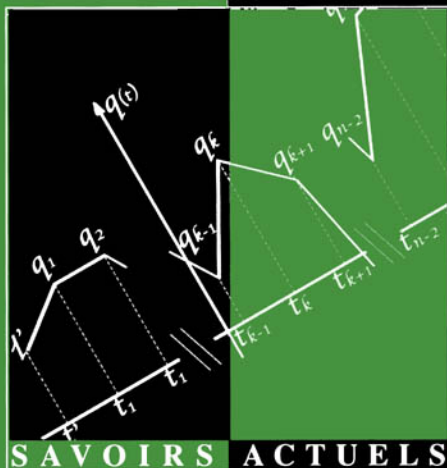


Jean ZINN-JUSTIN

• Intégrale de chemin • en mécanique quantique : Introduction



Intégrale de chemin en mécanique quantique : introduction

Cette page est laissée intentionnellement en blanc.

Jean Zinn-Justin

Intégrale de chemin
en mécanique quantique :
introduction

S A V O I R S A C T U E L S

EDP Sciences/CNRS ÉDITIONS

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

© 2003, EDP Sciences, 17, avenue du Hoggar, BP 112, Parc d'activités de Courtabœuf,
91944 Les Ulis Cedex A
et
CNRS ÉDITIONS, 15, rue Malebranche, 75005 Paris.

Tous droits de traduction, d'adaptation et de reproduction par tous procédés réservés pour tous pays. Toute reproduction ou représentation intégrale ou partielle, par quelque procédé que ce soit, des pages publiées dans le présent ouvrage, faite sans l'autorisation de l'éditeur est illicite et constitue une contrefaçon. Seules sont autorisées, d'une part, les reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective, et d'autre part, les courtes citations justifiées par le caractère scientifique ou d'information de l'œuvre dans laquelle elles sont incorporées (art. L. 122-4, L. 122-5 et L. 335-2 du Code de la propriété intellectuelle). Des photocopies payantes peuvent être réalisées avec l'accord de l'éditeur. S'adresser au : Centre français d'exploitation du droit de copie, 3, rue Hautefeuille, 75006 Paris. Tél. : 01 43 26 95 35.

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 $N \rightarrow \infty$	77
3.3.1	Une intégrale ordinaire pour $N \rightarrow \infty$	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 mécanique quantique, 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 $\hbar \rightarrow 0$ 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 $e^{-\beta H}$, 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 $e^{-iHt/\hbar}$. Ainsi, nous pourrions 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 $e^{-\beta H}$ (la formule de Feynman-Kac) que $e^{-iHt/\hbar}$.

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

$$Z(\beta) = \text{tr } e^{-\beta H}, \quad (1)$$

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

$$E_0 = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{\beta} \ln \text{tr } e^{-\beta H} \right). \quad (2)$$

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

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

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 *euclidien*, 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 $e^{-\beta H}$ 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 $\text{tr} e^{-\beta H}$, 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 relierons 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 point x_n au temps n est donnée par

$$P_n(x_n, x_0) = \int dx_1 dx_2 \dots dx_{n-1} p(x_n - x_{n-1}) \dots p(x_2 - x_1) p(x_1 - x_0).$$

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 $0, 1, \dots, n$.

Asymptotiquement cependant, pour $n \rightarrow \infty$, 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 $e^{-(x-x')^2/2D}$. 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 $e^{i\mathcal{L}\delta t/\hbar}$.

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 $e^{iS/\hbar}$, 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 $e^{iS/\hbar}$ 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 $e^{-itH/\hbar}$ par l'opérateur statistique $e^{-\beta H}$ (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 des 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. BEZIN, *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 $\hbar \rightarrow 0$ 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