# Développement de Wigner-Kirkwood

# Intégrale de chemin, M1 Physique

Julien Baglio
julien.baglio@ens-cachan.fr

27 mars 2007

**Résumé**

Ce petit article a pour but de présenter le développement de Wigner-Kirkwood, qui permet de calculer les fluctuations quantique de la fonction de partition canonique. On utilise pour cela le formalisme de l'intégrale de chemin, et l'on se limitera à l'ordre 2 en $\hbar$.

## 1 Rappels sur l'intégrale de chemin en temps imaginaire

On rappelle la définition de la fonction de partition canonique : $\mathcal{Z} = \sum e^{-\beta H}$ où $\beta = \dfrac{1}{kT}$ et $H$ est l'hamiltonien du système. Ceci peut se réécrire simplement à l'aide de l'opérateur hamiltonien $\widehat{H}$, en introduisant la trace : $\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta\widehat{H}}$.

Ainsi, on peut changer de base et reprendre l'expression de $\mathcal{Z}$ dans la base des positions : $\mathcal{Z} = \displaystyle\int dx \langle x| \exp(-\beta\widehat{H})|x\rangle = \int dx\langle x|\exp(-\frac{i}{\hbar}\times -i\beta\hbar\widehat{H})|x\rangle$. On reconnaît alors $\mathcal{Z} = \displaystyle\int dx K(x, -i\beta\hbar; x, 0)$, ce qui est bien un propagateur en temps imaginaire.

On rappelle que le propagateur en temps imaginaire est le propagateur euclidien tel que $K_E(x_f, \tau_f; x_i, \tau_i) = K(x_f, -i\tau_f; x_i, -i\tau_i)$. On a donc au final

$$\mathcal{Z} = \int dx \int_x^x \mathcal{D}x_1 \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} H(x_1, \tau)d\tau\right) \tag{1}$$

## 2 Développement de Wigner-Kirkwood à l'ordre 2

**Propriété 1 (Wigner-Kirkwood)** *Soit $\mathcal{Z}$ la fonction de partition d'un système dans l'ensemble canonique, dont le spectre de l'hamiltonien est discret. Alors en développement jusqu'à l'ordre 2 on a*

$$\mathcal{Z} \simeq \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int dx e^{-\beta V(x)} \left(1 + \frac{(V'(x))^2\beta^3\hbar^2}{24m} - \frac{V''(x)\beta^2\hbar^2}{12m}\right) \tag{2}$$

Démontrons l'égalité (2). Pour cela, on va paramétriser les boucles sur $x$ en terme d'écart à la position $x$ : $x_1 = x + \eta$ et on utilise (1). On rappelle que l'approximation classique est

$$\int_0^{\beta\hbar} H(x_1,\tau)d\tau >> \hbar$$

ce qui, en pratique, revient à développer le potentiel dans l'intégrale. On a $H(x_1,\tau) = \frac{1}{2}m(\dot{x_1})^2 + V(x) + (x_1 - x)V'(x) + \frac{(x_1-x)^2}{2}V''(x)$ jusqu'à l'ordre 2. Injectons ça dans (1) :

$$\mathcal{Z} = \int dx \int_x^x \mathcal{D}x_1 \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} \frac{1}{2}m(\dot{x_1})^2 + V(x) + (x_1-x)V'(x) + \frac{(x_1-x)^2}{2}V''(x)\right)$$

On effectue maintenant le changement de variable fonctionnelle $\eta = x_1 - x$ :

$$\mathcal{Z} = \int dx \int_0^0 \mathcal{D}\eta \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} \frac{1}{2}m(\dot{\eta})^2 + V(x) + \eta V'(x) + \frac{\eta^2}{2}V''(x)\right)$$

On peut sortir de l'intégrale en temps le potentiel (puisque la variable x ici est une variable fonctionnelle qui ne dépend pas du temps $\tau$), et l'on effectue une factorisation canonique : $\eta V'(x) + \frac{\eta^2}{2}V''(x) = \frac{1}{2}\left(\eta\sqrt{V''(x)} + \frac{V'(x)}{\sqrt{V''(x)}}\right)^2 - \frac{(V'(x))^2}{2V''(x)}$. On obtient alors

$$\mathcal{Z} = \int dx e^{-\beta\left(V(x) - \frac{(V'(x))^2}{2V''(x)}\right)} \int_0^0 \mathcal{D}\eta \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} \frac{1}{2}m(\dot{\eta})^2 + \frac{1}{2}m\frac{V''(x)}{m}\left(\eta + \frac{V'(x)}{V''(x)}\right)^2\right)$$

On peut alors effectuer un deuxième changement de variable fonctionnelle, en translatant $\eta$ dans l'expression ci-dessus, avec $\eta \to \eta + \frac{V'(x)}{V''(x)}$, ce qui permet de faire apparaître le propagateur harmonique euclidien :

$$\mathcal{Z} = \int dx e^{-\beta\left(V(x) - \frac{(V'(x))^2}{2V''(x)}\right)} K_E^{harm}\left(\frac{V'(x)}{V''(x)}, -\beta\hbar; \frac{V'(x)}{V''(x)}, 0\right) \tag{3}$$

où $K_E^{harm}\left(\frac{V'(x)}{V''(x)}, -\beta\hbar; \frac{V'(x)}{V''(x)}, 0\right) = \int_{V'(x)/V''(x)}^{V'(x)/V''(x)} \mathcal{D}\eta \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} \frac{1}{2}m(\dot{\eta})^2 + \frac{1}{2}m\frac{V''(x)}{m}\eta^2\right)$.

On utilise alors l'expression du propagateur d'un oscillateur harmonique de pulsation $\omega$ :

$$K_E(x_i,\tau_i;x_f,\tau_f) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\sinh(\omega(\tau_f-\tau_i))}}e^{\frac{-m\omega}{2\hbar\sinh(\omega(\tau_f-\tau_i))}[(x_i^2+x_f^2)\cosh(\omega(\tau_f-\tau_i))-2x_ix_f]} \tag{4}$$

En appliquant (4) dans notre cas, nous obtenons

$$K_E\left(\frac{V'(x)}{V''(x)},\beta\hbar;\frac{V'(x)}{V''(x)},0\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\sinh(\omega\beta\hbar)}}e^{\frac{-m\omega(V'(x))^2}{\hbar(V''(x))^2\sinh(\omega\beta\hbar)}[\cosh(\omega\beta\hbar)-1]}$$

avec $\omega^2 = \frac{V''(x)}{m}$.

Il ne nous reste plus qu'à développer le propagateur harmonique à l'ordre 2 en $\hbar$.

On utilise alors le développement limité de $\frac{\cosh x - 1}{\sinh x}$ : $\frac{\cosh x - 1}{\sinh x} = \frac{x}{2} - \frac{x^3}{24} + o(x^3)$

On l'injecte dans l'expression du propagateur, et l'on n'oublie pas de développer aussi la racine devant l'exponentielle. On obtient alors

$$K_E\left(\frac{V'(x)}{V''(x)},\beta\hbar;\frac{V'(x)}{V''(x)},0\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}}\left(1-\frac{\beta^2\hbar^2}{12}+o(\hbar^2)\right)e^{\frac{-m\omega(V'(x))^2}{\hbar(V''(x))^2}\left[\frac{\omega\beta\hbar}{2}-\frac{\omega^3\beta^3\hbar^3}{24}+o(\hbar^3)\right]}$$

Il ne reste plus qu'à développer l'exponentielle, et à tout rassembler. On obtient alors sans difficulté l'égalité (2). $\triangleleft$