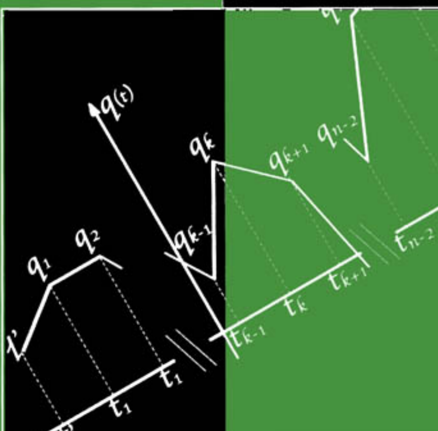
PHYSIQUE

Jean ZINN-JUSTIN

Intégrale de chemin en mécanique quantique : Introduction



SAVOIRS ACTUELS

CNRS EDITIONS

EDP SCIENCES

Intégrale de chemin en mécanique quantique : introduction

Cette page est laissée intentionnellement en blanc.

Jean Zinn-Justin

Intégrale de chemin en mécanique quantique : introduction

SAVOIRS ACTUELS

EDP Sciences/CNRS ÉDITIONS

Illustration de couverture : Un chemin contribuant à l'intégrale (Fig.2.1, p.39).

ISBN EDP Sciences 2-86883-660-7

ISBN CNRS Éditions 2-271-06164-4

Table des matières

Introduction xi

Bibliographie xvii

1 Quelques préliminaires mathématiques 1

1.1 Fonction génératrice 2
1.2 Valeurs moyennes gaussiennes. Théorème de Wick 2
1.2.1 Matrices réelles 3
1.2.2 Intégrale gaussienne générale 4
1.2.3 Valeurs moyennes gaussiennes et théorème de Wick . . 5
1.3 Mesure gaussienne perturbée. Contributions connexes 7
1.3.1 Mesure gaussienne perturbée 7
1.3.2 Diagrammes de Feynman. Contributions connexes . . . 8
1.4 Valeurs moyennes. Fonction génératrice. Cumulants 9
1.4.1 La fonction à deux points 10
1.4.2 Fonctions génératrices. Cumulants 11
1.5 Méthode du col 12
1.5.1 Intégrale réelle 12
1.5.2 Intégrale de contour complexe 15
1.6 Méthode du col à plusieurs variables. Application aux fonctions génératrices 17
1.6.1 Fonction génératrice et méthode du col 18
1.7 Techniques algébriques fonctionnelles 19
1.7.1 Fonctionnelle génératrice. Dérivée fonctionnelle 19
1.7.2 Déterminants d'opérateurs 20
1.8 Intégrale gaussienne : matrices complexes 22
Exercices 25

2 L'intégrale de chemin **31**

2.1 Processus markoviens locaux 32
2.1.1 Évolution markovienne 32
2.1.2 Éléments de matrice et localité 33
2.1.3 Exemple : évolution libre ou mouvement brownien . . . 34

2.2 Solution de l'équation d'évolution aux temps courts 36
2.3 Intégrale de chemin 39
2.4 Évaluation explicite : intégrales de chemin gaussiennes 41
2.4.1 Le mouvement libre 41
2.4.2 L'oscillateur harmonique 43
2.5 Fonction de partition. Fonctions de corrélation 44
2.6 Calcul de l'intégrale de chemin gaussienne générale 46
2.6.1 Intégrale de chemin gaussienne générale 46
2.6.2 Fonctions de corrélation gaussiennes, théorème de Wick 48
2.7 Oscillateur harmonique : la fonction de partition 50
2.7.1 Calcul direct de la fonction de partition gaussienne . . 51
2.7.2 Calcul avec temps continu 53
2.8 Oscillateur harmonique perturbé 54
2.9 Développement perturbatif en puissances de $\hbar$ 56
2.10 Développement semi-classique 57
2.11 Intégrale de chemin et principe variationnel 61
Exercices 64

3 Fonction de partition et spectre d'hamiltonien 67
3.1 Calcul perturbatif 67
3.2 Développement semi-classique ou BKW 70
3.2.1 Spectre et pôles de la résolvante 71
3.2.2 Approximation semi-classique 72
3.2.3 Exemples 74
3.2.4 Approximation BKW et équation de Schrödinger . . . 75
3.3 Le potentiel quartique avec symétrie $O(N)$ pour $N \to \infty$ 77
3.3.1 Une intégrale ordinaire pour $N \to \infty$ 78
3.3.2 Intégrale de chemin 80
3.3.3 Énergie du fondamental 83
3.4 Hamiltonien : unicité du fondamental 85
Exercices 86

4 Mécaniques statistiques quantique et classique 89
4.1 Fonction de partition classique. Matrice de transfert 90
4.2 Fonctions de corrélation 92
4.2.1 Fonctions de corrélation et matrice de transfert 92
4.2.2 Limite thermodynamique et comportement à grande distance 93
4.3 Modèle classique à basse température : un exemple 94
4.4 Limite continue et intégrale de chemin 96
4.4.1 Limite continue 96
4.4.2 Fonctions de corrélation et limite continue 98
4.5 La fonction à deux points : calcul perturbatif, représentation spectrale 100
4.5.1 Calcul perturbatif 101

4.5.2 Représentation spectrale 102
4.6 Formalisme d'opérateurs. Produits chronologiques 104
Exercices 105

5 Intégrales de chemin et quantification 111
5.1 Transformations de jauge 111
5.2 Couplage au champ magnétique : invariance de jauge 113
5.2.1 Invariance de jauge classique 113
5.2.2 Invariance de jauge quantique 115
5.2.3 Invariance de jauge et intégrale de chemin 115
5.3 Quantification et intégrale de chemin 116
5.3.1 Temps discrets et limite continue 117
5.3.2 Ambiguïté et calcul perturbatif 118
5.4 Champ magnétique : calcul direct 120
5.5 Diffusion, marche au hasard, équation de Fokker-Planck 122
5.5.1 Un exemple simple : marche au hasard ou mouvement brownien 123
5.5.2 Équation de diffusion générale 124
5.6 Le spectre du rotateur rigide avec symétrie $O(2)$ 126
5.6.1 Intégrale de chemin 127
5.6.2 Spectre de l'hamiltonien 128
5.6.3 Autre paramétrisation 130
Exercices 131

6 Intégrale de chemin 135
6.1 Intégrales complexes et théorème de Wick 136
6.1.1 Intégrales gaussiennes 137
6.1.2 Intégrale gaussienne générale 138
6.2 Représentation holomorphe 139
6.2.1 Espace de Hilbert des fonctions analytiques 139
6.2.2 Oscillateur harmonique et représentation holomorphe . . 140
6.3 Noyaux d'opérateurs 142
6.4 Intégrale de chemin : l'oscillateur harmonique 145
6.4.1 Intégrale gaussienne générale 146
6.4.2 Fonctions de corrélation gaussiennes 147
6.4.3 Fonction de partition 148
6.5 Intégrale de chemin : hamiltoniens généraux 149
6.5.1 Intégrale de chemin 149
6.5.2 Discussion 151
6.5.3 Oscillateur harmonique : perturbation réelle 152
6.6 Systèmes de bosons : seconde quantification 153
6.6.1 États de bosons et hamiltonien 153
6.6.2 Vecteurs d'état : fonction génératrice et hamiltonien . . 154
6.7 Fonction de partition 156
6.8 Condensation de Bose-Einstein 157

6.8.1 Potentiel harmonique 158
6.8.2 Particules libres dans une boîte 159
6.9 Intégrale de chemin généralisée : gaz de Bose quantique 160
6.9.1 Hamiltonien dans l'espace de Fock 161
6.9.2 Intégrale fonctionnelle 162
Exercices 163

7 Intégrale de chemin : fermions 173
7.1 Algèbres de Grassmann 173
7.2 Dérivations dans les algèbres de Grassmann 175
7.3 Intégration dans les algèbres de Grassmann 176
7.4 Changement de variables mixte : Bérézinien et supertrace . . . 178
7.5 Intégrales gaussiennes 180
7.5.1 Intégrales gaussiennes 180
7.5.2 Intégrales gaussiennes générales 182
7.5.3 Valeurs moyennes gaussiennes, théorème de Wick et perturbations 183
7.6 Intégrales gaussiennes réelles. Théorème de Wick 184
7.7 Espace de Hilbert de fermions et opérateurs 186
7.7.1 Fonctions grassmanniennes analytiques et produit scalaire 187
7.7.2 Noyaux d'opérateurs 188
7.8 Hamiltonien à un fermion 190
7.9 Intégrales de chemin 192
7.9.1 Intégrales de chemin gaussiennes 192
7.9.2 La fonction de partition 194
7.9.3 Généralisation 195
7.10 Fonction de partition de systèmes de fermions 197
7.10.1 États de fermions. Hamiltoniens 197
7.10.2 Fonction génératrice des vecteurs d'états 198
7.10.3 Fonction de partition : intégrale de chemin 200
7.11 Gaz de Fermi quantique 201
Exercices 202

8 Effet tunnel : approximation semi-classique 209
8.1 Double puits quartique et instantons 210
8.1.1 Le double puits quartique 210
8.1.2 Instantons 212
8.2 Minima dégénérés : approximation semi-classique 213
8.2.1 Instantons 214
8.2.2 Intégration gaussienne et mode zéro 214
8.3 Coordonnées collectives et intégration gaussienne 216
8.3.1 Modes zéro dans des intégrales simples 216
8.3.2 Coordonnées collectives et intégrale de chemin 217
8.3.3 Intégration gaussienne 219

8.3.4 Application au double puits 220
8.4 Instantons et états métastables 222
8.4.1 Une intégrale simple 223
8.4.2 Intégrale de chemin et méthode du col : instantons . . 225
8.5 Coordonnées collectives : autre méthode 228
8.6 Le jacobien 229
8.7 Instantons : l'oscillateur anharmonique quartique 231
8.7.1 L'intégrale simple quartique 232
8.7.2 Intégrale de chemin 233
8.7.3 Instantons 234
Exercices 236

9 Évolution quantique et matrice de diffusion 241
9.1 Évolution de la particule libre et matrice S 242
9.1.1 L'évolution de la particule libre 242
9.1.2 Particule dans un potentiel et matrice S 243
9.2 Développement perturbatif de la matrice S 245
9.2.1 Développement perturbatif 245
9.2.2 Calcul explicite 247
9.2.3 Autre méthode 249
9.3 Matrice S et formalisme holomorphe 251
9.4 Matrice S dans la limite semi-classique 252
9.5 Approximation semi-classique : une dimension 253
9.5.1 Diffusion vers l'avant 253
9.5.2 Diffusion vers l'arrière 254
9.5.3 La région interdite 255
9.6 Approximation eïkonale 256
9.6.1 Approximation eïkonale 256
9.6.2 Application au potentiel de Coulomb 258
9.7 Théorie des perturbations et opérateurs 259
Exercices 260

10 Intégrales de chemin dans l'espace des phases 263
10.1 Quelques rappels de mécanique analytique classique 263
10.1.1 Symétries. Lois de conservation 264
10.1.2 Invariance par translation dans le temps. Formalisme hamiltonien 265
10.1.3 Transformations canoniques 267
10.1.4 Crochets de Poisson 268
10.2 Intégrale de chemin dans l'espace de phase 268
10.2.1 Intégrale de chemin 269
10.2.2 Discussion 271
10.2.3 Évolution quantique 272
10.3 Lagrangiens quadratiques dans les vitesses 273
10.3.1 Vérifications 273

10.3.2 Lagrangien quadratique général 274
10.4 Mouvement libre sur la sphère ou rotateur rigide 277
10.4.1 Hamiltonien 277
10.4.2 Le spectre du rotateur rigide : intégrale de chemin . . . 279
Exercice 282

A Rappels minimaux de mécanique quantique 285
A.1 Espace de Hilbert et opérateurs 285
A.2 Évolution quantique, symétries et matrice densité 287
A.3 Position et impulsion. Équation de Schrödinger 290

Index 293

Introduction

Ce livre est issu du cours *Mécanique Quantique Avancée* enseigné depuis l'automne 1996 à Paris dans le cadre du Magistère Interuniversitaire de Physique. Il est partiellement inspiré de plusieurs chapitres de l'ouvrage de Zinn-Justin [26].

Son but est de familiariser le lecteur avec un outil, l'intégrale de chemin, qui offre un point de vue alternatif sur la mécanique quantique, et surtout qui, sous une forme généralisée, est devenu essentiel à une compréhension profonde de la théorie quantique des champs et de ses applications, qui vont de la physique des interactions fondamentales, à la mécanique statistique des transitions de phase, ou aux propriétés des gaz quantiques.

L'intégrale de chemin est un objet mathématique qui peut être considéré comme une généralisation à un nombre infini de variables, représenté par des chemins, des intégrales ordinaires. Elle partage les propriétés algébriques des intégrales ordinaires, mais présente des propriétés nouvelles du point de vue de l'analyse.

L'intégrale de chemin est un outil puissant pour l'étude de la quantique mécanique, car elle met en correspondance de façon très explicite les mécaniques classique et quantique. Les quantités physiques s'obtiennent en moyennant sur tous les chemins possibles, mais dans la limite semi-classique $\hbar \to 0$ les chemins dominant l'intégrale se trouvent dans un voisinage du chemin classique. Ainsi l'intégrale de chemin permet-elle une compréhension intuitive et un calcul simple des effets semi-classiques tant du point de vue de la diffusion que des propriétés spectrales ou de l'effet tunnel.

De plus la formulation de la mécanique quantique basée sur l'intégrale de chemin, si elle peut paraître plus compliquée du point de vue mathématique, puisqu'elle se substitue à un formalisme d'équations aux dérivées partielles, est bien adaptée à l'étude de systèmes à un nombre grand de degrés de liberté où un formalisme de type équation de Schrödinger est beaucoup moins utile. Elle permet ainsi une transition aisée entre la mécanique quantique à un petit nombre de particules et la théorie quantique des champs ou la mécanique statistique.

Dans ces notes, nous présenterons en premier lieu l'intégrale de chemin dans une formulation dite *euclidienne*. Ceci signifie que nous discuterons les éléments de matrice de l'opérateur statistique quantique, c'est-à-dire de la matrice densité à l'équilibre thermique $\mathrm{e}^{-\beta H}$, H étant l'hamiltonien quantique et β l'inverse de la température (mesurée en unités où la constante de Boltzmann k_B vaut 1), plutôt que l'opérateur d'évolution quantique $\mathrm{e}^{-iHt/\hbar}$. Ainsi, nous pourrons également faire le lien avec la mécanique statistique quantique et, ce qui est peut-être moins évident, classique.

Un avantage de la formulation euclidienne est qu'il est en général plus facile de définir rigoureusement l'intégrale de chemin représentant l'opérateur $\mathrm{e}^{-\beta H}$ (la formule de Feynman-Kac) que $\mathrm{e}^{-iHt/\hbar}$.

L'opérateur statistique (ou matrice densité), dont la trace est la fonction de partition quantique

$$\mathcal{Z}(\beta) = \operatorname{tr} \mathrm{e}^{-\beta H}, \tag{1}$$

décrit « l'évolution » en temps imaginaire, et dans ce sens la plupart des propriétés algébriques qui seront démontrées, s'appliqueront aussi à l'opérateur d'évolution en temps réel, les expressions explicites pouvant être obtenues par prolongement analytique $\beta \mapsto it/\hbar$.

Notons toutefois une propriété spécifique de l'opérateur statistique : il fournit un outil pour déterminer la structure de l'état fondamental d'un système quantique. Par exemple si H est borné inférieurement, l'énergie E_0 du fondamental est donnée par

$$E_0 = \lim_{\beta \to \infty} \left(-\frac{1}{\beta} \ln \operatorname{tr} \mathrm{e}^{-\beta H} \right). \tag{2}$$

Si, de plus, le fondamental est unique et isolé, $\mathrm{e}^{-\beta H}$ projette, quand $\beta \to +\infty$, sur l'état fondamental $|0\rangle$:

$$\mathrm{e}^{-\beta H} = \mathrm{e}^{-\beta E_0} \left[|0\rangle \langle 0| + O\left(\mathrm{e}^{-\beta(E_1 - E_0)} \right) \right]. \tag{3}$$

L'intégrale de chemin euclidienne conduit ainsi souvent à une compréhension simple et intuitive de la structure du fondamental de systèmes à un grand nombre de degrés de liberté.

L'effet tunnel quantique peut être interprété dans l'approximation semi-classique en termes de trajectoires classiques parcourues en temps imaginaire. L'intégrale de chemin euclidienne est donc naturellement adaptée à ce problème.

Par ailleurs, elle souligne les relations profondes entre la théorie quantique des champs et la mécanique statistique des systèmes critiques et transitions de phase. Enfin l'intégrale euclidienne est directement liée aux processus de diffusion, par exemple l'équation de Fokker-Planck a la forme d'une équation de Schrödinger en temps imaginaire. Cette classe de problèmes contient comme exemple le plus simple le mouvement brownien qui a motivé la construction de la première intégrale de chemin ou intégrale de Wiener.

L'inconvénient principal de la formulation euclidienne de la mécanique quantique est que les expressions classiques ont des formes quelque peu inhabituelles puisque le temps y est imaginaire. Nous parlerons d'action et de lagrangien *euclidiens*, ainsi que de temps euclidien (qui a en fait une dimension d'énergie inverse). Par ailleurs, le calcul d'amplitudes de diffusion exige alors un prolongement analytique.

Le chapitre 1, contient un rappel des propriétés générales des intégrales gaussiennes ordinaires, la démonstration du théorème de Wick et la méthode du col, dans la mesure où toutes ces notions se généralisent aux intégrales de chemin. En outre quelques méthodes fonctionnelles sont déjà introduites.

Dans le chapitre 2, nous construisons l'intégrale de chemin associée à l'opérateur statistique $\mathrm{e}^{-\beta H}$ pour des hamiltoniens de la forme simple $p^2/2m + V(q)$. Nous calculons ensuite explicitement l'intégrale de chemin correspondant à l'oscillateur harmonique couplé à une force extérieure dépendante du temps. Ce résultat permet de réduire l'évaluation des intégrales de chemin dans le cas de potentiels analytiques à la théorie des perturbations. Nous appliquons ces résultats au calcul de la fonction de partition $\operatorname{tr} \mathrm{e}^{-\beta H}$, par des méthodes perturbatives et semi-classiques. Le chapitre 3 exploite alors ces résultats pour déterminer le spectre de certains hamiltoniens dans différents schémas d'approximation.

Dans le chapitre 4, comparant la mécanique statistique classique des systèmes unidimensionnels et la mécanique statistique quantique à une particule, nous motivons l'introduction de fonctions de corrélation et discutons leur signification en mécanique quantique.

Dans le chapitre 5, nous construisons l'intégrale de chemin pour des hamiltoniens plus généraux linéaires dans les impulsions comme l'hamiltonien d'une particule dans un champ magnétique. Nous relions le problème du choix de l'ordre des opérateurs quantiques aux ambiguïtés de l'intégrale de chemin. Nous discutons certains processus de diffusion décrit par une équation de Fokker-Planck et qui conduisent à des intégrales de chemin analogues.

Dans le chapitre 6, nous introduisons la représentation holomorphe de la mécanique quantique, parce qu'elle permet d'étudier les propriétés de systèmes de bosons du point de la mécanique statistique quantique (dans un formalisme dit de seconde quantification). L'intégrale de chemin prend alors la forme d'une intégrale sur des trajectoires de l'espace de phase dans une paramétrisation complexe. Un formalisme parallèle, basé sur l'intégration sur des variables de type anti-commutant ou de Grassmann, que nous présentons dans le chapitre 7, permet alors de traiter les fermions de manière analogue aux bosons.

Le chapitre 8 est consacré à l'effet tunnel dans la limite semi-classique, un problème pour lequel le formalisme euclidien est particulièrement bien adapté. Nous y considérons le clivage quantique entre des minima classiques dégénérés et la désintégration d'états métastables. La notion d'*instanton* y joue un rôle important.

Dans le chapitre 9, passant à l'évolution quantique (c'est-à-dire au temps réel), nous construisons la représentation par l'intégrale de chemin de la matrice de diffusion ou matrice S et en déduisons son calcul perturbatif en puissances du potentiel. Différentes approximations de type semi-classique sont présentées.

Enfin le chapitre 10 contient quelques résultats complémentaires, comme la définition de l'intégrale de chemin dans l'espace des phases, et les problèmes liés à la quantification des lagrangiens avec potentiel quadratiques dans les vitesses.

Nous voulons souligner que dans tout ce cours notre démarche est largement empirique ; la rigueur mathématique, par exemple, ne sera pas un objectif essentiel. Notre but est plus de type pédagogique : comprendre l'intégrale de chemin, ses propriétés et son intérêt du point de vue de la physique. L'ouvrage ayant également une visée pratique, les méthodes de calcul auront une large place.

Enfin ce cours suppose des connaissances minimales en mécanique quantique, comme l'équation de Schrödinger, la notion d'espace de Hilbert et d'opérateurs agissant sur les vecteurs de l'espace de Hilbert. Nous utiliserons fréquemment la notation des bras et kets de Dirac pour indiquer les vecteurs de l'espace de Hilbert et leurs conjugués complexes. À toutes fins utiles, certaines notions de base de la mécanique quantique sont rappelées dans l'appendice A.

Brève historique et bibliographie. Le concept d'intégrale de chemin semble avoir été introduit par Wiener [25], dans le but de décrire les propriétés statistiques du mouvement brownien, à la suite des travaux d'Einstein. Le mouvement brownien peut être considéré comme la limite continue d'une marche au hasard markovienne en temps discrets. Le mouvement au temps t (t entier) est déterminé par la probabilité $p(x'-x)$ d'aller du point x au point x'. En conséquence, partant du point x_0 la probabilité $P_n(x_n, x_0)$ d'atteindre le poin x_n au temps n est donnée par

$$P_n(x_n, x_0) = \int \mathrm{d}x_1\, \mathrm{d}x_2 \ldots \mathrm{d}x_{n-1}\, p(x_n - x_{n-1}) \ldots p(x_2 - x_1) p(x_1 - x_0).$$

L'ensemble des intégrations sur les variables x_i peut s'interpréter comme une somme pondérée sur tous les chemins $\{x_i\}$ qui vont de x_0 à x_n dans un temps qui ne prend que des valeurs entières $0, 1, \ldots, n$.

Asymptotiquement cependant, pour $n \to \infty$, la nature discrète du temps ne joue plus de rôle. Par ailleurs, comme conséquence du théorème de la limite centrale de la théorie des probabilités, la distribution $p(x'-x)$ peut alors être remplacée par une distribution gaussienne de la forme $\mathrm{e}^{-(x-x')^2/2D}$. Ce processus limite conduit à une intégrale de chemin : les propriétés statistiques du mouvement brownien s'expriment en termes de sommes sur tous les chemins possibles fonctions d'un temps continu et obéissant à une loi de probabilité gaussienne.

Si les travaux de Wiener sont bien connus, un article plus oublié de Wentzel de la même période [24] dans le cadre de l'optique quantique introduit les notions de somme sur des chemins avec une phase d'interférence entre des chemins qui ne satisfont pas aux équations du mouvement classique, et l'interprétation de la somme comme une probabilité d'amplitude de transition. Dirac [5] écrit la première expression de l'opérateur d'évolution quantique qui ressemble à un intégrale de chemin, mais il en reste à une version approchée en terme d'intervalles de temps discrets. Néanmoins sa remarque est très importante du point de vue de la physique relativiste, puisqu'il montre ainsi que les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution dans un intervalle de temps δt court peuvent être calculés en terme du lagrangien, et donc de façon covariante, sous la forme $\mathrm{e}^{i\mathcal{L}\delta t/\hbar}$.

Bien entendu, l'histoire moderne de l'intégrale de chemin commence avec les articles de Feynman [10] qui formule l'évolution quantique en terme de sommes sur un ensemble de trajectoires pondérées par $\mathrm{e}^{iS/\hbar}$, où S est la valeur de l'action classique (intégrale du lagrangien) correspondant à la trajectoire. Il interprète en particulier les équations du mouvement classique comme résultant de l'application de la méthode de la phase stationnaire à l'intégrale de chemin. Lorsque pour un système physique les valeurs de l'action sont grandes par rapport à $\hbar$, seuls les chemins proches du chemin classique contribuent.

Cependant, malgré l'intérêt conceptuel de cette reformulation de l'évolution quantique et de son utilité pour l'étude de la limite semi-classique, l'intégrale de chemin doit son importance dans la physique moderne à sa généralisation à des systèmes à un nombre très grand de degrés de liberté, comme la théorie quantique des champs. En particulier, la quantification des théories de jauge non-abéliennes par Faddeev et Popov (1967) et DeWitt aurait été presque impossible dans la formulation usuelle de la théorie quantique en termes d'opérateurs et d'équations de champs quantiques. Dans la mesure où les théories de jauge non-abéliennes sont à la base de la description de toutes les interactions fondamentales sauf la gravitation, on mesure mieux la signification de ce résultat.

De même, l'intégrale de chemin a mis en évidence les relations mathématiques profondes entre la théorie quantique des champs et la mécanique statistique des transitions de phase, qui auraient été très difficiles à percevoir autrement. Ces relations ont joué un rôle essentiel dans notre compréhension des phénomènes critiques depuis Wilson.

Du point de vue mathématique, l'intégrale de chemin liée à l'évolution quantique est souvent difficile à définir parce que $\mathrm{e}^{iS/\hbar}$ est de module unité pour tout chemin et donc la contribution variable des chemins est un phénomène d'interférence. Kac [14] remarqua que si l'on remplaçait l'opérateur d'évolution $\mathrm{e}^{-itH/\hbar}$ par l'opérateur statistique $\mathrm{e}^{-\beta H}$ (et donc l'équation de Schrödinger par une équation de type diffusion ou de la chaleur), on obtenait une intégrale de chemin avec une mesure positive, généralisant l'intégrale de Wiener, bien plus facile à définir rigoureusement [11]. Une stratégie qui a ensuite été poursuivie par de nombreux auteurs a été de définir l'intégrale de chemin correspondant à l'évolution quantique par prolongement analytique sur la variable de temps [20]. C'est la démarche que nous suivrons aussi dans ce cours.

Dans le domaine de la physique, plusieurs généralisations de l'intégrale de chemin initiale se sont révélées utiles. L'intégrale sur des chemins complexes associée à la représentation holomorphe de la mécanique quantique [15] permet de discuter les propriétés des systèmes de bosons dans le formalisme dit grand canonique. L'intégrale sur des chemins grassmanniens [1, 18] permet de traiter les systèmes de fermions par un formalisme tout à fait parallèle. L'intégrale sur les chemins dans l'espace de phase [2, 6, 9] a permis plus tard de retrouver simplement les règles d'intégration pour des chemins appartenant à des variétés courbes [19] comme par exemple des sphères.

Enfin, dans ce cours nous ne traiterons pas le problème de la quantification de systèmes contraints et renvoyons à la littérature pour ce sujet [7].

Différents articles ont insisté sur le fait que, dans ces cas plus généraux, l'intégrale de chemin ne quantifie pas, c'est-à-dire que dans les situations où le passage de l'hamiltonien classique à l'hamiltonien quantique pose des problèmes d'ordre des opérateurs, l'intégrale de chemin n'est pas uniquement définie [3, 8].

L'intégrale de chemin permet de retrouver par des méthodes plus intuitives nombre d'approximations semi-classiques. Par exemple, on déduit de l'approximation semi-classique de l'opérateur d'évolution [19] des estimations semi-classiques des amplitudes de diffusion [22], comme des approximations pour le spectre du hamiltonien [13].

Sa version en temps imaginaire (Feynman-Kac) permet d'étudier l'effet tunnel dans l'approximation semi-classique [17]. L'intégrale de chemin est alors dominée par des solutions de type *instantons* [4] et le calcul de leurs contributions implique l'introduction de coordonnées collectives [12]. Le comportement aux grands ordres de la théorie des perturbations autour de l'approximation harmonique est obtenu par un calcul analogue à celui de l'effet tunnel [16].

Enfin, quelques livres consacrés aux intégrales de chemin ont un intérêt historique ou présentent d'autres points de vue et contiennent nombre de références supplémentaires [8, 23].

Bibliographie

[1] Les méthodes fonctionnelles dans le cas de systèmes de bosons et de fermions sont présentées dans F.A. BEREZIN, *The Method of Second Quantization* (Academic Press, New York, 1966).

[2] Pour une revue de ces différentes formes de l'intégration de chemin voir par exemple F.A. BEREZIN, *Theor. Math. Phys.* **6** (1971) 141 et la référence [7].

[3] L. COHEN, *J. Math. Phys.* **11** (1970) 3296 ; J.S. DOWKER, *J. Math. Phys.* **17** (1976) 1873.

[4] S. COLEMAN, « The uses of instantons » dans *The Whys of Subnuclear Physics, Erice 1977*, A. Zichichi ed. (Plenum, New York, 1979).

[5] P.A.M. DIRAC, *Physik. Z. Sowjetunion* **3** (1933) 64, repris dans *Collected Papers on Quantum Electrodynamics*, J. Schwinger ed. (Dover, New York, 1958).

[6] L.D. FADDEEV, dans *Methods in Field Theory*, Les Houches School 1975, R. Balian and J. Zinn-Justin eds. (North-Holland, Amsterdam, 1976).

[7] La quantification des systèmes contraints est discutée dans L.D. FADDEEV, *Theor. Math. Phys.* **1** (1969) 3.

[8] R.P. FEYNMAN and A.R. HIBBS, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw Hill, New York, 1965).

[9] R.P. FEYNMAN, *Phys. Rev.* **84** (1951) 108 (Appendix B) ; W. TOBOCMAN, *Nuovo Cimento* **3** (1956) 1213 ; C. GARROD, *Rev. Mod. Phys.* **38** (1966) 483.

[10] R.P. FEYNMAN, *Rev. Mod. Phys.* **20** (1948) 267 ; *Phys. Rev.* **80** (1950) 440, repris dans *Collected Papers on Quantum Electrodynamics*, J. Schwinger ed. (Dover, New York, 1958).

[11] Une des premières revues des propriétés de l'intégrale de chemin, avec de nombreuses références à la littérature mathématique correspondante, est I.M. GELFAND and A.M. YAGLOM, *Fortsch. Phys.* **5** (1957) 517, *J. Math. Phys.* **1** (1960) 48.

[12] Dans le cadre de la théorie quantique des champs les coordonnées collectives ont été discutées dans J.-L. GERVAIS et B. SAKITA, *Phys. Rev. D* **11** (1975) 2943 ; V.E. KOREPIN, P.P. KULISH and L.D. FADDEEV, *JETP Lett.* **21** (1975) 138.

[13] Le spectre semi-classique est déduit de l'approximation semi-classique de l'opérateur d'évolution dans un cadre très général par M.C. GUTZWILLER, *J. Math. Phys.* **11** (1970) 1791.

[14] M. KAC, *Trans. Amer. Math. Soc.* **65** (1949) 1. Voir aussi M. KAC, Chap. 4, *Probability and Related Topics in Physical Sciences, Lectures in Math. Phys.* (Interscience, New York, 1959).

[15] Dans l'article J.R. KLAUDER, *Ann. Phys.* **11** (1960) 123, apparaît pour la première fois une intégrale sur des variables complexes. La formulation générale est trouvée dans S.S. SCHWEBER, *J. Math. Phys.* **3** (1962) 831, où est explicité le lien avec le formalisme holomorphe V. BARGMANN, *Commun. Pure and Appl. Math.* **14** (1961) 187.

[16] C.S. LAM, *Nuovo Cimento* **A55** (1968) 258; E. BRÉZIN, J.C. LE GUILLOU and J. ZINN-JUSTIN, *Phys. Rev. D* **15** (1977) 1554 et 1558.

[17] L'intégrale de chemin permet de calculer le temps de vie d'états métastables comme il a été remarqué par J.S. LANGER, *Ann. Phys.* **41** (1967) 108.

[18] Dans le cadre de la théorie quantique des champs plusieurs auteurs avaient suggéré l'utilisation de variables anti-commutantes pour représenter des champs de fermions, par exemple, P.T. MATTHEWS and A. SALAM, *Nuovo Cimento* **2** (1955) 120. La dérivée dans le cas de variables de Grassmann est définie dans J.L. MARTIN, *Proc. Roy. Soc.* (London) **A251** (1959) 543. Les règles d'intégration et de dérivation dans les algèbres de Grassmann ont été clarifiées et formalisées dans F.A. BEREZIN, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **137** (1961) 311.

[19] Dans l'article C. MORETTE, *Phys. Rev.* **81** (1951) 848 apparaissent plusieurs résultats, le calcul de l'intégrale de chemin par la méthode de la phase stationnaire pour $\hbar \to 0$ et les relations avec l'approximation BKW de l'équation de Schrödinger, la détermination de la mesure non triviale engendrée par la quantification de potentiels quadratiques dans les vitesses. Cette mesure est déterminée par la condition d'unitarité de l'opérateur d'évolution aux temps courts, une stratégie analogue à J.H. VAN VLECK, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **14** (1928) 178.

[20] E. NELSON, *J. Math. Phys.* **5** (1964) 332.

[21] R.G. NEWTON, *Scattering theory Waves and Particles* (McGraw-Hill, New York, 1966).

[22] Une référence ancienne est P. PECHUKAS, *Phys. Rev.* **181** (1969) 166. Voir aussi la référence [6].

[23] L.R. SCHULMAN, *Techniques and Applications of Path Integration* (Wiley, New York 1981).
H. KLEINERT, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics* (World Scientific, Singapore, 1995).
Un livre récent avec nombre de références
C. GROSCHE and F. STEINER, *Handbook of Feynman path integrals* (Springer, Berlin, Heidelberg, 1998).

Index

A

algèbre de Grassmann, 174
- conjugaison complexe, 175
- dérivation, 175
- intégrale gaussienne, 180
- intégration, 176
- produit scalaire, 187

approximation semi-classique, 209

B

Bargmann-Wigner (potentiel), 235
bérézinien, 179
BKW (approximation), 75
Bohr-Sommerfeld (condition de quantification), 73
Boltzmann (constante de), 289
bosons
- équation d'état, 157
- fonction de partition, 156
- hamiltonien, 155
- seconde quantification, 153

bras et kets, 33, 91, 286
brisure spontanée de symétrie, 94

C

champ de jauge, 114
champ magnétique, 113
champ magnétique constant (spectre), 131
chemins browniens, 103
Clifford (algèbre de), 176
cols dégénérés, 215
condensation de Bose-Einstein, 157
- bosons libres, 159
- potentiel harmonique, 158

condition de Hölder, 41
conditions aux limites anti-périodiques, 195, 197
conditions aux limites périodiques, 45, 148
connexes (contributions), 8
coordonnées collectives, 218, 228
cumulants, 10

D

dérivée covariante, 115
dérivée fonctionnelle, 19
déterminants d'opérateurs, 20
développement
- asymptotique, 224
- en puissances de $\hbar$, 56
- perturbatif, 150
- semi-classique (fonction de partition), 57

diagrammes de Feynman, 8
diffusion (matrice T), 244
Dirac (fonction δ), 20
distribution d'équilibre, 126
double puits quartique, 210

E

effet
- de taille finie, 97
- tunnel, 209

énergie
- de Fermi, 200
- libre, 82

ensemble gaussien unitaire de matrices (GUE), 204
équation
- de Fokker-Planck dissipative, 126
- de Fokker-Planck (exemples), 133

de Schrödinger, 292
d'état : fermions, 200
équilibre thermique, 289
espace
de Fock, 161
de Hilbert, 285
de phase position-impulsion, 151
étalement du paquet d'onde, 242
états métastables (désintégration), 222
évolution
en temps imaginaire, 209
quantique, 241

F

Faddeev-Popov (méthode de), 217, 218
fermions, 173
fonction de partition, 194
hamiltonien, 190
intégrales de chemin, 192
vecteurs d'états, 197
Fokker-Planck
équation de, 125, 237
hamiltonien de, 122
fonction à deux points, 93
connexe, 93
gaussienne, 148
calcul perturbatif, 101
représentation spectrale, 102
fonction de Bessel, 14, 16
fonction de partition
classique, 90
holomorphe, 150
quantique, 45
fermions, 200
gaz de Fermi, 201
oscillateur harmonique, 148
fonction δ de Dirac
grassmannienne, 188
formalisme holomorphe, 140
fonction d'onde, 291
fonction Γ, 14
fonction génératrice, 2, 11
fonction grassmannienne analytique, 187
fonction ψ, 74
fonction saut, 148
fonction saut θ, 73, 120
fonction signe ϵ, 119
fonctionnelle génératrice, 19, 46, 99
bosons, 161
fonctions analytiques
espace de Hilbert, 139
produit scalaire, 139
fonctions de corrélation, 46, 92
connexes, 11, 100
gaussiennes, 48
limite continue, 98
fondamental (propriétés), 85
formalisme holomorphe, 139, 141
noyaux d'opérateurs, 142
trace, 144
formule
de Bohr-Sommerfeld (généralisation), 221
de Poisson, 129
de Stirling, 14

G

gaussienne
valeur moyenne, 5
intégrales de chemin, 41
gaz de Fermi quantique, 201
grand canonique (formalisme), 156
Grassmann (algèbre de), 174

H

hamiltoniens de bosons (noyaux), 155
Heisenberg (représentation de), 104
Hermite (polynômes de), 27

I

instanton, 209, 212, 214, 225
instantons, 235
jacobien, 230
intégrale de chemin, 31, 40
et quantification, 111
gaussienne (formalisme holomorphe), 146
holomorphe, 145, 150
ambiguïtés, 117, 151
changement de variables, 130
intégrale fonctionnelle, 163
fermions, 201