de Θ_0; et la seconde méthode pour

des valeurs de Θ satisfaisant la règle (64). Notons que l'existence même d'un intervalle implique:

$$\frac{\hbar}{m_0 c^2} = \Theta_0 \ll \quad \ll \Theta_1 = \frac{2 m_0}{\hbar} \lambda^2$$

ou bien

$$1 \ll \ll \frac{2 m_0^2 c^2}{\hbar^2} \lambda^2 = 2 \frac{\lambda^2}{\lambda_0{}^2} \rightarrow 1 \ll \frac{\lambda}{\lambda_0}$$

ce qu'on peut interpréter, en disant que la variation des forces, mesurée par λ, doit être faible sur une distance de l'ordre de λ_0, longueur d'onde de Compton; cette condition fixe donc une limite supérieure à l'inhomogénéité des forces, limite au-dessus de laquelle l'emploi des noyaux semi-classiques n'a pas de sens.

Si l'on passe déductivement aux cas non relativistes

$$\lim_{c \to \infty} \Theta_0 = 0 \quad \ll \lim \Theta = \tau \quad \ll \frac{2 m}{\hbar} \lambda^2$$

on retrouve la formule (12) et dans ces cas, il n'y a qu'une méthode que nous avons développée en détail dans ce travail.

Conclusion.

Le théorème démontré sous III attribuant à K_c^0 seul un rôle prédominant, ce noyau donné dans les cas les plus variés par les équations (1′, 28, 33, 55, 63, 55.I, 63.I) est l'instrument d'une méthode générale de traitement des phénomènes non stationnaires, méthode applicable dans le cadre fixé par les règles (12), (56) et (64).

Remerciements.

Que notre maître Monsieur Pauli, Professeur, veuille trouver ici l'expression de notre vive gratitude pour l'intérêt constant qu'il a manifesté pour ce travail et pour les discussions fréquentes dont il nous a fait bénificier. Nos remerciements s'adressent également à Monsieur A. Mercier, Professeur, pour sa généreuse bienveillance et à MM. Dr Schafroth et Dr Thellung pour leur dévouement et leurs suggestions fructueuses. Enfin nous remercions le Battelle Memorial Institute pour l'aide apportée à la publication de ce travail.