



HAL
open science

Ondes de matière dans des potentiels périodiques en temps : étude semi-classique

Pipa Storey

► **To cite this version:**

Pipa Storey. Ondes de matière dans des potentiels périodiques en temps : étude semi-classique. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 1996. Français. NNT: . tel-00011911

HAL Id: tel-00011911

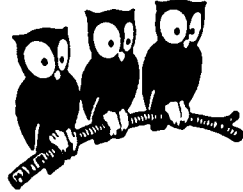
<https://theses.hal.science/tel-00011911>

Submitted on 10 Mar 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE
DE L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE



THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS VI
spécialité: Physique Quantique

présentée par
Elizabeth Pippa STOREY

pour obtenir le titre de
Docteur de l'Université Paris VI

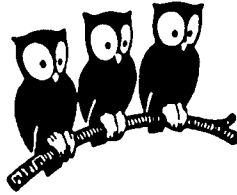
Sujet de la thèse:

**Ondes de matière dans des potentiels périodiques en temps :
étude semi-classique**

Soutenue le 13 décembre 1996 devant le jury composé de :

MM. Yvan CASTIN,
Jean-Yves COURTOIS,
Claude FABRE,
Christian MINIATURA,
Klaus MØLMER, Rapporteur
Andrew STEANE, Rapporteur
Claude COHEN-TANNOUDJI, Directeur de Thèse

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE
DE L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE



THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS VI
spécialité: Physique Quantique

présentée par
Elizabeth Pippa STOREY

pour obtenir le titre de
Docteur de l'Université Paris VI

Sujet de la thèse:
**Ondes de matière dans des potentiels périodiques en temps :
étude semi-classique**

Soutenue le 13 décembre 1996 devant le jury composé de :

MM. Yvan CASTIN,
Jean-Yves COURTOIS,
Claude FABRE,
Christian MINIATURA,
Klaus MØLMER, Rapporteur
Andrew STEANE, Rapporteur
Claude COHEN-TANNOUDJI, Directeur de Thèse

Table des matières

Introduction générale	1
1 Présentation du problème	5
Introduction	5
1.1 Approches existantes	6
1.1.1 Simulation numérique	6
1.1.2 Approximation de Born	9
1.1.3 La méthode de Floquet et l'atome habillé	12
1.1.4 La méthode du réseau de phase mince	14
1.2 Considérations expérimentales	17
1.2.1 Réalisation expérimentale	17
1.2.2 Calcul des paramètres du modèle	19
1.2.3 Pertes dues à l'émission spontanée	21
1.2.4 Effet du bruit expérimental	22
Conclusion	24
2 La méthode d'intégrale de chemin	25
Introduction	25
2.1 Le propagateur de Feynman	25
2.1.1 Définition	25
2.1.2 Idées menant à la formulation d'intégrale de chemin	26
2.1.3 Obtention de la formulation d'intégrale de chemin	28
2.2 La limite semi-classique	31
2.2.1 Analogie avec la construction de Huygens	31
2.2.2 Les rayons optiques	33
2.2.3 Les trajectoires classiques	34
2.2.4 La forme BKW du propagateur	34
2.3 Propagateurs généralisés	36
2.3.1 Propagateurs dépendant de l'impulsion	36
2.3.2 Propagateurs dépendant de l'énergie	40
2.4 Calcul de l'amplitude semi-classique	41
2.4.1 Démonstration directe à partir de l'intégrale de chemin	42
2.4.2 Interprétation en termes d'un ensemble classique	48
2.5 Trajectoires complexes	51
2.5.1 L'onde évanescente	53
2.5.2 Réflexion par un puits de potentiel	54

2.5.3	Traitement géométrique de la diffraction	57
	Conclusion	59
3	Caustiques	61
	Introduction	61
3.1	La méthode de la phase stationnaire	61
3.1.1	Exemple d'un calcul par la méthode de la phase stationnaire	62
3.1.2	Observations sur la méthode de la phase stationnaire	64
3.1.3	Extension de la méthode de la phase stationnaire	65
3.2	Concepts de la théorie des catastrophes	66
3.2.1	Stabilité topologique	67
3.2.2	Systèmes avec symétrie	74
3.3	Approximations uniformes	75
3.3.1	Le choix d'une forme générique pour la phase	75
3.3.2	Obtention heuristique des approximations uniformes	78
3.3.3	Comparaison de résultats	84
3.4	La détermination des indices de Maslov	86
3.4.1	Variation des indices au cours de l'évolution du système	86
3.4.2	Obtention des indices à partir du diagramme espace phase	92
	Conclusion	94
	Conclusion générale	95
A	Normalisation des états propres d'énergie	96
B	Calcul d'un déterminant par récurrence	101
C	Amplitudes semi-classiques	104
C.1	Le propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$	104
C.2	Le propagateur $\bar{\bar{K}}(x_f, t_f; p_i, t_i)$	106
D	Réflexion par un puits de potentiel	108
D.1	Traitement de Stokes	108
D.1.1	Point de rebroussement d'ordre un	108
D.1.2	Puits de potentiel	111
D.2	Calcul d'un intégrale de contour	114
E	Définitions de stabilité topologique	117
F	Le théorème de Thom	119
G	Forme générique de l'amplitude	121
	Bibliographie	124

Introduction générale

Les développements récents dans le refroidissement laser ont permis d'atteindre des températures au-dessous de la 'limite' de recul, c'est-à-dire des dispersions en impulsion atomique plus faibles que l'impulsion d'un seul photon. A de telles températures la longueur d'onde de de Broglie de l'atome est plus grande que la longueur d'onde de la lumière, et peut être considérée comme macroscopique. La réalisation de longueurs d'ondes de de Broglie aussi importantes a redoublé l'intérêt porté à l'interférométrie atomique [1], analogue de l'interférométrie optique, mais où des ondes de matière jouent le rôle d'ondes lumineuses. Un autre développement qui a contribué à cet intérêt est la mise au point de composants d'optique atomique analogues aux miroirs, lentilles et lames séparatrices de l'optique traditionnelle.

Le point de départ du travail décrit dans ce mémoire est un problème de diffusion dans lequel un jet monocinétique d'atomes traverse un potentiel modulé périodiquement dans le temps. Le spectre d'énergie du jet sortant présente des bandes latérales séparées de l'énergie initiale par des multiples entiers de $\hbar\omega$, où ω est la fréquence angulaire de la modulation. Ce problème est une variante du miroir atomique vibrant [2], la différence étant que le système fonctionne en transmission plutôt qu'en réflexion.

Les situations physiques dans de telles expériences restent souvent proches de la limite classique, dans le sens que la longueur d'onde de de Broglie, bien que plus grande que la longueur d'onde de la lumière, reste petite devant les autres longueurs caractéristiques du problème, telles que les dimensions du potentiel. Dans ce régime le système se prête à une analyse par des techniques semi-classiques. Une telle approche permet d'éclairer le contenu physique mieux qu'une évolution numérique de l'équation de Schrödinger.

La limite semi-classique de la mécanique quantique est analogue à la limite des petites longueurs d'ondes de l'électromagnétisme. De même que la propagation d'ondes électromagnétiques peut être décrite en termes de rayons optiques, l'évolution d'états quantiques peut être décrite en termes de trajectoires de particules classiques. Dans les deux cas il faut une famille de trajectoires pour décrire le système. En mécanique quantique, la multiplicité de trajectoires vient du principe d'incertitude, puisque pour chaque variable de l'état quantique qui est définie précisément, la variable conjuguée est entièrement inconnue. Représenter un état quantique nécessite donc un ensemble de particules classiques couvrant toutes les valeurs possibles des variables conjuguées. Par exemple, pour décrire un système dont l'impulsion initiale est bien définie il faut un ensemble de particules classiques dont l'impulsion est identique mais dont les positions prennent toutes les valeurs possibles. Pour le problème considéré dans cette thèse, il est commode d'utiliser un ensemble de particules qui entrent dans le potentiel avec une énergie identique mais à des instants différents.

On peut étendre l'analogie entre l'optique et la mécanique quantique en considérant la phase et l'amplitude du champ électromagnétique et celles de la fonction d'onde. Dans la limite semi-classique de la mécanique quantique, la phase de la fonction d'onde en un point donné est

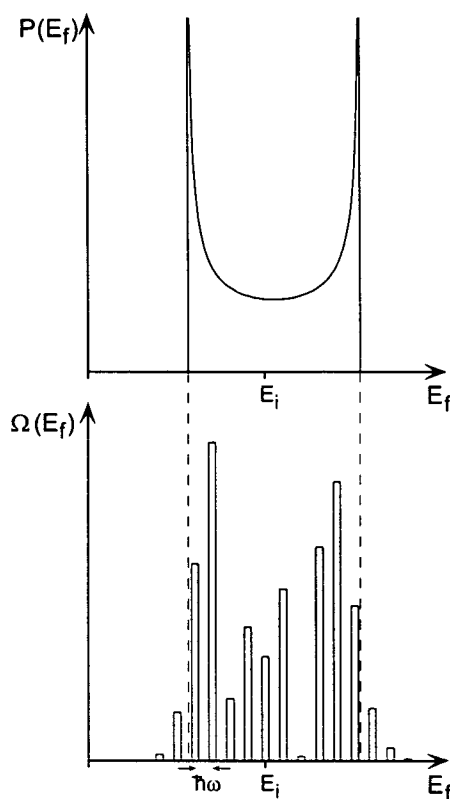
déterminée par l'action le long de la trajectoire classique qui arrive en ce point; dans le langage de l'optique géométrique, la trajectoire classique correspond donc aux rayons lumineux et l'action à la longueur de chemin optique. Tandis que l'intensité lumineuse est donnée par la densité de rayons, le module carré de la fonction d'onde est proportionnel à la densité de trajectoires classiques. Dans les deux cas, des effets d'interférence se produisent aux points où arrivent plus d'une trajectoire. Pour sommer les contributions des différentes trajectoires il est important de déterminer leurs phases relatives (ou plus généralement leurs poids complexes), et de traiter correctement les caustiques, c'est-à-dire les points de focalisation des trajectoires, en lesquels les densités de chemins deviennent infinies.

Cette approche s'applique au problème de diffusion considéré dans ce mémoire, bien que dans ce cas on s'intéresse au spectre d'énergie plutôt qu'à la fonction d'onde. L'énergie finale de chaque particule de l'ensemble s'obtient en calculant sa trajectoire à travers le potentiel selon les équations de mouvement classiques. L'énergie finale dépend de l'instant auquel la particule est entrée dans le potentiel, et peut adopter classiquement une valeur quelconque dans une gamme continue avec une distribution de probabilité $P(E_f)$ (voir figure ci-dessous). Notons que cette distribution contient des caustiques aux limites de la gamme permise classiquement. La structure discrète du vrai spectre $\Omega(E_f)$ provient d'interférences entre des trajectoires qui traversent le potentiel à des instants séparés par des multiples d'une période temporelle du potentiel $2\pi/\omega$. La présence de bandes latérales dans la région interdite classiquement est un effet quantique analogue à l'effet tunnel. En utilisant un traitement correct des caustiques, l'approche semi-classique reproduit avec précision le spectre quantique, aussi bien dans la région permise que dans la région interdite.

Le problème des approximations semi-classiques ou des petites longueurs d'onde a été abordé sous plusieurs angles différents. Il englobe plusieurs branches des mathématiques, et s'applique à de nombreux domaines de la physique. Une approximation semi-classique des états propres d'énergie de l'équation de Schrödinger indépendante du temps a été obtenue indépendamment par Wentzel [3] et Brillouin [4] en 1926. Elle consiste en une somme de solutions propageant en sens opposés, dont la phase dépend de l'action classique, et dont l'amplitude contient le facteur $|p|^{-1/2}$, qui peut être interprété comme la racine carrée de la densité spatiale d'un jet de particules de flux constant en chaque point. L'approximation est valable sauf au voisinage des points de rebroussement classique du mouvement dans le potentiel, où l'impulsion p s'annule et la densité classique diverge. Ceci est analogue à l'échec de l'optique géométrique aux points focaux, où les rayons convergent et leur densité devient infinie. En obtenant une solution locale autour d'un point de rebroussement, Kramers [5] a calculé la phase relative avec laquelle il faut sommer les solutions se propageant vers la droite et vers la gauche. En utilisant une approximation asymptotique il a également estimé la valeur de la fonction d'onde exponentiellement décroissante dans la région interdite au-delà du point de rebroussement, où l'énergie potentielle excède l'énergie totale du système.

Une méthode plus générale pour obtenir les amplitudes complexes relatives des 'solutions BKW' a été inventée par Zwaan [6] en 1929 (et résumée par Langer [7]). Au moyen de sa 'méthode complexe', les régions séparées par des points de rebroussement sont reliées par un chemin dans le plan complexe des positions qui passe assez loin des points de rebroussement pour que les solutions BKW restent valables. Les formules de raccordement obtenues sont souvent suffisantes pour déterminer tous les facteurs d'amplitude et de phase avec lesquels il faut sommer les solutions BKW dans chaque région. La méthode ne résout pas pourtant le problème de la valeur de la fonction d'onde au voisinage des points de rebroussement.

La méthode BKW a été généralisée aux hamiltoniens dépendant du temps et à d'autres



Un jet d'atomes d'énergie initiale E_i entre dans un potentiel modulé périodiquement dans le temps. Après avoir traversé le potentiel la distribution classique d'énergie $P(E_f)$ des atomes est non nulle dans une région dite 'permise'. Dû à la périodicité de la modulation, le spectre exacte $\Omega(E_f)$ prend une forme discrète. Les bandes latérales se produisent aux énergies $E_f = E_i + n\hbar\omega$, et ont un poids exponentiellement décroissant dans la région interdite classiquement.

espaces de configuration en 1928 par Van Vleck [8]. Une analyse différente a été présentée par Dirac [9], qui a montré l'analogie entre l'équation sur l'amplitude de la fonction d'onde et l'équation de continuité d'un fluide compressible. Comme l'approximation BKW standard, cette méthode échoue aux caustiques, où elle prédit une amplitude infinie.

La formulation en termes d'intégrale de chemin de la mécanique quantique par Feynman en 1948 [10] a été suivie aussitôt par plusieurs articles obtenant la valeur semi-classique de l'intégrale de chemin. Le rôle prépondérant des trajectoires classiques apparaît explicitement dans la formulation de Feynman, puisque ce sont précisément les trajectoires classiques qui rendent l'action stationnaire, et donc contribuent le plus à l'intégrale de chemin. Morette [11] en 1951 a été la première à reproduire les résultats de Van Vleck à partir de l'approche d'intégrale de chemin. D'autres méthodes ont été publiées depuis (voir par exemple Papadopoulos [12]). Comme l'approximation BKW généralisée, ces méthodes échouent dans le voisinage des caustiques. Le problème de la phase de la solution (analogue au problème de raccordement de la méthode BKW standard) peut être résolu en faisant appel à un théorème dû à Morse [13, 14] concernant des aspects globaux du calcul de variations. Le résultat est que la phase est déterminée par un nombre entier nommé indice de Morse (ou indice de Maslov),

qui ne peut changer que lorsque la trajectoire traverse une caustique. Dans le cas général d'espaces de configuration arbitraires, Levit *et al.* [15] ont montré que le changement dépend du signe des dérivées secondes du hamiltonien à la caustique.

Le problème de l'obtention de solutions semi-classiques au voisinage des caustiques est résolu par la méthode de l'approximation uniforme. La méthode a été développée par deux approches complémentaires. La première, établie par Miller et Good [16] et Dingle [17] est une extension de la méthode BKW standard, où l'équation de Schrödinger exacte est remplacée par une équation qui conduit à la même structure de points de rebroussement, mais dont les solutions sont connues exactement. La deuxième approche, due à Chester *et al.* [18] et Berry [19], utilise une formulation intégrale, et est utile pour des systèmes dépendant du temps et des problèmes de diffusion. Près d'une caustique, où les expressions BKW généralisée échouent, il est possible de trouver une représentation intégrale du champ ondulatoire, analogue à la 'somme d'ondelettes' de Huygens et Fresnel, et qui reste finie à la caustique. Une méthode générale pour trouver de telles représentations intégrales a été donnée par Maslov [20]. Puisque l'intégrand contient une phase qui oscille rapidement, la contribution la plus importante à l'intégrale provient des points où la phase est stationnaire. Par un choix judicieux de la variable d'intégration, la phase peut être mise sous une forme canonique, d'une façon qui préserve la structure de points stationnaires. Les formes canoniques possibles ont été classifiées par Thom [21, 22], et constituent la base d'une branche de la topologie appelée la théorie des catastrophes. Comme les expressions BKW généralisées, les solutions obtenues par l'approximation uniforme ne dépendent que des trajectoires classiques du système. La méthode s'applique aussi bien à la région permise classiquement qu'à la région interdite, où les trajectoires sont complexes. Les résultats obtenus sont très précis dans la limite semi-classique.

Ces méthodes sont discutées en détail dans un excellent article de revue de Berry *et al.* [23]. Elles sont universelles de la même façon que la théorie des ondes est universelle, et trouvent leurs applications dans des domaines aussi variés que la physique atomique et moléculaire, l'optique, l'acoustique et la physique des vagues océaniques.

Le mémoire est divisé en deux parties parallèles et complémentaires. La première partie du manuscrit est une synthèse de matériel explicatif et d'autres méthodes et applications, qui a pour but de placer le travail dans le contexte des sujets mentionnés au-dessus, en particulier le formalisme d'intégrale de chemin et la théorie des catastrophes. L'intention n'est pas de fournir une présentation rigoureuse de chacun des sujets mais plutôt d'indiquer les relations entre eux, et de renvoyer le lecteur à des revues plus détaillées. L'application de méthodes semi-classiques au problème considéré est présentée en détail dans l'article qui constitue la seconde partie de la thèse. Il décrit en particulier une version de l'approximation uniforme adaptée aux problèmes périodiques. Les résultats s'appliquent à des systèmes qui présentent une périodicité spatiale ou temporelle.

Chapitre 1

Présentation du problème

Introduction

On cherche à calculer les poids des bandes latérales créées par l'interaction d'un faisceau atomique avec un puits de potentiel modulé périodiquement dans le temps. On limite l'analyse à une dimension, et on considère en particulier le potentiel

$$V(x, t) = \frac{1}{2} V_0(x) [1 - \sin(\omega t)], \quad (1.1)$$

où $V_0(x)$ est un profil localisé en position, supposé gaussien

$$V_0(x) = -V e^{-x^2/2\sigma^2} \quad (1.2)$$

et V est positif. Le système se caractérise par trois paramètres sans dimension

$$\hat{V} \equiv \frac{Vm}{p_i^2} \quad (1.3a)$$

$$\hat{\omega} \equiv \frac{\hbar\omega m}{p_i^2} \quad (1.3b)$$

$$\hat{\sigma} \equiv k\sigma \quad (1.3c)$$

où

$$k \equiv \frac{\omega m}{p_i}. \quad (1.4)$$

\hat{V} et $\hat{\omega}$ sont respectivement la profondeur du potentiel et la différence d'énergie entre des bandes latérales voisines, exprimées en unités de l'énergie initiale de l'atome. $\hat{\sigma}$ est la largeur du potentiel en unités de $1/k$, où $\hbar k = \delta p$ est la différence d'impulsion entre les bandes latérales au premier ordre en $\hat{\omega}$.

Ce chapitre présente quelques approches existantes pour obtenir les poids des bandes latérales, et explique la motivation pour un calcul semi-classique en termes d'intégrales de chemin. On discute aussi certains aspects de la réalisation expérimentale du système.

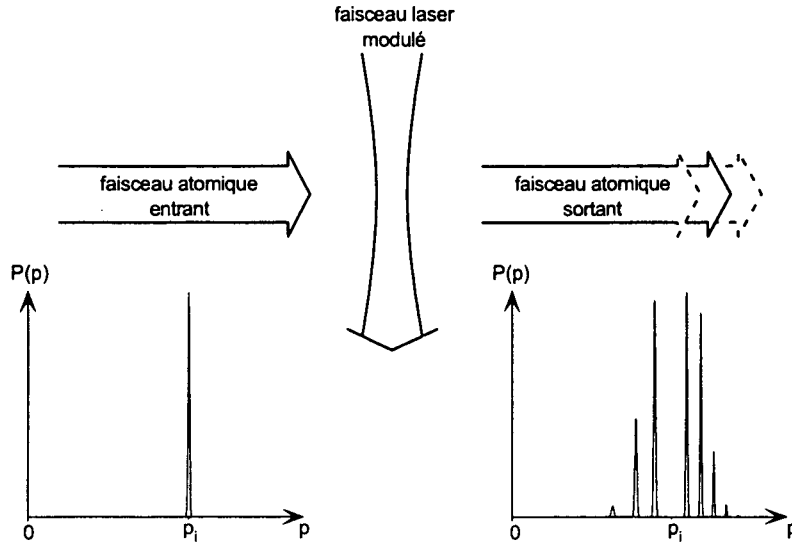


FIG. 1.1 – Le schéma de l'expérience. Des atomes d'impulsion bien définie traversent un faisceau laser dont l'intensité est modulée à la fréquence ω . La distribution d'impulsion des atomes sortant contient des bandes latérales aux impulsions $\sqrt{p_i^2 + 2mn\hbar\omega}$.

1.1 Approches existantes

Dans cette section je vais discuter l'application de quelques méthodes bien connues au calcul des bandes latérales. On commence par la simulation numérique de la fonction d'onde, qui est une méthode quantique, valable dans tous les régimes de paramètres du problème. On présente ensuite deux méthodes perturbatives: l'approximation de Born, et l'approche du réseau de phase mince. La méthode de Floquet est mentionnée brièvement, mais s'avère difficile à appliquer à ce système.

1.1.1 Simulation numérique

On peut calculer l'évolution de la fonction d'onde $\psi(x, t)$ en intégrant numériquement l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\psi(x, t), \quad (1.5)$$

où H est le hamiltonien

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x, t). \quad (1.6)$$

La fonction d'onde initiale $\psi(x, t_i)$ est un paquet d'ondes, situé en deça du potentiel, et dont la distribution d'impulsion est un pic étroit centré en p_i . L'évolution est déterminée jusqu'à ce que le paquet d'ondes, ayant interagi avec le potentiel, en soit sorti. Les poids des bandes latérales s'obtiennent alors en intégrant chacun des pics discrets apparaissant dans la distribution d'impulsion.

L'intégration de l'équation de Schrödinger est effectuée sur des pas de durée δt , en utilisant la technique de splitting. Puisque le hamiltonien dépend du temps, la méthode repose sur deux approximations. La première provient de l'utilisation d'une valeur constante pour le hamiltonien pendant chaque intervalle de temps. La deuxième résulte de la décomposition de l'opérateur d'évolution pour chaque intervalle en trois facteurs, de sorte que les termes d'énergie cinétique et d'énergie potentiel soient séparés. Les deux approximations sont correctes au second ordre en δt .

L'équation de Schrödinger possède la solution formelle

$$\psi(x, t_f) = T \left\{ \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt H(t) \right] \right\} \psi(x, t_i) \quad (1.7)$$

où T indique le T-produit (la mise des facteurs de chaque terme dans l'ordre chronologique). Numériquement il faut discrétiser l'évolution en intervalles de temps finis, et utiliser l'approximation

$$\psi(x, t + \delta t) \approx \exp \left[-\frac{i}{\hbar} H(t + \delta t/2) \delta t \right] \psi(x, t). \quad (1.8)$$

On peut facilement démontrer que l'erreur $\epsilon_1(\delta t)$ associé à l'approximation (1.8) est

$$\epsilon_1(\delta t) = \frac{\delta t^3}{4! \hbar^2} \left\{ 2 [H, \dot{H}] - i \hbar \ddot{H} \right\} \quad (1.9)$$

où \dot{H} et \ddot{H} sont respectivement les dérivées première et seconde du hamiltonien par rapport au temps, évaluées à l'instant t .

Pour chacun des termes (1.8), on peut utiliser la méthode de splitting, qui consiste à écrire l'opérateur d'évolution sous forme d'un produit de trois facteurs

$$e^{(A+B)\delta t} \approx e^{\frac{A}{2}\delta t} e^{B\delta t} e^{\frac{A}{2}\delta t}. \quad (1.10)$$

L'erreur $\epsilon_2(\delta t)$ associé à cette approximation est

$$\epsilon_2(\delta t) = \frac{\delta t^3}{4!} ([A, [A, B]] - 2[B, [B, A]]). \quad (1.11)$$

En remplaçant A et B par les opérateurs d'énergie cinétique et d'énergie potentielle respectivement, on obtient l'algorithme suivante pour calculer la fonction d'onde finale

$$\begin{aligned} \psi(x, t_f) \approx & e^{-\frac{ip^2}{2m\hbar} \frac{\delta t}{2}} e^{-iV(x, t_f - \delta t/2) \delta t / \hbar} e^{-\frac{ip^2}{2m\hbar} \delta t} \dots \\ & \dots e^{-iV(x, t_i + 3\delta t/2) \delta t / \hbar} e^{-\frac{ip^2}{2m\hbar} \delta t} e^{-iV(x, t_i + \delta t/2) \delta t / \hbar} e^{-\frac{ip^2}{2m\hbar} \frac{\delta t}{2}} \psi(x, t_i). \end{aligned} \quad (1.12)$$

Puisque les opérateurs qui contiennent le potentiel sont diagonaux en position, on les applique dans l'espace des positions. De même les opérateurs qui contiennent l'énergie cinétique sont appliqués dans l'espace des impulsions. Numériquement on bascule entre l'espace des positions et l'espace des impulsions entre chaque opération successive par une transformée de Fourier. Notons que cette méthode préserve exactement la normalisation de la fonction d'onde.

On peut estimer de la façon suivante la dimension des tableaux, le nombre de pas de temps, et donc le temps total requis pour effectuer le calcul. Si on utilise la position sans

dimension $\hat{x} = kx$ où k est défini dans l'équation (1.4), il faut que la valeur maximum de \hat{x} dans le tableau de position soit supérieure à

$$\hat{x}_{\max} \gg \hat{\sigma} \quad (1.13)$$

De même, en utilisant l'impulsion sans dimension $\hat{p} = p/p_i$, on trouve que la valeur maximum de \hat{p} dans le tableau d'impulsion doit être supérieure à

$$\hat{p}_{\max} > \sqrt{1 + \hat{V}} \quad (1.14)$$

Puisque \hat{p}_{\max} détermine la taille des divisions $\Delta\hat{x}$ du tableau de position

$$\hat{p}_{\max} \sim \frac{\hat{\omega}}{\Delta\hat{x}}, \quad (1.15)$$

on trouve que la dimension N des tableaux est donné par

$$N = \frac{\hat{x}_{\max}}{\Delta\hat{x}} \sim \frac{\hat{x}_{\max}\hat{p}_{\max}}{\hat{\omega}} \quad (1.16)$$

En insérant les valeurs de \hat{x}_{\max} et \hat{p}_{\max} on arrive à la condition

$$N \gg \frac{\hat{\sigma}\sqrt{1 + \hat{V}}}{\hat{\omega}}. \quad (1.17)$$

De même on peut estimer le nombre de pas de temps requis. En utilisant le temps sans dimension $\hat{t} = \omega t$ on trouve que le temps d'évolution est

$$\hat{t}_{\max} \gg \hat{\sigma} \quad (1.18)$$

Le pas de temps doit être suffisamment petit pour que les exposants des facteurs dans l'équation (1.12) soient très inférieurs à 1. En termes des paramètres sans dimension ceci implique

$$\Delta\hat{t} \ll \frac{\hat{\omega}}{1 + \hat{V}} \quad (1.19)$$

Le nombre de pas de temps est donc

$$N_t = \frac{\hat{t}_{\max}}{\Delta\hat{t}} \gg \frac{\hat{\sigma}(1 + \hat{V})}{\hat{\omega}} \quad (1.20)$$

Puisque le temps de calcul requis pour effectuer une transformée de Fourier sur un tableau de dimension N est proportionnel à $N \log_2 N$, on trouve que le temps total de calcul est

$$T \propto N_t N \log_2 N. \quad (1.21)$$

1.1.2 Approximation de Born

Dans le cas où les poids des premières bandes latérales sont faibles, on peut les calculer par la méthode de Born, en traitant comme une perturbation la partie du potentiel (1.1) qui dépend du temps. Le hamiltonien est divisé en deux termes de la façon suivante

$$H = H_0 + \epsilon V_1 \quad (1.22)$$

où V_1 est la perturbation, et H_0 est le hamiltonien non-perturbé

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{V_0(x)}{2} \quad (1.23a)$$

$$V_1 = -\frac{V_0(x)}{2} \sin(\omega t). \quad (1.23b)$$

Le paramètre ϵ est introduit dans le hamiltonien (1.22) pour tenir compte de l'ordre de la perturbation dans le calcul, et on posera $\epsilon = 1$ à la fin.

On suppose connus les états propres du hamiltonien non-perturbé, et on ne considère que les états non-liés, c'est-à-dire les états d'énergie positive $E_p = p^2/2m$. Pour chaque énergie E_p , il existe deux états propres de H_0 . Loin du potentiel ils ressemblent à des superpositions d'états propres d'impulsion $|p\rangle$ et $|-p\rangle$. Pour cette raison je les appelle $|\psi_p\rangle$ et $|\psi_{-p}\rangle$

$$H_0|\psi_{\pm p}\rangle = E_p|\psi_{\pm p}\rangle. \quad (1.24)$$

Pour $p > 0$, l'état $|\psi_p\rangle$ représente une particule incidente de la gauche avec l'énergie E_p , et $|\psi_{-p}\rangle$ est l'état d'une particule incidente de la droite. Si on normalise les états de telle façon que l'amplitude de l'onde plane incidente vaille $(2\pi\hbar)^{-1/2}$, les états propres de H_0 satisfont aux mêmes relations d'orthonormalité que les états propres d'impulsion (voir l'Annexe A)

$$\langle\psi_q|\psi_p\rangle = \delta(p - q). \quad (1.25)$$

Etant donnés les états propres non-perturbés, on cherche les solutions $|\phi_p(t)\rangle$ de l'équation de Schrödinger pour le hamiltonien perturbé

$$i\hbar|\dot{\phi}_p(t)\rangle = (H_0 + \epsilon V_1)|\phi_p(t)\rangle. \quad (1.26)$$

Si on développe $|\phi_p(t)\rangle$ en puissances du paramètre de perturbation ϵ

$$|\phi_p(t)\rangle = |\phi_p^0(t)\rangle + \epsilon|\phi_p^1(t)\rangle + \dots, \quad (1.27)$$

le terme d'ordre zéro $|\phi_p^0(t)\rangle$ est une solution de l'équation de Schrödinger pour le hamiltonien non-perturbé

$$i\hbar|\dot{\phi}_p^0(t)\rangle = H_0|\phi_p^0(t)\rangle. \quad (1.28)$$

On choisit la solution stationnaire

$$|\phi_p^0(t)\rangle = e^{-iE_p t/\hbar}|\psi_p\rangle \quad (1.29)$$

et on suppose que $p > 0$. On va s'intéresser en effet à une petite gamme d'impulsions p autour de p_i . Au premier ordre, l'équation de Schrödinger s'écrit comme

$$i\hbar|\dot{\phi}_p^1(t)\rangle = H_0|\phi_p^1(t)\rangle + V_1|\phi_p^0(t)\rangle, \quad (1.30)$$

dont la solution est

$$|\phi_p^1(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-iH_0(t-t')/\hbar} V_1(x, t') |\phi_p^0(t')\rangle. \quad (1.31)$$

où on prend la limite où le potentiel V_1 est branché et débranché très lentement. Supposant qu'à l'instant initial $t = -\infty$ le système est dans l'état propre $|\psi_p\rangle$ du hamiltonien non-perturbé, on cherche l'amplitude de probabilité $c_p(q)$ pour qu'il se trouve dans l'état $|\phi_q^0(t)\rangle = e^{-iE_q t/\hbar} |\psi_q\rangle$ à l'instant final $t = +\infty$

$$c_p(q) \equiv \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{iE_q t/\hbar} \langle \psi_q | \phi_p(t) \rangle - e^{i(E_q - E_p)t/\hbar} \langle \psi_q | \psi_p \rangle \quad (1.32)$$

$$\approx \epsilon \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{iE_q t/\hbar} \langle \psi_q | \phi_p^1(t) \rangle. \quad (1.33)$$

En insérant l'équation (1.29) dans (1.31), et en posant $\epsilon = 1$, on obtient

$$\begin{aligned} c_p(q) &\approx -\frac{V}{2i\hbar} \langle \psi_q | e^{-x^2/2\sigma^2} | \psi_p \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} dt' e^{i(E_q - E_p)t'/\hbar} \sin(\omega t') \\ &= \frac{V\pi}{2} \langle \psi_q | e^{-x^2/2\sigma^2} | \psi_p \rangle [\delta(E_q - E_p + \hbar\omega) - \delta(E_q - E_p - \hbar\omega)], \end{aligned} \quad (1.34)$$

qui s'écrit en termes d'impulsion comme

$$c_p(q) \approx C_p^q \left[\delta(p - \sqrt{q^2 + 2m\hbar\omega}) - \delta(p - \sqrt{q^2 - 2m\hbar\omega}) \right] \quad (1.35)$$

où

$$C_p^q = \frac{V\pi m}{2p} \langle \psi_q | e^{-x^2/2\sigma^2} | \psi_p \rangle. \quad (1.36)$$

Notons qu'on a omis les termes d'impulsion négative dans l'équation (1.35). Ceci est valable dans la limite perturbative si $p_i \gg \sqrt{2m\hbar\omega}$, parce qu'en ce cas le produit scalaire C_p^q de ces termes dans est négligeable.

Pour calculer le poids des premières bandes latérales, il faut considérer un état $|\phi(t)\rangle$ qui est initialement un paquet d'ondes

$$|\phi(-\infty)\rangle = \int dp \phi(p) |\psi_p\rangle, \quad (1.37)$$

où $\phi(p)$ est une distribution étroite, située autour de p_i . La probabilité pour que l'impulsion finale se trouve dans la petite gamme dp_f^\pm autour de p_f^\pm , où

$$p_f^\pm = \sqrt{p_i^2 \pm 2m\hbar\omega}, \quad (1.38)$$

est donc

$$\begin{aligned} dP^\pm &= dp_f^\pm \left| \langle \psi_{p_f^\pm} | \phi(+\infty) \rangle \right|^2 \\ &= dp_f^\pm \int dp'_i \int dp''_i \phi(p'_i) \phi^*(p''_i) \langle \phi_{p''_i}(+\infty) | \psi_{p_f^\pm} \rangle \langle \psi_{p_f^\pm} | \phi_{p'_i}(+\infty) \rangle \\ &\approx dp_f^\pm \int dp'_i \int dp''_i \phi(p'_i) \phi^*(p''_i) \left(C_{p''_i}^{p_f^\pm} \right)^* C_{p'_i}^{p_f^\pm} \delta(p'_i - p_i) \delta(p''_i - p_i) \\ &= dp_f^\pm |\phi(p_i)|^2 \left| C_{p_i}^{p_f^\pm} \right|^2. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Les poids des premières bandes latérales sont alors

$$I^\pm \approx \left| C_{p_i}^{p_f^\pm} \right|^2 \frac{dp_f^\pm}{dp_i}. \quad (1.40)$$

En calculant la valeur de dp_f^\pm/dp_i à partir de l'équation (1.38) on obtient

$$I^\pm \approx \frac{1}{p_i p_f^\pm} \left(\frac{V \pi m}{2} \right)^2 \left| \langle \psi_{p_f^\pm} | e^{-x^2/2\sigma^2} | \psi_{p_i} \rangle \right|^2, \quad (1.41)$$

qui est l'approximation de Born au premier ordre. En général il faut calculer le produit scalaire numériquement. Pourvu que la largeur du potentiel soit suffisamment grande par rapport à la longueur d'onde de de Broglie, on peut évaluer les fonctions d'ondes des états $|\psi_p\rangle$ en utilisant la méthode BKW. L'approximation (1.41) est en bon accord avec les résultats exacts dans le régime de faible diminution de la bande centrale (voir la Figure 1.2).

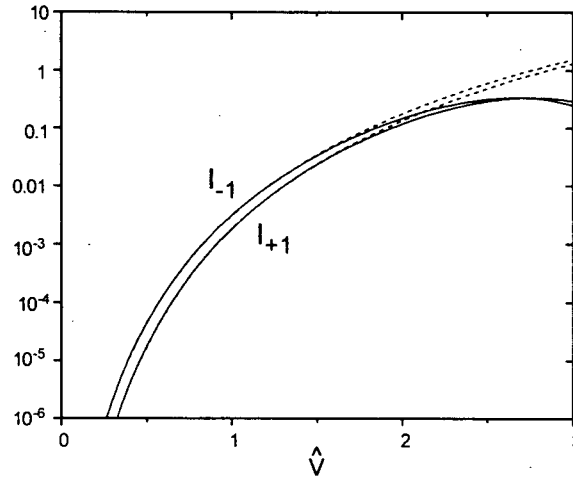


FIG. 1.2 - Les poids des premières bandes latérales $I_{\pm 1}$, calculés par la méthode de Born au premier ordre (pointillé), et comparés avec les poids exacts, obtenus par une évolution numérique de l'équation de Schrödinger (trait continu). La profondeur du potentiel \hat{V} est varié entre 0 et 3, et les autres paramètres sont fixés $\hat{\sigma} = 6.0$, $\hat{\omega} = 0.1$.

Si la profondeur du potentiel est beaucoup plus petite que l'énergie initiale de l'atome, les états propres du hamiltonien non-perturbé H_0 peuvent être remplacés par des états propres d'impulsion. En ce cas on peut calculer les poids des premières bandes latérales analytiquement. En effet le produit scalaire qui figure dans l'expression (1.41) vaut

$$\begin{aligned} \langle \psi_{p_f^\pm} | e^{-x^2/2\sigma^2} | \psi_{p_i} \rangle &\approx \langle p_f^\pm | e^{-x^2/2\sigma^2} | p_i \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx_f \int dx_i e^{ip_i x_i/\hbar} e^{-ip_f^\pm x_f/\hbar} \langle x_f | e^{-x^2/2\sigma^2} | x_i \rangle \\ &= \frac{\sigma}{\hbar\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(p_i - p_f^\pm)^2 \sigma^2}{2\hbar^2} \right]. \end{aligned} \quad (1.42)$$

1.1.3 La méthode de Floquet et l'atome habillé

Pour un système décrit par un hamiltonien périodique tel que (1.22), l'équation de Schrödinger possède des solutions de la forme

$$|\phi(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar} \sum_n e^{in\omega t} |\phi_n\rangle, \quad (1.43)$$

où les états $|\phi_n\rangle$ sont indépendants du temps. En termes des ces états, l'équation de Schrödinger s'écrit comme

$$E|\phi_n\rangle = \left(n\hbar\omega + \frac{p^2}{2m} + \frac{V_0(x)}{2} \right) |\phi_n\rangle - \frac{V_0(x)}{4i} (|\phi_{n-1}\rangle - |\phi_{n+1}\rangle). \quad (1.44)$$

En définissant un spineur

$$|\Phi\rangle \equiv \begin{pmatrix} \vdots \\ |\phi_{n-1}\rangle \\ |\phi_n\rangle \\ |\phi_{n+1}\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (1.45)$$

on peut réduire le problème périodique à un problème indépendant du temps. Le spineur $|\Phi\rangle$ est la solution de l'équation

$$E|\Phi\rangle = \mathbf{H}|\Phi\rangle, \quad (1.46)$$

\mathbf{H} étant l'opérateur matriciel

$$\mathbf{H} \equiv \mathbf{H}_0 + \mathbf{V}_1 \quad (1.47)$$

où

$$\mathbf{H}_0 = \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{V_0(x)}{2} \right) \mathbf{I} + \begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ & (n-1)\hbar\omega & & & \\ & & n\hbar\omega & & \\ & & & (n+1)\hbar\omega & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.48a)$$

$$\mathbf{V}_1 = -\frac{V_0(x)}{4i} \begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ & 0 & -1 & & \\ & 1 & 0 & -1 & \\ & & 1 & 0 & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.48b)$$

et \mathbf{I} est la matrice d'identité. Pour calculer les poids des bandes latérales il faut trouver les états propres du hamiltonien \mathbf{H} . Pour chaque valeur de l'énergie il existe une infinité de spineurs propres $|\Phi\rangle$. On cherche les spineurs d'énergie E proche de E_i pour lesquels seul l'élément $n = 0$ contient une onde plane incidente (les autres éléments ne contenant que des

ondes planes sortants). En recombinaison ces spineurs on peut construire un paquet d'onde et simuler son évolution. Dans la limite où l'énergie du paquet d'onde est bien définie, seul le spineur d'énergie E_i est requis. En principe on peut le calculer numériquement. En pratique les exigences sur la troncature et la discrétisation conduisent à des difficultés considérables.

Dans la limite perturbative on peut pourtant effectuer un calcul de Born indépendant du temps pour obtenir le poids des bandes latérales. On utilise l'expression suivante de la matrice S

$$\langle \Phi'_0 | S | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi'_0 | \Phi_0 \rangle - 2\pi i \delta(E' - E) \langle \Phi'_0 | T | \Phi_0 \rangle \quad (1.49)$$

où $|\Phi_0\rangle$ et $|\Phi'_0\rangle$ sont des états propres du hamiltonien non-perturbé \mathbf{H}_0 d'énergie E et E' respectivement, et \mathbf{T} est l'opérateur de transition

$$\mathbf{T} = \mathbf{V}_1 + \mathbf{V}_1 (E - \mathbf{H}_0 + i\eta)^{-1} \mathbf{V}_1 + \mathbf{V}_1 (E - \mathbf{H}_0 + i\eta)^{-1} \mathbf{V}_1 (E - \mathbf{H}_0 + i\eta)^{-1} \mathbf{V}_1 + \dots \quad (1.50)$$

Comme spineur initial $|\Phi_0\rangle$ on choisit un spineur d'énergie E proche de E_i pour lequel seul l'élément $n = 0$ est non-nul

$$|\Phi_0\rangle = |\Psi_E^{(0)}\rangle \equiv \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ |\psi_p\rangle \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (1.51)$$

où $p \equiv \sqrt{2mE}$. Le spineur final est un spineur d'énergie E' pour lequel seul l'élément n est non-nul

$$|\Phi'_0\rangle = |\Psi_{E'}^{(n)}\rangle \equiv \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ |\psi_q\rangle \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (1.52)$$

où $q \equiv \sqrt{2m(E' - n\hbar\omega)}$. Pour obtenir l'amplitude de transition il faut calculer les éléments de matrice de l'opérateur \mathbf{T} . Au premier ordre ils sont égaux à

$$\begin{aligned} \langle \Phi'_0 | T | \Phi_0 \rangle &\approx \langle \Phi'_0 | \mathbf{V}_1 | \Phi_0 \rangle \\ &= \left(\frac{-V}{4i} \right) (\delta_{n,1} - \delta_{n,-1}) \langle \psi_q | e^{-x^2/2\sigma^2} | \psi_p \rangle \end{aligned} \quad (1.53)$$

où δ est une fonction delta de Kronecker. En reportant cette expression dans l'équation (1.49), on trouve l'amplitude de transition

$$\begin{aligned} &-2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle \Phi'_0 | T | \Phi_0 \rangle \\ &\approx \frac{V\pi m}{2p} \langle \psi_q | e^{-x^2/2\sigma^2} | \psi_p \rangle \left[\delta_{n,1} \delta\left(p - \sqrt{q^2 + 2m\hbar\omega}\right) - \delta_{n,-1} \delta\left(p - \sqrt{q^2 - 2m\hbar\omega}\right) \right]. \end{aligned} \quad (1.54)$$

Ce résultat est identique à celui obtenu par la formulation dépendant du temps (1.35). Les fonctions delta de Kronecker donne des informations concernant l'énergie échangé entre l'atome et l'environnement, informations qui n'étaient pas présentes dans la formulation dépendant du temps.

Cette observation nous mène à l'interprétation de la formulation de Floquet comme la limite des grands nombres de photons de la formulation d'atome habillé. En effet, on peut supposer que le potentiel modulé est dû à l'interaction de l'atome avec deux modes optiques a et b qui diffèrent en fréquence de ω . En effet l'atome peut absorber un photon d'une mode et l'émettre soit dans la même mode, sans aucun changement de son énergie cinétique, soit dans l'autre mode, avec un changement de son énergie cinétique de $\hbar\omega$. Dans la limite de grand désaccord Δ on peut éliminer adiabatiquement tous les niveaux internes excités de l'atome, et on arrive à l'expression suivante pour le hamiltonien

$$\mathbf{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar|g|^2}{\Delta} f(x) (a + ib)^\dagger (a + ib) + \frac{\hbar\omega}{2} (a^\dagger a - b^\dagger b), \quad (1.55)$$

où on a supposé que la constante de couplage atome-champ g , et le profil spatial $f(x)$, sont identiques pour les deux modes. Si chaque mode contient un grand nombre moyen N de photons, et de faibles fluctuations $\Delta N \ll N$, ce hamiltonien devient formellement équivalent à (1.47) en posant

$$V_0(x) = 4N \frac{\hbar|g|^2}{\Delta} f(x). \quad (1.56)$$

On peut chercher des états propres sous la forme

$$|\Phi\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle \otimes |N + n, N - n\rangle \quad (1.57)$$

où le premier ket représente l'état de l'atome, et le deuxième l'état des modes optiques. En substituant l'expression (1.57) dans l'équation (1.46), et en projetant sur l'état $|N + n, N - n\rangle$, on retrouve l'équation (1.44), ce qui démontre l'équivalence des deux formulations.

En appliquant le modèle de l'atome habillé à ce problème il est important de noter que la différence $2n$ entre le nombre de photons dans chaque mode n'est pas bien définie, même avant le passage de l'atome. En effet, pour que la modulation du potentiel ait une phase bien définie¹, il faut que la phase relative entre les modes a et b soit elle aussi bien définie. Ceci implique une incertitude sur la différence entre le nombre de photons dans chaque mode.

1.1.4 La méthode du réseau de phase mince

Le calcul de Born s'applique au régime où les poids des premières bandes latérales sont petits. Un autre régime perturbatif qu'on peut étudier est celui où le transfert d'énergie à

1. Que la phase de la modulation du potentiel soit bien définie est nécessaire pour assurer la cohérence entre les bandes latérales. En utilisant ce fait, on peut expliquer l'incertitude sur la différence initiale entre le nombre de photons dans chaque mode de la façon suivante. Supposons au contraire qu'on connaissait exactement la valeur de n avant l'interaction. En ce cas, on pourrait, en principe, déterminer l'énergie finale de l'atome en mesurant le nombre de photons transférés d'un mode à l'autre. Le fait que l'information concernant l'énergie finale de l'atome est sauvegardée dans le champ optique détruirait toute cohérence entre les bandes latérales. On peut donc conclure que la supposition initiale est fautive, c'est-à-dire que la valeur de n n'est pas bien définie avant l'interaction.

l'atome $E_f - E_i$ dû à son interaction avec le potentiel est petit. Les deux régimes ne sont pas identiques, comme on le voit sur l'exemple suivant. Si la fréquence d'oscillation ω est petite, la différence d'énergie entre les bandes latérales est petite aussi. L'interaction peut donc transférer une fraction significative de la population atomique aux bandes latérales sans pour autant transférer beaucoup d'énergie aux atomes. Dans une telle situation le calcul de Born au premier ordre n'est pas valable. On peut pourtant utiliser la méthode du réseau de phase mince, présentée ci-dessous.

Cette méthode utilise une approximation semi-classique très simplifiée de la technique d'intégrale de chemin, où on intègre la phase quantique accumulée par l'atome le long de sa trajectoire. Dans la limite semi-classique on peut remplacer l'opérateur d'énergie cinétique dans le hamiltonien par un terme approché

$$H \approx \frac{1}{2} [vp + pv - mv^2] + V(x, t) \quad (1.58)$$

où $v \equiv v(x, t)$ est la vitesse de l'atome considérée comme une fonction classique. Notons que le hamiltonien (1.58) est toujours hermitien, et satisfait à l'équation de mouvement de Heisenberg

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [x, H] = v. \quad (1.59)$$

L'approximation (1.58) est équivalente à une approximation de type BKW dépendant du temps (voir le Chapitre 2), et remplace l'équation de Schrödinger par une équation différentielle de premier ordre en position

$$i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi(x, t) = \left[V(x, t) - \frac{1}{2}mv^2 - \frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] \psi(x, t). \quad (1.60)$$

Le terme de gauche est une dérivée totale de la fonction d'onde par rapport au temps. Pour résoudre l'équation il faut alors exprimer la position x en fonction de temps, c'est-à-dire trouver la trajectoire de l'atome. Puisqu'on considère le régime où la modulation du potentiel ne change pas le mouvement de l'atome de façon significative, on peut remplacer la vraie trajectoire de l'atome par la trajectoire qu'il aurait suivie dans le potentiel non modulé. On suppose une énergie totale de E_i , et on choisit la trajectoire $x_0(t)$ qui arrive à la position x_f à l'instant t_f . De même la vitesse v de l'atome est remplacée par sa valeur v_0 dans le potentiel non modulé $V_0(x)/2$. Puisque v_0 ne dépend que de la position de l'atome

$$\frac{1}{2}mv_0^2 = E_i - \frac{V_0(x)}{2}, \quad (1.61)$$

on trouve

$$\frac{\partial v}{\partial x} \approx \frac{dv_0}{dx} = \frac{1}{v_0} \frac{d}{dt} v_0 [x_0(t)]. \quad (1.62)$$

En substituant l'équation (1.62) dans (1.60), et en intégrant par rapport au temps, on obtient

$$\begin{aligned} \psi(x_f, t_f) &\approx \psi(x_i, t_{i,0}) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_{i,0}}^{t_f} dt \left\{ V[x_0(t), t] - \frac{1}{2}mv_0^2 - \frac{i\hbar}{2v_0} \frac{d}{dt} v_0[x_0(t)] \right\} \right] \\ &= \psi(x_i, t_{i,0}) \sqrt{\frac{v_0(x_i)}{v_0(x_f)}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_{i,0}}^{t_f} dt \left\{ V[x_0(t), t] - \frac{1}{2}mv_0^2 \right\} \right] \end{aligned} \quad (1.63)$$

où $t_{i,0}$ est l'instant auquel la trajectoire non-perturbée $x_0(t)$ part de la position initiale x_i . En remplaçant la fonction d'onde en deça du potentiel par une onde plane,

$$\psi(x_i, t_{i,0}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_i x_i - E_i t_{i,0}) \right] \quad (1.64)$$

et en utilisant le fait que $v_0(x_f) = v_0(x_i)$, on trouve

$$\psi(x_f, t_f) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_i x_i - E_i t_{i,0}) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_{i,0}}^{t_f} dt \left\{ V[x_0(t), t] - \frac{1}{2} m v_0^2 \right\} \right]. \quad (1.65)$$

On peut simplifier l'intégrale en utilisant la relation (1.61)

$$\begin{aligned} \int_{t_{i,0}}^{t_f} dt \left\{ V[x_0(t), t] - \frac{1}{2} m v_0^2 \right\} &= \int_{t_{i,0}}^{t_f} dt \{ E_i - m v_0^2 + V_1[x_0(t), t] \} \\ &= E_i (t_f - t_{i,0}) - p_i (x_f - x_i) + \hbar C + \int_{t_{i,0}}^{t_f} dt V_1[x_0(t), t] \end{aligned} \quad (1.66)$$

où C est une constante. En reportant ce résultat dans l'équation (1.65) on obtient

$$\psi(x_f, t_f) \approx \frac{e^{-iC}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_i x_f - E_i t_f) + \frac{i}{\hbar} \tilde{S}_1(x_f, t_f) \right]. \quad (1.67)$$

où \tilde{S}_1 est l'intégrale du potentiel V_1 le long du trajectoire non-perturbée (c'est-à-dire la trajectoire dans le potentiel non-modulé)

$$\tilde{S}_1(x_f, t_f) \equiv - \int_{t_{i,0}}^{t_f} dt V_1[x_0(t), t]. \quad (1.68)$$

Pour effectuer cette intégrale il faut prendre en compte la dépendance de la fonction $x_0(t)$ vis-à-vis du temps final t_f . Cette dépendance s'écrit comme

$$x_0(t) = \bar{x}(t - t_f + T_f) \quad (1.69)$$

où \bar{x} est une fonction qui est indépendant de t_f , et satisfait à la relation $\bar{x}(0) = 0$, c'est-à-dire, $\bar{x}(t)$ est la trajectoire non-perturbée qui passe l'origine $x = 0$ à l'instant $t = 0$. Le temps T_f est l'instant auquel cette trajectoire arrive à la position finale, $\bar{x}(T_f) = x_f$. De même on dénote par T_i l'instant auquel la trajectoire $\bar{x}(t)$ part de la position initiale $\bar{x}(T_i) = x_i$. Ainsi on peut récrire l'équation (1.68) comme

$$\tilde{S}_1(x_f, t_f) = - \int_{T_i}^{T_f} dt V_1[\bar{x}(t), t + t_f - T_f]. \quad (1.70a)$$

$$= \frac{1}{2} \int_{T_i}^{T_f} dt V_0[\bar{x}(t)] \sin[\omega(t + t_f - T_f)]. \quad (1.70b)$$

En décomposant la fonction sinus en une somme d'exponentielles complexes on trouve

$$\tilde{S}_1(x_f, t_f) = -\hbar\zeta \sin(\omega t_f - k x_f - C') \quad (1.71)$$

où on a remplacé ωT_f par son expression en fonction de x_f

$$\omega T_f = kx_f + C'. \quad (1.72)$$

k est défini dans (1.4) et C' est une constante qui dépend des paramètres du potentiel non modulé. L'indice de modulation ζ est la transformée de Fourier du potentiel vu par l'atome quand il se déplace le long de la trajectoire non-perturbée $\bar{x}(t)$

$$\zeta \equiv -\frac{1}{2\hbar} \int dt V_0[\bar{x}(t)] e^{i\omega t}. \quad (1.73)$$

Elle est réelle parce que la fonction $V_0[\bar{x}(t)]$ est symétrique. Notons qu'il est valable d'étendre les limites d'intégration à $\pm\infty$, puisque l'atome ne subit aucun potentiel avant l'instant T_i ni après l'instant T_f . En insérant l'expression (1.71) dans (1.67) on obtient

$$\psi(x_f, t_f) \approx \frac{e^{-iC}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_i x_f - E_i t_f) - i\zeta \sin(\omega t_f - kx_f + C') \right]. \quad (1.74)$$

La fonction d'onde finale est donc une onde plane, dont la phase est modulée sinusoidalement.

En prenant une transformée de Fourier par rapport à la position de l'expression approchée (1.74), on trouve des bandes latérales aux impulsions

$$p_n \approx p_i + n\hbar k \quad (1.75)$$

dont les poids sont

$$I_n \approx |J_n(\zeta)|^2 \quad (1.76)$$

où J_n sont des fonctions de Bessel. Le fait que la fonction d'onde approchée (1.74) ne satisfait pas aux relations de dispersion exactes, mais plutôt aux relations du premier ordre en $\hat{\omega}$ (1.75), est dû au remplacement des trajectoires exactes par des trajectoires non-perturbées dans le calcul. Ceci est également l'origine de la symétrie du spectre calculé (1.76). Les approximations (1.75) et (1.76) sont en bon accord avec les résultats exacts dans le régime de validité de la méthode, à savoir le régime où le transfert d'énergie à l'atome $E_f - E_i$ est faible devant E_i (voir la Figure 1.3).

1.2 Considérations expérimentales

Dans cette section je vais discuter quelques aspects de la réalisation expérimentale du système, y compris le calcul des paramètres du modèle et l'effet du bruit expérimental et de l'émission spontanée.

1.2.1 Réalisation expérimentale

On peut réaliser le potentiel $V(x, t)$ avec un faisceau laser dont l'intensité est modulée dans le temps. Le laser est focalisé avec une demi-largeur du col égale à σ (voir la Figure 1.4). La hauteur du col et la longueur de Rayleigh doivent être suffisamment grandes pour que le plus grand nombre d'atomes possible subissent un potentiel qui ressemble à celui de l'équation (1.1). Il faut que le laser doit être désaccordé sur le rouge pour que le potentiel soit attractif.

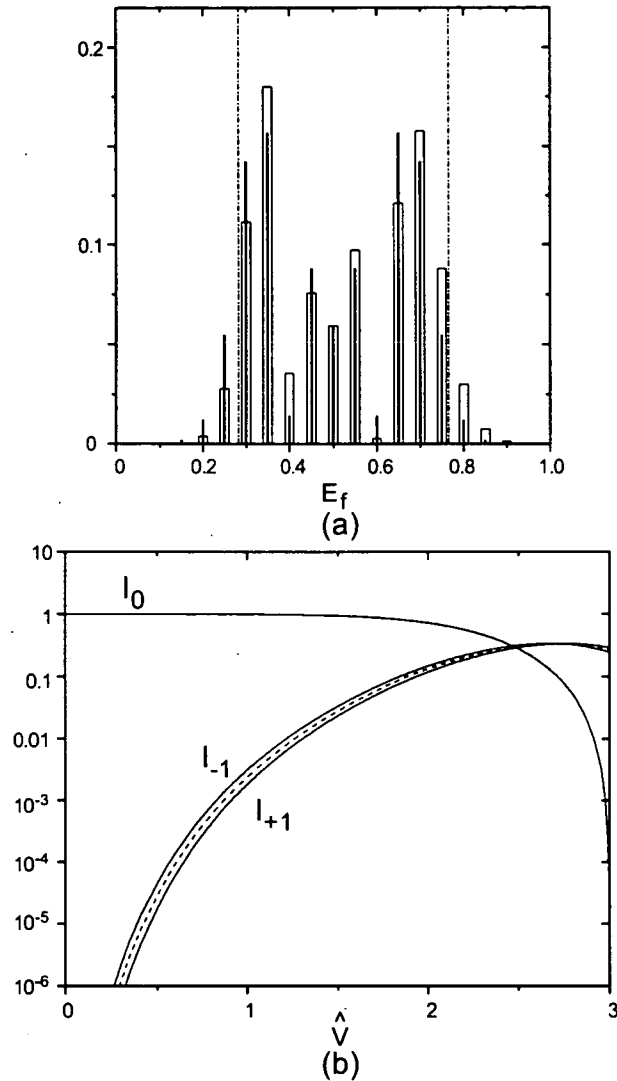


FIG. 1.3 - (a) Le spectre exact (barres vides), et les résultats de la méthode du réseau de phase mince (traits solides), pour les paramètres $\hat{\omega} = 0.05$, $\hat{\sigma} = 6.0$ et $\hat{V} = 3.0$. Les deux lignes en pointillé indiquent les limites de la région permise. L'énergie E_f est en unités de p_i^2/m . (b) Les poids exacts (lignes continues) de la bande centrale I_0 et des premières bandes latérales $I_{\pm 1}$ en fonction de \hat{V} , pour $\hat{\sigma} = 6.0$ et $\hat{\omega} = 0.1$. Les résultats de la méthode du réseau de phase mince sont en pointillé.

Les atomes qui ne passent pas au centre du col sont légèrement défléchis (voir la Figure 1.5). A cet élargissement du faisceau atomique s'ajoute l'incertitude sur l'impulsion initiale des atomes. Pour avoir une idée de la distribution d'impulsion finale on peut appliquer la méthode du réseau de phase mince le long des trajectoires classiques non-perturbées, c'est-à-dire les trajectoires classiques correspondant au potentiel non modulé (voir la Figure 1.5).

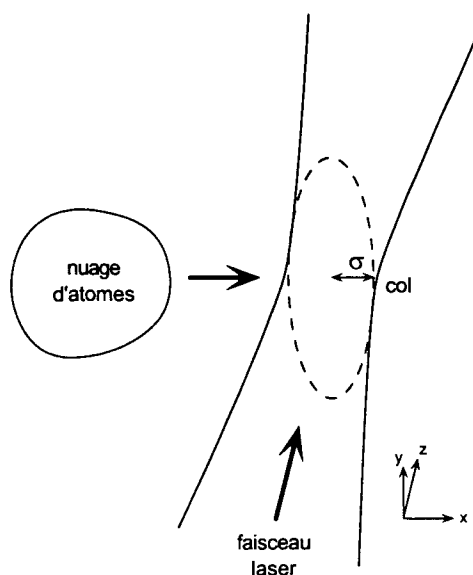


FIG. 1.4 – Le schéma de l'expérience en trois dimensions.

1.2.2 Calcul des paramètres du modèle

Le modèle théorique se caractérise par les trois paramètres sans dimension \hat{V} , $\hat{\omega}$ et $\hat{\sigma}$, définis par les équations (1.3). Les paramètres $\hat{\omega}$ et $\hat{\sigma}$ s'obtiennent directement à partir des quantités expérimentalement mesurables σ , ω et p_i . Le paramètre $\hat{V} \equiv Vm/p_i^2$ se calcule en termes du désaccord et de l'intensité de la lumière de la façon suivante.

Le potentiel V s'écrit comme

$$V = \frac{c^2}{2} \hbar \delta s \quad (1.77)$$

où c est le coefficient de Clebsch-Gordon de la transition, $\delta < 0$ est le désaccord en fréquence entre le laser et la résonance atomique, et s est le paramètre de saturation,

$$s \equiv \frac{\frac{\Omega^2}{2}}{\delta^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}. \quad (1.78)$$

Dans cette expression Γ est le taux d'émission spontanée, et Ω est la fréquence de Rabi

$$\hbar \Omega = -d \mathcal{E}_0 \quad (1.79)$$

où d dénote le dipôle électrique. \mathcal{E}_0 est l'amplitude du champ électrique

$$\mathcal{E}(t) = \frac{1}{2} (\mathcal{E}_0 e^{-i\omega_0 t} + \mathcal{E}_0^* e^{i\omega_0 t}), \quad (1.80)$$

qui oscille à la fréquence optique ω_0 . En utilisant le fait que la fréquence de Rabi est proportionnelle à la racine de l'intensité lumineuse I , on trouve qu'à grand désaccord $\delta \gg \Gamma$ le paramètre de saturation s'écrit comme

$$s = \frac{\Gamma^2}{4\delta^2} \frac{I}{I_{\text{sat}}} \quad (1.81)$$

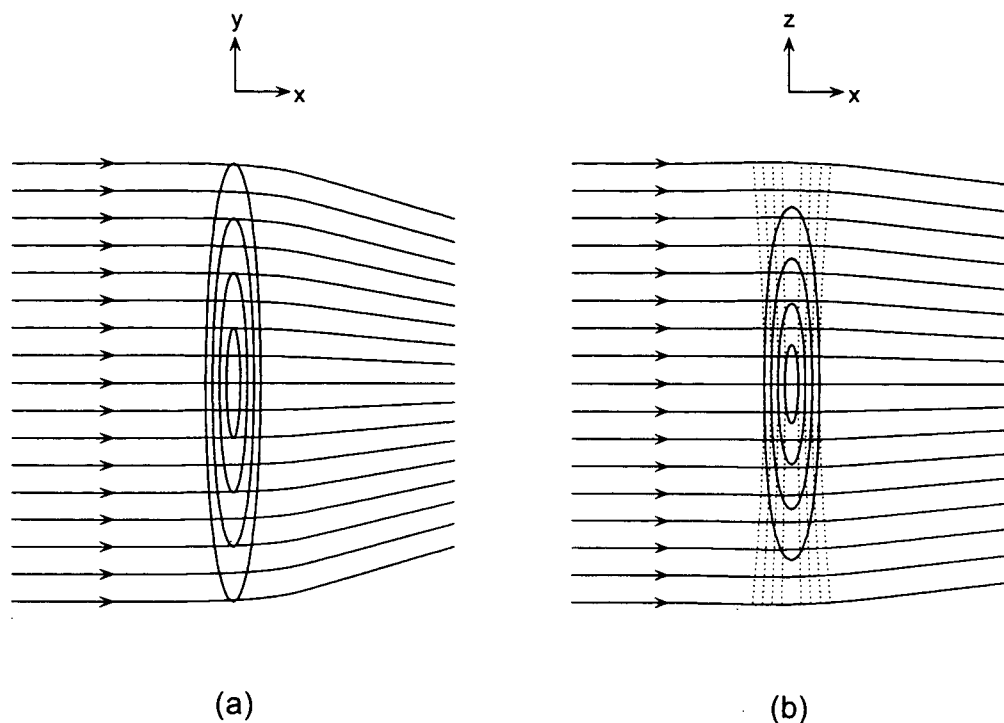


FIG. 1.5 – Les trajectoires classiques d'atomes qui traversent le potentiel en absence de modulation. La forme du potentiel est indiquée par des lignes de contour. La figure (a) montre une section du faisceau laser transverse, et la figure (b) une section longitudinale. Les lignes en pointillés dans (b) indique la mode optique longitudinale. Ce sont des contours où l'intensité atteint une certaine fraction de sa valeur sur l'axe z .

où I_{sat} est l'intensité de saturation, définie comme l'intensité pour laquelle le paramètre de saturation vaut un à désaccord nul. On peut la calculer de la façon suivante. L'intensité lumineuse s'écrit en termes du champ électrique $\mathcal{E}(t)$ comme

$$I = \epsilon_0 c \langle \mathcal{E}^2 \rangle = \frac{1}{2} \epsilon_0 c \mathcal{E}_0^2 \quad (1.82)$$

où $\langle \dots \rangle$ représente la moyenne sur une période du champ. En utilisant l'équation (1.79), et en déterminant la valeur du dipôle électrique d à partir du taux d'émission spontanée

$$\Gamma = \frac{1}{3\pi\epsilon_0} \frac{\omega_0^3}{\hbar c^3} d^2, \quad (1.83)$$

on trouve

$$I_{\text{sat}} = \frac{1}{12\pi} \frac{\hbar \Gamma \omega_0^3}{c^2}. \quad (1.84)$$

On obtient la valeur du paramètre de saturation s en reportant ce résultat dans l'équation (1.81). L'intensité I dans l'équation (1.81) s'obtient en divisant la puissance laser par l'aire effective du faisceau. Etant donné s , le potentiel est déterminé par l'équation (1.77).

1.2.3 Pertes dues à l'émission spontanée

Si un atome émet spontanément un photon pendant son interaction avec le potentiel, son impulsion longitudinale changera d'une quantité comprise entre $\pm\sqrt{2mE_R}$, où E_R est l'énergie de recul. Dans le cas où l'énergie de recul est plus grand que la différence d'énergie $\hbar\omega$ entre les bandes latérales, l'effet de l'émission spontanée est d'ajouter un fond plat à la distribution d'impulsion atomique. Il est donc important d'estimer la fraction d'atomes qui émettent spontanément pendant leur traversée du potentiel.

On peut simuler l'effet de l'émission spontanée 'sur les atomes n'ayant pas encore émis' en multipliant le potentiel $V(t)$ par un facteur complexe

$$V_{\text{es}}(x, t) = \frac{1}{1 + i\frac{\Gamma}{2\delta}} V(x, t). \quad (1.85)$$

La partie imaginaire $V_I(x, t)$ du nouveau potentiel $V_{\text{es}}(x, t)$ est

$$V_I(x, t) = -\frac{\frac{\Gamma}{2\delta}}{1 + \left(\frac{\Gamma}{2\delta}\right)^2} V(x, t) \quad (1.86a)$$

$$= -\frac{\frac{\hbar\Gamma}{4}}{1 + \left(\frac{\Gamma}{2\delta}\right)^2} s(x, t) \quad (1.86b)$$

où $s(x, t)$ est la valeur locale du paramètre de saturation. Puisque $s(x, t)$ est positif, la partie imaginaire $V_I(x, t)$ du potentiel est négative. $V_I(x, t)$ réduit progressivement la norme de la fonction d'onde atomique au fur et à mesure que le système évolue

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | (H - H^\dagger) | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{2}{\hbar} \langle \psi(t) | V_I(x, t) | \psi(t) \rangle. \end{aligned} \quad (1.87)$$

On interprète la norme $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$ comme la fraction d'atomes n'ayant pas encore fait d'émission spontanée. Puisque V_I dépend de x et de t , il peut aussi changer les poids relatifs des bandes latérales.

On peut calculer de façon semi-classique l'effet de l'émission spontanée en utilisant la méthode du réseau de phase mince, et en remplaçant l'expression (1.70a) par

$$\tilde{S}_1(x_f, t_f) = - \int_{-\infty}^{+\infty} dt \{ V_1[\bar{x}(t), t + t_f - T_f] + iV_I[\bar{x}(t), t + t_f - T_f] \}. \quad (1.88)$$

Pour estimer l'ordre de grandeur seulement des pertes dues à l'émission spontanée, dans la limite d'un grand désaccord, on peut utiliser l'approximation

$$P \approx \exp \left\{ \frac{-\Gamma}{2\delta} \int_{-\infty}^{+\infty} dt V_0[\bar{x}(t)] \right\} \quad (1.89)$$

où P est la probabilité qu'un atome ne subit aucune émission spontanée.

1.2.4 Effet du bruit expérimental

Dans cette section je vais calculer l'élargissement des bandes latérales dû au bruit expérimental. Soit $p(x_f, t_f)$ l'impulsion classique de l'atome au point (x_f, t_f) , et $\bar{p}(x_f, t_f)$ sa valeur en l'absence du bruit. L'élargissement en impulsion dépend alors de la valeur de $\langle [\Delta p(x_f, t_f)]^2 \rangle$, où $\Delta p(x_f, t_f) \equiv p(x_f, t_f) - \bar{p}(x_f, t_f)$ est la différence d'impulsion due au bruit, et $\langle \dots \rangle$ représente une moyenne statistique.

En utilisant les résultats de la méthode du réseau de phase mince on trouve l'expression suivante pour $\Delta p(x_f, t_f)$

$$\Delta p(x_f, t_f) = \frac{\partial}{\partial x_f} \tilde{S}_b(x_f, t_f) \quad (1.90)$$

où \tilde{S}_b est défini, par analogie à (1.68), comme

$$\tilde{S}_b(x_f, t_f) \equiv - \int_{t_i, 0}^{t_f} dt V_b[x_0(t), t] \quad (1.91)$$

et $V_b(x, t)$ est la partie fluctuante du potentiel. On va d'abord supposer que le bruit est dû à des fluctuations de la profondeur du potentiel, par exemple à des fluctuations de l'intensité du faisceau laser modulé. En ce cas on peut exprimer $V_b(x, t)$ comme

$$V_b(x, t) = f(x)\mathcal{V}(t) \quad (1.92)$$

où $f(x)$ est le profil spatial du potentiel,

$$f(x) = e^{-x^2/2\sigma^2} \quad (1.93)$$

et $\mathcal{V}(t)$ est sa profondeur. En insérant cette expression dans l'équation (1.91), et en substituant les relations (1.69) et (1.72) on trouve

$$\tilde{S}_b(x_f, t_f) = - \int_{-\infty}^{+\infty} dt f[\bar{x}(t)] \mathcal{V} \left(t + t_f - \frac{m}{p_i} x_f - \frac{C'}{\omega} \right). \quad (1.94)$$

La différence de l'impulsion finale due au bruit est alors

$$\Delta p(x_f, t_f) = \frac{m}{p_i} \int_{-\infty}^{+\infty} dt f[\bar{x}(t)] \mathcal{V}'(t + T_0) \quad (1.95)$$

où \mathcal{V}' est la dérivée de la fonction \mathcal{V} , et $T_0 \equiv t_f - mx_f/p_i - C'/\omega$. En définissant les fonctions $\tilde{f}(\omega)$ et $\tilde{\mathcal{V}}(\omega)$ comme des transformées de Fourier de $f[\bar{x}(t)]$ et $\mathcal{V}(t)$ respectivement

$$\tilde{f}(\omega) = \int dt f[\bar{x}(t)] e^{i\omega t} \quad (1.96a)$$

$$\tilde{\mathcal{V}}(\omega) = \int dt \mathcal{V}(t) e^{i\omega t} \quad (1.96b)$$

et en notant que $\tilde{\mathcal{V}}(-\omega) = \tilde{\mathcal{V}}^*(\omega)$, puisque $\mathcal{V}(t)$ est réel, on peut écrire la différence d'impulsion dans le domaine des fréquences comme

$$\Delta p(x_f, t_f) = \frac{1}{2\pi} \frac{m}{p_i} \int d\omega \tilde{f}(\omega) \tilde{\mathcal{V}}^*(\omega) i\omega e^{i\omega T_0}. \quad (1.97)$$

La moyenne statistique $\langle [\Delta p(x_f, t_f)]^2 \rangle$ est donc

$$\langle [\Delta p(x_f, t_f)]^2 \rangle = \frac{1}{(2\pi)^2} \left(\frac{m}{p_i} \right)^2 \int d\omega \int d\omega' \tilde{f}(\omega) \tilde{f}^*(\omega') \langle \tilde{\mathcal{V}}^*(\omega) \tilde{\mathcal{V}}(\omega') \rangle \omega \omega' e^{i(\omega - \omega')T_0}. \quad (1.98)$$

Il reste maintenant de calculer $\langle \tilde{\mathcal{V}}^*(\omega) \tilde{\mathcal{V}}(\omega') \rangle$. En revenant au domaine du temps, on peut l'exprimer comme

$$\langle \tilde{\mathcal{V}}^*(\omega) \tilde{\mathcal{V}}(\omega') \rangle = \int dt \int dt' \langle \mathcal{V}(t') \mathcal{V}(t' + t) \rangle e^{i(\omega' - \omega)t'} e^{i\omega t}. \quad (1.99)$$

Si le processus stochastique est stationnaire, la moyenne $\langle \mathcal{V}(t') \mathcal{V}(t' + t) \rangle$ est indépendante de t' et on obtient

$$\langle \tilde{\mathcal{V}}^*(\omega) \tilde{\mathcal{V}}(\omega') \rangle = 2\pi \delta(\omega' - \omega) P(\omega) \quad (1.100)$$

où $P(\omega)$ est le spectre de bruit

$$P(\omega) \equiv \int dt \langle \mathcal{V}(0) \mathcal{V}(t) \rangle e^{i\omega t}. \quad (1.101)$$

En insérant l'expression (1.100) dans (1.98) on trouve le résultat

$$\langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{m}{p_i} \right)^2 \int d\omega |\tilde{f}(\omega)|^2 \omega^2 P(\omega). \quad (1.102)$$

La contribution du bruit à de très basses fréquences est réduite par le facteur ω^2 , et à d'hautes fréquences elle est éliminée par le facteur $|\tilde{f}(\omega)|^2$. Les fréquences ω qui contribuent les plus sont celles pour lesquelles $\omega t_\sigma \sim 1$, où t_σ est le temps de traversée du potentiel.

Notons que selon l'expression (1.102) la moyenne statistique $\langle (\Delta p)^2 \rangle$ est indépendante du point (x_f, t_f) . On peut donc l'utiliser directement comme une estimation de l'élargissement des bandes latérales. Pour qu'on puisse résoudre les bandes il faut que $\langle (\Delta p)^2 \rangle^{1/2}$ vaille moins que leur séparation.

Il se peut que le bruit soit dû à des sources autres que les fluctuations de la profondeur du potentiel, par exemple à des vibrations spatiales du potentiel. En ce cas le potentiel total s'écrit

$$\begin{aligned} V_{\text{tot}}(x, t) &= \frac{1}{2} V_0 [x + \xi(t)] [1 - \sin(\omega t)] \\ &= V(x, t) + V_b(x, t). \end{aligned} \quad (1.103)$$

En soustrayant la valeur de $V(x, t)$ de l'équation (1.1), on trouve qu'au premier ordre le potentiel fluctuant $V_b(x, t)$ est

$$V_b(x, t) = \frac{1}{2} V_0'(x) \xi(t) [1 - \sin(\omega t)]. \quad (1.104)$$

L'élargissement des bandes dû à ce potentiel peut être calculé par des méthodes analogues à celles utilisées précédemment.

Conclusion

Dans ce chapitre on a discuté quelques méthodes existantes pour calculer les poids des bandes latérales. La méthode purement numérique est un calcul quantique qui est valable dans tous les régimes. Ses désavantages sont la longue durée de calcul et la manque d'éclaircissement qu'elle fournit sur le contenu physique. Deux méthodes qui remédient à ces inconvénients sont la méthode de Born et la méthode du réseau de phase mince. Elles ne sont valables cependant que dans certaines régimes. L'approximation de Born est valable dans le régime de faible diminution du poids de la bande centrale, et la méthode du réseau de phase mince est valable dans le régime où le transfert d'énergie $E_f - E_i$ aux particules est petit. Bien que les résultats de la méthode du réseau de phase mince ne soient pas exacts hors de ce régime, ils donnent en général le bon ordre de grandeur des poids des bandes latérales. La méthode est donc très utile pour obtenir des résultats préliminaires sur une grande gamme de valeurs des paramètres. Elle fournit aussi une estimation des pertes dues à l'émission spontanée, et l'élargissement des bandes dû au bruit expérimental. Pour obtenir des résultats d'une précision plus haute, tout en gardant la clarté physique offerte par une approche semi-classique, on peut utiliser la formulation d'intégrale de chemin.

Chapitre 2

La méthode d'intégrale de chemin

Introduction

Ce chapitre présente le propagateur de Feynman, qui décrit l'évolution d'un système dans l'espace-temps. Il discute également certains propagateurs généralisés, qui s'appliquent à d'autres espaces de configuration. Dans la limite semi-classique les valeurs des propagateurs ne dépendent que des trajectoires classiques qui relient le point initial et le point final du propagateur dans son espace de configuration. Ces chemins sont connus sous le nom de 'trajectoires racines'. L'approximation rudimentaire pour la valeur des propagateurs, que j'appellerai l'approximation BKW généralisée, consiste à prendre une somme sur toutes les trajectoires classiques du système.

La première section présente la définition du propagateur de Feynman et sa formulation comme une intégrale de chemin. Elle est destinée aux lecteurs peu familiers avec la méthode d'intégrale de chemin. On discute la forme du propagateur dans la limite semi-classique, en faisant une analogie avec la construction de Huygens. On définit ensuite des propagateurs dépendant de l'impulsion ou de l'énergie, qui s'obtiennent à partir du propagateur de Feynman par des transformées de Fourier. En utilisant une approximation quadratique pour le lagrangien, on peut effectuer l'intégrale de chemin analytiquement, ce qui permet de retrouver les expressions BKW du propagateur de Feynman et des propagateurs qui dépendent de l'impulsion. Finalement on discute la valeur des propagateurs dans des régions classiquement interdites, en donnant quelques applications.

2.1 Le propagateur de Feynman

Dans cette section je vais définir le propagateur de Feynman et présenter sa formulation en tant qu'intégrale de chemin. Je montrerai que le propagateur s'exprime comme une somme sur toutes les trajectoires reliant les points initial et final du propagateur.

2.1.1 Définition

Le propagateur de Feynman $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$ est défini comme l'amplitude de probabilité pour qu'une particule qui part de la position x_i à l'instant initial t_i arrive à la position x_f à

l'instant final t_f . Cette définition s'écrit comme

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \begin{cases} \langle x_f | U(t_f, t_i) | x_i \rangle & \text{pour } t_f > t_i \\ 0 & \text{pour } t_f < t_i \end{cases} \quad (2.1)$$

où $U(t_f, t_i)$ est l'opérateur d'évolution entre l'instant t_i et l'instant t_f .

2.1.2 Idées menant à la formulation d'intégrale de chemin

Un des postulats fondamentales de la mécanique quantique est que la probabilité s'exprime comme le module carré d'un nombre complexe $P = |\psi|^2$. En prenant l'exemple du propagateur de Feynman, la probabilité pour qu'une particule arrive au point (x_f, t_f) , étant donné qu'elle est partie du point (x_i, t_i) , vaut $|K(x_f, t_f; x_i, t_i)|^2$, où $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$ est le nombre complexe défini par l'équation (2.1). Alors qu'en mécanique classique les lois de combinaison des probabilités sont déterminées par la théorie de probabilité de Lagrange, en mécanique quantique ces lois dépendent des amplitudes complexes ψ .

Considérons une expérience à deux fentes, représentée sur la Figure 2.1. Chacune des particules émises par la source à gauche a une certaine probabilité $P(x)$ de passer la double-fente et d'être détectée à la position x à droite. Supposons qu'on bouche la fente F_2 , laissant ouverte la seule fente F_1 . La probabilité de détection est alors modifiée, et je la dénote par $P_1(x)$. De même, la probabilité de détection avec la seule fente F_2 ouverte est dénotée par $P_2(x)$. Les fonctions $P_1(x)$ et $P_2(x)$ sont indiquées sur la Figure 2.2.

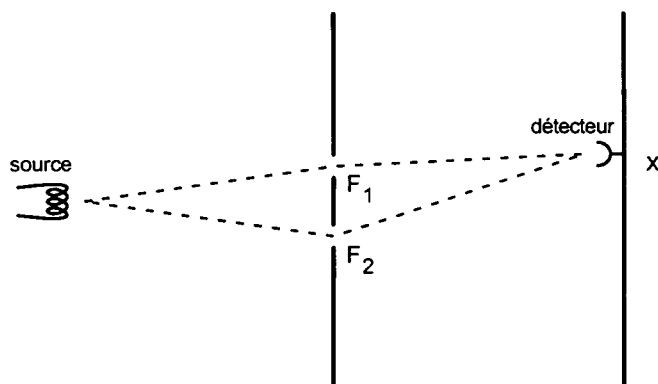


FIG. 2.1 - *Expérience à deux fentes F_1 et F_2 . A gauche une source émet des particules. De l'autre côté des fentes un détecteur enregistre les particules qui arrivent à la position x . Les chemins en pointillé servent uniquement comme un guide pour l'œil et ne doit pas se comprendre comme les trajectoires réellement suivies par la particule. En particulier, il n'y a pas de raison, selon la mécanique quantique, pour supposer que la particule suive une ligne droite entre la source et l'écran ni entre l'écran et le détecteur. En effet, tout ce qu'on sait est que pour atteindre le détecteur la particule doit nécessairement passer par une des deux fentes.*

La mécanique quantique prédit que la probabilité de détection $P(x)$ avec les deux fentes ouvertes ne vaut pas la somme des probabilités de détection avec chacune des fentes individuellement, c'est-à-dire $P(x) \neq P_1(x) + P_2(x)$. Ceci contredit les lois de probabilité classiques. Selon la théorie classique, il existe deux moyens possibles pour que la particule atteigne le

détecteur: soit elle passe par la fente F_1 , soit par la fente F_2 , ces deux possibilités étant exclusives. Classiquement on s'attend alors à ce que la probabilité totale de détection soit égale à la somme des probabilités associés à chacune de ces voies.

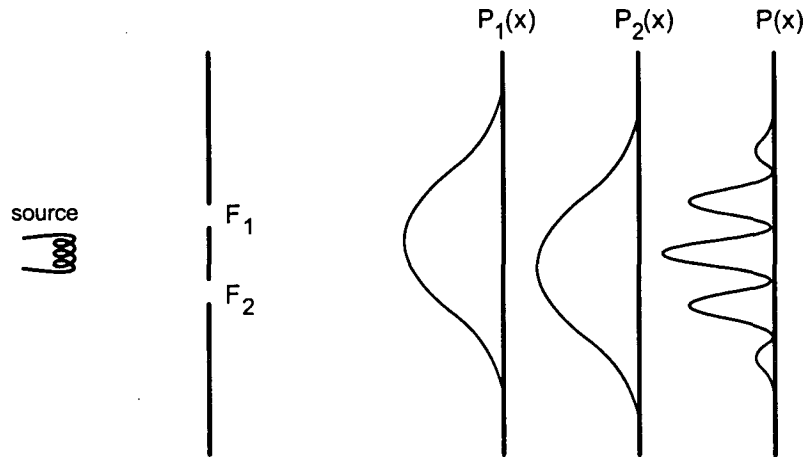


FIG. 2.2 - Les probabilités $P_1(x)$, $P_2(x)$ et $P(x)$ pour qu'une particule soit détectée à la position x . $P_1(x)$ correspond à la situation où la seule fente F_1 est ouverte, et $P_2(x)$ au cas où seulement F_2 est ouverte. $P(x)$ est la probabilité de détection quand les fentes sont toutes les deux ouvertes.

De nombreuses expériences d'interférométrie ont démontré que les probabilités sont gouvernées dans le régime quantique non par la théorie classique, mais par la théorie de la mécanique quantique. Cette dernière prédit que les probabilités se combinent en sommant leurs amplitudes complexes, $P(x) = |\psi(x)|^2$ où $\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$. Le fait que les amplitudes $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$ sont complexes explique la présence de franges d'interférence dans la distribution $P(x)$.

Supposons maintenant que la source de particules soit bien localisée à la position x_i , et que le détecteur enregistre seulement les particules qui arrivent précisément au point x_f . Les amplitudes de détection $\psi(x)$, $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$ sont alors des propagateurs de Feynman $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$, $K_1(x_f, t_f; x_i, t_i)$ et $K_2(x_f, t_f; x_i, t_i)$ respectivement, où t_i est l'instant d'émission et t_f l'instant de détection. Ces propagateurs sont déterminés respectivement par les opérateurs d'évolution $U(t_f, t_i)$, $U_1(t_f, t_i)$ et $U_2(t_f, t_i)$, qui dépendent de la configuration des fentes. On obtient alors

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = K_1(x_f, t_f; x_i, t_i) + K_2(x_f, t_f; x_i, t_i). \quad (2.2)$$

Imaginons qu'on introduise plus d'écrans, comme dans la Figure 2.3, et qu'on perce plusieurs fentes dans chaque écran. Pour chaque combinaison de fentes possible il faut ajouter un terme dans la somme (2.2),

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \sum_n K_n(x_f, t_f; x_i, t_i). \quad (2.3)$$

A la limite où l'espace entre les positions initiale et finale est remplie d'écrans, et chaque écran est percé partout de fentes, la somme doit être prise sur tous les chemins possibles reliant (x_i, t_i) et (x_f, t_f) . Mais un écran percé partout de fentes ne joue plus le rôle d'écran, puisque

il ne bloque plus les particules. Cette limite est alors équivalente à la situation sans aucun écran. On conclue que le propagateur de Feynman peut s'exprimer comme une somme de contributions associées à toutes les trajectoires qui partent de la position x_i à l'instant t_i et arrivent à la position x_f à l'instant t_f . Le but de la prochaine section est de formaliser cette notion de somme sur toutes les trajectoires et de calculer la contribution venant de chacune.

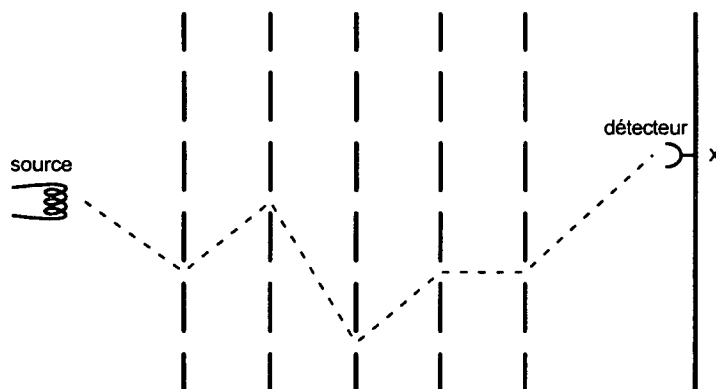


FIG. 2.3 – La situation hypothétique où la source et le détecteur sont séparés par plusieurs écrans, chacun percé de plusieurs fentes. Le chemin en pointillé sert en tant que guide pour l'œil de la même façon que les chemins dans la Figure 2.1. Il indique une succession possible de fentes que la particule peut prendre.

2.1.3 Obtention de la formulation d'intégrale de chemin

La formulation d'intégrale de chemin de Feynman [10, 24] est une formulation alternative de la mécanique quantique non-relativiste. Mais alors que Feynman a utilisé cette approche pour aboutir à la formulation standard de la mécanique quantique en termes d'opérateurs, on peut également démontrer l'équivalence entre les deux formulations dans le sens inverse. C'est-à-dire, en partant de la définition (2.1) du propagateur de Feynman, utiliser les propriétés de l'opérateur d'évolution pour retrouver la formulation d'intégrale de chemin. C'est cette démonstration que je vais présenter ici.

La méthode que je vais suivre pour obtenir la formulation d'intégrale de chemin du propagateur de Feynman est standard, et se trouve dans de nombreux livres [25]. On verra que le propagateur s'exprime comme une somme sur tous les chemins qui partent du point initial (x_i, t_i) et aboutissent au point final (x_f, t_f) . Ces chemins incluent non seulement les trajectoires 'classiques', c'est-à-dire les trajectoires qui satisfont aux équations classiques du mouvement, mais tous les chemins possibles qui relient les points initial et final. Chaque trajectoire contribue à la somme par une valeur dont la phase est proportionnelle à l'action le long de la trajectoire, mais dont le module est indépendant de la trajectoire.

A partir de la définition du propagateur de Feynman (2.1), on divise le temps d'évolution $[t_i, t_f]$ en $N + 1$ intervalles de durée égale $\epsilon = (t_f - t_i)/(N + 1)$. On va considérer la limite où le nombre d'intervalles tend vers l'infini $N \rightarrow \infty$, la durée ϵ de chaque intervalle tendant vers zéro: $\epsilon \rightarrow 0$. On dénote par t_j l'instant $t_j = t_i + j\epsilon$. L'instant initial est alors $t_0 = t_i$ et l'instant final est $t_{N+1} = t_f$. En utilisant la propriété de composition de l'opérateur d'évolution

$$U(t_f, t_i) = U(t_f, t_m)U(t_m, t_i) \quad (2.4)$$

(où $t_f > t_m > t_i$), on peut décomposer $U(t_f, t_i)$ en un produit de $N+1$ opérateurs d'évolution aux temps courts, ce qui donne

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \langle x_f | U(t_{N+1}, t_N) \dots U(t_2, t_1) U(t_1, t_0) | x_i \rangle \quad (2.5)$$

En introduisant entre chaque opérateur U la relation de fermeture

$$1 = \int dx |x\rangle \langle x| \quad (2.6)$$

on arrive à l'expression suivante du propagateur de Feynman

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int dx_1 \dots dx_N \prod_{j=0}^N \langle x_{j+1} | U(t_{j+1}, t_j) | x_j \rangle \quad (2.7)$$

On peut associer un sens physique au produit $\prod_{j=0}^N \langle x_{j+1} | U(t_{j+1}, t_j) | x_j \rangle$. Il représente une amplitude de probabilité pour que la particule prenne le chemin qui passe successivement par les positions x_0, x_1, \dots, x_{N+1} à des instants également séparés. Ce chemin est indiqué sur la Figure 2.4. Noter que la position initiale $x_0 = x_i$ ainsi que la position finale $x_{N+1} = x_f$ sont fixées, mais que les positions intermédiaires peuvent prendre des valeurs quelconques. En intégrant sur toutes les valeurs de position possibles à chaque instant t_j , ($j = 1, \dots, N$) on somme ainsi les amplitudes de probabilité de tous les chemins possibles.

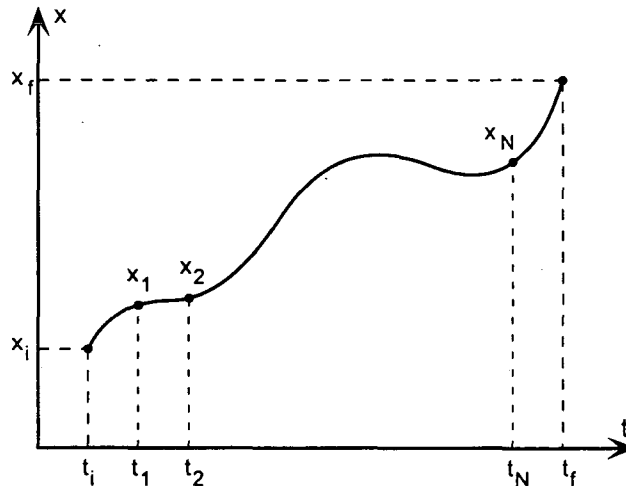


FIG. 2.4 - Un chemin qui relie la position initiale $x_0 = x_i$ et la position finale $x_{N+1} = x_f$, et qui passe par des positions intermédiaires x_1, x_2, \dots, x_N à des instants régulièrement séparés.

Calculons maintenant la valeur de l'intégrale (2.7) pour une particule dont l'évolution est gouvernée par le hamiltonien

$$\mathcal{H}(\hat{x}, \hat{p}, t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}, t) \quad (2.8)$$

où \hat{x} et \hat{p} sont les opérateurs de position et d'impulsion. Tous les hamiltoniens que nous allons considérer dans la suite sont de cette forme. A la limite où la durée ϵ de chaque intervalle de temps $[t_j, t_{j+1}[$ tend vers zéro, on peut utiliser l'expression suivante pour l'opérateur

d'évolution $U(t_{j+1}, t_j) = U(t_j + \epsilon, t_j)$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} U(t_j + \epsilon, t_j) = \exp \left[-i \frac{\epsilon}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} \right] \exp \left[-i \frac{\epsilon}{\hbar} V(\hat{x}, t_j) \right] \quad (2.9)$$

Cette expression nous permet de calculer la limite du propagateur aux temps courts qui apparaît dans l'intégrale (2.7),

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle x_{j+1} | U(t_j + \epsilon, t_j) | x_j \rangle = \exp \left[-i \frac{\epsilon}{\hbar} V(x_j, t_j) \right] \left\langle x_{j+1} \left| \exp \left[-i \epsilon \frac{\hat{p}^2}{2m\hbar} \right] \right| x_j \right\rangle \quad (2.10)$$

Signalons qu'en toute rigueur on devrait prendre la valeur du potentiel à la position intermédiaire $(x_{j+1} + x_j)/2$. Toutefois, ce choix n'a aucune importance pour un potentiel scalaire de type $V(x, t)$. En revanche, dans le cas d'un potentiel vecteur $\mathbf{A}(x, t)$, la position à laquelle on calcule le potentiel est critique, puisqu'elle change la valeur de l'intégrale (2.7) (voir la référence [25]).

Le facteur de droite dans (2.10) se calcule en projetant sur toutes les impulsions. Si on insère la relation de fermeture

$$1 = \int dp |p\rangle \langle p| \quad (2.11)$$

dans ce facteur on obtient

$$\left\langle x_{j+1} \left| \exp \left[-i \epsilon \frac{\hat{p}^2}{2m\hbar} \right] \right| x_j \right\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{-i\epsilon p^2/2m\hbar} e^{ip(x_{j+1}-x_j)/\hbar} \quad (2.12)$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} \exp \left[i \epsilon \frac{m}{2\hbar} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} \right)^2 \right] \quad (2.13)$$

En reportant cette relation dans l'intégrale (2.7) on arrive à l'expression suivante pour le propagateur de Feynman

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{(N+1)/2} \times \int dx_1 \dots dx_N \exp \left\{ i \frac{\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^N \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} \right)^2 - V(x_j, t_j) \right] \right\} \quad (2.14)$$

Notons qu'à la limite $N \rightarrow \infty$, où l'intervalle de temps ϵ tend vers zéro, l'exposant dans l'intégrand est proportionnel au lagrangien \mathcal{L}

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} \right)^2 - V(x_j, t_j) \right] = \frac{m\dot{x}_j^2}{2} - V(x_j, t_j) = \mathcal{L}(x_j, \dot{x}_j, t_j) \quad (2.15)$$

où \dot{x}_j est la vitesse de la particule à l'instant t_j . On arrive alors à la formulation d'intégrale de chemin

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int_{(x_i, t_i)}^{(x_f, t_f)} \mathcal{D}[x(t)] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \mathcal{L}[x(t), \dot{x}(t), t] \right\} \quad (2.16)$$

où la notation $\mathcal{D}[x(t)]$ signifie une intégrale sur toutes les trajectoires $x(t)$ reliant les points (x_i, t_i) et (x_f, t_f) . (La définition précise de cette notation s'obtient au moyen de l'expression (2.14).) L'exposant est proportionnel à l'action $S[x(t)]$ le long de la trajectoire $x(t)$

$$\int_{t_i}^{t_f} dt \mathcal{L}[x(t), \dot{x}(t), t] = S[x(t)] \quad (2.17)$$

On voit alors que le propagateur de Feynman s'exprime comme une somme de contributions venant de toutes les trajectoires possibles reliant les points initial et final, chaque contribution comportant une phase proportionnelle à l'action le long de la trajectoire.

2.2 La limite semi-classique

Dans cette section on va utiliser la formulation d'intégrale de chemin pour étudier la limite semi-classique $\hbar \rightarrow 0$ du propagateur de Feynman. On verra qu'à cette limite l'intégrale (2.16) est dominée par les trajectoires classiques qui relient le point initial (x_i, t_i) au point final (x_f, t_f) . La valeur du propagateur de Feynman $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$ est alors déterminée par les propriétés de ces trajectoires. Ceci explique comment les prédictions de la mécanique quantique tendent vers celles de la mécanique classique à la limite $\hbar \rightarrow 0$. L'approximation BKW du propagateur consiste à sommer les contributions de toutes les trajectoires classiques du système. Cette méthode est très pratique pour l'analyse d'un interféromètre, parce qu'elle donne l'amplitude de probabilité associée à chaque bras.

En décrivant la limite semi-classique, il nous a semblé utile du point de vue conceptuel de faire une analogie entre la formulation d'intégrale de chemin qui décrit la propagation d'une particule matérielle et la construction de Huygens qui s'applique à la lumière. La construction de Huygens est basée sur les propriétés ondulatoires de la lumière. La ressemblance entre cette construction et la formulation d'intégrale de chemin montre bien que cette dernière représente un modèle ondulatoire de la matière. Le fait qu'on retrouve la dynamique classique à partir de la formulation d'intégrale de chemin à la limite $\hbar \rightarrow 0$ est analogue au fait qu'on obtient l'optique géométrique à partir de la construction de Huygens à la limite de petites longueurs d'ondes. Les trajectoires classiques des particules correspondent aux rayons de la lumière.

2.2.1 Analogie avec la construction de Huygens

Huygens [26] visualisait la lumière comme une onde qui se propage dans une matière qu'il appelait 'l'ether', de la même façon que le son se propage dans l'air ou les vagues d'eau sur la surface d'un lac. Chaque point d'un objet lumineux produirait une onde sphérique dont ce point serait le centre. L'onde sphérique s'étendrait de la source, tout comme les ondes circulaires s'étendent autour d'un point dans un étang où est tombée une pierre. Elle consisterait en une agitation des 'particules' de l'ether. Chaque particule de l'ether communiquerait à son tour son mouvement à toutes les particules qui l'entourent, créant ainsi une ondelette sphérique secondaire (voir la Figure 2.5). L'enveloppe de ces ondes secondaires constituerait le nouveau front d'onde, qui se propage à la vitesse de la lumière. Avec ce modèle Huygens a pu démontrer les lois de réflexion et réfraction, et expliquer le phénomène de birefringence.

Plus d'un siècle plus tard, Fresnel a introduit la notion de longueur d'onde, chaque ondelette de Huygens ayant une fréquence d'oscillation, une amplitude et une phase bien définie. Le principe d'Huygens ainsi généralisé, appelé principe de Huygens-Fresnel, permet de rendre compte de phénomènes d'interférence et de diffraction observés en optique.

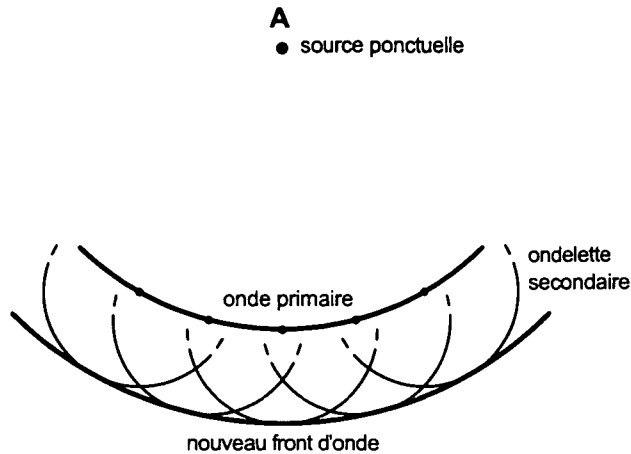


FIG. 2.5 – La construction de Huygens. Un point A d'un objet lumineux émet une onde sphérique qui se propage dans 'l'ether'. Toutes les particules de l'ether produisent à leur tour des ondelettes sphériques, dont l'enveloppe constitue le nouveau front d'onde.

Comparons ce modèle de la propagation de la lumière à la formulation de Feynman de la propagation des particules de matière. De la même façon que Feynman cherche à calculer l'amplitude de probabilité pour qu'une particule arrive au point final (x_f, t_f) étant donné qu'elle est partie du point initial (x_i, t_i) , on peut s'intéresser à l'amplitude de l'onde lumineuse au point (x_f, t_f) étant donné une source de lumière à la position x_i ¹. Selon la construction de Huygens-Fresnel, on peut considérer une série d'ondelettes décrivant la propagation de la lumière de proche en proche du point x_i jusqu'à la position du détecteur x_f , et constituant un certain chemin représenté par la Figure 2.6. L'amplitude totale de l'onde lumineuse à la position x_f dépend de l'interférence des contributions venant de tous les chemins possibles. La contribution de chaque chemin est déterminée par la phase de l'excitation optique associée au chemin. Cette phase est proportionnelle à la longueur optique du chemin, qui, elle, est proportionnelle au temps que met la lumière pour suivre le chemin. Ce modèle est analogue à la formulation d'intégrale de chemin de Feynman, qui exprime le propagateur comme une somme sur toutes les trajectoires possibles reliant les points initial et final (x_i, t_i) et (x_f, t_f) . La contribution de chaque trajectoire au propagateur dépend d'une phase qui est proportionnelle à l'action le long de la trajectoire².

1. Notons qu'à strictement parler le Principe de Huygens n'est pas correcte en optique. Comme l'équation d'onde est du second degré en temps, le calcul de l'amplitude du champ lumineux à un instant donné ne peut pas se faire à partir de l'amplitude initiale seulement, mais nécessite aussi une connaissance de la dérivée par rapport au temps de l'amplitude initiale. Pourtant, pour un paquet d'onde dont l'enveloppe est lentement variable, le degré de l'équation en temps est effectivement réduit. En ce cas le Principe de Huygens est correct. En revanche, le Principe de Huygens-Fresnel est exacte sans cette restriction pour les ondes de matière dans la mécanique quantique non-relativiste, car l'équation de Schrödinger est du premier degré en temps.

2. Dans la construction de Huygens Fresnel il existe un déphasage de $\pi/2$ entre les ondes secondaires et l'onde incidente. Un déphasage analogue existe dans la formulation de Feynman (voir l'expression (2.13), qui contient un déphasage de $-\pi/4$). Pour comprendre cette différence il faut prendre en compte la dimension de l'espace dans laquelle le calcul est fait. L'expression (2.13) est le résultat pour le propagateur à une dimension, tandis que la construction de Huygens Fresnel est un problème à deux dimensions (la vitesse fixe de la lumière réduisant effectivement la dimension du problème de trois à deux). En effet si on calcul le propagateur (2.13) à deux dimensions on retrouve le même déphasage de Huygens Fresnel, c'est-à-dire $-\pi/2$. A trois dimensions on obtient un déphasage de $-3\pi/4$.

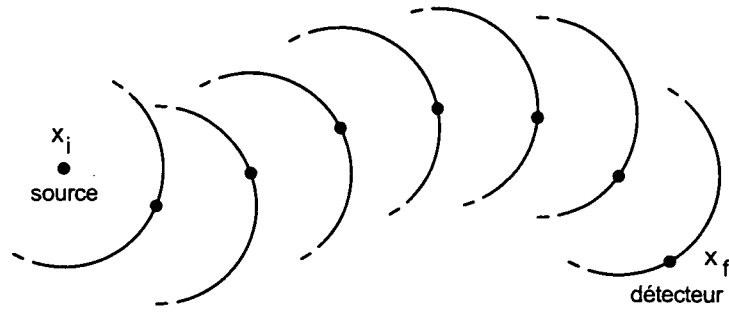


FIG. 2.6 – L'excitation de la source lumineuse à la position \mathbf{x}_i se transmet de proche en proche jusqu'au détecteur situé à la position \mathbf{x}_f .

A la limite où la longueur d'onde tend vers zéro $\lambda \rightarrow 0$, la propagation de la lumière se décrit bien par l'optique géométrique, c'est-à-dire en termes de rayons classiques. De même, à la limite semi-classique $\hbar \rightarrow 0$, la propagation des particules se conforme aux lois de la mécanique classique, c'est-à-dire, les particules suivent des trajectoires classiques. Ce comportement découle directement des formulations de Huygens-Fresnel et Feynman présentées ci-dessus. Dans les deux cas l'amplitude finale s'exprime comme une intégrale de contributions complexes des tous les chemins possibles. L'intégrale est dominée par la trajectoire dont la phase est stationnaire par rapport à de petites perturbations.

2.2.2 Les rayons optiques

Considérons d'abord la construction de Huygens-Fresnel. Dénotons par $\mathbf{x}(s)$ un chemin quelconque. Le paramètre s représente la distance le long du chemin, c'est-à-dire $|\mathbf{dx}/ds| = 1$. La phase Φ associée à chaque chemin est proportionnelle à la longueur optique \mathcal{S} du chemin

$$\Phi[\mathbf{x}(s)] = k\mathcal{S}[\mathbf{x}(s)] \quad (2.18)$$

où $k = 2\pi/\lambda$ et λ est la longueur d'onde dans le vide. La longueur optique vaut

$$\mathcal{S}[\mathbf{x}(s)] = \int_{\mathbf{x}_i}^{\mathbf{x}_f} ds n[\mathbf{x}(s)] \quad (2.19)$$

où $n(\mathbf{x})$ est l'indice de réfraction à la position \mathbf{x} . Notons que la longueur optique du chemin est proportionnelle au temps du trajet $T = \mathcal{S}/c$, où c est la vitesse de la lumière dans le vide. A la limite où la longueur d'onde tend vers zéro, la somme de Huygens est dominée par le chemin dont la longueur optique est la plus courte. La dominance de ce chemin est la base du Principe de Fermat, qui affirme que le chemin que prend un faisceau lumineux entre deux points est celui dont le temps de traversée est le plus court. Par un calcul variationnel on peut en déduire la Loi de Descartes

$$\begin{aligned} n \sin \theta &= \text{constante} \\ \phi &= \text{constante} \end{aligned} \quad (2.20)$$

θ est l'angle entre la direction de propagation de la lumière et la direction normale au plan d'indice de réfraction constant. ϕ est l'angle azimuthal, c'est-à-dire l'angle de la projection du vecteur de propagation sur le plan d'indice de réfraction constant. La Loi de Descartes forme la base de l'optique géométrique. Selon le modèle géométrique, la propagation de la lumière peut se décrire comme un ensemble de rayons classiques qui satisfont à l'équation (2.20).

2.2.3 Les trajectoires classiques

Considérons maintenant la formulation d'intégrale de chemin du propagateur de Feynman. La phase Φ associée à chaque chemin $x(t)$ reliant les points initial et final est proportionnelle à l'action (2.17) le long du chemin

$$\Phi[x(t)] = S[x(t)]/\hbar \quad (2.21)$$

De la même façon que la somme de Huygens-Fresnel est dominée à la limite $\lambda \rightarrow 0$ par le chemin optique de moindre temps, l'intégrale de chemin de Feynman est dominée à la limite $\hbar \rightarrow 0$ par la trajectoire dont l'action est stationnaire. En utilisant une méthode variationnelle on peut montrer que ce chemin est la trajectoire classique, c'est-à-dire la trajectoire qui satisfait à l'équation de Lagrange.

L'action $S[x(t)]$ est l'intégrale du lagrangien le long du chemin $x(t)$ (voir l'équation (2.17)). Si on varie le chemin par une petite perturbation $\delta x(t)$, en gardant les points initial et final fixés, la valeur de l'action change par la petite quantité

$$\delta S[x(t)] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} \delta x(t) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x}(t) \right\} \quad (2.22)$$

où les dérivées partielles de \mathcal{L} sont évaluées sur le chemin $x(t)$. La trajectoire dont l'action est stationnaire est celle pour laquelle $\delta S[x(t)]$ vaut zéro. En calculant $\delta S[x(t)]$ on trouvera cette trajectoire. L'expression (2.22) se résout en utilisant l'intégration par parties

$$\delta S[x(t)] = \left. \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \delta x(t) \right|_{t_i}^{t_f} + \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \right\} \delta x(t) \quad (2.23)$$

Puisque la perturbation ne change pas les positions initiale et finale $\delta x(t_i) = \delta x(t_f) = 0$, le premier terme vaut zéro. Pour que $\delta S[x(t)] = 0$ il faut alors que le deuxième terme aussi vaille zéro pour une perturbation quelconque, ce qui implique que

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = 0 \quad (2.24)$$

On obtient ainsi l'équation de Lagrange, qui décrit le mouvement d'une particule classique. On voit aussi qu'à la limite semi-classique $\hbar \rightarrow 0$ le propagateur de Feynman est déterminé par les propriétés de la trajectoire classique reliant les points initial et final (x_i, t_i) et (x_f, t_f) . C'est ainsi que les prédictions de la mécanique quantique tendent vers celles de la mécanique classique quand \hbar tend vers zéro.

2.2.4 La forme BKW du propagateur

Il est possible que la trajectoire classique Γ reliant les points initial et final (x_i, t_i) et (x_f, t_f) ne soit pas unique³. Par exemple, dans l'expérience à deux fentes (voir la Figure 2.1) il existe deux trajectoires classiques. Si la particule ne subit pas de force ni dans la région entre la source et l'écran ni dans la région entre l'écran et le détecteur, les trajectoires classiques sont précisément les chemins tracés en pointillé dans la Figure 2.1, c'est-à-dire elles suivent des lignes droites. Notons pourtant, que lors de la traversée d'une fente la direction de

3. Je vais utiliser la notation Γ pour une trajectoire classique, pour le distinguer d'une trajectoire quelconque $x(t)$.

la particule peut changer brusquement. Ceci s'explique par le fait que la fente peut transférer de l'impulsion à la particule. Notons également que l'impulsion initiale dépend de la trajectoire. Cette différence d'impulsion initiale entre les deux trajectoires est conforme aux lois de la mécanique quantique. En effet, puisque la position initiale de la particule est définie précisément, son impulsion initiale n'est pas parfaitement défini.

L'existence de plus d'une trajectoire classique Γ reliant les points initial et final est ce qui caractérise un interféromètre. On a vu dans la Section 2.2.3 qu'à la limite semi-classique ce sont les trajectoires classiques qui dominent l'intégrale de chemin (2.16), puisque leur action est stationnaire. La valeur du propagateur à la limite semi-classique dépend donc seulement des propriétés de ces trajectoires. Ce fait simplifie énormément le calcul du propagateur car, comme on verra dans la suite, il réduit le problème quantique à un problème classique.

L'approximation la plus rudimentaire, que je vais appeler la méthode BKW, consiste à prendre une somme sur toutes les trajectoires classiques. Notons la différence entre la somme BKW et l'intégrale de chemin (2.16): Tandis que le propagateur BKW s'exprime comme une *somme discrète sur toutes les trajectoires classiques* Γ , le propagateur exact est une *intégrale sur toutes les trajectoires possibles* $x(t)$, y compris celles qui ne satisfont pas aux équations classiques du mouvement. De même, la contribution venant de chaque trajectoire est différente dans les deux cas. Dans le cas du propagateur exact, chaque contribution à l'intégrale comporte une amplitude égale à 1, et une phase proportionnelle à l'action $S[x(t)]$ de long de la trajectoire. Dans le cas du propagateur semi-classique la phase de chaque contribution est toujours égale à l'action S_Γ divisée par \hbar , mais l'amplitude dépend de la trajectoire. Si on dénote cette amplitude par A_Γ , on peut alors écrire le propagateur BKW sous la forme

$$K_{\text{BKW}}(x_f, t_f; x_i, t_i) = \sum_{\Gamma} A_{\Gamma}(x_f, t_f; x_i, t_i) e^{iS_{\Gamma}(x_f, t_f; x_i, t_i)/\hbar} \quad (2.25)$$

L'approximation BKW (2.25) est très utile pour étudier un interféromètre dans le régime semi-classique. En effet, il suffit de calculer les contributions $A_{\Gamma} \exp[iS_{\Gamma}/\hbar]$ associées à toutes les trajectoires classiques du système et de les sommer. Par exemple, pour l'expérience à deux fentes il n'y a que deux termes à calculer, au lieu de l'infinité de termes qui sont présents dans l'expression exacte (2.16).

La forme $A_{\Gamma} \exp[iS_{\Gamma}/\hbar]$ de chaque contribution peut être expliquée de façon heuristique. Dans la Section 2.2.3 on a défini une différentielle $\delta S[x(t)]$ qui représente la variation de l'action au premier ordre due à une perturbation $\delta x(t)$ de la trajectoire. On pourrait aussi calculer la variation $\delta^2 S[x(t)]$ au second ordre due à la même perturbation. Formellement l'action peut donc s'exprimer sous forme d'un développement de Taylor

$$S[x(t) + \delta x(t)] = S[x(t)] + \left. \frac{\delta S}{\delta x} \right|_{x(t)} \delta x(t) + \frac{1}{2} \left. \frac{\delta^2 S}{\delta x^2} \right|_{x(t)} [\delta x(t)]^2 + \dots \quad (2.26)$$

Soit $\bar{x}_{\Gamma}(t)$ la paramétrisation d'une trajectoire classique Γ . Puisque l'action est stationnaire autour de cette trajectoire, le terme du premier ordre dans le développement de Taylor est nul. On trouve alors

$$S[\bar{x}_{\Gamma}(t) + \delta x(t)] = S[\bar{x}_{\Gamma}(t)] + \frac{1}{2} \left. \frac{\delta^2 S}{\delta x^2} \right|_{\bar{x}_{\Gamma}(t)} [\delta x(t)]^2 + \dots \quad (2.27)$$

L'approximation BKW consiste à tronquer ce développement après le terme du second ordre. La signification de ce terme sera précisé dans la Section 2.4, où il sera calculé explicitement.

Pour l'instant je ne ferai que retrouver la forme (2.25) de la solution BKW, et d'écrire une expression formelle pour l'amplitude semi-classique. Autour de chaque trajectoire classique on prend l'intégrale de chemin sur toutes les perturbations possibles qui gardent les positions initiale et finale constantes, $\delta x(t_i) = \delta x(t_f) = 0$. Ceci revient à prendre en compte toutes les trajectoires requises par la formulation de Feynman. En tronquant l'action de chaque trajectoire après le terme du second ordre en $\delta x(t)$, on obtient

$$K_{\text{BKW}}(x_f, t_f; x_i, t_i) = \sum_{\Gamma} e^{iS[\bar{x}_{\Gamma}(t)]/\hbar} \int_{(0,t_i)}^{(0,t_f)} \mathcal{D}[\delta x(t)] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{\delta^2 S}{\delta x^2} \Big|_{\bar{x}_{\Gamma}(t)} [\delta x(t)]^2 \right\} \quad (2.28)$$

Puisque $S[\bar{x}_{\Gamma}(t)]$ est l'action le long de la trajectoire Γ , notée précédemment $S_{\Gamma}(x_f, t_f; x_i, t_i)$, on retrouve l'expression (2.25) en posant

$$A_{\Gamma}(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int_{(0,t_i)}^{(0,t_f)} \mathcal{D}[\delta x(t)] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{\delta^2 S}{\delta x^2} \Big|_{\bar{x}_{\Gamma}(t)} [\delta x(t)]^2 \right\} \quad (2.29)$$

Comme cette intégrale est quadratique on peut l'effectuer exactement (voir la Section 2.4), et obtenir une expression simple pour l'amplitude semi-classique. On trouvera qu'elle correspond à la racine carrée d'une densité classique. Une autre façon de calculer l'amplitude semi-classique est présentée dans l'article qui suit. Elle consiste à supposer la forme (2.25) du propagateur, et de la substituer dans l'équation de Schrödinger. Les termes d'ordre zéro en \hbar donnent l'équation Hamilton-Jacobi pour l'action S_{Γ} , et les termes du premier ordre donnent une équation de continuité pour l'amplitude A_{Γ} . Ce procédé est une généralisation de la méthode BKW standard, et c'est pour cette raison que j'ai appelé la solution (2.25) l'approximation BKW. Notons pourtant que cette approximation n'est pas valable pour les trajectoires dont le différentielle du second ordre $\delta^2 S$ est nulle. Ce sont les trajectoires autour desquelles la densité de chemins diverge. Dans ce cas, il faut prendre en compte le terme d'ordre trois dans le développement de Taylor (2.27). De telles trajectoires correspondent aux caustiques, et seront considérées dans le Chapitre 3.

2.3 Propagateurs généralisés

Dans le cas où l'état initial d'une particule n'est pas un état propre de position, le propagateur de Feynman ne s'applique pas directement. Il est possible qu'au lieu de la position initiale on connaisse plutôt l'impulsion initiale ou l'énergie initiale de la particule. Dans ce cas il est commode d'introduire des propagateurs généralisés qui dépendent de l'impulsion ou de l'énergie respectivement. Cette généralisation permet également d'étudier non seulement la fonction d'onde finale de la particule, mais aussi sa distribution d'impulsion ou son spectre d'énergie.

2.3.1 Propagateurs dépendant de l'impulsion

Dans cette section on introduit deux propagateurs nouveaux qui dépendent de l'impulsion de la particule. Le propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ est défini comme l'amplitude de probabilité pour qu'une particule partant avec l'impulsion p_i à l'instant initial t_i arrive à la position x_f à l'instant final t_f . Un autre propagateur $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$, qui décrit la distribution d'impulsion finale, est défini comme l'amplitude de probabilité pour qu'une particule commençant avec

l'impulsion p_i à l'instant initial t_i termine avec l'impulsion p_f à l'instant final t_f . On peut écrire donc

$$\begin{aligned}\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i) &\equiv \langle x_f | U(t_f, t_i) | p_i \rangle \\ \bar{\bar{K}}(p_f, t_f; p_i, t_i) &\equiv \langle p_f | U(t_f, t_i) | p_i \rangle\end{aligned}\quad (2.30)$$

pour $t_f > t_i$, et $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i) = \bar{\bar{K}}(p_f, t_f; p_i, t_i) = 0$ pour $t_f < t_i$. Ces propagateurs sont tous les deux des transformées de Fourier du propagateur de Feynman

$$\begin{aligned}\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx_i K(x_f, t_f; x_i, t_i) e^{ip_i x_i / \hbar} \\ \bar{\bar{K}}(p_f, t_f; p_i, t_i) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx_f \int dx_i K(x_f, t_f; x_i, t_i) e^{i(p_i x_i - p_f x_f) / \hbar}.\end{aligned}\quad (2.31)$$

Les expressions (2.31) montre que l'évolution d'une particule initialement dans un état propre d'impulsion se décrivent comme une intégrale du propagateur de Feynman sur toutes les positions initiales. Cette propriété vient du fait que la fonction d'onde d'un état propre d'impulsion est étendue sur toute l'espace. Le facteur $e^{ip_i x_i / \hbar}$ représente la phase de la fonction d'onde initiale. L'intégration sur toutes les positions initiales est analogue à la construction de Huygens pour une onde plane optique (voir la Figure 2.7): Chaque point sur le front d'onde initial émet des ondelettes sphériques, et le nouveau front d'onde est composé de l'enveloppe de toutes les ondelettes.

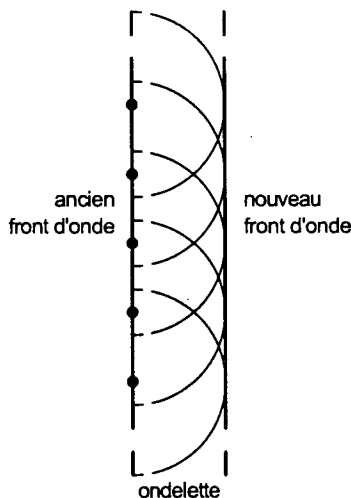


FIG. 2.7 – La construction de Huygens pour une onde plane incidente.

A partir des expressions (2.31) on peut étudier la limite semi-classique des propagateurs $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ et $\bar{\bar{K}}(p_f, t_f; p_i, t_i)$. Considérons d'abord le propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$. En substituant l'équation (2.16) pour le propagateur de Feynman il s'exprime comme une somme sur des chemins

$$\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx_i \int_{(x_i, t_i)}^{(x_f, t_f)} \mathcal{D}[x(t)] e^{i\{S[x(t)] + p_i x_i\} / \hbar} \quad (2.32)$$

A la limite semi-classique les contributions principales à cette intégrale proviennent du voisinage des trajectoires auxquelles la phase est stationnaire. Multipliant cette phase par \hbar on

obtient une 'action généralisée' $\bar{S}[x(t)]$, qui est égale à la somme de l'action le long de la trajectoire et d'un terme venant de la phase initiale au point de départ

$$\bar{S}[x(t)] = S[x(t)] + p_i x(t_i) \quad (2.33)$$

Les trajectoires dominantes sont donc ceux dont l'action généralisée \bar{S} est invariante au premier ordre par rapport à une perturbation $\delta x(t)$ de la trajectoire. L'expression pour la variation au premier ordre est

$$\delta \bar{S} = p_i \delta x_i + \left. \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \delta x(t) \right|_{t_i}^{t_f} + \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \right] \delta x(t). \quad (2.34)$$

L'intégrand du dernier terme vaut zéro pour une trajectoire classique. Considérons donc le deuxième terme. Puisque la position finale $x(t_f) = x_f$ est fixée par les conditions limites, on obtient $\delta x(t_f) = 0$. La perturbation de la position initiale est $\delta x(t_i) = \delta x_i$. Les trajectoires dont l'action généralisée est stationnaire sont donc des trajectoires classiques, dont l'impulsion initiale est p_i ,

$$\frac{\partial \mathcal{L}(t_i)}{\partial \dot{x}} = p_i. \quad (2.35)$$

Ces trajectoires, que je dénote par $\bar{\Gamma}$, sont les trajectoires racines de $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$.

Le propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ peut s'appliquer à un interféromètre comme celui de la Figure 2.8, pour lequel l'impulsion initiale des particules est définie très précisément. Notons que la position initiale des particules contient une large incertitude. Les chemins $\bar{\Gamma}_1$ et $\bar{\Gamma}_2$ sont les trajectoires racines du système, qui partent à l'instant t_i avec l'impulsion p_i et qui arrivent à l'instant t_f au détecteur situé à la position x_f . Notons que les positions initiales $x_i^{\bar{\Gamma}_1}$ et $x_i^{\bar{\Gamma}_2}$ des trajectoires ne sont pas les mêmes.

Comme pour le propagateur de Feynman, la valeur de $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ dépend uniquement des trajectoires racines à la limite semi-classique. L'approximation BKW consiste à sommer les contributions de chacun. La solution prend la forme

$$\bar{K}_{\text{BKW}}(x_f, t_f; p_i, t_i) = \sum_{\bar{\Gamma}} \bar{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i) e^{i\bar{S}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i)/\hbar} \quad (2.36)$$

où $\bar{S}_{\bar{\Gamma}}$ est l'action généralisée de la trajectoire racine $\bar{\Gamma}$

$$\bar{S}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i) = S_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i^{\bar{\Gamma}}, t_i) + p_i x_i^{\bar{\Gamma}} \quad (2.37)$$

Notons que $\bar{S}_{\bar{\Gamma}}$ est une transformée de Legendre de l'action classique. L'amplitude semi-classique $\bar{A}_{\bar{\Gamma}}$ dépend de la variation au second ordre $\delta^2 \bar{S}$ de l'action généralisée autour de la trajectoire $\bar{\Gamma}$, et s'écrit d'une manière analogue à (2.29). On calculera cette variation explicitement dans la Section 2.4. On trouvera qu'elle vaut la racine carrée d'une densité classique.

Considérons maintenant le propagateur $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$. On pourrait l'appliquer à un interféromètre à réseaux du type indiqué dans la Figure 2.9. Puisque l'impulsion initiale des particules est définie précisément, la distribution d'impulsion après interaction avec chaque réseau est discrète. Avec trois réseaux on peut recombinaison deux 'faisceaux' de particules, et détecter l'interférence entre les deux bras.

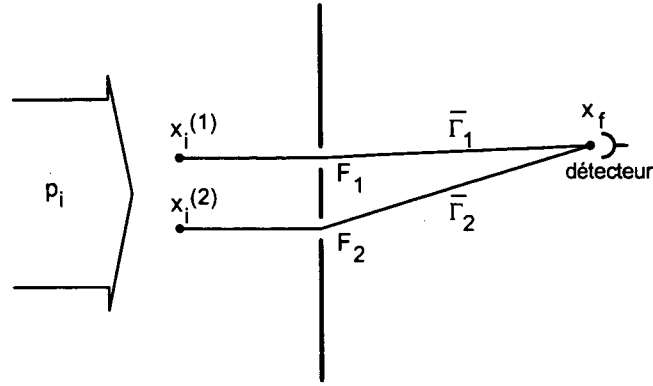


FIG. 2.8 – Une expérience à deux fentes où la particule est initialement dans un état propre d'impulsion.

Pour trouver la limite semi-classique du propagateur on l'exprime comme une somme sur des chemins

$$\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx_f \int dx_i \int_{(x_i, t_i)}^{(x_f, t_f)} \mathcal{D}[x(t)] e^{i\{S[x(t)] + p_i x_i - p_f x_f\}/\hbar} \quad (2.38)$$

Cette intégrale est dominée par les chemins dont l'action généralisée

$$\bar{S}[x(t)] = S[x(t)] + p_i x(t_i) - p_f x(t_f) \quad (2.39)$$

est stationnaire. Ce sont les trajectoires classiques dont l'impulsion initiale est p_i et l'impulsion finale est p_f . L'approximation BKW pour le propagateur $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ est une somme des contributions de chacun

$$\bar{K}_{\text{BKW}}(p_f, t_f; p_i, t_i) = \sum_{\bar{\Gamma}} \bar{A}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; p_i, t_i) e^{i\bar{S}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; p_i, t_i)/\hbar} \quad (2.40)$$

où $\bar{S}_{\bar{\Gamma}}$ est l'action généralisée

$$\bar{S}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; p_i, t_i) = S_{\Gamma} \left(x_f, t_f; x_i^{\bar{\Gamma}}, t_i \right) + p_i x_i^{\bar{\Gamma}} - p_f x_f^{\bar{\Gamma}} \quad (2.41)$$

$x_i^{\bar{\Gamma}}$ et $x_f^{\bar{\Gamma}}$ étant respectivement les positions initiale et finale de la trajectoire $\bar{\Gamma}$. $\bar{S}_{\bar{\Gamma}}$ est une double transformée de Legendre de l'action classique.

L'amplitude semi-classique $\bar{A}_{\bar{\Gamma}}$ dépend de la variation au second ordre $\delta^2 \bar{S}$ de l'action généralisée autour de la trajectoire $\bar{\Gamma}$. Elle sera calculée explicitement dans la Section 2.4. Le résultat montre que $\bar{A}_{\bar{\Gamma}}$ peut s'interpréter comme la racine carrée d'une densité classique. Pourtant la densité en ce cas est une densité d'impulsion, plutôt qu'une densité de position.

Notons que bien que les propagateurs $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ et $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ soient des transformées de Fourier du propagateur de Feynman $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$ (voir l'équation (2.31)), les approximations BKW $\bar{K}_{\text{BKW}}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ et $\bar{K}_{\text{BKW}}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ ne sont pas des transformées de Fourier de $K_{\text{BKW}}(x_f, t_f; x_i, t_i)$.

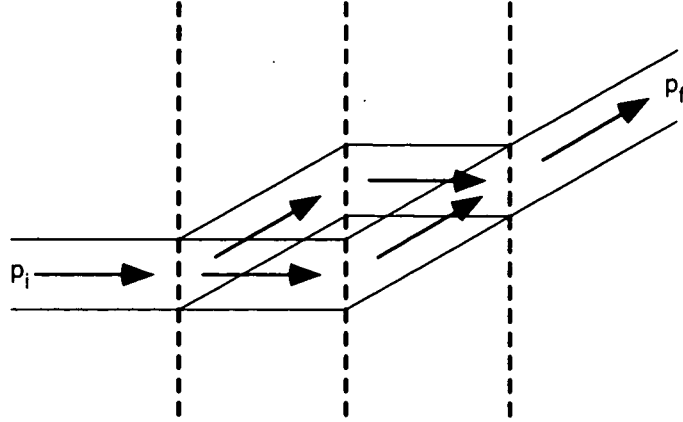


FIG. 2.9 – Un interféromètre qui consiste en trois réseaux, chacun desquels peut changer l'impulsion de la particule par des multiples de $\hbar k$, où k est déterminé par la périodicité du réseau. Les particules incidentes ont une impulsion p_i qui est bien définie.

2.3.2 Propagateurs dépendant de l'énergie

Certains problèmes sont plus facilement analysés en termes de l'énergie des particules plutôt que de leur impulsion. L'exemple le plus trivial est celui d'un état propre d'énergie dans un potentiel stationnaire. Le problème étudié dans ce mémoire est un autre exemple. L'énergie des particules incidentes est alors bien connue, et leur spectre au delà du potentiel prend une forme extrêmement simple, à savoir un peigne de composantes discrètes et régulièrement séparées. La raison pour laquelle ce problème est plus adapté à une analyse en termes d'énergie qu'en termes d'impulsion est qu'il est périodique en temps et plutôt qu'en position. En effet, la définition des propagateurs dépendant de l'énergie est identique à l'expression (2.31) pour les propagateurs dépendant de l'impulsion, sauf que les transformées de Fourier sont prises par rapport au temps plutôt qu'à la position

$$\begin{aligned}\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i) &\equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dt_i K(x_f, t_f; x_i, t_i) e^{-iE_i t_i/\hbar} \\ \tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i) &\equiv \frac{1}{2\pi\hbar} \int dt_f \int dt_i K(x_f, t_f; x_i, t_i) e^{-i(E_i t_i - E_f t_f)/\hbar}.\end{aligned}\quad (2.42)$$

Du fait que $K(x_f, t_f; x_i, t_i) = 0$ pour $t_f < t_i$, le domain d'intégration de t_i est effectivement de $-\infty$ jusqu'à t_f .

Si le potentiel est indépendant du temps, l'énergie reste constante durant l'évolution et le propagateur $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ est un état propre d'énergie. Pour un potentiel qui varie périodiquement dans le temps, tel que celui étudié dans ce mémoire, l'énergie finale E_f est une fonction discrète de l'énergie initiale $E_f = E_i + n\hbar\omega$, et le propagateur $\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ est un peigne de fonctions delta

$$\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i) = \sum_n \tilde{\tilde{K}}_n(x_f; x_i, E_i) \delta(E_f - E_i - n\hbar\omega).\quad (2.43)$$

Considérons maintenant la dépendance en position du propagateur. Elle est déterminée par la vitesse de la particule, qui est un fonction triviale de l'énergie. Si le potentiel est localisé dans l'espace, et que les positions initiale et finale se trouve à gauche et à droit du potentiel

respectivement, les vitesses initiale et finale sont toutes les deux positives, $v_i = \sqrt{2E_i/m}$ et $v_f = \sqrt{2E_f/m}$. La dépendance en position du propagateur est celle d'une onde plane

$$\tilde{K}_n(x_f; x_i, E_i) = \tilde{K}_n(E_i) e^{i(\sqrt{2m(E_i+n\hbar\omega)}x_f - \sqrt{2mE_i}x_i)/\hbar} \quad (2.44)$$

Le signe moins devant le terme en x_i vient du fait que la position initiale apparaît au côté 'ket' du propagateur au lieu qu'au côté 'bra'.

Dans le problème considéré dans ce mémoire, des atomes traversent un puits de potentiel modulé dans le temps et peuvent donc gagner ou perdre de l'énergie en unités de $\hbar\omega$. On définit le poids de chaque bande latérale comme l'intégrale de la distribution de probabilité d'impulsion sur la gamme d'impulsion qu'occupe cette bande. On trouve alors que les poids des bandes latérales sont

$$I_n = \frac{2}{m} \sqrt{E_i(E_i + n\hbar\omega)} \left| \tilde{K}_n(E_i) \right|^2. \quad (2.45)$$

Ce résultat est démontré dans l'article qui suit.

A la limite semi-classique on peut appliquer une approximation BKW aux propagateurs dépendant de l'énergie. La forme des solutions est la même que celle pour les autres propagateurs, et consiste en une somme de contributions de toutes les trajectoires racines du système.

$$\begin{aligned} \tilde{K}_{\text{BKW}}(x_f, t_f; x_i, E_i) &= \sum_{\tilde{\Gamma}} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) e^{i\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i)/\hbar} \\ \tilde{K}_{\text{BKW}}(x_f, E_f; x_i, E_i) &= \sum_{\tilde{\Gamma}} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i) e^{i\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i)/\hbar} \end{aligned} \quad (2.46)$$

L'action généralisée de chaque trajectoire est une transformée de Legendre par rapport au temps.

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) &= S_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, t_i^{\tilde{\Gamma}}) - E_i t_i^{\tilde{\Gamma}} \\ \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i) &= S_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f^{\tilde{\Gamma}}; x_i, t_i^{\tilde{\Gamma}}) + E_f t_f^{\tilde{\Gamma}} - E_i t_i^{\tilde{\Gamma}} \end{aligned} \quad (2.47)$$

L'amplitude semi-classique est la racine d'une densité de chemins classiques. Dans le cas du propagateur $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ il s'agit d'une densité dans l'espace des positions, et dans le cas du propagateur $\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ d'une densité dans le domain des énergies. La variation au second ordre de l'action généralisé étant difficile à calculer pour les propagateurs dépendant de l'énergie, on peut obtenir l'amplitude semi-classique plus facilement par la méthode BKW. Ce calcul est présenté dans l'article.

2.4 Calcul de l'amplitude semi-classique

Dans les deux dernières sections j'ai discuté l'approximation BKW pour les différents propagateurs. Les formes des solutions pour le propagateur de Feynman et les propagateurs dépendant de l'impulsion sont données dans les équations (2.25), (2.36) et (2.40). Celles des propagateurs dépendant de l'énergie sont analogues. Le but de cette section est de calculer

l'amplitude semi-classique qui figure dans chacune de ces expressions. On verra qu'elle est égale à la racine carrée d'une densité de chemins classiques.

Il existe (au moins) trois méthodes pour calculer l'amplitude semi-classique. La première est une méthode BKW généralisée. Elle est présentée en détail dans l'article, et je ne vais pas répéter la présentation ici. Elle consiste à supposer la forme BKW pour le propagateur, et à calculer la phase et l'amplitude de chacun des termes en les substituant dans l'équation de Schrödinger. Les termes d'ordre zéro en \hbar donnent une équation de type Hamilton-Jacobi qui détermine la phase, et les termes du premier ordre une équation de continuité pour l'amplitude. C'est cette équation de continuité qui justifie l'interprétation de l'amplitude en termes d'une densité classique.

La deuxième méthode pour obtenir l'amplitude est celle de la phase stationnaire. Cette méthode permet de calculer l'expression BKW pour un propagateur quelconque à partir de l'expression BKW d'un propagateur secondaire. Elle consiste à exprimer le propagateur donné comme une transformée de Fourier du propagateur secondaire, de substituer l'approximation BKW pour le propagateur secondaire, et puis de calculer l'intégrale en utilisant une approximation quadratique pour la phase autour de chaque point de phase stationnaire. Rappelons que les expressions BKW pour les différents propagateurs ne sont pas des transformées de Fourier l'un de l'autre. L'approximation de la phase stationnaire est nécessaire pour obtenir l'un à partir de l'autre. Un exemple d'un tel calcul est donné dans l'article, et la méthode est également à la base de l'introduction aux approximations uniformes (voir le Chapitre 3). Pour cette raison je ne vais pas la discuter ici.

La troisième méthode, qui est celle adoptée dans cette section, consiste à calculer l'intégrale de chemin autour de la trajectoire racine au deuxième ordre dans l'action généralisée (voir l'équation (2.29)). Elle est la plus directe des trois méthodes mentionnées. Pourtant elle a deux désavantages significatifs: Premièrement, elle nécessite plus de calculs algébriques que les autres méthodes, et elle est donc moins transparente. Deuxièmement, bien qu'elle s'applique facilement aux propagateurs qui ne dépendent que de la position et l'impulsion, elle est plus difficile à généraliser aux propagateurs dépendant de l'énergie.

Dans la Section 2.4.2 je vais interpréter les résultats obtenus dans la Section 2.4.1 en termes d'une densité classique. Chaque propagateur signifie la représentation dans un certain espace de configuration d'un état quantique. Par exemple, le propagateur de Feynman $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$ représente la fonction d'onde d'un système qui se trouve initialement dans un état propre de position. Le propagateur $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ représente la distribution d'impulsion d'un système qui se trouve initialement dans un état propre d'impulsion. On associe à l'état quantique un ensemble classique de particules. L'évolution de l'état se décrit dans la limite semi-classique en termes de l'évolution classique des particules qui constituent l'ensemble. L'amplitude semi-classique du propagateur est déterminée par la densité classique des particules. Si le propagateur représente la fonction d'onde de l'état quantique, la densité requise est la densité de particules en position. Si le propagateur représente la distribution d'impulsion de l'état, la densité requise est la densité de particules dans l'espace des impulsions. Une interprétation analogue existe pour les propagateurs dépendant de l'énergie.

2.4.1 Démonstration directe à partir de l'intégrale de chemin

Dans cette section je vais calculer directement, à partir de l'intégrale de chemin, les amplitudes semi-classiques pour le propagateur de Feynman et les propagateurs dépendant de l'impulsion. Une approximation quadratique est utilisée pour l'action généralisé autour de la

trajectoire racine. La variation au premier ordre est nulle par définition de la trajectoire racine. Le calcul de amplitude semi-classique revient alors à évaluer la variation au second ordre de l'action généralisée. Les résultats sont en accord avec les expressions (2.77), (2.78) et (2.79) et justifient donc l'interprétation des amplitudes comme la racine carrée d'une densité classique. Ils fournissent aussi les constantes de proportionnalité présentes dans ces expressions.

Le propagateur standard

La formulation d'intégrale de chemin exprime le propagateur de Feynman $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$ comme une intégrale d'une exponentielle de de l'action (2.16) sur toutes les trajectoires qui relient le point initial (x_i, t_i) au point final (x_f, t_f) . L'intégrale est dominée par les trajectoires dont l'action est stationnaire. Ce sont les trajectoires racines Γ . L'amplitude semi-classique associée à chaque trajectoire racine est déterminée par la variation au deuxième ordre de l'action classique autour de la trajectoire (2.29). Dans cette expression $\bar{x}_\Gamma(t)$ dénote la paramétrisation de la trajectoire Γ et $\delta x(t)$ est une perturbation quelconque satisfaisant aux conditions limites $\delta x(t_i) = \delta x(t_f) = 0$. La variation de l'action au second ordre est

$$\left. \frac{\delta^2 S}{\delta x^2} \right|_{\bar{x}_\Gamma(t)} [\delta x(t)]^2 = \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x^2} [\delta x(t)]^2 + 2 \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \dot{x} \partial x} \delta x(t) \delta \dot{x}(t) + \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \dot{x}^2} [\delta \dot{x}(t)]^2 \right\} \quad (2.48)$$

Pour un lagrangien de la forme

$$\mathcal{L}(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x, t) \quad (2.49)$$

l'expression (2.48) est égale à

$$\left. \frac{\delta^2 S}{\delta x^2} \right|_{\bar{x}_\Gamma(t)} [\delta x(t)]^2 = \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ m [\delta \dot{x}(t)]^2 - \partial_x^2 V[\bar{x}(t), t] [\delta x(t)]^2 \right\} \quad (2.50)$$

En reportant cette expression dans l'intégrale (2.29) on obtient

$$A_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int_{(0, t_i)}^{(0, t_f)} \mathcal{D}[\delta x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \{ m [\delta \dot{x}(t)]^2 - \partial_x^2 V[\bar{x}(t), t] [\delta x(t)]^2 \}} \quad (2.51)$$

Puisque l'intégrale de chemins (2.51) est gaussienne, on peut la calculer exactement. Je vais suivre la méthode utilisée par Schulman [25]. On échantillonne la perturbation $\delta x(t)$ à $N + 2$ instants régulièrement séparés entre t_i et t_f (voir la Figure 2.10). Dénotons ces instants par $\{t_0, t_1, \dots, t_N, t_{N+1}\}$, où $t_0 = t_i$ est l'instant initial et $t_{N+1} = t_f$ est l'instant final. Soit $\epsilon = (t_f - t_i)/(N + 1)$ la durée de chaque intervalle de temps. Le $j^{\text{ième}}$ instant est donc $t_j = t_i + j\epsilon$. Soit $\{y_0, y_1, \dots, y_N, y_{N+1}\}$ les valeurs échantillonnées de la perturbation $\delta x(t)$, $y_j = \delta x(t_j)$. Notons que $y_0 = y_{N+1} = 0$ à cause des conditions limites de $\delta x(t)$. Les autres valeurs y_1, \dots, y_N sont données par la perturbation $\delta x(t)$.

L'intégrale (2.51) sur toutes les perturbations peut s'écrire comme la limite $N \rightarrow \infty$ d'une intégrale multiple sur toutes les positions intermédiaires y_1, \dots, y_N (cf. équation (2.14))

$$A_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \int dy_1 \dots dy_N \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \sum_{j=0}^N \left[\frac{m}{\epsilon} (y_{j+1} - y_j)^2 - \epsilon c_j y_j^2 \right] \right\} \quad (2.52)$$

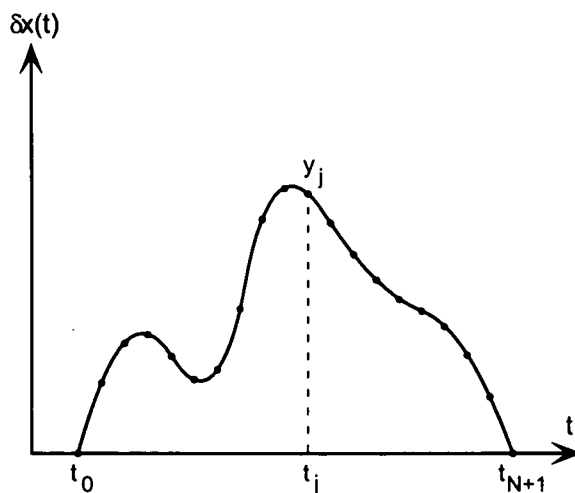


FIG. 2.10 - Une perturbation $\delta x(t)$ du type considéré dans le calcul de l'amplitude semi-classique $A_{\Gamma}(x_f, t_f; x_i, t_i)$. Elle est échantillonnée à $N + 2$ instants régulièrement séparés, où $t_0 \equiv t_i$ est l'instant initial et $t_{N+1} \equiv t_f$ est l'instant final. Notons que $\delta x(t_i) = \delta x(t_f) = 0$.

où le coefficient c_j est défini par

$$c_j \equiv \partial_x^2 V [\bar{x}_{\Gamma}(t_j), t_j]. \quad (2.53)$$

Pour effectuer l'intégrale (2.52) il convient de l'exprimer en termes de matrices. Définissant un vecteur de dimension N

$$\eta = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} \quad (2.54)$$

on peut écrire l'argument de l'exponentielle de (2.52) comme $i\eta^T \sigma \eta$ où σ est la matrice $N \times N$

$$\sigma = \frac{m}{2\epsilon\hbar} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & & \circ & \\ & & \ddots & & \\ & & & \circ & -1 \\ & \circ & & -1 & 2 \end{pmatrix} - \frac{\epsilon}{2\hbar} \begin{pmatrix} c_1 & & & & \\ & & & \circ & \\ & & \ddots & & \\ & \circ & & & \\ & & & & c_N \end{pmatrix} \quad (2.55)$$

L'intégrale (2.52) se résout maintenant en termes du déterminant de σ

$$\begin{aligned} A_{\Gamma}(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{(N+1)/2} \int d^N \eta e^{i\eta^T \sigma \eta} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} \left[\left(\frac{2\hbar \epsilon}{m} \right)^N \det \sigma \right]^{-1/2} \end{aligned} \quad (2.56)$$

Le déterminant s'obtient par récurrence. Il convient d'introduire une nouvelle matrice σ' en multipliant σ par un facteur scalaire

$$\sigma' = \frac{2\hbar \epsilon}{m} \sigma \quad (2.57)$$

Le déterminant de la nouvelle matrice

$$\det \sigma' = \left(\frac{2\hbar\epsilon}{m} \right)^N \det \sigma \quad (2.58)$$

est la valeur qui apparaît dans les crochets de l'équation (2.56). Pour appliquer la méthode de récurrence il faut définir des matrices tronquées σ'_j de taille $j \times j$ en prenant les premiers j rangs et colonnes de σ'

$$\sigma'_j = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & & & \\ & & \circ & & \\ & & \dots & & \\ & & & -1 & \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} - \frac{\epsilon^2}{m} \begin{pmatrix} c_1 & & & & \\ & \circ & & & \\ & & \dots & & \\ & & & \circ & \\ & & & & c_j \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

Soit D_j son déterminant

$$D_j = \det \sigma'_j \quad (2.60)$$

En définissant une fonction

$$f_N(t_j, t_i) \equiv \epsilon D_j \quad (2.61)$$

et sa limite à t_f quand $N \rightarrow \infty$

$$f(t_f, t_i) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} f_N(t_f, t_i) \quad (2.62)$$

on peut exprimer l'amplitude semi-classique comme

$$A_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{1/2} [f(t_f, t_i)]^{-1/2} \quad (2.63)$$

Il reste à trouver la fonction $f_N(t_f, t_i)$. Les déterminants D_j satisfont à l'équation

$$D_{j+1} = \left(2 - \frac{\epsilon^2}{m} c_{j+1} \right) D_j - D_{j-1}, \quad j = 2, \dots, N-1 \quad (2.64)$$

(voir l'Annexe B), qui s'écrit sous la forme

$$\frac{D_{j+1} - 2D_j + D_{j-1}}{\epsilon^2} = -\frac{c_{j+1}}{m} D_j \quad (2.65)$$

A la limite $N \rightarrow \infty$ on obtient une équation différentielle pour $f(t, t_i)$

$$\frac{\partial^2 f(t, t_i)}{\partial t^2} = -\frac{\partial_x^2 V[\bar{x}_\Gamma(t), t]}{m} f(t, t_i) \quad (2.66)$$

où on a substitué la valeur (2.53) pour c_j . Notons que (2.66) est une linéarisation des équations de mouvement. Pour comprendre la signification physique de $f(t, t_i)$ il faut considérer aussi les conditions initiales $f(t = t_i, t_i)$ et $\partial_t f(t = t_i, t_i)$. Elles s'obtiennent directement à partir des matrices σ'_1 et σ'_2

$$\begin{aligned} f(t = t_i, t_i) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \epsilon D_1 = 0 \\ \partial_t f(t = t_i, t_i) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \epsilon \left(\frac{D_2 - D_1}{\epsilon} \right) = 1 \end{aligned} \quad (2.67)$$

On peut interpréter $f(t, t_i)$ comme

$$f(t, t_i) = \lim_{\delta p_i^\Gamma \rightarrow 0} m \frac{\delta \bar{x}_\Gamma(t)}{\delta p_i^\Gamma} \quad (2.68)$$

où $\delta \bar{x}_\Gamma(t)$ est la variation de la trajectoire racine $\bar{x}_\Gamma(t)$ due à un changement de son impulsion initiale p_i^Γ . A la limite $\delta p_i^\Gamma \rightarrow 0$ la différentielle $\bar{x}_\Gamma(t)$ satisfait aux équations de mouvement linéarisées (2.66). Il est clair que l'expression (2.68) satisfait aussi aux conditions initiales (2.67). Pour $t = t_f$ on obtient la dérivée partielle

$$f(t_f, t_i) = m \left(\frac{\partial x_f}{\partial p_i^\Gamma} \right)_{t_f, x_i, t_i} \quad (2.69)$$

En substituant cette dérivée dans l'équation (2.63) on arrive à l'expression suivante pour l'amplitude semi-classique

$$A_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i) = (2i\pi\hbar)^{-1/2} \left| \left(\frac{\partial p_i^\Gamma}{\partial x_f} \right)_{t_f, x_i, t_i} \right|^{1/2} e^{-i\nu_\Gamma \pi/2}, \quad (2.70)$$

où ν_Γ est un nombre entier qui s'appelle l'indice de Maslov. Il indique la branche de la racine carrée qu'il faut prendre dans l'équation (2.63), et qui n'est pas déterminée par la méthode ci-dessus⁴.

Le propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$

Je vais maintenant appliquer la même méthode à l'amplitude semi-classique du propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$. Ce propagateur s'exprime comme une intégrale de chemins (2.32). L'intégrale est dominée par les trajectoires dont l'action généralisée est stationnaire. Ce sont les trajectoires racines $\bar{\Gamma}$. L'amplitude semi-classique $\bar{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ associée à chaque trajectoire racine est déterminée par la variation au second ordre $\delta^2 \bar{S}$ de l'action généralisée autour de la trajectoire. $\delta^2 \bar{S}$ se calcule par rapport aux perturbations $\delta x(t)$ qui satisfont à la condition limite $\delta x(t_f) = 0$. Cette condition vient du fait que la perturbation ne doit pas changer la position finale x_f de la trajectoire. En revanche la position initiale x_i n'est pas fixée, puisque l'intégrale de chemins (2.32) comporte une somme sur toutes les positions initiales x_i (voir la Figure 2.11). L'amplitude semi-classique s'exprime donc comme

$$\bar{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int d\delta x_i \int_{(\delta x_i, t_i)}^{(0, t_f)} \mathcal{D}[\delta x(t)] e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \{m[\delta \dot{x}(t)]^2 - \partial_x^2 V[\bar{x}_{\bar{\Gamma}}(t), t][\delta x(t)]^2\}} \quad (2.71)$$

L'expression (2.71) est identique à (2.51) excepté l'intégrale sur les positions initiales δx_i , et le fait que $\partial_x^2 V$ est calculé sur la trajectoire $\bar{\Gamma}$. La position initiale δx_i est ce qu'on a appelé $y_0 = \delta x(t_i)$. La forme discrète de l'intégrale (2.71) est donc la même que (2.52), sauf que les

4. Notons que bien que l'équation (2.63) n'a que deux branches, l'amplitude (2.70) semble pouvoir adopter quatre valeurs distinctes. En fait le signe de la dérivée partielle dans (2.70) restreint le choix de valeurs possibles de l'indice de Maslov. Si la dérivée partielle est positive, l'indice de Maslov est pair. Si elle est négative, l'indice est impair. On utilise l'écriture (2.70) par convention.

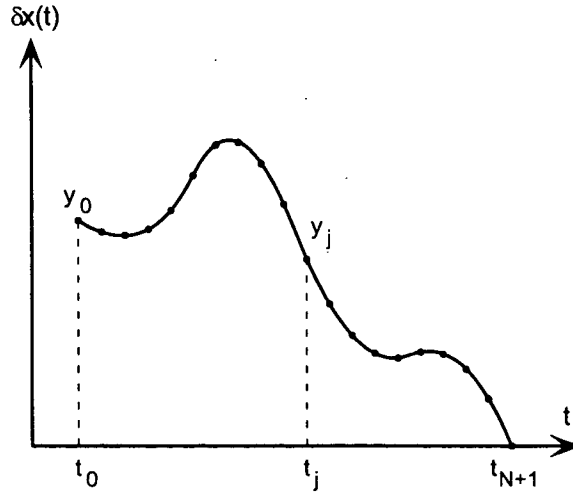


FIG. 2.11 – Une perturbation $\delta x(t)$ du type considéré dans le calcul de l'amplitude semi-classique $\bar{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i)$. Elle est échantillonnée à $N + 2$ instants régulièrement séparés, où $t_0 \equiv t_i$ est l'instant initial et $t_{N+1} \equiv t_f$ est l'instant final. Notons que $x(t_f) = 0$ mais que la position initiale $x(t_i)$ n'est pas déterminé par les conditions limites.

coefficients c_j (2.53) sont évalués sur $\bar{\Gamma}$, et qu'il faut maintenant intégrer sur y_0

$$\bar{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{(N+1)/2} \times \int dy_0 dy_1 \dots dy_N \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \sum_{j=0}^N \left[\frac{m}{\epsilon} (y_{j+1} - y_j)^2 - \epsilon c_j y_j^2 \right] \right\} \quad (2.72)$$

On peut effectuer l'intégrale par la même méthode qu'avant (voir l'Annexe C.1). L'expression obtenue pour l'amplitude semiclassique est

$$\bar{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \left| \left(\frac{\partial x_i^{\bar{\Gamma}}}{\partial x_f} \right)_{t_f, p_i, t_i} \right|^{1/2} e^{-i\bar{\nu}_{\bar{\Gamma}}\pi/2} \quad (2.73)$$

où $\bar{\nu}_{\bar{\Gamma}}$ est l'indice de Maslov.

Le propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$

L'extension de la méthode présentée ci-dessus au propagateur $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ (2.38) est simple. L'amplitude semi-classique est déterminée par la variation au second ordre $\delta^2 \bar{S}$ de l'action généralisée $\bar{S}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; p_i, t_i)$. Puisque l'intégrale de chemins (2.38) inclut une somme sur toutes les positions initiales et finales, il faut considérer toutes les perturbations $\delta x(t)$ possibles, sans conditions limites ni à t_i ni à t_f (voir la Figure 2.12). L'amplitude semi-classique s'exprime comme

$$\bar{A}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; p_i, t_i) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\delta x_i \int d\delta x_f \int_{(\delta x_i, t_i)}^{(\delta x_f, t_f)} \mathcal{D}[\delta x(t)] e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \{ m[\delta \dot{x}(t)]^2 - \partial_x^2 V[\bar{x}_{\bar{\Gamma}}(t), t][\delta x(t)]^2 \}} \quad (2.74)$$

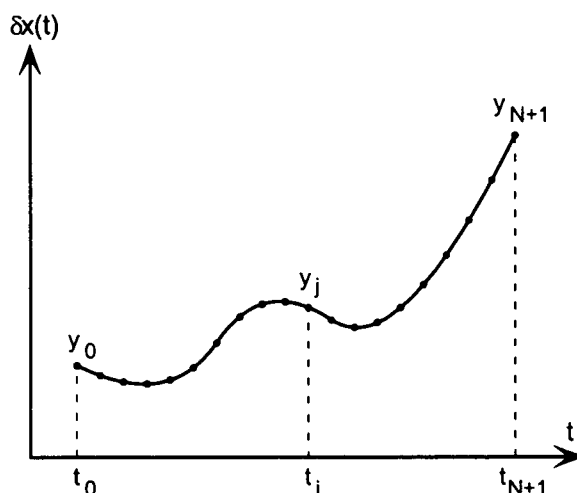


FIG. 2.12 – Une perturbation $\delta x(t)$ du type considéré dans le calcul de l'amplitude semi-classique $\bar{A}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; p_i, t_i)$. Elle est échantillonnée à $N + 2$ instants régulièrement séparés, où $t_0 \equiv t_i$ est l'instant initial et $t_{N+1} \equiv t_f$ est l'instant final. Notons que ni $\delta x(t_i)$ ni $\delta x(t_f)$ ne sont déterminés par les conditions limites.

La forme discrète de l'intégrale (2.74) est identique à (2.72), sauf qu'il faut évaluer c_j (2.53) sur la trajectoire $\bar{\Gamma}$, et qu'il faut intégrer sur toutes les positions finales $y_{N+1} = \delta x(t_f) = \delta x_f$

$$\bar{A}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; p_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{(N+1)/2} \times \int dy_0 dy_1 \dots dy_N dy_{N+1} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \sum_{j=0}^N \left[\frac{m}{\epsilon} (y_{j+1} - y_j)^2 - \epsilon c_j y_j^2 \right] \right\} \quad (2.75)$$

La méthode suivie est la même qu'avant (voir l'Annexe C.2), et l'expression obtenue pour l'amplitude est analogue

$$\bar{A}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; p_i, t_i) = (-2i\pi\hbar)^{-1/2} \left| \left(\frac{\partial x_i^{\bar{\Gamma}}}{\partial p_f} \right)_{t_f, p_i, t_i} \right|^{1/2} e^{-i\bar{\nu}_{\bar{\Gamma}}\pi/2}. \quad (2.76)$$

2.4.2 Interprétation en termes d'un ensemble classique

Les expressions BKW pour les propagateurs consistent en une somme de contributions associées à toutes les trajectoires racines du propagateur. Puisque les contributions sont complexes, le propagateur fait apparaître des interférences quand il existe deux trajectoires racines ou plus. Considérons d'abord le cas simple où il n'y a qu'une trajectoire racine et donc pas d'interférence. La distribution de probabilité du système à la limite $\hbar \rightarrow 0$ se réduit alors au module carré de l'amplitude semi-classique associée à l'unique trajectoire. Mais à cette limite on peut s'attendre à ce que la distribution de probabilité soit égale à la densité d'un ensemble classique qui représente l'état quantique du système. Ce raisonnement conduit à l'hypothèse que l'amplitude semi-classique est proportionnelle à la racine carrée de la densité classique.

On va montrer ici qu'une telle interprétation est valable puisque la racine carrée de la densité classique reproduit bien les expressions exactes des amplitudes semi-classiques calculées dans la Section 2.4.1.

Considérons d'abord le propagateur de Feynman. Il décrit la fonction d'onde d'un système qui se trouve initialement dans un état propre de position. Son impulsion à cet instant t_i est donc inconnue. On peut représenter un tel état initial par un ensemble de particules classiques qui ont la même position, mais des impulsions régulièrement distribuées. L'état du système à un instant ultérieure t_f se décrit en faisant évoluer l'ensemble selon les équations classiques du mouvement. Cette évolution est indiquée sur la Figure 2.13.

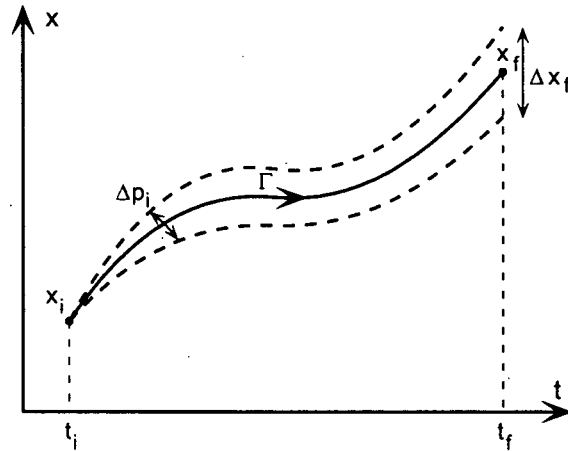


FIG. 2.13 – Pour représenter un système qui se trouve initialement dans un état propre de position, on utilise un ensemble de particules classiques dont les positions initiales sont les mêmes, mais dont les impulsions initiales sont régulièrement distribuées. Cette figure indique la trajectoire racine Γ (celle qui termine à la position x_f), et les chemins voisins (ceux qui commencent avec des impulsions légèrement différentes).

Supposons que l'amplitude semi-classique $A_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i)$ (2.25) est proportionnelle à la racine carrée de la densité de particules qui se trouve dans le voisinage de la trajectoire Γ à l'instant final t_f . On vérifie cette supposition par un calcul de la densité. L'impulsion initiale de la trajectoire Γ est dénoté par p_i^Γ . Considérons les particules qui se trouvent initialement dans la gamme d'impulsions Δp_i autour de p_i^Γ . Le nombre de particules dans cette gamme est proportionnel à la valeur de Δp_i , puisque les impulsions initiales des particules sont régulièrement distribuées. Laissons évoluer ces particules. A l'instant final ils occupent une gamme de positions Δx_f autour de x_f . La densité de particules est donc proportionnelle à $\lim_{\Delta p_i \rightarrow 0} (\Delta p_i / \Delta x_f)$, et on obtient

$$A_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i) \propto \left| \left(\frac{\partial p_i^\Gamma}{\partial x_f} \right)_{t_f, x_i, t_i} \right|^{1/2} \quad (2.77)$$

Le résultat (2.77) est en accord avec (2.70), et justifie l'interprétation de l'amplitude A_Γ comme la racine carrée d'une densité classique.

Le cas où Δx_f est nulle correspond à la situation où toutes les particules qui se trouve dans la gamme d'impulsion Δp_i sont focalisées à la même position finale. Dans ce cas la densité classique diverge et l'approximation BKW n'est plus valable.

Considérons maintenant les propagateurs $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ et $\bar{\bar{K}}(p_f, t_f; p_i, t_i)$, qui dépendent de l'impulsion. Le premier décrit la fonction d'onde spatiale d'un système initialement dans un état propre d'impulsion. Le second décrit la distribution finale d'impulsion de ce même système. On peut représenter l'état initial par un ensemble de particules classiques qui ont la même impulsion, mais des positions régulièrement espacées (voir les Figures 2.14 et 2.15)

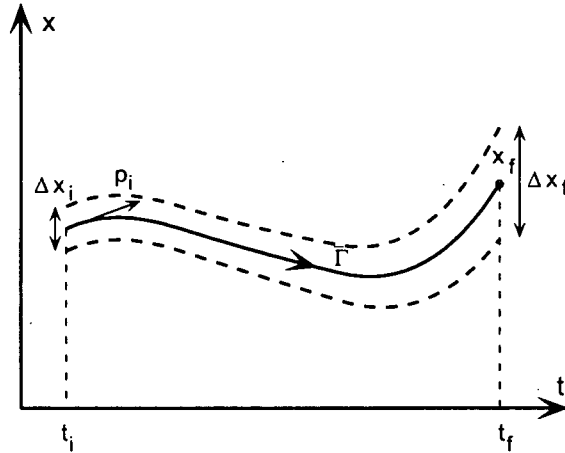


FIG. 2.14 – Pour représenter un système qui se trouve initialement dans un état propre d'impulsion, on utilise un ensemble de particules classiques dont les impulsions initiales sont les mêmes, mais dont les positions initiales sont régulièrement distribuées. Cette figure indique la trajectoire racine $\bar{\Gamma}$ (celle qui termine à la position x_f), et les chemins voisins (ceux qui commencent à des positions légèrement différentes).

Supposons que l'amplitude semi-classique $\bar{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ (2.36) est proportionnelle à la racine carrée de la densité finale de particules qui se trouvent dans le voisinage de la trajectoire racine. Puisqu'à l'instant initiale les particules étaient régulièrement espacées en position, la densité est proportionnelle à la limite $\lim_{\Delta x_i \rightarrow 0} (\Delta x_i / \Delta x_f)$, et on obtient

$$\bar{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i) \propto \left| \left(\frac{\partial x_i^{\bar{\Gamma}}}{\partial x_f} \right)_{t_f, p_i, t_i} \right|^{1/2} \quad (2.78)$$

Ce résultat est en accord avec l'expression (2.73).

Puisque $\bar{\bar{K}}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ représente la distribution d'impulsion du système, il en suit que l'amplitude semi-classique $\bar{\bar{A}}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ (2.40) est proportionnelle à la densité classique d'impulsions autour de la trajectoire racine. Cette densité est proportionnelle à la limite $\lim_{\Delta x_i \rightarrow 0} (\Delta x_i / \Delta p_f)$, et on obtient

$$\bar{\bar{A}}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; p_i, t_i) \propto \left| \left(\frac{\partial x_i^{\bar{\Gamma}}}{\partial p_f} \right)_{t_f, p_i, t_i} \right|^{1/2} \quad (2.79)$$

qui est en accord avec l'expression (2.76).

Pour les propagateurs dépendant de l'énergie, la méthode est analogue. Il faut cependant considérer les paramètres énergie et temps de chaque particule de l'ensemble plutôt que leur

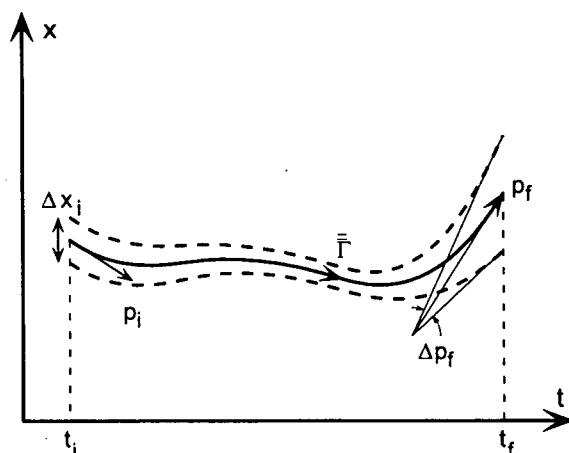


FIG. 2.15 – Cette figure indique la trajectoire racine $\bar{\Gamma}$ du propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ (celle qui termine avec l'impulsion p_f), et les chemins voisins (ceux qui commencent à des positions légèrement différentes, mais avec la même impulsion).

position et impulsion. Davantage de détails sont donnés dans l'article. Dans tous les cas, des divergences existent dans l'amplitude semiclassique aux points où les chemins classiques sont focalisés.

La figure 2.16 montre les poids des bandes latérales pour le problème décrit dans l'introduction, calculé par la méthode BKW généralisée. Les divergences se présentent pour les valeurs de \hat{V} auxquelles l'énergie d'une des bandes latérales coïncide avec la limite de la gamme d'énergies classiquement permise.

2.5 Trajectoires complexes

Dans les dernières sections j'ai montré qu'on peut décrire un système quantique à la limite semi-classique en utilisant seulement des éléments classiques, à savoir les trajectoires racines du système, leur action généralisée, et la densité de chemins dans leur voisinage. Les trajectoires racines sont les chemins classiques qui relient les points initial et final du propagateur dans son espace de configuration. Ce sont les trajectoires auxquelles l'action généralisée est stationnaire. L'approximation BKW, qui consiste à sommer les contributions de chaque trajectoire racine, est en bon accord avec les résultats quantiques exactes, sauf près des caustiques, où l'amplitude semi-classique diverge.

Dans les régions classiquement interdites du système il n'existe pas de trajectoires classiques réelles. Il se peut cependant que les régions interdites soient accessibles par effet tunnel quantique. L'amplitude tunnel peut être calculée par les méthodes semi-classiques si l'on admet des trajectoires complexes. Ce sont des trajectoires 'classiques' dans le sens qu'elles satisfont aux équations classiques du mouvement. Toutes les coordonnées de la trajectoire en général peuvent être complexes, et les équations du mouvement se résolvent en prenant le prolongement du potentiel dans le plan complexe. Dans les régions interdites l'action généralisée de chaque trajectoire racine est complexe. La variation de la partie imaginaire détermine la croissance ou décroissance exponentielle de la solution BKW.

Un fondement rigoureux pour des trajectoires complexes dans la méthode BKW standard

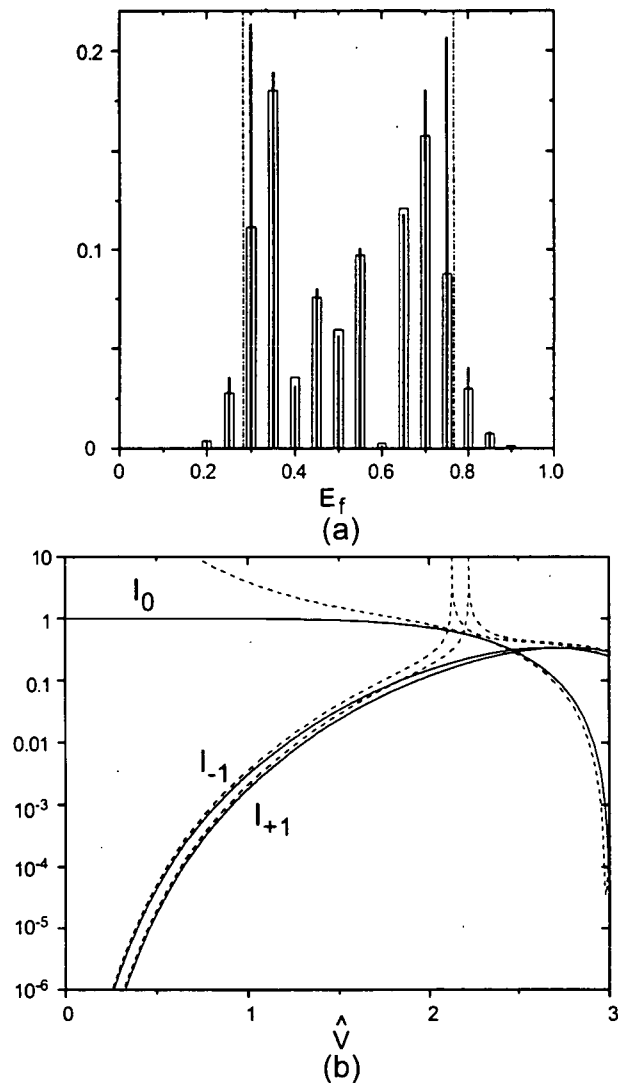


FIG. 2.16 – Comparaison entre l'approximation BKW et les résultats exacts, pour les paramètres utilisés dans la figure 1.3.

est fourni par le traitement de Stokes (voir l'Annexe D)⁵, et le but ici est de présenter quelques exemples. Le premier, et le plus connu, est l'onde évanescence. Sa forme s'explique en termes de rayons optiques complexes. Le deuxième exemple est celui de la réflexion par un puits de potentiel. L'application standard de la méthode BKW ne prédit pas de réflexion par un puits, quoiqu'il en existe quantiquement. Le coefficient de réflexion s'obtient en calculant les trajectoires qui contournent des points de rebroussement complexes. Le dernier exemple est

5. Un fondement rigoureux pour des trajectoires complexes dans le contexte de l'intégrale de chemin est beaucoup plus difficile à cause de problèmes de convergence. Considérons par exemple le propagateur $\langle x_f | U(t_f, t_i) | p_i \rangle$ pour une particule libre dans le cas où p_i et x_f sont réels mais la différence $t_f - t_i$ contient une partie imaginaire positive. Quoique le propagateur soit bien défini, il ne peut pas être calculé par la méthode d'intégrale de chemin à cause de la divergence des intégrales sur la position.

un traitement géométrique de la diffraction dans le cas d'une fente dont le profil est gaussien.

2.5.1 L'onde évanescente

On considère un milieu d'indice de réfraction $n > 1$ (que j'appellerai 'le verre'), dont l'interface avec le vide se trouve dans le plan $z = 0$ (voir la Figure 2.17). Une onde plane incidente dans le verre rencontre l'interface à l'angle θ_i à la normale. On cherche à calculer le champ électrique dans le vide au point (x_f, z_f) , en choisissant l'origine $(0, 0)$ comme référence. Calculons le rayon optique qui passe par le point final (x_f, z_f) . Selon la Loi de Descartes le rayon fait un angle θ_t avec la normale dans le vide, où

$$\sin \theta_t = n \sin \theta_i \quad (2.80)$$

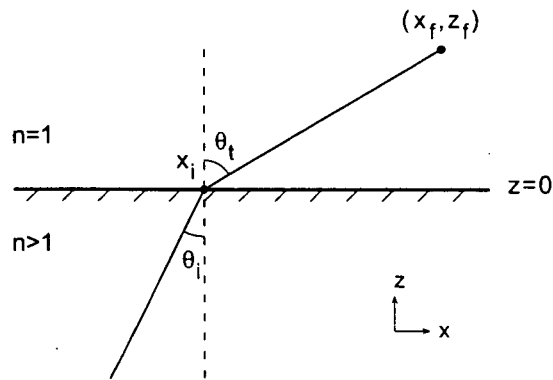


FIG. 2.17 - L'interface entre un bloc de verre et le vide se trouve dans le plan $z = 0$. On considère une onde plane qui rencontre l'interface à un angle θ_i avec la normale, et on cherche à calculer le champ électrique au point (x_f, z_f) dans le vide.

La position initiale x_i de ce rayon sur l'interface $z = 0$ est donc

$$x_i = x_f - z_f \frac{n \sin \theta_i}{(1 - n^2 \sin^2 \theta_i)^{1/2}} \quad (2.81)$$

La valeur de $x_f - x_i$ en fonction de l'angle d'incidence est tracée dans la Figure 2.18. La phase du champ électrique au point (x_f, z_f) est la somme de la phase initiale au point $(x_i, 0)$ et la longueur optique de la trajectoire. En fonction des coordonnées finales, cette phase vaut

$$\phi(x_f, z_f) = k_x x_f + k z_f (1 - n^2 \sin^2 \theta_i)^{1/2} \quad (2.82)$$

où $k_x \equiv k n \sin \theta_i$. Notons que pour un angle d'incidence plus grand que l'angle critique $n \sin \theta_i > 1$, la position initiale x_i et la phase finale $\phi(x_f, z_f)$ sont toutes deux complexes. Dans ce cas le champ électrique au point final s'écrit comme

$$E(x_f, z_f) \propto e^{i k_x x_f} e^{-\kappa z_f} \quad (2.83)$$

où $\kappa \equiv k \sqrt{n^2 \sin^2 \theta_i - 1}$. Le champ dans le vide consiste donc en une onde évanescente, qui décroît exponentiellement dans la direction z normale à l'interface, et dont la phase dépend de la position transverse x_f .

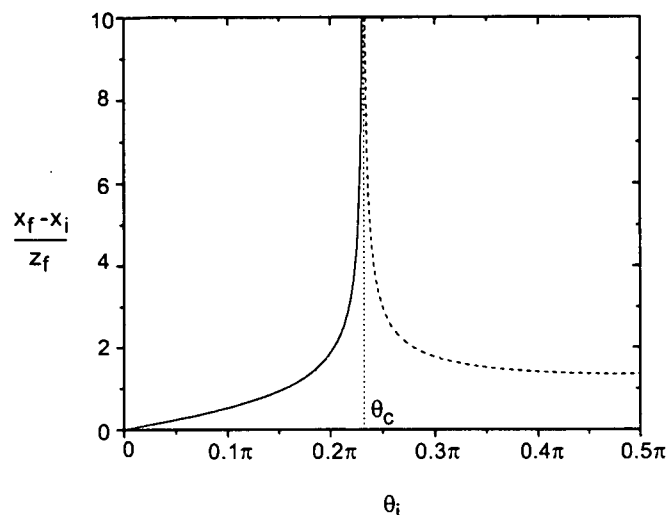


FIG. 2.18 – L'écart $x_f - x_i$ en unités de z_f en fonction de l'angle d'incidence θ_i . Il reste réel pour des angles inférieures à l'angle critique. Au delà de l'angle critique il est imaginaire. L'indice de réfraction du verre est 1,5.

2.5.2 Réflexion par un puits de potentiel

Dans cette section je vais calculer la réflexion par un puits de potentiel stationnaire à la limite semi-classique en utilisant des trajectoires complexes. Pour un puits de potentiel, l'application standard de BKW ne prédit pas de réflexion puisqu'il n'y a pas de points de rebroussement réels. Pourtant il existe des points de rebroussement complexes. La réflexion quantique peut être interprétée en termes de trajectoires complexes qui contournent un de ces points. Par définition, un point de rebroussement x_{tp} est un point où $E = V(x_{tp})$ et l'impulsion s'annule. Si la dérivée du potentiel est non-nulle en ce point $V'(x_{tp}) \neq 0$, l'impulsion prend localement la forme

$$p(x) = [2m(E - V(x))]^{1/2} \approx C(x - x_{tp})^{1/2} \quad (2.84)$$

Le passage autour d'un point de rebroussement change donc le signe de l'impulsion, et la particule est réfléchie.

Je vais ici considérer un potentiel particulier,

$$V(x) = -\frac{V_0}{\cosh^2\left(\frac{x}{\sigma}\right)} \quad (2.85)$$

où $V_0 > 0$. La raison de prendre ce potentiel est que la probabilité de réflexion peut être calculée exactement [27],

$$R = \frac{\cos^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{1 + \frac{8m\sigma^2 V_0}{\hbar^2}}\right)}{\sinh^2(\pi\sigma k) + \cos^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{1 + \frac{8m\sigma^2 V_0}{\hbar^2}}\right)} \quad (2.86)$$

où

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (2.87)$$

et $E > 0$ est l'énergie de la particule.

La limite semi-classique est obtenue en faisant tendre \hbar vers zéro, les autres paramètres du problème σ , V_0 et E restant constants. Cette limite correspond aux inégalités suivantes

$$\begin{aligned} \sigma k &\gg 1 \\ \sigma \sqrt{2mV_0}/\hbar &\gg 1 \end{aligned} \quad (2.88)$$

En appliquant ces deux inégalités à l'expression (2.86), on trouve une approximation pour la probabilité de réflexion (2.86) qui est valable à la limite semi-classique

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} R = 4e^{-2\pi\sigma k} \cos^2 \left(\frac{\pi\sigma}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \right) \quad (2.89)$$

Ceci peut être écrit comme le module carré de la somme de deux termes

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} R = \left| e^{-\pi\sigma k} \left(e^{i\frac{\pi\sigma}{\hbar} \sqrt{2mV_0}} + e^{-i\frac{\pi\sigma}{\hbar} \sqrt{2mV_0}} \right) \right|^2 \quad (2.90)$$

Je vais montrer que ces deux termes proviennent des trajectoires qui passe dans le demi-plan $\text{Im}(x) > 0$ et qui contournent les deux points de rebroussement les plus proches de l'axe réel.

Calculons d'abord les points de rebroussement. Puisque le potentiel est négatif sur l'axe réel et que l'énergie de la particule est positive, tous les points de rebroussement x_{tp} sont complexes (avec une partie imaginaire non-nulle). Ils s'obtiennent à partir de l'équation $V(x_{\text{tp}}) = E$. En reportant l'expression (2.85) pour le potentiel dans cette équation, on trouve

$$\cosh^2 \left(\frac{x_{\text{tp}}}{\sigma} \right) = -\frac{V_0}{E} \quad (2.91)$$

dont les solutions sont

$$\frac{x_{\text{tp}}}{\sigma} = \pm \ln \left(\sqrt{\frac{V_0}{E}} + \sqrt{\frac{V_0}{E} + 1} \right) + i \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \quad (2.92)$$

où $n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$ est un nombre entier. Les positions des points de rebroussement sont indiquées dans la Figure 2.19. Pour calculer la probabilité de réflexion, on ne considère que les deux points x_{tp}^{\pm} qui se trouve dans le demi-plan $\text{Im}(x) > 0$, et qui sont les plus proches de l'axe réel. Pour justifier ceci de façon rigoureuse il faut utiliser le traitement de Stokes (voir l'Annexe D). On peut pourtant noter que les trajectoires qui contournent des points au-dessous de l'axe réel ne sont pas physiques, puisqu'elles contribueraient au coefficient de réflexion des termes plus grands qu'un. De même on peut négliger les points de rebroussement dont la partie imaginaire est plus grande que $\text{Im}(x_{\text{tp}}^{\pm})$, parce que les contributions provenant de ces points sont exponentiellement plus petites que celles associées aux points x_{tp}^{\pm} . En particulier elles sont plus petites que l'erreur présente dans les termes principaux due à l'approximation semiclassique.

On cherche à calculer l'amplitude du composant de $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$ associé à la réflexion, c'est-à-dire, le terme qui varie en x_f comme $\exp \left(-i\sqrt{2mE}x_f/\hbar \right)$ pour $x_i < x_f \ll 0$. On verra

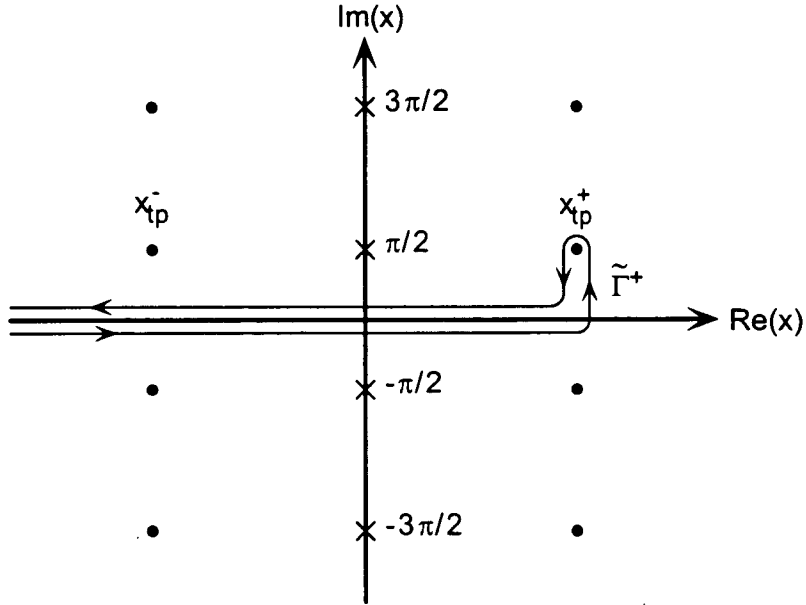


FIG. 2.19 – Les pôles (croix) et les points de rebroussement (cercles) pour le puits de potentiel (2.85), où l'énergie de la particule est positive $E > 0$. La trajectoire réfléchie $\tilde{\Gamma}^+$ qui contourne le point de rebroussement x_{tp}^+ est indiquée.

qu'à la limite semi-classique ce terme est égal à la somme des contributions $\tilde{A}^\pm \exp[i\tilde{S}^\pm/\hbar]$ associés aux trajectoires $\tilde{\Gamma}^\pm$ qui contournent les points x_{tp}^\pm . Les amplitudes $\tilde{A}^\pm(x_f, t_f; x_i, E)$ des termes réfléchis, comme l'amplitude $\tilde{A}^{(i)}(x_f, t_f; x_i, E)$ du terme incident, dépendent de la vitesse de la particule aux positions initiale et finale x_i et x_f , qui sont prises toutes les deux à gauche du potentiel. La vitesse finale d'une particule réfléchie ne diffère de la vitesse d'une particule incidente que par son signe, et donc les amplitudes $\tilde{A}^\pm(x_f, t_f; x_i, E)$ sont identiques à $\tilde{A}^{(i)}$ à part une phase multiplicative

$$\tilde{A}^\pm(x_f, t_f; x_i, E) = -i\tilde{A}^{(i)}(x_f, t_f; x_i, E) \quad (2.93)$$

Cette phase $-i$ provient de l'augmentation de l'indice de Maslov en réflexion.

Le coefficient de réflexion ne dépend donc, à la limite semiclassique, que de l'action généralisée le long des trajectoires $\tilde{\Gamma}^\pm$

$$r_{sc} = -i \left(e^{i\tilde{S}^+(0,0;0,E)/\hbar} + e^{i\tilde{S}^-(0,0;0,E)/\hbar} \right) \quad (2.94)$$

Dans cette expression $\tilde{S}^+(0,0;0,E)$ et $\tilde{S}^-(0,0;0,E)$ sont les intégrales de $p(x)$ le long de contours qui partent de l'origine, et passent autour des points de rebroussement x_{tp}^+ et x_{tp}^- respectivement, avant de retourner à l'origine. Puisque l'impulsion change de signe en contournant un point de rebroussement, l'intégrale le long du chemin de l'origine jusqu'au point de rebroussement est égale à l'intégrale de retour, et donc

$$\tilde{S}^\pm(0,0;0,E) = 2 \int_0^{x_{tp}^\pm} dx p(x) \quad (2.95)$$

Pour vérifier que le module carré de l'expression (2.94) coïncide avec la probabilité de réflexion R dans la limite semiclassique (2.90), il faut calculer $\tilde{S}^\pm(0, 0; 0, E)$. Ce calcul est fait dans l'Annexe D, où on obtient le résultat

$$\tilde{S}^\pm(0, 0; 0, E) = \pm\pi\sigma\sqrt{2mV_0} + i\pi\sigma\hbar k \quad (2.96)$$

En reportant (2.96) dans l'expression (2.94) on trouve que

$$|r_{sc}|^2 = \lim_{\hbar \rightarrow 0} R. \quad (2.97)$$

Ceci montre que la réflexion quantique peut bien se comprendre en termes de trajectoires réfléchies qui passent dans le demi-plan $\text{Im}(x) > 0$ et qui contournent les points de rebroussement les plus proches de l'axe réel.

On n'a pas mentionné jusqu'ici les pôles du potentiel. Ils sont déterminés par l'équation $\cosh(x_0/\sigma) = 0$, et sont donc

$$\frac{x_0}{\sigma} = i \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \quad (2.98)$$

Les points x_0 sont indiqués dans la Figure 2.19 par des croix. Ils sont des pôles d'ordre deux du potentiel, et donc des pôles d'ordre un de l'impulsion classique $p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}^{1/2}$. Il s'avère que l'équation de Schrödinger n'a pas de solution unique autour d'un tel pôle. C'est-à-dire, si on intègre l'équation de Schrödinger le long d'un contour fermé, qui passe autour d'un de ces pôles et revient à son point de départ, on ne retrouve pas la valeur initiale de la fonction d'onde. Puisque on s'intéresse à l'approximation semiclassique de la fonction d'onde sur l'axe réel, il ne faut prendre que des trajectoires qui restent du même côté des pôles que l'axe réel lui-même. C'est pour cette raison que les trajectoires $\tilde{\Gamma}^\pm$ que nous avons considérées ne contournent aucun pôle.

2.5.3 Traitement géométrique de la diffraction

Je vais présenter ici un exemple de l'application des trajectoires complexes à la diffraction. Je considère la diffraction d'une particule par une fente dont le profil spatiale est gaussien⁶. Je vais montrer que la distribution d'impulsion finale calculée en utilisant la méthode BKW avec des trajectoires complexes coïncide avec la résultat exacte.

Soit z la direction longitudinale, et x la direction transverse. La fente se trouve dans le plan $z = 0$. On suppose que la vitesse de la particule dans la direction z est beaucoup plus grande que sa vitesse dans la direction x , de sorte qu'on peut traiter le mouvement dans la direction z de façon classique. A partir de la relation $t = zm/p_z$, où p_z est traité comme un nombre réel, on peut remplacer l'opérateur z par le paramètre t . Seule la position x est traitée quantiquement.

L'effet sur la particule du passage par la fente est de multiplier sa fonction d'onde transverse initiale $\psi_i(x)$ par le facteur $G(x)$

$$\psi_f(x) = G(x)\psi_i(x) \quad (2.99)$$

On suppose que le profil est Gaussien

$$G(x) = \exp \left[- \left(\frac{x}{2\sigma} \right)^2 \right] \quad (2.100)$$

6. Pour un traitement géométrique d'une fente avec un profil en créneau, voir Keller [28].

et que l'état initial de la particule est un état propre d'impulsion $|p_i\rangle$. On cherche la distribution d'impulsion de la particule après l'interaction avec la fente. Il faut alors calculer le propagateur $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$, où t_i et t_f sont des instants avant et après l'interaction respectivement. Le calcul peut se faire de façon exacte. Divisons l'évolution en trois parties: la propagation libre jusqu'à la fente, l'interaction avec la fente, et la propagation libre après interaction. Supposons que la particule passe la fente à l'instant $t = 0$. En utilisant la relation de fermeture sur la position on obtient

$$\begin{aligned}\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i) &= \int dx \int dx' \bar{K}(p_f, t_f; x, t = 0^+) G(x) \bar{K}(x', t = 0^-; p_i, t_i) \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-i(E_f t_f - E_i t_i)/\hbar} \int dx G(x) e^{-i(p_f - p_i)x/\hbar}\end{aligned}\quad (2.101)$$

où $E_i = (p_i^2 + p_z^2)/2m$ and $E_f = (p_f^2 + p_z^2)/2m$ sont les énergies initiale et finale. En substituant la valeur de $G(x)$ de l'équation (2.100) on trouve le résultat

$$\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i) = \frac{\sigma}{\sqrt{\pi\hbar}} \exp\left[-\left(\frac{(p_f - p_i)\sigma}{\hbar}\right)^2\right] e^{-i(E_f t_f - E_i t_i)/\hbar}\quad (2.102)$$

On peut également calculer la diffraction de manière semi-classique. Puisque pour $p_f \neq p_i$ il n'y a pas de trajectoires réelles dont l'impulsion initiale est p_i et l'impulsion finale est p_f , il faut considérer des trajectoires complexes. Pour obtenir les trajectoires racines, il faut formuler le problème en termes d'un potentiel qui dépend du temps. Le potentiel qui représente l'interaction de la particule avec la fente est un potentiel imaginaire qui agit au moment où la particule passe la fente.

$$V(x, t) = -i\hbar \left(\frac{x}{2\sigma}\right)^2 \delta(t).\quad (2.103)$$

On vérifie que la fonction d'onde de la particule juste après l'interaction s'obtient à partir de celle juste avant l'interaction par l'équation (2.99)

$$\begin{aligned}\psi(x, t = 0^+) &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{0^-}^{0^+} dt T\{H(t)\}\right] \psi(x, t = 0^-) \\ &= \exp\left[-\left(\frac{x}{2\sigma}\right)^2\right] \psi(x, t = 0^-),\end{aligned}\quad (2.104)$$

où l'opérateur T signifie l'ordre chronologique.

Considérons maintenant l'impulsion transférée par ce potentiel à la particule. La force subie par la particule est

$$F(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} V(x, t) = i\hbar \frac{x}{2\sigma^2} \delta(t)\quad (2.105)$$

L'impulsion totale transférée à la particule pendant son évolution est donc

$$\Delta p = \int dt F[x(t), t] = i\hbar \frac{x(0)}{2\sigma^2}\quad (2.106)$$

qui dépend de la position $x(0)$ de la particule quand elle passe la fente. Soit x_0 la position d'une particule qui reçoit l'impulsion $p_f - p_i$

$$x_0 = -i(p_f - p_i) \frac{2\sigma^2}{\hbar} \quad (2.107)$$

Notons que x_0 est imaginaire. L'action généralisée sur la trajectoire de cette particule se calcule de la façon suivante

$$\begin{aligned} \bar{S}(p_f, t_f; p_i, t_i) &= -p_f x_f + p_i x_i + S(x_f, t_f; x_i, t_i) \\ &= -p_f x_f + p_i x_i + \int_{t_i}^{0^-} dt \frac{p_i^2}{2m} + \int_{0^+}^{t_f} dt \frac{p_f^2}{2m} - \int_{0^-}^{0^+} dt V[x(t), t] \end{aligned} \quad (2.108)$$

où l'intégrale du potentiel est prise entre 0^- et 0^+ , puisque $V(x, t)$ n'agit qu'à $t = 0$. Le calcul de (2.108) donne

$$\bar{S}(p_f, t_f; p_i, t_i) = -E_f t_f + E_i t_i + \frac{i}{\hbar} (p_f - p_i)^2 \sigma^2 \quad (2.109)$$

Notons que $i\bar{S}(p_f, t_f; p_i, t_i)/\hbar$ est identique à l'exposant dans l'expression (2.102).

Calculons maintenant l'amplitude semi-classique de la trajectoire racine. La position initiale de la trajectoire est

$$x_i = x_0 + \frac{p_i t_i}{m} \quad (2.110)$$

En utilisant la valeur de x_0 dans l'équation (2.107) on obtient

$$\left(\frac{\partial x_i}{\partial p_f} \right)_{t_f, p_i, t_i} = -i \frac{2\sigma^2}{\hbar} \quad (2.111)$$

En substituant cette dérivée partielle dans l'expression (2.76) pour l'amplitude semi-classique on trouve

$$\bar{A}(p_f, t_f; p_i, t_i) = \frac{\sigma}{\sqrt{\pi\hbar}} e^{-i\bar{\nu}\pi/2} \quad (2.112)$$

qui est en accord avec l'amplitude du résultat exacte (2.102). La comparaison montre que l'indice de Maslov $\bar{\nu}$ vaut zéro. Le résultat de la méthode BKW coïncide donc avec celui du calcul exacte.

Conclusion

On a vu dans ce chapitre qu'à la limite semi-classique les valeurs des propagateurs sont dominées par les trajectoires racines, qui relient les points initial et final dans l'espace de configuration du propagateur. L'approximation BKW consiste à prendre une somme de contributions de toutes les trajectoires racines. La contribution de chaque trajectoire comporte une phase proportionnelle à son action généralisée, et une amplitude semiclassique égale à la racine carrée de la densité de chemins classiques. Dans les régions interdites classiquement, les

trajectoires racines, ainsi que leurs actions et amplitudes, sont complexes. L'approximation BKW reproduit bien la valeur du propagateur loin des caustiques, les points où la densité classique diverge. Près des caustiques l'approximation échoue, et il faut utiliser un traitement semi-classique plus sophistiqué. L'obtention d'un tel traitement est le but du prochain chapitre.

Chapitre 3

Caustiques

Introduction

Les expressions BKW pour les propagateurs, qu'on a discutées dans le dernier chapitre, ne sont pas valables près des caustiques, où elles prédisent une amplitude infinie. La démarche qu'on va suivre pour traiter les caustiques consiste à retourner à une expression de chaque propagateur sous forme d'une intégrale. Les trajectoires racines correspondent aux points où la phase de l'intégrand est stationnaire. Si l'on applique la méthode de la phase stationnaire habituelle à tous ces points indépendamment, on retrouve l'approximation BKW pour le propagateur. L'échec de la méthode se produit quand les points de phase stationnaire sont trop proches pour être traités séparément. La solution consiste alors à étendre la méthode de la phase stationnaire pour qu'elle traite tous les points stationnaires simultanément. Cette technique, nommée la méthode d'approximation uniforme, est valable partout dans le voisinage des caustiques, et se réduit uniformément à la méthode de la phase stationnaire loin des caustiques. Elle repose sur des résultats de la théorie des catastrophes, qu'on décrira brièvement dans la deuxième section de ce chapitre. Finalement on discutera l'obtention des indices de Maslov à partir de ces méthodes, en donnant des applications aux conditions de quantification.

3.1 La méthode de la phase stationnaire

Les propagateurs quantiques sont tous des transformées de Fourier l'un de l'autre. Ce fait nous permet d'écrire un propagateur quelconque en termes d'une intégrale sur un propagateur secondaire donné. Une expression approchée pour le propagateur cherché s'obtient en remplaçant le propagateur secondaire par son approximation BKW, et en appliquant la méthode de la phase stationnaire à l'intégrale qui en résulte. Il s'avère que l'expression obtenue pour le propagateur cherché est identique à son approximation BKW. La meilleure façon de décrire cette méthode et d'expliquer ses résultats est en présentant un exemple. Dans la Section 3.1.1 on calcule l'expression BKW du propagateur $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ à partir de celle du propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$. Ensuite on discute la raison pour l'échec de la méthode près des caustiques, et les moyens possibles de résoudre le problème.

3.1.1 Exemple d'un calcul par la méthode de la phase stationnaire

Supposons connue l'expression BKW pour le propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$. En utilisant les équations (2.31) on peut écrire une expression approchée pour le propagateur $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$

$$\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx_f \bar{K}_{\text{BKW}}(x_f, t_f; p_i, t_i) e^{-ip_f x_f/\hbar} \quad (3.1)$$

Le propagateur $\bar{K}_{\text{BKW}}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ est une somme de contributions de toutes les trajectoires racines (2.36). La substitution de l'expression (2.36) dans l'équation (3.1) donne

$$\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx_f \sum_{\bar{\Gamma}} \bar{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i) e^{i\bar{S}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i)/\hbar} e^{-ip_f x_f/\hbar} \quad (3.2)$$

Soit $\phi_{\bar{\Gamma}}(x_f; p_f)$ la phase totale de l'intégrand,

$$\phi_{\bar{\Gamma}}(x_f; p_f) \equiv \frac{1}{\hbar} [\bar{S}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i) - p_f x_f] \quad (3.3)$$

L'intégrale s'écrit maintenant comme

$$\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx_f \sum_{\bar{\Gamma}} \bar{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i) e^{i\phi_{\bar{\Gamma}}(x_f; p_f)} \quad (3.4)$$

La contribution dominante à l'intégrale provient du voisinage des points $x_f^{\bar{\Gamma}}$ où la phase est stationnaire par rapport à des variations de x_f , c'est-à-dire

$$\frac{\partial}{\partial x_f} \phi_{\bar{\Gamma}}(x_f^{\bar{\Gamma}}; p_f) = 0 \quad (3.5)$$

Si l'on revient à la définition (3.3) cette condition devient

$$\frac{\partial}{\partial x_f} \bar{S}_{\bar{\Gamma}}(x_f^{\bar{\Gamma}}, t_f; p_i, t_i) = p_f \quad (3.6)$$

Les points de phase stationnaire $x_f^{\bar{\Gamma}}$ sont donc les positions pour lesquelles l'impulsion finale sur le trajectoire qui relie (p_i, t_i) à (x_f, t_f) vaut p_f . Une telle trajectoire est une trajectoire racine $\bar{\Gamma}$ de $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$. Puisque la phase est inversement proportionnelle à \hbar , tandis que l'amplitude semiclassique est indépendante de \hbar , on peut, dans la limite semiclassique $\hbar \rightarrow 0$, utiliser un développement de la phase au deuxième ordre autour de chaque point de phase stationnaire, et une approximation à l'ordre zéro pour l'amplitude

$$\begin{aligned} \phi_{\bar{\Gamma}}(x_f; p_f) &\approx \phi_{\bar{\Gamma}}(x_f^{\bar{\Gamma}}; p_f) + \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{\partial^2}{\partial x_f^2} \bar{S}_{\bar{\Gamma}}(x_f^{\bar{\Gamma}}, t_f; p_i, t_i) \right] (x_f - x_f^{\bar{\Gamma}})^2 \\ \bar{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i) &\approx \bar{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f^{\bar{\Gamma}}, t_f; p_i, t_i) \end{aligned} \quad (3.7)$$

En substituant ces approximations dans l'intégrale (3.4), et en sommant sur tous les points de phase stationnaire, on obtient

$$\begin{aligned} \bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i) &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_{\bar{\Gamma}} \bar{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f^{\bar{\Gamma}}, t_f; p_i, t_i) e^{i\phi_{\bar{\Gamma}}(x_f^{\bar{\Gamma}}; p_f)} \times \\ &\int dx_f e^{\frac{i}{2\hbar} \left[\frac{\partial^2}{\partial x_f^2} \bar{S}_{\bar{\Gamma}}(x_f^{\bar{\Gamma}}, t_f; p_i, t_i) \right] (x_f - x_f^{\bar{\Gamma}})^2} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Puisque cette intégrale est gaussienne, on peut l'effectuer facilement

$$\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i) \approx \sum_{\bar{f}} \bar{A}_{\bar{f}}(x_{\bar{f}}^{\bar{f}}, t_f; p_i, t_i) \left[-i \frac{\partial^2}{\partial x_{\bar{f}}^2} \bar{S}_{\bar{f}}(x_{\bar{f}}^{\bar{f}}, t_f; p_i, t_i) \right]^{-1/2} e^{i\phi_{\bar{f}}(x_{\bar{f}}^{\bar{f}}; p_f)} \quad (3.9)$$

où le deuxième facteur prend la phase $e^{i\pi/4}$ si $\partial^2 \bar{S}_{\bar{f}} / \partial x_{\bar{f}}^2$ est positif, et $e^{-i\pi/4}$ s'il est négatif. Dans l'exponentielle on reconnaît l'action généralisée $\bar{S}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ (voir la définition (2.41))

$$\phi_{\bar{f}}(x_{\bar{f}}^{\bar{f}}; p_f) = \frac{1}{\hbar} \left[\bar{S}_{\bar{f}}(x_{\bar{f}}^{\bar{f}}, t_f; p_i, t_i) - p_f x_{\bar{f}}^{\bar{f}} \right] = \frac{1}{\hbar} \bar{S}_{\bar{f}}(p_f, t_f; p_i, t_i) \quad (3.10)$$

On peut simplifier l'amplitude de l'expression (3.9) en remplaçant $\bar{A}_{\bar{f}}(x_{\bar{f}}^{\bar{f}}, t_f; p_i, t_i)$ par la valeur (2.73) et la dérivée seconde de $\bar{S}_{\bar{f}}$ par l'expression

$$\frac{\partial^2}{\partial x_{\bar{f}}^2} \bar{S}_{\bar{f}}(x_{\bar{f}}^{\bar{f}}, t_f; p_i, t_i) = \left(\frac{\partial p_f}{\partial x_{\bar{f}}} \right)_{t_f, p_i, t_i} \quad (3.11)$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} & \bar{A}_{\bar{f}}(x_{\bar{f}}^{\bar{f}}, t_f; p_i, t_i) \left[-i \frac{\partial^2}{\partial x_{\bar{f}}^2} \bar{S}_{\bar{f}}(x_{\bar{f}}^{\bar{f}}, t_f; p_i, t_i) \right]^{-1/2} \\ &= (-2i\pi\hbar)^{-1/2} \left| \left(\frac{\partial x_{\bar{f}}^{\bar{f}}}{\partial x_{\bar{f}}} \right)_{t_f, p_i, t_i} \left(\frac{\partial x_{\bar{f}}}{\partial p_f} \right)_{t_f, p_i, t_i} \right|^{1/2} e^{-i\bar{\nu}\pi/2} \\ &= (-2i\pi\hbar)^{-1/2} \left| \left(\frac{\partial x_{\bar{f}}^{\bar{f}}}{\partial p_f} \right)_{t_f, p_i, t_i} \right|^{1/2} e^{-i\bar{\nu}\pi/2} \end{aligned} \quad (3.12)$$

où l'indice de Maslov $\bar{\nu}$ est

$$\bar{\nu} = \bar{\nu} - \frac{1}{2} \left[\text{sgn} \left(\frac{\partial x_{\bar{f}}}{\partial p_f} \right)_{t_f, p_i, t_i} - 1 \right] \quad (3.13)$$

L'expression (3.12) est l'amplitude semi-classique $\bar{A}_{\bar{f}}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ qui a été calculée dans la Section 2.4.1 (voir l'équation (2.76)). Notons que la méthode utilisée ici nous a permis d'obtenir la valeur de l'indice de Maslov $\bar{\nu}$ en termes de $\bar{\nu}$. En substituant les expressions (3.10) et (3.12) dans (3.9) on obtient

$$\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i) \approx \sum_{\bar{f}} \bar{A}_{\bar{f}}(p_f, t_f; p_i, t_i) e^{i\bar{S}_{\bar{f}}(p_f, t_f; p_i, t_i)/\hbar}, \quad (3.14)$$

qui est l'expression BKW (2.40) pour $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$.

Dans le cas où il n'y a pas de points de phase stationnaire réels, il est possible qu'il existe des points complexes qui satisfont à l'équation (3.5). Ces points correspondent aux trajectoires racines complexes du propagateur $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$. La méthode de la phase stationnaire doit alors être appliquée dans le plan complexe. En ce cas elle est souvent appelée la 'méthode du

col'. Le chemin d'intégration de (3.4) est déformé de façon qu'elle reste autant que possible dans les 'vallées' de la fonction $\exp[-\text{Im}(\phi)]$. Les points cols sur lesquelles il passe sont les points de phase stationnaire qui contribuent à l'intégrale (3.4). En général seuls les points de phase stationnaire les plus proches de l'axe réel sont alors inclus.

La méthode présentée ci-dessus s'applique à tous les propagateurs. En effet on peut écrire un propagateur quelconque comme une intégrale multiple sur un propagateur secondaire donné. En remplaçant le propagateur secondaire par son expression BKW, et en calculant les intégrales successivement par la méthode de la phase stationnaire, on retrouve l'expression BKW du propagateur cherché.

3.1.2 Observations sur la méthode de la phase stationnaire

Le résultat (3.14) pour le propagateur $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ consiste en une somme de contributions venant de tous les points $x_f^{\bar{\Gamma}}$ où la phase $\phi_{\bar{\Gamma}}(x_f; p_f)$ est stationnaire par rapport à des variations de x_f (voir l'équation (3.5)). Suivant la terminologie de la théorie des catastrophes, on va appeler x_f la 'variable interne' du problème, et les positions $x_f^{\bar{\Gamma}}$ les 'points critiques' de la fonction $\phi_{\bar{\Gamma}}(x_f; p_f)$ pour une valeur donnée de p_f . Le nombre de points critiques et leurs valeurs varient selon p_f (voir la Figure 3.1). On appelle p_f une 'variable de contrôle' à cause du rôle qu'il joue dans le problème, ce rôle étant différent de celui de x_f . En effet x_f est la variable d'intégration de (3.4), tandis que p_f est une variable externe à l'intégrale. La conséquence de cette différence est que la dérivée de $\phi_{\bar{\Gamma}}(x_f; p_f)$ par rapport à p_f n'a aucune importance dans le problème, tandis que la dérivée par rapport à x_f est ce qui détermine les points dites 'stationnaires'. Il est donc convenable de considérer $\phi_{\bar{\Gamma}}(x_f; p_f)$ comme une 'famille de fonctions' de x_f , paramétrisée par p_f .

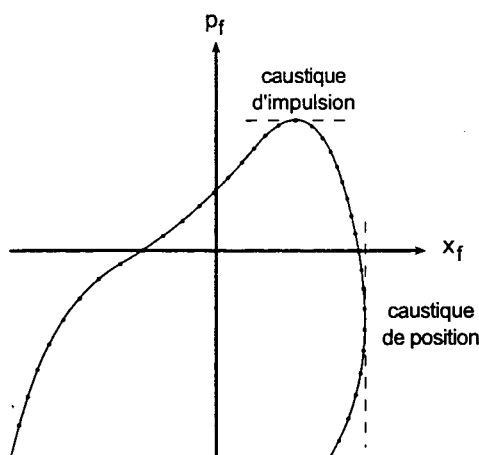


FIG. 3.1 – Le diagramme espace phase pour une particule qui commence dans un état propre d'impulsion. On peut interpréter la courbe de la façon suivante: Pour chaque valeur de p_f les valeurs correspondantes de x_f sont les points de phase stationnaire $x_f^{\bar{\Gamma}}$. Notons que les caustiques en position (les points où $\partial x_f / \partial x_i = 0$) ne coïncident pas avec les caustiques en impulsion (les points où $\partial p_f / \partial x_i = 0$).

Notons que le résultat (3.14) ne dépend que de l'action généralisée $\bar{S}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ et de l'amplitude semi-classique en impulsion $\bar{A}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; p_i, t_i)$. En particulier il est indépendant de

l'amplitude semi-classique en position $\bar{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; p_i, t_i)$. Ceci implique que la méthode de la phase stationnaire élimine les divergences associés aux caustiques en position (quoiqu'elle en introduise aux caustiques en impulsion). Ce n'aurait pas été le cas si on avait calculer l'intégrale (3.4) exactement, sans faire l'approximation de phase stationnaire. La prochaine étape, qu'on va discuter dans la Section 3.3, est d'améliorer la méthode de la phase stationnaire pour qu'elle n'introduise pas de divergences aux caustiques en impulsion.

Avant d'aborder cette étape, il faut comprendre d'où viennent les divergences aux caustiques en impulsion. Ces caustiques sont définies par la relation $\partial p_f / \partial x_i^{\bar{\Gamma}} = 0$ (où la dérivée partielle est prise à t_f, p_i, t_i constants). En utilisant l'équation

$$\left(\frac{\partial p_f}{\partial x_i^{\bar{\Gamma}}} \right)_{t_f, p_i, t_i} = \left(\frac{\partial x_f}{\partial x_i^{\bar{\Gamma}}} \right)_{t_f, p_i, t_i} \left(\frac{\partial p_f}{\partial x_f} \right)_{t_f, p_i, t_i} \quad (3.15)$$

on voit qu'une caustique en impulsion coïncide soit avec un point où $\partial x_f / \partial x_i^{\bar{\Gamma}} = 0$ (c'est-à-dire une caustique en position), soit avec un point où $\partial p_f / \partial x_f = 0$. On va négliger le premier cas, qui n'arrive que dans certaines situations spéciales¹. On va considérer plutôt le deuxième cas, c'est-à-dire le cas où les caustiques en position et en impulsion ne coïncident pas (voir la Figure 3.1). Soit $p_f^{(c)}$ la valeur de p_f à une caustique en impulsion, et $x_f^{(c)}$ la valeur correspondante de $x_f^{\bar{\Gamma}}$. Etant donné que $\partial p_f / \partial x_f = 0$ en un tel point, on peut utiliser la relation (3.11), pour obtenir

$$\frac{\partial^2}{\partial x_f^2} \bar{S}_{\bar{\Gamma}}(x_f^{(c)}, t_f; p_i, t_i) = 0 \quad (3.17)$$

Notons que la dérivée seconde $\partial_{x_f}^2 \bar{S}_{\bar{\Gamma}}(x_f^{\bar{\Gamma}}, t_f; p_i, t_i)$ est le coefficient qui apparaît dans le terme d'ordre deux du développement (3.7) pour la phase $\phi_{\bar{\Gamma}}(x_f; p_f)$. Selon l'équation (3.17) elle est nulle pour $p_f = p_f^{(c)}$. L'approximation (3.7) n'est donc pas valable aux caustiques en impulsion, ni dans leur voisinage, où le coefficient $\partial_{x_f}^2 \bar{S}_{\bar{\Gamma}}(x_f^{\bar{\Gamma}}, t_f; p_i, t_i)$ reste petit. Pour remédier à ce problème il faut garder le terme d'ordre trois dans le développement (3.7) pour la phase. Ceci est le point de départ pour l'extension de la méthode de la phase stationnaire.

3.1.3 Extension de la méthode de la phase stationnaire

L'extension de la méthode de la phase stationnaire au voisinage des caustiques en impulsion nécessite une caractérisation de la phase $\phi_{\bar{\Gamma}}(x_f; p_f)$ autour de la caustique $(x_f^{(c)}, p_f^{(c)})$. Puisque la troncature du développement (3.7) après le terme d'ordre deux n'est valable ni à $p_f = p_f^{(c)}$ ni dans son voisinage $p_f \approx p_f^{(c)}$, il faut caractériser la variation de la phase avec la variable de contrôle p_f aussi bien qu'avec la variable interne x_f .

Le problème de caractériser une famille de fonctions quand on perturbe une variable de contrôle relève de la théorie des catastrophes, qu'on va décrire brièvement dans la partie

1. Selon le théorème de Liouville

$$\left(\frac{\partial x_f}{\partial x_i} \right)_{t_f, p_i, t_i} \left(\frac{\partial p_f}{\partial p_i} \right)_{t_f, x_i, t_i} - \left(\frac{\partial x_f}{\partial p_i} \right)_{t_f, x_i, t_i} \left(\frac{\partial p_f}{\partial x_i} \right)_{t_f, p_i, t_i} = 1 \quad (3.16)$$

Les dérivées partielles $\partial x_f / \partial x_i$ et $\partial p_f / \partial x_i$, prises à t_f, p_i, t_i constants, ne peuvent pas être simultanément nulle sauf si une des dérivées $\partial x_f / \partial p_i$ ou $\partial p_f / \partial p_i$, prises à t_f, x_i, t_i constants, diverge.

suivante. La situation générale traitée par la théorie des catastrophes concerne des familles de fonctions dont le nombre de variables internes et le nombre de variables de contrôle sont tous les deux arbitraires. La théorie montre que, pour un nombre de variables de contrôle suffisamment petit, toutes les familles se classent en certains types, qui se décrivent par des formes génériques. Ces formes génériques sont à la base de l'extension de la méthode de la phase stationnaire, qu'on appelle 'la méthode d'approximation uniforme' (à discuter dans la Section 3.3). Elles sont suffisamment simples pour que l'intégrale (3.4) puisse être exprimée en termes de fonctions standard. Les approximations uniformes réussissent à éliminer les divergences associées aux caustiques en position, de la même façon que l'approximation de la phase stationnaire, sans introduire de divergences aux caustiques en impulsion. Loin des caustiques en impulsion leurs prédictions se réduisent uniformément à celles de la méthode de la phase stationnaire.

3.2 Concepts de la théorie des catastrophes

Dans cette partie on va aborder le problème de caractériser la variation près d'un point critique d'une fonction f soumise à une perturbation p . En général² f et p sont des fonctions d'un nombre arbitraire n de variables internes, et les points critiques sont définis comme les points où le gradient de f s'annule. En dehors de son application aux approximations d'intégrales oscillatoires, considérée ici, ce problème apparaît dans de nombreux autres domaines, tels que les transitions de phase, et les études de stabilité. La caractérisation des variations se décrit en termes de familles de fonctions qui sont topologiquement stables vis-à-vis des perturbations. On parle de 'stabilité topologique' lorsque chaque fonction de la famille, ayant subi une perturbation, reste topologiquement équivalente à une autre fonction de la famille. Chaque famille de fonctions est paramétrisée par une ou plusieurs³ variables de contrôle. Les familles se divisent en différents types, selon le nombre r de variables de contrôle, et la symétrie du système.

Pour les systèmes sans aucune symétrie particulière, le nombre de points critiques dépend d'une façon simple du nombre de variables de contrôle. Pour de tels systèmes il existe une classification, due à Thom [21], des formes génériques des familles à jusqu'à cinq variables de contrôle. Au-dessus de cinq aucune classification n'est possible, parce que le nombre de formes génériques est infini. La présence d'une symétrie spéciale, par exemple la périodicité ou l'invariance par réflexion, réduit le nombre de degrés de liberté du système, et donc le nombre de variables de contrôle requises pour le décrire. On va d'abord considérer la classification de Thom, et ensuite discuter l'effet de la symétrie. L'application des résultats de la théorie des catastrophes aux approximations uniformes de l'intégrale (3.4) est discutée dans la Section 3.3.

2. Dans le problème particulier considéré dans ce chapitre, c'est-à-dire l'évaluation de l'intégrale (3.4), on n'utilise qu'une variable interne, à savoir x_f . Ceci vient du fait qu'on s'intéresse à l'impulsion p_f le long d'une direction seulement. Pour calculer un propagateur dans une espace \mathbf{p}_f à plus qu'une dimension, il faudrait remplacer l'intégrale (3.4) par une intégrale multiple, la variable d'intégration étant le vecteur \mathbf{x}_f . Chaque composante du vecteur \mathbf{x}_f serait traitée alors comme une variable interne différente.

3. La raison pour laquelle il nous est utile de considérer des familles à plus qu'une variable de contrôle, même pour traiter un problème à une dimension, sera expliquée dans la Section 3.3.

3.2.1 Stabilité topologique

On va présenter ici les concepts de stabilité topologique d'une fonction et d'une famille de fonctions. Ceci nous mène à la classification de Thom des familles de fonctions, qui s'applique à des systèmes sans symétrie particulière. Des exemples de systèmes avec symétrie seront considérés dans la Section 3.2.2.

Stabilité topologique d'une fonction

On considère une fonction d'une variable $f(x)$. Les points critiques x_c de f sont donc les points où la dérivée de f s'annule, $f'(x_c) = 0$. On suppose d'abord qu'il n'y a qu'un seul point critique x_c , qui se trouve en $x_c = 0$, et que dans son voisinage la fonction⁴ $f(x)$ prend la forme

$$f(x) = \pm x^2. \quad (3.18)$$

On appelle un tel point 'un point critique non-dégénéré' ou 'un point critique de Morse', parce que la dérivée première s'annule mais la dérivée seconde ne s'annule pas. Il est topologiquement stable par rapport à de perturbations $p(x)$, puisque, pour $p(x)$ suffisamment petite, la somme $f + p$ n'a toujours qu'un point critique, et ce point critique est du même type, à savoir un point critique de Morse. Cette propriété se voit de la façon suivante. Supposons que dans le voisinage du point critique $x_c = 0$ la perturbation est de la forme $p(x) = 2\epsilon x$. La somme est donc égale à $g(x) = f(x) + p(x) = x^2 + 2\epsilon x = (x + \epsilon)^2 - \epsilon^2$, qui a un point critique de Morse à $x = -\epsilon$. Si l'approximation pour $p(x)$ à l'ordre le plus bas est quadratique ou d'un ordre plus élevé, le point critique restera de Morse aussi, et ne sera pas déplacé.

On considère ensuite une fonction qui contient un point critique dégénéré $f(x) = x^3$. Supposons qu'on la perturbe en ajoutant un terme $p(x) = \epsilon x$. Pour ϵ positif il n'y a pas de points critiques, et pour ϵ négatif il y en a deux: un maximum et un minimum de Morse (voir la Figure 3.2). Ceci est vrai indépendamment de la grandeur du paramètre de perturbation ϵ . La fonction $f(x) = x^3$ est donc instable.

Formellement, une fonction $f(x)$ est topologiquement stable si, pour toute petite perturbation $p(x)$ la somme $g(x) = f(x) + p(x)$ est topologiquement équivalente⁵ à $f(x)$, c'est-à-dire si la structure des points critiques de $f(x) + p(x)$ est la même que celle de $f(x)$. Dans les exemples donnés ci-dessus, on a vu que la fonction $f(x) = x^2$, qui contient un point critique de Morse, est stable, tandis que la fonction $f(x) = x^3$, avec un point critique dégénéré, est instable. On peut démontrer de façon générale qu'un point critique est topologiquement stable si et seulement s'il est non-dégénéré. Tout point critique dégénéré est donc topologiquement instable.

Stabilité topologique d'une famille de fonctions

On peut de même introduire la notion de stabilité topologique pour une famille de fonctions. Une fonction instable peut ainsi appartenir à une famille qui, elle, est topologiquement stable. Les autres fonctions de la famille représentent un 'déploiement' de la fonction instable,

4. Tant qu'on ne considère que les aspects mathématiques du problème, on peut négliger le terme constant dans le développement des fonctions, puisqu'il ne change pas la structure des points critiques. Ce terme peut pourtant jouer un rôle important dans la physique, et on va l'inclure plus loin (voir l'équation (3.43)).

5. Les définitions précises de stabilité et d'équivalence topologiques sont données dans l'Annexe E.

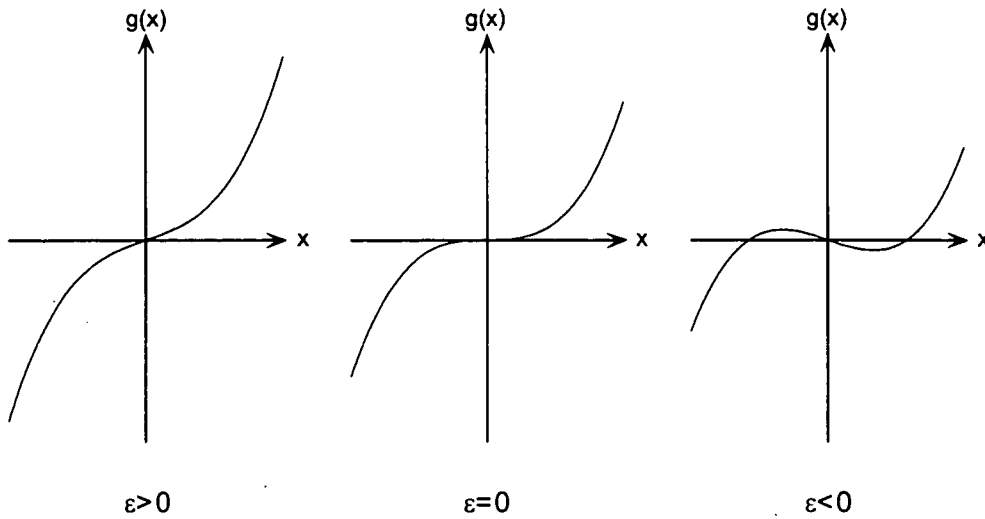


FIG. 3.2 - La fonction perturbée $g(x) = f(x) + p(x)$ où $f(x) = x^3$ et la perturbation est $p(x) = \epsilon x$. Pour ϵ positif il n'y a pas de point critique, pour $\epsilon = 0$ il y a un seul point critique dégénéré, et pour ϵ négatif il y a deux points critiques de Morse.

son point critique dégénéré ayant été divisé en plusieurs points critiques séparés. Le théorème de Thom classe les familles à moins de six variables de contrôle qui sont topologiquement stables. Ces familles s'appellent des 'catastrophes'.

Considérons la famille de fonctions à une variable de contrôle t

$$f(x; t) = x^3 + tx \quad (3.19)$$

Bien qu'on ait inclus la variable de contrôle t parmi les arguments de f , il faut se rappeler qu'elle n'a pas le même statut que x (la variable interne). En effet, les points critiques sont les points où le gradient de f par rapport aux variables internes s'annulent. Les dérivées par rapport aux variables de contrôle ne jouent aucun rôle dans le problème.

Pour une valeur non-nul de la variable t tous les points critiques sont de Morse. Pour $t = 0$ cependant, un point critique dégénéré existe. On a déjà montré que la fonction $f(x; t = 0) = x^3$ est topologiquement instable. La famille $f(x; t)$ dans laquelle elle se trouve est pourtant topologiquement stable. Cela signifie que si on ajoute une petite perturbation quelconque $p(x)$ à une fonction $f(x; t)$ de la famille, la somme $f(x; t) + p(x)$ est équivalente à une autre fonction $f(x; t')$ de la même famille.

Pour comparaison, on va présenter maintenant un exemple d'une famille de fonctions qui n'est pas stable. Considérons la famille

$$f(x; t) = \pm (x^4 + tx^2) \quad (3.20)$$

Les dérivées de ces fonctions sont

$$\partial_x f(x; t) = \pm (4x^3 + 2tx) = \pm 2x (2x^2 + t) \quad (3.21)$$

L'équation $\partial_x f(x; t) = 0$ donne les positions des points critiques de $f(x; t)$. La structure des points critiques dépend de t . Pour $t > 0$ la fonction $f(x; t)$ a un seul point critique, de Morse.

Pour $t = 0$ elle a un point critique dégénéré, et pour $t < 0$ elle a trois points critiques, tous de Morse. La disposition des points critiques est indiquée sur la Figure 3.3(a).

Supposons qu'on ajoute une perturbation $p(x) = \pm\epsilon x$. La somme $g(x; t) = f(x; t) + p(x)$ est

$$g(x; t) = \pm (x^4 + tx^2 + \epsilon x) \quad (3.22)$$

et sa dérivée est

$$\partial_x g(x; t) = \pm (4x^3 + 2tx + \epsilon) \quad (3.23)$$

La structure des points critiques de $g(x; t)$ est différente de celle de $f(x; t)$ (voir la Figure 3.3(b)). En particulier, considérons la valeur $t = t_0$ où

$$t_0 = -\frac{3}{2}\epsilon^{2/3}. \quad (3.24)$$

En ce point la dérivée $\partial_x g(x; t)$ est égale à

$$\partial_x g(x; t_0) = \pm 4 \left(x - \frac{\sqrt[3]{\epsilon}}{2} \right)^2 (x + \sqrt[3]{\epsilon}) \quad (3.25)$$

$g(x; t_0)$ contient donc deux points critiques: un point critique de Morse à $x = -\sqrt[3]{\epsilon}$ et un point critique dégénéré à $x = \sqrt[3]{\epsilon}/2$. Il n'y a aucune fonction de la famille $f(x; t)$ qui est équivalente à $g(x; t_0)$, puisque aucune fonction de cette famille ne contient exactement deux points critiques. La famille $f(x; t)$ est donc topologiquement instable. Notons cependant que si le système présentait une symétrie telle que seules des fonctions paires soient acceptables, la famille $f(x; t)$ serait stable. Pour un système général on peut rendre la famille (3.20) stable en introduisant une deuxième variable de contrôle

$$f(x; t_1, t_2) = \pm (x^4 + t_2 x^2 + t_1 x) \quad (3.26)$$

Applications

Il est important de voir quelles sortes de points critiques l'on peut trouver dans une famille de fonctions. Une seule fonction ne contient génériquement que des points critiques de Morse. A l'intérieur d'une famille cependant, il existe en général certaines fonctions qui contiennent des points critiques dégénérés. L'ordre de la dégénérescence⁶ peut être d'autant plus grand que le nombre de variables de contrôle de la famille est élevé.

Dans un problème de physique le nombre de variables de contrôle correspond souvent à la dimension du système. Par exemple, dans le calcul de $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ (Section 3.1.1) on s'intéresse à la distribution en impulsion d'une particule à une dimension. Il n'y a donc qu'une variable de contrôle, à savoir p_f . En variant p_f , on ne rencontre en général que des fonctions $\phi(x_f; p_f)$ dont les points critiques sont dégénérés d'ordre au plus deux. La famille la plus petite qui contient ces fonctions est $f(x; t)$, définie dans (3.19). Cette famille s'appelle 'le pli' ou 'l'arc-en-ciel'. La raison de l'appellation 'pli' est la suivante. Considérons l'ensemble $\{(x_c, t) \forall t : \partial_x f(x_c; t) = 0\}$, c'est-à-dire l'ensemble de tous les points $\{(x_c, t)\}$ où x_c est un

6. L'ordre de la dégénérescence désigne le nombre N de dérivées $\{\partial_x f, \partial_x^2 f, \dots, \partial_x^N f\}$ qui s'annulent simultanément.

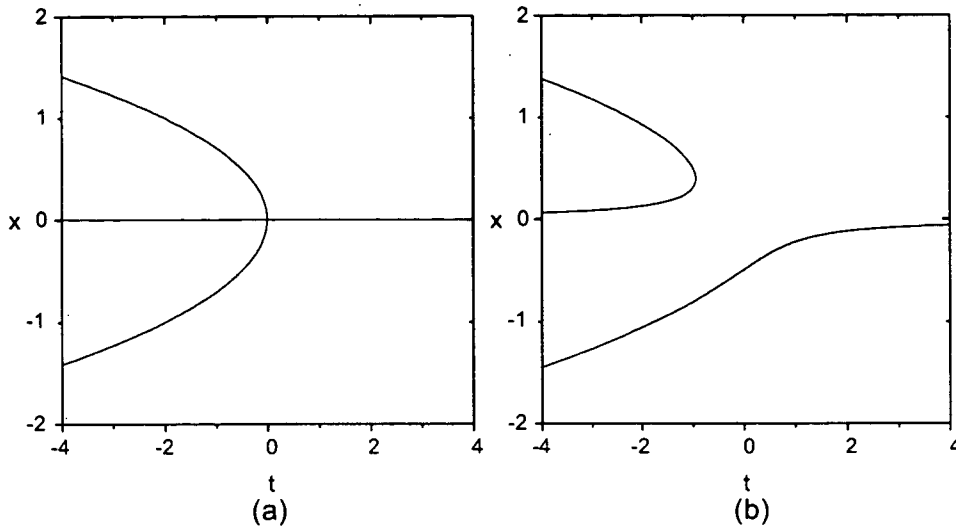


FIG. 3.3 - La disposition des points critiques de la famille $f(x; t) = x^4 + tx^2$ (a), et de $g(x; t) = x^4 + tx^2 + \epsilon x$ pour $\epsilon = 0.5$ (b).

point critique de la fonction $f(x; t)$. Cet ensemble s'appelle la variété de catastrophe. Pour le pli, il est décrit par la relation

$$3x_c^2 = -t, \quad (3.27)$$

qui est une parabole, ou 'un pli' (voir la Figure 3.4(a)).

Souvent, dans un problème de physique, on identifie une caustique par sa variété de catastrophe. Dans le calcul de $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ décrit dans la Section 3.1.1 on s'intéressait aux points critiques $x_f^{\bar{}}$ de la phase $\phi_{\bar{\Gamma}}(x_f; p_f)$ pour chaque valeur de p_f . Cet ensemble de points $\{(x_f^{\bar{}}, p_f)\}$ constitue la variété de catastrophe de $\phi_{\bar{\Gamma}}(x_f; p_f)$ (voir la Figure 3.4(b)). Elle est identique au diagramme espace phase du système, sauf que ce dernier contient de l'information concernant la distribution le long de la courbe de l'ensemble classique qui représente l'état quantique, information qui n'est pas présente dans la variété du catastrophe. Près de la caustique la variété de catastrophe de $\phi_{\bar{\Gamma}}(x_f; p_f)$ (Figure 3.4(b)) est topologiquement équivalente à celle du pli (Figure 3.4(a)). La valeur de p_f où il n'existe qu'un point critique $x_f^{(c)}$ est la caustique $p_f = p_f^{(c)}$ (analogue à $t = 0$). Ce point critique est dégénéré $\partial_{x_f}^2 \phi_{\bar{\Gamma}}(x_f^{(c)}; p_f^{(c)}) = 0$. Si on éloigne p_f de sa valeur à la caustique, il existe deux possibilités: soit le point dégénéré se sépare en deux points critiques non-dégénérés (analogue au cas $t < 0$), soit il disparaît (analogue au cas $t > 0$). Dans le premier cas, deux trajectoires racines existent, et la valeur de p_f est permise classiquement. Dans le second cas, aucune trajectoire racine n'existe, c'est-à-dire la valeur de p_f est classiquement interdite.

La raison pour l'appellation 'arc-en-ciel' est que le même type de caustique est présent dans un arc-en-ciel. L'angle de réflexion d'un un rayon optique par une goutte d'eau dépend du paramètre d'impact (voir la Figure 3.5). Supposons qu'on augmente continûment le paramètre d'impact de zéro (impact direct) jusqu'à sa valeur maximale (incidence rasante). L'angle de réflexion augmente continûment jusqu'à une valeur critique (l'angle 'arc-en-ciel') au-delà de

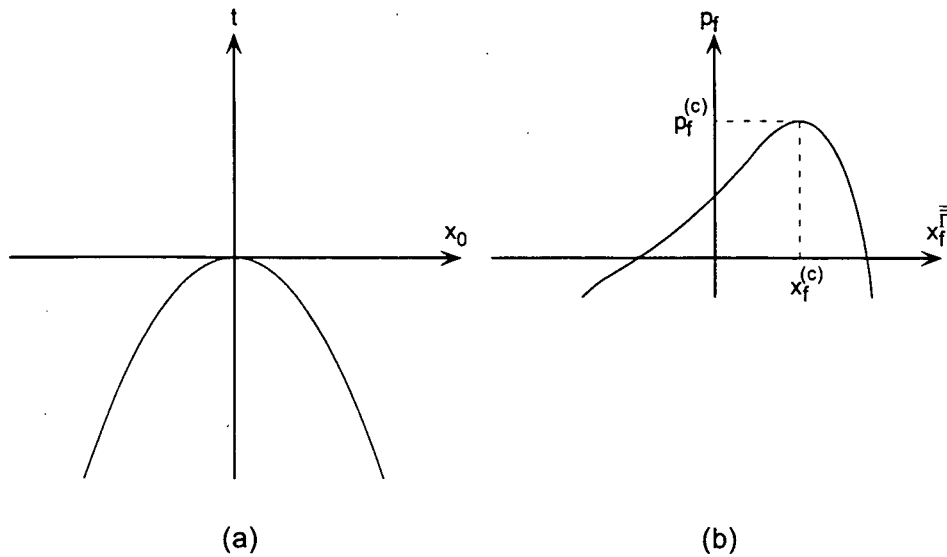


FIG. 3.4 - (a) La variété de catastrophe du pli. (b) L'impulsion p_f près de la caustique $p_f^{(c)}$ en fonction des points critiques $x_f^{\bar{}}$ (comparer avec la Figure 3.1).

laquelle il diminue. L'angle maximal correspond à la caustique. A cet angle, la lumière atteint une intensité maximale. Le fait que l'angle critique dépende de la longueur d'onde de la lumière incidente est ce qui produit l'arc-en-ciel.

Par analogie, considérons maintenant un problème physique à deux dimensions. En général, les fonctions décrivant le système peuvent contenir des points critiques dont la dégénérescence est au plus d'ordre deux. La famille la plus petite qui contient ces fonctions est $f(x; t_1, t_2)$, définie dans (3.26). Elle s'appelle 'la fronce', pour la raison suivante. Considérons les valeurs de t_1 et t_2 pour lesquelles il existe des points critiques dégénérés. Ce sont les caustiques du système. Dans le pli il n'y avait qu'un point critique dégénéré, à savoir $t = 0$. Dans la fronce, les points critiques dégénérés constituent une variété à une dimension, qui s'appelle l'ensemble de bifurcation, et qui peut être calculée de la façon suivante. Puisque les points de l'ensemble de bifurcation sont des points critiques dégénérés, ils satisfont à deux conditions: $\partial_x f = 0$ et $\partial_x^2 f = 0$. Ces deux conditions s'expriment comme

$$\begin{aligned} 4x^3 + 2t_2x + t_1 &= 0 \\ 12x^2 + 2t_2 &= 0 \end{aligned} \tag{3.28}$$

Les valeurs de x qui satisfont à la deuxième condition sont $x = \pm(t_2/6)^{1/2}$. En substituant ces valeurs de x dans la première condition on obtient une relation entre t_1 et t_2

$$t_1 = \mp 16 \left(\frac{t_2}{6} \right)^{3/2} \tag{3.29}$$

Cette relation décrit l'ensemble de bifurcation. L'ensemble prend la forme d'une fronce (voir la Figure 3.6).

La forme de la Figure 3.6 est la forme typique d'une caustique à deux dimensions. Un exemple est la caustique qu'on voit dans une tasse à café quand la lumière d'une source

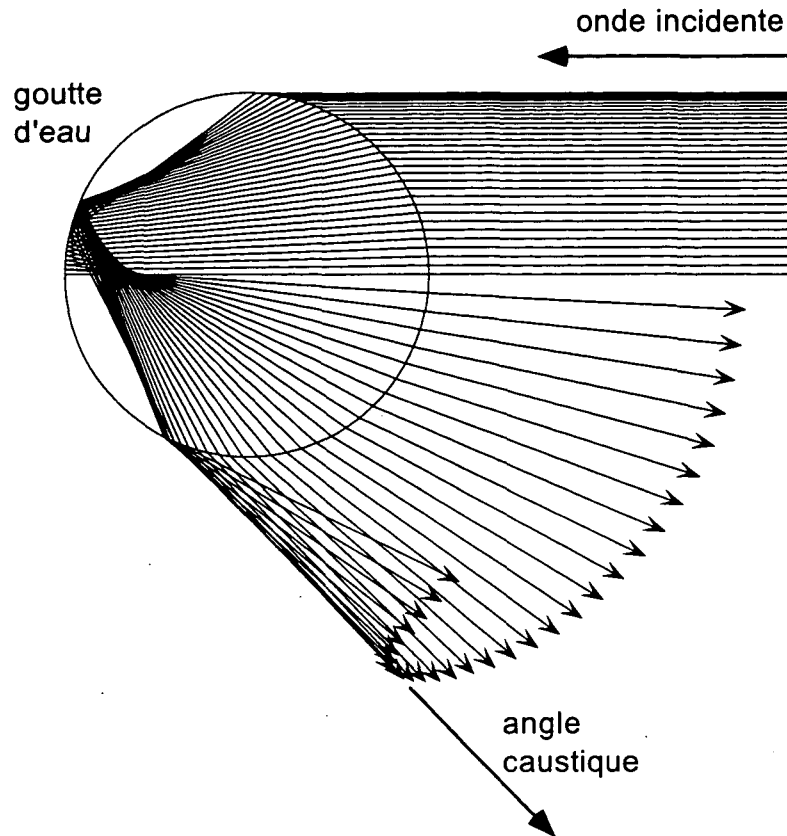


FIG. 3.5 – Les rayons optiques réfléchis par une goutte d'eau sphérique. L'indice de réfraction de l'eau est 1,3.

lointaine (par exemple le soleil) réfléchit de la surface intérieure de la tasse et sur la surface du café. La caustique est la courbe brillante composée de deux arcs qui se rencontrent sur leur axe de symétrie (voir la Figure 3.7). Le point où elles se rencontrent est le plus brillant, et marque la pointe de la fronce. Localement autour de ce point la caustique prend la forme indiquée sur la Figure 3.6. La correspondance entre les coordonnées de la surface et les variables de contrôle t_1 et t_2 est linéaire dans ce voisinage [29]. On voit les mêmes formes dans la figure de diffraction de gouttes d'eau. Une façon de les produire est de faire passer un faisceau laser sur une goutte d'eau et puis de le projeter sur un écran lointain.

Familles à plus de deux variables de contrôle

Jusqu'ici on n'a traité que des fonctions f d'une variable interne x . Or souvent on considère un système qui contient plusieurs variables internes (x, y, z, \dots), et on s'intéresse aux points critiques où le gradient ∇f s'annule⁷. Une fonction f de plusieurs variables ne contient génériquement que des points critiques de Morse. Autour de ces points la fonction est

7. Un exemple est le calcul par la méthode de la phase stationnaire du propagateur $\bar{K}(\mathbf{p}_f, t_f; \mathbf{p}_i, t_i)$, où \mathbf{p}_i et \mathbf{p}_f sont des vecteurs.

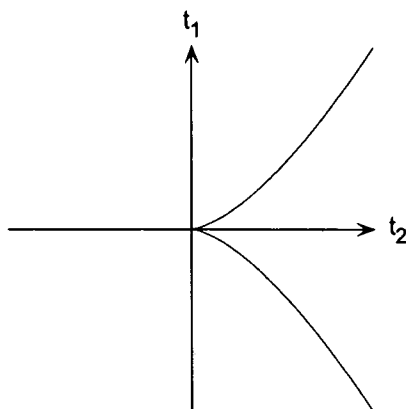


FIG. 3.6 – L'ensemble de bifurcation de la fronce.

localement équivalente à

$$f(x, y, z, \dots) = \pm x^2 \pm y^2 \pm z^2 \pm \dots, \quad (3.30)$$

où le choix \pm est indépendant pour chaque variable interne. Supposons maintenant qu'on choisisse une famille de fonctions $f(x, y, z, \dots; t)$, où t est une variable de contrôle qui paramétrise la famille. Il se peut que la famille contiennent certaines fonctions qui possèdent des points critiques dégénérés. Si la famille est paramétrisée par une seule variable de contrôle t , les points critiques dégénérés ne peuvent être en général que du type pli. Autour d'un tel point la famille est localement équivalente à

$$f(x, y, z, \dots; t) = x^3 + tx \pm y^2 \pm z^2 \pm \dots, \quad (3.31)$$

Pour une famille à deux variables de contrôle on retrouve la fronce

$$f(x, y, z, \dots; t_1, t_2) = \pm (x^4 + t_2 x^2 + t_1 x) \pm y^2 \pm z^2 \pm \dots \quad (3.32)$$

Les deux familles (3.31) et (3.32) sont topologiquement stables. Il s'avère que le pli (3.31) soit la seule famille à une variable de contrôle qui est topologiquement stable. C'est-à-dire, toutes les familles stables à une variable de contrôle sont équivalentes à (3.31) (voir la Définition 4 dans l'Annexe E). De même, la fronce (3.32) est la seule famille à deux variables de contrôle qui soit topologiquement stable.

Des familles analogues au pli et à la fronce existent pour trois, quatre et cinq variables de contrôle

$$f(x, y, z, \dots; t_1, t_2, t_3) = x^5 + t_3 x^3 + t_2 x^2 + t_1 x \pm y^2 \pm z^2 \pm \dots \quad (3.33)$$

$$f(x, y, z, \dots; t_1, t_2, t_3, t_4) = \pm (x^6 + t_4 x^4 + t_3 x^3 + t_2 x^2 + t_1 x) \pm y^2 \pm z^2 \pm \dots \quad (3.34)$$

$$f(x, y, z, \dots; t_1, t_2, t_3, t_4, t_5) = x^7 + t_5 x^5 + t_4 x^4 + t_3 x^3 + t_2 x^2 + t_1 x \pm y^2 \pm z^2 \pm \dots \quad (3.35)$$

Elles s'appellent respectivement la queue d'aronde, le papillon et le wigwam à cause des formes de leurs ensembles de bifurcation. La série de familles (3.31), (3.32), (3.33), (3.34) et (3.35) est

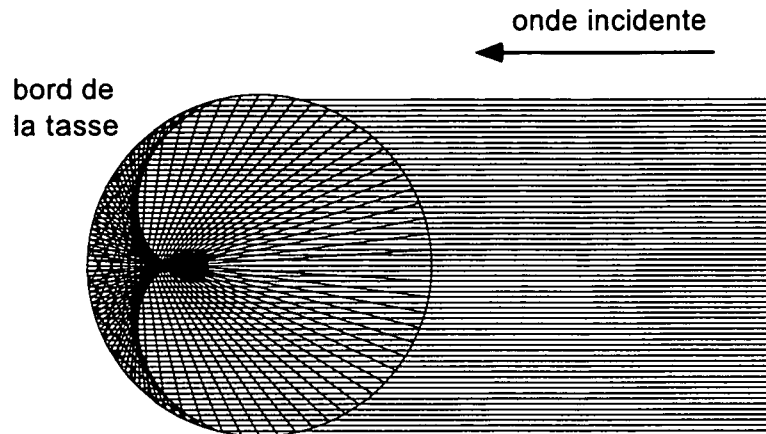


FIG. 3.7 – Les rayons optiques réfléchis de la surface intérieure d'une tasse à café.

connue sous le nom des 'catastrophes cuspoïdes'. Il existe d'autres séries de familles. En effet la queue d'aronde n'est pas la seule famille à trois variables de contrôle qui soit topologiquement stable. De même, le papillon et le wigwam ne sont pas les seules familles stables à quatre et cinq variables de contrôle respectivement. La raison en est la suivante. Considérons les points critiques dégénérés des familles appartenant à la série de catastrophes cuspoïdes. La dérivée seconde s'annule en ces points le long de l'axe x uniquement. Or une famille à plus que deux variables de contrôle peut contenir des fonctions dont la dérivée seconde s'annule en les points critiques en deux directions simultanément. De telles familles appartiennent à la série de catastrophes dites 'ombiliques'. Chaque famille générique à moins que six variables de contrôle appartient soit à la série cuspoïde soit à la série ombilique. Les deux séries sont présentées dans l'Annexe F.

Si on inclut parmi les points critiques ceux qui sont complexes, et on compte chacun avec sa multiplicité⁸ le nombre total de points critiques est identique pour toutes les fonctions appartenant à la même famille générique. Ce nombre caractérise donc la famille. Diminué à une unité, il s'appelle la codimension de la famille. La codimension de la catastrophe la plus simple, le pli, vaut donc un. La fronce a une codimension de deux. Si le système ne contient pas de symétrie particulière, la codimension est égale au nombre de variables de contrôle.

3.2.2 Systèmes avec symétrie

La classification de Thom ne s'applique pas aux systèmes qui présentent une symétrie particulière. En effet la symétrie change la stabilité d'une famille de fonctions. Considérons par exemple la famille (3.20), qui ne contient que des fonctions paires. Cette famille est topologiquement instable pour des systèmes généraux, mais stable pour des systèmes qui sont invariants par réflexion. La codimension d'une famille appartenant à un système symétrique est plus grande que le nombre de variables de contrôle. En revanche le nombre de variables de contrôle est toujours égal au nombre de points critiques 'indépendants' moins un (chaque point

8. J'utilise le terme 'multiplicité' pour indiquer l'ordre de dégénérescence d'un point critique. Un point critique de Morse par exemple a une multiplicité de un. Un point critique auquel les premières n dérivées s'annulent mais la $(n + 1)$ ième dérivée ne s'annule pas a une multiplicité de n .

critique compté rappelons-le avec sa multiplicité). Cette dernière relation est importante pour le développement des approximations uniformes, qu'on va aborder dans la partie suivante. Deux points critiques sont considérés indépendants s'ils ne sont pas reliés l'un à l'autre par la symétrie du système. Par exemple, pour un système qui est invariant par réflexion, les points critiques qui sont disposés symétriquement autour de l'origine ne sont pas indépendants. Notons que pour un système général tous les points critiques sont indépendants.

Un autre exemple de symétrie est la périodicité. On peut s'intéresser par exemple aux familles de fonctions de la forme

$$\begin{aligned}
 f_\xi(x; t) &= t \sin x + \xi x \\
 f_\xi(x; t_1, t_2, \theta_1) &= t_2 \sin 2x + t_1 \sin(x + \theta_1) + \xi x \\
 &\vdots \\
 f_\xi(x; t_1, \dots, t_n, \theta_1, \dots, \theta_{n-1}) &= t_n \sin nx + \sum_{j=1}^{n-1} t_j \sin(jx + \theta_j) + \xi x \quad (3.36)
 \end{aligned}$$

Si les fonctions f désignent des phases il faut que l'indice ξ vaille un nombre entier pour qu'elles soient périodique. Dans des problèmes physiques ξ joue souvent le rôle d'un paramètre de quantification. Si en revanche les fonctions désignent des amplitudes quelconque il faut que ξ soit égal à zéro. La codimension de chacune de ces familles est infinie, bien que le nombre de variables de contrôle $\{t_1, \dots, t_n, \theta_1, \dots, \theta_{n-1}\}$ soit fini. On peut facilement vérifier cependant que le nombre de variables de contrôle est égal au nombre de points critiques indépendants moins un. En effet le nombre de points critiques indépendants est le nombre de points critiques contenus dans une période.

3.3 Approximations uniformes

Ayant énoncé quelques-uns des concepts de la théorie des catastrophes, on va maintenant les utiliser pour obtenir des approximations uniformes. Ce sont des approximations semi-classiques qui sont valable partout dans le voisinage des caustiques et se réduisent uniformément à l'approximation de la phase stationnaire loin des caustiques. Une de leurs propriétés importantes est que, comme c'était le cas pour l'approximation de la phase stationnaire, leurs résultats ne dépendant que de quantités classiques, à savoir l'action généralisée le long des trajectoires racines et la densité de chemins classiques autour de ces mêmes trajectoires.

3.3.1 Le choix d'une forme générique pour la phase

Pour présenter la méthode d'approximation uniforme, je vais prendre comme exemple le calcul du propagateur $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$, considéré dans la Section 3.1. Le point de départ est l'intégrale (3.4). Pour simplifier la notation je vais pourtant supposer que l'approximation BKW du propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ ne contient qu'une branche $\bar{\Gamma}$. La phase de l'intégrand (3.4) s'écrit donc sans indice, comme $\phi(x_f; p_f)$. Selon la théorie des catastrophes, il y aura en général des valeurs $p_f^{(c)}$ de l'impulsion pour lesquelles la fonction $\phi(x_f; p_f)$ contient des points critiques dégénérés. L'approximation quadratique (3.7) pour la phase n'est pas valable à de tels points, et la méthode de la phase stationnaire échoue. Puisqu'il n'y a qu'un seul variable de contrôle p_f , la théorie des catastrophes montre que les points critiques dégénérés

ne peuvent être en général que du type pli. Localement, autour de la caustique, la forme de la phase est donc équivalente à (3.19). Si on substitue les variables $(x_f; p_f)$ pour les variables $(x; t)$ dans la forme générique (3.19), en utilisant des relations linéaires valable localement autour de la caustique, on obtient

$$\phi(x_f; p_f) \approx \phi\left(x_f^{(c)}; p_f^{(c)}\right) + \frac{1}{3! \hbar} \left[\frac{\partial^3}{\partial x_f^3} \bar{S}\left(x_f^{(c)}, t_f; p_i, t_i\right) \right] \left(x_f - x_f^{(c)}\right)^3 - \frac{1}{\hbar} x_f \left(p_f - p_f^{(c)}\right) \quad (3.37)$$

Il faut insister sur le fait que l'approximation (3.37) n'est valable que localement à la caustique. Or la méthode de la phase stationnaire échoue non seulement aux caustiques $p_f = p_f^{(c)}$ mêmes, mais aussi dans leur voisinage $p_f \approx p_f^{(c)}$. Ce concept d'un 'voisinage' n'entre pas dans la théorie mathématique des catastrophes, bien qu'il soit très important dans son application aux systèmes physiques. Dans l'application aux intégrales oscillatoires, que nous considérons ici, le voisinage est déterminé quantitativement par la rapidité d'oscillation de la phase, et donc, dans notre cas, par le paramètre \hbar . On va maintenant calculer l'étendue de ce voisinage pour le pli (3.37).

Supposons qu'on choisisse une valeur de p_f proche de la caustique $p_f^{(c)}$. Pour cette valeur de p_f on développe la phase autour d'un point critique $x_f^{\bar{f}}$

$$\phi(x_f; p_f) = \phi\left(x_f^{\bar{f}}; p_f\right) + \frac{1}{2!} \partial_{x_f}^2 \phi\left(x_f^{\bar{f}}; p_f\right) \left(x_f - x_f^{\bar{f}}\right)^2 + \frac{1}{3!} \partial_{x_f}^3 \phi\left(x_f^{\bar{f}}; p_f\right) \left(x_f - x_f^{\bar{f}}\right)^3 + \dots \quad (3.38)$$

Il est valable de tronquer le développement à second ordre si le terme cubique est très petite devant le terme quadratique, c'est-à-dire si

$$\left| \partial_{x_f}^3 \phi\left(x_f^{\bar{f}}; p_f\right) \left(x_f - x_f^{\bar{f}}\right)^3 \right| \ll 1 \quad \text{pour} \quad \left(x_f - x_f^{\bar{f}}\right)^2 = \left| \partial_{x_f}^2 \phi\left(x_f^{\bar{f}}; p_f\right) \right|^{-1} \quad (3.39)$$

Cette condition peut s'exprimer de façon plus concis comme

$$\left| \partial_{x_f}^3 \phi\left(x_f^{\bar{f}}; p_f\right) \right| \ll \left| \partial_{x_f}^2 \phi\left(x_f^{\bar{f}}; p_f\right) \right|^{3/2} \quad (3.40)$$

Si on utilise l'approximation (3.37) pour calculer les dérivées $\partial_{x_f}^2 \phi\left(x_f^{\bar{f}}; p_f\right)$ et $\partial_{x_f}^3 \phi\left(x_f^{\bar{f}}; p_f\right)$ près de la caustique $p_f \approx p_f^{(c)}$ on trouve que la condition (3.40) est satisfaite pour les p_f tels que

$$\left| p_f - p_f^{(c)} \right|^3 \gg \hbar^2 \left| \frac{\partial^3}{\partial x_f^3} \bar{S}\left(x_f^{(c)}, t_f; p_i, t_i\right) \right| \quad (3.41)$$

Le 'voisinage' de la caustique est défini comme l'ensemble des p_f qui ne satisfont pas à l'inégalité (3.41). Pour ces valeurs de p_f la méthode de la phase stationnaire n'est pas valable.

Une façon équivalente d'exprimer le régime de validité de la méthode de la phase stationnaire est en termes de la proximité entre les points de la phase stationnaire. Pour le pli il existe deux points de la phase stationnaire dont la séparation est d'autant plus petite que la variable de contrôle p_f est proche de la caustique $p_f^{(c)}$ (voir la Figure 3.4). En utilisant la

condition (3.40) et l'approximation (3.37) on trouve que la méthode de la phase stationnaire est valable seulement si les deux points de phase stationnaire, que j'appellerai $x_f^{\bar{1}}$ et $x_f^{\bar{2}}$, sont suffisamment loins l'un de l'autre que

$$\left| x_f^{\bar{1}} - x_f^{\bar{2}} \right|^3 \gg \hbar \left| \frac{\partial^3 \bar{S}}{\partial x_f^3} \left(x_f^{(c)}, t_f; p_i, t_i \right) \right|^{-1} \quad (3.42)$$

Supposons que p_f se trouve dans le voisinage de la caustique, au sens de l'inégalité (3.41). Il n'est pas alors valable d'utiliser une approximation quadratique pour la phase comme l'on a fait dans la méthode de la phase stationnaire. Or il se peut que le développement (3.37) ne soit pas une bonne approximation à la phase non plus, puisque elle n'est valable que localement à la caustique. Ce qu'il faut est une approximation semi-classique qui soit localement valable partout dans le voisinage de la caustique et se réduise à l'approximation de phase stationnaire loin de la caustique. Ceci est la motivation pour le développement des approximations uniformes.

L'idée de base est d'utiliser une forme pour la phase qui soit localement correcte a tous les points de phase stationnaire simultanément. Elles résolvent ainsi la difficulté, à l'origine de l'échec de la méthode de la phase stationnaire, que certains points critiques peuvent se trouver trop proche l'un de l'autre pour être traités indépendamment. Les formes génériques pour la phase sont fournies par la théorie des catastrophes.

La proximité entre des points critiques joue un rôle important dans le choix de la forme générique qu'on prend pour la phase. Bien que la famille de fonctions $\phi(x_f; p_f)$ n'ait qu'une variable de contrôle p_f , et donc ne contienne en général que des fonctions dont les points critiques sont dégénérés d'ordre au plus deux, il se peut que ces mêmes fonctions possèdent trois points critiques ou plus qui sont tous 'proches' les uns des autres dans le sens de l'inégalité (3.42). En ce cas la forme générique adaptée aura plus qu'une variable de contrôle.

En général le choix de la forme générique est déterminé par la disposition des points critiques, et non par le nombre de variables de contrôle originales (dans notre cas une seule, à savoir p_f). Si par exemple tous les points critiques sont isolés, on peut utiliser comme approximation la fonction de Morse à chaque point critique séparément (ce qui revient à appliquer la méthode de la phase stationnaire). Si en revanche un point critique est proche d'un autre point critique (mais isolé de tous les autres), on peut utiliser le pli pour cette paire. De même, si un point critique est proche simultanément à deux autres points critiques (mais isolé de tous les autres) il faut utiliser la fonce.

Pour des systèmes qui présentent une symétrie particulière la procédure est la même. Considérons par exemple un système périodique. Si tous les points critiques sont isolés, on peut utiliser la fonction de Morse. Si chaque point critique est proche à un autre au plus, il suffit d'utiliser le pli. Si en revanche tous les points critiques sont proches les uns des autres il faut utiliser une des formes génériques périodiques (3.36). Le choix dépend du nombre de points critiques par période (comptés avec leur multiplicité). Ce nombre est pair. S'il y a deux points critiques par période, il faut utiliser la famille $f_\xi(x; t)$ à une variable de contrôle. S'il y a quatre points critiques par période il faut utiliser la famille à trois variables de contrôle, et ainsi de suite.

3.3.2 Obtention heuristique des approximations uniformes

On va présenter maintenant la méthode d'approximation uniforme. Le but n'est pas de justifier tous les étapes de façon rigoureuse, puisque certaines entre elles dépendent de théorèmes assez subtils de la théorie des catastrophes. On va plutôt insister sur le démarche pratique et la signification physique du résultat. Chaque étape sera illustré par les exemples de la fonction de Morse, du pli et de la famille périodique à un harmonique.

Détermination de la phase

La première étape dans la recherche d'une approximation uniforme de l'intégrale (3.4) est de choisir une forme générique pour la phase $\phi(x_f; p_f)$

$$\phi(x_f; p_f) = f(u; \mathbf{t}) + \gamma. \quad (3.43)$$

Le choix de $f(u; \mathbf{t})$ est déterminé par la structure des points critiques et la symétrie du système, comme on l'a décrit dans la Section 3.3.1. \mathbf{t} est un vecteur de dimension r , qui dénote les variables de contrôle. Ce sont des fonctions (en général non-linéaires) de p_f . γ est une constante, qui n'a pas d'importance au point de vue mathématique, puisque elle ne change pas les points critiques, mais contient souvent une signification physique. Dans les exemples qui suit on va remplacer $f(u; \mathbf{t})$ par la fonction de Morse (3.18), le pli (3.19) et la fonction périodique à un harmonique (3.36). On distinguera les quantités associées aux différents exemples par les indices I, II et ∞ respectivement. Ces indices fait référence au nombre de points critiques traités simultanément.

Si un point critique est isolé de tous les autres, on peut utiliser la fonction de Morse (3.18)

$$\phi(x_f; p_f) = \pm u^2 + \gamma_I \quad (3.44)$$

qui ne contient aucune variable de contrôle \mathbf{t} . Ceci revient à utiliser la méthode de la phase stationnaire. En différentiant la fonction de droite par rapport à u , on vérifie qu'elle possède en effet un seul point critique u_c , qui se trouve en

$$u_c = 0 \quad (3.45)$$

Si deux points critiques sont proches, mais isolés de tous les autres on peut utiliser le pli (3.19)

$$\phi(x_f; p_f) = u^3 + t_{II}u + \gamma_{II} \quad (3.46)$$

qui contient une variable de contrôle t_{II} . La fonction de droite possède maintenant deux points critiques⁹ u_c^\pm , qui se trouvent en

$$u_c^\pm = \pm \left(-\frac{t_{II}}{3} \right)^{1/2}, \quad (3.47)$$

Si la famille $\phi(x_f; p_f)$ est périodique et contient au plus deux points critiques par période, il faut utiliser la famille périodique à un harmonique (3.36)

$$\phi(x_f; p_f) = t_\infty \sin u + \xi u + \gamma_\infty \quad (3.48)$$

9. Notons que pour t_{II} positif les deux points critiques sont complexes.

qui contient une variable de contrôle t_∞ . La fonction de droite possède en effet deux points critiques par période $u_c^{(n)\pm}$

$$u_c^{(n)\pm} = \pm \arccos \left(-\frac{\xi}{t_\infty} \right) + 2\pi n \quad (3.49)$$

où la valeur de la fonction arccos est prise dans la gamme $[0, \pi[$.

Il est important de noter que l'équation (3.43) fournit *la définition* de la variable u , et n'est pas une approximation locale, comme c'était le cas pour le développement (3.37). La relation entre x_f et u n'est pas donc en général linéaire. Cependant, puisque $\phi(x_f; p_f)$ et $f(u; t)$ ont la même structure de points critiques, u se déduit de x_f par un difféomorphisme y_t (qui dépend de t)

$$u = y_t(x_f) \quad (3.50)$$

On utilise le fait que $\phi(x_f; p_f)$ et $f(u; t)$ ont la même structure de points critiques pour trouver les paramètres libres $\{t, \gamma\}$. En différentiant l'équation (3.43) par rapport à x_f on obtient

$$\partial_{x_f} \phi(x_f; p_f) = \partial_u f(u; t) \frac{du}{dx_f} \quad (3.51)$$

Puisque u s'exprime en termes de x_f par un difféomorphisme, ni du/dx_f ni son inverse ne peuvent s'annuler. Les points critiques $x_f^{\bar{i}}$ de $\phi(x_f; p_f)$ correspondent donc aux points critiques de $f(u; t)$. Puisque le nombre de points critiques indépendants est important pour obtenir l'approximation uniforme, on va les numéroter $\bar{\Gamma} \leftrightarrow (i)$ où $i \in \{0, \dots, r\}$. On utilisera la notation $x_c^{(i)}$ pour les points critiques indépendants $x_f^{\bar{i}}$ de la fonction $\phi(x_f; p_f)$, et la notation $u_c^{(i)}$ pour les points critiques indépendants de $f(u; t)$. La correspondance entre $u_c^{(i)}$ et $x_c^{(i)}$ s'exprime comme

$$u_c^{(i)} = y_t \left(x_c^{(i)} \right) \quad (3.52)$$

où

$$\begin{aligned} \partial_{x_f} \phi \left(x_c^{(i)}; p_f \right) &= 0 \\ \partial_u f \left(u_c^{(i)}; t \right) &= 0 \end{aligned} \quad (3.53)$$

En substituant les relations (3.52) dans (3.43) on trouve

$$\phi \left(x_c^{(i)}; p_f \right) = f \left(u_c^{(i)}; t \right) + \gamma \quad (3.54)$$

Les équations (3.54) fournissent des conditions avec lesquelles on peut trouver les paramètres libres $\{t, \gamma\}$. Notons que le nombre de points critiques indépendants (et donc le nombre d'équations) vaut $r + 1$, qui est égal au nombre total de paramètres libres $\{t, \gamma\}$. Le fait que ce système d'équations est inversible est garanti par les résultats de la théorie des catastrophes concernant la forme des familles génériques $f(u, t)$.

Dans le cas trivial (3.44) où on traite un seul point critique isolé, on trouve que le paramètre libre γ_I est égale à la phase au point critique

$$\gamma_I = \phi(x_c; p_f) \quad (3.55)$$

Dans le cas (3.46) où on traite deux points critiques simultanément, on trouve que les paramètres libres γ_{II} et t_{II} sont déterminés respectivement par la somme et la différence des phases aux deux points critiques x_c^\pm

$$\begin{aligned} \gamma_{II} &= \frac{1}{2} [\phi(x_c^+; p_f) + \phi(x_c^-; p_f)] \\ t_{II} &= -3 \left[\frac{\phi(x_c^-; p_f) - \phi(x_c^+; p_f)}{4} \right]^{2/3} \end{aligned} \quad (3.56)$$

Dans le cas périodique (3.48) il existe une infinitude de points critiques $x_c^{(n)\pm}$, mais seulement deux d'entre eux sont indépendants. Le paramètre ξ peut être obtenu en comparant les phases à deux points critiques séparés d'une période, par exemple $x_c^{(1)-}$ et $x_c^{(0)-}$.

$$\xi = \frac{1}{2\pi} [\phi(x_c^{(1)-}; p_f) - \phi(x_c^{(0)-}; p_f)] \quad (3.57)$$

Puisque les points $x_c^{(1)-}$ et $x_c^{(0)-}$ ne sont pas indépendants il faut que leur différence de phase soit égal à un multiple de 2π . Les paramètres libres γ_∞ et t_∞ peuvent être déterminés respectivement par la somme et la différence des phases aux deux points critiques se trouvant dans la même période, par exemple $x_c^{(0)+}$ et $x_c^{(0)-}$

$$\begin{aligned} \gamma_\infty &= \frac{1}{2} [\phi(x_c^{(0)+}; p_f) + \phi(x_c^{(0)-}; p_f)] \\ t_\infty \sqrt{1 - \left(\frac{\xi}{t_\infty}\right)^2} + \xi \arccos\left(-\frac{\xi}{t_\infty}\right) &= \frac{1}{2} [\phi(x_c^{(0)+}; p_f) - \phi(x_c^{(0)-}; p_f)] \end{aligned} \quad (3.58)$$

La dernière équation est une expression implicite pour t_∞ .

Notons que les phases aux points critiques $\phi(x_c^{(i)}; p_f)$ sont proportionnelles aux actions généralisées $\bar{S}_{\bar{\Gamma}}(p_f)$ le long des trajectoires racines $\bar{\Gamma}$ (voir l'équation (3.10)). Les paramètres libres $\{t, \gamma\}$ sont donc entièrement déterminés par ces actions généralisées.

La même procédure que celle présentée ci-dessus doit être suivie pour trouver les paramètres libres $\{t, \gamma\}$ correspondant aux points critiques complexes.

Étant donnés les valeurs des paramètres libres $\{t, \gamma\}$, on peut simplifier l'intégrale (3.4) en changeant la variable d'intégration de x_f à u

$$\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i) = \frac{e^{i\gamma}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int du \bar{A}(x_f, t_f; p_i, t_i) \frac{dx_f}{du} e^{if(u;t)} \quad (3.59)$$

Jusqu'ici aucune approximation n'a été faite.

Détermination de l'amplitude

On introduit maintenant une approximation en choisissant une forme approchée pour l'amplitude de l'intégrand de (3.59). En supposant que cette amplitude présente la même

symétrie que la phase $\phi(x_f; p_f)$ on utilise l'approximation

$$\bar{A}(x_f, t_f; p_i, t_i) \frac{dx_f}{du} \approx a(u, t) \quad (3.60)$$

où on pose

$$a(u, t) = a_0 + \sum_{j=1}^r a_j \frac{\partial}{\partial t_j} f(u, t), \quad (3.61)$$

les coefficients $\{a_0, \dots, a_r\}$ étant des paramètres à déterminer. J'expliquerai dans la suite pourquoi la forme (3.61) est convenable.

Puisque l'intégrale (3.59) est dominée par les points critiques $u_c^{(i)}$ de la phase $f(u, t)$, il est important que l'approximation (3.60) soit bonne en ces points. On choisit donc les paramètres $\{a_0, \dots, a_r\}$ pour que la fonction $a(u, t)$ soit exactement égale à l'amplitude $\bar{A} dx_f/du$ aux points critiques

$$a(u_c^{(i)}, t) = \bar{A}(x_c^{(i)}, t_f; p_i, t_i) \frac{dx_f}{du} \Big|_{x=x_c^{(i)}} \equiv \mathcal{A}^{(i)} \quad (3.62)$$

On a introduit ici la notation $\mathcal{A}^{(i)}$ pour les valeurs de $\bar{A} dx_f/du$ aux points critiques. Les équations (3.62) fournissent $r+1$ conditions avec lesquelles on peut obtenir les $r+1$ paramètres libres $\{a_0, \dots, a_r\}$.

Considérons le cas trivial (3.44) où on traite un seul point critique isolé. L'approximation (3.61) se réduit alors à une constante

$$a_1(u) = a_{0,I}. \quad (3.63)$$

En utilisant l'équation (3.62) on trouve que cette constante est égale à l'amplitude \mathcal{A} au point critique.

$$a_{0,I} = \mathcal{A}_I \quad (3.64)$$

Dans le cas (3.46) où on traite deux points critiques simultanément, l'approximation (3.61) se réduit à une fonction linéaire

$$a_{II}(u, t) = a_{0,II} + a_{1,II}u. \quad (3.65)$$

En insérant les positions des points critiques (3.47) dans l'équation (3.62), on trouve que $a_{0,II}$ est proportionnelle à la somme des amplitudes \mathcal{A}_{II}^{\pm} calculées aux deux points critiques x_c^{\pm} , et $a_{1,II}$ est proportionnelle à leur différence

$$\begin{aligned} a_{0,II} &= \frac{1}{2} [\mathcal{A}_{II}^+ + \mathcal{A}_{II}^-] \\ a_{1,II} &= \frac{1}{2} \left(\frac{3}{-t_{II}} \right)^{1/2} [\mathcal{A}_{II}^+ - \mathcal{A}_{II}^-] \end{aligned} \quad (3.66)$$

La valeur de $a_{1,II}$ s'obtient en utilisant l'expression (3.56) pour t_{II} .

Dans le cas d'un système périodique l'amplitude $\bar{A} dx_f/du$ doit elle aussi être périodique. En utilisant l'approximation (3.61) on obtient

$$a_{\infty}(u, t) = a_{0,\infty} + a_{1,\infty} \sin u, \quad (3.67)$$

En dénotant les amplitudes aux points critiques $x_c^{(n)\pm}$ par \mathcal{A}_∞^\pm (indépendants de n) on trouve que les coefficients de (3.67) sont

$$\begin{aligned} a_{0,\infty} &= \frac{1}{2} [\mathcal{A}_\infty^+ + \mathcal{A}_\infty^-] \\ a_{1,\infty} &= \frac{1}{2\sqrt{1 - \left(\frac{\xi}{t_\infty}\right)^2}} [\mathcal{A}_\infty^+ - \mathcal{A}_\infty^-] \end{aligned} \quad (3.68)$$

où t_∞ est déterminé implicitement à partir de l'équation (3.58).

Ayant présenté ces trois exemples simples on va retourner à la question poser ci-dessus concernant le choix de la forme (3.61) de l'amplitude approchée $a(u, \mathbf{t})$. La fonction (3.61) est en fait le terme d'ordre le plus bas d'un développement qui couvre l'espace de toutes les fonctions satisfaisant à la symétrie du système

$$a(u, \mathbf{t}) = \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ a_0^{(k)} + \sum_{j=1}^r a_j^{(k)} \frac{\partial}{\partial t_j} f(u, \mathbf{t}) \right\} [\partial_u f(u, \mathbf{t})]^k, \quad (3.69)$$

La démonstration [30] que (3.69) constitue un ensemble complet de fonctions nécessite des résultats assez subtils de la théorie des catastrophes. Pour cette raison je ne vais pas la présenter ici. Cependant, ayant accepté que (3.69) contient toutes les fonctions possibles $\bar{A} dx_f/du$, la raison pour le choix (3.61) est évidente. En effet, chacun des termes de (3.69) pour $k > 0$ s'annule à tous les points critiques $u_c^{(i)}$, puisque $\partial_u f(u_c^{(i)}, \mathbf{t}) = 0$. Or seuls les points critiques (et leurs voisinages immédiats) contribuent de façon significative à l'intégrale (3.59). Les termes de (3.69) d'ordre plus haut que zéro peuvent donc être négligés.

On peut faire une observation qui justifie d'une autre manière le choix (3.61). Puisque seules les valeurs de $\bar{A} dx_f/du$ aux points critiques contribuent au résultat de façon significative, tout ce qu'on exige du choix de $a(u, \mathbf{t})$ est qu'il reproduit bien ces valeurs aux points critiques. Pour satisfaire à cette exigence il faut que le système d'équations (3.62) soit inversible, c'est-à-dire, il faut qu'on puisse déterminer tous les coefficients $\{a_0, \dots, a_r\}$ à partir des valeurs $\mathcal{A}^{(i)}$. Or il est clair que cette condition est remplie dans les trois exemples considérés ci-dessus, à savoir le point de Morse, le pli et la famille périodique. Qu'elle est satisfaite aussi dans le cas général est démontré dans l'Annexe G.

Considérons maintenant la signification physique de $\mathcal{A}^{(i)}$. Il faut d'abord calculer la dérivée dx_f/du aux points critiques. On l'obtient en différentiant l'équation (3.43) deux fois par rapport à x_f .

$$\partial_{x_f}^2 \phi(x_f; p_f) = \partial_u^2 f(u; \mathbf{t}) \left(\frac{du}{dx} \right)^2 + \partial_u f(u; \mathbf{t}) \frac{d^2 u}{dx^2} \quad (3.70)$$

Le deuxième terme s'annule au point critique $u_c^{(i)}$ puisque $\partial_u f(u_c^{(i)}, \mathbf{t}) = 0$, et on trouve

$$\left. \frac{dx_f}{du} \right|_{x=x_c^{(i)}} = \left[\frac{\partial_{x_f}^2 \phi(x_c^{(i)}; p_f)}{\partial_u^2 f(u_c^{(i)}, \mathbf{t})} \right]^{-1/2} \quad (3.71)$$

En utilisant la relation

$$\bar{A}_{\bar{F}}(p_f, t_f; p_i, t_i) = \bar{A}_{\bar{F}}(x_{\bar{F}}^{\bar{F}}, t_f; p_i, t_i) \left[-i \frac{\partial^2}{\partial x_{\bar{F}}^2} \bar{S}_{\bar{F}}(x_{\bar{F}}^{\bar{F}}, t_f; p_i, t_i) \right]^{-1/2} \quad (3.72)$$

(voir l'équation (3.12)) et le fait que $\partial_{x_f}^2 \phi(x_c^{(i)}; p_f) = \partial_{x_f}^2 \bar{S}(x_{\bar{F}}^{\bar{F}}, t_f; p_i, t_i)$, on trouve que

$$\mathcal{A}^{(i)} = \bar{A}_{\bar{F}}(p_f, t_f; p_i, t_i) \left[-i \partial_u^2 f(u_c^{(i)}, \mathbf{t}) \right]^{1/2}. \quad (3.73)$$

$\mathcal{A}^{(i)}$ est donc proportionnelle à l'amplitude semi-classique $\bar{A}_{\bar{F}}(p_f, t_f; p_i, t_i)$. La constante de proportionnalité $\left[-i \partial_u^2 f(u_c^{(i)}, \mathbf{t}) \right]^{1/2}$ est un nombre qu'on calcule facilement en sachant les valeurs des variables de contrôle \mathbf{t} . On conclut que les paramètres $\{a_0, \dots, a_r\}$ s'obtiennent à partir de l'équation (3.62) en n'utilisant que des quantités classiques du système, à savoir les actions généralisées $\bar{S}_{\bar{F}}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ et les amplitudes semi-classiques $\bar{A}_{\bar{F}}(p_f, t_f; p_i, t_i)$.

Calcul de l'intégrale

En substituant l'approximation (3.60) l'intégrale (3.59) devient

$$\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i) \approx \frac{e^{i\gamma}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int du \left\{ a_0 + \sum_{j=1}^r a_j \frac{\partial}{\partial t_j} f(u, \mathbf{t}) \right\} e^{if(u, \mathbf{t})} \quad (3.74)$$

Les valeurs des variables de contrôle \mathbf{t} (3.54) et des coefficients $\{a_0, \dots, a_r\}$ (3.62) sont déterminées par l'action généralisée $\bar{S}_{\bar{F}}(p_f)$ et l'amplitude semi-classique $\bar{A}_{\bar{F}}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ le long de chaque trajectoire racine de $\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i)$. Etant données ces valeurs on peut calculer l'intégrale (3.74) explicitement. Si on définit

$$I(\mathbf{t}) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int du e^{if(u, \mathbf{t})} \quad (3.75)$$

l'intégrale (3.74) devient

$$\bar{K}(p_f, t_f; p_i, t_i) \approx e^{i\gamma} \left\{ a_0 I(\mathbf{t}) - i \sum_{j=1}^r a_j \frac{\partial}{\partial t_j} I(\mathbf{t}) \right\} \quad (3.76)$$

$I(\mathbf{t})$ sont des intégrales simples qui s'expriment souvent en termes de fonctions standard. Par exemple, pour le pli la phase générique est $f(u; t) = u^3 + tu$, et l'intégrale $I(t)$ est proportionnelle à la fonction d'Airy $\text{Ai}(t/\sqrt[3]{3})$. Si les deux trajectoires racines sont réelles, l'argument t est négatif, et la fonction $\text{Ai}(t/\sqrt[3]{3})$ est oscillatoire. Dans le cas où les deux trajectoires sont des conjugués complexes, t est positif, et la fonction $\text{Ai}(t/\sqrt[3]{3})$ est exponentiellement décroissante. Pour la fonce, la phase générique est $f(u; t_1, t_2) = \pm(u^4 + t_2 u^2 + t_1 u)$, et l'intégrale $I(t_1, t_2)$ est proportionnelle à la fonction de Pearcey [31]. Pour la catastrophe périodique la plus simple la phase générique est $f_{\xi}(u; t) = t \sin u + \xi u$. L'intégrale $I(t)$ est alors proportionnelle à la fonction de Bessel $J_n(-t)$ quand $\xi = n$ est un nombre entier. Quand ξ n'est pas un nombre entier l'intégrale $I(t)$ est nulle. La théorie des catastrophes non seulement classe les différents types de caustiques, mais détermine aussi les fonctions de diffraction (3.75) qui en résultent.

3.3.3 Comparaison de résultats

Dans cette partie on va supposer que le système considéré est périodique, et que la phase $\phi(x_f; p_f)$ contient deux points critiques par période (éventuellement complexes) pour chaque valeur possible de p_f (voir la Figure 3.8). On va comparer les résultats obtenus pour l'intégrale (3.59) en utilisant les trois méthodes discutées ci-dessus. La première méthode est celle de la phase stationnaire, où la fonction de Morse (3.44) est utilisée à chaque point critique séparément (voir la Figure 3.9). La deuxième méthode est d'utiliser le pli (3.46) aux paires de points critiques les plus proches (voir la Figure 3.10). La troisième est d'utiliser la forme périodique (3.48), qui traite tous les points critiques simultanément (voir la Figure 3.11). On verra que les résultats des trois méthodes sont en accord quand tous les points critiques sont isolés les uns des autres. Dans le cas où chaque point critique est proche d'exactly un autre, la méthode de la phase stationnaire n'est pas valable, mais les prédictions des deux autres méthodes sont en accord. Quand tous les points critiques sont proches les uns des autres, seule la méthode d'approximation périodique est valable.

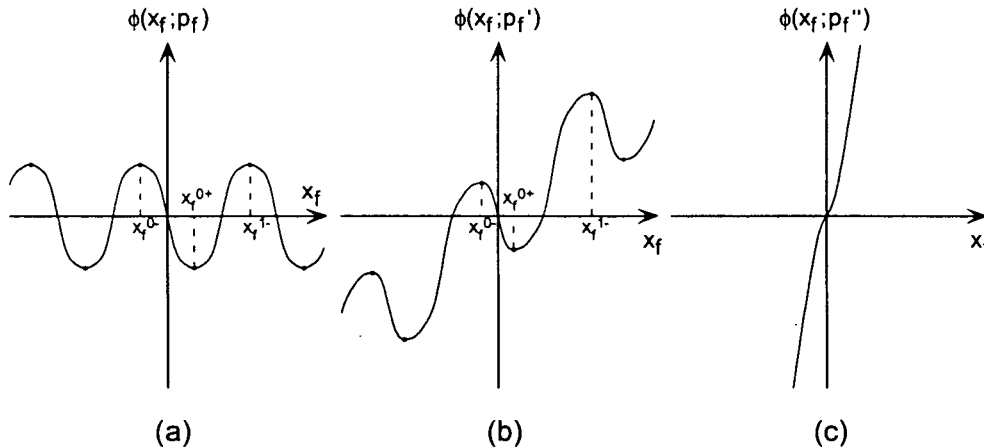


FIG. 3.8 - La phase $\phi(x_f; p_f)$ pour trois valeurs possibles de p_f . Pour p_f dans la région permise (Figures (a) et (b)) il existe deux points critiques réels par période. Pour p_f dans la région interdite (c) il n'y a aucun point critique réel. On suppose cependant qu'il existe deux points critiques complexes par période.

Plutôt que de choisir un système particulier dont on connaît les résultats exacts, on va comparer ici les résultats des trois méthodes ci-dessus pour toutes les valeurs possibles de l'action généralisée $\bar{S}_{\bar{f}}(p_f, t_f; p_i, t_i)$ et l'amplitude semi-classique $\bar{A}_{\bar{f}}(p_f, t_f; p_i, t_i)$. Ceci permet d'étudier les régimes de validité de la méthode de la phase stationnaire et la méthode de l'approximation uniforme à une caustique (en supposant toutefois que la méthode d'approximation uniforme périodique constitue la meilleur approximation des trois).

On n'impose donc aucune contrainte sur la phase $\phi(x_f; p_f) \equiv [\bar{S}(x_f, t_f; p_i, t_i) - p_f x_f] / \hbar$, sauf qu'elle contienne pour chaque valeur possible¹⁰ de p_f deux points critiques par période (ces points étant éventuellement complexes). On considère donc une phase de la forme tracée

10. Notons que la phase $\phi(x_f; p_f)$ (modulo 2π) n'est périodique que pour certaines valeurs de p_f , à savoir celles pour lesquelles $\phi(x_f + 2\pi/k; p_f) - \phi(x_f; p_f) = 2\pi N$ où $2\pi/k$ est la période du système et N est un nombre entier.

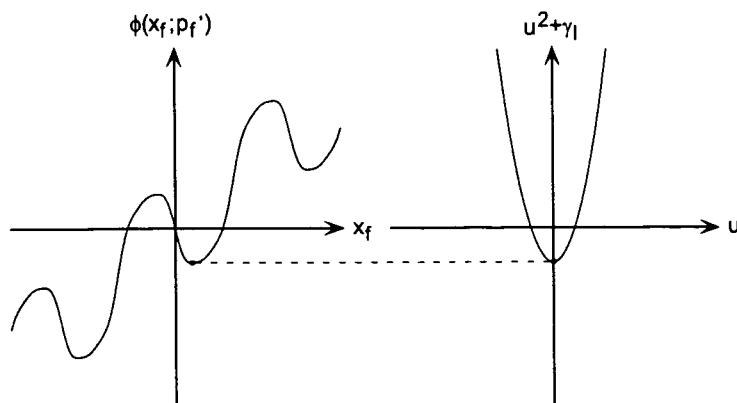


FIG. 3.9 – La phase $\phi(x_f; p_f')$, et sa transformation par un changement de variables en la fonction de Morse. La transformation est valable autour d'un seul point critique.

sur la Figure 3.8(a). Si on diminue p_f les positions des points critiques changent. Au fur et à mesure qu'on approche la caustique $p_f^{(c)}$ chaque paire de points critiques converge, et leur différence de phase se réduit. A la caustique elle-même $p_f = p_f^{(c)}$ un point critique dégénéré se produit par période. Au delà de la caustique les points critiques sont des conjugués complexes, et leur différence de phase est imaginaire.

Pour chaque valeur de p_f on calcule les paramètres libres $\{t, \gamma\}$ selon la méthode décrite dans la dernière partie. Les valeurs des paramètres sont telles que la phase soit la même aux points critiques correspondants de $\phi(x_f; p_f)$ et de $f(u, t)$ (voir les Figures 3.9, 3.10 et 3.11). Pour la fonction de Morse (3.44) le paramètre γ_I est recalculé pour chaque point critique (voir la Figure 3.9). Pour le pli (3.46) les paramètres t_{II} et γ_{II} sont obtenus pour chaque paire de points critiques (voir la Figure 3.10). t_{II} dépend uniquement de la différence de phase $\Delta\phi$ entre les points critiques de la paire, et γ_{II} dépend de leur somme (voir les équations (3.56)). A cause de la périodicité du problème t_{II} est identique pour tous les paires, et γ_{II} varie d'un multiple de 2π . Pour la fonction périodique (3.48) une seule valeur des paramètres t_∞ et γ_∞ applique à tous les points critiques simultanément (voir la Figure 3.11). γ dépend toujours de la somme des phases des deux points critiques les plus proches de zéro. Le paramètre t_∞ dépend de la différence de ces phases $\Delta\phi$ et de la valeur de ξ (voir les équations (3.58)). ξ , rappelons-le, est le changement de la phase après une période, divisé par 2π . Pour que la phase soit périodique (modulo 2π), il faut que ξ vaille un nombre entier.

On va maintenant comparer les valeurs obtenues pour l'intégrale (3.59) en utilisant les trois méthodes. La façon la plus évidente de présenter ces résultats serait peut-être de les tracer en fonction de la différence des phases $\Delta\phi$. Ce n'est pas pourtant la façon la plus commode puisque $\Delta\phi$ devient imaginaire au delà de la caustique. J'ai donc choisi de les tracer en fonction de t_{II} (voir la Figures 3.12). Ce paramètre dépend de $\Delta\phi$ et reste toujours réel. L'intégrale (3.59) dépend des amplitudes semi-classiques $\bar{A}^\pm(p_f, t_f; p_i, t_i)$ associées aux deux trajectoires racines indépendantes. Puisque la dépendance est très simple il n'est pas nécessaire de répéter les mêmes figures pour beaucoup de valeurs différentes. En effet l'intégrale se décompose en deux parties, l'une qui est proportionnelle à la somme des amplitudes $\bar{A}^\pm(p_f, t_f; p_i, t_i)$ (le

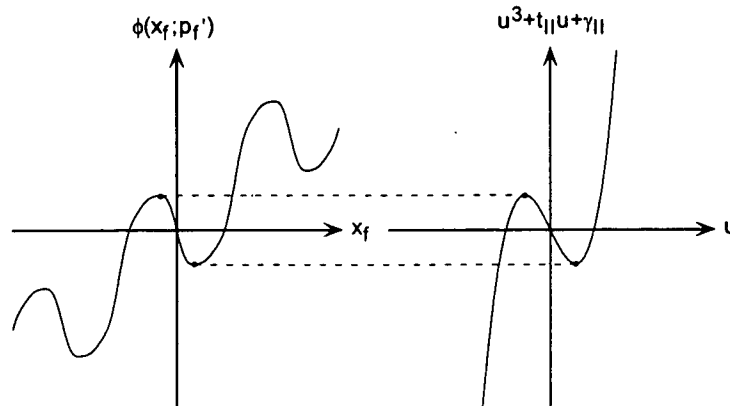


FIG. 3.10 – La phase $\phi(x_f; p_f')$, et sa transformation par un changement de variables en le pli. La transformation est valable autour de deux points critiques simultanément.

terme en a_0 dans l'équation (3.76)) et l'autre qui est proportionnelle à leur différence (le terme en a_1). Sur la Figure 3.12 deux séries de résultats sont tracés en fonction de t_{II} , la première (a) pour laquelle $a_{0,II}$ est constant et $a_{1,II}$ vaut zéro, et la seconde (b) pour laquelle $a_{1,II}$ est constant et $a_{0,II}$ vaut zéro. Notons que les résultats obtenus pour le pli dans ces deux cas sont simplement la fonction d'Airy et sa dérivée respectivement.

On voit que près de la caustique (t_{II} petit) les résultats obtenus par la méthode de la phase stationnaire divergent, alors que ceux obtenus avec la méthode de l'approximation uniforme à une caustique du type pli restent finis. L'approximation uniforme à une caustique ne donne pas de bons résultats dans le régime de petit t_{II} pour $\xi = 0$. Pour des valeurs de ξ plus grandes, les prédictions de la méthode d'approximation uniforme à une caustique sont en bonne accord avec celles de la méthode d'approximation uniforme périodique.

Les Figures 3.13 et 3.14 montrent les résultats obtenus pour les poids des bandes latérales du problème considéré dans l'introduction en utilisant l'approximation uniforme à une caustique et l'approximation uniforme périodique.

3.4 La détermination des indices de Maslov

Le calcul d'un propagateur par la méthode de la phase stationnaire ou de l'approximation uniforme, permet de déterminer les indices de Maslov du propagateur cherché à partir de ceux du propagateur secondaire. On va présenter ici deux exemples de cette technique, et appliquer les résultats au calcul de la condition de quantification d'énergie d'un oscillateur harmonique.

3.4.1 Variation des indices au cours de l'évolution du système

Considérons un système qui commence dans un état propre de position et qui est soumis à un potentiel harmonique. On peut représenter l'état quantique du système par un ensemble de particules classiques qui se trouvent initialement à la même position mais avec des impulsions régulièrement distribuées (voir la Figure 3.15(a)). La fonction d'onde de ce système est

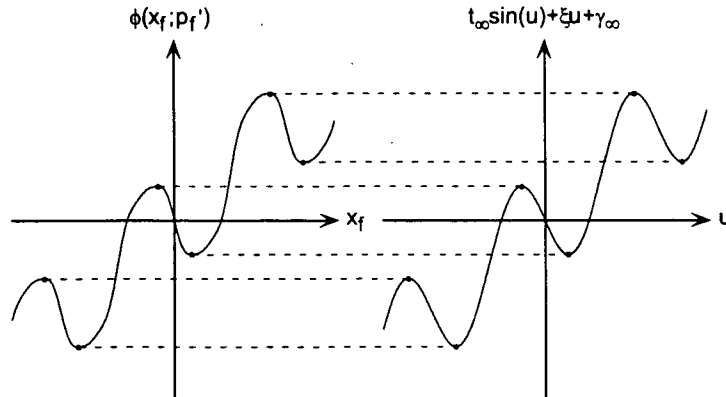


FIG. 3.11 – La phase $\phi(x_f; p_f)$, et sa transformation par un changement de variables en la forme périodique à un harmonique. La transformation est valable pour toute valeur de x_f .

donnée par le propagateur de Feynman $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$. Puisque le potentiel est quadratique le propagateur s'obtient exactement (jusqu'à une phase globale) par la méthode BKW.

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \frac{e^{-i\nu(t_f, t_i)\pi/2} \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \tan[\omega(t_f - t_i)]} \left[x_f^2 - \frac{2x_f x_i}{\cos[\omega(t_f - t_i)]} + x_i^2 \right] \right\}}{(2i\pi\hbar)^{1/2} |\sin[\omega(t_f - t_i)]/m\omega|^{1/2}} \quad (3.77)$$

La phase globale est déterminé par l'indice de Maslov ν , qui est une fonction de temps. Elle change pendant l'évolution chaque fois que l'amplitude du propagateur passe une singularité. La première singularité se produit à l'instant initial $t_f = t_i$, puisque l'amplitude diverge en ce moment à la position x_i . La singularité suivante se produit à l'instant $t_f = t_i + \tau/2$, où $\tau \equiv 2\pi/\omega$ est la période d'oscillation. En ce moment l'amplitude du propagateur diverge au point $-x_i$. Les singularités se répètent toutes les périodes. On peut calculer les indices de Maslov en basculant successivement entre l'espace des positions et l'espace des impulsions.

On exprime donc le propagateur de Feynman $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$ comme une intégrale sur le propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp_i \bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i) e^{-ip_i x_i/\hbar} \quad (3.78)$$

Puisque l'intégrale représente une transformée de Fourier, le propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ s'obtient à partir de $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$ par la transformée de Fourier inverse (2.31). $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ est la fonction d'onde d'un système qui se trouve initialement dans un état propre d'impulsion. Le diagramme espace phase pour un tel système soumis au potentiel harmonique est tracé sur la Figure 3.15(b). On constate que les singularités de $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ se produisent aux instants $t_f = t_i + (2n + 1)\tau/4$, où n est un nombre entier.

Comme c'était le cas pour le propagateur de Feynman, $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ s'obtient exacte-

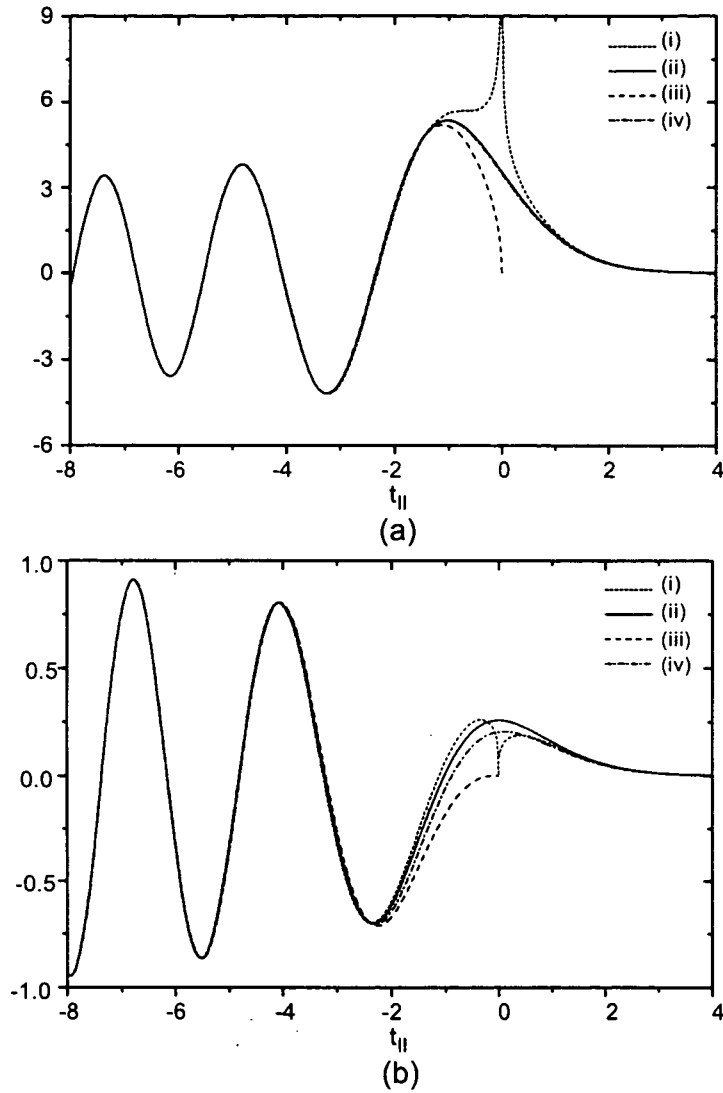


FIG. 3.12 - Les valeurs obtenus pour l'intégrale (3.74) en fonction de $t_{||}$. La figure (a) est calculée avec $a_{0,||} = \text{constante}$ et $a_{1,||} = 0$, et la figure (b) avec $a_{1,||} = \text{constante}$ et $a_{0,||} = 0$. Les figures comparent les résultats obtenus avec la fonction de Morse (i), l'approximation uniforme à une caustique du type pli (ii), et l'approximation uniforme périodique pour $\xi = 0$ (iii) et $\xi = 1$ (iv).

ment (jusqu'à une phase globale) par la méthode BKW.

$$\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i) = \frac{e^{-i\bar{\nu}(t_f, t_i)\pi/2} \exp \left\{ -\frac{i \tan[\omega(t_f - t_i)]}{2\hbar} \left[m\omega x_f^2 - \frac{2p_i x_f}{\sin[\omega(t_f - t_i)]} + \frac{p_i^2}{m\omega} \right] \right\}}{(2\pi\hbar)^{1/2} |\cos[\omega(t_f - t_i)]|^{1/2}} \quad (3.79)$$

Il reste à trouver les indices de Maslov $\bar{\nu}$. A l'instant initiale $t_f = t_i$ le propagateur prend une valeur bien définie: c'est une onde plane $\langle x_f | p_i \rangle = \exp(ip_i x_f / \hbar) / \sqrt{2\pi\hbar}$ dont la phase globale est connue. En sachant la phase globale, on trouve que l'indice de Maslov $\bar{\nu}(t_f = t_i, t_i)$

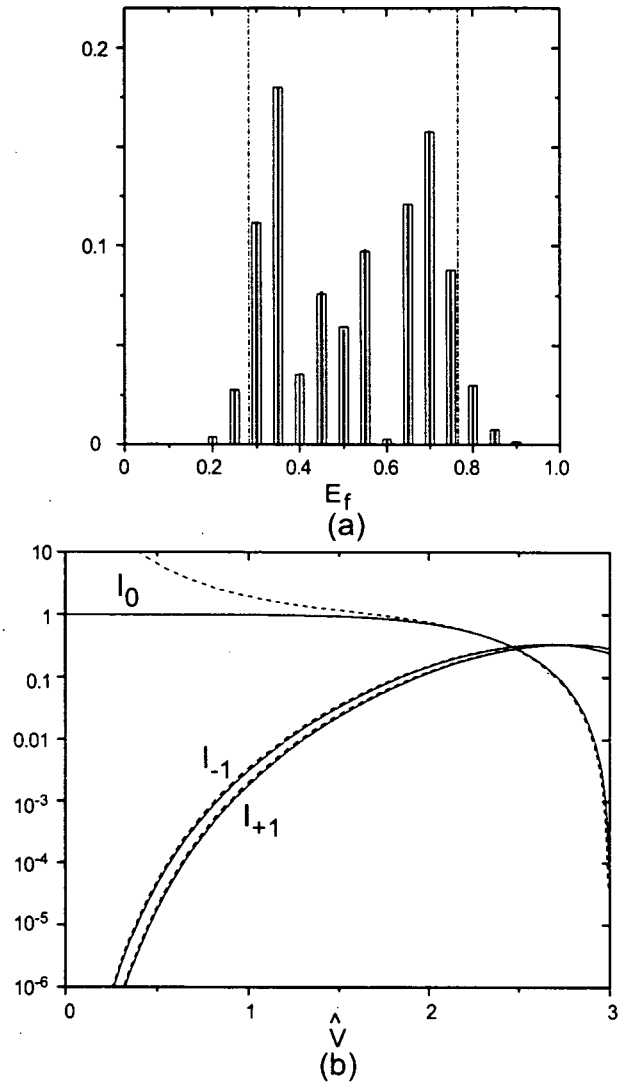


FIG. 3.13 – Comparaison entre l'approximation uniforme à une caustique du type pli et les résultats exacts, pour les paramètres utilisés dans la figure 1.3.

vaut zéro. La valeur de $\bar{\nu}$ reste constante jusqu'à la première singularité du propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$, qui se produit à l'instant $t_f = t_i + \tau/4$. Pendant l'intervalle $]t_i, t_i + \tau/4[$ on peut utiliser la valeur de $\bar{\nu}$ pour calculer celle de ν , l'indice de Maslov du propagateur de Feynman, en insérant l'expression exacte de $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$ dans la transformée de Fourier (3.78). On trouve que ν aussi vaut zéro pendant cet intervalle. Or ν reste constant jusqu'à l'instant $t_f = t_i + \tau/2$, c'est-à-dire après la première singularité de $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$. En utilisant la transformée de Fourier inverse (2.31) on peut calculer de cette façon la nouvelle valeur de $\bar{\nu}$. Puisque les singularités de $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$ se produisent toujours à des instants différents que celles de $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$, on obtient successivement l'indice de Maslov actuelle de l'un à partir de celle de l'autre. Les résultats sont les suivants. Pour le propagateur de Feynman

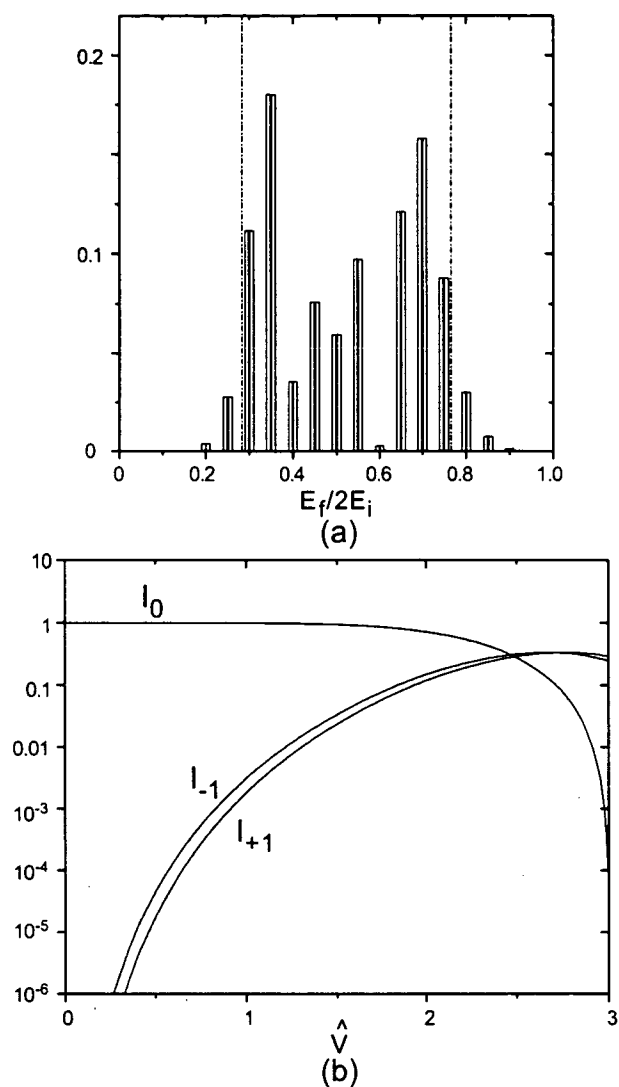


FIG. 3.14 – Comparaison entre l'approximation uniforme périodique et les résultats exacts, pour les paramètres utilisés dans la figure 1.3. L'accord est parfait sur toute la gamme de paramètres.

l'indice de Maslov (modulo 4) varie comme

$$\nu(t_f, t_i) = \begin{cases} 0 & \text{pour } 0 < \omega(t_f - t_i) - 4\pi n \leq \pi \\ 1 & \text{pour } \pi < \omega(t_f - t_i) - 4\pi n \leq 2\pi \\ 2 & \text{pour } 2\pi < \omega(t_f - t_i) - 4\pi n \leq 3\pi \\ 3 & \text{pour } 3\pi < \omega(t_f - t_i) - 4\pi n \leq 4\pi \end{cases} \quad (3.80)$$

L'indice de Maslov $\bar{\nu}$, du propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$, suit un cycle qui est décalé de $\pi/2$ par

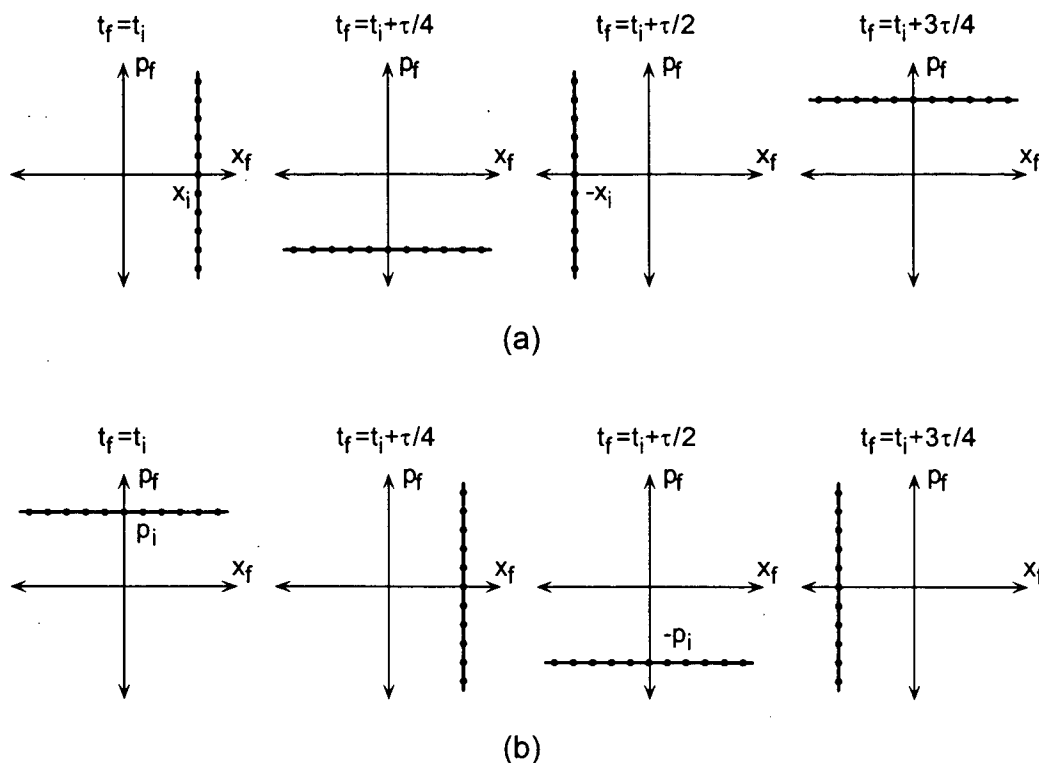


FIG. 3.15 – Les diagrammes espace phase pour un système dans un potentiel harmonique. Les figures (a) et (b) montrent l'évolution d'un système initialement dans un état propre de position et d'impulsion respectivement.

rapport à ν

$$\bar{\nu}(t_f, t_i) = \begin{cases} 0 & \text{pour } -\frac{\pi}{2} < \omega(t_f - t_i) - 4\pi n \leq \frac{\pi}{2} \\ 1 & \text{pour } \frac{\pi}{2} < \omega(t_f - t_i) - 4\pi n \leq \frac{3\pi}{2} \\ 2 & \text{pour } \frac{3\pi}{2} < \omega(t_f - t_i) - 4\pi n \leq \frac{5\pi}{2} \\ 3 & \text{pour } \frac{5\pi}{2} < \omega(t_f - t_i) - 4\pi n \leq \frac{7\pi}{2} \end{cases} \quad (3.81)$$

On voit que les indices de Maslov ν et $\bar{\nu}$ augmentent d'unité en passant chaque singularité¹¹. Chaque augmentation correspond à un changement de la phase du propagateur de $-\pi/2$. Notons que la valeur des propagateurs varie avec une période de 2τ , c'est-à-dire deux fois la période d'oscillation. En particulier, après une période d'oscillation τ la valeur des propagateurs a changé de signe

$$\begin{aligned} K(x_f, t_f; x_i, t_i) &= -K(x_f, t_f + \tau; x_i, t_i) \\ \bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i) &= -\bar{K}(x_f, t_f + \tau; p_i, t_i) \end{aligned} \quad (3.82)$$

Puisque le potentiel est indépendant du temps, les propagateurs ne dépendent que de la

11. Le fait que l'indice de Maslov du propagateur de Feynman augmente d'unité à chaque singularité est un résultat général qui s'applique non seulement à l'oscillateur harmonique. Il est démontré par le théorème de Morse [13]. Des théorèmes analogues existent pour d'autres propagateurs [15].

différence $t_f - t_i$, et les équations (3.82) s'expriment également comme

$$\begin{aligned} K(x_f, t_f; x_i, t_i) &= -K(x_f, t_f; x_i, t_i - \tau) \\ \bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i) &= -\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i - \tau) \end{aligned} \quad (3.83)$$

On peut utiliser la première de ces relations pour calculer la condition de quantification d'énergie d'un oscillateur harmonique.

Considérons le propagateur $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$, défini par (2.42). Pour les valeurs d'énergie auxquelles le propagateur $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$ est non-nul, il représente un état propre d'énergie du système. En utilisant la première des équations (3.83) on peut l'exprimer comme

$$\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_n \left(-e^{-iE\tau/\hbar} \right)^n \int_0^\tau dt_i K(x_f, t_f; x_i, t_i) e^{-iEt_i/\hbar} \quad (3.84)$$

Le propagateur s'annulera par interférence destructive à toutes les énergies excepté celles pour lesquelles

$$e^{-iE\tau/\hbar} = -1 \quad (3.85)$$

Les énergies qui satisfont à cette condition sont

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (3.86)$$

où n est un nombre entier. Ce sont les valeurs propres d'énergie d'un oscillateur harmonique.

3.4.2 Obtention des indices à partir du diagramme espace phase

L'état quantique décrit par la fonction d'onde $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$ (2.42) peut être représenté par un ensemble de particules classiques d'énergie identique E qui passent la position initiale x_i à des instants uniformément distribués. Dans un potentiel harmonique le diagramme espace phase de cet ensemble est une ellipse (voir la Figure 3.16). Pour calculer la fonction d'onde il faut considérer la distribution de l'ensemble en position. On voit qu'il existe deux caustiques en position, qui se trouvent aux points de rebroussement classiques du système. Si les caustiques sont bien séparées l'une de l'autre, on peut traiter chacune indépendamment comme un pli. En exprimant la fonction d'onde $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$ comme une intégrale sur la distribution d'impulsion $\tilde{K}(p_f, t_f; x_i, E)$, et en appliquant la méthode d'approximation uniforme, on trouve que de chaque côté du centre du potentiel $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$ ressemble à une fonction d'Airy, qui décroît exponentiellement au delà de la caustique, et qui oscille dans la région classiquement permise.

$$\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E) \approx \begin{cases} \alpha \text{Ai}(-u) & \text{pour } x_f < 0 \\ \bar{\alpha} \text{Ai}(+\bar{u}) & \text{pour } x_f > 0 \end{cases} \quad (3.87)$$

Les paramètres u et \bar{u} sont des difféomorphismes de x_f tels que $du/dx_f > 0$ et $d\bar{u}/dx_f > 0$. Le paramètre u vaut zéro au point de rebroussement de gauche, et \bar{u} s'annule au point de rebroussement de droite. Les amplitudes α et $\bar{\alpha}$ dépendent de x_f .

Puisque tout ce qu'on cherche ici sont les indices de Maslov, il n'est pas nécessaire de calculer les valeurs de u , \bar{u} , α et $\bar{\alpha}$ explicitement en fonction de x_f . Un exemple d'un tel

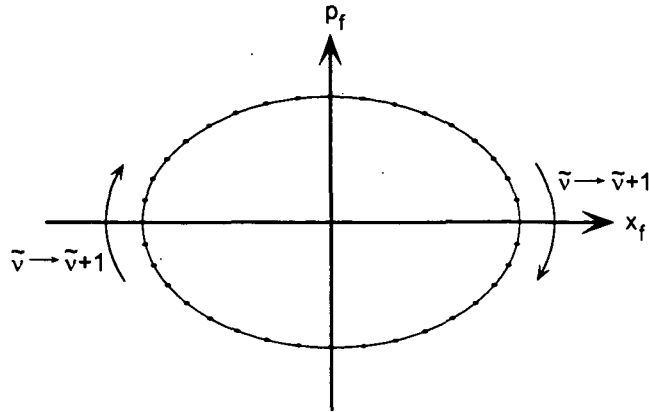


FIG. 3.16 – Le diagramme espace phase pour un oscillateur harmonique. L'indice de Maslov $\tilde{\nu}$ augmente d'une unité en traversant la caustique de gauche de la branche de bas vers la branche de haut. En retournant à la branche de bas, en passant par la caustique de droite, l'indice augmente d'encore une unité.

calcul est présenté dans l'article qui suit. Il est facile de démontrer que la solution se réduit à l'approximation de la phase stationnaire loin de la caustique. La démonstration fait appel à l'approximation asymptotique de la fonction d'Airy

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \text{Ai}(-x) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \sqrt[4]{x}} \sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.88)$$

En insérant cette approximation dans l'équation (3.87), et en décomposant la fonction sinus en deux fonctions exponentielles on trouve que

$$\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E) \approx \frac{\alpha}{2} \left[e^{-i\pi/4} e^{i\frac{2}{3}u^{3/2}} + e^{i\pi/4} e^{-i\frac{2}{3}u^{3/2}} \right] \quad \text{pour } x_f < 0 \quad (3.89)$$

Les deux termes correspondent aux deux branches de la solution BKW. En différentiant les exposants des deux termes par rapport à x_f on voit que le premier terme correspond à la branche d'impulsion positive, et le deuxième terme à la branche d'impulsion négative. La phase devant chaque terme détermine l'indice de Maslov $\tilde{\nu}$ de la branche. Puisqu'on ne connaît pas la phase globale, qui est contenue dans le facteur α , on ne peut obtenir que la différence des indices. On trouve que l'indice de Maslov augmente d'unité en traversant la caustique de gauche de la branche de bas vers la branche de haut (voir la Figure 3.16).

En répétant le calcul pour la caustique de droite on trouve que l'indice de Maslov augmente encore d'unité en retournant à la branche de bas. Dans un cycle complet, l'indice augmente donc de deux, ce qui correspond à un changement de phase de π . On peut utiliser ce résultat pour obtenir la condition de quantification de l'oscillateur harmonique.

L'approximation BKW (2.46) exprime le propagateur $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$ comme une somme de contributions venant de toutes les trajectoires racines $\tilde{\Gamma}$. Ce sont les trajectoires qui commencent à la position x_i avec une énergie E , et qui terminent à la position x_f à l'instant t_f . Chaque trajectoire est caractérisé par le temps $t_i^{\tilde{\Gamma}}$ auquel elle part de la position initiale. Dans le cas de l'oscillateur harmonique il y a un nombre infini de trajectoires racines. En effet, la particule peut aller directement de la position initiale à la position finale, ou elle peut commencer n périodes plus tôt et effectuer n oscillations dans le potentiel avant d'arriver à la

position finale. Les contributions des trajectoires racines n'interfèrent de façon constructive que si les trajectoires successives $\tilde{\Gamma}_k$ et $\tilde{\Gamma}_{k+1}$ satisfont à la condition suivante

$$\left[\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}_{k+1}}(x_f, t_f; x_i, E) - \frac{\hbar\pi}{2} \tilde{\nu}_{\tilde{\Gamma}_{k+1}} \right] - \left[\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}_k}(x_f, t_f; x_i, E) - \frac{\hbar\pi}{2} \tilde{\nu}_{\tilde{\Gamma}_k} \right] = 2n\pi\hbar, \quad (3.90)$$

où n est un nombre entier. Puisque l'indice de Maslov change de deux dans un cycle

$$\tilde{\nu}_{\tilde{\Gamma}_{k+1}} - \tilde{\nu}_{\tilde{\Gamma}_k} = 2 \quad (3.91)$$

la condition (3.90) s'exprime comme

$$\Delta\tilde{S}(E) \equiv \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}_{k+1}}(x_f, t_f; x_i, E) - \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}_k}(x_f, t_f; x_i, E) = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.92)$$

Il reste à calculer la différence $\Delta\tilde{S}(E)$ en fonction de l'énergie E . Dans un potentiel indépendant du temps l'expression (2.47) pour l'action généralisée se réduit à

$$\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E) = -Et_f + \int_{t_i^{\tilde{\Gamma}}}^{t_f} dt \frac{p(t)^2}{m}. \quad (3.93)$$

En changeant l'instant initiale par une période τ l'action généralisée change par

$$\Delta\tilde{S}(E) = - \int_{t_i^{\tilde{\Gamma}}}^{t_i^{\tilde{\Gamma}}+\tau} dt \frac{p(t)^2}{m} \quad (3.94)$$

En insérant la valeur de l'impulsion en fonction de temps

$$p(t) = \pm\sqrt{2mE} \cos \left[\omega \left(t - t_i^{\tilde{\Gamma}} \right) + \theta \right] \quad (3.95)$$

où θ est une phase qui dépend de la position initiale, on trouve que l'intégrale (3.94) est égale à

$$\Delta\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(E) = -E\tau \quad (3.96)$$

Pour que $\Delta\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(E)$ satisfasse à la condition (3.92) il faut que l'énergie E prenne une des valeurs données par l'équation (3.86). On retrouve donc la condition de quantification de l'oscillateur harmonique.

Conclusion

Dans ce chapitre j'ai présenté la technique d'approximation uniforme, et je l'ai appliquée au calcul de certains propagateurs. L'approximation uniforme fournit une méthode semiclassique pour obtenir avec haute précision la valeur d'un propagateur, aussi bien dans le voisinage d'une caustique que dans les régions loins des caustiques. L'expression obtenue pour le propagateur ne dépend que de quantités classiques, à savoir l'action le long des trajectoires classiques, et la densité de chemins. La forme exacte de l'expression dépend de la topologie de la caustique, en particulier de sa symétrie. Pourtant, pour des caustiques de topologie simple, elle s'exprime en termes de fonctions standard, telles que la fonction d'Airy et les fonctions de Bessel.

Conclusion générale

Dans cette thèse j'ai comparé plusieurs techniques pour analyser un problème de diffusion à une dimension dépendant du temps, mettant en exergue des méthodes semi-classiques. Ces méthodes ne nécessitent qu'une connaissance des propriétés des trajectoires classiques du système, et donc fournissent une meilleure compréhension physique que ce qui est possible par une simulation numérique quantique exacte. Elles présentent toutefois des effets purement quantiques tels que l'interférence et l'effet tunnel, ce dernier par moyen de trajectoires complexes.

L'approximation du réseau de phase mince est une méthode semi-classique perturbative, où on remplace la vraie trajectoire du système par la trajectoire non-perturbée. Pour un problème tel qu'on a considéré ici, cette approximation réduit le temps de calcul énormément. En effet, pour obtenir la trajectoire exacte correspondant à un propagateur donné, il faut refaire le calcul chaque fois qu'on change les paramètres du propagateur. Or, les trajectoires non-perturbées s'obtiennent les unes des autres par un simple déplacement. La méthode du réseau de phase mince s'est avérée un outil très puissant pour calculer des résultats préliminaires, puisque, même hors de son régime de validité, où elle n'est pas très précise, elle fournit en général le bon ordre de grandeur.

Le calcul des trajectoires classiques exactes, associée à l'utilisation de l'approximation uniforme, permet d'obtenir des résultats d'une précision très haute. Cette méthode n'utilise pas de techniques perturbatives, et en principe reste valable dans tous les régimes. En pratique elle devient plus difficile à appliquer lorsque la topologie du diagramme espace-phase est très compliquée. L'application de méthodes semi-classiques dans de tels cas vaut pourtant des recherches plus détaillées, parce que elles fournissent des informations concernant la transition du chaos quantique au chaos classique.

Annexe A

Normalisation des états propres d'énergie

On considère un potentiel qui est localisé spatialement dans une région $(-a, a)$, et on définit des états propres d'énergie positive $|\psi_p\rangle$ de la façon suivante. Pour p positif, l'état $|\psi_p\rangle$ représente une particule venant de la gauche avec l'énergie $E_p = p^2/2m$. Hors du potentiel sa fonction d'onde s'écrit comme

$$\psi_{p>0}(x) = \begin{cases} A_+(k)e^{ikx} + R_+(k)e^{-ikx}, & x \leq -a \\ T_+(k)e^{ikx}, & x \geq a \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

où $k \equiv p/\hbar$. $A_+(k)$ est l'amplitude de l'onde plane incidente, et les coefficients $T_+(k)$ et $R_+(k)$ sont les amplitudes de transmission et de réflexion respectivement. Les ondes incidente, transmise et réfléchie de la fonction d'onde $\psi_{p>0}(x)$ sont indiquées de façon schématique sur la Figure A.1. Dans le cas $p = 0$ on choisit $A_+(0) = T_+(0)$ et $R_+(0) = 0$.

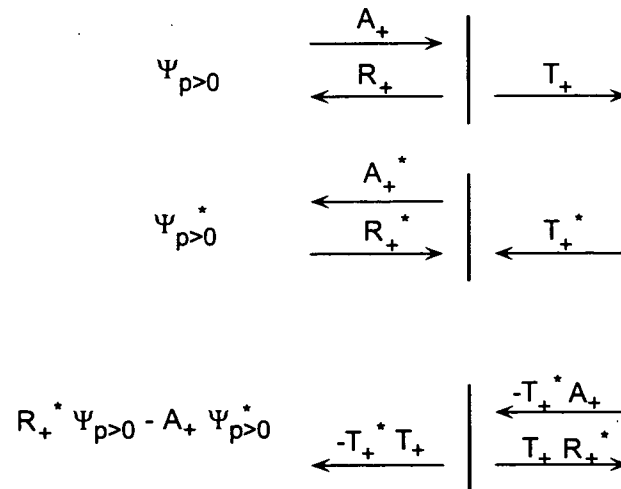


FIG. A.1 – Diagrammes schématiques de la fonction d'onde $\psi_{p>0}(x)$, de son conjugué complexe $\psi_{p>0}^*(x)$, et de la somme $R_+^*(k)\psi_{p>0}(x) - A_+(k)\psi_{p>0}^*(x)$.

Pour p négatif l'état $|\psi_p\rangle$ représente une particule venant de la droite avec la même énergie

$$E_p = p^2/2m$$

$$\psi_{p<0}(x) = \begin{cases} A_-(k)e^{-ikx} + R_-(k)e^{ikx}, & x \geq a \\ T_-(k)e^{-ikx}, & x \leq -a \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

où $k \equiv |p|/\hbar$. Le but de cette Annexe est de montrer que les états $|\psi_p\rangle$ sont orthogonaux, et de les normaliser, c'est-à-dire, de calculer les amplitudes incidentes $A_+(k)$ and $A_-(k)$.

Il faut alors évaluer le produit scalaire $\langle\psi_{p_1}|\psi_{p_2}\rangle$

$$\langle\psi_{p_1}|\psi_{p_2}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{p_1}^*(x)\psi_{p_2}(x). \quad (\text{A.3})$$

On divise le domaine d'intégration en trois parties, et effectue l'intégral sur chacune des parties séparément

$$\begin{aligned} \langle\psi_{p_1}|\psi_{p_2}\rangle &= \int_{-\infty}^{-a} dx \psi_{p_1}^*(x)\psi_{p_2}(x) + \int_{-a}^a dx \psi_{p_1}^*(x)\psi_{p_2}(x) + \int_a^{\infty} dx \psi_{p_1}^*(x)\psi_{p_2}(x) \\ &\equiv I_1 + I_2 + I_3, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

où I_1 , I_2 et I_3 sont les première, deuxième et troisième intégrales respectivement.

Considérons le cas où p_1 et p_2 ont le même signe $p_1 p_2 \geq 0$. On suppose que p_1 et p_2 sont tous les deux positives ou nulles. Le calcul est analogue si elles sont négatives. En posant $k_1 \equiv p_1/\hbar$ et $k_2 \equiv p_2/\hbar$, les intégrales I_1 et I_3 s'écrivent comme

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{-\infty}^{-a} dx \left[A_+(k_1)e^{ik_1x} + R_+(k_1)e^{-ik_1x} \right]^* \left[A_+(k_2)e^{ik_2x} + R_+(k_2)e^{-ik_2x} \right] \\ I_3 &= \int_a^{\infty} dx \left[T_+(k_1)e^{ik_1x} \right]^* T_+(k_2)e^{ik_2x}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

En utilisant le fait que

$$\int_a^{\infty} dx e^{ikx} = \pi\delta(k) + \frac{i}{k}e^{ika}, \quad (\text{A.6})$$

on obtient le résultat suivant pour I_1

$$\begin{aligned} I_1 &= A_+^*(k_1)A_+(k_2) \left[\pi\delta(k_2 - k_1) - \frac{i}{k_2 - k_1}e^{-i(k_2 - k_1)a} \right] + \\ &R_+^*(k_1)R_+(k_2) \left[\pi\delta(k_2 - k_1) + \frac{i}{k_2 - k_1}e^{i(k_2 - k_1)a} \right] + \\ &R_+^*(k_1)A_+(k_2) \left[\pi\delta(k_2 + k_1) - \frac{i}{k_2 + k_1}e^{-i(k_2 + k_1)a} \right] + \\ &A_+^*(k_1)R_+(k_2) \left[\pi\delta(k_2 + k_1) + \frac{i}{k_2 + k_1}e^{i(k_2 + k_1)a} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

De même, l'intégrale I_3 vaut

$$I_3 = T_+^*(k_1)T_+(k_2) \left[\pi\delta(k_2 - k_1) + \frac{i}{k_2 - k_1}e^{i(k_2 - k_1)a} \right]. \quad (\text{A.8})$$

L'intégrale I_2 s'obtient de la façon suivante. Les fonctions d'onde $\psi_{p_1}(x)$ et $\psi_{p_2}(x)$ satisfont à l'équation de Schrödinger indépendante du temps, avec les valeurs propres d'énergie $E_1 = p_1^2/2m$ et $E_2 = p_2^2/2m$ respectivement

$$-\psi_{p_j}''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [E_j - V(x)] \psi_{p_j}(x), \quad j = 1, 2. \quad (\text{A.9})$$

En définissant une fonction

$$\kappa_j^2(x) \equiv \frac{2m}{\hbar^2} [E_j - V(x)], \quad j = 1, 2 \quad (\text{A.10})$$

on peut exprimer l'équation de Schrödinger (A.9) comme

$$-\psi_{p_j}''(x) = \kappa_j^2(x) \psi_{p_j}(x), \quad j = 1, 2. \quad (\text{A.11})$$

Notons que

$$\kappa_2^2(x) - \kappa_1^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [E_2 - E_1] \equiv \Delta \quad (\text{A.12})$$

où Δ est une constante (indépendante de x). En utilisant cette relation, l'intégrale I_2 s'écrit comme

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_{-a}^a dx \psi_1^*(x) \psi_2(x) \\ &= \frac{1}{\Delta} \int_{-a}^a dx [\kappa_2^2(x) - \kappa_1^2(x)] \psi_1^*(x) \psi_2(x) \\ &= -\frac{1}{\Delta} \int_{-a}^a dx [\psi_1^*(x) \psi_2''(x) - \psi_1^{*''}(x) \psi_2(x)], \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

qui se résout par parties

$$I_2 = -\frac{1}{\Delta} [\psi_1^*(x) \psi_2'(x) - \psi_1^{*'}(x) \psi_2(x)] \Big|_{-a}^a + \frac{1}{\Delta} \int_{-a}^a dx [\psi_1^{*'}(x) \psi_2'(x) - \psi_1^{*''}(x) \psi_2(x)]. \quad (\text{A.14})$$

Puisque l'intégrand du deuxième terme est nul, on trouve

$$I_2 = -\frac{1}{\Delta} [\psi_1^*(x) \psi_2'(x) - \psi_1^{*'}(x) \psi_2(x)] \Big|_{-a}^a, \quad (\text{A.15})$$

qu'on peut évaluer en utilisant les expressions (A.1). A la position $x = a$ la fonction d'onde et sa dérivée valent

$$\left. \begin{aligned} \psi_{p_j}(a) &= T_+(k_j) e^{ik_j a} \\ \psi'_{p_j}(a) &= ik_j T_+(k_j) e^{ik_j a} \end{aligned} \right\}, \quad j = 1, 2. \quad (\text{A.16})$$

De même à la position $x = -a$ elles valent

$$\left. \begin{aligned} \psi_{p_j}(-a) &= A_+(k_j) e^{-ik_j a} + R_+(k_j) e^{ik_j a} \\ \psi'_{p_j}(-a) &= ik_j [A_+(k_j) e^{-ik_j a} - R_+(k_j) e^{ik_j a}] \end{aligned} \right\}, \quad j = 1, 2. \quad (\text{A.17})$$

En insérant les équations (A.16) et (A.17) dans (A.15), et en substituant la valeur

$$\Delta = k_2^2 - k_1^2, \quad (\text{A.18})$$

on obtient

$$\begin{aligned}
I_2 = & A_+^*(k_1)A_+(k_2)\frac{i}{k_2-k_1}e^{-i(k_2-k_1)a} - R_+^*(k_1)A_+(k_2)\frac{i}{k_2-k_1}e^{i(k_2-k_1)a} + \\
& R_+^*(k_1)A_+(k_2)\frac{i}{k_2+k_1}e^{-i(k_2+k_1)a} - A_+^*(k_1)R_+(k_2)\frac{i}{k_2+k_1}e^{i(k_2+k_1)a} - \\
& T_+^*(k_1)T_+(k_2)\frac{i}{k_2-k_1}e^{i(k_2-k_1)a}.
\end{aligned} \tag{A.19}$$

La somme des intégrales I_1 (A.7), I_2 (A.19) et I_3 (A.8) vaut

$$\begin{aligned}
I_1 + I_2 + I_3 = & [A_+^*(k_1)A_+(k_2) + R_+^*(k_1)R_+(k_2) + T_+^*(k_1)T_+(k_2)] \pi\delta(k_2 - k_1) + \\
& [R_+^*(k_1)A_+(k_2) + A_+^*(k_1)R_+(k_2)] \pi\delta(k_2 + k_1).
\end{aligned} \tag{A.20}$$

Notons que le deuxième terme est nul, puisque $k_1 \geq 0$ et $k_2 \geq 0$. En effet si $k_1 = k_2 = 0$ les coefficients de réflexion sont nuls $R_+(0) = 0$, et sinon la fonction delta $\delta(k_2 + k_1)$ s'annule. On calcule le premier terme en utilisant la condition de conservation du flux

$$|A_+(k_1)|^2 = |R_+(k_1)|^2 + |T_+(k_1)|^2, \tag{A.21}$$

et en substituant $\delta(k_2 - k_1) = \hbar\delta(p_2 - p_1)$, ce qui donne

$$\langle \psi_{p_1 \geq 0} | \psi_{p_2 \geq 0} \rangle = |A_+(k_1)|^2 2\pi\hbar \delta(p_2 - p_1). \tag{A.22}$$

Pour que les états propres $|\psi_p\rangle$ du hamiltonien satisfassent à la même condition d'orthonormalité que les états propres d'impulsion $|p\rangle$, il faut les normaliser de façon que

$$|A_+(k)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}. \tag{A.23}$$

Considérons maintenant le cas où p_1 et p_2 ont des signes différents. On choisit $p_1 \geq 0$ et $p_2 < 0$. En calculant le produit scalaire $\langle \psi_{p_1 \geq 0} | \psi_{p_2 < 0} \rangle$ de la même manière qu'au dessus, on trouve

$$\langle \psi_{p_1 \geq 0} | \psi_{p_2 < 0} \rangle = [T_+^*(k_1)R_-(k_2) + R_+^*(k_1)T_-(k_2)] \pi\delta(k_2 - k_1), \tag{A.24}$$

où $k_1 = |p_1|/\hbar$ et $k_2 = |p_2|/\hbar$ comme avant. On peut montrer que le coefficient de la fonction delta vaut zéro pour $k_1 = k_2$. D'abord on exprime les coefficients $A_-(k)$, $T_-(k)$ and $R_-(k)$ en termes des coefficients $A_+(k)$, $T_+(k)$ and $R_+(k)$. Puisque $\psi_p(x)$ est une solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, son conjugué complexe $\psi_p^*(x)$ l'est également. La combinaison linéaire des deux solutions, représentée sur la Figure A.1

$$f(x) = R_+^*(k)\psi_{p>0}(x) - A_+(k)\psi_{p>0}^*(x) \tag{A.25}$$

est elle aussi une solution. Hors du potentiel $f(x)$ est donnée par

$$f(x) = \begin{cases} -T_+^*(k)T_+(k)e^{-ikx}, & x < -a \\ R_+^*(k)T_+(k)e^{ikx} - T_+^*(k)A_+(k)e^{-ikx}, & x > a \end{cases} \tag{A.26}$$

où on a utilisé l'équation de conservation de flux (A.21) pour calculer $f(x)$ dans la région $x < -a$. Notons que $f(x)$ ne contient pas d'onde propageant vers la droite dans cette région. Elle est donc proportionnelle à la solution $\psi_{p < 0}(x)$

$$\begin{aligned} T_-(k) &= -\alpha T_+^*(k) T_+(k) \\ A_-(k) &= -\alpha T_+^*(k) A_+(k) \\ R_-(k) &= \alpha R_+^*(k) T_+(k) \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

où α est la constante de proportionnalité. En insérant ces relations dans l'équation (A.24), on peut évaluer le coefficient de la fonction delta pour $k_2 = k_1$

$$\begin{aligned} T_+^*(k_1) R_-(k_1) + R_+^*(k_1) T_-(k_1) &= T_+^*(k_1) [\alpha R_+^*(k_1) T_+(k_1)] + R_+^*(k_1) [-\alpha T_+^*(k_1) T_+(k_1)] \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

ce qui donne

$$\langle \psi_{p_1 > 0} | \psi_{p_2 < 0} \rangle = 0. \quad (\text{A.29})$$

En utilisant les résultats (A.22) et (A.29) et le choix de $|A_+(k)|^2$ correspondant à (A.23) on obtient une relation d'orthonormalité identique à celle des états propres d'impulsion

$$\langle \psi_{p_1} | \psi_{p_2} \rangle = \delta(p_1 - p_2). \quad (\text{A.30})$$

Annexe B

Calcul d'un déterminant par récurrence

Dans cette annexe je vais démontrer un formule de récurrence pour trouver le déterminant d'une matrice de la forme

$$\hat{\sigma}_j = \begin{pmatrix} z_1 & -1 & & & \\ -1 & z_2 & & \circ & \\ & & \ddots & & \\ & \circ & & & -1 \\ & & & -1 & z_j \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

Soit $\hat{D}_j = \det \hat{\sigma}_j$. On veut alors obtenir la relation entre les déterminants \hat{D}_j pour des valeurs différentes de j .

Montrons d'abord qu'on peut transformer $\hat{\sigma}_j$ en une matrice bidiagonale A_j de dimension $j \times j$ sans changer son déterminant. C'est-à-dire $\hat{D}_j = \det A_j$ où la matrice A_j est

$$A_j = \begin{pmatrix} a_1 & -1 & & & \\ & a_2 & & \circ & \\ & & \ddots & & \\ & \circ & & & -1 \\ & & & & a_j \end{pmatrix} \quad (\text{B.2})$$

Les relations entre les éléments a_i et z_i sont les suivantes

$$\begin{aligned} a_{i+1} &= z_{i+1} - \frac{1}{a_i}, \quad i = 1, \dots, j-1 \\ a_1 &= z_1 \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Ce résultat s'obtient de la manière suivante. Soit E une matrice élémentaire de dimension $j \times j$ dont tous les éléments diagonaux sont 1, et tous les termes non-diagonaux sont nuls sauf

un, qui vaut k .

$$E = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & k & \\ & \circ & & & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.4})$$

Supposons que l'élément non-nul k se trouve dans la $m^{\text{ième}}$ ligne et la $n^{\text{ième}}$ colonne, $m \neq n$. L'effet de multiplier une matrice arbitraire M de dimension $j \times j$ par E de la gauche, EM , est d'ajouter la $n^{\text{ième}}$ ligne de M , multiplié par le facteur k , à la $m^{\text{ième}}$ ligne. Le déterminant n'est pas changé $\det(EM) = \det E \det M = \det M$, puisque $\det E = 1$.

Considérons maintenant une matrice de la forme

$$\mathcal{A}_j^{(i)} = \begin{pmatrix} a_1 & -1 & & & & \\ & a_2 & & & \circ & \\ & & \ddots & & & \\ & & & a_i & -1 & \\ & & & -1 & z_{i+1} & -1 \\ & & & & & \ddots \\ \circ & & & & & & -1 \\ & & & & & & -1 & z_j \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

où $1 \leq i < j$. Si on ajoute la $i^{\text{ième}}$ ligne de $\mathcal{A}_j^{(i)}$, multipliée par le facteur $k = 1/a_i$, à la $(i+1)^{\text{ième}}$ ligne, on obtient la matrice

$$\mathcal{A}_j^{(i+1)} = \begin{pmatrix} a_1 & -1 & & & & \\ & a_2 & & & \circ & \\ & & \ddots & & & \\ & & & a_i & -1 & \\ & & & 0 & a_{i+1} & -1 \\ & & & & & \ddots \\ \circ & & & & & & -1 \\ & & & & & & -1 & z_j \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

où $a_{i+1} = z_{i+1} - 1/a_i$. Cette relation est identique à la relation de récurrence (B.3). Puisque cette transformation est équivalente à la multiplication de $\mathcal{A}_j^{(i)}$ par une matrice élémentaire, le déterminant n'est pas changé, c'est-à-dire $\det \mathcal{A}_j^{(i+1)} = \det \mathcal{A}_j^{(i)}$. Par induction on retrouve la matrice $\mathcal{A}_j^{(j)} \equiv A_j$ à partir de $\hat{\sigma}_j$, sans changer le déterminant $\det A_j = \det \hat{\sigma}_j = \hat{D}_j$.

On peut maintenant obtenir les relations de récurrence pour les déterminants \hat{D}_j . On vient de démontrer que $\hat{\sigma}_j$ a le même déterminant \hat{D}_j que la matrice A_j . Puisque A_j est triangulaire son déterminant est simplement le produit de tous ses éléments diagonaux, et on trouve [32]

$$\hat{D}_j = \prod_{i=1}^j a_i \quad (\text{B.7})$$

A partir de cette relation on obtient

$$\hat{D}_j = a_j a_{j-1} \hat{D}_{j-2} = (z_j a_{j-1} - 1) \hat{D}_{j-2} \quad (\text{B.8})$$

où la dernière expression est obtenue en utilisant (B.3). Finalement on substitue $a_{j-1} = \hat{D}_{j-1}/\hat{D}_{j-2}$ pour arriver à

$$\hat{D}_j = z_j \hat{D}_{j-1} - \hat{D}_{j-2} \quad (\text{B.9})$$

Annexe C

Amplitudes semi-classiques

Le but de cette Annexe est d'obtenir les expressions (2.73) et (2.76) pour les amplitudes semi-classiques des propagateurs dépendant de l'impulsion.

C.1 Le propagateur $\bar{K}(x_f, t_f; p_i, t_i)$

Dans cette section je vais calculer l'amplitude semi-classique $\bar{A}_F(x_f, t_f; p_i, t_i)$ à partir de l'expression (2.72). On résout l'intégrale par la méthode utilisée dans la Section 2.4.1. Soit $\bar{\eta}$ le vecteur de longueur $N + 1$

$$\bar{\eta} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} \quad (\text{C.1})$$

L'argument de l'exponentielle de l'équation (2.72) s'écrit alors comme $i\bar{\eta}^T \bar{\sigma} \bar{\eta}$ où $\bar{\sigma}$ est la matrice de dimension $(N + 1) \times (N + 1)$

$$\bar{\sigma} = \frac{m}{2\epsilon\hbar} \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \circ & \\ & -1 & 2 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & -1 & 2 \\ & \circ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} - \frac{\epsilon}{2\hbar} \begin{pmatrix} c_0 & & & & & \\ & c_1 & & & \circ & \\ & & \ddots & & & \\ & \circ & & & & \\ & & & & & c_N \end{pmatrix} \quad (\text{C.2})$$

L'amplitude dépend du déterminant de $\bar{\sigma}$

$$\bar{A}_F(x_f, t_f; p_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left[\left(\frac{2\hbar\epsilon}{m} \right)^{N+1} \det \bar{\sigma} \right]^{-1/2} \quad (\text{C.3})$$

On obtient le déterminant de la même façon qu'avant. On définit une nouvelle matrice $\bar{\sigma}'$ en multipliant $\bar{\sigma}$ par le facteur $2\hbar\epsilon/m$ comme dans l'équation (2.57). Le déterminant $\det \bar{\sigma}'$ est la valeur qui apparaît entre les crochets de l'équation (C.3). En tronquant $\bar{\sigma}'$ on obtient les

(voir l'Annexe B). Si on calcule les déterminants \bar{D} à partir des équations (C.14) et (C.16) on trouve

$$\bar{f}_N(t_{N+1}, t_i) = \left(1 - \frac{\epsilon^2}{m} c_{N+1}\right) \bar{f}_N(t_N, t_i) - \bar{f}_N(t_{N-1}, t_i) \quad (\text{C.18})$$

A la limite $N \rightarrow \infty$ le terme en c_{N+1} s'annule. En remplaçant $t_f = t_{N+1}$ on obtient

$$\bar{f}(t_f, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} [\bar{f}_N(t_N, t_i) - \bar{f}_N(t_{N-1}, t_i)] = \epsilon \frac{\partial}{\partial t} \bar{f}(t = t_f, t_i) \quad (\text{C.19})$$

On substitue ce résultat dans l'expression (C.15) pour l'amplitude semi-classique

$$\bar{A}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; p_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{i}{2\pi\hbar m}\right)^{-1/2} [\partial_t \bar{f}(t = t_f, t_i)]^{1/2} \quad (\text{C.20})$$

La dérivée $\partial_t \bar{f}(t = t_f, t_i)$ s'obtient en utilisant la valeur (C.8) de $\bar{f}(t, t_i)$

$$\partial_t \bar{f}(t, t_i) = \lim_{\delta x_i^{\bar{\Gamma}} \rightarrow 0} \frac{\delta \dot{x}_{\bar{\Gamma}}(t)}{\delta x_i^{\bar{\Gamma}}} = \lim_{\delta x_i^{\bar{\Gamma}} \rightarrow 0} \frac{1}{m} \frac{\delta \bar{p}_{\bar{\Gamma}}(t)}{\delta x_i^{\bar{\Gamma}}} \quad (\text{C.21})$$

où $\delta \bar{p}(t)$ est la variation de l'impulsion le long de la trajectoire racine dû à une variation $\delta x_i^{\bar{\Gamma}}$ de sa position initiale. Pour $t = t_f$ la dérivée vaut

$$\partial_t \bar{f}(t = t_f, t_i) = \frac{1}{m} \left(\frac{\partial p_f}{\partial x_i}\right)_{t_f, p_i, t_i} \quad (\text{C.22})$$

En substituant ce résultat dans l'équation (C.20) on obtient

$$\bar{A}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; p_i, t_i) = (-2i\pi\hbar)^{-1/2} \left| \left(\frac{\partial x_i^{\bar{\Gamma}}}{\partial p_f}\right)_{t_f, p_i, t_i} \right|^{1/2} e^{-i\bar{v}_{\bar{\Gamma}}\pi/2}. \quad (\text{C.23})$$

qui est en accord avec l'expression (2.79).

Annexe D

Réflexion par un puits de potentiel

Dans cet annexe je vais démontrer, en utilisant le traitement de Stokes, la validité de la méthode employée dans la Section 2.5.2 pour calculer la valeur semiclassique de la probabilité de réflexion par un puits de potentiel. Je vais ensuite effectuer l'intégrale de contour qui figure dans l'expression obtenue pour la probabilité.

D.1 Traitement de Stokes

Pour prolonger la solution BKW analytiquement autour d'un point de rebroussement, il faut prendre en compte le phénomène de Stokes. On peut décrire ce phénomène brièvement ainsi. La solution BKW s'exprime de la façon

$$\psi_{\text{BKW}}(x) = [p(x)]^{-1/2} \sum_{\pm} c_{\text{tp}}^{\pm} \exp \left[\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_{\text{tp}}}^x dx' p(x') \right] \quad (\text{D.1})$$

où x_{tp} est le point de rebroussement, et c_{tp}^{\pm} sont des constantes. Cette solution est valable loin du point de rebroussement. Pour la prolonger analytiquement autour de x_{tp} , il faut donc prendre un contour qui maintient une grande distance de ce point. Or, quand on s'éloigne dans le plan complexe, on trouve qu'une des solutions (D.1) s'agrandit exponentiellement alors que l'autre diminue exponentiellement. Puisque la solution BKW n'est qu'une solution approchée, on trouve que, suffisamment loin du point de rebroussement, la valeur du terme exponentiellement petite devient négligeable devant l'erreur présente dans le terme principal. En ce cas le coefficient devant le terme le plus petit n'est plus un bon paramètre, et ne peut plus être considéré comme constant. Ceci est le 'phénomène de Stokes'. Pour chaque type de point de rebroussement, il existe des règles selon lesquelles on peut déterminer le changement des coefficients c_{tp}^{\pm} autour du point.

D.1.1 Point de rebroussement d'ordre un

On va considérer ici le type de point de rebroussement le plus simple, qui correspond à un zéro d'ordre un de la fonction $E - V(x)$. En ce cas l'impulsion prend localement la forme

$$p(x) = C(x - x_{\text{tp}})^{1/2} \quad (\text{D.2})$$

Au voisinage de x_{tp} l'intégrale de $p(x)$ qui figure dans la solution (D.1) prend la valeur

$$\int_{x_{tp}}^x dx' p(x') = \frac{2C}{3} (x - x_{tp})^{3/2} \quad (D.3)$$

Dans le plan complexe il existe trois lignes, appelées des lignes de Stokes, le long desquelles l'intégrale de $p(x)$ est imaginaire pure. Il y a également trois lignes (les lignes anti-Stokes) le long desquelles l'intégrale est réelle. Ces lignes sont indiquées dans la Figure D.1

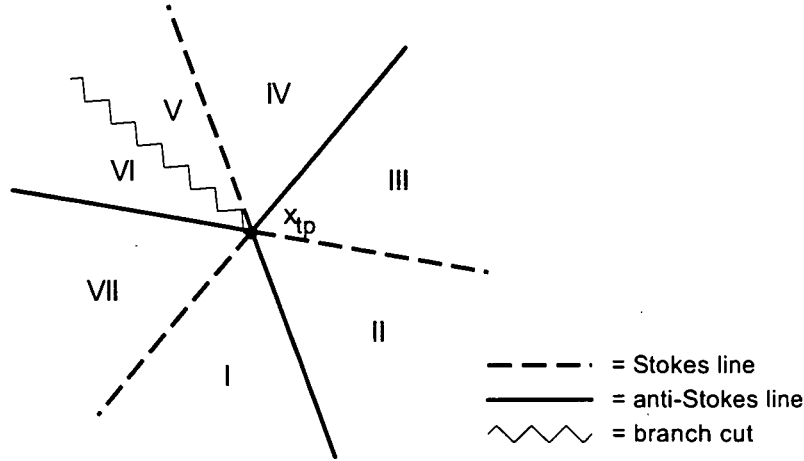


FIG. D.1 – Les lignes de Stokes (pointillé) et les lignes anti-Stokes (trait continu) dans le plan complexe pour une impulsion $p(x) = C(x - x_{tp})^{1/2}$. La ligne de coupure de $p(x)$ (zigzag) peut être choisie dans n'importe quelle direction.

Les règles de Stokes, qui déterminent les changements des coefficients c_{tp}^{\pm} , sont expliquées en détail dans le livre de Heading [33], et je ne ferai ici que présenter les résultats y obtenus. Suivant la notation de Heading, posons

$$\begin{aligned} (x_{tp}, x) &\equiv [p(x)]^{-1/2} \exp \left[+\frac{i}{\hbar} \int_{x_{tp}}^x dx' p(x') \right] \\ [x, x_{tp}] &\equiv [p(x)]^{-1/2} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{x_{tp}}^x dx' p(x') \right] \end{aligned} \quad (D.4)$$

La solution BKW s'exprime alors comme

$$\psi_{\text{BKW}}(x) = \{c_{tp}^+ (x_{tp}, x) + c_{tp}^- [x, x_{tp}]\} \quad (D.5)$$

Pour déterminer les coefficients c_{tp}^{\pm} il faut d'abord définir $p(x)$ de façon univoque, c'est-à-dire, de choisir une ligne de coupure. Lorsque on trace la solution à travers la ligne de coupure dans le sens trigonométrique, il faut faire les correspondances suivantes

$$\begin{aligned} (x_{tp}, x) &\rightarrow -i [x, x_{tp}] \\ [x, x_{tp}] &\rightarrow -i (x_{tp}, x) \end{aligned} \quad (D.6)$$

Les expressions à la droite des flèches, évaluées à travers la ligne de coupure, correspondent aux mêmes solutions physiques que les expressions à gauche, évaluées en deçà de la ligne de

coupure. Le changement d'ordre de x et x_{tp} dans les parenthèses provient du changement de signe de $p(x)$ dans l'exposant de (D.1), et le facteur de $-i$ est dû au changement de signe de $p(x)$ dans le facteur $[p(x)]^{-1/2}$.

Pour déterminer les correspondances entre les solutions à travers une ligne de Stokes il faut savoir quelle est la solution 'dominante' (la solution qui croît exponentiellement lorsque on s'éloigne du point de rebroussement) et quelle est la solution 'sous-dominante' (celle qui diminue exponentiellement). Laquelle des solutions (x_{tp}, x) ou $[x, x_{tp})$ est dominante dépend du choix de la ligne de coupure de $p(x)$. On l'indique alors avec un indice 'd'. De même on identifie la solution sous-dominante avec un indice 's'. Le coefficient de la solution dominante ne change pas à travers une ligne de Stokes. En revanche, le coefficient de la solution sous-dominante change par une quantité proportionnelle à celui du terme dominant. En utilisant des conditions de cohérence [33], on trouve que la constante de proportionnalité est i , ce qui donne les correspondances suivants,

$$\begin{aligned} (x_{tp}, x]_s &\rightarrow (x_{tp}, x]_s \\ [x, x_{tp})_d &\rightarrow [x, x_{tp})_d + i(x_{tp}, x]_s \end{aligned} \quad (D.7)$$

si $[x, x_{tp})$ est la solution dominante, et

$$\begin{aligned} [x, x_{tp})_s &\rightarrow [x, x_{tp})_s \\ (x_{tp}, x]_d &\rightarrow (x_{tp}, x]_d + i[x, x_{tp})_s \end{aligned} \quad (D.8)$$

si $(x_{tp}, x]$ est la solution dominante.

Sur une ligne anti-Stokes, les deux solutions sont oscillatoire. De chaque côté de la ligne pourtant, l'une des deux est dominante, et l'autre sous-dominante. On trouve qu'en traversant une ligne anti-Stokes, les deux solutions $(x_{tp}, x]$ et $[x, x_{tp})$ changent de rôle: la solution dominante devient sous-dominante, et, réciproquement, la solution sous-dominante devient dominante. On obtient alors les correspondances suivants

$$\begin{aligned} (x_{tp}, x]_s &\rightarrow (x_{tp}, x]_d \\ [x, x_{tp})_d &\rightarrow [x, x_{tp})_s \end{aligned} \quad (D.9)$$

ou

$$\begin{aligned} [x, x_{tp})_s &\rightarrow [x, x_{tp})_d \\ (x_{tp}, x]_d &\rightarrow (x_{tp}, x]_s \end{aligned} \quad (D.10)$$

selon quelle solution est dominante au deça de la ligne anti-Stokes.

A partir des ces règles de correspondance, on peut calculer la solution BKW complète autour d'un point de rebroussement du type indiqué dans la Figure D.1. Supposons que le signe de C est tel que la solution $(x_{tp}, x]$ soit dominante dans la région I. Si les coefficients des termes dominant et sous-dominant dans la région I sont A et B respectivement, on trouve

que les solutions dans les autres régions sont

$$\begin{aligned}
\psi_{\text{BKW}}^{\text{I}}(x) &= A(x_{\text{tp}}, x]_d + B[x, x_{\text{tp}})_s \\
\psi_{\text{BKW}}^{\text{II}}(x) &= A(x_{\text{tp}}, x]_s + B[x, x_{\text{tp}})_d \\
\psi_{\text{BKW}}^{\text{III}}(x) &= (A + iB)(x_{\text{tp}}, x]_s + B[x, x_{\text{tp}})_d \\
\psi_{\text{BKW}}^{\text{IV}}(x) &= (A + iB)(x_{\text{tp}}, x]_d + B[x, x_{\text{tp}})_s \\
\psi_{\text{BKW}}^{\text{V}}(x) &= (A + iB)(x_{\text{tp}}, x]_d + iA[x, x_{\text{tp}})_s \\
\psi_{\text{BKW}}^{\text{VI}}(x) &= (-iA + B)[x, x_{\text{tp}})_d + A(x_{\text{tp}}, x]_s \\
\psi_{\text{BKW}}^{\text{VII}}(x) &= (-iA + B)[x, x_{\text{tp}})_s + A(x_{\text{tp}}, x]_d
\end{aligned} \tag{D.11}$$

Il est clair qu'on retrouve la solution dans la région I en appliquant les règles de correspondance à la solution dans la région VII.

D.1.2 Puits de potentiel

On va maintenant considérer le puits de potentiel

$$V(x) = -\frac{V_0}{\cosh^2\left(\frac{x}{\sigma}\right)} \tag{D.12}$$

où V_0 est positif. Les points de rebroussement de ce potentiel correspondent aux zéros de la fonction

$$g(x) = E - V(x) \tag{D.13}$$

et sont calculés dans le Chapitre 2. Pour $E > 0$ ils sont égaux à x_{tp} où

$$\frac{x_{\text{tp}}}{\sigma} = \pm \ln \left(\sqrt{\frac{V_0}{E}} + \sqrt{\frac{V_0}{E} + 1} \right) + i \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \tag{D.14}$$

et n est un nombre entier. A ces points la dérivée de $g(x)$ est non-nulle

$$g'(x) = \pm \frac{4E}{\sigma} \sqrt{\frac{V_0}{E} + 1}. \tag{D.15}$$

x_{tp} sont alors des points de rebroussement d'ordre un, que nous avons étudiés dans la section D.1.1.

Les lignes de Stokes et les lignes anti-Stokes pour le potentiel D.12 sont tracées sur la Figure D.2. On considère le problème d'une particule incidente de la gauche. La forme de la fonction d'onde sur l'axe réel à la droite du potentiel est donc connue: elle est une onde plane propageant vers la droite, et correspond à la partie transmise de la fonction d'onde. Sur l'axe réel à la gauche du potentiel la fonction d'onde est la somme d'une onde plane incidente propageant vers la droite, et une onde plane réfléchie propageant vers la gauche. Pour déterminer les amplitudes relatives de ces ondes planes, et donc la probabilité de réflexion, il faut tracer la solution à partir de l'axe réel à droite du potentiel en utilisant les règles de correspondance.

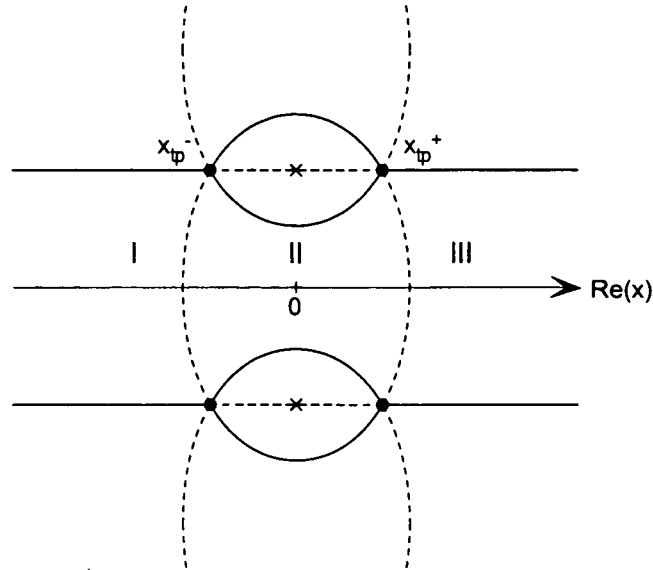


FIG. D.2 – Les lignes de Stokes (pointillé) et les lignes anti-Stokes (trait continu) dans le plan complexe pour le puits de potentiel $V(x) = -V_0/\cosh^2(\frac{x}{\sigma})$, dont les pôles sont indiqués par des croix diagonaux. Toutes ces lignes terminent aux points de rebroussement (cercles). L'axe réel est indiqué par un trait fin, et l'origine par un croix vertical.

Puisque la fonction d'onde sur l'axe réel à droite du potentiel est une onde plane transmise, on peut écrire la solution dans la région III comme

$$\psi_{\text{BKW}}^{\text{III}}(x) = (0, x) \quad (\text{D.16})$$

Pour obtenir la solution dans la région II il faut la tracer autour du point de rebroussement x_{tp}^+ dans le sens de l'aiguille de montre. Il est nécessaire donc de récrire la solution (D.16) en utilisant le point x_{tp}^+ comme point de référence, au lieu de l'origine. En introduisant la notation

$$(0, x_{\text{tp}}^+) \equiv \exp \left[+\frac{i}{\hbar} \int_0^{x_{\text{tp}}^+} dx p(x) \right] \quad (\text{D.17})$$

on constate que

$$(0, x) = (0, x_{\text{tp}}^+) (x_{\text{tp}}^+, x) \quad (\text{D.18})$$

Pour déterminer la solution dans la région II, il faut traverser une ligne de Stokes. Il est donc nécessaire de savoir si (x_{tp}^+, x) est la solution dominante ou sous-dominante. En constatant que l'intégrale de l'impulsion $p(x)$ le long de cette ligne de Stokes à partir du point x_{tp}^+ est négative imaginaire, on peut conclure que (x_{tp}^+, x) est la solution dominante. On écrit donc la solution dans la région III comme

$$\psi_{\text{BKW}}^{\text{III}}(x) = (0, x_{\text{tp}}^+) (x_{\text{tp}}^+, x)_d \quad (\text{D.19})$$

En utilisant les règles de correspondance on trouve que la solution dans la région II est

$$\psi_{\text{BKW}}^{\text{II}}(x) = (0, x_{\text{tp}}^+) \left\{ (x_{\text{tp}}^+, x]_d - i [x, x_{\text{tp}}^+]_s \right\} \quad (\text{D.20})$$

Pour trouver la solution dans la région I il faut tracer autour du point de rebroussement x_{tp}^- , en traversant encore une ligne de Stokes. En prenant x_{tp}^- comme point de référence la solution $\psi_{\text{BKW}}^{\text{II}}$ s'écrit comme

$$\psi_{\text{BKW}}^{\text{II}}(x) = (0, x_{\text{tp}}^+) \left\{ (x_{\text{tp}}^+, x_{\text{tp}}^-) (x_{\text{tp}}^-, x]_d - i [x, x_{\text{tp}}^-]_s (x_{\text{tp}}^-, x_{\text{tp}}^+) \right\} \quad (\text{D.21})$$

et donc on trouve

$$\psi_{\text{BKW}}^{\text{I}}(x) = (0, x_{\text{tp}}^+) \left\{ (x_{\text{tp}}^+, x_{\text{tp}}^-) (x_{\text{tp}}^-, x]_d - i \left\{ (x_{\text{tp}}^+, x_{\text{tp}}^-) + (x_{\text{tp}}^-, x_{\text{tp}}^+) \right\} [x, x_{\text{tp}}^-]_s \right\} \quad (\text{D.22})$$

Si on réécrit $\psi_{\text{BKW}}^{\text{I}}(x)$ en utilisant l'origine comme point de référence, on obtient, après quelques simplifications,

$$\psi_{\text{BKW}}^{\text{I}}(x) = (0, x] - i \left\{ (0, x_{\text{tp}}^-)^2 + (0, x_{\text{tp}}^+)^2 \right\} [x, 0] \quad (\text{D.23})$$

où

$$(0, x_{\text{tp}}^\pm)^2 \equiv (0, x_{\text{tp}}^\pm) (0, x_{\text{tp}}^\pm) \quad (\text{D.24})$$

Dans l'équation (D.23), le terme $(0, x]$ correspond à une onde plane propageant vers la droite, et le terme $[x, 0]$ à une onde plane propageant vers la gauche. Le facteur devant ce deuxième terme est donc le coefficient semiclassique de réflexion

$$r_{\text{sc}} = -i \left\{ (0, x_{\text{tp}}^-)^2 + (0, x_{\text{tp}}^+)^2 \right\} \quad (\text{D.25})$$

En substituant les définitions de $(0, x_{\text{tp}}^\pm)$, on obtient

$$r_{\text{sc}} = -i \left\{ \exp \left[\frac{2i}{\hbar} \int_0^{x_{\text{tp}}^+} dx p(x) \right] + \exp \left[\frac{2i}{\hbar} \int_0^{x_{\text{tp}}^-} dx p(x) \right] \right\} \quad (\text{D.26})$$

ce qui coïncide avec le résultat obtenu dans le Chapitre 2 (voir équations (2.94) et (2.95)).

Il convient de faire quelques commentaires à propos de la méthode utilisée ici. D'abord, le coefficient de réflexion ne peut pas être calculé en traçant la solution autour des points de rebroussement au-dessous de l'axe réel (ce qui donnerait un résultat de zéro). La raison est la suivante.

Evaluons l'onde incidente $(0, x]$ et l'onde réfléchie $r_{\text{sc}} [x, 0]$ en un des points x_{tp}^\pm , par exemple x_{tp}^- . En ce point l'onde incidente prend la valeur

$$(0, x]_{x=x_{\text{tp}}^-} = (0, x_{\text{tp}}^-]. \quad (\text{D.27})$$

En le même point l'onde réfléchie prend la valeur

$$\begin{aligned} r_{\text{sc}} [x, 0]_{x=x_{\text{tp}}^-} &= -i \left\{ (0, x_{\text{tp}}^-)^2 + (0, x_{\text{tp}}^+)^2 \right\} [x_{\text{tp}}^-, 0] \\ &= -i (0, x_{\text{tp}}^-] \left\{ 1 + (x_{\text{tp}}^-, x_{\text{tp}}^+)^2 \right\} \end{aligned} \quad (\text{D.28})$$

Puisque x_{tp}^- et x_{tp}^+ sont connectés par une ligne anti-Stokes, le module de $(x_{\text{tp}}^-, x_{\text{tp}}^+)$ vaut un

$$|(x_{\text{tp}}^-, x_{\text{tp}}^+)| = 1, \quad (\text{D.29})$$

et donc l'onde incidente (D.27) et l'onde réfléchie (D.28) évaluées au point x_{tp}^- ont la même ordre de grandeur. Elles sont donc toutes les deux prises en compte lorsque on trace la solution autour de x_{tp}^- . De même, les solutions sont toutes les deux gardées en passant autour du point x_{tp}^+ .

En revanche, si on évalue les ondes incidente et réfléchie à un point au-dessous de l'axe réel, on trouve que la valeur de l'onde réfléchie est exponentiellement plus petite que celle de l'onde incidente. Or, la méthode semiclassique ne prend en compte que les termes d'ordre le plus grand. C'est pour cette raison que l'amplitude de l'onde réfléchie ne peut pas être calculée en traçant la solution autour des points de rebroussement au-dessous de l'axe réel.

On ne peut pas non plus tracer la solution autour des points x_{tp}^\pm en passant au-dessus du pôle. La solution exacte de l'équation de Schrödinger n'est pas définie de façon univoque autour du pôle, et un tel contour mènerait à l'approximation semiclassique d'une solution différente de celle à laquelle on s'intéresse.

D.2 Calcul d'un intégrale de contour

L'expression pour le coefficient de réflexion contient les intégrales

$$I^\pm(E) = \int_0^{x_{\text{tp}}^\pm} dx p(x) \quad (\text{D.30})$$

Il s'avère plus facile de calculer la dérivée de $I^\pm(E)$ par rapport à l'énergie que de calculer $I^\pm(E)$ directement. Dénotons cette dérivée par $J^\pm(E) \equiv dI^\pm/dE$. Je vais d'abord calculer $J^\pm(E)$, et ensuite l'intégrer pour trouver $I^\pm(E)$. La constante d'intégration est déterminée par un calcul de $I^\pm(0)$.

En différentiant l'équation (D.30) par rapport à E , on obtient l'expression suivante pour $J^\pm(E)$

$$J^\pm(E) = p(x_{\text{tp}}^\pm) \frac{dx_{\text{tp}}^\pm}{dE} + \int_0^{x_{\text{tp}}^\pm} dx \left(\frac{d}{dE} p(x) \right) \quad (\text{D.31})$$

Le premier terme de l'équation (D.31) est nul puisque l'impulsion vaut zéro au point de rebroussement. En calculant l'intégrand du deuxième terme,

$$\frac{d}{dE} p(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{E - V(x)} \right)^{1/2} \quad (\text{D.32})$$

et en reportant dans (D.32) l'expression pour $V(x)$ de l'équation (D.12) on obtient

$$J^\pm(E) = \frac{1}{2} \int_0^{x_{\text{tp}}^\pm} dx \left(\frac{2m}{E + \frac{V_0}{\cosh^2(\frac{x}{\sigma})}} \right)^{1/2} \quad (\text{D.33})$$

On peut effectuer cette intégrale en faisant un changement de variables

$$u = \sinh\left(\frac{x}{\sigma}\right) \quad (\text{D.34})$$

En substituant

$$\begin{aligned} \cosh^2\left(\frac{x}{\sigma}\right) &= 1 + u^2 \\ \cosh\left(\frac{x}{\sigma}\right) dx &= \sigma du \end{aligned} \quad (\text{D.35})$$

dans l'intégrale (D.33), on trouve

$$J^\pm(E) = \frac{\sigma}{2} \int_0^{u_{\text{tp}}} du [au^2 + (a+b)]^{-1/2} \quad (\text{D.36})$$

où les paramètres a et b sont proportionnels respectivement à l'énergie et à la profondeur du potentiel

$$\begin{aligned} a &\equiv \frac{E}{2m} \\ b &\equiv \frac{V_0}{2m} \end{aligned} \quad (\text{D.37})$$

La limite d'intégration est

$$u_{\text{tp}} = \sinh\left(\frac{x_{\text{tp}}^\pm}{\sigma}\right) = i\sqrt{\frac{V_0}{E} + 1} \quad (\text{D.38})$$

En reportant cette valeur dans l'expression (D.36) on trouve

$$J^\pm(E) = \frac{\sigma}{2\sqrt{a}} \ln \left\{ u\sqrt{a} + [(a+b) + au^2]^{1/2} \right\} \Big|_0^{u_{\text{tp}}} \quad (\text{D.39})$$

c'est-à-dire, compte tenu de (D.37)

$$\begin{aligned} J^\pm(E) &= \frac{\sigma}{2} \sqrt{\frac{2m}{E}} \left\{ \ln \left(i\sqrt{\frac{E+V_0}{2m}} \right) - \ln \left(\sqrt{\frac{E+V_0}{2m}} \right) \right\} \\ &= \frac{\sigma}{2} \sqrt{\frac{2m}{E}} \ln i \end{aligned} \quad (\text{D.40})$$

La bonne branche à prendre pour le logarithme est $\ln i = i\pi/2$, ce qui donne

$$J^\pm(E) = i\pi \frac{\sigma}{4} \sqrt{\frac{2m}{E}} \quad (\text{D.41})$$

En intégrant cette expression par rapport à E on trouve l'équation suivante pour $I^\pm(E)$

$$I^\pm(E) = I^\pm(0) + \int_0^E dE' J^\pm(E') = I^\pm(0) + i\frac{\pi\sigma\hbar k}{2} \quad (\text{D.42})$$

où $I^\pm(0)$ est la valeur de $I^\pm(E)$ pour $E = 0$, et où on a utilisé la définition (2.87) de k .

Il reste à calculer la valeur de $I^\pm(0)$. Pour $E = 0$ l'impulsion classique vaut $p(x) = [-2mV(x)]^{1/2}$. En reportant cette valeur dans l'équation (D.30) on trouve

$$\begin{aligned} I^\pm(0) &= \int_0^{x_{\text{tp}}^\pm} dx \frac{\sqrt{2mV_0}}{\cosh\left(\frac{x}{\sigma}\right)} \\ &= \sigma\sqrt{2mV_0} \arctan\left[\sinh\left(\frac{x}{\sigma}\right)\right] \Big|_0^{x_{\text{tp}}^\pm} \end{aligned} \quad (\text{D.43})$$

Les bonnes branches d'arc-tangent à prendre au points de rebroussement x_{tp}^\pm sont $\pm\pi/2$. On obtient donc la valeur

$$I^\pm(0) = \pm \frac{\pi\sigma}{2} \sqrt{2mV_0} \quad (\text{D.44})$$

En substituant dans l'équation (D.42) on trouve le résultat annoncé en (2.96)

$$I^\pm(E) = \pm \frac{\pi\sigma}{2} \sqrt{2mV_0} + i \frac{\pi\sigma\hbar k}{2} \quad (\text{D.45})$$

Annexe E

Définitions de stabilité topologique

Dans cette Annexe je présenterai les définitions de stabilité topologique pour une fonction individuelle et pour une famille de fonctions. La notion de stabilité topologique utilise le concept d'un difféomorphisme, que j'expliquerai d'abord.

Définition 1 (Difféomorphisme) Soient U et V des ouverts de \mathbb{R}^n . Soit f une fonction $f : U \rightarrow \mathbb{R}^n$, qui satisfait à $f(U) = V$. La fonction f est un difféomorphisme pourvu que:

1. f soit une fonction de classe C^1
2. f possède une fonction inverse $g : V \rightarrow \mathbb{R}^n$ telle que $f \circ g = 1_V$ et $g \circ f = 1_U$
3. g soit une fonction de classe C^1

Notons que g est une fonction de classe C^1 seulement si sa dérivée est définie partout dans V , et si elle est continue. La fonction f n'est pas un difféomorphisme si, en un point quelconque x , sa dérivée s'annule le long d'une direction quelconque, c'est-à-dire si $\det Df|_x = 0$. Par exemple, supposons que $f(x) = x^3$. Son inverse est alors $g(x) = \sqrt[3]{x}$. Mais la dérivée de g n'existe pas à l'origine. Alors g n'est pas une fonction de classe C^1 , et f n'est pas un difféomorphisme.

On va utiliser maintenant le concept de difféomorphisme pour définir l'équivalence de deux fonctions.

Définition 2 (Equivalence de deux fonctions) Deux fonctions $f, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ de classe C^1 sont équivalentes autour de 0 s'il existe un difféomorphisme local $y : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ autour de 0 et une constante γ tels que, autour de 0,

$$g(x) = f[y(x)] + \gamma \quad (\text{E.1})$$

Les deux fonctions f et g sont donc équivalentes si elles ont la même structure de points critiques. Cette propriété se voit de la façon suivante. La dérivée de g est égale à

$$g'(x) = f'[y(x)]y'(x) \quad (\text{E.2})$$

Supposons que x est un point critique de g . Puisque y est un difféomorphisme sa dérivée ne s'annule pas. Le point $y(x)$ est donc un point critique de f . On peut utiliser le même argument pour montrer que pour tout point critique de f il correspond un point critique de g . De même on peut montrer que la dégénérescence des ces points critiques est identique.

Ceci nous mène à la définition de la stabilité topologique d'une fonction.

Définition 3 (Stabilité topologique d'une fonction) *Si $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ est équivalente à une fonction $f + p : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, où $p : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction quelconque qui est suffisamment petite, alors f est topologiquement stable.*

La perturbation $p(x)$ est 'suffisamment petite' si toutes ses dérivées sont petites pour x dans la région d'intérêt. Une fonction est topologiquement stable alors si la structure des ces points critique n'est pas changée par une petite perturbation.

Par analogie avec la définition de stabilité d'une fonction, on peut définir la stabilité topologique d'une famille de fonctions. On définit d'abord l'équivalence entre deux familles de fonctions. Cette définition est analogue à la Définition 2. Le difféomorphisme y est cependant remplacé par une famille de difféomorphismes, la constante γ par une famille de constantes, et un difféomorphisme est introduite pour les variables de contrôle t

Définition 4 (Equivalence de deux familles de fonctions) *Les deux familles de fonctions $f, g : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^r \rightarrow \mathbb{R}$ sont équivalentes s'il existe e, y et γ définis dans un voisinage de 0 tels que*

$$g(x, t) = f(y_t(x), e(t)) + \gamma(t) \quad (\text{E.3})$$

pour tous $(x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^r$ dans ce voisinage, et tels que e, y et γ satisfont aux conditions

1. $e : \mathbb{R}^r \rightarrow \mathbb{R}^r$ est un difféomorphisme
2. $y_t : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ est un difféomorphisme pour tous $t \in \mathbb{R}^r$
3. $\gamma : \mathbb{R}^r \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction de classe C^1

La définition de stabilité topologique d'une famille de fonctions suit de la Définition 4 d'équivalence

Définition 5 (Stabilité topologique d'une famille de fonctions) *Si $f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^r \rightarrow \mathbb{R}$ est équivalente à la famille $f + p$, où $p : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^r \rightarrow \mathbb{R}$ est une famille quelconque qui est suffisamment petite, alors f est topologiquement stable.*

Annexe F

Le théorème de Thom

Typiquement une famille à r variables de contrôle de fonctions $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ de classe C_1 est topologiquement stable pour tout n et pour tout $r \leq 5$, et elle est équivalente autour de chaque point critique dégénéré à une des formes suivantes.

Les catastrophes cuspoïdes:

Le pli

$$u_1^3 + t_1 u_1 + (M)$$

La fronce

$$\pm(u_1^4 + t_2 u_1^2 + t_1 u_1) + (M)$$

La queue d'aronde

$$u_1^5 + t_3 u_1^3 + t_2 u_1^2 + t_1 u_1 + (M)$$

Le papillon

$$\pm(u_1^6 + t_4 u_1^4 + t_3 u_1^3 + t_2 u_1^2 + t_1 u_1) + (M)$$

Le wigwam

$$u_1^7 + t_5 u_1^5 + t_4 u_1^4 + t_3 u_1^3 + t_2 u_1^2 + t_1 u_1 + (M)$$

Les catastrophes ombiliques:

Ombilique elliptique et hyperbolique

$$u_1^2 u_2 \mp u_2^3 + t_3 u_1^2 + t_2 u_2 + t_1 u_1 + (N)$$

Ombilique parabolique

$$\pm(u_1^2 u_2 + u_2^4 + t_4 u_2^2 + t_3 u_1^2 + t_2 u_2 + t_1 u_1) + (N)$$

Seconde ombilique elliptique et hyperbolique

$$u_1^2 u_2 \mp u_2^5 + t_5 u_2^3 + t_4 u_2^2 + t_3 u_1^2 + t_2 u_2 + t_1 u_1 + (N)$$

Ombilique symbolique

$$\pm(u_1^3 + u_2^4 + t_5 u_1 u_2^2 + t_4 u_2^2 + t_3 u_1 u_2 + t_2 u_2 + t_1 u_1) + (N)$$

où (M) et (N) indique des fonctions Morse de la forme

$$(M) = u_2^2 + \dots + u_i^2 - u_{i+1}^2 - \dots - u_n^2 \quad (1 \leq i \leq n)$$

$$(N) = u_3^2 + \dots + u_i^2 - u_{i+1}^2 - \dots - u_n^2 \quad (2 \leq i \leq n)$$

Annexe G

Forme générique de l'amplitude

Le but de cette Annexe est de montrer que le système d'équations (3.62) est inversible. C'est à dire, étant données les amplitudes arbitraires $\mathcal{A}^{(i)}$, $i = 0, \dots, r$, on peut déterminer les coefficients a_i . On commence par écrire le système d'équations avec une notation matricielle. Soit \mathbf{A} le vecteur dont les composants sont les $\mathcal{A}^{(i)}$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathcal{A}^{(0)} \\ \mathcal{A}^{(1)} \\ \vdots \\ \mathcal{A}^{(r)} \end{pmatrix} \quad (\text{G.1})$$

De même, soit \mathbf{a} le vecteur dont les composants sont les a_j ,

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_r \end{pmatrix} \quad (\text{G.2})$$

Les équations (3.62) s'écrivent sous forme matricielle comme

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{t}} \mathbf{a} = \mathbf{A} \quad (\text{G.3})$$

où la matrice $\partial \Phi / \partial \mathbf{t}$ constitue les valeurs des fonctions $\left\{ 1, \frac{\partial}{\partial t_j} \phi(u, \mathbf{t}) \right\}$ évaluées aux points critiques $u_c^{(i)}$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{t}} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{\partial}{\partial t_1} \phi(u_c^{(0)}, \mathbf{t}) & \cdots & \frac{\partial}{\partial t_r} \phi(u_c^{(0)}, \mathbf{t}) \\ 1 & \frac{\partial}{\partial t_1} \phi(u_c^{(1)}, \mathbf{t}) & \cdots & \frac{\partial}{\partial t_r} \phi(u_c^{(1)}, \mathbf{t}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \frac{\partial}{\partial t_1} \phi(u_c^{(r)}, \mathbf{t}) & \cdots & \frac{\partial}{\partial t_r} \phi(u_c^{(r)}, \mathbf{t}) \end{pmatrix} \quad (\text{G.4})$$

Pour que le système d'équations (3.62) soit inversible il faut que la matrice (G.4) soit inversible. On va montrer maintenant que la stabilité topologique des formes génériques $\phi(u, \mathbf{t})$ assure que ceci est vrai.

La famille générique $\phi(u, \mathbf{t})$, $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^r$ de chaque catastrophe reste fermée par rapport à de petites perturbations. C'est à dire, supposons qu'on considère une fonction $f(x)$ qui est équivalente à la fonction $\phi(u, \mathbf{t})$ pour un certain \mathbf{t} . On perturbe maintenant la fonction $f(x)$ avec une petite fonction $\epsilon p(x)$. On appelle la somme $g(x) = f(x) + \epsilon p(x)$. La propriété de fermeture de la famille $\phi(u, \mathbf{t})$, $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^r$ assure que la fonction perturbée $g(x)$ reste équivalente à une fonction de la famille $\phi(u, \mathbf{t}')$, où $\mathbf{t}' = \mathbf{t} + \epsilon \delta \mathbf{t}$. Considérons ce que ceci implique.

Soient $\phi^{(i)}$ les valeurs de $f(x)$ aux points critiques $x_c^{(i)}$

$$\phi^{(i)} \equiv f\left(x_c^{(i)}\right) \quad (\text{G.5})$$

La perturbation décale les positions des points critiques au premier ordre par une quantité $\epsilon \delta x_c^{(i)}$. Les valeurs de la fonction perturbée $g(x)$ en ces nouveaux points critiques diffère de $\phi^{(i)}$ au premier ordre par une quantité qu'on appellera $\epsilon \delta \phi^{(i)}$. Elle est égale à

$$g\left(x_c^{(i)} + \epsilon \delta x_c^{(i)}\right) = \phi^{(i)} + \epsilon \partial_x f\left(x_c^{(i)}\right) \delta x_c^{(i)} + \epsilon p\left(x_c^{(i)}\right) \quad (\text{G.6})$$

Le deuxième terme vaut zéro puisque $\partial_x f(x)$ s'annule aux points critiques. On obtient alors

$$\delta \phi^{(i)} = p\left(x_c^{(i)}\right) \quad (\text{G.7})$$

Puisque $p(x)$ est une fonction arbitraire, le changement des valeurs critiques $\delta \phi^{(i)}$ est aussi arbitraire.

Calculons maintenant le changement des paramètres libres $\{\gamma, \mathbf{t}\}$ nécessaire pour que les valeurs de $g(x)$ aux points critiques coïncident avec les valeurs de $\phi(u, \mathbf{t}')$ à ses points critiques. Le changement $\epsilon \delta \mathbf{t}$ de \mathbf{t} décale les positions des points critiques au premier ordre par les quantités $\epsilon \delta u_c^i$. La valeur de ϕ aux points critiques change aussi. Au premier ordre ce changement est $\epsilon \delta \phi^{(i)}$, où

$$\delta \phi^{(i)} = \delta u_c^i \frac{\partial}{\partial u} \phi\left(u_c^i, \mathbf{t}\right) + \delta \gamma + \sum_{j=1}^r \delta t_j \frac{\partial}{\partial t_j} \phi\left(u_c^i, \mathbf{t}\right) \quad (\text{G.8})$$

Le premier terme vaut zéro puisque $\partial_u \phi(u, \mathbf{t})$ s'annule aux points critiques, et on obtient

$$\delta \phi^{(i)} = \delta \gamma + \sum_{j=1}^r \delta t_j \frac{\partial}{\partial t_j} \phi\left(u_c^i, \mathbf{t}\right) \quad (\text{G.9})$$

En écrivant $\delta \phi^{(i)}$ et $\delta \mathbf{t}$ comme des vecteurs

$$\begin{aligned} \delta \Phi &= \begin{pmatrix} \delta \phi^{(0)} \\ \delta \phi^{(1)} \\ \vdots \\ \delta \phi^{(r)} \end{pmatrix} \\ \delta \mathbf{t} &= \begin{pmatrix} \delta \gamma \\ \delta t_1 \\ \vdots \\ \delta t_r \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{G.10})$$

on peut exprimer (G.9) sous forme matricielle comme

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{t}} \delta \mathbf{t} = \delta \Phi \quad (\text{G.11})$$

où la matrice $\partial \Phi / \partial \mathbf{t}$ est la même que celle définie dans (G.4). L'équation (G.11) exprime la variation des paramètres $\{\gamma, \mathbf{t}\}$ due à une perturbation arbitraire $p(x)$ de la fonction $f(x)$. Puisque la famille générique $\phi(u, \mathbf{t})$, $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^r$ est topologiquement stable le système (G.11) a une solution pour un vecteur $\delta \Phi$ arbitraire. Ceci implique que la matrice $\partial \Phi / \partial \mathbf{t}$ est inversible. Puisque $\partial \Phi / \partial \mathbf{t}$ est inversible, le système d'équations (3.62) est aussi inversible pour des amplitudes arbitraires $\mathcal{A}^{(i)}$, $i = 0, \dots, r$.

Bibliographie

- [1] J. MLYNEK, V. BALKIN, et P. MEYSTRE, editeurs. *Special Issue of Appl. Phys. B: Optics and Interferometry with Atoms*, volume 54, 1992.
- [2] A. STEANE, P. SZRIFTGISER, P. DESBIOLLES, et J. DALIBARD, *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 4972, 1995.
- [3] G. WENTZEL, *Z. Phys.*, **38**, 518, 1926.
- [4] L. BRILLOUIN, *C. R. Acad. Sci. Paris*, **183**, 24, 1926.
- [5] H. A. KRAMERS, *Z. Phys.*, **39**, 828, 1926.
- [6] A. ZWAAN. PhD thesis, Utrecht, 1929.
- [7] R. E. LANGER, *Bull. Am. Math. Soc.*, **40**, 545, 1934.
- [8] J. H. VAN VLECK, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, **14**, 178, 1928.
- [9] P. A. M. DIRAC. *The Principles of Quantum Mechanics*. Clarendon Press, Oxford, 1947.
- [10] R. P. FEYNMAN, *Rev. Mod. Phys.*, **20**, 367, 1948.
- [11] C. MORETTE, *Phys. Rev.*, **81**, 848, 1951.
- [12] G. J. PAPADOPOULOS, *Phys. Rev.*, **D11**, 2870, 1975.
- [13] M. MORSE. *Variational Analysis*. Wiley, New York, 1973.
- [14] J. MILNOR. *Morse Theory*. Princeton University Press, Princeton, 1963.
- [15] U. S. S. LEVIT, K. MÖHRING et T. DREYFUS, *Ann. Phys.*, **114**, 223, 1978.
- [16] S. C. MILLER et R. H. GOOD, *Phys. Rev.*, **91**, 174, 1953.
- [17] R. B. DINGLE, *Appl. Sci. Res.*, **B5**, 345, 1956.
- [18] C. CHESTER, B. FRIEDMAN, et F. URSELL, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **53**, 599, 1957.
- [19] M. V. BERRY, *Proc. Phys. Soc.*, **89**, 479, 1966.
- [20] V. P. MASLOV, *USSR Comp. Math. Phys.*, **3**, 744, 1962.

- [21] R. THOM. *Structural Stability and Morphogenesis*. Benjamin-Addison Wesley, New York, 1975.
- [22] M. V. BERRY, *Adv. Phys.*, **25**, 1, 1976.
- [23] M. BERRY et K. E. MOUNT, *Rep. Prog. Phys.*, **35**, 315, 1972.
- [24] R. P. FEYNMAN et A. R. HIBBS. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, New York, 1965.
- [25] L. S. SCHULMAN. *Path integrals and their applications*. John Wiley and Sons, New York, 1981.
- [26] C. HUYGENS. *Traité de la lumière*. Gressner and Schramm, Leipzig, 1690.
- [27] L. LANDAU et E. LIFCHITZ. *Mécanique quantique*. Editions Mir, Moscou, 1975.
- [28] J. B. KELLER, *J. Opt. Soc. Am.*, **52**, 116, 1962.
- [29] T. POSTON et I. N. STEWART. *Catastrophe theory and its applications*. Pitman, London, 1978.
- [30] J. J. DUISTERMAAT, *Communs. pure appl. Maths.*, **27**, 207, 1974.
- [31] T. PEARCEY, *Philos. Mag.*, **37**, 311, 1946.
- [32] R. V. ANDRÉE. *Introduction à l'algèbre*. Holt, Rinehart and Winston, New York, 1968.
- [33] J. HEADING. *An Introduction to Phase-Integral Methods*. Methuen, London, 1962.

Semiclassical approaches to temporally periodic systems, and their application to phase modulation of de Broglie waves

Pippa Storey, Yvan Castin, Jean Dalibard and Claude Cohen-Tannoudji
Laboratoire Kastler Brossel de l'Ecole Normale Supérieure
24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France

Abstract

A semiclassical approach is applied to the analysis of a longitudinal atomic beamsplitter, consisting of a temporally modulated potential well. Atoms traversing the potential may gain or lose energy in multiples of $\hbar\omega$, where ω is the frequency of modulation. The atomic beam is thus split into discrete components, all travelling in the same direction but with different speeds. The system is analysed entirely in terms of classical trajectories, the quantum nature of the problem being taken into account by associating with each trajectory a phase derived from its classical action. The generalised WKB methods based on this approach fail to reproduce the energy spectrum of the transmitted atomic beam correctly, due to the presence of caustics both in the spatio-temporal distribution of the classical trajectories, and in their energy distribution. The method of uniform approximation however, when adapted to take advantage of the periodicity of the problem, provides a remarkably accurate calculation of the spectrum. The regime of validity of the uniform approximation is limited to situations in which the topology of the system's phase-space diagram is sufficiently simple. In particular, this excludes the treatment of chaos.

Contents

Introduction	2
1 Quantum propagators and their WKB approximations	7
1.1 The standard Feynman propagator	7
1.1.1 Definition and review	8
1.1.2 Semiclassical value of the propagator	8
1.1.3 Maslov indices	11
1.1.4 Example: the free particle	11
1.2 Energy-dependent propagators	12
1.2.1 Definitions	13
1.2.2 Case of a stationary potential	13
1.2.3 Case of a time-dependent localised potential	14
1.2.4 Case of a temporally periodic potential	15
1.2.5 Semiclassical values of the propagators	16
1.2.6 Example: the linear potential	20
1.3 Caustics and shadow zones	24
1.3.1 The standard WKB method in forbidden regions	24
1.3.2 Example 1: the linear potential	27
1.3.3 Example 2: the Gaussian well	29
1.3.4 Forbidden zones in the generalised WKB method	30
2 Direct application of the WKB propagators	31
2.1 The time-domain approach	31
2.1.1 The thin phase grating approximation	33
2.2 The energy-domain approach	36
2.2.1 Origin of the discrete spectrum	38
2.2.2 The forbidden zone	39
2.2.3 Discussion of results	41
3 Semiclassical treatment of caustics	41
3.1 Quadratic expansion: the stationary phase method	42
3.1.1 Example: the linear potential	44
3.2 Local approximation at a caustic	47
3.3 Uniform approximation for an isolated caustic	49
3.3.1 Generic form for the phase	50
3.3.2 Calculation of the phase parameters	50
3.3.3 Approximation of the amplitude	52
3.3.4 The uniform approximation	53
3.3.5 Validity of the fold-caustic treatment	54
3.4 A periodic uniform approximation	56
3.4.1 Generic form for the phase	56
3.4.2 Calculation of the phase parameters	56
3.4.3 Approximation of the amplitude	57
3.4.4 The uniform approximation	58
3.4.5 Generalisation to higher harmonics	59

Conclusion	59
A Generalised WKB methods	60
A.1 The Feynman propagator	60
A.2 The energy-dependent propagators	62
A.2.1 The propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$	62
A.2.2 The propagator $\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$	65
B Practical calculation of the semiclassical amplitudes	66
B.1 The Feynman propagator	66
B.2 The energy-dependent propagators	67
C Calculation of the sideband weights	68
D The thin phase grating approximation	70
E The WKB wavefunction in the perturbative limit	72
F Generalisation to higher harmonics	75
F.1 Generic form for the phase	75
F.2 Calculation of the modulation indices	75
F.3 Approximation for the amplitude	77
F.4 The uniform approximation	78
F.5 The perturbative limit	78

Introduction

Recent developments in laser cooling of neutral atoms have made it possible to reach temperatures below the recoil ‘limit’, that is, temperatures such that the atomic momentum spread is less than the momentum of a single photon. The atomic de Broglie wavelength is then greater than the wavelength of light, and may be considered to be macroscopic. The achievement of such long de Broglie wavelengths has redoubled the interest in atomic interferometry [1], an analogue of optical interferometry in which atomic matter waves play the role of light waves. Another development which has contributed to this renewed interest is the experimental realisation of atom-optical components analogous to the mirrors, lenses and beamsplitters used in traditional optics. Atoms hold an advantage over photons and neutrons in interferometric experiments because of their low velocity, which permits long interaction times.

The problem considered in this article concerns the scattering of a monokinetic beam of atoms from a one-dimensional potential well whose depth is varied periodically in time. Such a potential could be created by modulating the intensity of a laser beam whose frequency is highly detuned from the atomic resonance (see Figure 1). The potential transfers energy to each atom in units of $\hbar\omega$ where ω is the frequency of modulation. The beam is thereby split into discrete components, with identical transverse velocity but differing longitudinal velocity. The system is analogous to the electro-optic phase modulation of light, in which a monochromatic light beam is passed through a crystal whose refractive index is modulated by an applied alternating voltage. The spectrum of the output light contains sidebands whose frequency differs from that of the input light by a multiple of the modulation frequency.

Problems similar to the one considered in this article have been studied by Henkel *et al.* [2] and Steane *et al.* [3], who investigated the reflection of atoms from a vibrating evanescent light wave, and by Hamilton *et al.* [4] and Felber [5], who used a resonating crystal to study the reflection of neutrons.

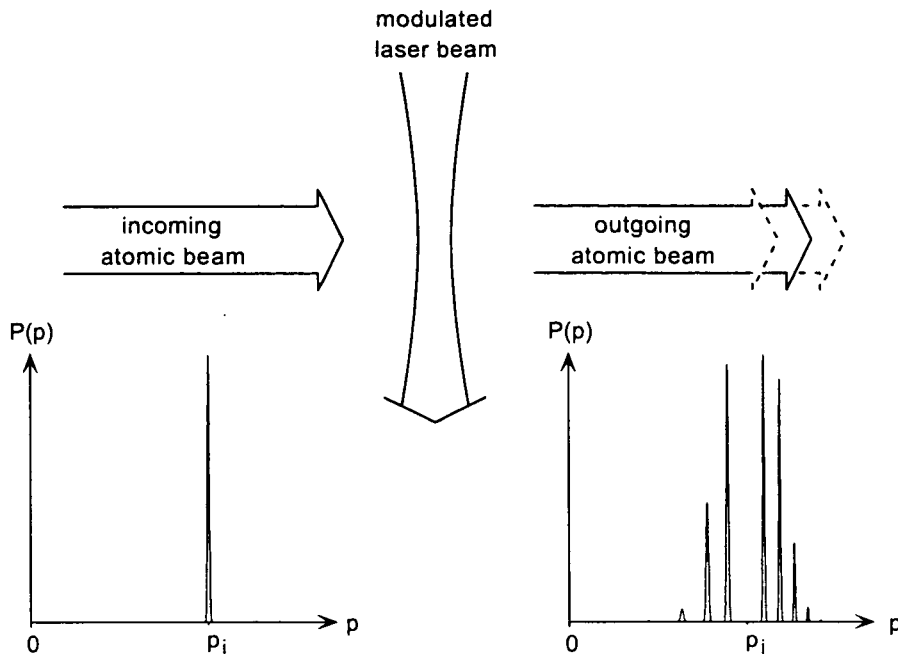


Figure 1: A beam of atoms of momentum p_i traverses a highly detuned laser beam whose intensity is modulated at frequency ω . The momentum distribution of the outgoing atomic beam exhibits sidebands at momenta $p_f = p_i \sqrt{1 + n\hbar\omega (2m/p_i^2)}$, where n is an integer.

The physics of atomic interferometry experiments is often close to the classical limit, in the sense that the atomic de Broglie wavelength, although longer than the wavelength of light, remains much smaller than the other characteristic lengths of the system, such as the dimensions of the potential. In this regime the experimental results lend themselves readily to a semiclassical analysis [6, 7, 8]. Such an approach provides more physical insight than can be obtained by a numerical integration of the Schrödinger equation.

The semiclassical limit of quantum mechanics $\hbar \rightarrow 0$ is analogous to the short wavelength limit of electromagnetism. Just as the propagation of electromagnetic waves can be described in terms of optical rays, the evolution of quantum states can be described in terms of classical paths. In each case a family of trajectories is required to describe the physics. In quantum mechanics the multiplicity of the trajectories arises from the uncertainty principle, since for each state variable whose value is precisely determined, there exists a conjugate variable whose value is entirely unknown. Representing a quantum state semiclassically therefore requires an ensemble of classical particles possessing all possible values of the conjugate variables.

The phase of the electromagnetic field at a given point is determined by the optical path length of the ray which passes through that point. Similarly, the phase of the quantum wavefunction at a given point is determined by the action, in units of \hbar , along the classical path which reaches that point. The amplitude of both the electromagnetic field and the quantum

wavefunction depends not on a single trajectory, but on the family of trajectories. Except in the vicinity of focal points or ‘caustics’, the amplitude is proportional to the square root of the path density. In geometrical optics, we approximate the intensity of the electromagnetic field by the density of optical rays, and hence the amplitude of the field by the square root of the ray density. Similarly, in quantum mechanics, using the Wentzel Kramers Brillouin (WKB) method, we approximate the wavefunction amplitude by the square root of the density of classical trajectories. Interference occurs at points reached by two or more paths, and the solution is obtained by summing the contributions from each.

On the envelope of a family of rays there exist caustics, where the path density diverges. The methods described above are invalid in the neighbourhood of caustics, and a more sophisticated treatment is required to obtain the correct semiclassical solution. Such a treatment, known as the uniform approximation, matches the local solution at the caustic to the WKB solution valid far from the caustic in a uniform manner.

The same approach can be used for the scattering problem considered in this article, although the calculation must be applied to the energy distribution of the atoms rather than to their wavefunction. We consider an ensemble of classical particles which enter the potential well with identical energy and constant flux. The energy with which each particle leaves the potential is obtained by calculating the particle’s trajectory across the potential according to the classical equations of motion. The final energy is a function of the time at which the particle entered the potential, and may classically adopt any value in a continuous bounded range, with probability distribution $P(E_f)$ (see Figure 2). Note that the distribution $P(E_f)$ contains caustics at the limits of the classically permitted range of energies. The discrete structure of the quantum mechanical spectrum $\Omega(E_f)$ results from interference among the trajectories which exit the potential at times separated by multiples of a period $2\pi/\omega$. The presence of sidebands in the classically forbidden energy range is a quantum effect analogous to tunnelling. Using a periodic form of the uniform approximation, the exact spectrum can be approximated in the semiclassical limit to a very high degree of accuracy, both in the classically allowed and classically forbidden energy ranges.

An excellent review of semiclassical methods in quantum mechanics is given by Berry and Mount [6]. The application of semiclassical techniques to quantum systems dates back to 1926, when Wentzel [9] and Brillouin [10] independently obtained an approximation for the energy eigenstates of the time-independent Schrödinger equation. It consisted of a sum of counter-propagating solutions, whose phase depended on the classical action, and whose amplitude contained the factor $|p(x)|^{-1/2}$, where $p(x)$ is the local value of the classical momentum. This factor can be interpreted as the square root of the density of a stream of particles of constant flux. The approximation is valid everywhere except in the neighbourhood of the classical turning points of the potential, where the momentum vanishes and the classical density diverges. By calculating the local solution about the turning points, Kramers [11] obtained the relative phase with which the left- and right-propagating solutions must be summed. Using a local approximation he also estimated the value of the exponentially decreasing solution in the forbidden region beyond the turning point, where the potential energy exceeds the total energy of the system.

A more general method for obtaining the relative complex amplitudes of the various WKB solutions was invented by Zwaan [12, 13]. By means of his ‘complex method’, regions on opposite sides of turning points are joined by a path in the complex position plane which lies far enough from the turning points for the WKB solutions to remain valid along it. The matching conditions obtained are often sufficient to determine the relative weights and phase

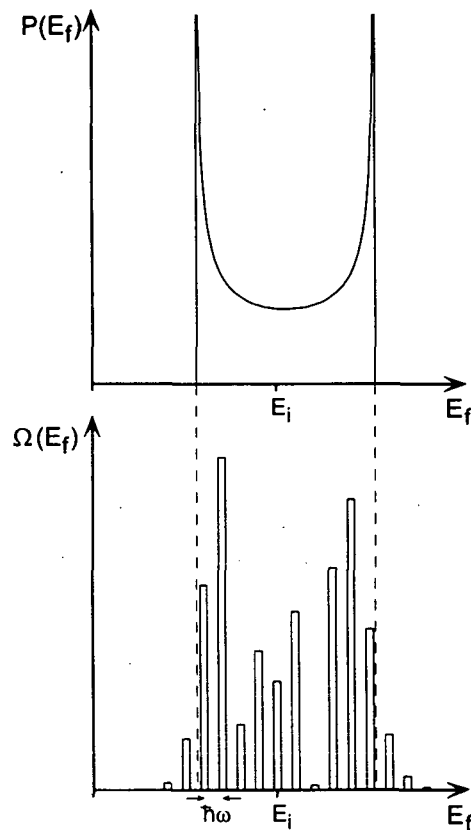


Figure 2: Classically, the final energy of the atoms may fall anywhere within a certain continuous range, with a probability distribution given by $P(E_f)$. The quantum mechanical energy spectrum $\Omega(E_f)$ is however composed of discrete components separated from the initial energy E_i by multiples of $\hbar\omega$. The intensity of the sidebands decays exponentially outside the classically allowed range (the boundaries of which are indicated by dashed lines).

factors with which the solutions in each region must be summed. The method however gives no information about the solution in the neighbourhood of turning points.

In the case of time-dependent problems, Dirac [14] demonstrated that the quantum mechanical probability distribution (the modulus squared of the wavefunction) obeys an evolution equation which, in the semiclassical limit, is analogous to the continuity equation for a compressible fluid.

The WKB method was generalised to other configuration spaces in 1928 by Van Vleck [15]. The analogue of turning points in this more general context is caustics, where the density of classical paths diverges. Like the standard WKB approximation, Van Vleck's method fails at such points, where it predicts an infinite amplitude.

Feynman's publication of his path integral formulation of quantum mechanics in 1948 sparked a renewed interest in semiclassical methods. The predominant role of the classical trajectories appears explicitly in Feynman's formulation: The phase associated with each trajectory equals the classical action in units of \hbar . Constructive interference therefore occurs

in the path integral only in the neighbourhood of those paths for which the action is stationary, namely the classical trajectories. Morette [16] was the first to reproduce Van Vleck's results starting from a path integral approach (see also Papadopoulos [17]). Like the WKB approximation, this approach fails in the neighbourhood of caustics. The phase change of the solution across a caustic (analogous to the phase change between the incident and reflected terms in the standard WKB method) can be determined by appealing to the Morse theorem of the calculus of variations [18, 19]. The phase is described by an integer known as the Morse index (or Maslov index) which changes only when a trajectory traverses a caustic. The Morse index for wavefunctions increases by one at each caustic. In generalising the theory to alternative configuration spaces, Levit *et al.* [20] have shown that the index change depends on the sign of the second derivatives of the Hamiltonian at the caustic.

A semiclassical solution which remains valid in the neighbourhood of a caustic can be obtained by the method of uniform approximation. The method was developed using two complementary approaches. The first, established by Miller and Good [21] and Dingle [22], and applicable to time-independent problems, is an extension of the standard WKB method, in which the Schrödinger equation is replaced by a simpler equation, which possesses the same turning point structure, but whose solutions are known exactly. The second method, due to Chester *et al.* [23] and Berry [24], is derived from an integral formulation, and is useful for time-dependent systems and scattering problems. The quantity to be calculated is written as an integral over an oscillatory field, analogous to the Huygens-Fresnel sum-of-wavelets representation. A general method for finding such integral expressions has been given by Maslov [25]. The largest contribution to the integral arises from the neighbourhood of points at which the phase is stationary. By a judicious choice of integration variable, the phase can be written in one of several standard forms, in such a way as to preserve the structure of the stationary phase points. The possible standard forms have been classified by Thom [26], and constitute a branch of topology known as catastrophe theory. An approximation is made for the amplitude of the integrand, which is exact at the stationary phase points, and which allows the integral to be calculated analytically. The solutions obtained depend, like the generalised WKB expressions, only on properties of the classical trajectories of the system, namely the classical action and the path density. The uniform approximation can be applied both in the classically allowed regions of configuration space, and in the forbidden zones, where the classical trajectories are complex.

In this article we apply the various semiclassical approximations described above to the scattering of particles from a one-dimensional potential well modulated periodically in time. For simplicity we consider a simple sinusoidal modulation

$$V(x, t) = V_0(x) [1 - \sin(\omega t)], \quad (1)$$

although the analysis can easily be generalised to treat higher harmonics. The spatial profile $V_0(x)$ is localised, and we shall assume it to be Gaussian

$$V_0(x) = -\frac{V}{2} e^{-x^2/2\sigma^2}, \quad (2)$$

where the constant V is positive. The system is characterised by three independent parame-

ters, which can be written in dimensionless form as

$$\hat{V} \equiv \frac{Vm}{p_i^2} \quad (3a)$$

$$\hat{\omega} \equiv \frac{\hbar\omega m}{p_i^2} \quad (3b)$$

$$\hat{\sigma} \equiv k\sigma, \quad (3c)$$

where

$$k \equiv \frac{\omega m}{p_i}. \quad (4)$$

\hat{V} and $\hat{\omega}$ are respectively the potential depth and the energy difference between adjacent sidebands, expressed in units of twice the particle's initial kinetic energy. $\hat{\sigma}$ is the width of the potential in units of $1/k$, where $\hbar k = \delta p$ is the elementary momentum spacing (the momentum difference between adjacent sidebands to first order in $\hat{\omega}$). To be useful as a beamsplitter, the parameters \hat{V} , $\hat{\omega}$ and $\hat{\sigma}$ must be optimised so as to maximise the transfer of atoms into selected sidebands.

The article is organised as follows: Section 1 defines quantum propagators in the configuration spaces of interest, and presents the WKB expression for each. Section 2 discusses the application of the WKB propagators to the calculation of the sideband weights. In Section 3 the sideband weights are obtained by the method of uniform approximation, first using the standard fold-caustic uniform approximation, in which each caustic is treated independently, and then using a more appropriate periodic uniform approximation, in which all the caustics are treated simultaneously. To take advantage of the temporal periodicity of the potential, we analyse the energy spectrum of the atoms at a fixed position beyond the potential. For simplicity therefore we assume that classically all the atoms are transmitted. Provided however that the potential is not sufficiently deep for classical chaos to occur, the methods should in principle be suitable for treating the situation in which there is a significant reflected component. The results obtained using the periodic uniform approximation agree very well with the exact quantum mechanical predictions in the semiclassical limit.

1 Quantum propagators and their WKB approximations

A quantum propagator expresses the probability amplitude that a particle starting from a given initial point will reach a certain final point. The points may be space-time points, as in the case of the standard Feynman propagator, or they may be points in a more general configuration space. To treat the problem of the modulated potential well discussed in the introduction, we shall find it useful to introduce energy-dependent propagators.

Van Vleck's generalised form of the WKB approximation [15] provides a practical method of calculating the propagators in the semiclassical limit using purely classical quantities. While the dynamics of the system are determined by the rules of classical mechanics, the quantum effects are introduced through the superposition principle.

1.1 The standard Feynman propagator

In Section 1.1.1 we define the Feynman propagator [27] and review certain of its properties which will be used in the following sections. In Section 1.1.2 a semiclassical expression for

the propagator is obtained using a time-dependent form of the WKB method.

1.1.1 Definition and review

The Feynman propagator $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$ is the Green's function for the Schrödinger equation

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_f^2} + V(x_f, t_f) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t_f} \right) K(x_f, t_f; x_i, t_i) = -i\hbar \delta(t_f - t_i) \delta(x_f - x_i), \quad (5)$$

and expresses the probability amplitude of finding a particle at position x_f at the final time t_f , given that it was at position x_i at the initial time t_i . It can therefore be written in terms of the evolution operator $U(t_f, t_i)$ as

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \begin{cases} \langle x_f | U(t_f, t_i) | x_i \rangle & \text{for } t_f > t_i \\ 0 & \text{for } t_f < t_i \end{cases} \quad (6)$$

With respect to the initial coordinates x_i and t_i , the Feynman propagator satisfies the following equation

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V(x_i, t_i) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t_i} \right) K(x_f, t_f; x_i, t_i) = -i\hbar \delta(t_f - t_i) \delta(x_f - x_i). \quad (7)$$

Using the path integral formulation, $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$ can be expressed as a sum of contributions from all possible paths $x(t)$ connecting the initial and final points

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int_{(x_i, t_i)}^{(x_f, t_f)} \mathcal{D}[x(t)] e^{iS[x(t)]/\hbar}, \quad (8)$$

where the notation $\mathcal{D}[x(t)]$ signifies functional integration, and $S[x(t)]$ is the action along the path $x(t)$ between (x_i, t_i) and (x_f, t_f)

$$S[x(t)] \equiv \int_{t_i}^{t_f} dt \mathcal{L}[x(t), \dot{x}(t), t] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \frac{1}{2} m [\dot{x}(t)]^2 - V[x(t), t] \right\}. \quad (9)$$

1.1.2 Semiclassical value of the propagator

In the classical limit, where $S[x(t)] \gg \hbar$, the phase of the integrand in expression (8) generally varies very rapidly among neighbouring paths $x(t)$. Destructive interference occurs everywhere except in the neighbourhood of the classical trajectories, for which the action is extremal. It is the neighbourhood of the classical trajectories therefore which make the largest contribution to the integral (8), and which principally determine the value of the propagator. This is clear in the trivial example of the free particle, for which the Feynman propagator can be calculated exactly,

$$K_{\text{free}}(x_f, t_f; x_i, t_i) = (2i\pi\hbar)^{-1/2} \sqrt{\frac{m}{t_f - t_i}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m(x_f - x_i)^2}{2(t_f - t_i)} \right], \quad (10)$$

$i^{-1/2}$ denoting the branch $e^{-i\pi/4}$. The phase of the propagator (10) is exactly $1/\hbar$ times the action along the classical trajectory

$$S[x_{\text{free}}(t)] = \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{m}{2} \left(\frac{x_f - x_i}{t_f - t_i} \right)^2 = \frac{m}{2} \frac{(x_f - x_i)^2}{(t_f - t_i)}. \quad (11)$$

Although in the case of the free particle there is only one classical trajectory joining the initial and final spacetime points (x_i, t_i) and (x_f, t_f) , there may in general exist more than one. Such is the case in an interferometer. The classical trajectories joining the initial and final points are known as the ‘root trajectories’ of the propagator. The reason for this terminology is that they are obtained by solving the classical equations of motion subject to the boundary conditions $(x_f, t_f; x_i, t_i)$, a process which is equivalent to finding the roots of an equation. When the problem is not analytically soluble, an initial value for the momentum must be guessed, and the system evolved from time t_i to time t_f according to the classical equations of motion. The value obtained for the final position is then compared with the required value x_f , and used to refine the initial guess by means of a numerical root-finding procedure.

The root trajectories of the Feynman propagator will be denoted by Γ , and the classical action associated with each by $S_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i)$. Provided that the root trajectories are sufficiently well separated (in a sense we shall define later), the value of the propagator in the semiclassical limit consists of a discrete sum of contributions from each

$$K_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, t_i) = \sum_{\Gamma} A_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i) e^{iS_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i)/\hbar}. \quad (12)$$

Because the contributions from the various root trajectories are complex, interference occurs among them. The semiclassical amplitude $A_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i)$ can be obtained up to an overall phase using a time-dependent form of the WKB method (see Appendix A.1), and equals

$$A_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i) = (2i\pi\hbar)^{-1/2} \left[\left(\frac{\partial p_i^\Gamma}{\partial x_f} \right)_{t_f, x_i, t_i} \right]^{1/2}, \quad (13)$$

where the partial derivative expresses the variation of the initial momentum required for a change in the final position, with the parameters t_f , x_i and t_i held constant. The correct branch of the square root is usually specified by writing the phase explicitly in terms of an integer known as the ‘Maslov index’ ν_Γ . Since the partial derivative can in general be either positive or negative, the phase can adopt one of four values, hence

$$A_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i) = (2i\pi\hbar)^{-1/2} \left| \left(\frac{\partial p_i^\Gamma}{\partial x_f} \right)_{t_f, x_i, t_i} \right|^{1/2} e^{-i\nu_\Gamma\pi/2}. \quad (14)$$

The semiclassical amplitude $A_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i)$ has a simple interpretation in terms of a classical path density. Recalling expression (6), we may regard the Feynman propagator as the wavefunction $\psi(x_f, t_f)$ corresponding to the quantum state $|\psi(t_f)\rangle = U(t_f, t_i)|x_i\rangle$. In the semiclassical limit, this quantum state may be associated with a classical ensemble of particles whose positions and momenta vary with time according to the classical equations of motion. Since at the initial time t_i the quantum state has a precisely defined position but completely indeterminate momentum, the appropriate classical ensemble is a set of particles which initially have identical positions x_i and uniformly distributed momenta (see the left-hand diagram of Figure 3). After evolution to the final time t_f , the positions and momenta of the particles will have changed, as indicated in the right-hand diagram of Figure 3. Note that, for certain ranges of position, multiple root trajectories may exist. This is illustrated in Figure 3 by the region between the dashed lines, in which there are three root trajectories, Γ , Γ' and Γ'' , for each value of x_f .

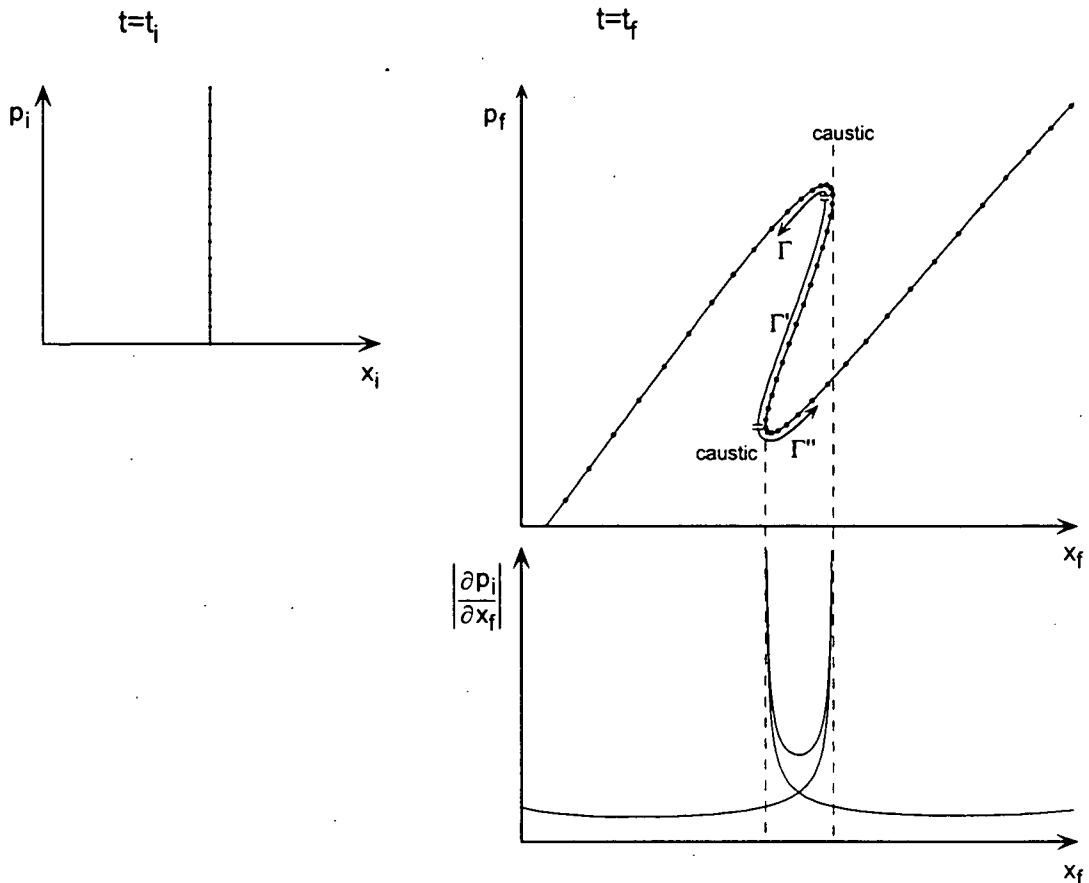


Figure 3: The classical ensemble as prepared at the initial time t_i , and after evolution to a later time t_f . The ensemble density $|\partial p_i / \partial x_f|$ is obtained by projection onto the position axis.

Consider first however a range of final positions over which only one root trajectory exists. The classical density of particles in such a region is obtained by projecting the ensemble in phase space onto the position axis, as shown in the lower diagram of Figure 3. An expression for the density can be obtained as follows. Since the particles initially have uniformly distributed momenta, their spacing at the final time is simply proportional to $|\partial x_f / \partial p_i|$, where the variables x_i , t_i and t_f are held constant. The density $\rho(x_f)$ is the reciprocal of the particle spacing, that is

$$\rho(x_f) \propto \left| \left(\frac{\partial p_i}{\partial x_f} \right)_{t_f, x_i, t_i} \right|. \quad (15)$$

In regions where multiple root trajectories Γ exist, a classical density $\rho^\Gamma(x_f) \propto |\partial p_i^\Gamma / \partial x_f|$ may be associated with each (see the lower diagram of Figure 3 in the region between the dashed lines). Since this partial derivative appears to the power of one half in expression (14) for the semiclassical amplitude, it is valid to interpret A_Γ as the square root of the classical path density. In practice $\rho^\Gamma(x_f)$ can be obtained by linearising the equations of motion about the root trajectory (see Appendix B).

Note that the various branches Γ , Γ' and Γ'' of the phase space diagram Figure 3 are separated by caustics, points at which the phase space curve becomes vertical and the particle density diverges. This results in divergences in the semiclassical amplitude $A_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i)$. Except in the case of systems with Lagrangians which are of at most quadratic order in x and \dot{x} , such as the free particle and the harmonic oscillator, such divergences are unphysical. The WKB expression (14) for the propagator is therefore invalid in the neighbourhood of caustics.

1.1.3 Maslov indices

The generalised WKB method outlined in Section 1.1.2 and detailed in Appendix A.1 can be used to predict the magnitude of the semiclassical amplitude A_Γ , but not its phase. It can be shown however [20, 28] that the phase of A_Γ depends on the sign of $\partial p_i^\Gamma / \partial x_f$, as indicated in expression (13). This sign can be determined from the phase space diagram (see Figure 3). Since the value of p_i increases monotonically along the phase space curve (at a rate indicated by the proximity of the dots), the sign of $\partial p_i^\Gamma / \partial x_f$ changes on traversing a caustic. The sign is however not sufficient in itself to determine the Maslov index ν_Γ , since it is the square root of $\partial p_i^\Gamma / \partial x_f$ which appears in the expression for A_Γ . The Maslov index can be obtained in two different ways. The first, described by Campolieti *et al.* [29], is to trace the evolution of the system along the appropriate root trajectory. Letting x denote the position of the particle at time t , where t increases from t_i to t_f , it can be shown that each time the root trajectory passes through a caustic, that is, each time the value of $(\partial p_i^\Gamma / \partial x)_{t, x_i, t_i}$ changes sign, the Maslov index ν_Γ increases by 1. The final value of the Maslov index on a given root trajectory can therefore be obtained simply by counting the number of caustics through which it passed during the evolution.

Phase changes arising from passage through foci are familiar phenomena in optics. The phase of a light beam changes by $-\pi/2$ on passage through a one-dimensional focus (a focal line), and by $-\pi$ on passage through a two-dimensional focus (a focal point).

Rather than by studying the entire evolution of a single root trajectory, the Maslov indices can be found by examining the phase space diagram at the final time. The change in the Maslov index between adjacent branches can be found by making a local approximation to the phase space diagram about the caustic. The caustics of Figure 3 are simple ‘fold caustics’, and can be approximated locally by parabolae, $x_f - x_c \propto \pm (p_f - p_c)^2$, for some p_c and x_c . In such cases the wavefunction can be expressed locally in terms of an Airy function (see Section 1.2.6). By matching the Airy function to the WKB solution far from the caustic, a phase difference of $\pi/2$ between the two branches is found.

1.1.4 Example: the free particle

In the case of the free particle there exists only one possible classical trajectory Γ_{free} linking the initial and final points (x_i, t_i) and (x_f, t_f) . The momentum of the particle remains constant along this trajectory, and equals

$$p_i^{\Gamma_{\text{free}}} = m \frac{x_f - x_i}{t_f - t_i}. \quad (16)$$

We have already demonstrated in equation (11) that the phase of the quantum propagator for a free particle is given exactly by its semiclassical value, namely the action along the classical

path in units of \hbar . It remains to compare the amplitude of the quantum propagator with its semiclassical approximation. By substituting the value of the derivative

$$\left(\frac{\partial p_i^{\Gamma_{\text{free}}}}{\partial x_f}\right)_{t_f, x_i, t_i} = \frac{m}{t_f - t_i} \quad (17)$$

into the expression (14) for the semiclassical amplitude, and taking $\nu_{\text{free}} = 0$ since no caustics are encountered during the evolution, we obtain

$$A_{\text{free}}(x_f, t_f; x_i, t_i) = (2i\pi\hbar)^{-1/2} \sqrt{\frac{m}{t_f - t_i}}, \quad (18)$$

which equals the amplitude of the exact quantum propagator (10).

Figure 4 shows the position-momentum phase space plot representing the free evolution of a position eigenstate. At the initial time the particles of the classical ensemble have identical position x_i but uniformly distributed momenta. As time evolves the diagram shears, the particles with higher momentum traveling farther. The classical particle density, obtained by projecting the ensemble onto the position axis, is constant.

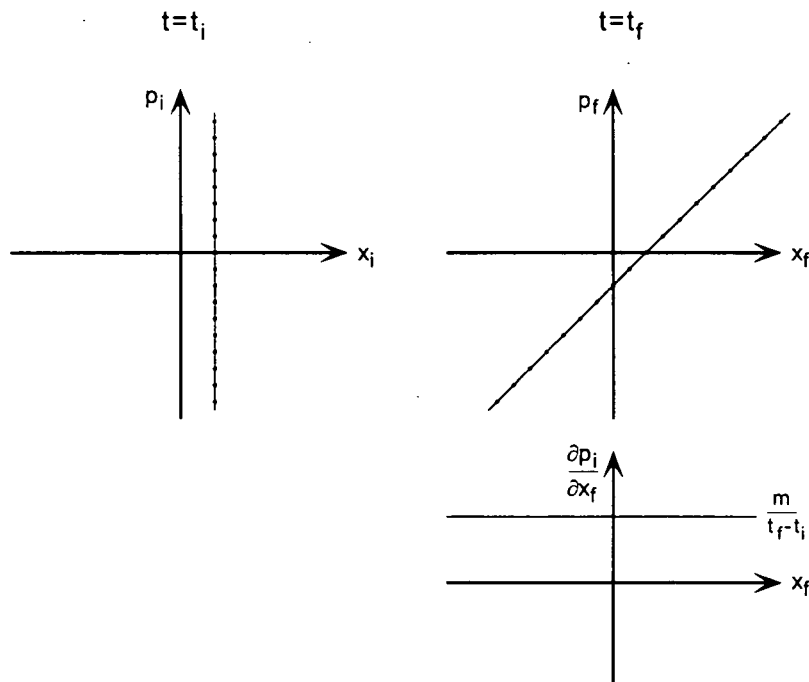


Figure 4: Phase space plots showing the free evolution of a position eigenstate. The classical particle density $|\partial p_i / \partial x_f|$ is obtained by projecting the ensemble onto the position axis.

1.2 Energy-dependent propagators

In this article we wish to analyse the system described in the introduction involving a beam of atoms which interact with a temporally modulated potential. The Feynman propagator is not directly applicable to this problem, since it describes the evolution of a particle which

is initially localised in position. The situation of interest is rather that of a particle whose energy ahead of the potential is well defined. Moreover, it is useful also to know not only the wavefunction of the atoms after interaction, but also their energy spectrum. For this purpose we shall introduce propagators which depend explicitly on initial and final energy [27].

1.2.1 Definitions

The two energy-dependent propagators we shall use are given by Fourier transforms of the standard Feynman propagator with respect to time

$$\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dt_i K(x_f, t_f; x_i, t_i) e^{-iE_i t_i/\hbar} \quad (19a)$$

$$\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i) \equiv \frac{1}{2\pi\hbar} \int dt_f \int dt_i K(x_f, t_f; x_i, t_i) e^{-i(E_i t_i - E_f t_f)/\hbar}. \quad (19b)$$

Note that since $K(x_f, t_f; x_i, t_i) = 0$ for $t_f < t_i$, the integral over t_i effectively runs from $-\infty$ to t_f . We now discuss the interpretation of these propagators by considering specific situations. Initially we treat the case of a stationary potential. We then discuss time-dependent potentials, making two simplifications appropriate to our system, first that the potential is localised in space, and second that it is periodic in time. This allows us to write an expression for the sideband weights of the transmitted beam in terms of the propagator $\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$. Finally we obtain semiclassical expressions for the energy-dependent propagators analogous to that of the Feynman propagator (12).

1.2.2 Case of a stationary potential

In the case where the potential is independent of time, the propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$ is a Green's function of the time-independent Schrödinger equation for energy E . This can be shown by taking Fourier transforms of equations (5) and (7) with respect to time. With respect to the final position x_f , the propagator satisfies the equation

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_f^2} + V(x_f) - E \right) \tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E) = \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} \delta(x_f - x_i) e^{-iEt_f/\hbar}, \quad (20)$$

and with respect to the initial position it obeys

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V(x_i) - E \right) \tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E) = \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} \delta(x_f - x_i) e^{-iEt_f/\hbar}. \quad (21)$$

As an example, consider the case of the free particle. The value of the propagator is then

$$\tilde{K}_{\text{free}}(x_f, t_f; x_i, E) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{m}{2E}} e^{-iEt_f/\hbar} e^{i\sqrt{2mE}(x_f-x_i)/\hbar} & \text{for } x_f \geq x_i \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{m}{2E}} e^{-iEt_f/\hbar} e^{-i\sqrt{2mE}(x_f-x_i)/\hbar} & \text{for } x_f < x_i \end{cases} \quad (22)$$

For $x_f > x_i$ it describes a particle travelling to the right with velocity $\sqrt{2E/m}$, and for $x_f < x_i$ a particle travelling to the left with velocity $-\sqrt{2E/m}$.

Now consider the propagator $\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$. Since the evolution operator for a stationary potential is a function of the time difference only $U(t_f, t_i) = U(t_f - t_i)$, the propagator

$\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ has a delta function dependence on energy

$$\begin{aligned}\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt_f \int_{-\infty}^{t_f} dt_i \langle x_f | U(t_f - t_i) | x_i \rangle e^{-i(E_i t_i - E_f t_f)/\hbar} \\ &= \delta(E_f - E_i) \int_0^{\infty} d\Theta \langle x_f | U(\Theta) | x_i \rangle e^{iE_i \Theta/\hbar}.\end{aligned}\quad (23)$$

This reflects the fact that the energy of a particle does not change in a stationary potential.

1.2.3 Case of a time-dependent localised potential

The situation of interest in this article is that of a time-dependent potential which is localised in space. The initial position x_i is chosen to lie on the left of the potential and the final position x_f on the right.

For all x_i to the left of the potential the propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ satisfies the equation

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - E_i\right) \tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i) = \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} \delta(x_f - x_i) e^{-iE_i t_f/\hbar}.\quad (24)$$

Since x_f lies to the right of the potential, the propagator must describe a particle which leaves the initial position x_i with positive velocity and traverses the potential. The appropriate solution of (24) is therefore

$$\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i) = \tilde{K}(x_f, t_f; E_i) e^{-i\sqrt{2mE_i}x_i/\hbar},\quad (25)$$

where the negative sign in the exponent arises from the fact that x_i occupies the 'ket' position rather than the 'bra' position in the propagator.

Now consider the propagator $\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i)$. For all x_i to the left of the potential and all x_f to the right of it we have

$$\begin{aligned}\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_f^2} - E_f\right) \tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) &= -i\hbar \delta(x_f - x_i) \delta(E_f - E_i) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - E_i\right) \tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) &= -i\hbar \delta(x_f - x_i) \delta(E_f - E_i).\end{aligned}\quad (26)$$

The propagator must describe a particle which leaves the initial position with positive velocity, traverses the potential, and arrives at the final position also with positive velocity. The appropriate solution of (26) is therefore

$$\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) = \tilde{K}(E_f; E_i) e^{i(\sqrt{2mE_f}x_f - \sqrt{2mE_i}x_i)/\hbar}.\quad (27)$$

The above expression suggests that the propagator $\tilde{K}(E_f; E_i)$ may be interpreted as the probability amplitude for a particle to exit the potential on the right with velocity $\sqrt{2E_f/m}$, given that it approached the potential from the left with velocity $\sqrt{2E_i/m}$. A further relation can be obtained which corroborates this interpretation. Suppose a wavepacket with a narrow momentum distribution $\tilde{\psi}(p, t)$ is incident on the potential from the left. Letting t_i denote a

time before the interaction, and t_f a time after the interaction, we can express the momentum distribution of the transmitted wavepacket as

$$\bar{\psi}(p_f, t_f) = \sqrt{\frac{2E_f}{m}} e^{-iE_f t_f/\hbar} \int dE_i e^{iE_i t_i/\hbar} \tilde{\tilde{K}}(E_f; E_i) \bar{\psi}(\sqrt{2mE_i}, t_i). \quad (28)$$

where $p_f = \sqrt{2mE_f}$. The above expression follows from equations (237) and (240) of Appendix C, and relates the momentum distribution of the transmitted wavepacket to that of the incident wavepacket. The propagator $\tilde{\tilde{K}}(E_f; E_i)$ plays the role of a transition amplitude between momentum components $p_i = \sqrt{2mE_i}$ and $p_f = \sqrt{2mE_f}$. It is in this capacity that we shall use it to analyse the modulated potential well described in the introduction.

1.2.4 Case of a temporally periodic potential

It is easy to show that for a temporally periodic potential such as (1) the propagator $\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ is a discrete function of energy. Using the definition (19b) and writing $\Theta = t_f - t_i$ and $\bar{t} = (t_f + t_i)/2$, we obtain

$$\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\bar{t} \int d\Theta K(x_f, \bar{t} + \Theta/2; x_i, \bar{t} - \Theta/2) e^{i(E_f - E_i)\bar{t}/\hbar} e^{-i(E_f + E_i)\Theta/2\hbar}. \quad (29)$$

Since the potential is temporally periodic, $K(x_f, \bar{t} + \Theta/2; x_i, \bar{t} - \Theta/2)$ is periodic in \bar{t} , and hence $\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ can be expressed as a comb of delta functions

$$\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i) = \sum_n \tilde{\tilde{K}}_n(x_f; x_i, E_i) \delta(E_f - E_i - n\hbar\omega), \quad (30)$$

where ω is the modulation frequency. Thus energy is transferred to the system in multiples of $\hbar\omega$. For all x_i to the left of the potential and all x_f to the right of it, we can express $\tilde{\tilde{K}}_n(x_f; x_i, E_i)$ as

$$\tilde{\tilde{K}}_n(x_f; x_i, E_i) = \tilde{\tilde{K}}_n(E_i) e^{i(\sqrt{2m(E_i + n\hbar\omega)}x_f - \sqrt{2mE_i}x_i)/\hbar}. \quad (31)$$

The goal in this article is to calculate the proportion of atoms which absorb a given number of quanta n on traversing the periodic potential (1) defined in the introduction. This proportion, which we refer to as the weight of the n th sideband, can be expressed in terms of $\tilde{\tilde{K}}_n(E_i)$ as follows.

Each incident atom is modelled as a wavepacket with a very narrow momentum distribution centred about $p_i = \sqrt{2mE_i}$. The interaction with the potential splits the wavepacket into a transmitted and a reflected component. If the atom is transmitted, its momentum is measured by a detector placed to the right of the potential. The momentum distribution of the atoms, as measured by the detector, exhibits sidebands centred about the momentum values $p_f = \sqrt{2m(E_i + n\hbar\omega)}$, the width of each sideband depending on the ratio p_f/p_i and on the width of the initial momentum distribution. The weight of the n th sideband is defined as the probability that the momentum of an atom will fall in the range occupied by the n th

sideband, in the limit that the width of the initial momentum distribution tends to zero. It is calculated in Appendix C, and equals

$$I_n = \frac{2}{m} \sqrt{E_i(E_i + n\hbar\omega)} \left| \tilde{K}_n(E_i) \right|^2. \quad (32)$$

In practice the initial momentum distribution of the atoms will always have a finite width Δp_i . In order to be able to define the probability of detecting the atom in the n th sideband, it is necessary that Δp_i be sufficiently small that the sidebands do not overlap. This requirement can be written as

$$\Delta p_i \ll \sqrt{\frac{m}{2E_i}} \hbar\omega. \quad (33)$$

As long as condition (33) is satisfied, expression (32) then remains a good approximation to the probability of detecting an atom in the n th sideband provided the value of $\left| \tilde{K}_n(E_i) \right|$ varies little over the width of the initial momentum distribution.

1.2.5 Semiclassical values of the propagators

Substituting the path integral formulation (8) of the Feynman propagator into definition (19a), we obtain an exact expression for $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ as a sum over paths

$$\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{t_f} dt_i \int_{(x_i, t_i)}^{(x_f, t_f)} \mathcal{D}[x(t)] e^{i\{S[x(t)] - E_i t_i\}/\hbar}. \quad (34)$$

In the semiclassical limit this integral is dominated by trajectories for which the phase is stationary. Defining a ‘generalised’ action

$$\tilde{S}[x(t)] \equiv S[x(t)] - E_i t_i, \quad (35)$$

we identify the paths of stationary phase as the solutions of $\delta\tilde{S}[x(t)] = 0$, where $\delta\tilde{S}[x(t)]$ is the first order change in $\tilde{S}[x(t)]$ due to a perturbation $\delta x(t)$ of the trajectory,

$$\delta\tilde{S} = -E_i \delta t_i + \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \delta x(t) \right]_{t_i}^{t_f} - \mathcal{L}(t_i) \delta t_i + \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \right] \delta x(t). \quad (36)$$

To evaluate $\delta\tilde{S}$, we note that the final time t_f is fixed by the boundary conditions, as is the final position $x(t_f) = x_f$. Hence $\delta x(t_f) = 0$. The initial position x_i is fixed, although the initial time t_i is perturbed by δt_i . To zeroth order in the perturbation therefore we have $x(t_i) = x_i$, and to first order

$$\delta x(t_i) + \dot{x}(t_i) \delta t_i = 0. \quad (37)$$

Using the above relation, and replacing $\partial \mathcal{L}(t_i)/\partial \dot{x} = p(t_i)$, the bracketed term of (36) can be simplified as follows

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \delta x(t) \Big|_{t_i}^{t_f} - \mathcal{L}(t_i) \delta t_i = [p(t_i) \dot{x}(t_i) - \mathcal{L}(t_i)] \delta t_i = \mathcal{H}(t_i) \delta t_i, \quad (38)$$

where $\mathcal{H} = p\dot{x} - \mathcal{L}$ is the Hamiltonian of the system. The first two terms of (36) will therefore cancel provided

$$\mathcal{H}(t_i) = E_i, \quad (39)$$

that is, provided the initial energy on the trajectory equals E_i . The integrand of the third term will vanish if the trajectory satisfies the Euler Lagrange equations (the classical equations of motion). Hence, in conclusion, the trajectories $\tilde{\Gamma}$ for which the generalised action $\tilde{S}[x(t)]$ is stationary are classical trajectories whose initial energy is E_i . The generalised action $\tilde{S}[x(t)]$ on $\tilde{\Gamma}$ is a Legendre transform of the classical action

$$\tilde{S}[x_{\tilde{\Gamma}}(t)] = \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) \equiv S_{\Gamma}(x_f, t_f; x_i, t_i^{\tilde{\Gamma}}) - E_i t_i^{\tilde{\Gamma}}, \quad (40)$$

where $t_i^{\tilde{\Gamma}}$ denotes the initial time of the trajectory $\tilde{\Gamma}$.

The semiclassical value of the propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ is a sum of contributions from all the root trajectories $\tilde{\Gamma}$

$$\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E_i) = \sum_{\tilde{\Gamma}} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) e^{i\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i)/\hbar}, \quad (41)$$

where the semiclassical amplitude $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ can be calculated by a generalised WKB method (see Appendix A.2.1), and equals

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \left[\frac{m^2}{p_i^{\tilde{\Gamma}} p_f^{\tilde{\Gamma}}} \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial t_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \right]^{1/2}, \quad (42)$$

$p_i^{\tilde{\Gamma}}$ and $p_f^{\tilde{\Gamma}}$ denoting the initial and final momenta of $\tilde{\Gamma}$. Writing the phase of $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}$ explicitly in terms of a Maslov index $\tilde{\nu}_{\tilde{\Gamma}}$, we have

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \left| \frac{m^2}{p_i^{\tilde{\Gamma}} p_f^{\tilde{\Gamma}}} \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial t_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \right|^{1/2} e^{-i\tilde{\nu}_{\tilde{\Gamma}}\pi/2}. \quad (43)$$

The semiclassical amplitude can be interpreted in the following manner as the square root of a classical density. The propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ denotes the wavefunction of a quantum state which can be represented by a classical ensemble of particles emitted from the position x_i with energy E_i and constant flux (see Figure 5). The spacing between the particles at the final time t_f is therefore proportional to $|\partial x_f / \partial t_i|$. The density of particles on the branch $\tilde{\Gamma}$ is the reciprocal of the particle spacing on that branch,

$$\rho^{\tilde{\Gamma}}(x_f) \propto \left| \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial x_f} \right)_{t_f, x_i, E_i} \right| = \left| \frac{m}{p_f^{\tilde{\Gamma}}} \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial t_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \right|, \quad (44)$$

where a change of variables has been made to write the density $|\partial t_i / \partial x_f|$ in terms of the flux $|\partial t_i / \partial t_f|$. The flux can be obtained directly from the phase-space diagram at $x = x_f$ by projecting the ensemble onto the time axis. In practice it is most easily calculated by linearising the classical equations of motion about the root trajectories (see Appendix B).

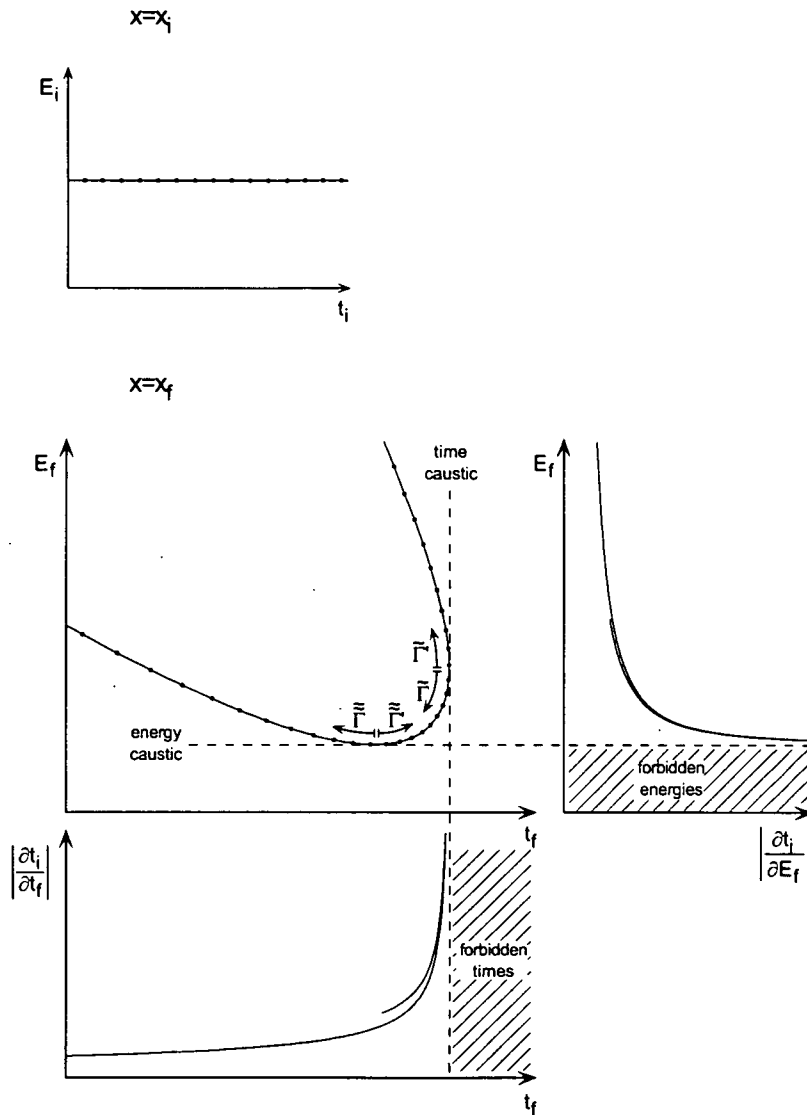


Figure 5: The classical ensemble as prepared at the initial position $x = x_i$, and after evolution to the final position $x = x_f$. The energy E_f of the particles is plotted as a function of their arrival time t_f . The flux $|\partial t_i / \partial t_f|$ at the position x_f is obtained by projection of the ensemble onto the time axis, and the energy density $|\partial t_i / \partial E_f|$ by projection onto the energy axis.

The various branches $\tilde{\Gamma}$ are separated by caustics in the flux (points at which the energy-time phase space diagram becomes vertical, and the flux diverges).

It can be shown (see Appendix A.2.1) that the proportionality factor of expression (44) contains the reciprocal of the initial velocity, $m/p_i^{\tilde{\Gamma}}$. Including this factor, and comparing $\rho^{\tilde{\Gamma}}$ with the expression (43) for the semiclassical amplitude $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}$, we see that it is valid to interpret $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}$ as the square root of the classical density. At points where the density diverges the WKB expression (41) for the propagator is invalid. These include turning points of the system (where $p_i^{\tilde{\Gamma}}$ or $p_f^{\tilde{\Gamma}}$ vanishes), and caustics in the flux $|\partial t_i^{\tilde{\Gamma}} / \partial t_f|$.

The phase of $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}$, which is written in terms of a Maslov index $\tilde{\nu}_{\tilde{\Gamma}}$ in expression (43), changes on passage through a caustic. As in the case of the Feynman propagator, the Maslov index can be calculated either from the final phase space diagram, or from the evolution of the system along the root trajectory. During the evolution, the Maslov index increases by one every time a caustic is traversed [28].

A special case of the generalised WKB approximation (41) occurs when the potential is independent of time. As mentioned in Section 1.2.2, the propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$ for a stationary potential is a Green's function of the time-independent Schrödinger equation. The semiclassical approximation $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E)$ must therefore be related to the standard WKB solutions

$$\psi_{\text{WKB}}(x_f, t_f) = e^{-iEt_f/\hbar} [p(x_f)]^{-1/2} \sum_{\pm} c^{\pm} \exp \left[\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_i}^{x_f} dx p(x) \right], \quad (45)$$

where x_i is some initial position and $p(x)$ is the local value of the classical momentum

$$p(x) = [2m(E - V(x))]^{1/2}. \quad (46)$$

We show below that on either side of the point $x_f = x_i$, where the derivative of the propagator is discontinuous, $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E)$ equals a particular linear combination of the WKB solutions (45), the coefficients c^{\pm} depending in general on the initial position x_i and the energy E .

The generalised action $\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}$ for a stationary potential is given by

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E) &= -Et_i^{\tilde{\Gamma}} + \int_{t_i^{\tilde{\Gamma}}}^{t_f} dt \left[\frac{1}{2}m [\dot{x}_{\tilde{\Gamma}}(t)]^2 - V[x_{\tilde{\Gamma}}(t)] \right] \\ &= -Et_f + \int_{x_i}^{x_f} dx p_{\tilde{\Gamma}}(x), \end{aligned} \quad (47)$$

where $x_{\tilde{\Gamma}}(t)$ is a parametrisation of the root trajectory $\tilde{\Gamma}$, and $p_{\tilde{\Gamma}}(x)$ is the corresponding momentum. For each root trajectory, $p_{\tilde{\Gamma}}(x)$ takes one of the values $\pm [2m(E - V(x))]^{1/2}$. Each trajectory thus contributes to one of the two terms in equation (45).

It remains to show that the semiclassical amplitude $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E)$ (43) agrees with that of the standard WKB solution (45). Since for a stationary potential the flux is constant

$$\left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial t_f} \right)_{x_f, x_i, E} = 1, \quad (48)$$

the semiclassical amplitude is just

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \left[\frac{m^2}{p_i^{\tilde{\Gamma}} p_f^{\tilde{\Gamma}}} \right]^{1/2}. \quad (49)$$

Note that $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}$ has the same dependence on the final coordinates as does the amplitude of the standard WKB solutions (45): both are inversely proportional to the square root of the final momentum $p_f^{-1/2}$. This factor arises since the density of a stream of particles of constant flux is inversely proportional to the particles' momentum. The propagator is thus equal to the

WKB solution, where the coefficients c^\pm contain the dependence of the propagator on the initial coordinates.

We now return to the general case of a time-dependent potential, and consider the propagator $\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i)$. A WKB approximation for this propagator can be obtained by a method analogous to that used for $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$, which gives

$$\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, E_f; x_i, E_i) = \sum_{\tilde{\Gamma}} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i) e^{i\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i)/\hbar}, \quad (50)$$

where $\tilde{\Gamma}$ are the root trajectories that start at the initial position x_i with energy E_i , and finish at the final position x_f with energy E_f . The generalised action $\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ is a double Legendre transform of the classical action

$$\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i) = S_{\Gamma} \left(x_f, t_f^{\tilde{\Gamma}}; x_i, t_i^{\tilde{\Gamma}} \right) + E_f t_f^{\tilde{\Gamma}} - E_i t_i^{\tilde{\Gamma}}, \quad (51)$$

where $t_i^{\tilde{\Gamma}}$ and $t_f^{\tilde{\Gamma}}$ are the initial and final times respectively of the trajectory $\tilde{\Gamma}$. The semi-classical amplitude $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ of each contribution in expression (50) is calculated in Appendix A.2.1, and equals

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i) = (2i\pi\hbar)^{-1/2} \left[\frac{m^2}{p_i^{\tilde{\Gamma}} p_f^{\tilde{\Gamma}}} \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \right]^{1/2}, \quad (52)$$

or equivalently,

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i) = (2i\pi\hbar)^{-1/2} \left| \frac{m^2}{p_i^{\tilde{\Gamma}} p_f^{\tilde{\Gamma}}} \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \right|^{1/2} e^{-i\tilde{\nu}_{\tilde{\Gamma}}\pi/2}. \quad (53)$$

The derivative $\left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_f} \right)_{x_f, x_i, E_i}$ is the energy density of a classical ensemble of particles which leave x_i with energy E_i and constant flux. It can be read directly off the phase space diagram at the final position $x = x_f$ by projecting the ensemble onto the energy axis (see Figure 5). The various branches $\tilde{\Gamma}$ are separated by caustics in the energy distribution, where the phase space diagram becomes horizontal, and the energy distribution diverges. Note that the branches $\tilde{\Gamma}$ do not coincide with the branches $\tilde{\Gamma}$ of the propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$.

Although the energy-dependent propagators $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ (19a) and $\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ (19b) are Fourier transforms of the Feynman propagator $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$, their WKB approximations $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ and $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ are not Fourier transforms of $K_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, t_i)$, or of each other.

1.2.6 Example: the linear potential

In this section we calculate the energy-dependent propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ and its WKB approximation for a stationary linear potential. The reason for treating the linear potential is that it is one of the simplest systems containing a caustic. Since the problem can be solved

analytically, it provides an opportunity to compare the exact value of the propagator with its WKB approximation, both in the neighbourhood of the caustic and far from the caustic. It also contains an example of a classically forbidden region of space.

Consider then the potential

$$V(x) = Fx, \quad (54)$$

where F is positive. Since the solutions for different energies differ only by a spatial displacement and an overall phase, we may restrict ourselves to the zero energy case without any loss of generality. At zero energy the turning point occurs at $x_{tp} = 0$, and the region $x > 0$ is classically forbidden. The exact solution is simply the Green's function of the time-independent Schrödinger equation, and equals

$$\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E = 0) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar}} \frac{m}{\alpha\hbar} [\text{Ai}(\alpha x_i) - i\text{Bi}(\alpha x_i)] \text{Ai}(\alpha x_f) & \text{for } x_f \geq x_i \\ \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar}} \frac{m}{\alpha\hbar} [\text{Ai}(\alpha x_f) - i\text{Bi}(\alpha x_f)] \text{Ai}(\alpha x_i) & \text{for } x_f < x_i \end{cases}, \quad (55)$$

where

$$\alpha \equiv \sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}. \quad (56)$$

Note that expression (55) is independent of t_f because the energy is chosen to be zero.

We shall now solve for the WKB solution in the classically allowed region $x_i, x_f < 0$, supposing, without loss of generality, that $x_i \leq x_f$. The propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E = 0)$ has two root trajectories, which are sketched in Figure 6. The trajectory $\tilde{\Gamma}^+$ is a direct path from x_i to x_f , and the trajectory $\tilde{\Gamma}^-$ is a reflected path, describing a particle which moves up the potential until it reaches the turning point, then reverses its direction and moves back down the potential to the point x_f .

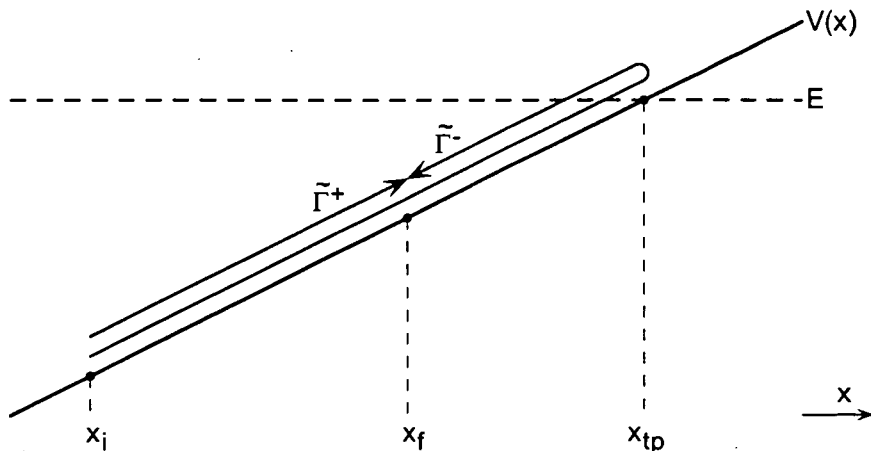


Figure 6: The two root trajectories of the propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E = 0)$. The trajectory $\tilde{\Gamma}^+$ is a direct path from x_i to x_f , and the trajectory $\tilde{\Gamma}^-$ is a reflected path, which reverses direction at the turning point x_{tp} .

The propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E = 0)$ is the wavefunction of a quantum state which can be represented by a classical ensemble of particles emitted from the initial point x_i with energy

$E = 0$ and constant flux. Since the potential is stationary, the energy of the particles does not vary during the evolution. Rather than plot an energy-time phase space diagram, as in Figure 5, it is therefore more useful to plot a momentum-position phase-space diagram (see Figure 7(a)). The dots in the diagram, which represent the particles of the classical ensemble, lie on the curve of constant energy $E = 0$, given by the equation $p_f = \pm\sqrt{-2mFx_f}$. This curve consists of two branches, $\tilde{\Gamma}^+$ and $\tilde{\Gamma}^-$. The momenta on the branch $\tilde{\Gamma}^+$ are positive, since the trajectories $\tilde{\Gamma}^+$ are direct paths from x_i to x_f . On the branch $\tilde{\Gamma}^-$ the final momenta are negative, since the trajectories $\tilde{\Gamma}^-$ have reversed direction at the turning point. In the forbidden zone $x_f > 0$ the momenta p_f are pure imaginary, as shown in Figure 7(b).

Denoting the generalised action and the semiclassical amplitude on the trajectories $\tilde{\Gamma}^\pm$ by $\tilde{S}^\pm(x_f, t_f; x_i, E)$ and $\tilde{A}^\pm(x_f, t_f; x_i, E)$ respectively, the WKB approximation for the propagator in the classically allowed zone can be written as

$$\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E) = \sum_{\pm} \tilde{A}^\pm(x_f, t_f; x_i, E) e^{i\tilde{S}^\pm(x_f, t_f; x_i, E)/\hbar}. \quad (57)$$

Using equation (47) we find that for $E = 0$ the generalised action $\tilde{S}^\pm(x_f, t_f; x_i, E)$ in the above expression is

$$\begin{aligned} \tilde{S}^+(x_f, t_f; x_i, E = 0) &= \int_{x_i}^{x_f} dx |p(x)| \\ \tilde{S}^-(x_f, t_f; x_i, E = 0) &= \int_{x_i}^0 dx |p(x)| - \int_0^{x_f} dx |p(x)|, \end{aligned} \quad (58)$$

where $p(x)$ is the classical value of the momentum at the point x , which in the allowed zone $x < 0$ equals

$$p(x) = \pm\sqrt{-2mFx}. \quad (59)$$

Evaluating the integrals in (58) gives

$$\begin{aligned} \tilde{S}^\pm(x_f, t_f; x_i, E = 0) &= \frac{2}{3}\sqrt{2mF} \left[\mp(-x_f)^{3/2} + (-x_i)^{3/2} \right] \\ &= \frac{2}{3} \left[\mp(-\alpha x_f)^{3/2} + (-\alpha x_i)^{3/2} \right]. \end{aligned} \quad (60)$$

The semiclassical amplitude $\tilde{A}^\pm(x_f, t_f; x_i, E = 0)$ is the square root of the ensemble density, obtained by projecting the phase space diagram Figure 7(a) onto the position axis. Its value can be obtained from equation (49), and equals

$$\tilde{A}^\pm(x_f, t_f; x_i, E = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{m}{2F}} \frac{1}{\sqrt[4]{x_i x_f}} e^{-i\tilde{\nu}^\pm\pi/2}. \quad (61)$$

Note that at the turning point $x_f = 0$ the semiclassical amplitudes \tilde{A}^\pm diverge. The Maslov indices $\tilde{\nu}^\pm$ can be obtained by considering the evolution of the root trajectories. Since the trajectory $\tilde{\Gamma}^+$ corresponds to direct propagation, its Maslov index equals $\tilde{\nu}^+ = 0$. The trajectory $\tilde{\Gamma}^-$ includes one reflection, and therefore has a Maslov index of $\tilde{\nu}^- = 1$. Since the change in the Maslov index depends only on the topology of the caustic, we can conclude that on traversing any caustic which is locally of the form $x_f - x_c \propto -(p_f - p_c)^2$ from the upper to the lower branch, as indicated in Figure 7(a), the Maslov index increases by unity.

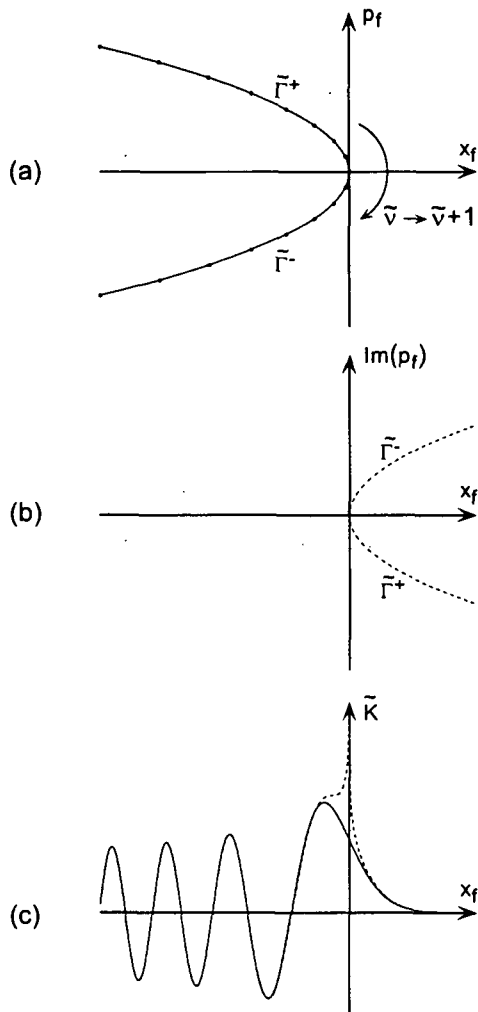


Figure 7: (a) The momentum-position phase space diagram at a fixed final time t_f for the propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$ in a linear potential $V(x) = Fx$, where $E = 0$ and x_i lies far from the caustic in the classically allowed region. (b) The final momenta of trajectories terminating in the forbidden zone ($x_f > 0$). Note that these are pure imaginary. (c) The exact value of the propagator (solid line), and its WKB approximation (dashed line).

Substituting equations (60) and (61) into the expression (57) for the WKB approximation of the propagator gives

$$\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E = 0) = \sqrt{\frac{m}{\pi \hbar F}} \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{x_i x_f}} e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x_i)^{3/2}} \sin \left[\frac{2}{3}(-\alpha x_f)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right], \quad (62)$$

which equals the asymptotic approximation of the exact propagator (55) far from the turning point, $x_i < x_f \ll -1/\alpha$. Figure 7(c) compares the exact value and the WKB approximation for all values of x_f . Although the WKB approximation is invalid close to the turning point,

it agrees well with the exact value of the propagator outside the immediate neighbourhood of the caustic.

1.3 Caustics and shadow zones

In developing semiclassical approximations for various propagators, we have modelled the quantum states which they describe by an ensemble of classical particles. The areas of configuration space which the classical particles do not penetrate are known as classically forbidden zones. An example is given in Figure 7(a), which shows the ensemble of particles appropriate for the propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$ in a stationary linear potential. There are no classical particles in the region $x_f > x_{tp}$, where $x_{tp} = 0$ is the classical turning point. It is clear however from Figure 7(c) that the exact value of $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$ does not vanish in the forbidden zone, but decays away exponentially as x_f increases. This exponentially decreasing solution can be obtained using semiclassical methods by including complex trajectories. As in the classically allowed zone however, the WKB solution fails in the neighbourhood of the caustic.

In this section we first consider a stationary potential, and discuss the application of the standard WKB method in forbidden zones, where the potential energy exceeds the total energy of the system. We then discuss the possible generalisation of this approach to time-dependent potentials and other configuration spaces.

1.3.1 The standard WKB method in forbidden regions

The standard WKB method is used for the calculation of energy eigenfunctions in a stationary potential. Caustics occur at the turning points x_{tp} , where the potential energy equals the total energy of the system, and the classical momentum (46) vanishes. The semiclassical amplitude of the wavefunction diverges at such points, and the WKB approximation (45) becomes invalid. However, sufficiently far beyond a given turning point, in the classically forbidden region, the standard WKB method gives an accurate approximation for the tunneling amplitude. The wavefunction in this region may be obtained by the ‘complex method’ [6, 30, 31, 32], in which the classically allowed and forbidden regions are connected by a path in the complex position plane which lies sufficiently far from the turning point that the WKB solution remains valid along it. The WKB solution in the complex plane is found by analytically continuing expression (45). In doing so, attention must be paid to the Stokes phenomenon. Because this is described in detail in the references [6, 13] we shall discuss it here only briefly.

Let us choose the initial point of integration in expression (45) to be the turning point x_{tp} . Then the WKB solution can be written as

$$\psi_{\text{WKB}}(x_f, t_f) = e^{-iEt_f/\hbar} [p(x_f)]^{-1/2} \sum_{\pm} c_{\text{tp}}^{\pm} \exp \left[\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_{\text{tp}}}^{x_f} dx p(x) \right]. \quad (63)$$

As we proceed away from the turning point into the classically allowed region along the real position axis, the solution $\psi_{\text{WKB}}(x_f, t_f)$ varies with x_f in an oscillatory manner. If on the other hand we move along the real position axis into the forbidden zone, where the classical momentum is purely imaginary, one of the terms in the WKB solution (63) decreases exponentially, while the other increases exponentially. Paths such as this, along which $p(x) dx$ is purely imaginary, are known as Stokes lines. They begin and end at the turning points. In the simple case of the linear potential there are three Stokes lines, $x = Re^{i\theta}$ where $R \in \mathbb{R}^+$ and

$\theta = 0, 2\pi/3, 4\pi/3$ (see Figure 8). Lines along which $p(x) dx$ is real are known as anti-Stokes lines, and alternate with the Stokes lines.

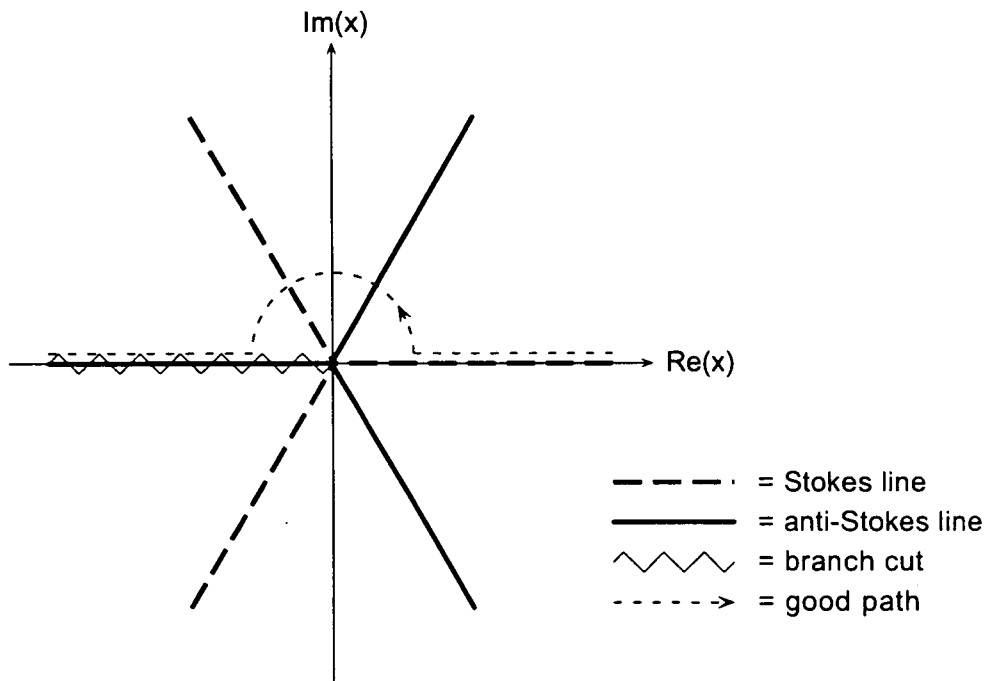


Figure 8: The Stokes and anti-Stokes lines for the linear potential $V = Fx$ with $F > 0$ and $E = 0$. The WKB solution is traced along a 'good path', which lies far from the turning point.

On a Stokes line, the term of equation (63) which increases exponentially is known as the dominant solution, while the term which decreases exponentially is called the subdominant solution. Since the sum of these terms represents only an approximation to the exact solution, there is a certain error associated with it. Provided the coefficient of the dominant solution is non-zero, the contribution from the subdominant solution will be smaller than the error in the sum at positions far from the turning point. Care must therefore be taken in continuing this term analytically about the turning point. It can be shown [30] that on crossing a Stokes line in the anticlockwise sense, the coefficient of the subdominant term changes by an amount equal to i times the coefficient of the dominant term.

On an anti-Stokes line both terms are oscillatory, and hence remain of the same order of magnitude regardless of the distance from the turning point. Their coefficients therefore remain constant on crossing an anti-Stokes line. However the terms swap role, the term that was dominant on one side of the anti-Stokes line becoming subdominant on the other, and vice versa. On crossing successive anti-Stokes lines, a given term therefore becomes alternately dominant and subdominant.

Consider for example the case of the linear potential $V = Fx$ with $F > 0$ and $E = 0$. We require that the solution contain no exponentially increasing term in the forbidden zone $x > 0$. Hence the coefficient of the dominant term on the Stokes line $x \in \mathbb{R}^+$ must vanish, and only the subdominant term has a non-zero coefficient. Given the value of this coefficient, we can obtain the solution in the classically allowed zone by following a 'good path' in the complex

position plane, which lies sufficiently far from the turning point for the WKB approximation to remain valid along it (see Figure 8). The path first meets the anti-Stokes line $x = Re^{i\pi/3}$, where the term that was originally subdominant becomes oscillatory. As the anti-Stokes line is crossed, this term becomes the dominant solution. The path then traverses the Stokes line $x = Re^{i2\pi/3}$, at which point a component of the other (now subdominant) term is introduced. On returning to the real axis in the classically allowed region, the solution contains two oscillatory terms: an incident right-propagating term, and a reflected left-propagating term. The coefficients of the two terms have the same magnitude, but a phase difference of i . The WKB solution obtained this way agrees with the exact solution far from the turning point.

With each of the terms in the WKB solution (63) we may associate a root trajectory $\tilde{\Gamma}$. As shown in Section 1.2.5, the phase of each term equals the generalised action $\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E)$ in units of \hbar , and the prefactor corresponds to the semiclassical amplitude $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E)$. In the case where x_f lies in the forbidden zone, the root trajectories are complex. They remain ‘classical’ however in the sense that they satisfy the classical equations of motion

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \frac{p}{m} \\ \frac{dp}{dt} &= -V'(x).\end{aligned}\tag{64}$$

Any or all the variables x, p, t in these equations may however be complex, and the potential is replaced by its analytic continuation into the complex plane.

For a given set of boundary conditions $(x_f, t_f; x_i, E)$ there may exist multiple root trajectories. Two trajectories are distinct if they are evaluated along contours which pass on opposite sides of a turning point. This can most easily be seen by writing the evolution equations in terms of position rather than time,

$$\begin{aligned}\frac{dt}{dx} &= \frac{m}{p} \\ \frac{dp}{dx} &= -\frac{m}{p}V'(x).\end{aligned}\tag{65}$$

This transformation is a natural one to make since the time variable t_f plays only a trivial role in the value of the semiclassical wavefunction (63). By elementary complex analysis (see for example [33]), the system of differential equations (65) has a unique solution $p(x), t(x)$ in the neighbourhood of a point $x = x_0$, which satisfies the boundary conditions $t(x_0) = t_0, p(x_0) = p_0$, *provided the functions on the right hand side are analytic in the neighbourhood of (x_0, p_0, t_0)* . It is clear however that the functions are not analytic at points where classical momentum $p(x)$ vanishes, that is, at the classical turning points of the system. In general the turning points may be complex. The presence of such points prohibits the existence of a unique global solution to the above system. However, provided the turning points are isolated, it is possible to define local solutions.

Let us integrate the equations (65) along a certain contour C in the complex position plane from x_i to x_f . We shall parametrise the contour by a real variable u , as $x(u)$, $u \in [0, 1]$, where $x'(u)$ exists and does not vanish. Along this contour the evolution equations can be

written as

$$\begin{aligned}\frac{dx}{du} &= x'(u) \\ \frac{dt}{du} &= \frac{dt}{dx} x'(u) \\ \frac{dp}{du} &= \frac{dp}{dx} x'(u),\end{aligned}\tag{66}$$

where dt/dx and dp/dx are given in equations (65). We suppose that the initial conditions $x(0), t(0), p(0)$ are specified. Then, provided the contour C does not intersect any turning points (that is, provided $p \neq 0$ along C), the above equations have a unique solution $x(u), t(u), p(u)$, $u \in [0, 1]$. Furthermore, if the contour is deformed such that the endpoints remain fixed and no turning points have been traversed during the deformation, then the final solution will remain unchanged. This formulation allows us to define local solutions to the equations (65).

The local solution depends on which way around the turning points the contour passes in the complex plane. Any two contours passing on the same side of the turning points will give the same solution. Note that this implies that the contour may be chosen arbitrarily close to the turning points. Each distinct solution is labeled as a different trajectory $\tilde{\Gamma}$.

Consider for example the case in which the turning point corresponds to a simple zero of the function $p(x)^2 = 2m[E - V(x)]$. Then in the immediate neighbourhood of the turning point we can approximate

$$p(x) \propto (x - x_{tp})^{1/2}.\tag{67}$$

Since the momentum on a classical trajectory cannot change instantaneously in a smoothly varying potential, its sign must be reversed after a full circuit around the turning point. We can indicate the change of sign of $p(x)$ in the complex position plane by sketching a branch cut in such a direction that the trajectory does not cross it. Thus a trajectory which circumscribes the turning point once will finish on the opposite side of the branch cut, and its momentum will have been reversed. Note however that since the momentum of the particle is completely determined by the requirement that it may not change instantaneously along the trajectory, the branch cut is included simply as an aid to visualisation, and is not in fact required for the definition of $p(x)$. It is preferable to think of the contour as finishing on a new Riemann surface of $p(x)$ after passage around the turning point.

In general the root trajectories $\tilde{\Gamma}$ will be complex. The generalised action $\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E)$ and semiclassical amplitude $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E)$ associated with each are still given by the usual expressions (47) and (49), but are now also complex. Note that not all possible complex trajectories contribute to the WKB solution. Whether a given trajectory contributes or not in a given region is determined by the Stokes connection formulae.

1.3.2 Example 1: the linear potential

In the case of the linear potential there is only one turning point, and thus, for every choice of the boundary conditions $(x_f, t_f; x_i, E)$, exactly two trajectories. These trajectories, which we have labelled $\tilde{\Gamma}^{\pm}$, pass on opposite sides of the turning point. Suppose as before that x_i and x_f both lie in the classically allowed zone, and that $x_i < x_f$. Then the trajectory $\tilde{\Gamma}^+$ corresponds to a direct path from the initial to the final position, and represents an incident

wave. The trajectory $\tilde{\Gamma}^-$ corresponds to a contour which passes around the turning point, and returns to the final position with negative momentum. We can indicate the change in sign of the momentum by sketching a branch cut along the negative real axis (see Figure 9). This second trajectory corresponds to a reflected wave. Both direct and reflected trajectories contribute to the value of the WKB solution.

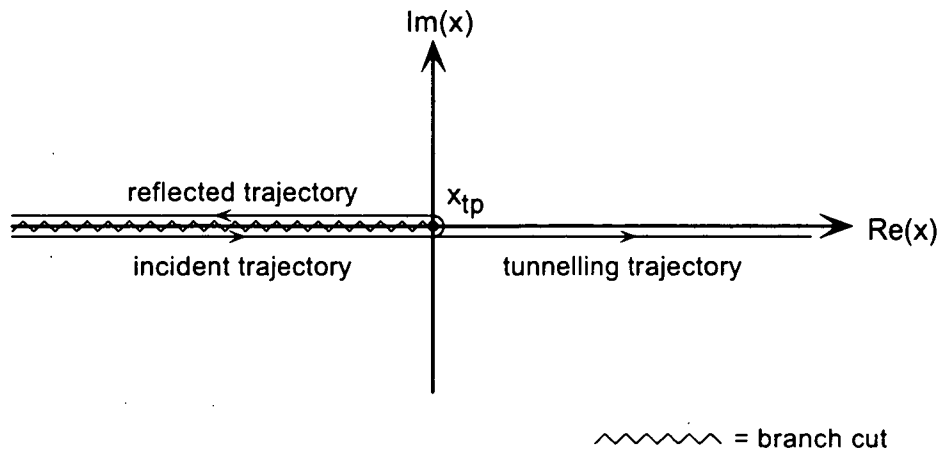


Figure 9: Trajectories in the complex position plane for a linear potential. The reflected trajectory encircles the turning point x_{tp} before returning along the real position axis. The tunnelling trajectory passes below the turning point.

Now suppose that the final position lies in the classically forbidden zone $x_f > 0$. Two trajectories exist which link the initial and final positions, one passing above the turning point, and the other below it. We shall label these trajectories $\tilde{\Gamma}^+$ and $\tilde{\Gamma}^-$ respectively. The trajectory which passes below the turning point, as shown Figure 9, corresponds to an exponentially decreasing term and is therefore the only one of the two that contributes to the WKB solution. This can be shown as follows.

On the positive real position axis, the momentum is purely imaginary (see Figure 7). Its sign depends on whether the contour passed above the turning point ($\tilde{\Gamma}^+$) or below it ($\tilde{\Gamma}^-$),

$$p^\pm(x) = \mp i\sqrt{2mFx}. \quad (68)$$

Using this expression for the momentum, we can obtain the generalised action and semiclassical amplitude on the trajectories $\tilde{\Gamma}^\pm$

$$\tilde{S}^\pm(x_f, t_f; x_i, E = 0) = \frac{2}{3}\sqrt{2mF} \left[\mp i(x_f)^{3/2} + (-x_i)^{3/2} \right] \quad (69a)$$

$$\tilde{A}^\pm(x_f, t_f; x_i, E = 0) = \frac{e^{\pm i\pi/4}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{m}{2F}} \frac{1}{\sqrt{-x_i x_f}}. \quad (69b)$$

Only the trajectory $\tilde{\Gamma}^-$, whose generalised action has a positive imaginary part, contributes to the WKB solution. The semiclassical propagator therefore contains only a single term, which decays away exponentially as x_f increases

$$\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E) = \tilde{A}^-(x_f, t_f; x_i, E) e^{i\tilde{S}^-(x_f, t_f; x_i, E)/\hbar}. \quad (70)$$

Substituting the values of the generalised action (69a) and semiclassical amplitude (69b) into expression (70) we obtain

$$\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E = 0) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{m}{\pi \hbar F}} \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{-x_i x_f}} e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x_i)^{3/2}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x_f)^{3/2}}, \quad (71)$$

which is the asymptotic approximation of the exact solution (55) far from the turning point $x_i \ll -1/\alpha$, $x_f \gg 1/\alpha$. A comparison of the semiclassical solution (71) and the exact solution (55) is given in Figure 7(c).

Note that the time $t_f - t_i^\pm$ taken by the particle to travel along the trajectory $\tilde{\Gamma}^\pm$ from the initial point x_i in the classically allowed zone to the final point x_f in the classically forbidden zone is complex

$$t_f - t_i^\pm = \sqrt{\frac{2m}{F}} (\pm i\sqrt{x_f} + \sqrt{-x_i}). \quad (72)$$

The example of the linear potential illustrates a few general characteristics of simple ‘fold’ caustics, so named because they appear as a folding of the phase space curve (see Figure 7). As the caustic is approached from the classically allowed side, two branches of the ensemble converge, and finally become degenerate at the caustic itself. Proceeding into the forbidden zone, the root trajectories separate to form a complex conjugate pair (that is, a pair of paths for which parametrisations can be chosen such that the coordinates $x(u)$, $p(u)$, $t(u)$ on each are complex conjugates). Their associated generalised action and semiclassical amplitudes also form complex conjugate pairs. Since the forbidden zone is unbounded, the only trajectory which contributes to the WKB solution is the one whose generalised action has a positive imaginary part. This ensures that the solution decreases exponentially into the forbidden zone.

1.3.3 Example 2: the Gaussian well

We now consider the example of a stationary Gaussian potential well $V(x) = -V_0 e^{-x^2/2\sigma^2}$, where $V_0 > 0$. For positive incident energy E there are no real turning points, and hence a standard application of the WKB method predicts no reflection. However there do exist turning points which lie off the real position axis, and they can be used to provide a semiclassical estimate of the quantum reflection. Their locations x_{tp} can be found by setting the potential energy equal to the total energy of the system $V(x_{\text{tp}}) = E$. Writing $x_{\text{tp}} = x_R + ix_I$, this condition provides two equations with which to solve for the real and imaginary parts of x_{tp} ,

$$\begin{aligned} x_R^2 - x_I^2 &= 2\sigma^2 \ln \frac{V_0}{E} \\ x_R x_I &= \sigma^2 (2n + 1) \pi, \end{aligned} \quad (73)$$

where n is an integer. Note that since these equations cannot be satisfied unless x_I is non-zero, all the turning points lie off the real axis.

Figure 10 indicates two complex trajectories $\tilde{\Gamma}^\pm$, which pass around the two turning points x_{tp}^\pm in the upper half plane which lie closest to the real axis. A reflection amplitude r^\pm can be associated with each,

$$r^\pm = -ie^{i\tilde{S}_{\text{tp}}^\pm/\hbar}, \quad (74)$$

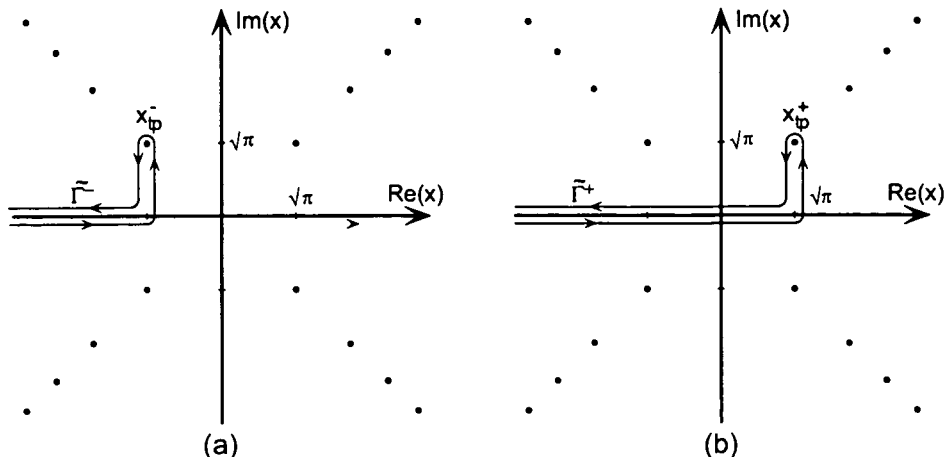


Figure 10: Reflected trajectories for a Gaussian potential well. The turning points, indicated by dots, all lie off the real position axis. The real and imaginary parts of the position x are plotted in units of σ , and the incident energy is chosen to be $E = V_0$

where $\tilde{S}_{\text{tp}}^{\pm}$ is the integral of the momentum about the turning point x_{tp}^{\pm} ,

$$\tilde{S}_{\text{tp}}^{\pm} = 2 \int_0^{x_{\text{tp}}^{\pm}} dx p(x). \quad (75)$$

The factor of $(-i)$ in equation (74) arises from the fact that each trajectory has undergone a single reflection, and thus its Maslov index has increased by one. Due to the symmetry of the potential the imaginary parts of $\tilde{S}_{\text{tp}}^{\pm}$ are identical, $\text{Im}(\tilde{S}_{\text{tp}}^+) = \text{Im}(\tilde{S}_{\text{tp}}^-) > 0$. The magnitudes of the two reflection amplitudes

$$|r^{\pm}| = e^{-\text{Im}(\tilde{S}_{\text{tp}}^{\pm})/\hbar} \quad (76)$$

are therefore equal. It can be shown, using the Stokes connection formulae, that the trajectories $\tilde{\Gamma}^{\pm}$ are the only ones which contribute to the reflection probability. Trajectories which pass around turning points in the lower half plane are unphysical since their generalised action has a negative imaginary part. Trajectories which pass around turning points in the upper half plane which lie farther from the position axis than x_{tp}^{\pm} are also neglected, since their contributions would be exponentially smaller than r^{\pm} , and therefore smaller than the errors already inherent in the WKB approximation. Trajectories involving multiple reflections are neglected for the same reason. Considering therefore only the trajectories $\tilde{\Gamma}^{\pm}$, we find that the total probability of reflection in the semiclassical limit is

$$R = |r^+ + r^-|^2. \quad (77)$$

1.3.4 Forbidden zones in the generalised WKB method

As shown in Section 1.2.5, the standard WKB method for energy eigenfunctions is equivalent to the calculation of $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E)$ in the case of a stationary potential. In general however we may be interested in the values of a variety of propagators in both stationary and time-dependent potentials. It will then be necessary to consider forbidden zones in other

configuration spaces. For example, in obtaining a semiclassical value for the energy-dependent propagator $\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$, we shall need to consider values of the final energy which are classically inaccessible, but for which the propagator has a small but finite value.

The Stokes connection formulae cannot be used in such cases to determine which complex trajectories to include and which to omit, since no generalised Stokes theory exists in higher dimensions [34]. We shall assume in what follows that the value of a propagator in the forbidden region just beyond a caustic is determined principally by the ‘natural complex branches’ [34]. These are the branches which, like those labelled $\tilde{\Gamma}^\pm$ for the linear potential (Section 1.3.2), form the analytic continuation of the branches which are real in the classically allowed zone.

2 Direct application of the WKB propagators

In this section we present a semiclassical analysis of the problem discussed in the introduction involving the modulated potential (1). As shown in Section 1.2.4, the weights of the sidebands produced on the momentum of the particle can be expressed in terms of the quantum propagator $\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ (see equations (30)-(32)). Approximate values for this propagator will be obtained by applying the WKB method first in the time domain and then in the energy domain.

Consider an atom of very well defined energy E_i approaching the potential well (1) from the left. Its wavefunction on the right hand side of the potential is given by $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$, where x_i lies to the left of the potential, and x_f to the right. According to definition (19b), the propagator $\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ is given by the Fourier transform of the wavefunction $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ with respect to the final time. Hence we might expect to obtain a semiclassical estimate of $\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ by substituting for the wavefunction its semiclassical approximation $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ (41). Denoting the result of this calculation by $\tilde{\tilde{K}}^{(\text{sc})}(x_f, E_f; x_i, E_i)$, we have

$$\tilde{\tilde{K}}^{(\text{sc})}(x_f, E_f; x_i, E_i) \equiv (2\pi\hbar)^{-1/2} \int dt_f \tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E_i) e^{iE_f t_f/\hbar}. \quad (78)$$

We shall refer to this method as the time-domain approach, since the the WKB approximation is applied in the time-domain to obtain a semiclassical value for the wavefunction, and then a Fourier transform performed to calculate the energy spectrum.

An alternative method is to apply the WKB approximation directly in the energy-domain. This method is not equivalent to the preceding one since $\tilde{\tilde{K}}_{\text{WKB}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ does not equal the Fourier transform of $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$.

2.1 The time-domain approach

In this section we calculate the semiclassical value of the wavefunction $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ at a given position x_f beyond the potential, and use it to obtain an approximate value for the propagator $\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ using equation (78). The semiclassical wavefunction is obtained by considering an ensemble of classical particles which leave the initial position x_i with energy E_i and constant flux. The times at which they arrive at the final position x_f are indicated, together with their final energies, in Figures 11 (a) and (b), for two different values of x_f . The

semiclassical value of the wavefunction at a given time t_f is determined from this diagram by locating the classical particle of the ensemble which arrives at the time t_f , and calculating the generalised action $\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ (40) and semiclassical amplitude $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ (42) associated with its trajectory. The flux $\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}/\partial t_f$ which appears in the expression (42) for the semiclassical amplitude is obtained by projecting the ensemble onto the time axis, as shown in Figure 11.

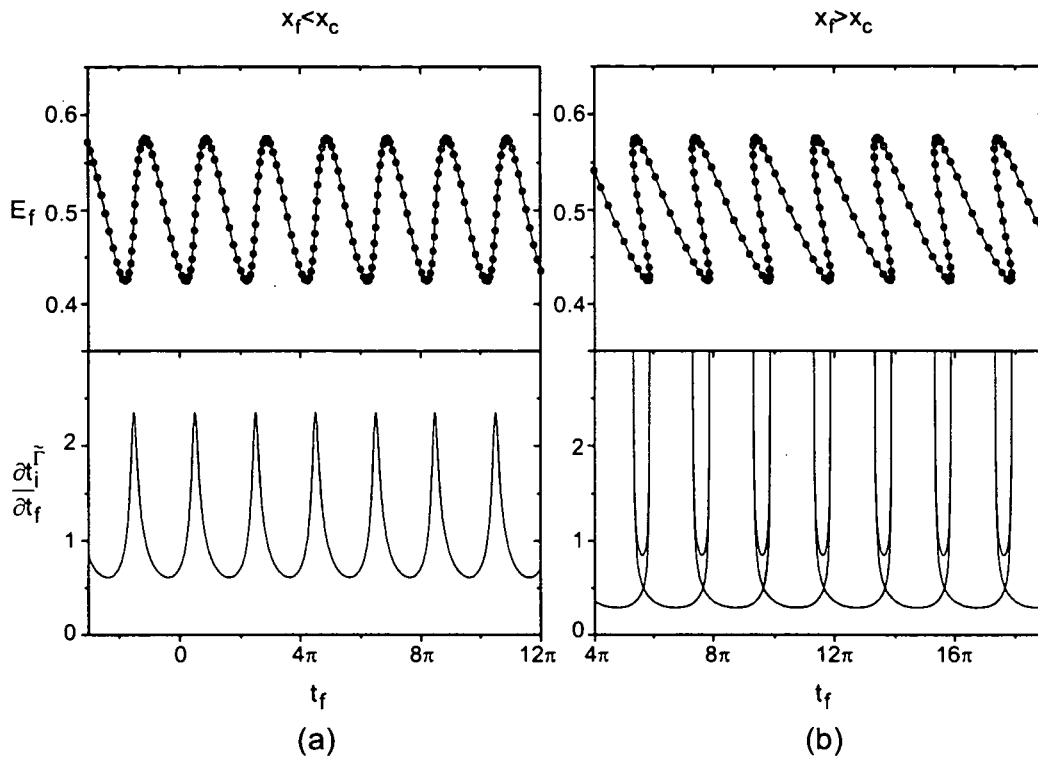


Figure 11: The energy-vs-time phase-space diagram for an ensemble of classical particles which have traversed the modulated potential (1). The graph is plotted for two different positions $x_f = 8.0/k$ (ahead of x_c) and $x_f = 30.0/k$ (beyond x_c). The energy E_f is given in units of p_i^2/m , and the time t_f in units of $1/\omega$. Below is plotted the flux $\left| \frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial t_f} \right|$, which is used to determine the semiclassical amplitude of $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$. The values of the parameters used are $\hat{\sigma} = 1.0$ and $\hat{V} = 0.1$. (Given our choice of units for the various coordinates, $\hat{\omega}$ does not enter into the equations of motion.)

Having calculated the semiclassical wavefunction $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$, an approximate value for the sideband weights can be obtained as follows. Note first that the semiclassical amplitude is periodic,

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f + \tau; x_i, E_i) = \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i). \quad (79)$$

The generalised action however is the sum of a periodic term and a linear term,

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f + \tau; x_i, E_i) &= S_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f + \tau; x_i, t_i^{\tilde{\Gamma}} + \tau) - E_i (t_i^{\tilde{\Gamma}} + \tau) \\ &= \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) - E_i \tau, \end{aligned} \quad (80)$$

where we have used the fact that the Feynman propagator is periodic

$$S_{\Gamma}(x_f, t_f + \tau; x_i, t_i + \tau) = S_{\Gamma}(x_f, t_f; x_i, t_i). \quad (81)$$

The semiclassical wavefunction therefore obeys the relation

$$\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f + \tau; x_i, E_i) = \tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E_i)e^{-iE_i\tau/\hbar}, \quad (82)$$

and its Fourier transform is composed of a discrete sum of delta functions

$$\tilde{\tilde{K}}^{(\text{sc})}(x_f, E_f; x_i, E_i) = \sum_n \tilde{\tilde{K}}_n^{(\text{sc})}(x_f; x_i, E_i)\delta(E_f - E_i - n\hbar\omega). \quad (83)$$

Following Section 1.2.4 we now estimate the sideband weights as

$$I_n \approx \frac{2}{m} \sqrt{E_i(E_i + n\hbar\omega)} \left| \tilde{\tilde{K}}_n^{(\text{sc})}(x_f; x_i, E_i) \right|^2. \quad (84)$$

It turns out that in many parameter regimes expression (84) does not constitute a good approximation to the sideband weights. The reason is clear from Figure 11. For positions x_f close to the potential only a single root trajectory exists for every value of time t_f . As x_f is increased however, the energy-time phase space plot shears, the faster particles of the ensemble covering the same distance in less time. At a critical position x_c caustics form in the flux, and beyond this point multiple trajectories exist (see Figure 11(b)). The caustics produce divergences in the semiclassical amplitude, and errors in the values of the sideband weights.

The position x_c at which caustics form can be estimated as follows. The final momentum of a particle depends on the time at which it left the potential. Between the fastest and slowest particles there is a delay of about half a period. This corresponds to a position displacement ahead of the potential of $\Delta x_{\text{cl}} \approx p_i\tau/2m = \pi/k$, where k is defined in equation (4). Denoting by Δp_{cl} the momentum difference between the fastest and slowest particles, the position x_c at which the fastest particle will overtake the slowest one is given by

$$kx_c \sim k \Delta x_{\text{cl}} \frac{p_i}{\Delta p_{\text{cl}}} \approx \pi \frac{p_i}{\Delta p_{\text{cl}}}. \quad (85)$$

Note that this is a purely classical quantity, since it is independent of \hbar .

The approximation (84) for the sideband weights is invalid close to the caustic position x_c . How close to x_c it becomes inaccurate depends on the value of \hbar relative to the other physical parameters of the system. In our choice of dimensionless parameters, only $\hat{\omega}$ (3c) depends on \hbar . Thus the value of $\hat{\omega}$ indicates whether the system will behave in a more classical or more quantum mechanical fashion. If $\hat{\omega}$ is very small, the system is close to the classical limit, and expression (84) remains valid until immediately ahead of the caustic position x_c . If $\hat{\omega}$ is not small, the method may fail well ahead of x_c (see Appendix E). If the value of $\hat{\omega}$ is sufficiently large, the distance at which the approximation becomes inaccurate may lie within the potential, and in this case the method is valid nowhere.

2.1.1 The thin phase grating approximation

Although the approximation (78) fails due to divergences in the semiclassical amplitude $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$, a perturbative approach, known as the ‘thin phase grating’ approximation [8], provides a practical method of obtaining correct order-of-magnitude estimates for

the sideband weights. In this approach, the time-dependent part of the potential (1),

$$V_1(x, t) = -V_0(x) \sin(\omega t), \quad (86)$$

is treated as a perturbation. The generalised action $\tilde{S}_{\tilde{F}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ is calculated to first order in the perturbation, but the semiclassical amplitude is included only to zeroth order. The position variation of the semiclassical amplitude is thereby simply neglected, and the divergences thus eliminated. The results for the sideband weights are independent of the final position x_f beyond the potential at which they are evaluated.

The details of the calculation are given in Appendix E. In the absence of the perturbation the potential is stationary and the semiclassical propagator contains only one branch $\tilde{K}_{\text{WKB}} = \tilde{A}_0 \exp(i\tilde{S}_0/\hbar)$, where the zeroth order values of the semiclassical amplitude and generalised action are

$$\tilde{A}_0(x_f, t_f; x_i, E_i) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \sqrt{\frac{m}{2E_i}} \quad (87a)$$

$$\tilde{S}_0(x_f, t_f; x_i, E_i) = -E_i t_f + p_i(x_f - x_i) - \hbar C, \quad (87b)$$

and C is a dimensionless constant. The first order perturbation on the generalised action is

$$\tilde{S}_1(x_f, t_f; x_i, E_i) = -\hbar\zeta \sin(\omega t_f - kx_f - C'), \quad (88)$$

where C' is a constant and ζ is a modulation index defined by

$$\zeta = -\frac{1}{\hbar} \int dt V_0[\bar{x}(t)] e^{i\omega t}. \quad (89)$$

The trajectory $\bar{x}(t)$ appearing in this expression is the unperturbed trajectory (that is, the trajectory in the unmodulated potential) which passes the origin $x = 0$ at time $t = 0$. Note that since the function $V_0[\bar{x}(t)]$ is even in t , the integral above is real.

By approximating the generalised action to first order and the semiclassical amplitude to zeroth order, we obtain the thin phase grating approximation $\tilde{K}^{(\text{ph})}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ for the propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$,

$$\tilde{K}^{(\text{ph})}(x_f, t_f; x_i, E_i) = \frac{e^{-iE_i t_f/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{m}{2E_i}} e^{i[p_i(x_f - x_i)/\hbar - C]} \exp\{-i\zeta \sin[\omega t_f - kx_f + C']\}. \quad (90)$$

Taking the Fourier transform of this expression with respect to time, we obtain

$$\tilde{\tilde{K}}^{(\text{ph})}(x_f, E_f; x_i, E_i) = \sum_n \tilde{\tilde{K}}_n^{(\text{ph})}(x_f; x_i, E_i) \delta(E_f - E_i - n\hbar\omega), \quad (91)$$

where

$$\tilde{\tilde{K}}_n^{(\text{ph})}(x_f; x_i, E_i) = \sqrt{\frac{m}{2E_i}} e^{i[p_i(x_f - x_i)/\hbar - C]} e^{in(kx_f - C')} J_n(\zeta), \quad (92)$$

and J_n is the n th order Bessel function. Note that the above result does not satisfy the exact dispersion relations, but rather the approximate relations

$$p_n \approx p_i + n\hbar k, \quad (93)$$

which are correct only to first order in $\hat{\omega}$.

The values of the sideband weights obtained using the thin phase grating method are therefore

$$I_n^{(\text{ph})} = \frac{2E_i}{m} \left| \tilde{K}_n^{(\text{ph})}(x_f; x_i, E_i) \right|^2 = |J_n(\zeta)|^2, \quad (94)$$

where we have substituted relations (93) for the exact dispersion relations in obtaining the prefactor $2E_i/m$ (see Appendix C). The form of the atomic energy spectrum (94) is identical to that of the optical spectrum produced by electro-optic phase modulation (see Introduction). The sideband weights are normalised

$$\sum_n I_n^{(\text{ph})} = 1, \quad (95)$$

and are symmetric about the central band, $I_{-n}^{(\text{ph})} = I_n^{(\text{ph})}$. The thin phase grating method can therefore not be used to predict the asymmetry in the sideband weights. However it is found to give consistently good order-of-magnitude agreement with the exact results, even outside the perturbative regime. The method is numerically very fast, since the spectrum is characterised by only one value, namely the modulation index ζ , which can be evaluated by means of a single trajectory $\bar{x}(t)$. The speed of calculation makes the method extremely useful, despite the fact that only order-of-magnitude accuracy is obtained. Figures 12(a) and 13(a) compare the results of the thin phase grating method with the exact solution, obtained using a numerical evolution of the Schrödinger equation. Figure 12(a) shows the full spectrum for a given set of parameters, and Figure 13(a) shows the weights of the central band and first order sidebands over a range of values of \hat{V} .

If the depth of the potential is much smaller than the incident kinetic energy, the velocities of the atoms do not change significantly as they cross the potential, and the modulation index can be calculated analytically

$$\zeta = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{V\sigma m}{\hbar p_i} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\sigma\omega m}{p_i} \right)^2 \right] = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\hat{V}\hat{\sigma}}{\hat{\omega}} e^{-\hat{\sigma}^2/2}, \quad (96)$$

where the dimensionless parameters $\hat{\omega}$, $\hat{\sigma}$ and \hat{V} are defined in the introduction. The expression (96) for the modulation index has a ‘band pass’ dependence on $\hat{\sigma}$, reaching a maximum for $\hat{\sigma} = 1$. This condition can be expressed as $\omega t_\sigma = 1$, where $t_\sigma \equiv \sigma m/p_i$ characterises the time taken to cross the potential. The modulation index therefore reaches a maximum when the interaction time is of the same order as the period of modulation. This can be understood in physical terms as follows. If the interaction time is too short the particle will not experience the full modulation of the potential, and hence its final momentum will not differ significantly from its initial momentum. If on the other hand the interaction time is too long, the potential will oscillate several times during the interaction and the effect of the modulation will be averaged out.

In the case in which the depth of the potential is not small compared to the initial kinetic energy, the particles will undergo a considerable acceleration in the potential. Although the simple formula (96) is invalid in this case, the heuristic argument relating the interaction time to the period of modulation is still applicable.

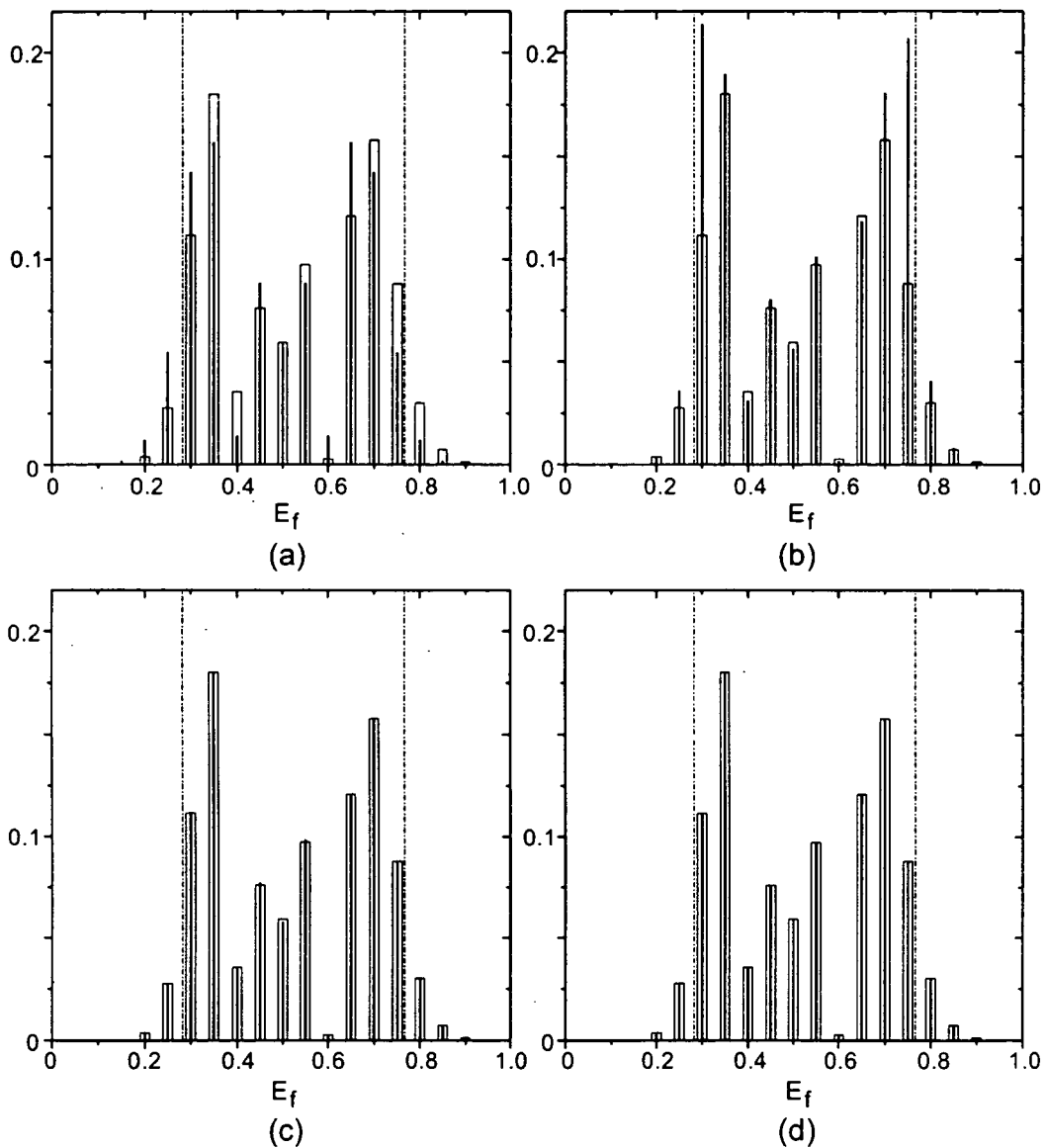


Figure 12: The spectrum (bold lines) calculated using the thin phase grating method (a), the generalised WKB approximation (b), the fold-caustic uniform approximation (c) and the periodic uniform approximation (d), for the parameters $\hat{\omega} = 0.05$, $\hat{\sigma} = 6.0$ and $\hat{V} = 3.0$. The exact results (hollow bars) are plotted on each figure for comparison. The two vertical dot-dashed lines indicate the positions of the caustics (the limits of the classically allowed energy range). The final energy E_f is plotted in units of p_i^2/m .

2.2 The energy-domain approach

In this section we apply the WKB approximation directly in the energy domain, to calculate the value of $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$, which will then be used to obtain an estimate of the sideband weights. The energy-time phase space diagram in Figure 11 must now be analysed

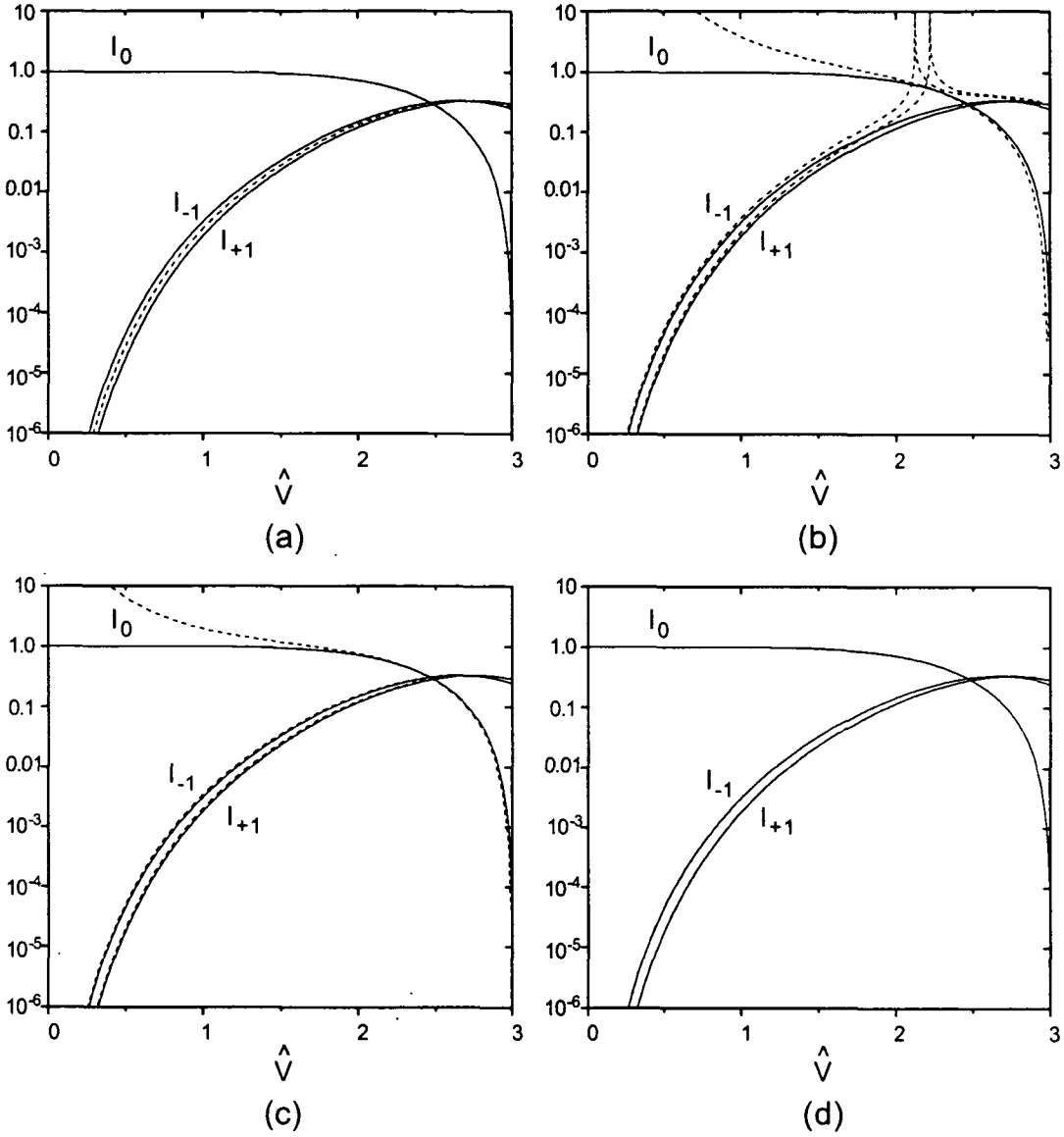


Figure 13: The weights of the central band I_0 and first order sidebands $I_{\pm 1}$ as calculated using the thin phase grating approximation (a), the generalised WKB approximation (b), the fold-caustic uniform approximation (c) and the periodic uniform approximation (d). These approximate values are plotted in dashed lines, and compared with the exact results, plotted in solid lines, for varying potential depth \hat{V} . The remaining parameters are fixed, $\hat{\sigma} = 6.0$ and $\hat{\omega} = 0.1$. The results of the periodic uniform approximation coincide with the exact results over the entire range investigated.

with regard to its energy distribution rather than its temporal distribution. The value of $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ at a given energy E_f is obtained by locating the particles whose final energy is E_f , and calculating the generalised action $\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ (51) and semiclassical

amplitude $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ (52) associated with their trajectories. The semiclassical amplitude is proportional to the square root of the energy density $\partial t_i^{\tilde{\Gamma}} / \partial E_f$, which is obtained by projecting the branch $\tilde{\Gamma}$ of the ensemble onto the energy axis.

2.2.1 Origin of the discrete spectrum

It is clear from the periodicity of Figure 11 that for each energy E_f there is an infinite number of root trajectories. The semiclassical amplitude is identical for trajectories exactly one period apart. However the phases of such trajectories differ. Letting $\tilde{\Gamma}_j$ denote a given trajectory, and $\tilde{\Gamma}_{j+1}$ the trajectory occurring exactly one period later, we have

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}_{j+1}}(x_f, E_f; x_i, E_i) &= S_{\Gamma} \left(x_f, t_f^{\tilde{\Gamma}_j} + \tau; x_i, t_i^{\tilde{\Gamma}_j} + \tau \right) + E_f \left(t_f^{\tilde{\Gamma}_j} + \tau \right) - E_i \left(t_i^{\tilde{\Gamma}_j} + \tau \right) \\ &= \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}_j}(x_f, E_f; x_i, E_i) + \frac{2\pi}{\omega} (E_f - E_i), \end{aligned} \quad (97)$$

where we have used the fact that the Feynman propagator is periodic (81). Destructive interference occurs among periodically separated root trajectories for all energies E_f except those satisfying the condition $E_f - E_i = n\hbar\omega$. This is the origin of the discrete structure of the spectrum.

The various components of the energy distribution $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ can be obtained as follows. For every energy E_f there exist two root trajectories per period. Let us choose a particular period, and denote the root trajectories in that period by $\tilde{\Gamma}^{\pm}$, and the times at which they arrive at the final position by t_f^{\pm} respectively (see Figure 14). Note that the trajectories $\tilde{\Gamma}^{\pm}$ become degenerate at the caustic energies. To evaluate $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ we need to sum over the root trajectories in all periods. Taking into account the phase difference (97) between successive periods, this can be done by evaluating the double sum

$$\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, E_f; x_i, E_i) = \sum_{\tilde{\Gamma} \in \tilde{\Gamma}^{\pm}} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i) e^{i\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i)/\hbar} \sum_j e^{i2\pi j(E_f - E_i)/\hbar\omega}. \quad (98)$$

The sum over j equals

$$\sum_j e^{i2\pi j(E_f - E_i)/\hbar\omega} = \hbar\omega \sum_n \delta(E_f - E_i - n\hbar\omega), \quad (99)$$

and hence we can write

$$\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, E_f; x_i, E_i) = \sum_n \tilde{K}_{\text{WKB},n}(x_f; x_i, E_i) \delta(E_f - E_i - n\hbar\omega), \quad (100)$$

where the components $\tilde{K}_{\text{WKB},n}$ are given by

$$\tilde{K}_{\text{WKB},n}(x_f; x_i, E_i) = \hbar\omega \sum_{\tilde{\Gamma} \in \tilde{\Gamma}^{\pm}} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_n; x_i, E_i) e^{i\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_n; x_i, E_i)/\hbar}, \quad (101)$$

and $E_n = E_i + n\hbar\omega$. To calculate $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}$ it is necessary to determine the values of the Maslov index $\tilde{\nu}$. We show in Section 3.3 that on crossing the upper caustic in the direction of increasing t_i , the Maslov index increases by 1, and that on passing the lower caustic, also in the direction of increasing t_i , it decreases by 1. The Maslov index thus depends only on the sign of $\partial E_f / \partial t_i$. Letting $\tilde{\Gamma}^{\pm}$ denote the root trajectories for which $\pm \partial E_f / \partial t_i > 0$, we obtain

$$\tilde{K}_{\text{WKB},n}(x_f; x_i, E_i) = \sqrt{\frac{m}{2\sqrt{E_i E_n}}} \sum_{\pm} \tilde{B}^{\pm}(x_f, E_n; x_i, E_i) e^{i[\tilde{S}^{\pm}(x_f, E_n; x_i, E_i)/\hbar \mp \pi/4]}, \quad (102)$$

where \tilde{B}^{\pm} are dimensionless amplitudes proportional to \tilde{A}^{\pm} , but independent of the Maslov indices. They are defined in the allowed zone as

$$\tilde{B}^{\pm}(x_f, E_f; x_i, E_i) \equiv \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left| \left(\frac{\partial t_i^{\pm}}{\partial E_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \right|^{1/2}, \quad (103)$$

and are plotted in Figure 14. Approximating the sideband weights by

$$I_n \approx \frac{2}{m} \sqrt{E_i(E_i + n\hbar\omega)} \left| \tilde{K}_{\text{WKB},n}(x_f; x_i, E_i) \right|^2, \quad (104)$$

and substituting expression (102) for $\tilde{K}_{\text{WKB},n}$, gives

$$I_n \approx \left| \sum_{\pm} \tilde{B}^{\pm}(x_f, E_n; x_i, E_i) e^{i[\tilde{S}^{\pm}(x_f, E_n; x_i, E_i)/\hbar \mp \pi/4]} \right|^2. \quad (105)$$

The WKB approximation (105) for the sideband weights is compared with the exact solution in graph (b) of Figures 12 and 13. Note that the approximation fails in the neighbourhood of the caustics, indicated in Figure 12 by the dot-dashed lines. The divergence at the caustics is also clear in Figure 13(b): for values of \hat{V} such that one of the first order sidebands $E_f = E_i \pm \hbar\omega$ falls precisely at the limit of the classically allowed energy range, its weight $I_{\pm 1}$ diverges. For small \hat{V} the central band is itself close to the caustics, and its weight I_0 diverges.

2.2.2 The forbidden zone

The same method can be applied to obtain an estimate of the sideband weights in the classically forbidden ranges of energy. There are two such forbidden regions: one below the allowed range, and one above it (see Figure 14). The root trajectories $\tilde{\Gamma}$ in these regions are complex. In particular, the final time $t_f^{\tilde{\Gamma}}$ of each root trajectory has a finite imaginary part, indicated by the dashed curves in Figure 14. The generalised action $\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_n; x_i, E_i)$ and semiclassical amplitude $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_n; x_i, E_i)$, although still given by the expressions (51) and (52) respectively, are now also complex.

Note that the root trajectories we consider are those on the ‘natural complex branches’ $\tilde{\Gamma}^{\pm}$, which join the real branches at the caustic. They can be calculated by integrating the evolution equations (65) along the real position axis, thus avoiding the complex turning points.

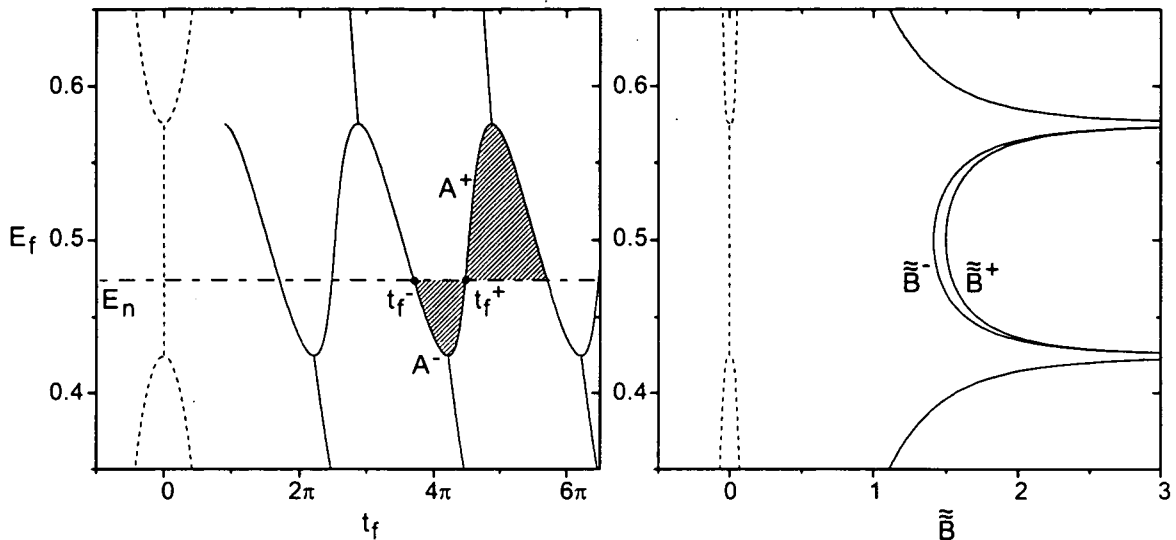


Figure 14: The energy-vs-time phase-space diagram at position $x_f = 8.0/k$ for the same physical parameters as used in Figure 11. The time t_f here is complex, and should be interpreted as a function of energy. The solid lines indicate the real part of t_f , and the dashed lines correspond to the imaginary part. The curve intersects the line $E = E_n$ at the points t_f^\pm and encloses the areas \mathcal{A}^\pm . To the right is the (complex) function \tilde{B} in units of $\omega^{1/2}$. It is proportional to the square root of the energy density $\partial t_i / \partial E_f$, obtained by projection of the ensemble onto the energy axis.

It should be noted however that since the potential is time-dependent, the positions of the turning points are a function of both the initial and final energy. It may happen that as we consider energies further into the forbidden zone, one or more of the turning points may cross the real position axis. In order to follow the same branch, the contour must remain on the same side of the turning points, and must therefore depart from the real position axis.

In the forbidden zone, as in the allowed zone, the propagator \tilde{K}_{WKB} has a discrete structure (100). However it is only the root trajectory $\tilde{\Gamma}^-$, whose generalised action has a positive imaginary part, which contributes to the value of the components $\tilde{K}_{\text{WKB},n}$,

$$\tilde{K}_{\text{WKB},n}(x_f; x_i, E_i) = \hbar\omega \tilde{A}^-(x_f, E_n; x_i, E_i) e^{i\tilde{S}^-(x_f, E_n; x_i, E_i)/\hbar}. \quad (106)$$

For convenience we define dimensionless amplitudes \tilde{B}^\pm in the forbidden zone as

$$\tilde{B}^\pm(x_f, E_f; x_i, E_i) \equiv \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left[\pm i \left(\frac{\partial t_i^\pm}{\partial E_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \right]^{1/2}. \quad (107)$$

Although only \tilde{B}^- is present in the WKB solution, both \tilde{B}^- and \tilde{B}^+ will be needed in the following section. They are plotted in Figure 14, their imaginary parts being indicated by dashed lines. Note that they are complex conjugates

$$\tilde{B}^- = \left(\tilde{B}^+ \right)^*. \quad (108)$$

Using (106) and (107) we obtain the following approximation for the sideband weights in the forbidden zone

$$I_n \approx \left| \tilde{B}^-(x_f, E_n; x_i, E_i) e^{i\tilde{S}^-(x_f, E_n; x_i, E_i)/\hbar} \right|^2. \quad (109)$$

This is plotted in graph (b) of Figures 12 and 13. As in the classically allowed zone, the WKB approximation fails in the immediate neighbourhood of the caustics.

2.2.3 Discussion of results

Whereas the results for the sideband weights (84) obtained using the time-domain approach depend on the position x_f beyond the potential at which they are evaluated, those calculated using the energy-domain approach (105) and (109) do not. This is because the semiclassical amplitude $\tilde{B}^\pm(x_f, E_f; x_i, E_i)$ does not vary beyond the potential, and because the phase $\tilde{S}^\pm(x_f, E_f; x_i, E_i)/\hbar$ obeys the correct dispersion relations.

Consider first the semiclassical amplitude \tilde{B}^\pm . This depends on the energy density $\partial t_i/\partial E_f$, obtained by projecting the phase space diagram onto the energy axis. As indicated in Figure 11, a change in the final position x_f simply causes a shearing of the phase space diagram, and cannot affect the energy density. Hence \tilde{B}^\pm is independent of x_f beyond the potential.

Now consider the generalised action \tilde{S}^\pm . Its partial derivative with respect to the final position x_f is calculated in Appendix A.2.2, and equals

$$\frac{\partial}{\partial x_f} \tilde{S}^\pm(x_f, E_f; x_i, E_i) = p_f^\pm, \quad (110)$$

where p_f^\pm denotes the final momentum on the trajectory $\tilde{\Gamma}^\pm$. Since p_f^+ and p_f^- are identical in the potential-free region, $p_f^\pm = \sqrt{2mE_f}$, the generalised action $\tilde{S}^+(x_f, E_f; x_i, E_i)$ and $\tilde{S}^-(x_f, E_f; x_i, E_i)$ contain the same position dependence. Hence the sideband weights (102) do not vary with position.

3 Semiclassical treatment of caustics

Close to the caustics in the energy distribution, the WKB approximation for the sideband weights fails both in the allowed zone (105) and in the forbidden zone (109). A correct semiclassical treatment in this region is obtained by returning to an integral expression for the propagator $\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i)$. We write $\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ as a Fourier transform of $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$, and then approximate $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ by its WKB value, as in equation (78). However, instead of evaluating the resulting integral exactly, as was discussed in Section 2.1, we apply a local approximation about the points of stationary phase. The simplest of these approximations, which will be described in Section 3.1, is the standard ‘stationary phase approximation’, in which the phase is expanded to second order about each stationary point. In the neighbourhood of a caustic this approximation is invalid, and a higher order expansion must be used (see Section 3.2). The appropriate expansion depends on the local variation of the phase about the caustic, which can be classified as one of several generic

forms [35]. In Sections 3.3 and 3.4 two alternative generic forms are used to obtain uniform approximations for the periodic system described in the introduction. These match the local solution at the caustic with the stationary phase approximation valid far from the caustic in a uniform manner.

3.1 Quadratic expansion: the stationary phase method

Substituting the WKB value (41) of the propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ into equation (78) we obtain

$$\tilde{K}^{(\text{sc})}(x_f, E_f; x_i, E_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dt_f \sum_{\tilde{\Gamma}} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) e^{i\phi_{\tilde{\Gamma}}(t_f; E_f)}, \quad (111)$$

where

$$\phi_{\tilde{\Gamma}}(t_f; E_f) \equiv \frac{1}{\hbar} \left[\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) + E_f t_f \right]. \quad (112)$$

In the limit $\hbar \rightarrow 0$ the integral (111) is dominated by points $t_f^{\tilde{\Gamma}}$ at which the phase $\phi_{\tilde{\Gamma}}(t_f; E_f)$ is stationary

$$\frac{\partial}{\partial t_f} \phi_{\tilde{\Gamma}} \left(t_f^{\tilde{\Gamma}}; E_f \right) = 0. \quad (113)$$

By definition (112) this condition is equivalent to

$$-\frac{\partial}{\partial t_f} \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}} \left(x_f, t_f^{\tilde{\Gamma}}; x_i, E_i \right) = E_f, \quad (114)$$

and can be interpreted as follows. Since $\partial \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}} / \partial t_f = -E_f^{\tilde{\Gamma}}$, where $E_f^{\tilde{\Gamma}}$ is the final energy on the trajectory $\tilde{\Gamma}$ (see Appendix A.2.1), the instants $t_f^{\tilde{\Gamma}}$ are those values of t_f for which the final energy $E_f^{\tilde{\Gamma}}$ equals E_f . The trajectories defined by the boundary conditions $(x_f, t_f^{\tilde{\Gamma}}; x_i, E_i)$ are therefore simply the root trajectories $\tilde{\Gamma}$ of the propagator $\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i)$, and the phases $\phi_{\tilde{\Gamma}}(t_f^{\tilde{\Gamma}}; E_f)$ are the corresponding values of generalised action in units of \hbar

$$\phi_{\tilde{\Gamma}} \left(t_f^{\tilde{\Gamma}}; E_f \right) = \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i) / \hbar. \quad (115)$$

We now introduce an approximation for $\phi_{\tilde{\Gamma}}(t_f; E_f)$ about the points of stationary phase $t_f^{\tilde{\Gamma}}$. The simplest such approximation is a quadratic expansion in t_f

$$\phi_{\tilde{\Gamma}}(t_f; E_f) \approx \frac{1}{\hbar} \left[\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i) + \frac{1}{2} \left(t_f - t_f^{\tilde{\Gamma}} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial t_f^2} \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}} \left(x_f, t_f^{\tilde{\Gamma}}; x_i, E_i \right) \right]. \quad (116)$$

Whereas the phase $\phi_{\tilde{\Gamma}}(t_f; E_f)$ is inversely proportional to \hbar , the amplitude $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ is independent of \hbar . Hence the variation of $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}$ about a stationary phase point is negligible

compared to that of $\phi_{\bar{\Gamma}}$ in the semiclassical limit $\hbar \rightarrow 0$. We therefore use a zeroth order approximation for $\tilde{A}_{\bar{\Gamma}}$ near the stationary phase point

$$\tilde{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) \approx \tilde{A}_{\bar{\Gamma}}\left(x_f, t_f^{\bar{\Gamma}}; x_i, E_i\right). \quad (117)$$

Substituting the approximations (116) and (117) into the integral (111) we obtain

$$\begin{aligned} \tilde{K}^{(\text{sc})}(x_f, E_f; x_i, E_i) &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_{\bar{\Gamma}} \tilde{A}_{\bar{\Gamma}}\left(x_f, t_f^{\bar{\Gamma}}; x_i, E_i\right) e^{i\tilde{S}_{\bar{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i)/\hbar} \times \\ &\int dt_f e^{\frac{i}{2\hbar}(t_f - t_f^{\bar{\Gamma}})^2 \frac{\partial^2}{\partial t_f^2} \tilde{S}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f^{\bar{\Gamma}}; x_i, E_i)}. \end{aligned} \quad (118)$$

Since the resulting integrand is Gaussian, the expression can easily be evaluated, giving

$$\tilde{K}^{(\text{sc})}(x_f, E_f; x_i, E_i) \approx \sum_{\bar{\Gamma}} \frac{\tilde{A}_{\bar{\Gamma}}\left(x_f, t_f^{\bar{\Gamma}}; x_i, E_i\right)}{\left[-i \frac{\partial^2}{\partial t_f^2} \tilde{S}_{\bar{\Gamma}}\left(x_f, t_f^{\bar{\Gamma}}; x_i, E_i\right)\right]^{1/2}} e^{i\tilde{S}_{\bar{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i)/\hbar}, \quad (119)$$

where the phase $e^{-i\pi/4}$ is taken for the square root if $\partial^2 \tilde{S}_{\bar{\Gamma}}/\partial t_f^2$ is positive, and the phase $e^{i\pi/4}$ if it is negative. The amplitudes of the terms in (119) can be simplified by substituting the value (43) for $\tilde{A}_{\bar{\Gamma}}\left(x_f, t_f^{\bar{\Gamma}}; x_i, E_i\right)$ and using the relation

$$\frac{\partial^2}{\partial t_f^2} \tilde{S}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) = - \left(\frac{\partial E_f}{\partial t_f} \right)_{x_f, x_i, E_i}. \quad (120)$$

This gives

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{A}_{\bar{\Gamma}}\left(x_f, t_f^{\bar{\Gamma}}; x_i, E_i\right)}{\left[-i \frac{\partial^2}{\partial t_f^2} \tilde{S}_{\bar{\Gamma}}\left(x_f, t_f^{\bar{\Gamma}}; x_i, E_i\right)\right]^{1/2}} &= (2i\pi\hbar)^{-1/2} \left[\frac{m^2}{p_i^{\bar{\Gamma}} p_f^{\bar{\Gamma}}} \left(\frac{\partial t_i^{\bar{\Gamma}}}{\partial E_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \right]^{1/2} \\ &= \tilde{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i), \end{aligned} \quad (121)$$

where $\tilde{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ was introduced in definition (52). Hence expression (119) is identical to the WKB approximation $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ (50). Note that if the phase of $\tilde{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ is known, then equation (121) determines the phase of $\tilde{A}_{\bar{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$, and thus the value of the Maslov index $\tilde{\nu}_{\bar{\Gamma}}$ (53).

We have shown above that the stationary phase method applied to the integral (78) yields the value of $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ given the value of $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$. It is in fact possible to transform among all the WKB propagators by successive applications of the stationary phase method.

In the forbidden zone, there are no real stationary phase points, and the integration contour must be deformed to pass over saddle points in the complex plane. To each saddle

point there corresponds a complex root trajectory. The contour must be chosen such that it remains as far as possible in the ‘valleys’ of the function $\exp\{-\text{Im}[\phi_{\bar{\Gamma}}(t_f; E_f)]\}$. This requirement leads to the result that only certain saddle points are traversed, and provides an alternative explanation for the fact that not all complex root trajectories are included in the WKB solution.

3.1.1 Example: the linear potential

As an example we shall apply the stationary phase method to the calculation of the propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$ for the linear potential $V(x) = Fx$. Given our definition (19a) of $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$, the most natural approach might be to write it as an integral over the Feynman propagator. This is the method adopted by McLaughlin [36]. There is however a simpler approach, which for our purposes is more appropriate. Since $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$ represents a wavefunction, it can be expressed as a Fourier transform over the corresponding momentum distribution, which we shall denote by $\bar{\bar{K}}(p_f, t_f; x_i, E)$, and which is defined as

$$\bar{\bar{K}}(p_f, t_f; x_i, E) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{t_f} dt_i \langle p_f | U(t_f, t_i) | x_i \rangle e^{-iE t_i / \hbar}. \quad (122)$$

In terms of this momentum distribution, $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$ can be expressed as

$$\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp_f \bar{\bar{K}}(p_f, t_f; x_i, E) e^{ip_f x_f / \hbar}. \quad (123)$$

Following the method of the previous section, we now approximate the propagator $\tilde{K}(p_f, t_f; x_i, E)$ in the integrand by its WKB expression

$$\bar{\bar{K}}_{\text{WKB}}(p_f, t_f; x_i, E) = \sum_{\bar{\Gamma}} \bar{\bar{A}}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; x_i, E) e^{i\bar{\bar{S}}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; x_i, E) / \hbar}, \quad (124)$$

where the generalised action $\bar{\bar{S}}_{\bar{\Gamma}}$ and the semiclassical amplitude $\bar{\bar{A}}_{\bar{\Gamma}}$ are defined analogously to those of the other propagators: the generalised action is a Legendre transform of the classical action, and the semiclassical amplitude is the square root of the classical momentum density.

We now calculate $\bar{\bar{S}}_{\bar{\Gamma}}$ and $\bar{\bar{A}}_{\bar{\Gamma}}$ explicitly, supposing that $E = 0$ and that x_i is large and negative. For every momentum p_f in the range $|p_f| < \sqrt{-2mFx_i}$ there is exactly one root trajectory $\bar{\Gamma}$. For positive p_f it is a direct path from the point x_i to the point $x_f^{\bar{\Gamma}} = -p_f^2/2mF$, and for negative p_f it is a path joining the same two points but undergoing reflection at the turning point (see Figure 6). The generalised action $\bar{\bar{S}}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; x_i, E)$ can be evaluated on this trajectory using the fact that

$$\frac{\partial \bar{\bar{S}}_{\bar{\Gamma}}}{\partial p_f} = -x_f^{\bar{\Gamma}} = \frac{p_f^2}{2mF}, \quad (125)$$

where the first equality follows from the definition of $\bar{\bar{S}}_{\bar{\Gamma}}$ as a Legendre transform of the classical action. Integrating the above equation gives

$$\bar{\bar{S}}_{\bar{\Gamma}}(p_f, t_f; x_i, E = 0) = \frac{p_f^3}{6mF} + C_{\bar{\Gamma}}, \quad (126)$$

where the constant of integration $C_{\bar{f}}$ equals

$$C_{\bar{f}} = \frac{2}{3} \sqrt{2mF} (-x_i)^{3/2}. \quad (127)$$

The semiclassical amplitude $\bar{A}_{\bar{f}}$ is the square root of the momentum density

$$\bar{A}_{\bar{f}}(p_f, t_f; x_i, E = 0) = (2i\pi\hbar)^{-1/2} \left[\frac{m}{p_i^{\bar{f}}} \left(\frac{\partial t_i^{\bar{f}}}{\partial p_f} \right)_{t_f, x_i, E} \right]^{1/2}. \quad (128)$$

Substituting $p_i^{\bar{f}} = \sqrt{-2mFx_i}$ and using the fact that

$$\left(\frac{\partial p_f}{\partial t_i^{\bar{f}}} \right)_{t_f, x_i, E} = F, \quad (129)$$

we obtain the result

$$\bar{A}_{\bar{f}}(p_f, t_f; x_i, E = 0) = (2i\pi\hbar)^{-1/2} \sqrt[4]{\frac{m}{-2F^3 x_i}}. \quad (130)$$

Equations (126) and (130) are valid for p_f in the range $|p_f| < \sqrt{-2mFx_i}$, where exactly one root trajectory exists. Provided x_i is chosen such that $x_i \ll x_f$, the contributions to the integral (123) from values of p_f outside this range are negligible and we can approximate the propagator \tilde{K} by

$$\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E = 0) \approx \frac{e^{-i\pi/4}}{2\pi\hbar} \sqrt[4]{\frac{m}{-2F^3 x_i}} e^{i\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}(-x_i)^{3/2}} \int dp_f e^{i\phi(p_f; x_f)}, \quad (131)$$

where

$$\phi(p_f; x_f) = \frac{p_f^3}{6mF\hbar} + \frac{p_f x_f}{\hbar}. \quad (132)$$

The integral in (131) can be calculated exactly, and reproduces the Airy function which appears in expression (55) for $x_f > x_i$. However we shall show that by applying the stationary phase method to (131) we obtain the WKB value (62) of $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E)$.

For every value of $x_f < 0$ the phase $\phi(p_f; x_f)$ has two stationary phase points p_f^\pm , which are given by

$$p_f^\pm = \pm \sqrt{-2mFx_f}, \quad (133)$$

and which correspond to the incident and reflected trajectories shown in Figure 6. The phase is expanded to second order in p_f about these stationary points as follows

$$\phi(p_f; x_f) = \pm \frac{1}{\hbar} \left[-\frac{2}{3} \sqrt{2mF} (-x_f)^{3/2} + \left(-\frac{x_f}{2mF} \right)^{1/2} (p_f - p_f^\pm)^2 \right]. \quad (134)$$

Substituting this approximation into (131) and summing over both stationary phase points gives

$$\begin{aligned} \tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E = 0) &\approx \frac{e^{-i\pi/4}}{2\pi\hbar} \sqrt[4]{\frac{m}{-2F^3 x_i}} e^{i\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}(-x_i)^{3/2}} \times \\ &\sum_{\pm} e^{\mp i\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}(-x_f)^{3/2}} \int dp_f e^{\pm \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{x_f}{2mF}\right)^{1/2} (p_f - p_f^{\pm})^2}. \end{aligned} \quad (135)$$

Since the integrand is Gaussian, expression (135) can be evaluated exactly, giving

$$\begin{aligned} \tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E = 0) &\approx \sqrt{\frac{m}{4\pi\hbar F}} \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt[4]{x_i x_f}} e^{i\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}(-x_i)^{3/2}} \sum_{\pm} e^{\pm i\pi/4} e^{\mp i\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}(-x_f)^{3/2}} \\ &= \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar F}} \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt[4]{x_i x_f}} e^{i\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}(-x_i)^{3/2}} \sin \left[\frac{2}{3} \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}} (-x_f)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right], \end{aligned} \quad (136)$$

which is identical to the WKB solution (62).

In the forbidden zone $x_f > 0$ the stationary phase points are imaginary

$$p_f^{\pm} = \mp i \sqrt{2mF x_f}, \quad (137)$$

and the appropriate integration contour to take in (131) is one which passes over the point p_f^- along the line of steepest descent of the function $\exp\{-\text{Im}[\phi(p_f; x_f)]\}$ (see Figure 15). In the semiclassical limit only values of p_f in the immediate vicinity of p_f^- contribute to the integral and we can use a quadratic approximation for the phase

$$\phi(p_f; x_f) = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{2}{3} \sqrt{2mF} (x_f)^{3/2} + \left(\frac{x_f}{2mF} \right)^{1/2} (p_f - p_f^-)^2 \right]. \quad (138)$$

Substituting this expression into (131)

$$\begin{aligned} \tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E = 0) &\approx \frac{e^{-i\pi/4}}{2\pi\hbar} \sqrt[4]{\frac{m}{-2F^3 x_i}} e^{i\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}(-x_i)^{3/2}} \times \\ &e^{-\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}} x_f^{3/2}} \int dp_f e^{-\frac{1}{\hbar} \left(\frac{x_f}{2mF} \right)^{1/2} (p_f - p_f^{\pm})^2}, \end{aligned} \quad (139)$$

and evaluating the integral, we obtain

$$\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E = 0) \approx \frac{1}{2} \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar F}} \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt[4]{-x_i x_f}} e^{i\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}(-x_i)^{3/2}} e^{-\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}} x_f^{3/2}}, \quad (140)$$

which is identical to the WKB result (71).

Note that at the turning point $x_f = 0$ the expressions (136) and (140) diverge. This is due to the fact that the quadratic term in $\phi(p_f; x_f)$ vanishes for $x_f = 0$ (see expressions (134) and (138)). In the neighbourhood of this point it is invalid to truncate the series expansion for the phase at second order, and the standard stationary phase method is not applicable. In the following section we obtain a local approximation for the propagator near the caustic by expanding the phase to third order.

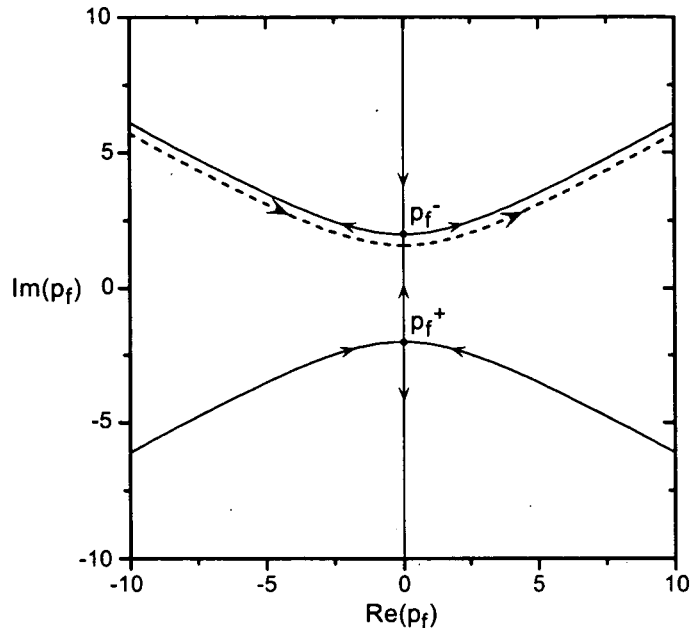


Figure 15: The stationary phase points p_f^\pm for a linear potential. The momentum p_f is plotted in units of $\sqrt[3]{mF\hbar}$, and the final position is chosen in the forbidden zone $x_f = 2\sqrt[3]{\hbar^2/mF}$. The solid lines indicate contours along which the real part of the phase $\phi(p_f; x_f)$ is constant, the arrows pointing in the direction of steepest descent of $\exp\{-\text{Im}[\phi(p_f; x_f)]\}$. The dashed line is the integration contour, which traverses the stationary phase point p_f^- along the path of steepest descent, and rejoins the real p_f axis at $\pm\infty$.

3.2 Local approximation at a caustic

The stationary phase approximation discussed in the previous section reproduces the results of the WKB approximation, and thus fails in the neighbourhood of caustics. However, unlike the WKB method, the stationary phase method can easily be extended to treat caustics.

The reason for the failure of the stationary phase approximation is that the coefficient of the second order term of the phase (116) vanishes at a caustic. This was demonstrated in Section 3.1.1 in the particular case of a linear potential, but can be shown in general as follows. A caustic in $\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ occurs when the semiclassical amplitude $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ (52) diverges, that is, when $\partial_{t_i} E_f = 0$. Provided $\partial_{t_i} t_f$ is not simultaneously zero, it follows that $\partial_{t_f} E_f$ vanishes, that is, the energy-time phase space curve is horizontal (see Figure 5). Since $\partial_{t_f} E_f$ is proportional to the second derivative of the generalised action (120), this implies that the second order coefficient of $\phi_{\tilde{\Gamma}}(t_f; E_f)$ (116) vanishes, and a higher order expansion of the phase is required.

The simplest caustic, the fold caustic, corresponds to a zero of $\partial_{t_f} E_f$ of multiplicity one. Let $E_f^{(c)}$ denote the energy at which the caustic occurs, and $t_f^{(c)}$ the corresponding stationary phase point. For values of t_f and E_f close to the caustic $(t_f^{(c)}, E_f^{(c)})$, the phase may be

expanded as

$$\phi_{\bar{\Gamma}}(t_f; E_f) \approx \phi_{\bar{\Gamma}}(t_f^{(c)}; E_f^{(c)}) + \frac{1}{3! \hbar} (t_f - t_f^{(c)})^3 \frac{\partial^3}{\partial t_f^3} \tilde{S}(x_f, t_f^{(c)}; x_i, E_i) + \frac{1}{\hbar} (E_f - E_f^{(c)}) t_f. \quad (141)$$

The stationary phase points $t_f^{\ddot{\Gamma}}$ for values of E_f close to the caustic are obtained by setting $\partial_{t_f} \phi_{\bar{\Gamma}}(t_f^{\ddot{\Gamma}}; E_f) = 0$ in (141), giving

$$(t_f^{\ddot{\Gamma}} - t_f^{(c)})^2 \frac{\partial^3}{\partial t_f^3} \tilde{S}(x_f, t_f^{(c)}; x_i, E_i) + 2(E_f - E_f^{(c)}) = 0. \quad (142)$$

This equation has two roots $t_f^{\ddot{\Gamma}}$ for every energy E_f except $E_f^{(c)}$, at which they are degenerate. The caustic can therefore be thought of as the point of convergence of two stationary phase points. For classically allowed values of the energy the stationary phase points are real, and for energies on the classically forbidden side of the caustic they are complex, as shown in Figure 14.

Using expression (141) we can derive a condition under which the stationary phase method of Section 3.1 is valid. The expansion of the phase $\phi_{\bar{\Gamma}}(t_f; E_f)$ about a stationary point may be truncated at second order provided that the third order term remains sufficiently small with respect to the quadratic term,

$$\left| \frac{1}{3!} (t_f - t_f^{\ddot{\Gamma}})^3 \partial_{t_f}^3 \phi_{\bar{\Gamma}}(t_f^{\ddot{\Gamma}}; E_f) \right| \ll 1 \quad \text{for} \quad (t_f - t_f^{\ddot{\Gamma}})^2 = \left| \partial_{t_f}^2 \phi_{\bar{\Gamma}}(t_f^{\ddot{\Gamma}}; E_f) \right|^{-1}. \quad (143)$$

This condition can be expressed as

$$\left| \partial_{t_f}^3 \phi_{\bar{\Gamma}}(t_f^{\ddot{\Gamma}}; E_f) \right| \ll \left| \partial_{t_f}^2 \phi_{\bar{\Gamma}}(t_f^{\ddot{\Gamma}}; E_f) \right|^{3/2}. \quad (144)$$

Using expressions (141) and (142) we can determine the range of energies over which the stationary phase method is valid

$$\left| \frac{E_f - E_f^{(c)}}{\hbar} \right|^3 \gg \left| \partial_{t_f}^3 \phi_{\bar{\Gamma}}(t_f^{(c)}; E_f^{(c)}) \right|. \quad (145)$$

Energies which do not satisfy condition (145) can be said to lie in the neighbourhood of the caustic. The stationary phase method is then not applicable, and a third order expansion is required.

If the caustic involved is not a simple fold caustic, but corresponds to a zero of $\partial_{t_f} E_f$ of multiplicity greater than one, then an appropriate higher order expansion of the phase is necessary. According to the topology of the caustic, the phase can be written in one of several simple generic forms. The appropriate generic form is used to obtain a uniform approximation for the solution in the following way.

Starting from the integral expression (111) for the propagator, a new variable of integration \hat{t} is defined such that the phase $\phi_{\bar{\Gamma}}(t_f; E_f)$, when written in terms of \hat{t} , takes the appropriate

generic form. The amplitude of the integrand is then approximated by a simple expansion, which is locally accurate at both (or all) stationary phase points simultaneously.

In the following sections we shall apply uniform approximations to the system discussed in the introduction involving a modulated potential well. First the standard fold-caustic uniform approximation is used to treat each caustic individually. This is valid only when the caustics are isolated from each other, that is, when there is no value of energy which lies simultaneously in the neighbourhood of two or more caustics. We find that if the modulation amplitude of the potential is too low this condition is not satisfied. The difficulty is avoided by introducing a periodic uniform approximation, which treats all the caustics simultaneously.

3.3 Uniform approximation for an isolated caustic

In this section we use the uniform approximation to calculate $\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ for the system described in the introduction, treating each of the caustics independently. Two caustics occur per period τ , one at the upper bound of the range of allowed energies, and the other at the lower bound (see Figure 14). To calculate the weights of sidebands that lie in the neighbourhood of one of the caustics, we apply the uniform approximation to that caustic. Clearly the method is invalid when one or more sidebands lies in the neighbourhood of both the upper and lower caustics.

We start from expression (111), assuming for simplicity that at every final time t_f the wavefunction has only one root trajectory $\tilde{\Gamma}$

$$\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dt_f \tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i) e^{i\phi(t_f; E_f)}. \quad (146)$$

This can usually be achieved by choosing the final position x_f appropriately. The fact that the result is independent of x_f beyond the potential shows that this assumption is not in fact necessary. The time t_f is divided into intervals of a single period $[T_f + j\tau, T_f + (j+1)\tau)$, where T_f is chosen in the following way: If the uniform approximation is to be applied to the upper caustic, T_f is a time at which the phase space diagram Figure 14 reaches the lower limit of the allowed energy range. Similarly if the lower caustic is the one to be treated, T_f is chosen to be one of the times coinciding with the upper caustic. Each interval $(T_f + j\tau, T_f + (j+1)\tau)$ thus encloses exactly one caustic. $\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ is expressed as a sum of integrals over each of these intervals as follows

$$\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_j \int_{T_f + j\tau}^{T_f + (j+1)\tau} dt_f \tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i) e^{i\phi(t_f; E_f)}. \quad (147)$$

Using definition (112) and equation (80) we can write the phase $\phi(t_f; E_f)$ as the sum of a periodic and a linear term in t_f

$$\phi(t_f; E_f) = \phi(t_f - \tau, E_f) + \frac{2\pi}{\hbar\omega} (E_f - E_i), \quad (148)$$

which, when substituted into equation (147), gives

$$\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_j e^{i2\pi j(E_f - E_i)/\hbar\omega} \int_{T_f}^{T_f + \tau} dt_f \tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i) e^{i\phi(t_f; E_f)}. \quad (149)$$

Using the relation (99), this expression can be rewritten as

$$\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) \approx \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_n \delta(E_f - E_i - n\hbar\omega) \int_{T_f}^{T_f+\tau} dt_f \tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i) e^{i\phi(t_f; E_f)}. \quad (150)$$

Following the treatment of Berry [24], we now apply the fold-caustic uniform approximation to the integral in (150). Within the interval $(T_f, T_f + \tau)$ the integrand contains exactly two stationary phase points t_f^\pm for every energy E_f except the caustic energy, at which they are degenerate. For energies in the classically allowed zone the stationary phase points are real, and in the forbidden zone they form a complex conjugate pair. The fold-caustic uniform approximation is a local approximation for the integrand which is valid about both stationary phase points simultaneously.

3.3.1 Generic form for the phase

Within the interval $(T_f, T_f + \tau)$ it is possible to make a change of variable from t_f to \hat{t} which transforms the phase $\phi(t_f; E_f)$ into the generic cubic form appropriate for a fold caustic,

$$\phi(t_f; E_f) \equiv \hat{\phi}(\hat{t}; E_f) \equiv \pm \left(\frac{1}{3} \hat{t}^3 - \mu \hat{t} \right) + \eta. \quad (151)$$

The upper sign is used if the caustic occurs at the upper limit of the range of allowed energies, and the lower sign if it occurs at the lower limit. Equation (151) is not an approximation, but rather the definition of the variable \hat{t} . Due to our choice of T_f it is always possible to find μ and η such that \hat{t} is diffeomorphic to t_f in the range $(T_f, T_f + \tau)$. The coefficients μ and η , and the diffeomorphism relating \hat{t} to t_f , all depend on the energy E_f . Given the choice of signs in expression (151) for the upper and lower caustics, the derivative $dt_f/d\hat{t}$ is positive throughout the interval $(T_f, T_f + \tau)$.

Substituting expression (151) into (150) we obtain

$$\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) \approx \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_n \delta(E_f - E_i - n\hbar\omega) e^{i\eta} \int_{\hat{t}(T_f)}^{\hat{t}(T_f+\tau)} d\hat{t} \tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i) \frac{dt_f}{d\hat{t}} e^{\pm i[\hat{t}^3/3 - \mu\hat{t}]} \quad (152)$$

where $\hat{t}(T_f)$ and $\hat{t}(T_f + \tau)$ denote the values of \hat{t} corresponding to $t_f = T_f$ and $t_f = T_f + \tau$ respectively. The exponential in the integrand now has a simple form, although the amplitude contains the additional factor $dt_f/d\hat{t}$.

3.3.2 Calculation of the phase parameters

The values of the parameters η and μ are obtained using the requirement that t_f be diffeomorphic to \hat{t} in the range $(T_f, T_f + \tau)$. To satisfy this requirement, the derivative $d\hat{t}/dt_f$ must neither vanish nor diverge, and hence the stationary points of $\phi(t_f; E_f)$ must correspond to those of $\hat{\phi}(\hat{t}; E_f)$

$$t_f : \partial_{t_f} \phi(t_f; E_f) = 0 \leftrightarrow \hat{t} : \partial_{\hat{t}} \hat{\phi}(\hat{t}; E_f) = 0. \quad (153)$$

Since for every energy there are two stationary phase points in the interval of integration, this requirement provides two conditions with which to solve for the parameters μ and η . Note

that at the caustic energy, where the stationary phase points are degenerate, μ must equal zero, and the requirement (153) then provides a single condition with which to solve for the remaining parameter η .

Let \hat{t}^\pm denote the stationary phase points of $\hat{\phi}(\hat{t}; E_f)$. Their values are determined by the equation

$$\partial_{\hat{t}}\hat{\phi}(\hat{t}^\pm; E_f) = \pm \left[(\hat{t}^\pm)^2 - \mu \right] \equiv 0. \quad (154)$$

In solving for the roots of $\partial_{\hat{t}}\hat{\phi}(\hat{t}; E_f)$ above we must consider two cases. The first case occurs for energies in the classically allowed zone, for which $\mu > 0$ and the roots are real. In the second case, when the energy falls in the forbidden zone, $\mu < 0$ and the roots are imaginary.

In the allowed zone the correspondence relations (153) can be written as

$$\begin{aligned} t_f^+ &\leftrightarrow \hat{t}^+ = \mp\sqrt{\mu} \\ t_f^- &\leftrightarrow \hat{t}^- = -\hat{t}^+, \end{aligned} \quad (155)$$

where the upper and lower signs correspond, as before, to the upper and lower caustics respectively. This choice of signs is consistent with the convention established in Section 2.2, that t_f^\pm denote the point for which $\pm\partial E_f/\partial t_i > 0$ (see Figure 14). When inserted into (151) the expressions (155) give

$$\phi(t_f^\pm; E_f) = \pm \frac{2}{3}\mu^{3/2} + \eta, \quad (156)$$

which can be used to solve for μ and η . Writing $\phi^\pm \equiv \phi(t_f^\pm; E_f)$, we obtain

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{\phi^+ + \phi^-}{2} \equiv \bar{\phi} \\ \frac{4}{3}\mu^{3/2} &= [\phi^+ - \phi^-] \equiv \Delta\phi. \end{aligned} \quad (157)$$

where $\bar{\phi}$ denotes the mean of the phases at the stationary phase points, and $\Delta\phi$ is the difference between them.

In the forbidden zone ($\mu < 0$) the stationary phase points are complex

$$\begin{aligned} t_f^+ &\leftrightarrow \hat{t}^+ = \mp i\sqrt{-\mu} \\ t_f^- &\leftrightarrow \hat{t}^- = -\hat{t}^+, \end{aligned} \quad (158)$$

where the signs are chosen so that, as in Section 2.2, t_f^- denotes the point at which the phase $\phi(t_f; E_f)$ has a positive imaginary part. Substituting these values into the mapping relation (151) we obtain

$$\phi^\pm = \mp i \frac{2}{3}(-\mu)^{3/2} + \eta, \quad (159)$$

which, when solved for μ and η , gives

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{\phi^+ + \phi^-}{2} \equiv \bar{\phi} \\ -\frac{4}{3}(-\mu)^{3/2} &= \frac{\phi^+ - \phi^-}{i} = \frac{\Delta\phi}{i}. \end{aligned} \quad (160)$$

Note that by equation (115), the parameters μ and η are entirely determined by the generalised action $\tilde{S}^\pm(x_f, E_f; x_i, E_i)$, both in the allowed zone and in the forbidden zone, where \tilde{S}^\pm is complex.

3.3.3 Approximation of the amplitude

An approximation is now introduced for the amplitude $\tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ ($dt_f/d\hat{t}$) of the integrand in expression (152). Since the largest contributions to the integral come from the neighbourhood of the stationary phase points, the approximation must be accurate at these points. Since, by equation (154), the stationary phase points satisfy the relation

$$(\hat{t}^\pm)^2 - \mu = 0, \quad (161)$$

it is valid to treat the quantity $(\hat{t}^2 - \mu)$ as a small parameter in their neighbourhood. The amplitude can be expanded in powers of $(\hat{t}^2 - \mu)$ as

$$\tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i) \frac{dt_f}{d\hat{t}} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_m (p_m \pm q_m \hat{t}) (\hat{t}^2 - \mu)^m, \quad (162)$$

where \mathcal{N} is a scaling factor

$$\mathcal{N} = \sqrt{\frac{4\pi\hbar\omega^2 \sqrt{E_i E_f}}{m}}, \quad (163)$$

and where p_m and q_m are coefficients to be determined. Values of p_m and q_m which satisfy equation (162) can always be found, since the sum over m forms a complete set of functions. However, rather than calculate all the coefficients p_m and q_m , the amplitude is approximated by the lowest order term of the series

$$\mathcal{N} \tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i) \frac{dt_f}{d\hat{t}} \approx p \pm q \hat{t}. \quad (164)$$

The requirement that this relation be exact at both stationary phase points provides two conditions with which to solve for the parameters p and q . In the classically allowed zone this is done as follows. The values of \hat{t} at the stationary phase points (155) are inserted into the relation (164), giving

$$\begin{aligned} \mathcal{N} \tilde{A}(x_f, t_f^+; x_i, E_i) \left. \frac{dt_f}{d\hat{t}} \right|_{t_f^+} &= p - q\sqrt{\mu} \\ \mathcal{N} \tilde{A}(x_f, t_f^-; x_i, E_i) \left. \frac{dt_f}{d\hat{t}} \right|_{t_f^-} &= p + q\sqrt{\mu}. \end{aligned} \quad (165)$$

The derivative $(dt_f/d\hat{t})$ can be found by two successive differentiations of the mapping relation (151), using the definition (112) of $\phi(t_f; E_f)$. The first differentiation gives

$$\frac{1}{\hbar} \left[\frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} + E_f \right] \frac{dt_f}{d\hat{t}} = \pm (\hat{t}^2 - \mu), \quad (166)$$

and the second gives

$$\frac{1}{\hbar} \left\{ \frac{\partial^2 \tilde{S}}{\partial t_f^2} \left(\frac{dt_f}{d\hat{t}} \right)^2 + \left[\frac{\partial \tilde{S}}{\partial t_f} + E_f \right] \frac{d^2 t_f}{d\hat{t}^2} \right\} = \pm 2\hat{t}. \quad (167)$$

By equation (114), the term which appears in square brackets in equation (167) vanishes at the stationary points. Substituting the value of $\partial^2 \tilde{S} / \partial t_f^2$ from equation (120), we obtain

$$\left. \frac{dt_f}{d\hat{t}} \right|_{t_f^\pm} = \sqrt{\pm 2\hbar\sqrt{\mu} \left(\frac{\partial E_f}{\partial t_f} \right)^{-1}_{x_f, E_i, x_i} \Big|_{t_f^\pm}}. \quad (168)$$

The argument of the square root in (168) is positive for both stationary phase points, since $\pm \partial E_f / \partial t_i > 0$ at the points t_f^\pm respectively, and $\partial t_f / \partial t_i$ is assumed to be positive. By inserting (168) into (165), and using the definition (103) of \tilde{B} we obtain

$$\begin{aligned} p &= \sqrt{\pi} \sqrt[4]{\mu} \left[\tilde{B}^+ + \tilde{B}^- \right] \\ q &= -\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt[4]{\mu}} \left[\tilde{B}^+ - \tilde{B}^- \right]. \end{aligned} \quad (169)$$

The same method is followed to solve for $\tilde{A}(dt_f/d\hat{t})$ in the forbidden zone. Equation (165) is replaced by

$$\begin{aligned} \mathcal{N} \tilde{A}(x_f, t_f^+; x_i, E_i) \left. \frac{dt_f}{d\hat{t}} \right|_{t_f^+} &= p - iq\sqrt{-\mu} \\ \mathcal{N} \tilde{A}(x_f, t_f^-; x_i, E_i) \left. \frac{dt_f}{d\hat{t}} \right|_{t_f^-} &= p + iq\sqrt{-\mu}, \end{aligned} \quad (170)$$

and the coefficients p and q are found to equal

$$\begin{aligned} p &= \sqrt{\pi} \sqrt[4]{-\mu} \left[\tilde{B}^+ + \tilde{B}^- \right] \\ q &= -\frac{\sqrt{\pi}}{i\sqrt[4]{-\mu}} \left[\tilde{B}^+ - \tilde{B}^- \right], \end{aligned} \quad (171)$$

where the amplitudes \tilde{B}^\pm are defined in the forbidden zone by equation (107). Since they are complex conjugates (108), both p and q are real.

In both the allowed and forbidden zones p and q depend only on classical quantities associated with the root trajectories $\tilde{\Gamma}^\pm$, namely the generalised action (through μ) and semiclassical amplitudes (through \tilde{B}^\pm).

3.3.4 The uniform approximation

Substituting (164) into (152) we obtain the following expression for the energy propagator

$$\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) \approx \frac{e^{i\eta}}{2\pi \left(\frac{2\sqrt{E_i E_f}}{m} \right)^{1/2}} \sum_n \delta(E_f - E_i - n\hbar\omega) \int_{\hat{t}(T_f)}^{\hat{t}(T_f+\tau)} d\hat{t} (p \pm q\hat{t}) e^{\pm i[\hat{t}^3/3 - \mu\hat{t}]}. \quad (172)$$

In order to obtain an analytical result we suppose that the limits of integration $\hat{t}(T_f)$ and $\hat{t}(T_f + \tau)$ are sufficiently large that they can be replaced by $-\infty$ and ∞ respectively. This

replacement is one of the factors that limits the validity of the fold-caustic treatment, as will be discussed further in the following section. Integrating between $-\infty$ and ∞ gives the result

$$\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) \approx \frac{e^{i\eta}}{\left(\frac{2\sqrt{E_i E_f}}{m}\right)^{1/2}} \sum_n \delta(E_f - E_i - n\hbar\omega) [p\text{Ai}(-\mu) - iq\text{Ai}'(-\mu)], \quad (173)$$

where Ai denotes the Airy function [37]. The sideband weights are therefore

$$I_n \approx |p\text{Ai}(-\mu) - iq\text{Ai}'(-\mu)|^2, \quad (174)$$

where μ , p and q are all functions of energy. They are plotted for a typical set of parameters in Figure 16(a). Since each depends only on the generalised action and semiclassical amplitudes associated with the root trajectories $\tilde{\Gamma}^\pm$, the uniform approximation (174) for the sideband weights is independent of x_f beyond the potential. In the limit $|\mu| \gg 1$ it reduces to the WKB expressions (105) and (109) in the classically allowed and forbidden zones respectively, thus providing the values of the Maslov indices. The sideband weights are shown in Figure 12(c) for the same parameters as used in Figure 16(a). Note that the fold-caustic treatment has eliminated the divergences present in the WKB approximation (Figure 12(b)). Figure 13(c) shows the weights of the central band and first order sidebands as calculated using the fold-caustic uniform approximation over a range of potential depths. For small values of the potential depth the fold-caustic treatment does not preserve the normalisation. The reason is that in this regime it is not valid to treat the upper and lower caustics independently. Even at intermediate values of the potential small discrepancies remain in the sideband weights.

An investigation of the accuracy and range of validity of the fold-caustic uniform approximation in other physical systems is presented by Mount [38].

3.3.5 Validity of the fold-caustic treatment

The fold-caustic treatment is valid if the caustics can be treated independently, that is, if there is no value of energy E_f which lies simultaneously in the neighbourhood of both the upper and lower caustics. Since the results of the fold-caustic treatment reduce to those of the WKB method for large values of $|\mu|$ (that is, for large values of $|\Delta\phi|$), any value of energy satisfying

$$|\Delta\phi| \gg 1 \quad (175)$$

can be said to lie outside the neighbourhood of the caustic. It is easily shown that (175) is equivalent to the condition (145) derived earlier.

The inequality (175) can however be used to obtain a geometrical interpretation of the regime of validity of the fold caustic treatment. The value of $\Delta\phi$ at a given sideband energy E_n equals the size in units of \hbar of the area bounded by the curve E_f -vs- t_f and the line $E = E_n$ (see Figure 14). This can be shown as follows. The curve E_f -vs- t_f intersects the line $E = E_n$

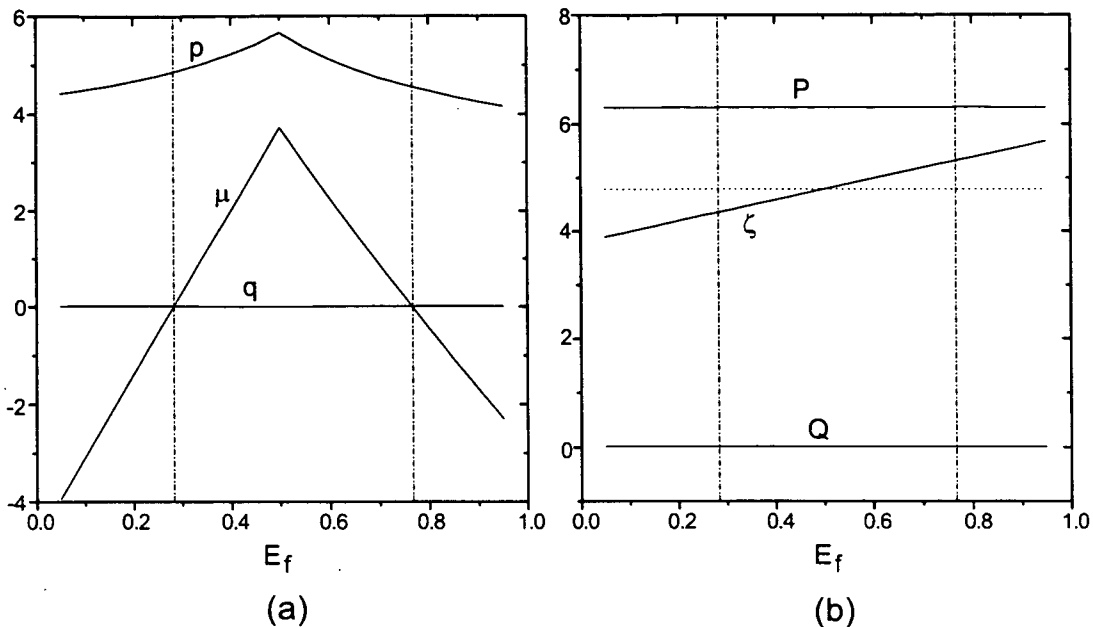


Figure 16: (a) The coefficients p , q , and μ used in the fold-caustic uniform approximation, and calculated here for the physical parameters $\hat{\omega} = 0.05$, $\hat{\sigma} = 6.0$ and $\hat{V} = 3.0$. They are plotted as a function of E_f , which is given in units of p_i^2/m . (b) The coefficients P , Q , and ζ used in the periodic uniform approximation, and calculated for the same physical parameters. The horizontal dotted line in graph (b) indicates the value of the modulation index obtained using the thin phase grating method. The vertical dot-dashed lines in each graph show the limits of the classically allowed energy range.

at the stationary phase points t_f^\pm . Integrating $E_n - E_f$ between these two points gives

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A} &\equiv \int_{t_f^-}^{t_f^+} dt_f (E_n - E_f) \\
 &= E_n(t_f^+ - t_f^-) + \int_{t_f^-}^{t_f^+} dt_f \left[\frac{\partial}{\partial t_f} \tilde{S}(x_f, t_f; x_i, E_i) \right] \\
 &= E_n(t_f^+ - t_f^-) + \left[\tilde{S}(x_f, t_f^+; x_i, E_i) - \tilde{S}(x_f, t_f^-; x_i, E_i) \right] \\
 &= \hbar \Delta \phi.
 \end{aligned} \tag{176}$$

The two shaded areas \mathcal{A}^+ and \mathcal{A}^- in Figure 14 are thus proportional to the phase differences $\Delta \phi$ evaluated about the upper and lower caustics respectively. If for any value of E_n neither \mathcal{A}^+ nor \mathcal{A}^- is significantly greater than \hbar then the fold caustic treatment is invalid. Using relation (148) for the phase $\phi(t_f; E_f)$, it can easily be shown that the areas \mathcal{A}^+ and \mathcal{A}^- differ by $2\pi n \hbar$ at energy E_n . Thus the condition of validity of the fold caustic treatment is that there are many sidebands in the classically allowed range.

3.4 A periodic uniform approximation

In the case where the caustics are not independent of each other, a higher order treatment must be used. Due to the periodicity of the problem, all the caustics must then be treated simultaneously. Starting from equation (146), we choose a periodic approximation for the integrand which is locally valid about all the stationary phase points simultaneously.

3.4.1 Generic form for the phase

Since the phase $\phi(t_f; E_f)$ is the sum of a periodic and a linear function in t_f (148), it is possible to make a change of variables from t_f to \hat{t} which transforms $\phi(t_f; E_f)$ to the generic form $\hat{\phi}(\hat{t}; E_f)$

$$\phi(t_f; E_f) \equiv \hat{\phi}(\hat{t}; E_f) \equiv \xi \hat{t} - \zeta \sin \hat{t} + \eta, \quad (177)$$

where the coefficient ξ , the modulation index ζ , and the overall phase η are all functions of the final energy E_f . The new variable \hat{t} is related to t_f by a diffeomorphism which obeys the relation

$$\hat{t}(t_f + \tau) = \hat{t}(t_f) + 2\pi. \quad (178)$$

Using equation (178) the linear terms of (177) and (148) can immediately be equated by setting

$$\xi = \frac{E_f - E_i}{\hbar\omega}. \quad (179)$$

Substituting equation (177) into (146), we obtain the following expression for the energy propagator

$$\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\eta} \int d\hat{t} \tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i) \frac{dt_f}{d\hat{t}} e^{i(\xi\hat{t} - \zeta \sin \hat{t})}. \quad (180)$$

Since the factors $\tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ and $(dt_f/d\hat{t})$ are both periodic, it is clear that the integral will vanish at non-integer values of ξ . This is the origin of the discrete structure of the spectrum.

3.4.2 Calculation of the phase parameters

Following the same procedure as in Section 3.3.2, the modulation index ζ and the overall phase η are calculated in terms of the values of $\phi(t_f; E_f)$ at the stationary phase points. We shall assume that ζ is positive. This can always be achieved by choosing the zero of \hat{t} appropriately. In order that \hat{t} be diffeomorphic to t_f the stationary phase points of $\phi(t_f; E_f)$ must correspond to those of $\hat{\phi}(\hat{t}; E_f)$. Since two stationary points exist per period, this requirement provides two conditions with which to solve for the parameters μ and η .

We shall denote the two stationary phase points of $\hat{\phi}(\hat{t}; E_f)$ which are closest to the origin by \hat{t}^\pm , the indices \pm being chosen according to the same conventions as in Sections 2.2 and 3.3. Their values are found by differentiating the expression for $\hat{\phi}(\hat{t}; E_f)$ given in equation (177),

$$\partial_{\hat{t}} \hat{\phi}(\hat{t}^\pm; E_f) = \xi - \zeta \cos \hat{t}^\pm \equiv 0. \quad (181)$$

The classically allowed energy range corresponds to the regime in which $|\xi| < \zeta$ and the roots \hat{t}^\pm of the above equation are real. Substituting \hat{t}^\pm into definition (177) produces two equations which implicitly determine the parameters ζ and η in terms of the phases $\phi^\pm = \dot{\phi}(\hat{t}^\pm; E_f)$ at the stationary points,

$$\begin{aligned}\eta &= \frac{\phi^+ + \phi^-}{2} \\ \frac{\phi^+ - \phi^-}{2} &= -\xi \arccos\left(\frac{\xi}{\zeta}\right) + \zeta \sqrt{1 - \left(\frac{\xi}{\zeta}\right)^2}.\end{aligned}\quad (182)$$

The classically forbidden zone corresponds to the regime in which $|\xi| > \zeta$ and the roots \hat{t}^\pm are complex conjugates. The parameters η and ζ can be then deduced from the equations

$$\begin{aligned}\eta &= \frac{\phi^+ + \phi^-}{2} + \pi\theta(-\xi) \\ \frac{\phi^+ - \phi^-}{2i} &= -|\xi| \operatorname{arccosh}\left(\frac{|\xi|}{\zeta}\right) + \zeta \sqrt{\left(\frac{\xi}{\zeta}\right)^2 - 1},\end{aligned}\quad (183)$$

where θ denotes the Heaviside function.

3.4.3 Approximation of the amplitude

An approximation is now obtained for the amplitude $\tilde{A}(dt_f/d\hat{t})$ of the integrand appearing in (180). As in Section 3.3.3, this is done by expanding about the points of stationary phase. Since the stationary points satisfy the relation (181), the quantity $(\cos \hat{t} - \xi/\zeta)$ may be treated as a small parameter in their vicinity. Given that $\tilde{A}(dt_f/d\hat{t})$ is periodic, it can be expanded in powers of $(\cos \hat{t} - \xi/\zeta)$ as

$$\tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i) \frac{dt_f}{d\hat{t}} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_m (P_m + Q_m \sin \hat{t}) \left(\cos \hat{t} - \frac{\xi}{\zeta}\right)^m, \quad (184)$$

where the scaling factor \mathcal{N} is defined in (163), and the sum on the right hand side forms a complete set of periodic functions. The amplitude $\tilde{A}(dt_f/d\hat{t})$ is approximated by the lowest order term in the series

$$\mathcal{N} \tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i) \frac{dt_f}{d\hat{t}} = P + Q \sin \hat{t}, \quad (185)$$

where the coefficients P and Q are calculated in a manner analogous to that of Section 3.3.3, and are found to equal

$$\begin{aligned}P &= \sqrt{\frac{\pi\zeta}{2}} \left[1 - \left(\frac{\xi}{\zeta}\right)^2\right]^{1/4} [\tilde{B}^+ + \tilde{B}^-] \\ Q &= -\sqrt{\frac{\pi\zeta}{2}} \left[1 - \left(\frac{\xi}{\zeta}\right)^2\right]^{-1/4} [\tilde{B}^+ - \tilde{B}^-]\end{aligned}\quad (186)$$

in the classically allowed zone, and

$$\begin{aligned} P &= \sqrt{\frac{\pi\zeta}{2}} \left[\left(\frac{\xi}{\zeta} \right)^2 - 1 \right]^{1/4} [\tilde{B}^+ + \tilde{B}^-] \\ Q &= -\sqrt{\frac{\pi\zeta}{2}} \left[\left(\frac{\xi}{\zeta} \right)^2 - 1 \right]^{-1/4} \frac{[\tilde{B}^+ - \tilde{B}^-]}{i} \end{aligned} \quad (187)$$

in the forbidden zone.

3.4.4 The uniform approximation

Substituting the approximation (185) for the amplitude $\tilde{A}(dt_f/d\hat{t})$ into the expression (180) for the propagator \tilde{K} gives

$$\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) \approx \left(\frac{2\sqrt{E_i E_f}}{m} \right)^{-1/2} \frac{e^{i\eta}}{2\pi\hbar\omega} \int d\hat{t} (P + Q \sin \hat{t}) e^{i(\xi\hat{t} - \zeta \sin \hat{t})}. \quad (188)$$

The integral vanishes at all energies except those for which ξ equals an integer n , and we obtain

$$\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) \approx \left(\frac{2\sqrt{E_i E_f}}{m} \right)^{-1/2} e^{i\eta} \sum_n \delta(E_f - E_i - n\hbar\omega) [PJ_n(\zeta) + iQJ'_n(\zeta)], \quad (189)$$

where J_n denotes the n th order Bessel function. The sideband weights are therefore

$$I_n \approx |PJ_n(\zeta) + iQJ'_n(\zeta)|^2, \quad (190)$$

where ζ , P and Q are all functions of energy E_f , and are plotted in Figure 16(b). Since they depend only on the generalised action and semiclassical amplitudes associated with the root trajectories $\tilde{\Gamma}^{\pm}$, the result (190) for the sideband weights is independent of x_f beyond the potential. Using the asymptotic approximations for the Bessel functions and their derivatives [37], it can be shown that in the limit $\hbar \rightarrow 0$ the predictions (190) of the periodic uniform approximation reduce to those of the fold-caustic uniform approximation (174). In the limit of small momentum transfer, the modulation index ζ is independent of energy E_f . If the variation of $\tilde{A}(dt_f/d\hat{t})$ with t_f is neglected then the parameter P equals unity and Q vanishes, and the result (190) reduces to that of the thin phase grating approximation (94).

The sideband weights are shown in Figure 12(d) for the same set of parameters as used in Figure 16(b). Note that the small systematic errors present in the fold-caustic uniform approximation (Figure 12(c)) have been eliminated. Figure 13(d) shows the weights of the central band and first order sidebands as calculated using the periodic uniform approximation over a range of potential depths. They are indistinguishable from the exact quantum mechanical results over the entire potential range investigated. In particular, they remain accurate in the regime of low modulation potentials, for which the fold-caustic treatment is invalid.

3.4.5 Generalisation to higher harmonics

Because the periodic uniform approximation presented above treats all the caustics simultaneously, it is sensitive to their topology. If for example the potential were such that more than two caustics occurred per period in the energy distribution, then additional harmonics would need to be added to the generic form (177) for the phase. In Appendix F we treat the case in which four caustics occur per period, and the generic phase contains a second harmonic. No explicit expressions can be found in this case for either the phase parameters or the coefficients of the amplitude expansion, and the final solution cannot be written in terms of standard functions.

A situation in which more than two caustics occur per period could arise if the potential itself contained higher harmonics. It should be noted however that the presence of higher harmonics in the potential does not *necessarily* result in additional caustics, since the high frequencies are more strongly attenuated (see Appendix F.5).

Conclusion

In this article we have considered the application of semiclassical path integral methods to a temporally periodic system. The problem considered was that of an atomic beam traversing a modulated potential well. The kinetic energy spectrum of the outgoing beam exhibits sidebands separated by multiples of $\hbar\omega$, where ω is the modulation frequency. A purely classical analysis however suggests that the atoms may exit the potential with any energy within a certain continuous allowed range. The discrete structure of the spectrum results from interference between those atoms which exit the potential at instants separated by multiples of a period.

To calculate the sideband weights we initially used a generalised form of the WKB method to approximate the wavefunction of the atoms after the interaction. The phase was given by a Legendre transform of the action along the classical trajectories, and the amplitude by the square root of the classical density. The sideband weights were estimated by taking the Fourier transform with respect to time of the resulting semiclassical wavefunction. The approach was found not to be successful due to the secular divergences introduced into the wavefunction by the WKB approximation.

The second approach discussed was to calculate the energy distribution directly using a WKB method. The phase of the energy distribution was given by a double Legendre transform of the action along the classical trajectories, and the amplitude by the square root of the classical energy density. This method was found to be inadequate close to the limits of the classically allowed energy range, where caustics occurred and the classical energy density diverged. Far beyond the caustics however, in the classically forbidden energy range, the WKB approximation could once again be applied, although in that case the classical trajectories were complex.

The appropriate semiclassical treatment of the caustics was achieved by the method of uniform approximation. The energy distribution was expressed as an oscillatory integral, and an approximation made to the integrand which was valid locally about all the points of stationary phase. The resulting expression for the sideband weights depended, like the WKB approximation, only on the classical action and the energy density.

We first treated all the caustics in the energy distribution individually as 'fold caustics', and obtained a solution in terms of Airy functions. This was found to be inadequate in the

regime of low depletion of the central band, where the caustics are not isolated. We then introduced a periodic uniform approximation, which treats all the caustics simultaneously. The solution is expressed in terms of Bessel functions, and was found to give excellent agreement with the exact quantum mechanical result over the entire parameter range investigated.

The validity of uniform approximations however depends critically on the topology of the phase space diagram. If the phase space curve is very irregular or chaotic the methods are not applicable. In our system this occurs for very large modulation potentials, when the atoms may classically become trapped in the potential well for long periods, and subsequently exit on either side of the well. In this article we have not investigated parameter regimes in which classical reflection or chaos occurs.

A Generalised WKB methods

In Section 1 we obtained semiclassical expressions for the Feynman propagator and each of the energy-dependent propagators. They consisted of a sum of contributions from all the classical paths joining the initial and final points. The phase of each contribution was given in the case of Feynman propagator by the classical action, and in the case of the energy-dependent propagators by its Legendre transforms. In this appendix we calculate the semiclassical amplitude for each propagator using a generalisation of the WKB approach. Supposing that the solution is of the form described above, we substitute it into the evolution equation. In the case of the Feynman propagator the evolution equation is just the time-dependent Schrödinger equation. In the case of the energy-dependent propagators it is the Fourier transform of the Schrödinger equation with respect to time. The zeroth order terms in \hbar cancel due to properties of the action. The first order terms produce an equation for the square of the semiclassical amplitude which is identical to the continuity equation for a classical fluid. The solution for the amplitude is therefore the square root of a classical density. The method can be applied both in the classically allowed zone and in the forbidden zone, where the coordinates adopt complex quantities, and the potential must be replaced by its analytic continuation.

A.1 The Feynman propagator

In the limit $\hbar \rightarrow 0$ the Feynman propagator can be expressed as a sum of contributions (12) from all the classical trajectories Γ linking the initial point (x_i, t_i) to the final point (x_f, t_f) . For times $t_f < t_i$ the semiclassical amplitude $A_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i)$ associated with each contribution vanishes. For times $t_f > t_i$ a solution for A_Γ can be obtained by substituting expression (12) into the time-dependent Schrödinger equation. The zeroth order terms in \hbar cancel, since the classical action on each trajectory Γ satisfies the Hamilton-Jacobi equation

$$-\frac{\partial S_\Gamma}{\partial t_f} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_\Gamma}{\partial x_f} \right)^2 + V(x_f, t_f). \quad (191)$$

Note that since the partial derivatives of the classical action equal

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_f} S_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i) &= p_f^\Gamma \\
\frac{\partial}{\partial t_f} S_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i) &= -E_f^\Gamma \\
\frac{\partial}{\partial x_i} S_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i) &= -p_i^\Gamma \\
\frac{\partial}{\partial t_i} S_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i) &= E_i^\Gamma,
\end{aligned} \tag{192}$$

equation (191) is simply an expression of the conservation of energy. Neglecting terms of second order in \hbar , the Schrödinger equation can then be written as

$$\frac{\partial A_\Gamma}{\partial t_f} + \frac{1}{m} \frac{\partial S_\Gamma}{\partial x_f} \frac{\partial A_\Gamma}{\partial x_f} = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 S_\Gamma}{\partial x_f^2} A_\Gamma. \tag{193}$$

Substituting $\partial_{x_f} S_\Gamma = p_f^\Gamma$ (192) and multiplying on both sides by $2A_\Gamma$ gives

$$\frac{\partial}{\partial t_f} A_\Gamma^2 + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x_f} (p_f^\Gamma A_\Gamma^2) = 0. \tag{194}$$

This can be rewritten as

$$\frac{\partial}{\partial t_f} A_\Gamma^2 + \frac{\partial}{\partial x_f} \left[\frac{dx_f}{dt_f} A_\Gamma^2 \right] = 0, \tag{195}$$

where we have set $p_f^\Gamma = m\dot{x}_f$. Equation (195) is identical to the continuity equation in fluid dynamics, A_Γ^2 playing the role of the fluid density. The solution of (195) is therefore a probability density $P(x_f)$, which may in general be multiplied by a phase factor

$$A_\Gamma^2 = e^{i\theta} P(x_f). \tag{196}$$

Treating x_f as a classical function of the initial momentum p_i (x_i and t_i being fixed), we obtain

$$A_\Gamma^2 = e^{i\theta} P(p_i^\Gamma) \left(\frac{\partial p_i^\Gamma}{\partial x_f} \right)_{t_f, x_i, t_i}, \tag{197}$$

where $P(p_i)$ denotes the probability distribution over the initial momentum. Since the system is initially in a position eigenstate, $P(p_i^\Gamma)$ is constant

$$P(p_i^\Gamma) = |\langle p_i^\Gamma | x_i \rangle|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}. \tag{198}$$

The phase θ can be found by considering a specific example such as the free particle (see Section 1.1.2), and we obtain

$$A_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i) = (2i\pi\hbar)^{-1/2} \left[\left(\frac{\partial p_i^\Gamma}{\partial x_f} \right)_{t_f, x_i, t_i} \right]^{1/2}. \tag{199}$$

At focal points, where $\partial x_f / \partial p_i^\Gamma = 0$, the semiclassical amplitude diverges. In the neighbourhood of such points it is not valid to neglect the term of second order in \hbar in the Schrödinger equation. The WKB method therefore generally fails near caustics. An exception occurs in the case of systems which have Lagrangians of at most quadratic order in position and velocity (such as the free particle and the harmonic oscillator). In that case the second order term vanishes identically, and the divergences predicted by the WKB approximation reproduce true divergences in the wavefunction.

A.2 The energy-dependent propagators

The semiclassical amplitudes of the energy-dependent propagators can be found by a method analogous to that used above for the Feynman propagator.

A.2.1 The propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$

The semiclassical expression (41) for the propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ consists of a sum of contributions from all the classical trajectories $\tilde{\Gamma}$ satisfying the boundary conditions $(x_f, t_f; x_i, E_i)$. The phase of each contribution is proportional to the generalised action $\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ defined in equation (40). The time $t_i^{\tilde{\Gamma}}$ in this equation is the instant at which a particle with energy E_i must leave the initial position x_i if it is to arrive at the final position x_f at time t_f . This condition is expressed in equation (39), but can also be written in terms of the partial derivatives of the classical action (192), as

$$\frac{\partial}{\partial t_i} S_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i^{\tilde{\Gamma}}) = E_i. \quad (200)$$

Using this equation and the definition (40) we can evaluate the partial derivative of the generalised action $\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}$ with respect to E_i ,

$$\frac{\partial}{\partial E_i} \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) = -t_i^{\tilde{\Gamma}} + \left[\frac{\partial}{\partial t_i} S_\Gamma(x_f, t_f; x_i, t_i^{\tilde{\Gamma}}) - E_i \right] \frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_i} = -t_i^{\tilde{\Gamma}}. \quad (201)$$

The remaining partial derivatives can be calculated in a similar manner, giving

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_f} \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) &= p_f^{\tilde{\Gamma}} \\ \frac{\partial}{\partial t_f} \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) &= -E_f^{\tilde{\Gamma}} \\ \frac{\partial}{\partial x_i} \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) &= -p_i^{\tilde{\Gamma}} \\ \frac{\partial}{\partial E_i} \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) &= -t_i^{\tilde{\Gamma}}. \end{aligned} \quad (202)$$

Given these properties of the generalised action, the semiclassical amplitude $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}$ can be evaluated as follows. Taking a Fourier transform of equation (5) with respect to the initial time gives

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_f^2} + V(x_f, t_f) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t_f} \right) \tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i) = \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} \delta(x_f - x_i) e^{iE_i t_f / \hbar}. \quad (203)$$

Apart from the term on the right hand side, this is simply the time-dependent Schrödinger equation. The propagator \tilde{K} can therefore be obtained by finding solutions to the Schrödinger equation on either side of the point x_i , and then matching them appropriately. Substituting the semiclassical expression (41) for \tilde{K} into the Schrödinger equation, we find that the terms of zeroth order in \hbar cancel, since the generalised action $\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}$ satisfies the Hamilton-Jacobi equation

$$-\frac{\partial \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}}{\partial t_f} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}}{\partial x_f} \right)^2 + V(x_f, t_f). \quad (204)$$

By equating the terms of first order in \hbar , a continuity equation analogous to (195) is obtained for the square of the semiclassical amplitude

$$\frac{\partial}{\partial t_f} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2 + \frac{\partial}{\partial x_f} \left[\frac{dx_f}{dt_f} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2 \right] = 0. \quad (205)$$

The solution of (205) is therefore a probability density $\tilde{P}(x_f)$, which may in general be multiplied by a phase factor

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2 = e^{i\theta} \tilde{P}(x_f). \quad (206)$$

Because x_f is a classical function of t_i (E_i and x_i being fixed), we can write

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2 &= e^{i\theta} \tilde{P}(t_i^{\tilde{\Gamma}}) \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial x_f} \right)_{t_f, x_i, E_i} \\ &= -e^{i\theta} \tilde{P}(t_i^{\tilde{\Gamma}}) \frac{m}{p_f^{\tilde{\Gamma}}} \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial t_f} \right)_{x_f, x_i, E_i}, \end{aligned} \quad (207)$$

where the probability distribution over the initial time $\tilde{P}(t_i^{\tilde{\Gamma}})$ is a function only of the initial variables. It can be found by solving for $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}$ with respect to the initial variables as follows.

Taking a Fourier transform of (7) with respect to the initial time we obtain

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i) + \tilde{V}(x_i, E_i) * \tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i) = \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} \delta(x_f - x_i) e^{iE_i t_f/\hbar} \quad (208)$$

where the function $\tilde{V}(x_i, E_i)$ is the Fourier transform of the potential with respect to the initial time

$$\tilde{V}(x_i, E_i) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dt_i V(x_i, t_i) e^{-iE_i t_i/\hbar}, \quad (209)$$

and where $\tilde{V}(x_i, E_i) * \tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ denotes a convolution with respect to energy

$$\tilde{V}(x_i, E_i) * \tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dE'_i \tilde{V}(x_i, E'_i) \tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i - E'_i). \quad (210)$$

Using the semiclassical expression (41) for the propagator, the convolution may be evaluated to first order in \hbar as follows

$$\begin{aligned}
& \tilde{V}(x_i, E_i) * \tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E_i) \\
&= \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_{\tilde{\Gamma}} \int d\omega' \tilde{V}(x_i, \hbar\omega') \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i - \hbar\omega') e^{i\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i - \hbar\omega')/\hbar} \\
&\approx \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_{\tilde{\Gamma}} \int d\omega' \tilde{V}(x_i, \hbar\omega') \left[\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}} - \hbar\omega' \frac{\partial \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_i} \right] e^{i\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}/\hbar} e^{-i\omega' \partial \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}} / \partial E_i} \left[1 + \frac{1}{2} i\hbar (\omega')^2 \frac{\partial^2 \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_i^2} \right] \\
&\approx \sum_{\tilde{\Gamma}} e^{i\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}/\hbar} \left\{ V(x_i, t_i^{\tilde{\Gamma}}) \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}} + i\hbar \left[\frac{\partial \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_i} \frac{\partial}{\partial t_i} V(x_i, t_i^{\tilde{\Gamma}}) - \frac{1}{2} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}} \frac{\partial^2 \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_i^2} \frac{\partial^2}{\partial t_i^2} V(x_i, t_i^{\tilde{\Gamma}}) \right] \right\}, \tag{211}
\end{aligned}$$

where $t_i^{\tilde{\Gamma}}$ has been substituted for $-\partial_{E_i} \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}$, and where $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}$ and $\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}$ and their derivatives are evaluated at the point $(x_f, t_f; x_i, E_i)$ unless otherwise specified.

When the approximation (211) for the convolution $\tilde{V} * \tilde{K}$ is substituted into equation (208), the terms of order zero in \hbar cancel since the generalised action satisfies the equation

$$E_i = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}}{\partial x_i} \right)^2 + V(x_i, t_i^{\tilde{\Gamma}}). \tag{212}$$

On either side of the point $x_f = x_i$, equation (208) can then be written to first order in \hbar as

$$\frac{1}{2m} \frac{\partial p_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial x_i} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}} + \frac{p_i^{\tilde{\Gamma}}}{m} \frac{\partial \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_i} \frac{\partial}{\partial t_i} V(x_i, t_i^{\tilde{\Gamma}}) + \frac{1}{2} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}} \frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_i} \frac{\partial^2}{\partial t_i^2} V(x_i, t_i^{\tilde{\Gamma}}) = 0, \tag{213}$$

where we have substituted $\partial_{x_i} \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}} = -p_i^{\tilde{\Gamma}}$ and $\partial_{E_i}^2 \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}} = -\partial_{E_i} t_i^{\tilde{\Gamma}}$. Replacing

$$\frac{\partial V}{\partial t_i} = \frac{dE_i}{dt_i} = \frac{p_i^{\tilde{\Gamma}}}{m} \frac{dE_i}{dx_i}, \tag{214}$$

and multiplying on both sides by $2\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}$, equation (213) reduces to

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{p_i^{\tilde{\Gamma}}}{m} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2 \right) + \frac{\partial}{\partial E_i} \left[\frac{dE_i}{dx_i} \left(\frac{p_i^{\tilde{\Gamma}}}{m} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2 \right) \right] = 0. \tag{215}$$

Noting the analogy with (195), we can interpret (215) as a continuity equation for the quantity $p_i^{\tilde{\Gamma}} \tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2/m$. The probability density however now corresponds to an energy density $\tilde{P}(E_i)$, and the evolution is carried out over position rather than time. Using this interpretation, $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2$ can be expressed as

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2 = e^{i\tilde{\theta}} \tilde{P}(E_i) \frac{m}{p_i^{\tilde{\Gamma}}}. \tag{216}$$

The initial energy E_i may be regarded as a function of the final variables x_f , t_f and E_f . Because x_f and t_f are fixed by the boundary conditions, we may write $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}$ in terms of a

probability distribution over the final energy $\tilde{P}(E_f^{\tilde{\Gamma}})$ as follows

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2 = e^{i\tilde{\theta}} \tilde{P}(E_f^{\tilde{\Gamma}}) \frac{m}{p_i^{\tilde{\Gamma}}} \left(\frac{\partial E_f^{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_i} \right)_{x_f, t_f, x_i} \quad (217)$$

Since $\tilde{P}(E_f^{\tilde{\Gamma}})$ is a function only of the final variables, we can use the expressions (207) and (217) together to determine the value of $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2$ up to a normalisation constant. Given the fact that

$$\left(\frac{\partial E_f^{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_i} \right)_{x_f, t_f, x_i} = - \frac{\partial^2 \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_i \partial t_f} = - \frac{\partial^2 \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}}{\partial t_f \partial E_i} = \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial t_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \quad (218)$$

we find

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2 = N \frac{m}{p_i^{\tilde{\Gamma}} p_f^{\tilde{\Gamma}}} \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial t_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \quad (219)$$

The normalisation constant N can be determined by considering any specific example, such as a free particle, and we obtain

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \left[\frac{m^2}{p_i^{\tilde{\Gamma}} p_f^{\tilde{\Gamma}}} \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial t_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \right]^{1/2} \quad (220)$$

A.2.2 The propagator $\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i)$

The semiclassical expression (50) for the propagator $\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ consists of a sum of contributions from all the classical trajectories $\tilde{\Gamma}$ which start from the initial position x_i with energy E_i and arrive at the final position x_f with energy E_f . The amplitude $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ of each contribution can be found using methods analogous to those applied to the propagator $\tilde{K}(x_f, t_f; x_i, E_i)$. By considering the variation of $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}$ with respect to the initial variables, we obtain an equation identical to (216),

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2 = e^{i\tilde{\theta}} \tilde{P}(E_i) \frac{m}{p_i^{\tilde{\Gamma}}}. \quad (221)$$

The initial energy E_i is, as earlier, a function of the final coordinates x_f , t_f and E_f . In this case however the parameters x_f and E_f are fixed by the boundary conditions, and we express $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}$ in terms of a probability distribution $\tilde{P}(t_f^{\tilde{\Gamma}})$ over the final time

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2 = e^{i\tilde{\theta}} \tilde{P}(t_f^{\tilde{\Gamma}}) \frac{m}{p_i^{\tilde{\Gamma}}} \left(\frac{\partial t_f^{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_i} \right)_{x_f, E_f, x_i} \quad (222)$$

By considering the the variation of $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2$ with respect to the final variables, we obtain an analogous equation

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2 = e^{i\tilde{\theta}} \tilde{P} \left(t_i^{\tilde{\Gamma}} \right) \frac{m}{p_f^{\tilde{\Gamma}}} \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \quad (223)$$

Since $\tilde{P} \left(t_i^{\tilde{\Gamma}} \right)$ depends only on the final variables, and $\tilde{P} \left(t_i^{\tilde{\Gamma}} \right)$ only on the initial variables, we can use equations (222) and (223) together to determine $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2$ up to a normalisation constant. Given the fact that

$$\left(\frac{\partial t_f^{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_i} \right)_{x_f, E_f, x_i} = \frac{\partial^2 \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_i \partial E_f} = \frac{\partial^2 \tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_f \partial E_i} = - \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \quad (224)$$

we obtain

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}^2 = N \frac{m^2}{p_i^{\tilde{\Gamma}} p_f^{\tilde{\Gamma}}} \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \quad (225)$$

It can be shown that the normalisation constant is $N = 1/2i\pi\hbar$, and hence that

$$\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i) = (2i\pi\hbar)^{-1/2} \left[\frac{m^2}{p_i^{\tilde{\Gamma}} p_f^{\tilde{\Gamma}}} \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial E_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \right]^{1/2} \quad (226)$$

B Practical calculation of the semiclassical amplitudes

The semiclassical amplitude of each of the propagators presented in Section 1 is proportional to the square root of a classical ensemble density. In this appendix we describe how the ensemble densities may be calculated in practice, by linearising the equations of motion about the appropriate root trajectories. The procedure may be used in both the classically allowed and forbidden zones. Since the root trajectories in the forbidden zones are complex, the variables in the linearised equations adopt complex values, and the potential must be replaced by its analytic continuation. The resulting values for the ensemble densities are then also complex.

B.1 The Feynman propagator

The semiclassical amplitude $A_{\Gamma}(x_f, t_f; x_i, t_i)$ (14) of the Feynman propagator is proportional to $\partial p_i^{\Gamma} / \partial x_f$, where t_f , t_i and x_i are held constant. This partial derivative can be calculated using the linearised equations

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \delta x &= \frac{\delta p}{m} \\ \frac{d}{dt} \delta p &= -\delta x \frac{\partial^2}{\partial x^2} V[x(t), t], \end{aligned} \quad (227)$$

which must be integrated along the root trajectory Γ . With respect to time, this trajectory is parametrised by $x^{\Gamma}(t)$. Since the initial quantum state is a position eigenstate, the position

variation must be initialised to zero $\delta x^\Gamma(t_i) = 0$. The momentum variation is initially set to a finite value $\delta p^\Gamma(t_i) = \delta p_i$. By evolving the linearised equations (227) from t_i to t_f the final position variation $\delta x^\Gamma(t_f)$ is obtained in terms of the initial momentum variation δp_i . The ratio of δp_i to $\delta x^\Gamma(t_f)$ gives the value of the partial derivative required

$$\left(\frac{\partial p_i^\Gamma}{\partial x_f}\right)_{t_f, x_i, t_i} = \frac{\delta p_i}{\delta x^\Gamma(t_f)}. \quad (228)$$

B.2 The energy-dependent propagators

To obtain the values of the semiclassical amplitudes $\tilde{A}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ (42) and $\tilde{\tilde{A}}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$ (52) it is necessary to calculate the partial derivatives $\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}/\partial t_f$ and $\partial t_i^{\tilde{\tilde{\Gamma}}}/\partial E_f$ respectively, where in both cases x_f , x_i and E_i are held constant. Since the root trajectories $\tilde{\Gamma}$ and $\tilde{\tilde{\Gamma}}$ of the energy-dependent propagators are specified in terms of their initial and final positions rather than their initial and final times, we choose to calculate the evolution of the system using position rather than time as the variable of integration, as in equations (65). The linearised form of these equations, for a time-dependent potential, is

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \delta t &= -\delta p \frac{m}{p(x)^2} \\ \frac{d}{dx} \delta p &= \frac{m}{p(x)} \left(\frac{\delta p}{p(x)} \frac{\partial}{\partial x} V[x, t(x)] - \delta t \frac{\partial^2}{\partial t \partial x} V[x, t(x)] \right), \end{aligned} \quad (229)$$

where $p(x)$ and $t(x)$ are parametrisations with respect to position of the momentum and time respectively along the root trajectory.

The partial derivatives $\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}/\partial t_f$, and $\partial t_i^{\tilde{\tilde{\Gamma}}}/\partial E_f$ are obtained by integrating the equations (229) along the trajectories $\tilde{\Gamma}$ and $\tilde{\tilde{\Gamma}}$ respectively. All the particles of the classical ensemble leave the initial position x_i with the same energy E_i but at different times. The time variation is therefore initialised to a finite value $\delta t(x_i) = \delta t_i$. The initial momentum variation is determined using the condition that the energy be fixed

$$\frac{p(x_i)}{m} \delta p(x_i) + \frac{\partial V[x_i, t(x_i)]}{\partial t} \delta t_i = 0. \quad (230)$$

In particular if x_i lies in a potential free region the initial momentum variation $\delta p(x_i)$ is zero.

The equations (229) are integrated from the initial position x_i to the final position x_f , and the required partial derivatives are determined from the values of the final time and momentum variations as follows

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\Gamma}}}{\partial t_f}\right)_{x_f, E_i, x_i} &= \frac{\delta t_i}{\delta t^{\tilde{\Gamma}}(x_f)} \\ \left(\frac{\partial t_i^{\tilde{\tilde{\Gamma}}}}{\partial E_f}\right)_{x_f, E_i, x_i} &= \frac{m}{p^{\tilde{\tilde{\Gamma}}}(x_f)} \frac{\delta t_i}{\delta p^{\tilde{\tilde{\Gamma}}}(x_f)}. \end{aligned} \quad (231)$$

C Calculation of the sideband weights

In this appendix we calculate the weights of the sidebands produced on the momentum of a beam of atoms traversing the modulated potential well discussed in the introduction. Each atom is described by a wavepacket that approaches the potential from the left with a narrow momentum distribution centred about p_i (see Figure 1). If the atom is transmitted, its momentum is measured by a detector placed to the right of the potential. Since energy can be transferred to the atoms only in units of $\hbar\omega$, where ω is the modulation frequency, the final momentum distribution of the beam, as registered by the detector, contains sidebands localised about the momenta $\sqrt{p_i^2 + 2m(n\hbar\omega)}$ where n is an integer. The weight I_n of the n th sideband is defined as the probability that the final momentum of any given particle will fall in the momentum range occupied by the n th sideband, in the limit that the width Δp_i of the initial momentum distribution tends to zero.

We shall denote the wavefunction of each atom by $\psi(x, t)$, and its momentum distribution by

$$\bar{\psi}(p, t) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x, t). \quad (232)$$

At the initial time t_i the wavefunction is located on the left hand side of the potential, and the momentum distribution is concentrated in a small interval about p_i . In particular we assume that $\bar{\psi}(p, t_i)$ is non-zero only for positive momenta, and that its width Δp_i is less than the momentum difference between adjacent sidebands (approximately $\hbar k$).

We also assume that it is possible to define a time t_f after which the atom no longer interacts with the potential. The wavepacket then consists of two parts, a transmitted part located to the right of the potential, and a reflected part located to its left. Since the detector is placed to the right of the potential, it is only the transmitted part of the wavepacket which is of interest. Because the transmitted wavepacket contains only positive-valued momentum components, $\psi_+(x, t)$ can be written for times $t \geq t_f$ as

$$\psi_+(x, t) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^\infty dp e^{ipx/\hbar} \bar{\psi}(p, t). \quad (233)$$

We define the spectrum Ω_ψ of the wavepacket at a position x_f to the right of the potential as

$$\Omega_\psi(x_f, E_f) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dt e^{iE_f t/\hbar} \psi(x_f, t), \quad (234)$$

where x_f is assumed to be sufficiently far from the potential that the wavepacket has not yet reached x_f by the time t_f , that is $\psi(x_f, t) = 0$ for $t < t_f$. Since only the transmitted part of the wavepacket traverses the point x_f , the spectrum can be rewritten as

$$\Omega_\psi(x_f, E_f) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dt e^{iE_f t/\hbar} \psi_+(x_f, t), \quad (235)$$

where $\psi_+(x, t)$ is defined in equation (233). Note that for times $t < t_f$ the value of $\psi_+(x, t)$ at $x = x_f$ vanishes, and for times $t \geq t_f$ the atom no longer interacts with the potential. These facts together imply that the transmitted wavefunction at position x_f may be obtained at

any time t by freely evolving the positive-valued components of the momentum distribution $\bar{\psi}(p, t_f)$, and taking their Fourier transform

$$\psi_+(x_f, t) = \int_0^\infty dp \left[e^{-ip^2(t-t_f)/2m\hbar} \bar{\psi}(p, t_f) \right] e^{ipx_f/\hbar}. \quad (236)$$

Substituting (236) into (235) gives the following expression for the spectrum in terms of the final momentum distribution

$$\begin{aligned} \Omega_\psi(x_f, E_f) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dp \int dt e^{iE_f t/\hbar} e^{-ip^2(t-t_f)/2m\hbar} e^{ipx_f/\hbar} \bar{\psi}(p, t_f) \\ &= \sqrt{\frac{m}{2E_f}} e^{iE_f t_f/\hbar} e^{i\sqrt{2mE_f}x_f/\hbar} \bar{\psi}\left(\sqrt{2mE_f}, t_f\right). \end{aligned} \quad (237)$$

We need now to relate the spectrum to the initial momentum distribution. Expanding the wavefunction $\psi(x_f, t)$ as

$$\psi(x_f, t) = \int dx_i K(x_f, t; x_i, t_i) \psi(x_i, t_i), \quad (238)$$

and substituting it into the definition (234) of the spectrum, we obtain

$$\begin{aligned} \Omega_\psi(x_f, E_f) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx_i \int dt e^{iE_f t/\hbar} K(x_f, t; x_i, t_i) \psi(x_i, t_i) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx_i \int dE'_i e^{iE'_i t_i/\hbar} \tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E'_i) \psi(x_i, t_i), \end{aligned} \quad (239)$$

where we have used the definition (19b) of $\tilde{\tilde{K}}(x_f, E_f; x_i, E_i)$. Note that, due to the presence of $\psi(x_i, t_i)$, the integrand in (239) is non-zero only for positions x_i to the left of the potential. Since in this region $\tilde{\tilde{K}}$ is given by expression (27), the integral over x_i is trivial

$$\Omega_\psi(x_f, E_f) = e^{i\sqrt{2mE_f}x_f} \int dE'_i e^{iE'_i t_i/\hbar} \tilde{\tilde{K}}(E_f, E'_i) \bar{\psi}\left(\sqrt{2mE'_i}, t_i\right). \quad (240)$$

Inserting the energy dependence appropriate for a temporally periodic potential (see Section 1.2.4)

$$\tilde{\tilde{K}}(E_f, E'_i) = \sum_n \tilde{\tilde{K}}_n(E'_i) \delta(E_f - E'_i - n\hbar\omega), \quad (241)$$

we find that

$$\Omega_\psi(x_f, E_f) = e^{i\sqrt{2mE_f}x_f} \sum_n e^{iE_i^{(n)} t_i/\hbar} \tilde{\tilde{K}}_n\left(E_i^{(n)}\right) \bar{\psi}\left(\sqrt{2mE_i^{(n)}}, t_i\right), \quad (242)$$

where

$$E_i^{(n)} = E_f - n\hbar\omega. \quad (243)$$

Using equations (237) and (242) we can now express the final momentum distribution $\bar{\psi}(p, t_f)$ over the range $p > 0$ in terms of the initial momentum distribution $\bar{\psi}(p, t_i)$. Defining $p_f = \sqrt{2mE_f}$ and $p_i^{(n)} = \sqrt{2mE_i^{(n)}}$, we have

$$\bar{\psi}(p_f, t_f) = \sum_n \bar{\psi}^{(n)}(p_f, t_f), \quad (244)$$

where

$$\bar{\psi}^{(n)}(p_f, t_f) \equiv \frac{p_f}{m} e^{-iE_f(t_f-t_i)/\hbar} e^{-in\omega t_i} \tilde{K}_n(E_i^{(n)}) \bar{\psi}(p_i^{(n)}, t_i). \quad (245)$$

Defining the sideband weights by

$$I_n \equiv \lim_{\Delta p_i \rightarrow 0} \int_0^\infty dp_f \left| \bar{\psi}^{(n)}(p_f, t_f) \right|^2, \quad (246)$$

and changing the variable of integration to $p_i^{(n)}$, we obtain

$$I_n = \lim_{\Delta p_i \rightarrow 0} \int_0^\infty dp_i^{(n)} \frac{p_i^{(n)} p_f}{m^2} \left| \tilde{K}_n(E_i^{(n)}) \right|^2 \left| \bar{\psi}(p_i^{(n)}, t_i) \right|^2. \quad (247)$$

Since the initial momentum distribution $\bar{\psi}(p_i^{(n)}, t_i)$ is concentrated about the point p_i , we can evaluate all the factors inside the integral, apart from $\bar{\psi}$ itself, at the point p_i , giving

$$I_n = \frac{2}{m} \sqrt{E_i(E_i + n\hbar\omega)} \left| \tilde{K}_n(E_i) \right|^2 \int_0^\infty dp'_i \left| \bar{\psi}(p'_i, t_i) \right|^2, \quad (248)$$

where $E_i = p_i^2/2m$ is the initial energy of the system. The remaining integral equals unity since the momentum distribution is normalised, and is nonzero only for positive momentum. Hence the sideband weights equal

$$I_n = \frac{2}{m} \sqrt{E_i(E_i + n\hbar\omega)} \left| \tilde{K}_n(E_i) \right|^2. \quad (249)$$

D The thin phase grating approximation

In this appendix we calculate the first order change in the generalised action $\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ due to a time-dependent perturbation $\epsilon V_1(x, t)$ of the potential.

The generalised action $\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$, defined in equation (40), can be expressed directly in terms of the Lagrangian as

$$\tilde{S}_{\tilde{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i) = -E_i t_i^{\tilde{\Gamma}} + \int_{t_i^{\tilde{\Gamma}}}^{t_f} dt \mathcal{L}[x_{\tilde{\Gamma}}(t), \dot{x}_{\tilde{\Gamma}}(t), t], \quad (250)$$

where $x_{\tilde{\Gamma}}(t)$ is a parametrisation of the classical root trajectory $\tilde{\Gamma}$ with boundary conditions $(x_f, t_f; x_i, E_i)$. The time $t_i^{\tilde{\Gamma}}$ denotes the instant at which this trajectory leaves the initial position x_i

$$x_{\tilde{\Gamma}}(t_i^{\tilde{\Gamma}}) = x_i. \quad (251)$$

It is a function of the boundary conditions, $t_i^{\bar{\Gamma}} = t_i^{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$.

In the presence of a time-dependent perturbing potential $\epsilon V_1(x, t)$, the total Lagrangian can be written as

$$\mathcal{L}(x, \dot{x}, t) = \mathcal{L}_0(x, \dot{x}) - \epsilon V_1(x, t), \quad (252)$$

where \mathcal{L}_0 is the unperturbed Lagrangian. Here we have written \mathcal{L}_0 as a function of x and \dot{x} only, since that is the situation considered in the main text. However \mathcal{L}_0 may in general be time-dependent.

The presence of the perturbing potential $\epsilon V_1(x, t)$ alters the root trajectory $x_{\bar{\Gamma}}(t)$, its initial time $t_i^{\bar{\Gamma}}$, and, in turn, the generalised action $\tilde{S}_{\bar{\Gamma}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$. We expand these quantities in powers of the perturbation parameter ϵ

$$\begin{aligned} x_{\bar{\Gamma}}(t) &= x_{\bar{\Gamma},0}(t) + \epsilon x_{\bar{\Gamma},1}(t) + \epsilon^2 x_{\bar{\Gamma},2}(t) + \dots \\ t_i^{\bar{\Gamma}} &= t_{i,0}^{\bar{\Gamma}} + \epsilon t_{i,1}^{\bar{\Gamma}} + \epsilon^2 t_{i,2}^{\bar{\Gamma}} + \dots \\ \tilde{S}_{\bar{\Gamma}} &= \tilde{S}_{\bar{\Gamma},0} + \epsilon \tilde{S}_{\bar{\Gamma},1} + \epsilon^2 \tilde{S}_{\bar{\Gamma},2} + \dots \end{aligned} \quad (253)$$

where the index 0 denotes the unperturbed values. Since the trajectory $x_{\bar{\Gamma},0}(t)$ is a path of extremal action for the unperturbed system

$$\left(\frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{x}} \right) \Big|_{x(t)=x_{\bar{\Gamma},0}(t)} = 0, \quad (254)$$

the integral of \mathcal{L}_0 between $t_{i,0}^{\bar{\Gamma}}$ and t_f remains unchanged to first order by the path variation $\epsilon x_{\bar{\Gamma},1}(t)$. The perturbation on the action is therefore given to first order by

$$\tilde{S}_{\bar{\Gamma},1}(x_f, t_f; x_i, E_i) = -E_i t_{i,1}^{\bar{\Gamma}} - \left(\mathcal{L}_0 t_{i,1}^{\bar{\Gamma}} + \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{x}} x_{\bar{\Gamma},1} \right) \Big|_{t=t_{i,0}^{\bar{\Gamma}}} - \int_{t_{i,0}^{\bar{\Gamma}}}^{t_f} dt V_1[x_{\bar{\Gamma},0}(t), t], \quad (255)$$

where \mathcal{L}_0 and its partial derivative $\partial \mathcal{L}_0 / \partial \dot{x}$ are evaluated on the unperturbed trajectory $x_{\bar{\Gamma},0}(t)$. The bracketed term of (255) can be simplified using the boundary condition (251) on the initial position, which, to first order in ϵ , is

$$\left[x_{\bar{\Gamma},1} + \dot{x}_{\bar{\Gamma},0} t_{i,1}^{\bar{\Gamma}} \right] \Big|_{t=t_{i,0}^{\bar{\Gamma}}} = 0. \quad (256)$$

Hence $x_{\bar{\Gamma},1}$ may be replaced by $-\dot{x}_{\bar{\Gamma},0} t_{i,1}^{\bar{\Gamma}}$ at the point $t = t_{i,0}^{\bar{\Gamma}}$ in equation (255). Using the definition of momentum as the partial derivative of the Lagrangian with respect to velocity, we may also substitute

$$\frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{x}} = p_0^{\bar{\Gamma}}, \quad (257)$$

where $p_0^{\bar{\Gamma}}$ denotes the unperturbed momentum. The bracketed term of (255) therefore reduces to

$$\begin{aligned} - \left(\mathcal{L}_0 t_{i,1}^{\bar{\Gamma}} + \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{x}} x_{\bar{\Gamma},1} \right) \Big|_{t=t_{i,0}^{\bar{\Gamma}}} &= - \left(\mathcal{L}_0 - p_0^{\bar{\Gamma}} \dot{x}_{\bar{\Gamma},0} \right) \Big|_{t=t_{i,0}^{\bar{\Gamma}}} t_{i,1}^{\bar{\Gamma}} \\ &= H_0 \Big|_{t=t_{i,0}^{\bar{\Gamma}}} t_{i,1}^{\bar{\Gamma}} \\ &= E_i t_{i,1}^{\bar{\Gamma}}, \end{aligned} \quad (258)$$

which cancels the first term of (255). The first order perturbation of the generalised action is therefore

$$\tilde{S}_{\tilde{\Gamma},1}(x_f, t_f; x_i, E_i) = - \int_{t_{\tilde{\Gamma},0}}^{t_f} dt V_1 [x_{\tilde{\Gamma},0}(t), t], \quad (259)$$

that is, the integral of the perturbing potential $V_1(x, t)$ along the unperturbed trajectory $x_{\tilde{\Gamma},0}(t)$.

E The WKB wavefunction in the perturbative limit

In this appendix we perform a perturbative calculation of the WKB wavefunction $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ for the periodic potential (1). The perturbation is chosen to be the time-dependent part of the potential

$$V_1(x, t) \equiv -V_0(x) \sin(\omega t). \quad (260)$$

It is this time-dependent part which is responsible for the transfer of energy to the atoms. In its absence, the wavefunction in the region beyond the potential would be just a plane wave, of energy equal to that of the incident beam. In order for the perturbative treatment to be valid, the momentum transferred to the atoms as a result of their interaction with the potential must be a very small fraction of their initial momentum.

Using a perturbative approach, we shall show that the amplitude of the WKB wavefunction diverges secularly with position beyond the potential. This causes a divergence in values of the sideband weights as calculated using the method of Section 2.1. We shall determine the position dependence of the first order sidebands, and show that their values may become erroneous well ahead of the position x_c at which caustics begin to appear.

Following the notation of Appendix D we denote the perturbing potential by $\epsilon V_1(x, t)$, where the perturbation parameter ϵ will be set to unity at the end of the calculation. Since the WKB approximation is invalid at caustics, we consider only the region of x_f beyond the potential but ahead of the caustic position x_c . In this region $\tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E_i)$ contains only one branch, $\tilde{K}_{\text{WKB}} = \tilde{A} \exp(i\tilde{S}/\hbar)$. The generalised action and semiclassical amplitude are expanded in powers of ϵ as follows,

$$\begin{aligned} \tilde{S} &= \tilde{S}_0 + \epsilon \tilde{S}_1 + \epsilon^2 \tilde{S}_2 + \dots \\ \tilde{A} &= \tilde{A}_0 + \epsilon \tilde{A}_1 + \epsilon^2 \tilde{A}_2 + \dots \end{aligned} \quad (261)$$

where the zeroth order terms denote the solutions in the unmodulated potential. Using the result (47) for a stationary potential we obtain

$$\tilde{S}_0(x_f, t_f; x_i, E_i) = -E_i t + p_i(x_f - x_i) - \hbar C, \quad (262)$$

where C is a dimensionless constant. The zeroth order value of the semiclassical amplitude is identical to that of a free particle

$$\tilde{A}_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{m}{2E_i}}. \quad (263)$$

The first order perturbation on the action, obtained in Appendix D, is

$$\tilde{S}_1(x_f, t_f; x_i, E_i) = - \int_{t_{i,0}}^{t_f} dt V_1[x_0(t), t], \quad (264)$$

where $x_0(t)$ denotes the unperturbed trajectory which arrives at the final position x_f at time t_f . $t_{i,0}$ is the time at which this trajectory left the initial position x_i . The path $x_0(t)$ depends in a very simple manner on t_f

$$x_0(t) = \bar{x}(t - t_f + T_f), \quad (265)$$

where $\bar{x}(t)$ is a function that is independent of t_f and is chosen to satisfy $\bar{x}(0) = 0$. The time T_f denotes the instant at which this trajectory arrives at the final position, $\bar{x}(T_f) = x_f$. We shall also use T_i to denote the time at which it leaves the initial position $\bar{x}(T_i) = x_i$. The first order perturbation on the action may now be rewritten as

$$\begin{aligned} \tilde{S}_1(x_f, t_f; x_i, E_i) &= \int_{T_i}^{T_f} dt V_0[\bar{x}(t)] \sin[\omega(t + t_f - T_f)] \\ &= -\hbar\zeta \sin(\omega t_f - kx_f - C'), \end{aligned} \quad (266)$$

where, in the second line, ωT_f has been replaced by

$$\omega T_f = kx_f + C'. \quad (267)$$

The wavenumber k is defined in (4), and C' is a constant which depends on the parameters of the unperturbed potential. The modulation index ζ in equation (266) is simply the Fourier transform of the potential $V_0(x)$ 'seen' by a particle moving along the unperturbed trajectory $\bar{x}(t)$

$$\zeta = -\frac{1}{\hbar} \int dt V_0[\bar{x}(t)] e^{i\omega t}. \quad (268)$$

Note that it is valid to extend the limits of integration in (266) to $\pm\infty$, since the particle moves in a potential-free region before time T_i and after time T_f . The integral (268) is real since the function $V_0[\bar{x}(t)]$ is even in t .

To calculate the first order perturbation on the semiclassical amplitude we use the continuity equation (205), which can be rewritten as

$$\left(\frac{\partial}{\partial t_f} + \frac{p_f}{m} \frac{\partial}{\partial x_f} \right) \tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i) = -\frac{1}{2m} \tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i) \frac{\partial p_f}{\partial x_f}. \quad (269)$$

Expanding the momentum in powers of ϵ

$$p_f = p_{f,0} + \epsilon p_{f,1} + \epsilon^2 p_{f,2} + \dots \quad (270)$$

we obtain

$$\begin{aligned} p_{f,0} &= \frac{\partial \tilde{S}_0}{\partial x_f} = p_i \\ p_{f,1} &= \frac{\partial \tilde{S}_1}{\partial x_f} = \omega \zeta p_i \cos(\omega t_f - kx_f - C'), \end{aligned} \quad (271)$$

where $\hat{\omega}$ is defined in (3c). The ratio of the above terms provides a check on the validity of the perturbative approach. The method can be expected to be valid provided $|p_{f,1}|/|p_{f,0}| \ll 1$, that is, provided

$$\hat{\omega}\zeta \ll 1. \quad (272)$$

Equations (271) can also be used to estimate the position x_c at which caustics form. The range of momenta of the particles leaving the potential is $\Delta p_{cl} \approx 2\hat{\omega}\zeta p_i$. Substituting this value into equation (85) we find that the caustic position x_c is approximately

$$x_c \approx \frac{\pi}{2k\zeta\hat{\omega}}. \quad (273)$$

Returning to the amplitude calculation, we expand (269) in powers of the perturbation parameter, and obtain the following equation for $\tilde{A}_1(x_f, t_f; x_i, E_i)$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t_f} + \frac{p_{f,0}}{m} \frac{\partial}{\partial x_f} \right) \tilde{A}_1(x_f, t_f; x_i, E_i) = -\frac{1}{2m} \tilde{A}_0 \frac{\partial p_{f,1}}{\partial x_f}, \quad (274)$$

where the zeroth order amplitude \tilde{A}_0 , given in equation (263), is constant. Substituting the values of $p_{f,0}$ and $p_{f,1}$ from expression (271) gives

$$\left(\partial_{t_f} + \frac{p_i}{m} \partial_{x_f} \right) \tilde{A}_1(x_f, t_f; x_i, E_i) = -\frac{1}{2m} k p_i \hat{\omega} \zeta \sin(\omega t_f - k x_f - C') \tilde{A}_0. \quad (275)$$

Since the resonant frequency of the homogeneous equation equals the frequency of the excitation term, the solution for \tilde{A}_1 exhibits a secular divergence in x_f

$$\tilde{A}_1(x_f, t_f; x_i, E_i) = -\frac{\hat{\omega}\zeta}{2} \tilde{A}_0 \left[(k x_f - C_I) \sin(\omega t_f - k x_f - C') - C_R \cos(\omega t_f - k x_f - C') \right], \quad (276)$$

where C_R and C_I are constants.

For $\zeta \ll 1$ a simple expression can be obtained for the weights of the first order sidebands. Writing both the generalised action and semiclassical amplitude to first order in the perturbation, and approximating

$$e^{i\tilde{S}_1(x_f, t_f; x_i, E_i)/\hbar} \approx 1 - i\zeta \sin(\omega t_f - k x_f - C'), \quad (277)$$

we obtain to lowest order in ζ

$$\begin{aligned} \tilde{K}_{\text{WKB}}(x_f, t_f; x_i, E_i) &\approx \tilde{A}_0 e^{i\tilde{S}_0(x_f, t_f; x_i, E_i)/\hbar} \times \\ &\left\{ 1 - \zeta \left[\left(\frac{\hat{\omega}}{2} (k x_f - C_I) + i \right) \sin(\omega t_f - k x_f - C') - C_R \frac{\hat{\omega}}{2} \cos(\omega t_f - k x_f - C') \right] \right\}. \end{aligned} \quad (278)$$

Substituting this approximation into equation (78) and calculating the sideband weights using equation (84) we obtain

$$I_{\pm 1} = \frac{2}{m} \sqrt{E_i (E_i \pm \hbar\omega)} \left(\frac{\zeta}{2} \right)^2 \left[\left(1 \pm C_R \frac{\hat{\omega}}{2} \right)^2 + (k x_f - C_I)^2 \left(\frac{\hat{\omega}}{2} \right)^2 \right]. \quad (279)$$

Thus the first order sidebands $I_{\pm 1}$ (84) also diverge with x_f . A characteristic distance x_{ch} may be associated with the divergence,

$$x_{\text{ch}} \sim \frac{2}{k\hat{\omega}}. \quad (280)$$

In the situation where C_R and C_I are both small (which may occur for a very weak potential) x_{ch} represents the distance at which the sideband weights $I_{\pm 1}$ double from their minimum values. Since $\zeta \ll 1$ the position x_{ch} lies well ahead of x_c (273), and the results for the sideband weights may therefore be inaccurate even if the calculation is performed well ahead of the caustics.

F Generalisation to higher harmonics

In this appendix we develop a periodic uniform approximation appropriate for the situation in which the energy distribution contains four caustics per period. Two pairs of stationary phase points then exist per period for every value E_f of the final energy, although one or both pairs may be degenerate or complex. The method can be generalised in a trivial manner to treat systems with an arbitrary number of caustics per period.

F.1 Generic form for the phase

Starting from equation (146), we choose a periodic approximation for the integrand which is locally valid at all the stationary phase points simultaneously. By changing the variable of integration from t_f to \hat{t} , the phase $\phi(t_f; E_f)$ is transformed to the generic form $\hat{\phi}(\hat{t}; E_f)$

$$\phi(t_f; E_f) \equiv \hat{\phi}(\hat{t}; E_f) \equiv \xi \hat{t} + \alpha \cos(\hat{t} + \theta) + \beta \cos(2\hat{t}) + \eta, \quad (281)$$

where \hat{t} obeys equation (178), and ξ is given by (179). Note that the coefficients $\xi, \alpha, \theta, \beta, \eta$, and the diffeomorphism relating t_f to \hat{t} , all depend on the energy E_f . In terms of the generic phase $\hat{\phi}(\hat{t}; E_f)$, the energy propagator can be expressed as

$$\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\eta} \int d\hat{t} \tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i) \frac{dt_f}{d\hat{t}} e^{i[\xi \hat{t} + \alpha \cos(\hat{t} + \theta) + \beta \cos(2\hat{t})]}. \quad (282)$$

F.2 Calculation of the modulation indices

Since t_f and \hat{t} are related by a diffeomorphism, the four stationary phase points $t_f^{(i)}$, $i \in \{1, \dots, 4\}$ of $\phi(t_f; E_f)$ that occur in a given period must correspond to the four stationary phase points $\hat{t}^{(i)}$, $i \in \{1, \dots, 4\}$ of $\hat{\phi}(\hat{t}; E_f)$, the latter being roots of the equation

$$\partial_{\hat{t}} \hat{\phi}(\hat{t}^{(i)}; E_f) = \xi - \alpha \sin(\hat{t}^{(i)} + \theta) - 2\beta \sin(2\hat{t}^{(i)}) \equiv 0. \quad (283)$$

The requirement that $\hat{t}^{(i)}$ satisfy

$$\hat{\phi}(\hat{t}^{(i)}; E_f) = \phi^{(i)}, \quad (284)$$

where $\phi^{(i)} \equiv \phi(t_f^{(i)}; E_f)$, provides four conditions with which to solve for the unknown parameters α, β, θ and η . The solution must however be found numerically since the roots of

equation (283) cannot in general be calculated analytically. The following iterative procedure can be adopted.

For convenience we shall denote the four unknown parameters α , θ , β and η by a four-component vector \mathbf{X}

$$\mathbf{X} \equiv \begin{pmatrix} \alpha \\ \theta \\ \beta \\ \eta \end{pmatrix}. \quad (285)$$

Writing $\hat{\phi}(\hat{t}; E_f)$ explicitly as a function of \mathbf{X} , equation (283) can be expressed as

$$\frac{\partial}{\partial \hat{t}} \hat{\phi}(\hat{t}^{(i)}; \mathbf{X}) \equiv 0, \quad (286)$$

and equation (284) as

$$\hat{\phi}(\hat{t}^{(i)}; \mathbf{X}) = \phi^{(i)}. \quad (287)$$

Let \mathbf{X}_j be the j th iterative guess for \mathbf{X} ,

$$\mathbf{X}_j \equiv \begin{pmatrix} \alpha_j \\ \theta_j \\ \beta_j \\ \eta_j \end{pmatrix}, \quad (288)$$

and let $\hat{t}_j^{(i)}$ denote the corresponding stationary phase points,

$$\frac{\partial}{\partial \hat{t}} \hat{\phi}(\hat{t}_j^{(i)}; \mathbf{X}_j) = 0. \quad (289)$$

If \mathbf{X}_j is close to the true value \mathbf{X} we can approximate

$$\phi^{(i)} \approx \hat{\phi}(\hat{t}_j^{(i)}; \mathbf{X}_j) + \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} \hat{\phi}(\hat{t}_j^{(i)}; \mathbf{X}_j) \right] (\mathbf{X} - \mathbf{X}_j) + \left[\frac{\partial}{\partial \hat{t}} \hat{\phi}(\hat{t}_j^{(i)}; \mathbf{X}_j) \right] (\hat{t}^{(i)} - \hat{t}_j^{(i)}). \quad (290)$$

The last term of the above equation is identically zero, due to the definition of $\hat{t}_j^{(i)}$ in equation (289). Denoting the four phases $\phi^{(i)}$ by a four-component vector Φ ,

$$\Phi \equiv \begin{pmatrix} \phi^{(1)} \\ \phi^{(2)} \\ \phi^{(3)} \\ \phi^{(4)} \end{pmatrix}, \quad (291)$$

and the calculated values $\hat{\phi}(\hat{t}_j^{(i)}, \mathbf{X}_j)$ by

$$\Phi_j \equiv \begin{pmatrix} \hat{\phi}(\hat{t}_j^{(1)}, \mathbf{X}_j) \\ \hat{\phi}(\hat{t}_j^{(2)}, \mathbf{X}_j) \\ \hat{\phi}(\hat{t}_j^{(3)}, \mathbf{X}_j) \\ \hat{\phi}(\hat{t}_j^{(4)}, \mathbf{X}_j) \end{pmatrix}, \quad (292)$$

equation (290) can be written as

$$\Phi \approx \Phi_j + \frac{\partial \Phi_j}{\partial \mathbf{X}} (\mathbf{X} - \mathbf{X}_j), \quad (293)$$

where $\partial \Phi_j / \partial \mathbf{X}$ is a four by four matrix whose elements are given by

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \Phi_j}{\partial \mathbf{X}} \right)_{i,1} &= \frac{\partial}{\partial \alpha} \hat{\phi}(\hat{t}_j^{(i)}, \mathbf{X}_j) = \cos(\hat{t}_j^{(i)} + \theta_j) \\ \left(\frac{\partial \Phi_j}{\partial \mathbf{X}} \right)_{i,2} &= \frac{\partial}{\partial \theta} \hat{\phi}(\hat{t}_j^{(i)}, \mathbf{X}_j) = -\alpha_j \sin(\hat{t}_j^{(i)} + \theta_j) \\ \left(\frac{\partial \Phi_j}{\partial \mathbf{X}} \right)_{i,3} &= \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{\phi}(\hat{t}_j^{(i)}, \mathbf{X}_j) = \cos(2\hat{t}_j^{(i)}) \\ \left(\frac{\partial \Phi_j}{\partial \mathbf{X}} \right)_{i,4} &= \frac{\partial}{\partial \eta} \hat{\phi}(\hat{t}_j^{(i)}, \mathbf{X}_j) = 1. \end{aligned} \quad (294)$$

Since the difference

$$\mathbf{d}\Phi_j = \Phi - \Phi_j \quad (295)$$

is known, we can obtain an improved estimate \mathbf{X}_{j+1} for the unknown parameters using

$$\mathbf{X}_{j+1} = \mathbf{X}_j + \mathbf{d}\mathbf{X}_j, \quad (296)$$

where $\mathbf{d}\mathbf{X}_j$ is defined through the equation

$$\mathbf{d}\Phi_j = \frac{\partial \Phi_j}{\partial \mathbf{X}} \mathbf{d}\mathbf{X}_j. \quad (297)$$

F.3 Approximation for the amplitude

An approximation is now introduced for the amplitude $\tilde{A}(dt_f/d\hat{t})$ of the integrand in expression (282) by expanding about the stationary phase points $\hat{t}^{(i)}$. Since $\hat{t}^{(i)}$ satisfy the equation (283), the quantity $[\xi - \alpha \sin(\hat{t} + \theta) - 2\beta \sin(2\hat{t})]$ can be treated as a small parameter in their vicinity. The amplitude may therefore be expanded in powers of this parameter as

$$\begin{aligned} \tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i) \frac{dt_f}{d\hat{t}} &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_m [\mathcal{P}_m + \mathcal{Q}_m \cos(\hat{t} + \theta) + \mathcal{R}_m \sin(\hat{t} + \theta) + \mathcal{S}_m \cos(2\hat{t})] \times \\ &[\xi - \alpha \sin(\hat{t} + \theta) - 2\beta \sin(2\hat{t})]^m, \end{aligned} \quad (298)$$

where the constant \mathcal{N} is defined in equation (163). Note that the right hand side of (298) forms a complete set of periodic functions. We approximate $\tilde{A}(dt_f/d\hat{t})$ by the lowest order term in the series

$$\mathcal{N} \tilde{A}(x_f, t_f; x_i, E_i) \frac{dt_f}{d\hat{t}} \approx \mathcal{P} + \mathcal{Q} \cos(\hat{t} + \theta) + \mathcal{R} \sin(\hat{t} + \theta) + \mathcal{S} \cos(2\hat{t}). \quad (299)$$

Since no explicit expressions exist for the stationary phase points $\hat{t}^{(i)}$, the coefficients \mathcal{P} , \mathcal{Q} , \mathcal{R} and \mathcal{S} must be calculated numerically. We define dimensionless amplitudes $\tilde{\tilde{B}}^{(i)}$ as

$$\tilde{\tilde{B}}^{(i)}(x_f, E_f; x_i, E_i) = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left[\left(\frac{\partial \hat{t}_i^{(i)}}{\partial E_f} \right)_{x_f, x_i, E_i} \right]^{1/2}, \quad (300)$$

where the superscript (i) identifies quantities associated with the trajectory which arrives at x_f at time $t_f^{(i)}$. In terms of the four amplitudes $\tilde{B}^{(i)}$ we can solve for \mathcal{P} , \mathcal{Q} , \mathcal{R} and \mathcal{S} using the following system of equations

$$\tilde{B}^{(i)} = \frac{\mathcal{P} + \mathcal{Q} \cos(\hat{t}^{(i)} + \theta) + \mathcal{R} \sin(\hat{t}^{(i)} + \theta) + \mathcal{S} \cos(2\hat{t}^{(i)})}{\sqrt{2\pi} [\alpha \cos(\hat{t}^{(i)} + \theta) + 4\beta \cos(2\hat{t}^{(i)})]^{1/2}}. \quad (301)$$

F.4 The uniform approximation

Using approximation (299) for the amplitude, the energy propagator (282) may be written as

$$\tilde{K}(x_f, E_f; x_i, E_i) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{i\eta}}{N} \int d\hat{t} [\mathcal{P} + \mathcal{Q} \cos(\hat{t} + \theta) + \mathcal{R} \sin(\hat{t} + \theta) + \mathcal{S} \cos(2\hat{t})] \times e^{i[\xi\hat{t} + \alpha \cos(\hat{t} + \theta) + \beta \cos(2\hat{t})]}. \quad (302)$$

Note that the integral vanishes at all energies E_f except those for which ξ is equal to an integer n . Defining a function

$$\mathcal{J}_\xi(\alpha, \theta, \beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\Theta e^{i[\xi\Theta + \alpha \cos(\Theta + \theta) + \beta \cos(2\Theta)]}, \quad (303)$$

the uniform approximation for the sideband weights can be expressed as

$$I_n \approx \left| \mathcal{P} \mathcal{J}_n(\alpha, \theta, \beta) - i \left(\mathcal{Q} \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathcal{J}_n(\alpha, \theta, \beta) - \frac{\mathcal{R}}{\alpha} \frac{\partial}{\partial \theta} \mathcal{J}_n(\alpha, \theta, \beta) + \mathcal{S} \frac{\partial}{\partial \beta} \mathcal{J}_n(\alpha, \theta, \beta) \right) \right|^2, \quad (304)$$

where the arguments α , θ and β , as well as the coefficients \mathcal{P} , \mathcal{Q} , \mathcal{R} and \mathcal{S} , are all functions of energy.

F.5 The perturbative limit

Consider the perturbative regime in which the thin phase grating method is applicable, and suppose that the time-dependent part of the potential contains a second harmonic

$$V_1(x, t) = V_0(x) [a \cos(\omega t + \theta) + b \cos(2\omega t)]. \quad (305)$$

The resulting first order perturbation on the action will be

$$\tilde{S}_1(x_f, t_f; x_i, E_i) = \hbar [\alpha \cos(\omega t_f + \theta - kx_f - C') + \beta \cos(2\omega t_f - kx_f - C')], \quad (306)$$

where C' is the constant defined in equation (267), and where the modulation indices α and β are both Fourier transforms of the potential $V_0(x)$ 'seen' by the particle as it follows the unperturbed trajectory $\bar{x}(t)$, defined in equation (265)

$$\begin{aligned} \alpha &= -\frac{a}{\hbar} \int dt V_0[\bar{x}(t)] e^{i\omega t} \\ \beta &= -\frac{b}{\hbar} \int dt V_0[\bar{x}(t)] e^{2i\omega t}. \end{aligned} \quad (307)$$

Note that \tilde{S}_1 , when added to the unperturbed action \tilde{S}_0 (262), has exactly the same form as the generic phase $\hat{\phi}$ (281).

For many potentials the modulation index decreases rapidly with frequency ω (see for example expression (96)). In such cases the second harmonic component is highly attenuated, and may not produce additional caustics in the energy. The periodic uniform approximation involving a single harmonic should then be used.

References

- [1] J. MLYNEK, V. BALYKIN, and P. MEYSTRE, editors. *Special Issue of Appl. Phys. B: Optics and Interferometry with Atoms*, volume 54, 1992.
- [2] C. HENKEL, A. M. STEANE, R. KAISER, and J. DALIBARD, *J. Phys. II*, **4**, 1877, 1994.
- [3] A. STEANE, P. SZRIFTGISER, P. DESBIOLLES, and J. DALIBARD, *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 4972, 1995.
- [4] W. A. HAMILTON, A. G. KLEIN, G. I. OPAT, and P. A. TIMMINS, *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 2770, 1987.
- [5] J. FELBER. PhD thesis, Technischen Universität, Munich, 1994.
- [6] M. BERRY and K. E. MOUNT, *Rep. Prog. Phys.*, **35**, 315, 1972.
- [7] P. STOREY and C. COHEN-TANNOUJJI, *J. Phys. II*, **4**, 1999, 1994.
- [8] C. HENKEL, J.-Y. COURTOIS, and A. ASPECT, *J. Phys. II*, **4**, 1955, 1994.
- [9] G. WENTZEL, *Z. Phys.*, **38**, 518, 1926.
- [10] L. BRILLOUIN, *C. R. Acad. Sci. Paris*, **183**, 24, 1926.
- [11] H. A. KRAMERS, *Z. Phys.*, **39**, 828, 1926.
- [12] A. ZWAAN. PhD thesis, Utrecht, 1929.
- [13] R. E. LANGER, *Bull. Am. Math. Soc.*, **40**, 545, 1934.
- [14] P. A. M. DIRAC. *The Principles of Quantum Mechanics*. Clarendon Press, Oxford, 1947.
- [15] J. H. VAN VLECK, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, **14**, 178, 1928.
- [16] C. MORETTE, *Phys. Rev.*, **81**, 848, 1951.
- [17] G. J. PAPADOPOULOS, *Phys. Rev.*, **D11**, 2870, 1975.
- [18] M. MORSE. *Variational Analysis*. Wiley, New York, 1973.
- [19] J. MILNOR. *Morse Theory*. Princeton University Press, Princeton, 1963.
- [20] U. S. S. LEVIT, K. MÖHRING and T. DREYFUS, *Ann. Phys.*, **114**, 223, 1978.
- [21] S. C. MILLER and R. H. GOOD, *Phys. Rev.*, **91**, 174, 1953.
- [22] R. B. DINGLE, *Appl. Sci. Res.*, **B5**, 345, 1956.
- [23] C. CHESTER, B. FRIEDMAN, and F. URSELL, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **53**, 599, 1957.
- [24] M. V. BERRY, *Proc. Phys. Soc.*, **89**, 479, 1966.
- [25] V. P. MASLOV, *USSR Comp. Math. Phys.*, **3**, 744, 1962.

- [26] R. THOM. *Structural Stability and Morphogenesis*. Benjamin-Addison Wesley, New York, 1975.
- [27] R. P. FEYNMAN and A. R. HIBBS. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, New York, 1965.
- [28] L. S. SCHULMAN. *Path integrals and their applications*. John Wiley and Sons, New York, 1981.
- [29] G. CAMPOLIETI and P. BRUMER, *Phys. Rev. A*, **50**, 997, 1994.
- [30] J. HEADING. *An Introduction to Phase-Integral Methods*. Methuen, London, 1962.
- [31] N. FRÖMAN and P. O. FRÖMAN. *JWKB Approximation: Contributions to the Theory*. North-Holland, Amsterdam, 1965.
- [32] L. LANDAU and E. LIFSHITZ. *Quantum Mechanics*. Pergamon Press, Oxford, 1965.
- [33] H. CARTAN. *Théorie élémentaire des fonctions analytiques d'une ou plusieurs variables complexes*. Hermann, Paris, 1961.
- [34] A. SHUDO and K. S. IKEDA, *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 682, 1995.
- [35] M. V. BERRY, *Adv. Phys.*, **25**, 1, 1976.
- [36] D. W. McLAUGHLIN, *J. Math. Phys.*, **13**, 1099, 1972.
- [37] M. ABRAMOWITZ and I. A. STEGUN. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, Inc., New York, 1970.
- [38] K. E. MOUNT, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, **6**, 1397, 1973.

Elizabeth Pippa STOREY

**Ondes de matière dans des potentiels périodiques en temps :
étude semi-classique**

Résumé

La limite semi-classique de la mécanique quantique est analogue à la limite des petits longueurs d'ondes de l'électromagnétisme, les trajectoires classiques des particules jouant le rôle des rayons optiques. Dans ce mémoire, des méthodes semi-classiques sont appliquées à la diffusion d'un faisceau atomique par un potentiel modulé périodiquement dans le temps. Des caustiques, analogues aux points focaux optiques, se produisent dans l'espace des énergies aux limites de la région permise classiquement. De même que l'optique géométrique n'est pas valable aux points focaux, où elle prédit une intensité infinie, les méthodes semi-classiques élémentaires comme BKW sont inapplicables près des caustiques. Un traitement semi-classique plus performant s'obtient par la méthode d'approximation uniforme, que nous avons généralisée au cas des problèmes périodiques. Les résultats sont en bon accord avec les prédictions quantiques, aussi bien dans la région des énergies permises que dans celle des énergies interdites, où les trajectoires sont complexes.

Abstract

The semiclassical limit of quantum mechanics is analogous to the short-wavelength limit of electromagnetism, classical particle trajectories playing the role of optical rays. In this thesis semiclassical techniques are applied to the scattering of an atomic beam by a periodically modulated potential. Caustics, analogous to optical foci, occur in the energy domain at the limits of the classically allowed range. Just as geometrical optics is invalid at focal points, where it predicts an infinite intensity, elementary semiclassical methods such as WKB fail in the neighbourhood of caustics. A more accurate semiclassical treatment is obtained by the method of uniform approximation, which we generalise to periodic problems. The results agree remarkably well with the quantum mechanical predictions, both in the classically allowed energy range, and in the forbidden range, where the particle trajectories are complex.

Mots clés

Intégrales de chemin – approximations semi-classiques – WKB – caustiques – théorie des catastrophes – approximations uniformes – trajectoires complexes – problèmes périodiques – réseau de phase mince