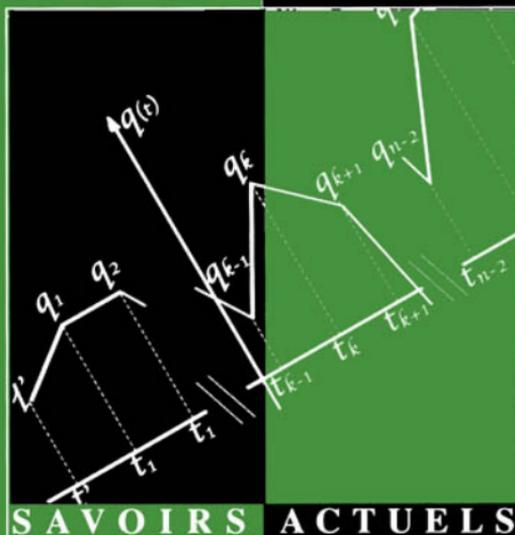


Jean ZINN-JUSTIN

• Intégrale de chemin •  
 en mécanique quantique :  
 Introduction



Intégrale de chemin  
en mécanique quantique :  
introduction



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

|   |             |
|---|-------------|
| <b>Introduction</b>   | <b>xi</b>   |
| <b>Bibliographie</b>  | <b>xvii</b> |
| <b>1 Quelques préliminaires mathématiques</b>   | <b>1</b>    |
| 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<br>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          |
| <b>2 L'intégrale de chemin</b>  | <b>31</b>   |
| 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        |
| <b>3</b> | <b>Fonction de partition et spectre d'hamiltonien</b> . . . . .                    | <b>67</b> |
| 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        |
| <b>4</b> | <b>Mécaniques statistiques quantique et classique</b> . . . . .                    | <b>89</b> |
| 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        |
| <b>5</b> | <b>Intégrales de chemin et quantification</b>                           | <b>111</b> |
| 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<br>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        |
| <b>6</b> | <b>Intégrale de chemin</b>  | <b>135</b> |
| 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        |
| <b>7</b> | <b>Intégrale de chemin : fermions</b>                                     | <b>173</b> |
| 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        |
| <b>8</b> | <b>Effet tunnel : approximation semi-classique</b>                        | <b>209</b> |
| 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        |
| <b>9</b>  | <b>Évolution quantique et matrice de diffusion</b>                         | <b>241</b> |
| 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        |
| <b>10</b> | <b>Intégrales de chemin dans l'espace des phases</b>                       | <b>263</b> |
| 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        |
| <b>A</b> | <b>Rappels minimaux de mécanique quantique</b>              | <b>285</b> |
| 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        |
|          | <b>Index</b>  | <b>293</b> |

# 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  $\beta$  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  $\delta t$  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).

Une revue en français se trouve dans C. DEWITT-MORETTE, L'intégrale de Feynman : Une introduction, *Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor.* **11** (1969) 153.

- [24] G. WENTZEL, *Z. Phys.* **22** (1924) 193.
- [25] N. WIENER, *J. Math. Phys.* **2** (1923) 131, repris dans *Selected Papers of N. Wiener* (MIT Press, Cambridge, 1964), p. 55. Voir aussi N. WIENER, *Proc. London Math. Soc.* **22** (1924) 455.
- [26] J. ZINN-JUSTIN, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Clarendon Press 1989 (Oxford 4<sup>e</sup> éd., 2002), chapitres 1–6, 39–41.



# Chapitre 1

## Quelques préliminaires mathématiques

**A**VANT D'ENTRER DANS LE VIF DU SUJET, nous rappelons quelques résultats mathématiques, surtout de nature algébrique, et introduisons quelques notions importantes pour la suite.

Nous trouverons souvent commodes d'utiliser les fonctions génératrices des valeurs moyennes par rapport à une mesure ou une distribution de probabilité. Celles-ci se généralisent en fonctionnelles génératrices dans le cas d'une mesure sur des chemins tels que l'intégrale de chemin la fournit.

La mesure gaussienne joue un rôle essentiel dans des domaines variés : la théorie des probabilités à cause du théorème de la limite centrale, la mécanique quantique comme nous allons le montrer, et donc la théorie quantique des champs et la mécanique statistique des transitions de phase. Nous rappelons donc quelques propriétés des valeurs moyennes gaussiennes. Nous démontrons le théorème de Wick, un résultat simple mais d'un grand intérêt pratique. Nous expliquons la méthode du col, une méthode qui permet le calcul approché de certaines intégrales en les ramenant à des intégrales gaussiennes. Enfin nous définissons les dérivées fonctionnelles et nous décrivons une identité utile pour le calcul de déterminants d'opérateurs.

*Notation.* Dans les paragraphes qui suivent, nous utilisons des caractères gras pour indiquer des matrices ou des vecteurs, et les caractères italiques correspondants pour indiquer les éléments de matrice ou les composantes de vecteurs.

## 1.1 Fonction génératrice

Soit  $\Omega(x_1, x_2, \dots, x_n)$  une mesure positive ou une distribution de probabilité définie dans tout  $\mathbb{R}^n$  et normalisée. Nous notons

$$\langle F \rangle \equiv \int d^n x F(\mathbf{x}) \Omega(\mathbf{x}),$$

où  $d^n x \equiv \prod_{i=1}^n dx_i$ , la valeur moyenne d'une fonction  $F(x_1, \dots, x_n)$ . Par définition  $\langle 1 \rangle = 1$ .

Il est souvent commode d'introduire la transformée de Fourier de la distribution, qui est aussi une fonction génératrice de ses moments. Ici nous considérons une classe particulière de distributions qui admettent une transformée de type Laplace :

$$\mathcal{Z}(\mathbf{b}) = \left\langle \exp \left( \sum_{i=1}^n b_i x_i \right) \right\rangle = \int d^n x \exp \left( \sum_{i=1}^n b_i x_i \right) \Omega(\mathbf{x}). \quad (1.1)$$

Dans ce cas, considérer une transformée de type Laplace plutôt que la transformée de Fourier a un avantage : l'intégrant est encore une mesure positive.

La fonction  $\mathcal{Z}(\mathbf{b})$  est alors une *fonction génératrice* des moments de la distribution, c'est-à-dire des valeurs moyennes de polynômes. En effet on reconnaît, après développement de l'intégrant en puissances des variables  $b_k$ , la série

$$\mathcal{Z}(\mathbf{b}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{\ell!} \sum_{k_1, k_2, \dots, k_\ell=1}^n b_{k_1} b_{k_2} \dots b_{k_\ell} \langle x_{k_1} x_{k_2} \dots x_{k_\ell} \rangle.$$

Les valeurs moyennes peuvent donc être obtenues en dérivant la fonction  $\mathcal{Z}(\mathbf{b})$  par rapport à ses arguments. Dérivant les deux membres de l'équation (1.1) par rapport à  $b_k$ , on obtient

$$\frac{\partial}{\partial b_k} \mathcal{Z}(\mathbf{b}) = \int d^n x x_k \exp \left( \sum_i b_i x_i \right) \Omega(\mathbf{x}). \quad (1.2)$$

Dérivant de façon répétée et prenant la limite  $\mathbf{b} = 0$ , on trouve donc

$$\langle x_{k_1} x_{k_2} \dots x_{k_\ell} \rangle = \left[ \frac{\partial}{\partial b_{k_1}} \frac{\partial}{\partial b_{k_2}} \dots \frac{\partial}{\partial b_{k_\ell}} \mathcal{Z}(\mathbf{b}) \right] \Big|_{\mathbf{b}=0}. \quad (1.3)$$

Cette notion de fonction génératrice est très utile et sera étendue en section 1.7 à la limite où le nombre de variables est infini.

## 1.2 Valeurs moyennes gaussiennes.

### Théorème de Wick

À cause du théorème de la limite centrale, les distributions de probabilités gaussiennes jouent un rôle important en théorie des probabilités comme en

physique. De plus, elles ont des propriétés algébriques remarquables que nous allons maintenant rappeler. Comme la plupart de ces propriétés algébriques se généralisent à toutes les intégrales gaussiennes, nous nous plaçons dans ce cadre plus général.

Considérons d'abord l'intégrale gaussienne

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = \int d^n x \exp \left( - \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j \right), \quad (1.4)$$

où la matrice  $\mathbf{A}$  d'éléments  $A_{ij}$  est une matrice symétrique complexe dont la partie réelle a des valeurs propres non négatives, et qui n'a pas de valeur propre nulle :

$$\operatorname{Re} \mathbf{A} \geq 0, \quad a_i \neq 0.$$

Diverses méthodes permettent de démontrer

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = (2\pi)^{n/2} (\det \mathbf{A})^{-1/2}. \quad (1.5)$$

Nous démontrons ici ce résultat pour des matrices réelles. En section 1.8, nous donnerons deux démonstrations pour des matrices complexes.

### 1.2.1 Matrices réelles

Nous partons de l'intégrale simple ( $a > 0$ )

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2/2+bx} = \sqrt{2\pi/a} e^{b^2/2a}. \quad (1.6)$$

Toute matrice symétrique réelle peut être diagonalisée par une transformation orthogonale, et donc la matrice  $\mathbf{A}$  peut être écrite

$$\mathbf{A} = \mathbf{O} \mathbf{D} \mathbf{O}^T, \quad (1.7)$$

où la matrice  $\mathbf{O}$  est orthogonale et la matrice  $\mathbf{D}$  d'éléments  $D_{ij}$  diagonale :

$$\mathbf{O}^T \mathbf{O} = \mathbf{1}, \quad D_{ij} = a_i \delta_{ij}.$$

Changeons alors de variables,  $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{y}$ , dans l'intégrale (1.4) :

$$x_i = \sum_{j=1}^n O_{ij} y_j \quad \Rightarrow \quad \sum_{ij} x_i A_{ij} x_j = \sum_{ij} x_i O_{ik} a_k O_{jk} x_j = \sum_i a_i y_i^2,$$

dont le jacobien est  $J = |\det \mathbf{O}| = 1$ . Nous sommes alors ramenés à une intégrale factorisée

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = \prod_{i=1}^n \int dy_i e^{-a_i y_i^2/2}.$$

La matrice  $\mathbf{A}$  est positive ; ses valeurs propres  $a_i$  sont donc positives, chaque intégrale converge et se déduit du résultat (1.6). Nous concluons

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = (2\pi)^{n/2} (a_1 a_2 \dots a_n)^{-1/2} = (2\pi)^{n/2} (\det \mathbf{A})^{-1/2}.$$

### 1.2.2 Intégrale gaussienne générale

Considérons maintenant une intégrale gaussienne générale

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}, \mathbf{b}) = \int d^n x \exp \left( - \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j + \sum_{i=1}^n b_i x_i \right). \quad (1.8)$$

Pour calculer  $\mathcal{Z}(\mathbf{A}, \mathbf{b})$ , on cherche le minimum de la forme quadratique :

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j - \sum_{i=1}^n b_i x_i \right) = \sum_{j=1}^n A_{kj} x_j - b_k = 0.$$

En terme de la matrice inverse de  $\mathbf{A}$  :

$$\Delta = \mathbf{A}^{-1},$$

la solution peut s'écrire

$$x_i = \sum_{j=1}^n \Delta_{ij} b_j. \quad (1.9)$$

Après le changement de variables  $x_i \mapsto y_i$ ,

$$x_i = \sum_{j=1}^n \Delta_{ij} b_j + y_i, \quad (1.10)$$

l'intégrale devient

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}, \mathbf{b}) = \exp \left[ \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j \right] \int d^n y \exp \left( - \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} y_i A_{ij} y_j \right). \quad (1.11)$$

Ce changement de variables réduit le calcul à l'intégrale (1.4). On en déduit

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}, \mathbf{b}) = (2\pi)^{n/2} (\det \mathbf{A})^{-1/2} \exp \left[ \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j \right]. \quad (1.12)$$

*Remarque.* L'intégrale gaussienne a une propriété remarquable : si l'on intègre l'exponentielle d'une forme quadratique sur un sous-ensemble de variables, le résultat est encore l'exponentielle d'une forme quadratique. Cette stabilité structurale explique la stabilité des distributions de probabilité gaussiennes. Elle est également liée à certaines propriétés de l'oscillateur harmonique qui seront discutées en section 2.6.

### 1.2.3 Valeurs moyennes gaussiennes et théorème de Wick

Dans le cas où la matrice  $\mathbf{A}$  est réelle et donc positive, nous pouvons considérer la fonction gaussienne comme une mesure positive sur  $\mathbb{R}^n$  ou une distribution de probabilité et calculer des valeurs moyennes de fonction des variables  $x_i$  :

$$\langle F(\mathbf{x}) \rangle \equiv \mathcal{N} \int d^n x F(\mathbf{x}) \exp \left( - \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j \right), \quad (1.13)$$

où la normalisation  $\mathcal{N}$  est choisie de telle sorte que  $\langle 1 \rangle = 1$  :

$$\mathcal{N} = \mathcal{Z}^{-1}(\mathbf{A}, 0) = (2\pi)^{-n/2} (\det \mathbf{A})^{1/2}.$$

La fonction (1.8) est alors une *fonction génératrice* des moments de la distribution, c'est-à-dire des valeurs moyennes gaussiennes de polynômes (cf. section 1.1). En effet

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}, \mathbf{b}) / \mathcal{Z}(\mathbf{A}, 0) = \left\langle \exp \sum_i b_i x_i \right\rangle.$$

Les valeurs moyennes peuvent donc être obtenues en dérivant l'expression (1.8) par rapport aux variables  $b_i$  :

$$\langle x_{k_1} x_{k_2} \dots x_{k_\ell} \rangle = (2\pi)^{-n/2} (\det \mathbf{A})^{1/2} \left[ \frac{\partial}{\partial b_{k_1}} \frac{\partial}{\partial b_{k_2}} \dots \frac{\partial}{\partial b_{k_\ell}} \mathcal{Z}(\mathbf{A}, \mathbf{b}) \right] \Big|_{\mathbf{b}=0}$$

et, remplaçant  $\mathcal{Z}(\mathbf{A}, \mathbf{b})$  par son expression explicite (1.12),

$$\langle x_{k_1} \dots x_{k_\ell} \rangle = \left\{ \frac{\partial}{\partial b_{k_1}} \dots \frac{\partial}{\partial b_{k_\ell}} \exp \left[ \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j \right] \right\} \Big|_{\mathbf{b}=0}. \quad (1.14)$$

De façon générale, si  $F(\mathbf{x})$  est une série entière dans l'ensemble des variables  $x_i$ , nous trouvons l'identité

$$\langle F(\mathbf{x}) \rangle = \left\{ F \left( \frac{\partial}{\partial b} \right) \exp \left[ \sum_{i,j} \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j \right] \right\} \Big|_{\mathbf{b}=0}. \quad (1.15)$$

*Théorème de Wick.* L'identité (1.14) conduit au théorème de Wick. Chaque fois qu'une dérivée agit sur l'exponentielle du membre de droite, elle engendre un facteur  $b$ . Une autre dérivée devra agir ultérieurement sur ce facteur, sinon le terme correspondant s'annulera dans la limite  $\mathbf{b} = 0$ . Nous en concluons que

la moyenne du produit  $x_{k_1} \dots x_{k_\ell}$  avec le poids gaussien  $\exp(-\frac{1}{2}x_i A_{ij} x_j)$  est obtenue de la manière suivante : on considère tous les appariements possibles des indices  $k_1, \dots, k_\ell$  ( $\ell$  doit donc être paire). À chaque paire  $k_p k_q$ , on associe l'élément  $\Delta_{k_p k_q}$  de la matrice  $\Delta = \mathbf{A}^{-1}$ . Alors

$$\langle x_{k_1} \dots x_{k_\ell} \rangle = \sum_{\substack{\text{tous les appariements} \\ \text{possibles } P \text{ de } \{k_1 \dots k_\ell\}}} \Delta_{k_{P_1} k_{P_2}} \dots \Delta_{k_{P_{\ell-1}} k_{P_\ell}}, \quad (1.16)$$

$$= \sum_{\substack{\text{tous les appariements} \\ \text{possibles } P \text{ de } \{k_1 \dots k_\ell\}}} \langle x_{k_{P_1}} x_{k_{P_2}} \rangle \dots \langle x_{k_{P_{\ell-1}}} x_{k_{P_\ell}} \rangle. \quad (1.17)$$

Les équations (1.16, 1.17) sont des propriétés caractéristiques de toute mesure gaussienne centrée ( $\langle x_i \rangle = 0$ ). Elles sont connues sous le nom de théorème de Wick et sont, dans une forme adaptée à la mécanique quantique ou à la théorie quantique des champs, la base de la théorie des perturbations. La simplicité du résultat ne doit donc pas cacher sa *grande importance pratique*. Notons aussi que la démonstration est purement algébrique et s'étend donc aux intégrales complexes. Seule l'interprétation des fonctions gaussiennes comme mesure ou distribution de probabilité disparaît alors.

*Exemples.* On trouve alors successivement :

$$\begin{aligned} \langle x_{i_1} x_{i_2} \rangle &= \Delta_{i_1 i_2}, \\ \langle x_{i_1} x_{i_2} x_{i_3} x_{i_4} \rangle &= \Delta_{i_1 i_2} \Delta_{i_3 i_4} + \Delta_{i_1 i_3} \Delta_{i_2 i_4} + \Delta_{i_1 i_4} \Delta_{i_3 i_2}. \end{aligned}$$

Plus généralement, la valeur moyenne d'un produit de  $2p$  variables est la somme de  $(2p-1)(2p-3) \dots 5 \times 3 \times 1$  termes distincts.

*Une identité utile.* Considérons maintenant la valeur moyenne gaussienne du produit  $x_i F(\mathbf{x})$  :

$$\langle x_i F(\mathbf{x}) \rangle = \mathcal{N} \int d^n x x_i F(\mathbf{x}) \exp \left( - \sum_{j,k=1}^n \frac{1}{2} x_j A_{jk} x_k \right). \quad (1.18)$$

Nous notons

$$x_i \exp \left( - \sum_{j,k=1}^n \frac{1}{2} x_j A_{jk} x_k \right) = - \sum_{\ell} \Delta_{i\ell} \frac{\partial}{\partial x_\ell} \exp \left( - \sum_{j,k=1}^n \frac{1}{2} x_j A_{jk} x_k \right).$$

Nous utilisons alors cette identité dans (1.18) et intégrons par parties :

$$\langle x_i F(\mathbf{x}) \rangle = \mathcal{N} \sum_{\ell} \Delta_{i\ell} \int d^n x \exp \left( - \sum_{j,k=1}^n \frac{1}{2} x_j A_{jk} x_k \right) \frac{\partial F}{\partial x_\ell},$$

ce qui se résume dans une identité qui peut se démontrer aussi en appliquant le théorème de Wick :

$$\langle x_i F(x) \rangle = \sum_{\ell} \langle x_i x_{\ell} \rangle \left\langle \frac{\partial F}{\partial x_{\ell}} \right\rangle. \quad (1.19)$$

## 1.3 Mesure gaussienne perturbée. Contributions connexes

Même dans les cas favorables où le théorème de la limite centrale s'applique, la mesure gaussienne n'est qu'une distribution limite. Il est donc intéressant d'étudier les corrections à la distribution gaussienne.

### 1.3.1 Mesure gaussienne perturbée

Nous considérons une distribution plus générale normalisée  $e^{-A(\mathbf{x}, \lambda)} / \mathcal{Z}(\lambda)$  où la fonction  $A(\mathbf{x}, \lambda)$  est la somme d'une partie quadratique et d'un polynôme  $\lambda V(\mathbf{x})$  dans les variables  $x_i$  :

$$A(\mathbf{x}, \lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n x_i A_{ij} x_j + \lambda V(\mathbf{x}), \quad (1.20)$$

le paramètre  $\lambda$  caractérisant l'amplitude de la déviation à la distribution gaussienne.

La normalisation  $\mathcal{Z}(\lambda)$  est donnée par l'intégrale

$$\mathcal{Z}(\lambda) = \int d^n x e^{-A(\mathbf{x}, \lambda)}. \quad (1.21)$$

Pour la calculer, nous développons l'intégrand en série formelle de  $\lambda$  et intégrons terme à terme :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\lambda) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^k}{k!} \int d^n x V^k(\mathbf{x}) \exp\left(-\sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j\right) \\ &= \mathcal{Z}(0) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^k}{k!} \langle V^k(\mathbf{x}) \rangle_0, \end{aligned} \quad (1.22)$$

où  $\langle \bullet \rangle_0$  signifie valeur moyenne gaussienne avec la mesure  $\exp[-\sum_{i,j} x_i A_{ij} x_j / 2]$ . Chaque terme du développement, qui est la valeur moyenne gaussienne d'un polynôme, s'obtient alors en utilisant le théorème de Wick (1.16).

Utilisant l'équation (1.15) avec  $F = e^{-\lambda V}$ , nous en déduisons aussi une représentation formelle de la fonction (1.21) :

$$\mathcal{Z}(\lambda)/\mathcal{Z}(0) = \left\{ \exp \left[ -\lambda V \left( \frac{\partial}{\partial \mathbf{b}} \right) \right] \exp \left[ \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j \right] \right\} \Big|_{\mathbf{b}=0}. \quad (1.23)$$

*Exemple.* Considérons la perturbation

$$V(\mathbf{x}) = \frac{1}{4!} \sum_{i=1}^n x_i^4. \quad (1.24)$$

À l'ordre  $\lambda^2$  on trouve ( $\Delta \mathbf{A} = \mathbf{1}$ )

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\lambda)/\mathcal{Z}(0) &= 1 - \frac{1}{4!} \lambda \sum_i \langle x_i^4 \rangle_0 + \frac{1}{2!(4!)^2} \lambda^2 \sum_i \sum_j \langle x_i^4 x_j^4 \rangle_0 + O(\lambda^3) \\ &= 1 - \frac{1}{8} \lambda \sum_i \Delta_{ii}^2 + \frac{1}{128} \lambda^2 \sum_i \Delta_{ii}^2 \sum_j \Delta_{jj}^2 \\ &\quad + \lambda^2 \sum_{ij} \left( \frac{1}{16} \Delta_{ii} \Delta_{jj} \Delta_{ij}^2 + \frac{1}{48} \Delta_{ij}^4 \right) + O(\lambda^3). \end{aligned} \quad (1.25)$$

Une vérification simple des facteurs est obtenue en spécialisant au cas d'une seule variable. Alors

$$\mathcal{Z}(\lambda)/\mathcal{Z}(0) = 1 - \frac{1}{8} \lambda + \frac{35}{384} \lambda^2 + O(\lambda^3).$$

Notons aussi que les deux premiers termes de l'expression (1.25) s'exponentient de telle sorte que  $\ln \mathcal{Z}$  n'a plus que des termes *connexes*, c'est-à-dire des termes qui ne peuvent pas se factoriser en un produit de sommes :

$$\ln \mathcal{Z}(\lambda) - \ln \mathcal{Z}(0) = -\frac{1}{8} \lambda \sum_i \Delta_{ii}^2 + \lambda^2 \sum_{ij} \left( \frac{1}{16} \Delta_{ii} \Delta_{jj} \Delta_{ij}^2 + \frac{1}{48} \Delta_{ij}^4 \right) + O(\lambda^3).$$

### 1.3.2 Diagrammes de Feynman. Contributions connexes

Il est possible d'associer à chaque contribution perturbative un graphe appelé diagramme de Feynman. Chaque monôme contribuant à  $V(\mathbf{x})$  est représenté par un point (un vertex) d'où partent un nombre de lignes égal au degré du monôme, et chaque appariement est représenté par une ligne joignant les vertex auxquels appartient les variables correspondantes.

Nous venons d'introduire la notion de contribution connexe. À cette notion correspond une propriété des graphes. Une contribution connexe est une contribution correspondant à un diagramme connexe. Nous utilisons ci-dessous l'indice  $c$  pour indiquer la partie connexe d'une valeur moyenne. Dans

ces conditions par exemple

$$\begin{aligned}\langle V(\mathbf{x}) \rangle &= \langle V(\mathbf{x}) \rangle_c, & \langle V^2(\mathbf{x}) \rangle &= \langle V^2(\mathbf{x}) \rangle_c + \langle V(\mathbf{x}) \rangle_c^2 \\ \langle V^3(\mathbf{x}) \rangle &= \langle V^3(\mathbf{x}) \rangle_c + 3 \langle V^2(\mathbf{x}) \rangle_c \langle V(\mathbf{x}) \rangle_c + \langle V(\mathbf{x}) \rangle_c^3, \dots\end{aligned}$$

De façon générale, à l'ordre  $k$  on trouve

$$\frac{1}{k!} \langle V^k(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{k!} \langle V^k(\mathbf{x}) \rangle_c + \text{termes non connexes.}$$

Un terme non connexe est un produit de la forme

$$\langle V^{k_1}(\mathbf{x}) \rangle_c \langle V^{k_2}(\mathbf{x}) \rangle_c \dots \langle V^{k_p}(\mathbf{x}) \rangle_c, \quad k_1 + k_2 + \dots + k_p = k,$$

avec un poids  $1/k!$  venant du développement de l'exponentielle multiplié par un facteur combinatoire correspondant à toutes les façons de regrouper  $k$  objets en sous-ensembles de  $k_1 + k_2 + \dots + k_p$  objets, si tous les  $k_i$  sont distincts. On trouve

$$\frac{1}{k!} \times \frac{k!}{k_1! k_2! \dots k_p!} = \frac{1}{k_1! k_2! \dots k_p!}.$$

Si  $m$  puissances  $k_i$  sont égales, il faut diviser par un facteur combinatoire supplémentaire  $1/m!$  car le même terme a été compté  $m!$  fois.

On remarque alors que le développement perturbatif peut être réécrit

$$\mathcal{W}(\lambda) = \ln \mathcal{Z}(\lambda) = \ln \mathcal{Z}(0) + \sum_k \frac{(-\lambda)^k}{k!} \langle V^k(\mathbf{x}) \rangle_c. \quad (1.26)$$

## 1.4 Valeurs moyennes. Fonction génératrice. Cumulants

Nous calculons maintenant les valeurs moyennes de polynômes avec la distribution  $e^{-A(\mathbf{x}, \lambda)} / \mathcal{Z}(\lambda)$  où  $A(\mathbf{x}, \lambda)$  est le polynôme (1.20) :

$$A(\mathbf{x}, \lambda) = \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j + \lambda V(\mathbf{x}).$$

Les valeurs moyennes  $\langle x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_\ell} \rangle_\lambda$ , que nous appellerons aussi *fonctions à  $\ell$  points*, sont données par le rapport

$$\begin{aligned}\langle x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_\ell} \rangle_\lambda &= \mathcal{Z}^{-1}(\lambda) \mathcal{Z}_{i_1 i_2 \dots i_\ell}(\lambda), \\ \mathcal{Z}_{i_1 i_2 \dots i_\ell}(\lambda) &= \int d^n x x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_\ell} \exp[-A(\mathbf{x}, \lambda)].\end{aligned}$$

### 1.4.1 La fonction à deux points

Considérons, par exemple, la fonction à deux points  $\langle x_{i_1} x_{i_2} \rangle_\lambda$ . Il faut calculer l'intégrale

$$\mathcal{Z}_{i_1 i_2}(\lambda) = \int d^n x x_{i_1} x_{i_2} \exp[-A(\mathbf{x}, \lambda)].$$

Dans l'exemple (1.24) à l'ordre  $\lambda^2$ , nous trouvons

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_{i_1 i_2}(\lambda)/\mathcal{Z}(0) &= \Delta_{i_1 i_2} - \frac{1}{24} \lambda \Delta_{i_1 i_2} \sum_i \langle x_i^4 \rangle_0 - \frac{1}{2} \lambda \sum_i \Delta_{ii_1} \Delta_{ii} \Delta_{ii_2} \\ &+ \frac{\lambda^2}{2!(4!)^2} \sum_{ij} \Delta_{i_1 i_2} \langle x_i^4 x_j^4 \rangle_0 + \frac{\lambda^2}{2!4!} \sum_{ij} \Delta_{ii_1} \Delta_{ii} \Delta_{ii_2} \langle x_j^4 \rangle_0 \\ &+ \lambda^2 \sum_{ij} \left( \frac{1}{4} \Delta_{ii_1} \Delta_{ii_2} \Delta_{ij}^2 \Delta_{jj} + \frac{1}{6} \Delta_{i_1 i} \Delta_{j i_2} \Delta_{ij}^3 \right. \\ &\left. + \frac{1}{4} \Delta_{i_1 i} \Delta_{j i_2} \Delta_{ij} \Delta_{ii} \Delta_{jj} \right) + O(\lambda^3). \end{aligned}$$

Nous devons encore calculer le rapport

$$\langle x_{i_1} x_{i_2} \rangle_\lambda = \mathcal{Z}_{i_1 i_2}(\lambda)/\mathcal{Z}(\lambda).$$

Dans la division des deux séries, les termes non connexes disparaissent et nous trouvons

$$\begin{aligned} \langle x_{i_1} x_{i_2} \rangle_\lambda &= \Delta_{i_1 i_2} - \frac{1}{2} \lambda \sum_i \Delta_{ii_1} \Delta_{ii} \Delta_{ii_2} + \lambda^2 \sum_{ij} \left( \frac{1}{4} \Delta_{i_1 i} \Delta_{j i_2} \Delta_{ij} \Delta_{ii} \Delta_{jj} \right. \\ &\left. + \frac{1}{4} \Delta_{ii_1} \Delta_{ii_2} \Delta_{ij}^2 \Delta_{jj} + \frac{1}{6} \Delta_{i_1 i} \Delta_{j i_2} \Delta_{ij}^3 \right) + O(\lambda^3). \end{aligned} \quad (1.27)$$

En termes de diagrammes de Feynman, la contribution d'ordre  $\lambda$  est représentée par le diagramme de la figure 1.1 et les diagrammes de la figure 1.2 représentent les contributions d'ordre  $\lambda^2$ .

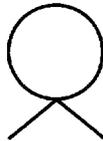


FIG. 1.1 – La fonction à deux points à l'ordre  $\lambda$ .

Nous pourrions calculer de même la fonction à quatre points, c'est-à-dire les valeurs moyennes des monômes de degré quatre. Nous trouverions un grand nombre de contributions. Mais les résultats se simplifient notablement si nous calculons directement les cumulants de la distribution. Pour cela, il est commode de définir d'abord une fonction génératrice des valeurs moyennes  $\langle x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_p} \rangle_\lambda$ .

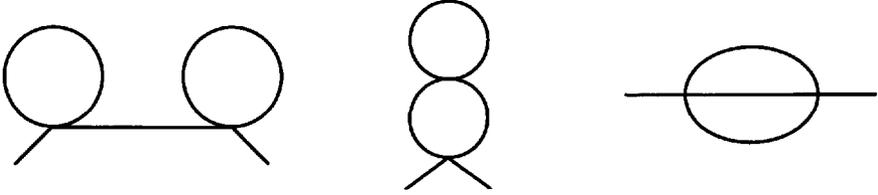


FIG. 1.2 – Contributions d'ordre  $\lambda^2$  à la fonction à deux points.

### 1.4.2 Fonctions génératrices. Cumulants

Nous généralisons la fonction (1.8) de l'exemple gaussien sous la forme

$$\mathcal{Z}(\mathbf{b}, \lambda) = \mathcal{Z}(\lambda) \langle \exp [\sum_i b_i x_i] \rangle_\lambda = \int d^n x \exp \left( -A(\mathbf{x}, \lambda) + \sum_i b_i x_i \right). \quad (1.28)$$

La fonction  $\mathcal{Z}(\mathbf{b}, \lambda)/\mathcal{Z}(\lambda)$  est la fonction génératrice des valeurs moyennes (section 1.1)

$$\langle x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_\ell} \rangle_\lambda = \mathcal{Z}^{-1}(\lambda) \left[ \frac{\partial}{\partial b_{i_1}} \frac{\partial}{\partial b_{i_2}} \dots \frac{\partial}{\partial b_{i_\ell}} \mathcal{Z}(\mathbf{b}, \lambda) \right] \Big|_{\mathbf{b}=0}. \quad (1.29)$$

Introduisons maintenant la fonction

$$\mathcal{W}(\mathbf{b}, \lambda) = \ln \mathcal{Z}(\mathbf{b}, \lambda). \quad (1.30)$$

Dans l'interprétation probabiliste,  $\mathcal{W}(\mathbf{b}, \lambda)$  est la fonction génératrice des cumulants de la distribution. Comme conséquence de l'équation (1.26), le développement perturbatif des cumulants est beaucoup plus simple puisqu'il ne contient que des contributions connexes. Notons que dans le cas gaussien  $\mathcal{W}(\mathbf{b})$  se réduit à une forme quadratique en  $\mathbf{b}$ .

*Remarque.* Dans le cadre de la physique statistique, les valeurs moyennes  $\langle x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_\ell} \rangle_\lambda$  sont appelées fonctions de corrélation à  $\ell$  points et les cumulants

$$W_{i_1 i_2 \dots i_\ell}^{(\ell)} = \left[ \frac{\partial}{\partial b_{i_1}} \frac{\partial}{\partial b_{i_2}} \dots \frac{\partial}{\partial b_{i_\ell}} \mathcal{W}(\mathbf{b}, \lambda) \right] \Big|_{\mathbf{b}=0},$$

fonctions de corrélation *connexes*.

*Exemples.* Développant la relation (1.30) en puissances de  $\mathbf{b}$ , on trouve que les fonctions à un point sont identiques

$$W_i^{(1)} = \langle x_i \rangle_\lambda.$$

Pour les fonctions à deux points, on trouve

$$W_{i_1 i_2}^{(2)} = \langle x_{i_1} x_{i_2} \rangle_\lambda - \langle x_{i_1} \rangle_\lambda \langle x_{i_2} \rangle_\lambda = \langle (x_{i_1} - \langle x_{i_1} \rangle_\lambda) (x_{i_2} - \langle x_{i_2} \rangle_\lambda) \rangle_\lambda.$$

C'est donc la fonction à deux points de la variable à laquelle sa valeur moyenne a été soustraite.

Dans le cas d'une perturbation paire  $V(\mathbf{x}) = V(-\mathbf{x})$ , comme dans l'exemple 1.24,

$$\begin{aligned} W_{i_1 i_2}^{(2)} &= \langle x_{i_1} x_{i_2} \rangle_\lambda, \\ W_{i_1 i_2 i_3 i_4}^{(4)} &= \langle x_{i_1} x_{i_2} x_{i_3} x_{i_4} \rangle_\lambda - \langle x_{i_1} x_{i_2} \rangle_\lambda \langle x_{i_3} x_{i_4} \rangle_\lambda - \langle x_{i_1} x_{i_3} \rangle_\lambda \langle x_{i_2} x_{i_4} \rangle_\lambda \\ &\quad - \langle x_{i_1} x_{i_4} \rangle_\lambda \langle x_{i_3} x_{i_2} \rangle_\lambda. \end{aligned} \quad (1.31)$$

La fonction connexe à quatre points, qui s'annule exactement pour une mesure gaussienne, donne une première évaluation de l'écart à la mesure gaussienne.

Dans l'exemple 1.24, on trouve alors à l'ordre  $\lambda^2$  :

$$\begin{aligned} W_{i_1 i_2 i_3 i_4}^{(4)} &= -\lambda \sum_i \Delta_{i_1 i} \Delta_{i_2 i} \Delta_{i_3 i} \Delta_{i_4 i} + \frac{1}{2} \lambda^2 \sum_{ij} \Delta_{i_1 i} \Delta_{i_2 i} \Delta_{i_3 j} \Delta_{i_4 j} \Delta_{ij}^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \lambda^2 \sum_{ij} \Delta_{i_1 i} \Delta_{i_3 i} \Delta_{i_2 j} \Delta_{i_4 j} \Delta_{ij}^2 + \frac{1}{2} \lambda^2 \sum_{ij} \Delta_{i_1 i} \Delta_{i_4 i} \Delta_{i_3 j} \Delta_{i_2 j} \Delta_{ij}^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \lambda^2 \sum_{ij} (\Delta_{ii} \Delta_{ij} \Delta_{i_1 i} \Delta_{i_2 j} \Delta_{i_3 j} \Delta_{i_4 j} + 3 \text{ termes}) + O(\lambda^3). \end{aligned} \quad (1.32)$$

## 1.5 Méthode du col

Pour évaluer des intégrales de contour dans le domaine complexe, on peut parfois utiliser la méthode du col, qui réduit leur évaluation à une somme (infinie) d'intégrales gaussiennes.

Nous décrirons d'abord la méthode dans le cas d'une intégrale réelle puis complexe. Nous généraliserons ensuite à un nombre quelconque de variables.

### 1.5.1 Intégrale réelle

Considérons l'intégrale

$$\mathcal{I}(\lambda) = \int_a^b dx e^{-A(x)/\lambda}, \quad (1.33)$$

où la fonction  $A(x)$  est une fonction réelle, analytique dans un voisinage du segment  $(a, b)$ , et  $\lambda$  un paramètre positif. Nous voulons évaluer cette intégrale dans la limite  $\lambda \rightarrow 0_+$ . Dans cette limite, l'intégrale est dominée par les maxima de l'intégrand et donc les minima de  $A(x)$ . Deux cas peuvent se présenter.

(i) Le minimum de  $A(x)$  correspond à un bord du domaine d'intégration. On développe alors  $A(x)$  au voisinage du minimum et on intègre. Ce n'est pas le cas qui nous intéresse ici.

(ii) La fonction  $A(x)$  a un ou plusieurs minima sur l'intervalle  $(a, b)$ . Les minima correspondent à des points  $x^c$  caractérisés par

$$A'(x^c) = 0,$$

où génériquement  $A''(x^c) > 0$  (les cas où  $A''(x^c) = 0$  exigent une analyse séparée). Pour des raisons qui apparaîtront plus tard, ces points sont appelés des cols (*cf.* exemple (ii)). S'il y a plusieurs solutions, la contribution dominante sera donnée par le minimum absolu de  $A(x)$ .

Par ailleurs, si nous négligeons des corrections d'ordre  $\exp[-\text{const.}/\lambda]$ , nous pouvons restreindre l'intégration à un voisinage fini  $(x^c - \varepsilon, x^c + \varepsilon)$  de  $x^c$ , mais avec  $\varepsilon$  arbitrairement petit. En effet, les contributions hors de cet intervalle sont bornées par

$$(b - a) e^{-A''(x^c)\varepsilon^2/2\lambda},$$

où nous avons utilisé la propriété  $\varepsilon \ll 1$  de sorte que

$$A(x) - A(x^c) \sim \frac{1}{2}A''(x^c)(x - x^c)^2.$$

Plus précisément, le domaine qui contribue est d'ordre  $\sqrt{\lambda}$ . Il est donc commode de changer de variables,  $x \mapsto y$  :

$$y = (x - x^c)/\sqrt{\lambda}.$$

Le développement de la fonction  $A$  s'écrit alors

$$A/\lambda = A(x^c)/\lambda + \frac{1}{2}y^2A''(x^c) + \frac{1}{6}\sqrt{\lambda}A'''(x^c)y^3 + \frac{1}{24}\lambda A^{(4)}(x^c)y^4 + O(\lambda^{3/2}).$$

On voit qu'à l'ordre dominant il suffit de garder le terme quadratique. À cause du caractère négligeable des contributions loin du col, on peut alors intégrer sur  $[-\infty, +\infty]$ . On est ramené à une intégrale gaussienne :

$$\mathcal{I}(\lambda) \sim \sqrt{2\pi\lambda/A''(x^c)} e^{-A(x^c)/\lambda}. \quad (1.34)$$

Pour calculer les corrections d'ordre supérieur, on développe l'exponentielle en puissance de  $\lambda$  et on intègre terme à terme. Par exemple à l'ordre suivant

$$\mathcal{I}(\lambda) = \sqrt{2\pi\lambda/A''(x^c)} e^{-A(x^c)/\lambda} \left[ 1 + \frac{1}{24}\lambda \left( 5\frac{A'''^2}{A''^3} - 3\frac{A^{(4)}}{A''^2} \right) + O(\lambda^2) \right].$$

*Exemples.*

(i) Un exemple classique est l'évaluation asymptotique de la fonction

$$\Gamma(s) = \int_0^\infty dx x^{s-1} e^{-x},$$

pour  $s \rightarrow +\infty$ . L'intégrale n'a pas telle quelle la forme canonique (1.33) mais un changement de variable linéaire la lui donne :  $x = (s-1)x'$ , et on pose  $s-1 = 1/\lambda$ . Alors

$$\Gamma(s) = (s-1)^{s-1} \int_0^\infty dx e^{-(x-\ln x)/\lambda}$$

et donc  $A(x) = x - \ln x$ . La position du col est donnée par

$$A'(x) = 1 - 1/x = 0 \Rightarrow x^c = 1.$$

La dérivée seconde au col est  $A''(x^c) = 1$ . Le résultat à l'ordre dominant est donc

$$\Gamma(s) \underset{s \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{2\pi} (s-1)^{s-1/2} e^{1-s} \sim \sqrt{2\pi} s^{s-1/2} e^{-s}, \quad (1.35)$$

une évaluation aussi appelée formule de Stirling. Notons que grâce à la méthode du col complexe que nous expliquons maintenant, ce résultat s'étend à  $s$  complexe avec  $|\arg s| < \pi$ .

(ii) Évaluons la fonction de Bessel modifiée

$$I_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{x \cos \theta},$$

(=  $J_0(ix)$ ) pour  $x \rightarrow +\infty$  (la fonction est paire).

Cette intégrale a la forme canonique pour l'application de la méthode du col ( $x = 1/\lambda$ ), et l'intégrand est une fonction entière.

Les cols sont donnés par

$$\sin \theta = 0 \Rightarrow \theta = 0 \pmod{\pi}.$$

Pour  $x \rightarrow +\infty$  le col dominant est  $\theta = 0$ . Nous développons au voisinage du col

$$x \cos \theta = x - \frac{1}{2}x\theta^2 + \frac{1}{24}x\theta^4 + O(\theta^6).$$

La région contribuant à l'intégrale est d'ordre  $\theta = O(1/\sqrt{x})$ . Donc

$$\begin{aligned} I_0(x) &= \frac{1}{2\pi} e^x \int_{-\infty}^{\infty} d\theta e^{-x\theta^2/2} \left(1 + \frac{1}{24}x\theta^4\right) + O(e^x/x^2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi x}} e^x \left(1 + \frac{1}{8x} + O\left(\frac{1}{x^2}\right)\right). \end{aligned}$$

Justifions, sur cet exemple, l'appellation *méthode du col*. Pour cela il faut examiner la fonction  $\cos \theta$ , qui apparaît dans l'intégrand, dans le plan complexe au voisinage du col  $\theta = 0$ . Les courbes de module constant de l'intégrand sont les courbes  $\operatorname{Re} \cos \theta$  constant. Nous notons que ces courbes se croisent au col (cf. figure 1.3) et le module de l'intégrand a donc une structure de col au sens géographique.

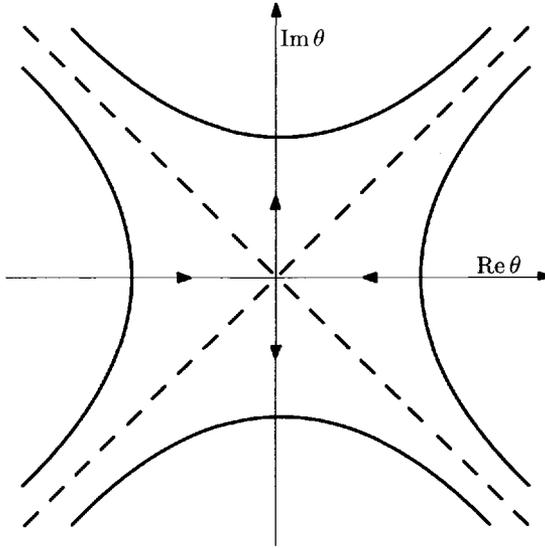


FIG. 1.3 – Fonction  $I_0$  : courbes de niveaux du module de l'intégrand dans le voisinage du col  $\theta = 0$ .

## 1.5.2 Intégrale de contour complexe

Considérons l'intégrale

$$\mathcal{I}(\lambda) = \oint_C dx e^{-A(x)/\lambda}, \quad (1.36)$$

où la fonction  $A(x)$  est une fonction analytique de la variable complexe  $x$  et  $\lambda$  un paramètre réel positif. Le contour  $C$  va du point  $a$  au point  $b$  du plan complexe, et est contenu dans le domaine d'holomorphic de  $A$ . Comme cas limite, on peut considérer la situation où les points  $a$  et  $b$  s'éloignent à l'infini dans le plan complexe.

On veut évaluer l'intégrale pour  $\lambda \rightarrow 0_+$ . On pourrait penser *a priori* que l'intégrale est alors dominée par les points où le module de l'intégrand est maximum et donc la partie réelle de  $A(x)$  est minimum. Cependant la contribution du voisinage de tels points peut se compenser parce que la phase varie rapidement (un argument qui conduit à la méthode de la phase stationnaire).

La méthode du col consiste à déformer le contour  $C$  de toutes les manières possibles dans le domaine d'holomorphic de  $A$  (sans évidemment franchir de singularité ce qui changerait la valeur de l'intégrale) de façon à ce que le module maximum de l'intégrand soit minimum, c'est-à-dire que le minimum de  $\operatorname{Re} A(x)$  sur le contour soit maximum.

S'il est possible de déformer le contour  $C$  en un contour équivalent sur lequel  $\operatorname{Re} A(x)$  est monotone, alors l'intégrale est dominée par une des

extrémités du contour. Dans le cas contraire la partie réelle passe par un minimum. Sur le contour optimal le minimum ne peut être dû qu'à une singularité de la fonction ou enfin, et c'est la situation qui nous intéresse ici, à un point régulier où la dérivée de  $A$  s'annule :

$$A'(x) = 0.$$

Un tel point  $x^c$  est un *col* au sens des courbes de niveaux de  $\operatorname{Re} A(x)$  (figure 1.3). La structure de l'intégrand se comprend mieux si l'on se souvient que les courbes  $\operatorname{Re} A$  et  $\operatorname{Im} A$  constant forment deux ensembles de courbes bi-orthogonales. Les seuls points doubles de ces courbes sont des singularités ou des cols. En effet développons la fonction au voisinage de  $x^c$  :

$$A(x) - A(x^c) \sim \frac{1}{2} A''(x^c) (x - x^c)^2 \Rightarrow \operatorname{Re}[A(x) - A(x^c)] \sim \frac{1}{2} |A''(x^c)| (u^2 - v^2),$$

où les coordonnées réelles  $u, v$  sont définies par

$$u + iv = (x - x^c) e^{i \operatorname{Arg} A''(x^c)/2}.$$

Au voisinage du col, on peut choisir le contour déformé pour qu'il suive une courbe  $\operatorname{Im} A$  constant, et donc la phase de l'intégrand reste constante. Il n'y a plus de compensations. L'intégrale est dominée, à des contributions plus petites que toute puissance de  $\lambda$  près, par le voisinage du col. Le reste de l'argument et du calcul sont les mêmes que dans le cas réel précédent.

*Exemple.* Considérons la représentation intégrale de la fonction de Bessel

$$J_0(x) = \frac{1}{2i\pi} \oint_C \frac{dz}{z} e^{x(z-1/z)/2},$$

où le contour  $C$  est un contour fermé simple contenant l'origine à son intérieur et parcouru dans le sens positif. Évaluons par la méthode du col l'intégrale pour  $x$  réel tendant vers  $+\infty$ .

Posons

$$A(z) = (1/z - z)/2.$$

L'équation des cols est

$$2A'(z) = -\frac{1}{z^2} - 1 = 0 \Rightarrow z = \pm i.$$

Les deux cols contribuent. Pour le col  $z = i$  posons  $z = i + e^{3i\pi/4} s$ . Alors

$$A(z) = -i + s^2/2 + O(s^3).$$

La contribution du col est

$$\frac{1}{2\pi} e^{ix - i\pi/4} \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{-xs^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi x}} e^{ix - i\pi/4}.$$

Le deuxième col donne le conjugué complexe. On trouve alors

$$J_0(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos(x - \pi/4).$$

## 1.6 Méthode du col à plusieurs variables. Application aux fonctions génératrices

Considérons l'intégrale générale sur  $n$  variables

$$\mathcal{I}(\lambda) = \int d^n x \exp \left[ -\frac{1}{\lambda} A(x_1, \dots, x_n) \right], \quad (1.37)$$

où pour simplifier nous supposons la fonction  $A$  entière et l'intégrale porte sur tout  $\mathbb{R}^n$ .

Dans la limite  $\lambda \rightarrow 0$ , l'intégrale est dominée par les cols solutions de :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} A(x_1^c, x_2^c, \dots, x_n^c) = 0 \quad \forall i. \quad (1.38)$$

Dans le cas où il existe plusieurs cols, il faut classer les cols par la valeur de  $\text{Re } A$ . Le col dominant sera souvent celui qui correspond à  $\text{Re } A$  minimum. Toutefois, tous les cols ne contribuent pas nécessairement et il faut procéder par déformation du domaine d'intégration initial. Dans le cas de plusieurs variables, il peut ne pas être simple de reconnaître quels cols contribuent.

Pour calculer la contribution dominante du col  $\mathbf{x}^c$ , nous changeons de variables, posant

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}^c + \mathbf{y}\sqrt{\lambda}. \quad (1.39)$$

Nous développons alors  $A(\mathbf{x})$  en puissances de  $\lambda$  (et donc de  $\mathbf{y}$ ) :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} A(x_1, \dots, x_n) &= \frac{1}{\lambda} A(\mathbf{x}^c) + \frac{1}{2!} \sum_{ij} \frac{\partial^2 A(\mathbf{x}^c)}{\partial x_i \partial x_j} y_i y_j \\ &+ \sum_{k=3}^{\infty} \frac{\lambda^{k/2-1}}{k!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_k} \frac{\partial^k A(\mathbf{x}^c)}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_k}} y_{i_1} \dots y_{i_k}. \end{aligned} \quad (1.40)$$

Après le changement de variables, le terme quadratique en  $\mathbf{y}$  est indépendant de  $\lambda$ . L'intégrale devient

$$\mathcal{I}(\lambda) = \lambda^{n/2} e^{-A(\mathbf{x}^c)/\lambda} \int d^n y \exp \left[ -\frac{1}{2!} \sum_{ij} \frac{\partial^2 A(\mathbf{x}^c)}{\partial x_i \partial x_j} y_i y_j - R(\mathbf{y}) \right] \quad (1.41)$$

$$R(\mathbf{y}) = \sum_{k=3}^{\infty} \frac{\lambda^{k/2-1}}{k!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_k} \frac{\partial^k A(\mathbf{x}^c)}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_k}} y_{i_1} \dots y_{i_k}. \quad (1.42)$$

Nous développons alors l'intégrand en puissances de  $\sqrt{\lambda}$  : à chaque ordre le calcul est ramené à une moyenne gaussienne de polynômes. À l'ordre dominant on trouve

$$\mathcal{I}(\lambda) \underset{\lambda \rightarrow 0}{\sim} (2\pi\lambda)^{n/2} \left[ \det \mathbf{A}^{(2)} \right]^{-1/2} e^{-A(\mathbf{x}^c)/\lambda}, \quad (1.43)$$

où  $\mathbf{A}^{(2)}$  est la matrice des dérivées partielles secondes :

$$[\mathbf{A}^{(2)}]_{ij} \equiv \frac{\partial^2 A(\mathbf{x}^c)}{\partial x_i \partial x_j}.$$

### 1.6.1 Fonction génératrice et méthode du col

Nous introduisons la fonction génératrice des valeurs moyennes (1.28)

$$\mathcal{Z}(\mathbf{b}) = \int d^n x e^{-A(\mathbf{x}) + \sum_i b_i x_i}, \quad (1.44)$$

où  $A(\mathbf{x})$  est maintenant une fonction régulière des  $x_i$ . Définissons

$$\mathcal{N} = 1/\mathcal{Z}(0).$$

Les valeurs moyennes de polynômes avec le poids  $e^{-A(\mathbf{x})}$ ,

$$\langle x_{k_1} x_{k_2} \dots x_{k_\ell} \rangle \equiv \mathcal{N} \int d^n x x_{k_1} x_{k_2} \dots x_{k_\ell} e^{-A(\mathbf{x})}, \quad (1.45)$$

peuvent être obtenues à partir de dérivées de  $\mathcal{Z}$  (cf. équation (1.29)) :

$$\langle x_{k_1} x_{k_2} \dots x_{k_\ell} \rangle = \mathcal{N} \left[ \frac{\partial}{\partial b_{k_1}} \frac{\partial}{\partial b_{k_2}} \dots \frac{\partial}{\partial b_{k_\ell}} \mathcal{Z}(\mathbf{b}) \right] \Big|_{\mathbf{b}=0}.$$

*Méthode du col.* Calculons les contributions des deux premiers ordres de la méthode du col à l'intégrale (1.44). L'équation du col est

$$b_i = \frac{\partial A}{\partial x_i}.$$

Nous développons  $A(\mathbf{x})$  autour du col  $\mathbf{x}^c$  comme expliqué en section 1.5 et utilisons le résultat (1.43). Introduisons maintenant  $\mathcal{W}(\mathbf{b})$ , la fonction génératrice des cumulants de la distribution qui sont aussi les fonctions de corrélation connexes (équation (1.30)) :

$$\mathcal{W}(\mathbf{b}) = \ln \mathcal{Z}(\mathbf{b}).$$

Utilisant le résultat (1.43) et l'identité (1.52) :  $\ln \det \mathbf{M} = \text{tr} \ln \mathbf{M}$ , valable pour toute matrice  $\mathbf{M}$ , nous trouvons

$$\mathcal{W}(\mathbf{b}) = -A(\mathbf{x}_c) + \sum_i b_i x_i - \frac{1}{2} \text{tr} \ln \frac{\partial^2 A(\mathbf{x}^c)}{\partial x_i \partial x_j}, \quad (1.46a)$$

$$b_i = \frac{\partial A(\mathbf{x}_c)}{\partial x_i}. \quad (1.46b)$$

Les dérivées successives par rapport à  $\mathbf{b}$  (se rappelant que  $\mathbf{x}_c$  est une fonction de  $\mathbf{b}$  à travers l'équation (1.46b)) calculées à  $\mathbf{b} = 0$  sont les fonctions de corrélation connexes.

## 1.7 Techniques algébriques fonctionnelles

Dans la discussion des propriétés algébriques des fonctions de corrélation les concepts de fonctionnelle génératrice, généralisation de la fonction génératrice introduite en section 1.1, et de dérivée fonctionnelle sont extrêmement utiles.

### 1.7.1 Fonctionnelle génératrice. Dérivée fonctionnelle

Soit  $\{F^{(n)}(x_1, \dots, x_n)\}$ ,  $n = 0, 1, \dots$ , une suite de fonctions *symétriques* de leurs arguments. Nous introduisons une nouvelle fonction d'une variable  $f(x)$  et considérons la série formelle en  $f$  suivante :

$$\mathcal{F}(f) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dx_1 \dots dx_n F^{(n)}(x_1, \dots, x_n) f(x_1) \dots f(x_n). \quad (1.47)$$

On appelle  $\mathcal{F}(f)$  la fonctionnelle génératrice de la suite de fonctions  $F^{(n)}$ .

En fait, nous admettrons plus généralement pour les  $F^{(n)}$  des distributions. Dans ce cas, la fonction  $f(x)$  doit appartenir à la classe des fonctions test correspondante et donc être considérée implicitement comme continue ou même indéfiniment différentiable.

Par la suite, nous aurons à calculer des fonctions de corrélation du type

$$Z^{(n)}(t_1, \dots, t_n) = \langle q(t_1) \dots q(t_n) \rangle,$$

où  $q(t)$  est la position d'une particule au temps  $t$  dans un processus aléatoire et  $\langle \bullet \rangle$  veut dire valeur moyenne. On pourra alors introduire la fonction génératrice de fonctions de corrélation

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(f) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dt_1 \dots dt_n Z^{(n)}(t_1, \dots, t_n) f(t_1) \dots f(t_n) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dt_1 \dots dt_n \langle q(t_1) \dots q(t_n) \rangle f(t_1) \dots f(t_n) \\ &= \left\langle \exp \left[ \int dt q(t) f(t) \right] \right\rangle. \end{aligned} \quad (1.48)$$

*Dérivée fonctionnelle.* Pour calculer une fonction  $F^{(n)}$  à partir de  $\mathcal{F}(f)$ , nous avons alors besoin du concept de *dérivée fonctionnelle*  $\delta/\delta f(x)$ . La dérivée fonctionnelle est définie par les propriétés qu'elle satisfait aux règles algébriques habituelles de toute dérivation :

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta f(x)} [\mathcal{F}_1(f) + \mathcal{F}_2(f)] &= \frac{\delta}{\delta f(x)} \mathcal{F}_1(f) + \frac{\delta}{\delta f(x)} \mathcal{F}_2(f), \\ \frac{\delta}{\delta f(x)} [\mathcal{F}_1(f) \mathcal{F}_2(f)] &= \mathcal{F}_1(f) \frac{\delta}{\delta f(x)} \mathcal{F}_2(f) + \mathcal{F}_2(f) \frac{\delta}{\delta f(x)} \mathcal{F}_1(f) \end{aligned} \quad (1.49)$$

et de plus

$$\frac{\delta}{\delta f(y)} f(x) = \delta(x - y), \quad (1.50)$$

où  $\delta(x)$  est la fonction (plus exactement distribution)  $\delta$  de Dirac.

La dérivée de  $\mathcal{F}(f)$ , par exemple, est

$$\frac{\delta}{\delta f(y)} \mathcal{F}(f) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dx_1 \dots dx_n F^{(n+1)}(y, x_1, \dots, x_n) f(x_1) \dots f(x_n). \quad (1.51)$$

Si l'on dérive maintenant  $p$  fois et si l'on prend la limite  $f \equiv 0$ , on trouve

$$F^{(p)}(x_1, \dots, x_p) = \left\{ \left( \prod_{i=1}^p \frac{\delta}{\delta f(x_i)} \right) \mathcal{F} \right\} \Big|_{f=0}.$$

*Remarque.* Ce formalisme s'applique aussi lorsque les  $F^{(n)}$  ne sont pas des fonctions au sens strict mais des distributions. Par exemple

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta f(y)} \frac{df(x)}{dx} &= \frac{\delta}{\delta f(y)} \frac{d}{dx} \int dz \delta(x - z) f(z) \\ &= \frac{d}{dx} \delta(x - y). \end{aligned}$$

Ainsi il est possible d'obtenir les équations du mouvement classique associées à un lagrangien, en annulant la dérivée fonctionnelle de l'action. Considérons, par exemple, l'action

$$\mathcal{S}(q) = \int dt \left[ \frac{1}{2} (\dot{q}(t))^2 - V(q(t)) \right].$$

Sa dérivée fonctionnelle est

$$\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta q(\tau)} = \int dt \left[ \dot{q}(t) \frac{d}{dt} \delta(t - \tau) - V'(q) \delta(t - \tau) \right] = -\ddot{q}(\tau) - V'(q(\tau)).$$

L'équation  $\delta \mathcal{S} / \delta q(\tau) = 0$  est donc l'équation du mouvement.

## 1.7.2 Déterminants d'opérateurs

Parfois nous aurons à calculer le déterminant d'un opérateur qui, si nécessaire après quelques transformations, peut être ramené au calcul du déterminant d'un opérateur de la forme  $\mathbf{M} = \mathbf{1} + \mathbf{K}$ . À condition que les traces de toutes puissances de  $\mathbf{K}$  existent, l'identité suivante, valable pour toute matrice  $\mathbf{M}$ ,

$$\ln \det \mathbf{M} \equiv \text{tr} \ln \mathbf{M}, \quad (1.52)$$

développée en puissance du noyau  $\mathbf{K}$  :

$$\ln \det [\mathbf{1} + \mathbf{K}] = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^{p+1}}{p} \operatorname{tr} \mathbf{K}^p, \quad (1.53)$$

peut se révéler utile. Dans le cas où les opérateurs  $\mathbf{M}$  et donc  $\mathbf{K}$  sont représentés par des noyaux  $M(x, y) = \delta(x - y) + K(x, y)$ , les traces successives s'écrivent explicitement

$$\operatorname{tr} \mathbf{K}^p = \int dx_1 \cdots dx_p K(x_1, x_2) K(x_2, x_3) \cdots K(x_p, x_1).$$

*Remarque.* Le déterminant d'une matrice de taille finie  $n \times n$ , de la forme  $\mathbf{1} + \lambda \mathbf{K}$  est un polynôme en  $\lambda$  de degré  $n$ . Si on le calcule par l'identité précédente, on trouve une série infinie. Expriment que tous les termes à partir de l'ordre  $n + 1$  s'annulent, on trouve des identités entre les traces des puissances de la matrice  $\mathbf{K}$ .

*Une application.* Soit  $H_0$  un hamiltonien quantique avec un spectre discret de valeurs propres  $E_n^{(0)}$  et vecteurs propres  $|n\rangle$ . Considérons l'hamiltonien perturbé  $H = H_0 + V$ . Nous allons calculer le spectre de  $H$  au second ordre dans la perturbation  $V$  en utilisant le développement précédent. Nous posons

$$G_0(E) = \frac{1}{H_0 - E}.$$

Nous partons de l'identité

$$\begin{aligned} \ln \det[(H - E)(H_0 - E)^{-1}] &= \operatorname{tr} \ln(1 + G_0(E)V) \\ &= \sum_{n=0} \ln \left( \frac{E_n - E}{E_n^{(0)} - E} \right). \end{aligned}$$

Nous développons maintenant les deux expressions en puissances de  $V$ . Au premier ordre

$$\begin{aligned} E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} \Rightarrow \ln \left( \frac{E_n - E}{E_n^{(0)} - E} \right) &= \frac{E_n^{(1)}}{E_n^{(0)} - E}, \\ \operatorname{tr} \ln(1 + G_0(E)V) &= \operatorname{tr} G_0(E)V = \sum_n \frac{\langle n|V|n\rangle}{E_n^{(0)} - E} \end{aligned}$$

Identifiant les résidus des pôles à  $E = E_n^{(0)}$ , nous concluons

$$E_n^{(1)} = \langle n|V|n\rangle.$$

Au second ordre nous posons

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}.$$

Par ailleurs,

$$\begin{aligned} \operatorname{tr} \ln(1 + G_0(E)V) &= \operatorname{tr} G_0V - \frac{1}{2} \operatorname{tr}(G_0V)^2 \\ &= \sum_n \frac{\langle n|V|n\rangle}{E_n^{(0)} - E} - \frac{1}{2} \sum_{m,n} \frac{|\langle n|V|m\rangle|^2}{(E_m^{(0)} - E)(E_n^{(0)} - E)}. \end{aligned}$$

Cette expression doit être comparée à

$$\sum_n \ln \left( \frac{E_n - E}{E_n^{(0)} - E} \right) = \sum_n \frac{E_n^{(1)}}{E_n^{(0)} - E} + \sum_n \frac{E_n^{(2)}}{E_n^{(0)} - E} - \frac{1}{2} \left( \frac{E_n^{(1)}}{E_n^{(0)} - E} \right)^2.$$

On remarque que les pôles doubles se compensent entre les deux membres. De nouveau on identifie les résidus des pôles simples. On substitue

$$\frac{1}{(E_m^{(0)} - E)(E_n^{(0)} - E)} = \frac{1}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \left( \frac{1}{E_n^{(0)} - E} - \frac{1}{E_m^{(0)} - E} \right).$$

On en déduit le résultat classique de la théorie des perturbations au second ordre :

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n|V|m\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

## 1.8 Intégrale gaussienne : matrices complexes

En section 1.2, nous n'avons démontré le résultat général (1.5) que dans le cas de matrices réelles. Nous étendons ici la démonstration à des matrices complexes.

La démonstration par diagonalisation, utilisée dans le cas des matrices réelles, peut se généraliser au cas complexe. Toute matrice complexe symétrique  $\mathbf{A}$  peut en effet se mettre sous la forme

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^T, \quad (1.54)$$

où la matrice  $\mathbf{U}$  est unitaire et la matrice  $\mathbf{D}$  diagonale positive. Dans l'intégrale (1.4), nous changeons alors de variables  $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{y}$  :

$$x_i = \sum_{j=1}^n U_{ij} y_j.$$

Ce changement de variables est une généralisation complexe de la transformation orthogonale (1.7). L'intégrale (1.4) se factorise alors et le résultat est le produit de l'intégrale par le jacobien (ici non trivial) du changement de variables. Donc

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = (2\pi)^{n/2} (\det \mathbf{D})^{-1/2} / \det \mathbf{U}.$$

Mais par ailleurs

$$\det \mathbf{A} = \det \mathbf{D}(\det \mathbf{U})^2.$$

Nous en déduisons le résultat (1.5).

*Représentation de matrices complexes.* L'existence de la représentation (1.54) n'est peut être pas universellement connue; comme un exercice nous en rapelons la démonstration.

(i) *Décomposition polaire.* Toute matrice complexe  $\mathbf{M}$  a une décomposition « polaire » :

$$\mathbf{M} = \mathbf{U}\mathbf{H}, \quad \text{avec} \quad \mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{1}, \quad \mathbf{H} = \mathbf{H}^\dagger. \quad (1.55)$$

Si la matrice n'a pas de valeur propre nulle, la preuve est simple. La représentation (1.55) implique une relation entre matrices hermitiennes :

$$\mathbf{M}^\dagger\mathbf{M} = \mathbf{H}^2.$$

On choisit pour  $\mathbf{H}$  la matrice  $(\mathbf{M}^\dagger\mathbf{M})^{1/2}$  avec valeurs propres positives. On vérifie alors immédiatement que la matrice  $\mathbf{U} = \mathbf{M}\mathbf{H}^{-1}$  est unitaire :

$$\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{1}.$$

Cette décomposition en implique une autre équivalente. Une matrice hermitienne peut être diagonalisée par une transformation unitaire, et donc nous pouvons écrire

$$\mathbf{H} = \mathbf{V}^\dagger\mathbf{D}\mathbf{V}, \quad \mathbf{V}^\dagger\mathbf{V} = \mathbf{1},$$

et  $D_{ij} = h_i\delta_{ij}$ ,  $h_i > 0$ . Ceci implique

$$\mathbf{M} = \mathbf{U}\mathbf{V}^\dagger\mathbf{D}\mathbf{V},$$

ou dans une notation plus simple

$$\mathbf{M} = \mathbf{U}_2^\dagger\mathbf{D}\mathbf{U}_1, \quad (1.56)$$

où  $\mathbf{U}_1$  et  $\mathbf{U}_2$  sont deux matrices unitaires.

(ii) *Matrices unitaires symétriques.* Nous allons maintenant démontrer une représentation des matrices unitaires symétriques. Soit une matrice  $\mathbf{U}$  satisfaisant

$$\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{1}, \quad \mathbf{U} = \mathbf{U}^T.$$

Nous décomposons  $\mathbf{U}$  en partie réelle et imaginaire :

$$\mathbf{U} = \mathbf{X} + i\mathbf{Y}.$$

Les matrices  $\mathbf{X}$  et  $\mathbf{Y}$  sont deux matrices symétriques réelles qui satisfont, comme conséquence de la relation d'unitarité,

$$\mathbf{X}^2 + \mathbf{Y}^2 = \mathbf{1} \quad \mathbf{X}\mathbf{Y} - \mathbf{Y}\mathbf{X} = 0.$$

Deux matrices symétriques réelles qui commutent peuvent être diagonalisées simultanément. Les valeurs propres correspondantes (qui sont réelles)  $\{x_i, y_i\}$  satisfont

$$x_i^2 + y_i^2 = 1,$$

que nous paramétrons comme

$$x_i = r_i \cos \theta_i, \quad y_i = r_i \sin \theta_i.$$

Appelant  $\mathbf{O}$  la matrice orthogonale commune qui diagonalise  $\mathbf{X}$  et  $\mathbf{Y}$ , et donc  $\mathbf{U}$ , nous trouvons

$$\mathbf{U} = \mathbf{O}^T \mathbf{R} \mathbf{W} \mathbf{O}$$

avec

$$W_{ij} = e^{i\theta_i} \delta_{ij}, \quad R_{ij} = r_i \delta_{ij}.$$

Nous pouvons aussi poser

$$V_{ij} = e^{i\theta_i/2} O_{ij} \Leftrightarrow \mathbf{V} = \mathbf{W}^{1/2} \mathbf{O},$$

et trouvons

$$\mathbf{U} = \mathbf{V}^T \mathbf{R} \mathbf{V}, \quad \mathbf{R} \text{ diagonale } > 0, \quad \mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{1}. \quad (1.57)$$

Nous allons généraliser cette représentation aux matrices symétriques complexes quelconques.

(iii) *Matrices complexes symétriques.* Nous considérons maintenant des matrices complexes symétriques quelconques :

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}^T.$$

La représentation (1.56) doit alors satisfaire

$$\mathbf{U}_2^\dagger \mathbf{D} \mathbf{U}_1 = \mathbf{U}_1^T \mathbf{D} \mathbf{U}_2^*,$$

où \* signifie conjugué complexe. Introduisant la matrice unitaire

$$\mathbf{W} = \mathbf{U}_2 \mathbf{U}_1^T,$$

nous en déduisons la contrainte

$$\mathbf{D} = \mathbf{W} \mathbf{D} \mathbf{W}^* \Leftrightarrow \mathbf{D} = \mathbf{W}^T \mathbf{D} \mathbf{W}^\dagger.$$

Nous multiplions le membre de droite de la deuxième équation par le membre de droite de la première (dans cet ordre). Nous trouvons

$$\mathbf{D}^2 = \mathbf{W}^T \mathbf{D}^2 \mathbf{W}^* \Leftrightarrow \mathbf{D}^2 = \mathbf{W}^\dagger \mathbf{D}^2 \mathbf{W} \Leftrightarrow [\mathbf{W}, \mathbf{D}^2] = 0.$$

La dernière forme de l'équation en termes des composantes s'écrit

$$(h_i^2 - h_j^2) W_{ij} = 0,$$

(sans sommation sur les indices), et donc

$$W_{ij} = 0 \quad \text{pour } h_i \neq h_j.$$

Supposons d'abord que toutes les valeurs propres de  $\mathbf{D}$  sont simples. Alors  $\mathbf{W}$  est une matrice unitaire diagonale :

$$W_{ij} = e^{i\theta_i} \delta_{ij}.$$

Introduisons ce résultat dans la représentation (1.56), éliminant  $\mathbf{U}_2$  au profit de  $\mathbf{W}$ , nous trouvons

$$\mathbf{M} = \mathbf{U}_1^T \mathbf{W}^* \mathbf{D} \mathbf{U}_1.$$

Posant finalement

$$\mathbf{U}_0 = [\mathbf{W}^{1/2}]^* \mathbf{U}_1,$$

nous trouvons la représentation d'une matrice symétrique complexe en fonction d'une matrice diagonale positive  $\mathbf{D}$  et d'une matrice unitaire  $\mathbf{U}_0$  :

$$\mathbf{M} = \mathbf{U}_0^T \mathbf{D} \mathbf{U}_0. \quad (1.58)$$

Si  $\mathbf{D}$  a une valeur propre multiple, d'après (1.56) dans le sous-espace correspondant, la matrice  $\mathbf{M}$  est proportionnelle à une matrice unitaire symétrique. Nous utilisons alors le résultat (1.57) et montrons que la décomposition (1.58) est générale.

## Exercices

### Exercice 1.1.

Soient deux variables aléatoires  $x, y$  corrélées dont on suppose la loi de probabilité gaussienne. On trouve les cinq valeurs moyennes suivantes

$$\langle x \rangle = \langle y \rangle = 0, \quad \langle x^2 \rangle = 5, \quad \langle xy \rangle = 3, \quad \langle y^2 \rangle = 2.$$

En déduire les valeurs moyennes  $\langle x^4 \rangle, \langle x^3 y \rangle, \langle x^2 y^2 \rangle, \langle xy^5 \rangle, \langle y^6 \rangle, \langle x^3 y^3 \rangle$  (on utilisera le théorème de Wick).

Quelle est la distribution gaussienne qui conduit à ces valeurs ?

*Solution.*

$$75, 45, 28, 180, 120, 432.$$

La distribution gaussienne est

$$e^{-(x^2 - 3xy + 5y^2)/2}.$$

*Exercice 1.2.*

Soient trois variables aléatoires  $x, y, z$  corrélées dont on suppose la loi de probabilité gaussienne. On trouve les neuf valeurs moyennes suivantes

$$\begin{aligned}\langle x \rangle = \langle y \rangle = \langle z \rangle = 0, \quad \langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle = a, \\ \langle xy \rangle = b, \quad \langle xz \rangle = \langle zy \rangle = c.\end{aligned}$$

En déduire en fonction de  $a, b, c$  les valeurs moyennes  $\langle x^4 \rangle$ ,  $\langle x^6 \rangle$ ,  $\langle x^3 y \rangle$ ,  $\langle x^2 y^2 \rangle$ ,  $\langle x^2 y z \rangle$ .

Quelle est pour  $a = 2, b = 1, c = 0$  la distribution gaussienne qui conduit à ces valeurs ?

*Solution.*

$$\begin{aligned}\langle x^4 \rangle = 3a^2, \quad \langle x^6 \rangle = 15a^3, \quad \langle x^3 y \rangle = 3ab, \quad \langle x^2 y^2 \rangle = a^2 + 2b^2, \\ \langle x^2 y z \rangle = ac + 2bc.\end{aligned}$$

Pour  $a = 2, b = 1, c = 0$ , la distribution gaussienne qui conduit à ces valeurs est

$$\exp \left[ -\frac{1}{12} (4x^2 + 4y^2 + 3z^2 - 4xy) \right].$$

*Exercice 1.3.*

*Démonstration du résultat (1.5) par méthode itérative.* Le déterminant d'une matrice complexe quelconque  $\mathbf{A}^{(n)}$   $n \times n$ , d'éléments  $A_{ij}^{(n)}$  peut être calculé de façon récursive en soustrayant à toutes les lignes un multiple de la dernière ligne de façon à annuler la dernière colonne (supposant  $A_{nn}^{(n)} \neq 0$ , sinon il faut prendre une autre ligne et colonne). Cette méthode conduit à la relation entre déterminants

$$\det \mathbf{A}^{(n)} = A_{nn}^{(n)} \det \mathbf{A}^{(n-1)},$$

où  $\mathbf{A}^{(n-1)}$  est une matrice  $(n-1) \times (n-1)$  d'éléments

$$A_{ij}^{(n-1)} = A_{ij}^{(n)} - A_{in}^{(n)} A_{nj}^{(n)} / A_{nn}^{(n)}, \quad i, j = 1 \dots n-1. \quad (1.59)$$

Utiliser le résultat (1.6) pour retrouver cette identité.

*Solution.* Nous considérons maintenant l'intégrale (1.4). Nous intégrons sur la variable  $x_n$  (supposant  $\text{Re } A_{nn} > 0$ ), utilisant le résultat (1.6) :

$$\int dx_n \exp \left( -\frac{1}{2} A_{nn} x_n^2 - x_n \sum_{i=1}^{n-1} A_{ni} x_i \right) = \sqrt{\frac{2\pi}{A_{nn}}} \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n-1} \frac{A_{in} A_{nj}}{A_{nn}} x_i x_j \right).$$

L'intégrale gaussienne restante devient une intégrale sur  $n - 1$  variables :

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = \sqrt{\frac{2\pi}{A_{nn}}} \int \left( \prod_{i=1}^{n-1} dx_i \right) \exp \left( - \sum_{i,j=1}^{n-1} \frac{1}{2} x_i (A_{ij} - A_{in} A_{nn}^{-1} A_{nj}) x_j \right).$$

Comparant avec l'identité (1.59), nous remarquons que nous sommes en train de calculer  $1/\sqrt{\det \mathbf{A}}$ . Nous concluons

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = (2\pi)^{n/2} (\det \mathbf{A})^{-1/2}. \quad (1.60)$$

*Exercice 1.4.*

Évaluer par la méthode du col l'intégrale suivante

$$I_n(\alpha) = \int_0^1 dx x^{\alpha n} (1-x)^{\beta n},$$

avec  $\beta = 1 - \alpha$ ,  $\alpha > 0$ ,  $\beta > 0$ , dans la limite  $n \rightarrow \infty$ .

*Solution.* Le col est  $x_c = \alpha$ , et donc

$$I_n(\alpha) \sim \sqrt{2\pi\alpha(1-\alpha)/n} \alpha^{n\alpha} (1-\alpha)^{n(1-\alpha)}.$$

*Exercice 1.5.*

On considère l'intégrale

$$Z(g) = \int d^3q \exp \left[ \frac{1}{g} \left( \frac{\mathbf{q}^2}{2} - \frac{(\mathbf{q}^2)^2}{4} \right) \right],$$

où le vecteur  $\mathbf{q}$  a deux composantes  $q_1, q_2$ . Calculer cette intégrale pour  $g \rightarrow 0_+$  par la méthode du col (cet exercice contient un point subtil).

*Solution.* Pour plus d'information, voir section 8.3.1 :

$$Z(g) \sim 4\pi^{3/2} g^{1/2} e^{1/4g}.$$

*Exercice 1.6.*

Les polynômes de Hermite, qui apparaissent dans les fonctions propres de l'oscillateur harmonique, ont une représentation intégrale de la forme

$$\mathcal{H}_n(z) = \sqrt{\frac{n}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{-ns^2/2} (z - is)^n.$$

Évaluer ces polynômes pour  $n \rightarrow \infty$  et  $z$  réel par la méthode du col.

*Solution.* Les polynômes  $\mathcal{H}_n(z)$  sont pairs ou impairs

$$\mathcal{H}_n(-z) = (-1)^n \mathcal{H}_n(z).$$

Nous pouvons donc nous restreindre à  $z \geq 0$ .

Posons

$$A(s) = \frac{1}{2}s^2 - \ln(z - is).$$

Les cols sont donnés par

$$A'(s) = s - \frac{1}{s + iz} = 0 \Rightarrow s_{\pm} = -\frac{1}{2}iz \pm \sqrt{1 - z^2/4}.$$

Par ailleurs

$$A''(s) = 1 + \frac{1}{(s + iz)^2} = s^2 + 1.$$

Il faut alors distinguer les deux cas  $0 \leq z < 2$  et  $z > 2$  ( $z = 2$  exige un traitement spécial).

(ii)  $z > 2$ . Il est commode de poser  $z = 2 \cosh \theta$  avec  $\theta > 0$ . Alors

$$s_{\pm} = -ie^{\pm\theta} \Rightarrow e^{-nA} = \exp \left[ \frac{1}{2}n e^{\pm 2\theta} \mp n\theta \right].$$

Il est facile de se convaincre en déplaçant le contour que le col pertinent est  $s_-$  (le col  $s_+$  est un col entre le trou à  $s = -iz$  et l'autre col  $s_-$ ) et donc

$$\mathcal{H}_n(z) \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\sqrt{1 - e^{-2\theta}}} \exp \left[ \frac{1}{2}n e^{-2\theta} + n\theta \right].$$

Au contraire pour  $|z| < 2$ , les deux cols contribuent. Posant  $z = 2 \cos \theta$ , on trouve

$$\mathcal{H}_n(z) \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\sqrt{1 - e^{-2i\theta}}} e^{n e^{-2i\theta} / 2 + ni\theta} + \text{conjugué complexe.}$$

*Exercice 1.7.*

Évaluer par la méthode du col l'intégrale

$$I_n(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-nx^2/2 + nax} \cosh^n x$$

en fonction du paramètre réel  $a$  dans la limite  $n \rightarrow \infty$ . On pourra exprimer le résultat sous forme paramétrique en fonction de la position du col.

*Solution.* On observe qu'on peut écrire l'intégrale

$$I_n(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{nf(x)},$$

$$f(x) = -x^2/2 + ax + \ln \cosh x.$$

La position du col est donnée par

$$f'(x) = 0 = -x + a + \tanh x,$$

et

$$f''(x) = -\tanh^2(x).$$

Cette équation a donc une solution unique  $x(a)$  pour tout  $a$ . Il est commode de paramétrer le résultat en fonction de  $x(a)$ . On substitue

$$a = x - \tanh x.$$

Au col

$$f(x) = x^2/2 - x \tanh x + \ln \cosh x,$$

et donc

$$I_n(a) = \frac{(2\pi)^{1/2}}{|\tanh x|} e^{nf(x)}.$$

On note que la méthode du col ne s'applique pas pour  $a = 0$  où  $f''(x)$  s'annule au col. Il faut alors développer  $f(x)$  jusqu'à l'ordre  $x^4$  et intégrer directement.



# Chapitre 2

## L'intégrale de chemin en mécanique quantique

LE FORMALISME D'INTÉGRALE DE CHEMIN que nous allons développer dans le cadre de la mécanique quantique conduit à représenter les quantités physiques comme des moyennes avec un poids approprié (réel ou complexe) sur un ensemble de chemins ou trajectoires. Ainsi il donne un sens assez concret à la notion de fluctuations quantiques. En fait nous pourrions définir la mécanique quantique directement à partir de l'intégrale de chemin, un point de vue qui ne serait pas sans vertu, mais qui ferait dépendre l'étude de la mécanique quantique à un petit nombre de particules d'un formalisme mathématique plus complexe que les équations aux dérivées partielles. Notons cependant que quand le nombre de degrés de liberté augmente, comme en mécanique statistique ou en théorie quantique des champs, les mérites de l'intégrale de chemin finissent par l'emporter largement.

Ici, pour des raisons pédagogiques, nous supposons au contraire que certaines notions de base de la mécanique quantique sont déjà connues, tels que la notion d'espace de Hilbert (la notation des bras et kets étant utilisée pour les vecteurs), sur lequel agissent des opérateurs correspondant aux différentes observables, tels que les opérateurs de position, d'impulsion, d'évolution ou la matrice densité. Par ailleurs, l'évolution des fonctions d'onde est gouvernée par l'équation de Schrödinger.

Nous allons d'abord décrire une stratégie générale qui conduit à une représentation des éléments de matrice (dans une base particulière) d'un opérateur d'évolution par des intégrales de chemin. L'existence d'une telle représentation est basée sur deux propriétés fondamentales :

- Une évolution markovienne, c'est-à-dire sans mémoire, une propriété caractéristique de systèmes isolés ou sans influence sur leur environnement.
- La localité de l'évolution pour des intervalles de temps courts, une propriété que nous expliquerons plus loin.

Ces deux propriétés sont satisfaites à la fois par l'opérateur unitaire  $e^{-itH/\hbar}$  (si  $H$  est un hamiltonien indépendant du temps) qui décrit l'évolution en mécanique quantique et l'opérateur statistique  $e^{-\beta H}$  qui est la matrice densité à l'équilibre thermique. Mais elles sont aussi partagées par des processus aléatoires de type diffusion qui n'ont rien de quantique, comme le mouvement brownien qui est à l'origine de la notion d'intégrale de chemin (intégrale de Wiener).

Nous appliquerons ensuite cette stratégie à l'exemple le plus simple, le calcul des éléments de matrice de l'opérateur statistique pour des hamiltoniens de la forme  $H = \hat{p}^2/2m + V(\hat{q})$ , où  $\hat{q}$ ,  $\hat{p}$  sont respectivement les opérateurs de position et impulsion.

## 2.1 Processus markoviens locaux

Nous définissons maintenant dans le cadre de la mécanique quantique les propriétés d'évolution markovienne et de localité.

### 2.1.1 Évolution markovienne

Soit  $U(t, t')$ ,  $t \geq t'$ , un opérateur borné de l'espace de Hilbert, qui décrit une évolution du temps  $t'$  au temps  $t$  et qui satisfait une propriété de Markov dans le temps :

$$U(t, t'')U(t'', t') = U(t, t') \quad \text{pour } t \geq t'' \geq t' \quad \text{et} \quad U(t', t') = \mathbf{1}. \quad (2.1)$$

Cette propriété, caractéristique aussi de certains processus aléatoires, comme nous le montrerons en section 5.5, signifie que l'évolution associée à l'opérateur  $U$  est sans mémoire, c'est-à-dire que l'évolution du temps  $t''$  au temps  $t$  ne dépend que de l'état du système au temps  $t''$  mais pas de l'évolution antérieure.

Nous supposons de plus  $U(t, t')$  dérivable à dérivée continue. Nous posons

$$\left. \frac{\partial U(t, t')}{\partial t} \right|_{t=t'} = -H(t)/\hbar,$$

où  $\hbar$  est un paramètre réel, qui sera identifié plus loin avec la constante de Planck ce qui en justifiera l'utilité. Nous dérivons alors l'équation (2.1) par rapport à  $t$  et prenons la limite  $t'' = t$ . Nous trouvons

$$\hbar \frac{\partial U}{\partial t}(t, t') = -H(t)U(t, t'). \quad (2.2)$$

Quand l'opérateur  $H$  est indépendant du temps, l'équation se résout formellement :  $U(t, t') = e^{-(t-t')H/\hbar}$ .

La propriété de Markov (2.1) permet d'écrire  $U(t'', t')$  comme un produit de  $n$  opérateurs pour des intervalles de temps  $\varepsilon = (t'' - t')/n$  arbitrairement

petits :

$$U(t'', t') = \prod_{m=1}^n U[t' + m\varepsilon, t' + (m-1)\varepsilon], \quad n\varepsilon = t'' - t'. \quad (2.3)$$

Le produit (2.3) est *ordonné dans le temps* comme dans l'équation (2.1). Quand  $H$  est indépendant du temps,  $U(t + \varepsilon, t) = e^{-\varepsilon H/\hbar}$  et on reconnaît la formule de Trotter.

Notons que les opérateurs  $U(t + \varepsilon, t)$  jouent un rôle analogue aux matrices de transfert de la mécanique statistique classique (*cf.* chapitre 4).

### 2.1.2 Éléments de matrice et localité

*Opérateur position et éléments de matrice.* Nous introduisons maintenant une base qui joue un rôle privilégié, la base dans laquelle l'opérateur de position  $\hat{q}$  est diagonal. C'est dans cette base que nous supposons l'évolution locale au temps court. Utilisant la notation des bras et kets usuelle en mécanique quantique, nous notons  $|q\rangle$  le vecteur propre de  $\hat{q}$  avec la valeur propre  $q$  :

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle. \quad (2.4)$$

À tout observable comme la position est associé un opérateur hermitien et donc les vecteurs propres de  $\hat{q}$  sont orthogonaux :

$$\langle q'|q\rangle = \delta(q - q').$$

(Comme dans le cas des ondes planes, c'est une base généralisée puisque les vecteurs n'appartiennent pas à l'espace de Hilbert.) Par ailleurs la base est complète, ce qui s'écrit

$$\int dq |q\rangle \langle q| = \mathbf{1}. \quad (2.5)$$

En termes d'éléments de matrice dans cette base, l'identité (2.1) pour les temps  $t_3 \geq t_2 \geq t_1$  prend alors la forme

$$\langle q_3|U(t_3, t_1)|q_1\rangle = \int dq_2 \langle q_3|U(t_3, t_2)|q_2\rangle \langle q_2|U(t_2, t_1)|q_1\rangle,$$

où nous avons utilisé la décomposition de l'identité (2.5). Généralisant cette identité nous pouvons réécrire l'équation (2.3)

$$\langle q''|U(t'', t')|q'\rangle = \int \prod_{k=1}^{n-1} dq_k \prod_{k=1}^n \langle q_k|U(t_k, t_{k-1})|q_{k-1}\rangle \quad (2.6)$$

avec les conventions

$$t_k = t' + k\varepsilon, \quad q_0 = q', \quad q_n = q''.$$

Dans cette expression, nous pouvons prendre la limite  $n \rightarrow \infty$ , ou  $\varepsilon \rightarrow 0$ , ramenant l'évaluation de l'expression (2.6) à l'évaluation asymptotique (avec une précision suffisante) des éléments de matrice  $\langle q|U(t + \varepsilon, t)|q' \rangle$  pour des intervalles de temps infinitésimaux.

*Localité de l'évolution aux temps courts.* Si l'opérateur  $H$  est local dans la base où l'opérateur de position  $\hat{q}$  est diagonal, ce qui signifie que les éléments de matrice  $\langle q_1|H(t)|q_2 \rangle$  ont un support réduit à  $q_1 = q_2$ , nous pouvons construire à partir de l'identité (2.3) une *intégrale de chemin* donnant les éléments de matrice  $\langle q''|U(t'', t')|q' \rangle$ . En effet, dans cette limite, comme conséquence de la localité de  $H$ , seuls les éléments de matrice avec  $|q - q'| \ll 1$  contribuent de façon appréciable à l'expression (2.6). Cette propriété est satisfaite quand l'opérateur  $H(t)$  s'exprime en termes des opérateurs habituels d'impulsion et de position  $\hat{p}$  et  $\hat{q}$  de la mécanique quantique :  $H(t) \equiv H(\hat{p}, \hat{q}; t)$ , et est un polynôme en  $\hat{p}$ . De façon équivalente,  $H$  agit sur les fonctions d'onde  $\langle q|\psi \rangle \equiv \psi(q)$  comme un opérateur différentiel.

*L'opérateur  $H$ .* Dans ce cours nous rencontrerons trois types d'opérateurs.

Si l'opérateur  $U$  décrit l'évolution quantique dans le temps, il est unitaire et l'opérateur  $H$  est anti-hermitien,  $H = i\tilde{H}$ , où  $\tilde{H}$  est un opérateur de type hamiltonien quantique. La localité de l'évolution quantique est alors en correspondance directe avec la localité de l'évolution classique. Cette situation sera abordée au chapitre 9.

Dans ce chapitre, c'est l'opérateur  $H$  lui-même qui est hermitien et l'interprétation est différente. Par exemple, si  $H$  est un hamiltonien indépendant du temps, l'opérateur  $U(\hbar\beta, 0)$  est l'opérateur statistique quantique ou matrice densité d'un système statistique quantique à l'équilibre à la température  $T = 1/\beta$  (l'équilibre pouvant être induit par un couplage faible à un bain thermique). Nous appellerons néanmoins la variable  $t$  temps (ou temps euclidien), quoique du point de vue de l'évolution quantique ce soit un temps imaginaire. En effet, si l'on change le temps  $t$  en  $it$  on obtient l'opérateur d'évolution ordinaire de la mécanique quantique. Le même prolongement permet aussi de transposer la partie algébrique des calculs qui suivent à l'évolution quantique.

Enfin, en section 5.5,  $H$  sera l'hamiltonien de Fokker-Planck associé à une équation de diffusion qui est réel mais pas en général hermitien.

### 2.1.3 Exemple : évolution libre ou mouvement brownien

Nous illustrons ces remarques par l'exemple de l'opérateur statistique correspondant à la particule libre de masse  $m$ , qui est aussi l'exemple du mouvement brownien (section 5.5). Nous supposons maintenant que l'opérateur  $\hat{\mathbf{q}}$  est un vecteur à  $d$  composantes ( $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^d$ ).

Pour étudier ce problème, il est utile d'introduire l'opérateur d'impulsion  $\hat{\mathbf{p}}$ . Les composantes de  $\hat{\mathbf{q}}$  ont des relations de commutation canonique

avec les  $d$  composantes de l'opérateur impulsion  $\hat{\mathbf{p}}$  :

$$[\hat{q}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}. \quad (2.7)$$

L'hamiltonien du mouvement libre peut alors s'écrire

$$H_0 = \hat{\mathbf{p}}^2/2m.$$

Pour calculer les éléments de matrice de l'opérateur  $U(t, t') = e^{-(t-t')H_0/\hbar}$  il est commode d'introduire aussi la base dans laquelle  $\hat{\mathbf{p}}$  est diagonal, qui est reliée à la base des positions par transformée de Fourier.

*Transformation de Fourier : convention.* Notant  $|\widetilde{\mathbf{p}}\rangle$  les vecteurs dans la base dans laquelle l'opérateur impulsion  $\hat{\mathbf{p}}$  est diagonal, nous définissons la transformée de Fourier par

$$\int d^d q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{p}/\hbar} |\mathbf{q}\rangle = |\widetilde{\mathbf{p}}\rangle. \quad (2.8)$$

Les éléments de matrice de l'opérateur identité dans cette base sont alors

$$\langle \widetilde{\mathbf{p}}'' | \mathbb{1} | \widetilde{\mathbf{p}}' \rangle = \langle \widetilde{\mathbf{p}}'' | \widetilde{\mathbf{p}}' \rangle = (2\pi\hbar)^d \delta^{(d)}(\mathbf{p}'' - \mathbf{p}').$$

En conséquence, dans un produit d'opérateurs en représentation d'impulsion la mesure d'intégration est  $d^d p / (2\pi\hbar)^d$  :

$$\langle \widetilde{\mathbf{p}}'' | U_2 U_1 | \widetilde{\mathbf{p}}' \rangle = \int \frac{d^d p}{(2\pi\hbar)^d} \langle \widetilde{\mathbf{p}}'' | U_2 | \widetilde{\mathbf{p}} \rangle \langle \widetilde{\mathbf{p}} | U_1 | \widetilde{\mathbf{p}}' \rangle.$$

Par ailleurs, de cette normalisation découle pour les fonctions d'onde  $\psi(\mathbf{q}) \equiv \langle \mathbf{q} | \psi \rangle$  :

$$\langle \widetilde{\mathbf{p}} | \psi \rangle \equiv \tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \int d^d q e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{p}/\hbar} \psi(\mathbf{q}) \Rightarrow \psi(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int d^d p e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{p}/\hbar} \tilde{\psi}(\mathbf{p}).$$

*Hamiltonien libre.* On peut maintenant résoudre l'équation (2.2) en utilisant la représentation mixte impulsion-position :

$$\begin{aligned} -\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \widetilde{\mathbf{p}} | U(t, t') | \mathbf{q}' \rangle &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \langle \widetilde{\mathbf{p}} | U(t, t') | \mathbf{q}' \rangle, \\ \langle \widetilde{\mathbf{p}} | U(t', t') | \mathbf{q}' \rangle &= e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{p}/\hbar}. \end{aligned}$$

La solution est

$$\langle \widetilde{\mathbf{p}} | U(t, t') | \mathbf{q}' \rangle = e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{p}/\hbar} e^{-(t-t')\mathbf{p}^2/2m\hbar}.$$

Inversant la transformée de Fourier, on en déduit

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{q} | U(t, t') | \mathbf{q}' \rangle &= \int \frac{d^d p}{(2\pi\hbar)^d} \exp \left[ \frac{1}{\hbar} \left( i(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{p} - (t - t') \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right) \right] \\ &= \left( \frac{m}{2\pi\hbar(t-t')} \right)^{d/2} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \frac{m(\mathbf{q} - \mathbf{q}')^2}{2(t-t')} \right]. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Ce résultat met clairement en évidence la propriété de localité : quand  $t - t' \rightarrow 0$  le domaine où  $\langle \mathbf{q} | U(t, t') | \mathbf{q}' \rangle$  n'est pas négligeable se réduit à  $|\mathbf{q} - \mathbf{q}'| = O(\sqrt{t - t'})$ .

## 2.2 Solution de l'équation d'évolution aux temps courts

Dans la suite de ce chapitre, l'opérateur  $H(t)$  qui apparaît dans l'équation 2.2 est identifié à un hamiltonien quantique de la forme

$$H = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + V(\hat{\mathbf{q}}, t), \quad (2.10)$$

(où  $\mathbf{p}, \mathbf{q}$  sont des vecteurs à  $d$  composantes). De tels hamiltoniens sont locaux, comme tous les hamiltoniens polynomiaux en  $\hat{\mathbf{p}}$ . Des hamiltoniens plus généraux seront discutés aux chapitres 5 et 10.

Nous évaluons alors l'expression (2.6) dans la limite  $n \rightarrow \infty$ ,  $\varepsilon \rightarrow 0$  à  $n\varepsilon$  fixé.

En termes des éléments de matrice des opérateurs  $H$  et  $U$  dans la base  $|q\rangle$ , l'équation (2.2) devient une équation aux dérivées partielles qui formellement est une équation de Schrödinger pour un opérateur d'évolution quantique en temps imaginaire :

$$-\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{q} | U(t, t') | \mathbf{q}' \rangle = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{q}}^2 + V(\mathbf{q}, t) \right] \langle \mathbf{q} | U(t, t') | \mathbf{q}' \rangle \quad (2.11)$$

avec la condition aux limites

$$\langle \mathbf{q} | U(t', t') | \mathbf{q}' \rangle = \delta^{(d)}(\mathbf{q} - \mathbf{q}').$$

Pour résoudre l'équation (2.11) dans la limite  $t - t' \rightarrow 0$ , il est commode de poser

$$\langle \mathbf{q} | U(t, t') | \mathbf{q}' \rangle = \exp[-\sigma(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; t, t')/\hbar].$$

L'équation (2.11) devient alors

$$\partial_t \sigma = -\frac{1}{2m} (\nabla_{\mathbf{q}} \sigma)^2 + \frac{\hbar}{2m} \nabla_{\mathbf{q}}^2 \sigma + V(\mathbf{q}, t). \quad (2.12)$$

Nous savons par la solution (2.9) du cas libre que la solution est singulière pour  $|t - t'| \rightarrow 0$ . Si l'on suppose que les termes singuliers ne dépendent pas du potentiel, on est amené à poser

$$\sigma(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; t, t') = m \frac{(\mathbf{q} - \mathbf{q}')^2}{2(t - t')} + \frac{d}{2} \hbar \ln[2\pi\hbar(t - t')/m] + \sigma_1(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; t, t'). \quad (2.13)$$

Les dérivées partielles de  $\sigma$  qui apparaissent dans l'équation (2.12) deviennent alors

$$\begin{aligned} \partial_t \sigma &= -\frac{m}{2(t - t')^2} (\mathbf{q} - \mathbf{q}')^2 + \frac{d\hbar}{2(t - t')} + \partial_t \sigma_1(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; t, t'), \\ \nabla_q \sigma &= \frac{m}{t - t'} (\mathbf{q} - \mathbf{q}') + \nabla_q \sigma_1, \\ \nabla_q^2 \sigma &= \frac{dm}{t - t'} + \nabla_q^2 \sigma_1. \end{aligned}$$

Introduisant ces expressions dans l'équation (2.12), on vérifie que la fonction  $\sigma_1$  est d'ordre  $t - t'$ . Les termes dominants de l'équation, qui sont d'ordre  $|t - t'|^0$ , se réduisent à

$$\partial_t \sigma_1 = -\frac{1}{t - t'} (\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \nabla_q \sigma_1 + V(\mathbf{q}, t),$$

où les termes négligés sont au moins d'ordre  $t - t'$ . De façon plus suggestive cette équation peut s'écrire

$$[(t - t')\partial_t + (\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \nabla_q] \sigma_1 \sim (t - t')V(\mathbf{q}, t). \quad (2.14)$$

Introduisons alors un paramètre  $\lambda$  et la fonction de  $\phi(\lambda)$  obtenue en substituant  $t \mapsto t' + \lambda(t - t')$ ,  $\mathbf{q} \mapsto \mathbf{q}' + \lambda(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$  dans  $\sigma_1$ . Elle satisfait l'équation

$$\lambda \frac{d\phi}{d\lambda} = \lambda(t - t')V(\mathbf{q}' + \lambda(\mathbf{q} - \mathbf{q}'), t' + \lambda(t - t')).$$

Intégrant, on en déduit

$$\sigma_1 = \phi(1) = (t - t') \int_0^1 d\lambda V(\mathbf{q}' + \lambda(\mathbf{q} - \mathbf{q}'), t' + \lambda(t - t')).$$

Faisons dans l'intégrale le changement de variable  $\lambda \mapsto \tau$  :

$$\tau = t' + \lambda(t - t'),$$

et introduisons la fonction  $\mathbf{q}(\tau)$  qui correspond à la trajectoire rectiligne qui relie  $\mathbf{q}'$  à  $\mathbf{q}$  à vitesse constante :

$$\mathbf{q}(\tau) = \mathbf{q}' + \frac{\tau - t'}{t - t'} (\mathbf{q} - \mathbf{q}'). \quad (2.15)$$

La solution de l'équation (2.14) s'écrit alors

$$\sigma_1(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; t, t') \sim \int_{t'}^t d\tau V(\mathbf{q}(\tau), \tau). \quad (2.16)$$

La contribution libre peut aussi être exprimée en fonction de  $\mathbf{q}(\tau)$  ( $\dot{q} \equiv dq/d\tau$ ) :

$$\frac{m(\mathbf{q} - \mathbf{q}')^2}{2(t - t')} = \frac{1}{2} \int_{t'}^t d\tau m \dot{\mathbf{q}}^2(\tau).$$

On vérifie enfin que la forme (2.13) entraîne que la limite de  $\langle \mathbf{q} | U(t, t') | \mathbf{q}' \rangle$  pour  $t - t' \rightarrow 0$  est bien  $\delta^{(d)}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ . On en déduit

$$\langle \mathbf{q} | U(t, t') | \mathbf{q}' \rangle = \left( \frac{m}{2\pi\hbar(t - t')} \right)^{d/2} \exp[-\mathcal{S}(\mathbf{q})/\hbar] \quad (2.17)$$

avec

$$\mathcal{S}(\mathbf{q}) = \int_{t'}^t d\tau \left[ \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{q}}^2(\tau) + V(\mathbf{q}(\tau), \tau) \right] + O((t - t')^2). \quad (2.18)$$

Notons que quand le potentiel ne dépend pas du temps, on peut aussi utiliser la remarque ( $\varepsilon = t - t'$ )

$$U(\hbar\varepsilon, 0) = e^{-\varepsilon H} = e^{-\varepsilon \hat{p}^2} e^{-\varepsilon V(\hat{q}) + O(\varepsilon^2)},$$

où le terme d'ordre  $\varepsilon^2$  est proportionnel au commutateur  $[\hat{p}^2, V(\hat{q})]$  (formule de Baker-Hausdorff). Prenant les éléments de matrice de deux membres, on obtient le résultat recherché, pourvu que le commutateur ne soit pas trop singulier.

**Remarque fondamentale.** Le terme le plus singulier dans le développement pour  $\varepsilon = t - t' \rightarrow 0$  est  $(\mathbf{q} - \mathbf{q}')^2/\varepsilon$  (qui est indépendant du potentiel). Ceci implique que le support de l'élément de matrice  $\langle \mathbf{q} | U(t' + \varepsilon, t') | \mathbf{q}' \rangle$  correspond à des valeurs  $|\mathbf{q}' - \mathbf{q}| = O(\sqrt{\varepsilon})$ , une propriété typique du mouvement brownien. De plus pour  $|\mathbf{q}' - \mathbf{q}| = O(\sqrt{\varepsilon})$ , nous trouvons

$$\begin{aligned} \sigma_1(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; t' + \varepsilon, t') &= \varepsilon V((\mathbf{q} + \mathbf{q}')/2, t') + O(\varepsilon^2) \\ &= \frac{1}{2}\varepsilon(V(\mathbf{q}, t) + V(\mathbf{q}', t')) + O(\varepsilon^2) = \varepsilon V(\mathbf{q}, t) + O(\varepsilon^{3/2}), \end{aligned}$$

si le potentiel est différentiable. Ainsi le remplacement dans le développement (2.13) de  $\sigma_1$  par  $(t - t')V(\mathbf{q}, t)$ , par exemple, ne modifie  $\sigma$  que par des termes d'ordre  $(t - t')^{3/2}$  qui, comme nous le montrons ci-dessous, sont négligeables. Plus généralement, pour que les trois expressions soient équivalentes, le potentiel doit être au moins continu, des potentiels plus singuliers exigeant une analyse particulière.

## 2.3 Intégrale de chemin

Nous introduisons maintenant la trajectoire rectiligne par morceaux définie par (figure 2.1)

$$\mathbf{q}(t) = \mathbf{q}_k + \frac{t - t_k}{t_{k+1} - t_k} (\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k) \quad \text{pour } t_k \leq t \leq t_{k+1}$$

qui interpole en temps les variables  $\mathbf{q}_k \equiv \mathbf{q}(t_k)$ .

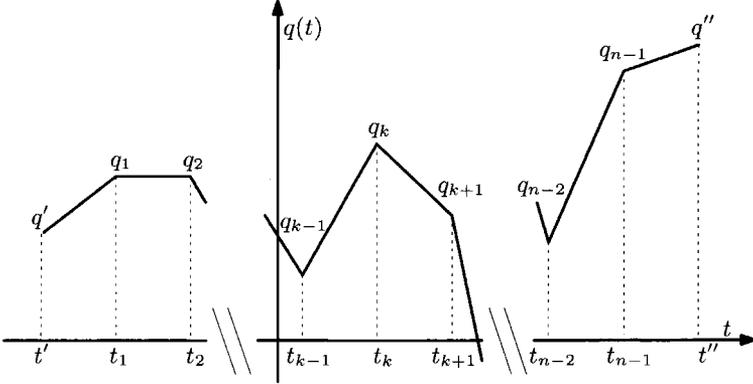


FIG. 2.1 – Un chemin contribuant à l'intégrale (2.19).

Combinant alors l'évaluation aux temps courts (2.17, 2.18) et l'équation (2.6), nous obtenons ( $\varepsilon = (t'' - t')/n$ )

$$\langle \mathbf{q}'' | U(t'', t') | \mathbf{q}' \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon} \right)^{dn/2} \int \prod_{k=1}^{n-1} d^d q_k \exp [-S(\mathbf{q}, \varepsilon)/\hbar] \quad (2.19)$$

avec

$$\begin{aligned} S(\mathbf{q}, \varepsilon) &= \sum_{k=0}^{n-1} \int_{t_k}^{t_{k+1}} dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{q}}^2(t) + V(\mathbf{q}(t), t) \right] + O(\varepsilon^2) \\ &= \int_{t'}^{t''} dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{q}}^2(t) + V(\mathbf{q}(t), t) \right] + O(n\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (2.20)$$

L'intégrale sur les variables  $\mathbf{q}_k$  est donc équivalente à une intégration sur les points d'un chemin rectiligne par morceaux du genre représenté dans la figure 2.1.

Nous observons que les termes négligés dans l'expression (2.20) sont d'ordre  $n\varepsilon^2$ . Dans la limite  $n \rightarrow \infty$ ,  $\varepsilon \rightarrow 0$  avec  $n\varepsilon = t'' - t'$  fixé, ils tendent donc vers zéro. Quand  $\varepsilon \rightarrow 0$ ,  $S(\mathbf{q}, \varepsilon)$  a comme limite l'action euclidienne

$$S(\mathbf{q}) \equiv \int_{t'}^{t''} dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{q}}^2(t) + V(\mathbf{q}(t), t) \right], \quad (2.21)$$

qui est l'intégrale du lagrangien euclidien associé à l'hamiltonien. L'action euclidienne se distingue de l'action usuelle de la mécanique classique par le signe relatif entre le terme cinétique et le terme de potentiel. Du point de vue formel, l'action euclidienne décrit un mouvement en *temps imaginaire*, ce qui explique le signe.

Nous prenons alors la limite formelle de l'expression (2.19) :

$$\langle \mathbf{q}'' | U(t'', t') | \mathbf{q}' \rangle = \int_{\mathbf{q}(t')=\mathbf{q}'}^{\mathbf{q}(t'')=\mathbf{q}''} [d\mathbf{q}(t)] \exp[-\mathcal{S}(\mathbf{q})/\hbar], \quad (2.22)$$

et l'appelons *intégrale de chemin* puisque le membre de droite implique une somme sur tous les chemins satisfaisant aux conditions aux limites prescrites, avec un poids  $\exp[-\mathcal{S}/\hbar]$ .

Nous notons par la suite  $[d\mathbf{q}(t)]$  (avec des crochets) la mesure d'intégration pour distinguer les intégrales de chemin des intégrales ordinaires.

*Remarque.* Dans le symbole  $[d\mathbf{q}(t)]$  est cachée une normalisation

$$\mathcal{N} = \left( \frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon} \right)^{dn/2}$$

qui est infinie mais qui ne dépend pas du potentiel. C'est pourquoi, dans les calculs explicites, nous normaliserons toujours les résultats en divisant l'intégrale de chemin par une intégrale de chemin de référence dont la valeur est déjà connue (le mouvement libre  $V \equiv 0$  par exemple).

*Généralisation.* La généralisation de la construction précédente à un système de plusieurs particules correspondant à l'hamiltonien

$$H = \sum_a \frac{\hat{\mathbf{P}}_a^2}{2m_a} + V(\hat{\mathbf{q}}; t),$$

est immédiate et conduit à une intégrale de chemin où apparaît l'action euclidienne correspondante

$$\mathcal{S}(\mathbf{q}) = \int dt \left[ \sum_a \frac{1}{2} m_a (\dot{\mathbf{q}}_a)^2 + V(\mathbf{q}(t)) \right].$$

*Discussion.* Dans l'action (2.21), les deux termes jouent des rôles tout à fait différents. Le potentiel détermine la contribution des chemins en fonction de la valeur de  $\mathbf{q}(t)$  à chaque temps, et détermine les propriétés physiques de la théorie.

Le terme cinétique  $\int dt \dot{\mathbf{q}}^2$  détermine pour sa part l'espace des chemins qui contribuent à l'intégrale et est ainsi essentiel à l'existence même de l'intégrale de chemin. Il sélectionne les chemins suffisamment réguliers, c'est-à-dire comme nous le voyons sur l'expression (2.20), ceux pour lesquels

$[\mathbf{q}(t + \varepsilon) - \mathbf{q}(t)]^2 / \varepsilon$  reste fini quand  $\varepsilon$  tend vers zéro. Ces chemins sont typiques du mouvement brownien ou de la marche au hasard. Le terme cinétique fait en réalité partie de la mesure d'intégration. D'ailleurs, l'écriture explicite faisant intervenir  $\dot{q}$  est quelque peu formelle puisque les chemins typiques qui contribuent à l'intégrale de chemin sont continus (ils satisfont à une condition de Hölder d'ordre 1/2) mais ne sont pas dérivables.

Cependant, une notation mathématiquement plus correcte serait peu intuitive. En particulier, il est clairement apparent sur l'expression (2.22) que les maxima de l'intégrand correspondent aux chemins qui minimisent l'action (2.21), c'est-à-dire qui satisfont

$$\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta q_i(t)} = 0 \quad \text{avec} \quad \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta q_i(t_1) \delta q_j(t_2)} \geq 0$$

au sens des opérateurs. Ce sont donc des solutions des équations du mouvement classique, ici euclidien (ou en temps imaginaire), qui sont dérivables. Cette observation est particulièrement pertinente pour  $\hbar \rightarrow 0$  où ces solutions classiques sont des cols, au sens de la méthode du col appliquée à l'intégrale de chemin. L'intégrale de chemin est toujours dominée par des chemins non dérivables, mais dans la limite semi-classique  $\hbar \rightarrow 0$  ces chemins sont concentrés au voisinage des chemins classiques qui eux sont dérivables.

## 2.4 Évaluation explicite : intégrales de chemin gaussiennes

Nous avons défini l'intégrale de chemin comme une limite formelle d'intégrales avec des intervalles de temps discrets. On pourrait donc craindre qu'il ne faille toujours retourner aux temps discrets pour la calculer. Il n'en est rien ; beaucoup de calculs peuvent être menés à bien sans faire référence au processus limite, ce qui fait l'utilité de cet objet mathématique nouveau. C'est ce que nous allons illustrer ici d'abord avec le mouvement libre puis avec l'exemple de l'oscillateur harmonique.

### 2.4.1 Le mouvement libre

Dans le cas du mouvement libre  $V \equiv 0$ , l'action euclidienne se réduit à une forme quadratique en  $q(t)$  :

$$\mathcal{S}(q) = \int_{t'}^{t''} \frac{1}{2} m \dot{q}^2(t) dt$$

et conduit donc à une intégrale de chemin (2.22) gaussienne. Pour la calculer explicitement, il suffit d'adapter la méthode expliquée en section 1.2. Le rôle de la matrice  $\mathbf{A}$  de l'intégrale (1.4) est joué ici par l'opérateur différentiel  $-m d_t^2$ ,

comme une intégration par parties du terme  $(\dot{q})^2$  le montre. Comme c'est un opérateur différentiel, le déterminant, ainsi que l'inverse, dépendent des conditions aux limites, et ceci constitue la différence principale par rapport au calcul avec un nombre fini de variables.

Pour calculer l'intégrale, nous changeons de variables  $q(t) \mapsto r(t)$  (une translation à chaque temps  $t$ ) :

$$q(t) = q_c(t) + r(t), \quad (2.23)$$

où la fonction  $q_c$  satisfait aux conditions aux limites

$$q_c(t') = q', \quad q_c(t'') = q'' \Rightarrow r(t') = r(t'') = 0. \quad (2.24)$$

L'action devient

$$\mathcal{S}(q_c + r) = \mathcal{S}(q_c) + \mathcal{S}(r) + m \int_{t'}^{t''} dt \dot{q}_c(t) \dot{r}(t).$$

Le terme linéaire en  $r$  peut se réécrire

$$\int_{t'}^{t''} \dot{q}_c(t) \dot{r}(t) dt = - \int_{t'}^{t''} \ddot{q}_c(t) r(t) dt, \quad (2.25)$$

où, dans l'intégration par parties, les conditions aux limites (2.24) ont été utilisées. Le terme linéaire s'annule donc si la fonction  $q_c(t)$  est une solution de l'équation du mouvement classique libre

$$m\ddot{q}_c(t) = 0.$$

La solution qui satisfait aux conditions (2.24) est

$$q_c(t) = q' + \frac{t - t'}{t'' - t'}(q'' - q').$$

On en déduit

$$\mathcal{S}(q_c) = \frac{m}{2} \frac{(q'' - q')^2}{t'' - t'}.$$

Comme le changement de variables est une translation, le jacobien de la transformation est égal à 1 et  $[dq(t)] = [dr(t)]$ . Nous obtenons donc

$$\langle q'' | e^{-(t''-t')\hat{p}^2/2m\hbar} | q' \rangle = \mathcal{N} \exp \left[ -\frac{m}{2\hbar} \frac{(q'' - q')^2}{t'' - t'} \right],$$

où

$$\mathcal{N} = \int [dr(t)] \exp \left[ -\frac{m}{2\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \dot{r}^2(t) \right] \quad (2.26)$$

avec  $r(t') = r(t'') = 0$ . Comme la normalisation  $\mathcal{N}$  est indépendante de  $q'$ ,  $q''$ , l'expression est cohérente avec le résultat exact (2.9). L'intégrale de chemin  $\mathcal{N}$

est la valeur de  $\langle q'' | e^{-(t''-t')\hat{p}^2/2m\hbar} | q' \rangle$  pour  $q' = q'' = 0$ . Pour la déterminer, il faut soit revenir à des intervalles de temps discrets, soit utiliser une information indépendante.

En présence d'un terme de potentiel, on ne peut plus faire le calcul exact en général. Cependant, aux temps courts, le terme cinétique est dominant. Dans le terme de potentiel, à l'ordre dominant on peut remplacer  $q(t)$  par la trajectoire classique  $q_c(t)$ . On retrouve alors exactement la forme (2.18) de l'action.

### 2.4.2 L'oscillateur harmonique

Nous considérons maintenant l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique

$$H_0 = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2. \quad (2.27)$$

L'action euclidienne correspondante est

$$\mathcal{S}_0(q) = \int_{t'}^{t''} \left( \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \right) dt, \quad (2.28)$$

qui est encore une forme quadratique en  $q(t)$ . En conséquence, l'intégrale de chemin (2.22)

$$\langle q'' | U_0(t'', t') | q' \rangle = \int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''} [dq(t)] e^{-\mathcal{S}_0(q)/\hbar}, \quad (2.29)$$

est encore gaussienne. Le rôle de la matrice  $\mathbf{A}$  de l'intégrale (1.4) est joué ici par l'opérateur différentiel  $m(-d_t^2 + \omega^2)$ . Il est de nouveau utile de décomposer le calcul en plusieurs étapes. La partie la plus simple et la plus utile du calcul est la détermination de la dépendance explicite dans les conditions aux limites, c'est-à-dire en  $q', q''$ .

Nous changeons de variables  $q(t) \mapsto r(t)$  (une translation) :

$$q(t) = q_c(t) + r(t), \quad (2.30)$$

où la fonction  $q_c$  satisfait aux conditions aux limites 2.24. L'action devient

$$\mathcal{S}_0(q_c + r) = \mathcal{S}_0(q_c) + \mathcal{S}_0(r) + m \int_{t'}^{t''} dt (\dot{q}_c(t)\dot{r}(t) + \omega^2 q_c(t)r(t)).$$

Dans le terme linéaire en  $r$  nous intégrons par parties (équation (2.25)). Nous choisissons la fonction  $q_c(t)$  solution de l'équation

$$-m\ddot{q}_c + m\omega^2 q_c = 0, \quad (2.31)$$

de sorte que le terme linéaire en  $r(t)$  s'annule. On reconnaît que  $q_c(t)$  satisfait l'équation du mouvement classique associée à l'action  $\mathcal{S}_0$ , c'est-à-dire à un potentiel harmonique inversé  $-\frac{1}{2}m\omega^2 q^2$  (le signe  $-$  est dû au temps euclidien).

L'action 2.28 se réduit alors à la somme de deux termes :

$$\mathcal{S}_0(q) = \mathcal{S}_0(q_c) + \mathcal{S}_0(r), \quad (2.32)$$

où  $\mathcal{S}_0(q_c)$  est l'action classique de la trajectoire. L'intégrale de chemin devient

$$\langle q'' | U_0(t'', t') | q' \rangle = \mathcal{N}(\omega, \tau) e^{-\mathcal{S}_0(q_c)/\hbar} \quad (2.33)$$

avec

$$\mathcal{N}(\omega, \tau) = \int [dr(t)] \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \left( \frac{1}{2} m \dot{r}^2(t) + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2(t) \right) \right], \quad (2.34)$$

où les trajectoires satisfont aux conditions aux limites (2.24) :  $r(t') = r(t'') = 0$ .

*L'action classique.* Nous calculons maintenant  $\mathcal{S}_0(q_c)$  explicitement. Posant  $\tau = t'' - t'$ , nous pouvons écrire la solution

$$q_c(t) = \frac{1}{\sinh(\omega\tau)} [q' \sinh(\omega(t'' - t)) + q'' \sinh(\omega(t - t'))]. \quad (2.35)$$

Une intégration par parties,

$$\int \dot{q}^2 dt = q\dot{q} - \int q\ddot{q} dt,$$

combinée avec l'équation du mouvement (2.31), simplifie le calcul de  $\mathcal{S}_0(q_c)$ . On trouve

$$\mathcal{S}_0(q_c) = \frac{m\omega}{2 \sinh \omega\tau} [(q'^2 + q''^2) \cosh \omega\tau - 2q'q'']. \quad (2.36)$$

*Normalisation.* L'intégrale gaussienne restante sur  $r(t)$  ne dépend plus de  $q'$ ,  $q''$  et n'engendre qu'une normalisation. Comme le calcul direct fait apparaître un facteur infini, et pour des raisons essentiellement pédagogiques, nous n'acheverons le calcul qu'en section 2.7.

Le résultat explicite est

$$\begin{aligned} \langle q'' | U_0(t'', t') | q' \rangle &= \left( \frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh \omega\tau} \right)^{1/2} \\ &\times \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar \sinh \omega\tau} [(q'^2 + q''^2) \cosh \omega\tau - 2q'q''] \right\}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

## 2.5 Fonction de partition. Fonctions de corrélation

Dans les sections qui suivent, nous discuterons d'abord une des quantités les plus simples : la fonction de partition quantique. Nous introduirons ensuite les fonctions de corrélation associées à la mesure  $e^{-S/\hbar}$ .

Le potentiel, dans cette section, est *indépendant du temps*.

*Fonction de partition quantique.* La fonction de partition quantique  $\mathcal{Z}(\beta) = \text{tr} e^{-\beta H}$  ( $\beta$  est l'inverse de la température) a une représentation sous forme d'intégrale de chemin qui se déduit immédiatement de la représentation des éléments de matrice de l'opérateur statistique  $e^{-\beta H}$ . En effet

$$\mathcal{Z}(\beta) = \text{tr} e^{-\beta H} \equiv \text{tr} U(\hbar\beta, 0) = \int dq'' dq' \delta(q'' - q') \langle q'' | U(\hbar\beta, 0) | q' \rangle.$$

Nous utilisons maintenant pour  $\langle q'' | U(\hbar\beta, 0) | q' \rangle$  la représentation par intégrale de chemin (2.22). La fonction  $\delta$  et les deux intégrales sur  $q' = q(0)$  et  $q'' = q(\hbar\beta)$  impliquent que l'intégration porte sur tous les chemins satisfaisant aux conditions aux limites périodiques  $q(0) = q(\hbar\beta)$ , et sur toutes les valeurs de  $q(0)$  :

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int_{q(0)=q(\hbar\beta)} [dq(t)] \exp [-S(q)/\hbar]. \quad (2.38)$$

De façon équivalente, cela signifie que la sommation porte sur tous les chemins fermés sans restriction, ou sur toutes les fonctions  $q(t)$  périodiques de période  $\hbar\beta$ .

L'action (2.21) dépend maintenant implicitement de  $\hbar$  :

$$S(q) = \int_0^{\hbar\beta} dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{q}}^2(t) + V(\mathbf{q}(t)) \right].$$

Changeant  $t$  en  $t/\hbar$ , nous pouvons la réécrire

$$S(q)/\hbar = \int_0^\beta dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{q}}^2(t)/\hbar^2 + V(\mathbf{q}(t)) \right]. \quad (2.39)$$

*Limite de basse température.* Dans la limite  $\beta \rightarrow \infty$  (basse température), la fonction de partition pour un système avec fondamental isolé fournit l'énergie  $E_0$  du fondamental :

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}(\beta) = -E_0.$$

Nous utiliserons cette remarque plus systématiquement au chapitre 3.

Notons que dans l'intégrale de chemin on peut imposer les conditions aux limites à  $t = \pm\beta/2$  aussi bien qu'à  $t = 0$  et  $t = \beta$ . Comme l'action est invariante par translation du temps, les résultats sont identiques. Cependant, dans la limite  $\beta \rightarrow \infty$ , dans un cas nous sommes amenés à intégrer sur tous les chemins avec  $t \geq 0$  et la condition initiale  $q(0) = 0$ , alors que dans le second cas nous obtenons un formalisme explicitement invariant par translation dans le temps. Le second formalisme est clairement plus simple.

*Fonctions de corrélation.* L'intégrand  $e^{-S(q)/\hbar}$  dans l'intégrale de chemin (2.38) définit une mesure positive sur les chemins périodiques. À cette

mesure correspondent des valeurs moyennes

$$\langle q(t_1)q(t_2)\dots q(t_n) \rangle = \mathcal{Z}^{-1}(\beta) \int [dq(t)] q(t_1)q(t_2)\dots q(t_n) \exp[-\mathcal{S}(q)/\hbar] \quad (2.40)$$

avec  $q(\beta/2) = q(-\beta/2)$ , où la division par la fonction de partition correspondante  $\mathcal{Z}(\beta)$  assure que  $\langle 1 \rangle = 1$ . Une interprétation physique de ces valeurs moyennes appelées fonctions de corrélation sera donnée au chapitre 4.

Une fonction de corrélation qui dépend de  $n$  temps différents sera appelée par la suite *fonction à  $n$  points*.

Il est possible bien sûr de définir des fonctions de corrélation correspondant à des conditions aux limites différentes, mais pour des raisons pédagogiques nous ne les étudierons pas, les expressions explicites dans le cas des intégrales gaussiennes étant nettement plus compliquées.

## 2.6 Calcul de l'intégrale de chemin gaussienne générale

En section 1.2 nous avons montré comment déduire de l'intégrale gaussienne avec terme linéaire toutes les valeurs moyennes avec poids gaussien (expression (1.8)). Nous allons maintenant généraliser cette méthode.

### 2.6.1 Intégrale de chemin gaussienne générale

Nous considérons l'intégrale de chemin

$$\text{tr } U_G(\tau/2, -\tau/2; b) = \int [dq(t)] \exp[-\mathcal{S}_G(q, b)/\hbar] \quad (2.41)$$

avec conditions aux limites périodiques :  $q(\tau/2) = q(-\tau/2)$  et

$$\mathcal{S}_G(q, b) = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{q}^2(t) + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2(t) - b(t)q(t) \right]. \quad (2.42)$$

L'intégrale est une fonctionnelle de  $b(t)$ . Pour la calculer, nous éliminons d'abord le terme linéaire de  $\mathcal{S}_G(q, b)$ . Nous faisons de nouveau un changement de variables  $q(t) \mapsto r(t)$  (translation) :

$$q(t) = q_c(t) + r(t), \quad q_c(\tau/2) = q_c(-\tau/2) \Rightarrow r(\tau/2) = r(-\tau/2), \quad (2.43)$$

où la fonction  $q_c(t)$  va être déterminée ci-dessous. Alors

$$\mathcal{S}_G(q, b) = \mathcal{S}_0(r) + \mathcal{S}_G(q_c, b) + \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \left[ m \dot{q}_c(t) \dot{r}(t) + m \omega^2 q_c(t) r(t) - b(t) r(t) \right].$$

Dans le terme linéaire en  $r$  nous intégrons par parties :

$$\int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \dot{q}_c(t) \dot{r}(t) = \dot{q}_c(\tau/2)r(\tau/2) - \dot{q}_c(-\tau/2)r(-\tau/2) - \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \ddot{q}_c(t)r(t).$$

Tenant compte des conditions (2.43) :  $r(\tau/2) = r(-\tau/2)$ , nous voyons que le coefficient du terme linéaire en  $r$  s'annule si la fonction  $q_c(t)$  est solution de l'équation du mouvement classique

$$-\ddot{q}_c(t) + \omega^2 q_c(t) = b(t)/m$$

avec  $\dot{q}_c(\tau/2) = \dot{q}_c(-\tau/2)$ . La solution satisfaisant aux conditions aux limites (2.43) peut s'écrire

$$q_c(t) = \frac{1}{m} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \Delta(t-u)b(u)du, \quad (2.44)$$

où la fonction  $\Delta(t)$  est solution de l'équation

$$-\ddot{\Delta} + \omega^2 \Delta = \delta(t) \quad (2.45)$$

avec les conditions aux limites périodiques

$$\Delta(\tau/2) = \Delta(-\tau/2), \quad \dot{\Delta}(\tau/2) = \dot{\Delta}(-\tau/2).$$

On trouve

$$\Delta(t) = \frac{1}{2\omega \sinh(\omega\tau/2)} \cosh(\omega(\tau/2 - |t|)). \quad (2.46)$$

La fonction  $\Delta(t)$ , qui joue un rôle essentiel dans les développements perturbatifs autour de l'oscillateur harmonique (cf. section 2.8), est aussi appelée *propagateur*. Elle a une limite simple quand  $\tau \rightarrow \infty$ ,

$$\Delta(t) = \frac{1}{2\omega} e^{-\omega|t|}, \quad (2.47)$$

qui est la transformée de Fourier de la fonction  $1/(s^2 + \omega^2)$  et la solution de l'équation (2.45) avec des conditions de décroissance à l'infini.

L'équation (2.44) est l'analogie continu de l'équation (1.9). Le noyau  $\Delta(t_1 - t_2)$  est l'inverse de l'opérateur  $-\mathbf{d}_t^2 + \omega^2$  avec conditions aux limites périodiques. Il ne dépend que de la différence  $t_2 - t_1$  parce que les conditions aux limites périodiques sont invariantes par translation, l'intervalle  $[0, \tau]$  pouvant alors être identifié à un cercle et le temps à une variable de type angulaire.

Nous en déduisons

$$\begin{aligned}
 \mathcal{S}_G(q_c, b) &= \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{q}_c^2(t) + \frac{1}{2} m \omega^2 q_c^2(t) - b(t) q_c(t) \right] \\
 &= \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt q_c(t) \left[ -\frac{1}{2} m \ddot{q}_c(t) + \frac{1}{2} m \omega^2 q_c(t) - b(t) \right] \\
 &= -\frac{1}{2} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt q_c(t) b(t) \\
 &= -\frac{1}{2m} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt du b(t) \Delta(t-u) b(u).
 \end{aligned}$$

L'intégrale résiduelle sur le chemin  $r(t)$  donne une normalisation qui est égale à la fonction de partition  $\text{tr} e^{-\tau H_0/\hbar}$  (équation (2.27)) :

$$\text{tr} U_G(\tau/2, -\tau/2; b) = \text{tr} e^{-\tau H_0/\hbar} e^{-\mathcal{S}_G(q_c, b)/\hbar}.$$

Substituant  $\tau = \hbar\beta$ , nous trouvons

$$\begin{aligned}
 \mathcal{Z}_G(\beta, b) &= \text{tr} U_G(\hbar\beta/2, -\hbar\beta/2; b) \\
 &= \mathcal{Z}_0(\beta) \exp \left[ \frac{1}{2m\hbar} \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} du dv \Delta(v-u) b(v) b(u) \right], \quad (2.48)
 \end{aligned}$$

où  $\mathcal{Z}_0(\beta)$  est la fonction de partition de l'oscillateur harmonique (2.27) qui se déduit de l'expression (2.37), mais que nous allons calculer directement plus loin (équation (2.55)).

## 2.6.2 Fonctions de corrélation gaussiennes, théorème de Wick

La fonctionnelle  $\mathcal{Z}_G(\beta, b)$  engendre les fonctions de corrélation (équation (1.48)) correspondant à la mesure gaussienne  $[dq] e^{-S_0(q)/\hbar}$  (équation (2.28)). En effet, si nous appliquons l'identité (la définition de la dérivée fonctionnelle a été donnée en section 1.7)

$$\hbar \frac{\delta}{\delta b(t_1)} \exp \left[ \frac{1}{\hbar} \int dt b(t) q(t) \right] = q(t_1) \exp \left[ \frac{1}{\hbar} \int dt b(t) q(t) \right]$$

à l'intégrale de chemin (2.41), nous trouvons

$$\hbar \frac{\delta}{\delta b(t_1)} \mathcal{Z}_G(\beta, b) = \int [dq] q(t_1) \exp [-\mathcal{S}_G(q, b)/\hbar]$$

et, plus généralement, par dérivations successives

$$\hbar^p \prod_{j=1}^p \frac{\delta}{\delta b(t_j)} \mathcal{Z}_G(\beta, b) = \int [dq] \prod_{j=1}^p q(t_j) \exp [-\mathcal{S}_G(q, b)/\hbar].$$

Dans la limite  $b \equiv 0$ , nous pouvons ainsi engendrer toute fonction de corrélation :

$$\hbar^p \left[ \prod_{j=1}^p \frac{\delta}{\delta b(t_j)} \right] \mathcal{Z}_G(\beta, b) \Big|_{b \equiv 0} = \int [dq] \left[ \prod_{j=1}^p q(t_j) \right] \exp[-S_0(q)/\hbar] \quad (2.49a)$$

$$= \mathcal{Z}_0(\beta) \langle q(t_1)q(t_2) \dots q(t_p) \rangle_0, \quad (2.49b)$$

où  $\langle \bullet \rangle_0$  signifie valeur moyenne avec la mesure  $e^{-S_0/\hbar}$ .

Plus généralement, un opérateur différentiel  $\mathcal{F}(\hbar\delta/\delta b)$  engendre dans le membre de droite la valeur moyenne de la fonctionnelle  $\mathcal{F}(q)$  :

$$\mathcal{F}(\hbar\delta/\delta b) \mathcal{Z}_G(\beta, b) \Big|_{b \equiv 0} = \int [dq(t)] \mathcal{F}(q) \exp[-S_0(q)/\hbar]. \quad (2.50)$$

Dans le membre de gauche de l'équation (2.49b), nous remplaçons maintenant  $\mathcal{Z}_G(b, \beta)$  par le résultat explicite (2.48) et obtenons

$$\langle q(t_1)q(t_2) \dots q(t_p) \rangle_0 = \prod_{j=1}^p \hbar \frac{\delta}{\delta b(t_j)} \exp \left[ \frac{1}{2m\hbar} \int du dv b(v) \Delta(v-u) b(u) \right] \Big|_{b \equiv 0}.$$

En particulier, la dérivée seconde donne la fonction de corrélation à deux points

$$\langle q(t)q(u) \rangle_0 = \mathcal{Z}_0^{-1}(\beta) \hbar^2 \frac{\delta^2}{\delta b(t) \delta b(u)} \mathcal{Z}_G(\beta, b) \Big|_{b \equiv 0} = \frac{\hbar}{m} \Delta(t-u). \quad (2.51)$$

Plus généralement, l'action de la dérivée fonctionnelle sur l'exponentielle de la forme quadratique fait apparaître un facteur  $b$  :

$$\begin{aligned} \hbar \frac{\delta}{\delta b(t_1)} \exp \left[ \frac{1}{2m\hbar} \int du dv \Delta(v-u) b(v) b(u) \right] = \\ \frac{1}{m} \int du_1 \Delta(t_1 - u_1) b(u_1) \\ \times \exp \left[ \frac{1}{2m\hbar} \int du dv b(v) \Delta(v-u) b(u) \right]. \end{aligned}$$

Les arguments de la section 1.2 s'appliquent alors directement. Les seuls termes qui survivent dans la limite  $b \equiv 0$  correspondent à des appariements de toutes les dérivées fonctionnelles. Nous retrouvons une propriété caractéristique de la mesure gaussienne. Comme nous l'avons déjà expliqué, toutes les fonctions de corrélation s'expriment en termes de la fonction à deux points

ainsi que le montre le théorème de Wick :

$$\begin{aligned} \langle q(t_1)q(t_2)\dots q(t_\ell)\rangle_0 &= \sum_{P\{1,2,\dots,\ell\}} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^\ell \Delta(t_{P_1} - t_{P_2})\dots \Delta(t_{P_{\ell-1}} - t_{P_\ell}) \\ &= \sum_{P\{1,2,\dots,\ell\}} \langle q(t_{P_1})q(t_{P_2})\rangle_0 \dots \langle q(t_{P_{\ell-1}})q(t_{P_\ell})\rangle_0, \end{aligned} \quad (2.52)$$

où  $P\{1,2,\dots,\ell\}$  sont tous les appariements possibles de  $\{1,2,\dots,\ell\}$ .

*Régularité des chemins génériques.* Les résultats précédents nous permettent de calculer la valeur moyenne de la quantité

$$\left\langle (q(t+\varepsilon) - q(t))^2 \right\rangle_0 = \frac{2\hbar}{m} [\Delta(0) - \Delta(\varepsilon)].$$

Pour  $\varepsilon \rightarrow 0$ , nous trouvons

$$\left\langle (q(t+\varepsilon) - q(t))^2 \right\rangle_0 \sim |\varepsilon| \frac{\hbar}{m}. \quad (2.53)$$

Ce résultat confirme que la trajectoire générique n'est pas dérivable (mais cependant continue), et que le comportement de  $q(t+\varepsilon) - q(t)$  pour  $\varepsilon \rightarrow 0$  ne dépend pas du potentiel mais seulement du terme cinétique de l'action. Il implique aussi que l'action moyenne  $\langle \mathcal{S}(q) \rangle$  est infinie, à cause de la divergence du terme cinétique. Une démonstration plus générale, valable pour tout potentiel, est donnée en section 4.5.2.

## 2.7 Oscillateur harmonique : la fonction de partition

Nous sommes maintenant en mesure de compléter le calcul de la fonction de partition  $\mathcal{Z}_0(\beta)$  de l'oscillateur harmonique qui donne la normalisation. Nous commençons par déterminer sa dépendance dans le paramètre  $\omega$ . Dérivant l'intégrale de chemin (2.29) avec conditions aux limites (2.38), nous trouvons

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \mathcal{Z}_0(\beta) = -\frac{1}{\hbar} \int [dq] e^{-S_0(q)/\hbar} \frac{\partial S_0}{\partial \omega} = -\frac{m\omega}{\hbar} \int [dq] e^{-S_0(q)/\hbar} \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} dt q^2(t)$$

avec  $q(\beta/2) = q(-\beta/2)$ . Divisant les deux membres par  $\mathcal{Z}_0(\beta)$ , nous obtenons, par définition de la valeur moyenne gaussienne avec poids  $e^{-S_0(q)/\hbar}$ ,

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \ln \mathcal{Z}_0(\beta) = -\frac{m\omega}{\hbar} \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} dt \langle q^2(t) \rangle_0 = -\hbar\beta\omega \Delta(0) = -\frac{\hbar\beta \cosh(\omega\hbar\beta/2)}{2 \sinh(\omega\hbar\beta/2)}, \quad (2.54)$$

où la forme explicite (2.46) a été utilisée. Donc

$$\mathcal{Z}_0(\beta) = \mathcal{N}' \frac{1}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)}.$$

Pour des raisons dimensionnelles,  $\mathcal{N}'$  est un nombre pur. Il peut être obtenu en prenant la limite  $\beta \rightarrow \infty$ , où on doit trouver  $e^{-\beta E_0}$ . Le résultat complet est donc

$$\mathcal{Z}_0(\beta) = \frac{1}{2 \sinh(\beta\hbar\omega/2)} = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}, \quad (2.55)$$

où nous reconnaissons en effet la fonction de partition de l'oscillateur harmonique.

*Normalisation de l'intégrale gaussienne.* L'équation (2.33) permet de relier la normalisation de l'intégrale de chemin à la fonction de partition  $\mathcal{Z}_0(\beta)$  de l'oscillateur harmonique. Prenant la trace de  $U_0(\hbar\beta, 0)$ , on trouve

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_0(\beta) &= \text{tr} U_0(\hbar\beta, 0) \equiv \int dq \langle q | U_0(\hbar\beta, 0) | q \rangle \\ &= \mathcal{N}(\omega, \beta) \left( \frac{\pi\hbar}{m\omega \tanh(\beta\hbar\omega/2)} \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Ceci complète le calcul de la normalisation dans l'expression (2.37).

### 2.7.1 Calcul direct de la fonction de partition gaussienne

Il est utile, surtout en vue de développements semi-classiques (solitons, instantons), d'introduire une méthode de calcul plus directe. Toutefois, comme nous nous attendons à des problèmes de normalisation infinie dans ce cas, nous faisons d'abord le calcul en utilisant des intervalles de temps discrets. Nous posons ici  $\hbar = m = 1$ . Alors

$$\mathcal{Z}_0(\beta, \varepsilon) = (2\pi\varepsilon)^{-n/2} \int dq_0 dq_n \delta(q_n - q_0) \int \prod_{k=1}^{n-1} dq_k e^{-S_0(q, \varepsilon)}, \quad (2.57)$$

où un choix possible de l'action avec intervalles de temps discrets est

$$S_0(q, \varepsilon) = \sum_{k=1}^n \left[ \frac{(q_k - q_{k-1})^2}{2\varepsilon} + \frac{1}{2} \varepsilon \omega^2 q_k^2 \right].$$

L'utilisation de la forme (2.18) aurait donné

$$S_0(q, \varepsilon) = \sum_{k=1}^n \left[ \frac{(q_k - q_{k-1})^2}{2\varepsilon} + \frac{1}{6} \varepsilon \omega^2 (q_{k-1}^2 + q_k^2 + q_{k-1}q_k) \right], \quad (2.58)$$

ce qui est équivalent dans la limite  $\varepsilon \rightarrow 0$  et  $|q_k - q_{k-1}| = O(\sqrt{\varepsilon})$ .

La fonction  $\mathcal{S}_0$  est une forme quadratique dans les variables  $q_k$ , qu'il est particulièrement simple de diagonaliser. En effet, les conditions aux limites périodiques impliquent l'invariance par translation. Nous introduisons donc un développement en séries de Fourier, posant

$$q_k = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{\ell=0}^{n-1} e^{2i\pi k\ell/n} c_\ell \quad (2.59)$$

avec les conditions de réalité

$$c_0 = \bar{c}_0, \quad \bar{c}_{n-\ell} = c_\ell. \quad (2.60)$$

Alors

$$\mathcal{S}_0(q, \varepsilon) = \sum_{\ell=0}^{n-1} \bar{c}_\ell \left[ (1 - \cos(2\pi\ell/n)) / \varepsilon + \frac{1}{2}\omega^2\varepsilon \right] c_\ell, \quad (2.61)$$

où les relations d'orthogonalité

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} e^{2i\pi k\ell/n} = \begin{cases} 1 & \text{pour } \ell = 0 \pmod{n}, \\ 0 & \text{autrement,} \end{cases}$$

ont été utilisées. Ces relations montrent aussi que la transformation est unitaire et le jacobien du changement de variables est une phase.

L'intégrale a maintenant la forme (6.5), mais la relation (2.60) implique que seule une moitié des variables complexes est indépendante. On trouve

$$\mathcal{Z}_0(\beta, \varepsilon) = (2\varepsilon)^{-n/2} \left[ \prod_{\ell=0}^{n-1} \left( (1 - \cos(2\pi\ell/n)) / \varepsilon + \frac{1}{2}\omega^2\varepsilon \right) \right]^{-1/2}. \quad (2.62)$$

Le produit peut être calculé explicitement. Posant

$$\cosh \theta = 1 + \omega^2\varepsilon^2/2,$$

on obtient

$$\prod_{\ell=0}^{n-1} \left[ (1 - \cos(2\pi\ell/n)) / \varepsilon + \frac{1}{2}\omega^2\varepsilon \right] = \frac{2}{(2\varepsilon)^n} (\cosh n\theta - 1),$$

identité qu'on peut vérifier en comparant les racines des deux polynômes en  $\cosh \theta$  ainsi que leurs comportements asymptotiques.

Dans la limite  $\varepsilon \rightarrow 0$  avec  $n\varepsilon = \beta$  fixé,  $n\theta \rightarrow \beta\omega$  et donc

$$\mathcal{Z}_0(\beta) = \frac{e^{-\beta\omega/2}}{1 - e^{-\beta\omega}}.$$

On retrouve la fonction de partition de l'oscillateur harmonique.

### 2.7.2 Calcul avec temps continu

Le calcul avec intervalles de temps discrets suggère comment faire un calcul directement dans le continu. Nous suivons en fait directement la méthode de la section 1.2, et calculons le déterminant de l'opérateur différentiel  $\mathbf{A} = -d_t^2 + \omega^2$  avec des conditions aux limites appropriées. Dans la limite continue, le changement de variables (2.59) devient un développement du chemin sur une base de fonctions périodiques sur  $(-\beta/2, \beta/2)$  de carré sommable :

$$q(t) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{\ell} c_{\ell} e^{2i\pi\ell t/\beta}, \quad c_{-\ell} = \bar{c}_{\ell},$$

et orthonormées pour que le jacobien soit trivial :

$$[dq(t)] \mapsto dc_0 \prod_{\ell > 0} dc_{\ell} d\bar{c}_{\ell}. \quad (2.63)$$

L'action devient

$$S_0 = \frac{1}{2}\omega^2 c_0^2 + \sum_{\ell \geq 1} \bar{c}_{\ell} (\omega^2 + 4\pi^2 \ell^2 / \beta^2) c_{\ell}.$$

L'intégration est immédiate et donne

$$\mathcal{Z}_0(\beta) \propto \frac{1}{\omega} \prod_{\ell \geq 1} [(\omega^2 + 4\pi^2 \ell^2 / \beta^2)]^{-1}. \quad (2.64)$$

Une difficulté apparaît cependant : le produit infini du membre de droite de l'équation (2.64) est divergent. Cette divergence est liée au facteur infini contenu dans la mesure d'intégration : comme nous l'avons plusieurs fois souligné, il est nécessaire de diviser l'intégrale de chemin par une intégrale de référence pour obtenir un résultat fini. Nous ne pouvons pas choisir ici l'intégrale du mouvement libre parce que la fonction de partition est infinie dans ce cas. Par contre, nous pouvons comparer les intégrales de chemin pour différentes valeurs de  $\omega$  ou prendre la dérivée :

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \ln \mathcal{Z}_0(\beta) = -\frac{1}{\omega} - \sum_{\ell > 0} \frac{2\omega}{\omega^2 + 4\pi^2 \ell^2 / \beta^2} = -\frac{\beta}{2 \tanh(\omega\beta/2)},$$

ce qui est le résultat (2.54).

*Autre méthode de calcul.* De façon à montrer la robustesse du calcul avec temps continu, nous faisons le même calcul par une autre méthode (pour  $\omega = 1$ ). Nous éliminons d'abord la valeur à  $t = \pm\beta/2$ . Appelons  $\lambda$  cette valeur :

$$q(-\beta/2) = q(\beta/2) = \lambda. \quad (2.65)$$

La solution  $q_c$  de l'équation

$$\mathbf{A}f \equiv -\ddot{f}(t) + f(t) = 0$$

avec les conditions aux limites (2.65) est

$$q_c(t) = \lambda \frac{\cosh t}{\cosh(\beta/2)}.$$

Changeons alors de variables  $q(t) \mapsto r(t)$  :

$$q(t) = q_c(t) + r(t) \Rightarrow r(-\beta/2) = r(\beta/2) = 0.$$

Nous trouvons

$$\mathcal{S}_0(q) = \tanh(\beta/2)\lambda^2 + \mathcal{S}_0(r).$$

Nous devons maintenant chercher les valeurs propres de  $\mathbf{A}$  agissant sur les fonctions s'annulant aux extrémités de l'intervalle  $[-\beta/2, \beta/2]$ . Soit  $f(t)$  une fonction propre avec une valeur propre  $a$  :

$$\mathbf{A}f \equiv -\ddot{f}(t) + f(t) = af(t).$$

Nous n'intégrons que sur les fonctions qui satisfont la condition aux limites  $f(\beta/2) = f(-\beta/2) = 0$ . Les solutions sont

$$f_\ell(t) = \sqrt{2/\beta} \sin(\ell\pi(t - \beta/2)/\beta) \Rightarrow a_\ell = 1 + \ell^2\pi^2/\beta^2,$$

pour tout entier  $\ell \geq 1$ .

À une normalisation près, le résultat de l'intégrale de chemin est le résultat de l'intégration sur  $\lambda$  et du produit des valeurs propres :

$$\mathcal{Z}_0(\beta) \propto 1/\sqrt{\tanh(\beta/2) \det \mathbf{A}}.$$

Du calcul discret, nous savons qu'une normalisation doit être factorisée et que la partie non triviale est

$$\prod_{\ell \geq 1} (1 + \beta^2/\pi^2 \ell^2) = \sinh \beta/\beta.$$

Alors

$$\sinh(\beta) \tanh(\beta/2) = 2 \sinh^2(\beta/2).$$

Le résultat est donc proportionnel à  $1/\sinh(\beta/2)$ , qui est bien le résultat de l'oscillateur harmonique.

## 2.8 Oscillateur harmonique perturbé

Considérons l'hamiltonien

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m}{2} \omega^2 q^2 + V_1(q), \quad (2.66)$$

où nous supposons que la perturbation

$$V_I(q) = \sum_{n=1} v_n q^n$$

est un polynôme dans la variable  $q$ , même si certains résultats se généralisent au cas de toute fonction développable en puissances de  $q$ .

La fonction de partition correspondante est donnée par (dans cette section nous posons  $\hbar = 1$ )

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int [dq] \exp \left\{ - \int_{-\beta/2}^{\beta/2} \left[ \frac{1}{2} m \dot{q}^2(t) + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2(t) + V_I(q(t)) \right] dt \right\} \quad (2.67)$$

avec  $q(-\beta/2) = q(\beta/2)$ .

L'intégrand (2.67) peut être développé en puissances de  $V_I(q)$ , ce qui conduit à

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{Z}(\beta)}{\mathcal{Z}_0(\beta)} &= \sum_{k=0} \frac{(-1)^k}{k!} \left\langle \left[ \int dt V_I(q(t)) \right]^k \right\rangle_0 \\ &= \sum_{k=0} \frac{(-1)^k}{k!} \int dt_1 dt_2 \dots dt_k \langle V_I(q(t_1)) \dots V_I(q(t_k)) \rangle_0, \end{aligned}$$

où  $\langle \bullet \rangle_0$  signifie moyenne par rapport à la mesure gaussienne  $e^{-S_0/\hbar}$  (équation (2.28)) avec conditions aux limites périodiques. Les arguments donnés en section 1.2 s'appliquent immédiatement ici aussi. Si  $V_I(q)$  est un polynôme, les termes successifs du développement peuvent être calculés systématiquement en utilisant le théorème de Wick (1.17) sous la forme (2.52). Ceci fournit la base de la théorie des perturbations.

*Expression formelle.* Une généralisation des identités (1.21, 1.23) conduit à une représentation formelle du développement perturbatif. L'application de l'identité (2.50) avec

$$\mathcal{F}(q) = \exp \left[ - \int_{-\beta/2}^{\beta/2} V_I(q(t)) dt \right],$$

conduit à la représentation

$$\mathcal{Z}(\beta) = \left\{ \exp \left[ - \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt V_I \left( \frac{\delta}{\delta b(t)} \right) \right] \mathcal{Z}_G(b, \beta) \right\} \Big|_{b=0}, \quad (2.68)$$

où la fonctionnelle  $\mathcal{Z}_G(b, \beta)$ , qui correspond à l'action (2.42), a été calculée en section 2.6. En terme du résultat explicite (2.48), on trouve

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{Z}(\beta)}{\mathcal{Z}_0(\beta)} &= \exp \left[ - \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt V_I \left( \frac{\delta}{\delta b(t)} \right) \right] \\ &\times \exp \left[ \frac{1}{2m} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} du dv b(u) \Delta(u-v) b(v) \right] \Big|_{b=0}. \end{aligned} \quad (2.69)$$

*Théorie des perturbations et minimum du potentiel.* À toute décomposition du potentiel en une somme d'un terme quadratique et d'un reste  $V_I(q)$  est associé un développement perturbatif. Toutefois, l'intégrant est maximum dans le voisinage des chemins qui minimisent l'action. Clairement, les fonctions périodiques qui minimisent l'action sont les fonctions constantes  $q(t) \equiv q_0$ , pour minimiser le terme cinétique, dont la valeur  $q_0$  minimise le potentiel  $V(q)$  et donc

$$V'(q_0) = 0, \quad V''(q_0) > 0.$$

La décomposition optimale consiste alors à poser

$$V(q) = V(q_0) + \frac{1}{2}V''(q_0)(q - q_0)^2 + V_I(q),$$

Des problèmes particuliers sont associés à la dégénérescence du minimum du potentiel.

## 2.9 Développement perturbatif en puissances de $\hbar$

Dans cette section, nous rétablissons la constante de Planck  $\hbar$ . Nous considérons un hamiltonien général de la forme

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + V(q), \quad (2.70)$$

où le potentiel  $V(q)$  est un polynôme avec un minimum unique à  $q = 0$  tel que

$$V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2q^2 + V_I(q), \quad V_I(q) = O(q^3).$$

Nous avons déjà discuté en section 2.8 le calcul perturbatif de la fonction de partition dans un développement en puissances de l'interaction  $V_I(q)$  et souligné l'utilité de développer le potentiel autour de son minimum. Il existe une manière naturelle d'organiser un tel développement perturbatif comme un développement en puissances de  $\hbar$ . Il se distingue du développement perturbatif simple dès que le potentiel perturbant  $V_I$  n'est pas un monôme.

Tout développement en puissances de  $\hbar$  peut être qualifié de semi-classique. Mais en fait le développement décrit plus loin en section 2.10 correspond mieux à l'idée d'une approche semi-classique.

Nous considérons la fonction de partition  $\mathcal{Z}(\beta)$  et posons  $\beta = \tau/\hbar$ . Alors

$$\mathcal{Z}(\tau/\hbar) = \int_{q(-\tau/2)=q(\tau/2)} [dq(t)] \exp[-\mathcal{S}(q)/\hbar], \quad (2.71)$$

où  $\mathcal{S}(q)$  est l'action euclidienne :

$$\mathcal{S}(q) = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \left[ \frac{1}{2}m\dot{q}^2(t) + V(q(t)) \right] dt. \quad (2.72)$$

Nous calculons maintenant l'intégrale de chemin dans la limite formelle  $\hbar \rightarrow 0$  à  $\tau$  fixé. Du point de vue semi-classique, cette limite correspond bien à  $\hbar \rightarrow 0$ , mais en même temps  $\beta = \tau/\hbar \rightarrow \infty$ , c'est-à-dire de façon corrélée la température tend vers zéro, ce qui privilégie les petites oscillations autour du minimum classique et les excitations proches du fondamental quantique.

Dans cette limite, l'intégrale de chemin a exactement la forme qui permet l'utilisation de la méthode du col (*cf.* section 1.5). Comme  $q = 0$  est le minimum absolu et non dégénéré du potentiel  $V$ , l'intégrale de chemin est dominée pour  $\hbar \rightarrow 0$  par le col  $q(t) \equiv 0$  qui minimise à la fois le potentiel et le terme cinétique. Les termes les plus importants de l'intégrand peuvent être identifiés en faisant le changement d'échelle sur les chemins  $q(t) \mapsto \sqrt{\hbar}q(t)$ . Alors

$$\mathcal{S}(q)/\hbar = \frac{m}{2} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} [\dot{q}^2(t) + \omega^2 q^2(t)] + \frac{1}{\hbar} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt V_1(q(t)\sqrt{\hbar}).$$

Comme  $V_1(q\sqrt{\hbar})/\hbar$  est au moins d'ordre  $\sqrt{\hbar}$ , l'ordre dominant est la fonction de partition de l'oscillateur harmonique. Aux ordres suivants, l'intégrale peut être calculée en développant l'intégrand en puissances de  $V_1$  et intégrant terme à terme. Ceci conduit à un développement perturbatif de  $\mathcal{Z}(\tau/\hbar)$  qui peut être réorganisé comme un développement en puissances de  $\hbar$ . Notons que les termes de degré  $q^n$  du potentiel ne contribuent qu'à l'ordre  $\hbar^{n/2-1}$ . En particulier, il devient alors possible de définir un développement perturbatif pour tout potentiel analytique, car à tout ordre fini en  $\hbar$ , seul un nombre fini de termes du développement en série de Taylor de  $V_1(q)$  contribue.

## 2.10 Développement semi-classique

Par contraste, dans la limite formelle  $\hbar \rightarrow 0$  à  $\beta$  fixé, on s'attend à ce que la fonction de partition quantique tende vers la fonction de partition classique. C'est ce que nous allons montrer en calculant le terme principal et la première correction du développement semi-classique de la fonction de partition 2.38. En particulier, comme  $\hbar$  a une dimension, le paramètre de développement doit être de la forme  $\hbar$  divisée par une action. Le calcul va permettre d'identifier le paramètre sans dimension du développement.

La fonction de partition est donnée par

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int [dq(t)] \exp[-\mathcal{S}(q)/\hbar], \quad (2.73)$$

où les chemins satisfont maintenant à des conditions aux limites périodiques :  $q(0) = q(\beta)$  et (équation (2.39))

$$\mathcal{S}(q)/\hbar = \int_0^\beta dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{q}^2(t)/\hbar^2 + V(q(t)) \right]. \quad (2.74)$$

Pour  $\hbar \rightarrow 0$ , le terme dominant de l'action est le terme cinétique. Les trajectoires dominantes sont donc celles pour lesquelles  $\dot{q} = 0$ , c'est-à-dire toutes les trajectoires constantes. Au sens de la méthode du col, on trouve donc une famille à un paramètre de cols dégénérés. Pour tenir compte de cette propriété, il est commode de calculer d'abord l'élément de matrice diagonal

$$\langle q_0 | e^{-\beta H} | q_0 \rangle = \int_{q(0)=q(\beta)=q_0} [dq(t)] \exp [-\mathcal{S}(q)/\hbar], \quad (2.75)$$

auquel un seul col contribue :  $q(t) \equiv q_0$ . Après la translation  $q(t) \mapsto q(t) + q_0$ , l'intégrale de chemin devient

$$\langle q_0 | e^{-\beta H} | q_0 \rangle = \int_{q(0)=q(\beta)=0} [dq(t)] \exp [-\Sigma(q)] \quad (2.76)$$

avec

$$\Sigma(q) = \int_0^\beta dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{q}^2(t)/\hbar^2 + V(q_0 + q(t)) \right]. \quad (2.77)$$

Avec ces conditions aux limites,  $q(t)$  est formellement d'ordre  $\hbar$ , et on peut donc développer le potentiel en puissances de  $q(t)$  :

$$V(q_0 + q(t)) = V(q_0) + V'(q_0)q(t) + \frac{1}{2}V''(q_0)q^2(t) + O(\hbar^3),$$

et calculer les contributions correspondantes perturbativement. On développe donc l'intégrand dans l'intégrale (2.76) :

$$\begin{aligned} \langle q_0 | e^{-\beta H} | q_0 \rangle = \mathcal{N}(\beta) e^{-\beta V(q_0)} & \left[ 1 - V'(q_0) \int_0^\beta dt \langle q(t) \rangle_0 + \frac{1}{2}(V'(q_0))^2 \right. \\ & \left. \times \int_0^\beta dt du \langle q(t)q(u) \rangle_0 - \frac{1}{2}V''(q_0) \int_0^\beta dt \langle q^2(t) \rangle_0 + O(\hbar^3) \right], \end{aligned}$$

où  $\langle \bullet \rangle_0$  signifie valeur moyenne avec la mesure correspondant à l'action libre  $\mathcal{S}_0(q) = \frac{1}{2}m \int dt \dot{q}^2(t)/\hbar$ .

Les différentes contributions font intervenir la fonction à deux points  $\Delta(t, u)$  correspondant à l'action libre avec les conditions aux limites  $q(0) = q(\beta) = 0$  :

$$\begin{aligned} \langle q_0 | e^{-\beta H} | q_0 \rangle = \mathcal{N}(\beta) e^{-\beta V(q_0)} & \left[ 1 + \frac{\hbar^2}{2m}(V'(q_0))^2 \int_0^\beta \Delta(t, u) dt du \right. \\ & \left. - \frac{\hbar^2}{2m}V''(q_0) \int_0^\beta \Delta(t, t) dt + O(\hbar^3) \right]. \end{aligned}$$

La normalisation est donnée par

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(\beta) &= \langle q=0 | e^{-\beta p^2/2m} | q=0 \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\beta p^2/2m} \\ &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}}, \end{aligned} \quad (2.78)$$

c'est-à-dire l'expression libre (2.9) dans laquelle il faut remplacer  $t-t'$  par  $\hbar\beta$  (et ici  $d=1$ ).

Il reste maintenant à déterminer la fonction à deux points  $\Delta(t, u)$ .

*La fonction à deux points.* La fonction à deux points peut être obtenue en calculant l'intégrale de chemin

$$\mathcal{Z}_G(b, \beta) = \int_{q(0)=q(\beta)=0} [dq(t)] \exp \left[ -\frac{m}{2\hbar^2} \int_0^\beta \dot{q}^2(t) dt + \int_0^\beta b(t)q(t) dt \right]. \quad (2.79)$$

Un calcul très semblable à celui présenté en section 2.6 donne

$$\mathcal{Z}_G(b, \beta) / \mathcal{Z}_G(0, \beta) = \exp \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\beta dt \int_0^\beta du b(t) \Delta(t, u) b(u) \right], \quad (2.80)$$

où  $\Delta(t, u) = \Delta(u, t)$  est la solution de l'équation

$$-\ddot{\Delta}(t, u) = \delta(t - u) \quad \text{avec} \quad \Delta(0, u) = \Delta(\beta, u) = 0.$$

On trouve

$$\Delta(t, u) = -\frac{1}{2}|t - u| + \frac{1}{2}(t + u - 2ut/\beta). \quad (2.81)$$

*Fonction de partition.* Utilisant cette fonction à deux points, on peut évaluer les moyennes explicitement :

$$\langle q_0 | e^{-\beta H} | q_0 \rangle = \mathcal{N}(\beta) e^{-\beta V(q_0)} \left[ 1 + \frac{\hbar^2 \beta^3}{24m} (V'(q_0))^2 - \frac{\hbar^2 \beta^2}{12m} V''(q_0) + O(\hbar^3) \right]. \quad (2.82)$$

On peut vérifier le résultat (2.82) en développant la fonction (2.37) de l'oscillateur harmonique avec  $V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$  pour  $q' = q'' = q$ ,  $\tau = \hbar\beta$  :

$$\langle q_0 | e^{-\beta H} | q_0 \rangle = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} e^{-\beta m\omega^2 q^2/2} \left[ 1 - \frac{1}{12}\omega^2 \beta^2 \hbar^2 + \frac{1}{24}m\omega^4 \beta^3 \hbar^2 q^2 + O(\hbar^4) \right].$$

Enfin, la fonction de partition prend la forme d'une intégrale simple correspondant à l'intégration sur  $q_0$  :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{Z}(\beta) &= \int dq \langle q | e^{-\beta H} | q \rangle \\
 &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} \int dq e^{-\beta V(q)} \left[ 1 + \frac{\hbar^2 \beta^3}{24m} (V'(q))^2 - \frac{\hbar^2 \beta^2}{12m} V''(q) + O(\hbar^3) \right] \\
 &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} \int dq e^{-\beta V(q)} \left[ 1 - \frac{\hbar^2 \beta^2}{24m} V''(q) + O(\hbar^3) \right] \\
 &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} \int dq \exp \left[ -\beta V(q) - \beta^2 \hbar^2 V''(q)/24m + O(\hbar^3) \right], \quad (2.83)
 \end{aligned}$$

où la deuxième expression est obtenue après intégration par parties du terme proportionnel à  $V'^2$ .

*Calcul alternatif.* Une façon alternative de faire ce calcul consiste à développer  $q(t)$  en série de Fourier sur la base des fonctions périodiques orthonormées sur l'intervalle  $[0, \beta]$  :

$$q(t) = q_0 + \delta q(t), \quad \delta q(t) = \sqrt{2/\beta} \sum_{n>0} [a_n \cos(2\pi n t/\beta) + b_n \sin(2\pi n t/\beta)].$$

Nous avons distingué le mode  $q_0$  parce qu'il disparaît dans la dérivée et n'est donc pas contraint par la limite  $\hbar \rightarrow 0$ . Au contraire les coefficients  $a_n$  et  $b_n$  et donc  $\delta q(t)$  sont d'ordre  $\hbar$ . Il est donc possible de développer le potentiel en puissance de  $\delta q(t)$  :

$$V(q(t)) = V(q_0) + \delta q(t) V'(q_0) + \frac{1}{2} (\delta q(t))^2 V''(q_0) + O((\delta q)^3).$$

Nous intégrons sur  $t$  et utilisons l'orthogonalité des fonctions de base. Nous voyons en particulier que le terme d'ordre  $\delta q$  s'annule. L'action devient alors

$$S(q)/\hbar = \beta V(q_0) + \sum_{n>0} (a_n^2 + b_n^2) \left[ \frac{2mn^2\pi^2}{\beta^2 \hbar^2} + \frac{1}{2} V''(q_0) \right] + O(a_n^3, a_n^2 b_n, \dots).$$

Ainsi que nous l'avons discuté dans l'exemple de l'intégrale gaussienne en section 2.7 (équation (2.63)), nous pouvons alors remplacer l'intégrale sur les chemins  $q(t)$  par l'intégrale sur les coefficients du développement de  $q(t)$ , ici sur  $q_0$  (ce mode n'est pas normalisé, mais le jacobien est une constante), et sur  $\{a_n, b_n\}$ . Les intégrales gaussiennes sur les coefficients  $a_n$  et  $b_n$  sont simples. Nous normalisons les intégrales en divisant par l'intégrale pour  $V''(q) \equiv 0$ . Dans ces conditions

$$\begin{aligned}
 \int da_n \exp \left[ - \left( \frac{2mn^2\pi^2}{\beta^2 \hbar^2} + \frac{1}{2} V''(q_0) \right) a_n^2 \right] &\propto \left[ 1 + \frac{\beta^2 \hbar^2}{4m\pi^2 n^2} V''(q_0) \right]^{-1/2} \\
 &\sim \exp \left[ - \frac{\beta^2 \hbar^2}{8m\pi^2 n^2} V''(q_0) \right].
 \end{aligned}$$

Sommant sur  $n$  (et utilisant  $\sum_n 1/n^2 = \pi^2/6$ ), on trouve la fonction de partition, à une normalisation près. La normalisation  $\mathcal{N}(\beta)$ , qui est indépendante du potentiel, peut être obtenue en remarquant qu'avant intégration sur  $q_0$ , ce que nous avons calculé est un élément diagonal de la matrice densité de la forme  $\langle q | e^{-\beta H} | q \rangle$ . Pour  $V \equiv 0$  il est donné par l'expression (2.78). On retrouve alors le résultat (2.83).

*Discussion.*

(i) La contribution dominante pour  $\hbar \rightarrow 0$  est la fonction de partition classique avec le poids de Boltzmann obtenu en intégrant sur  $p$  le poids de Boltzmann dans l'espace de phase  $e^{-\beta H(p,q)}$ , où  $H$  est l'hamiltonien classique. En effet, pour le hamiltonien  $H = p^2/2m + V(q)$ , les deux formes de  $\mathcal{N}(\beta)$  dans les équations (2.78), conduisent à l'identité

$$\mathcal{Z}_{\text{cl.}}(\beta) = \int \frac{dpdq}{2\pi\hbar} e^{-\beta H(p,q)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} \int dq e^{-\beta V(q)}. \quad (2.84)$$

(ii) Introduisant une longueur d'onde thermique

$$\lambda_{\text{th.}} = \hbar \sqrt{\beta/m},$$

et une échelle typique des variations du potentiel (que nous supposons caractérisé par une seule échelle)

$$l_{\text{pot.}} = \sqrt{|\langle V(q) \rangle / \langle V''(q) \rangle|},$$

nous voyons que le rapport entre le terme classique et la première correction quantique peut être caractérisé par le rapport  $\lambda_{\text{th.}}/l_{\text{pot.}}$ . À haute température  $T = 1/\beta$ , et donc  $\beta$  petit, la longueur thermique est faible et le comportement statistique est classique. Au contraire, à basse température les effets quantiques finissent par devenir dominants.

Dans cette analyse, nous avons supposé implicitement que le potentiel est suffisamment régulier, en fait au moins deux fois dérivable. Les potentiels idéalisés, du genre puits carré, qu'on utilise parfois en mécanique quantique, exigent une étude particulière.

(iii) Nous observons que, du point de vue formel, le passage à la limite classique conduit à un phénomène de réduction dimensionnelle. La fonction de partition quantique correspond à une intégrale sur des chemins, c'est-à-dire à des objets unidimensionnels. La fonction classique se réduit à une intégrale sur le mode zéro (au sens des séries de Fourier), qui est un point, et donc de dimension zéro.

## 2.11 Intégrale de chemin et principe variationnel

*Inégalité de convexité.* De nombreux principes variationnels en physique sont basés sur la propriété de convexité de la fonction exponentielle, qui dans

sa forme la plus simple s'écrit

$$e^{(x_1+x_2)/2} \leq \frac{1}{2} (e^{x_1} + e^{x_2}).$$

De façon plus générale, notons par  $\langle \bullet \rangle$  la moyenne de  $\bullet$  par rapport à une mesure positive normalisée. Alors, pour toute fonction  $F$ , on obtient l'inégalité de convexité

$$e^{\langle F \rangle} \leq \langle e^F \rangle \Leftrightarrow \langle F \rangle \leq \ln \langle e^F \rangle.$$

Nous allons appliquer cette inégalité au cas où la mesure est gaussienne et  $F$  un polynôme dont la valeur moyenne se calcule donc par le théorème de Wick.

*Principe variationnel.* Supposons que nous voulions estimer l'intégrale sur  $\mathbb{R}^n$  :

$$\mathcal{Z} = \int d^n x e^{-V(\mathbf{x})},$$

où  $V(\mathbf{x})$  est un polynôme dans les variables  $x_i$ . Nous introduisons la mesure gaussienne normalisée  $e^{-A(\mathbf{x})}/\mathcal{Z}_0$ , où la fonction  $A(\mathbf{x})$  est un polynôme du second degré :

$$A(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n x_i A_{ij} x_j - \sum_{i=1}^n b_i x_i. \quad (2.85)$$

Nous choisissons

$$F(\mathbf{x}) = A(\mathbf{x}) - V(\mathbf{x}).$$

Nous trouvons alors

$$\frac{1}{\mathcal{Z}_0} \int d^n x (A(\mathbf{x}) - V(\mathbf{x})) e^{-A(\mathbf{x})} \leq \ln \int d^n x e^{-V(\mathbf{x})} - \ln \mathcal{Z}_0,$$

qui peut se réécrire

$$\begin{aligned} \ln \mathcal{Z} &\geq \ln \mathcal{Z}_0 + \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \int d^n x (A(\mathbf{x}) - V(\mathbf{x})) e^{-A(\mathbf{x})} \\ &\geq \ln \mathcal{Z}_0 + \frac{n}{2} - \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \int d^n x V(\mathbf{x}) e^{-A(\mathbf{x})}. \end{aligned} \quad (2.86)$$

De cette inégalité, on tire un principe variationnel dans la mesure où la matrice  $\mathbf{A}$  et le vecteur  $\mathbf{b}$  sont arbitraires : la meilleure approximation de l'intégrale  $\mathcal{Z}$  est obtenue en cherchant le maximum du membre de droite sur tout  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{b}$ . Comme le membre de droite peut se calculer explicitement par le théorème de Wick, ce problème est purement algébrique.

*Intégrale de chemin.* Nous considérons la fonction de partition ( $\hbar = 1$ )

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int [dq(t)] \exp[-\mathcal{S}(q)], \quad (2.87)$$

où les chemins maintenant satisfont à des conditions aux limites périodiques :  $q(0) = q(\beta)$  et (équation (2.39))

$$\mathcal{S}(q) = \int_0^\beta dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{q}^2(t) + V(q(t)) \right]. \quad (2.88)$$

Nous choisissons la mesure gaussienne correspondant à

$$\mathcal{S}_0(q) = \frac{m}{2} \int_0^\beta dt \left[ \dot{q}^2(t) + \omega^2 (q(t) - q_0)^2 \right],$$

où  $\omega$  et  $q_0$  sont deux paramètres variationnels. La quantité  $F$  est ici

$$F(q) = \int_0^\beta dt \left[ \frac{1}{2} m \omega^2 (q(t) - q_0)^2 - V(q(t)) \right].$$

Il est commode ici de changer  $q(t) - q_0$  en  $q(t)$ . En terme de la fonction de partition  $\mathcal{Z}_0$  de l'oscillateur harmonique (équation (2.55)), l'inégalité de convexité s'écrit alors

$$\ln \mathcal{Z}(\beta) \geq \ln \mathcal{Z}_{\text{var.}}(\beta)$$

avec

$$\begin{aligned} \ln \mathcal{Z}_{\text{var.}}(\beta) &= \ln \mathcal{Z}_0(\beta) + \int_0^\beta dt \langle \left[ \frac{1}{2} m \omega^2 q^2(t) - V(q(t) + q_0) \right] \rangle_0 \\ &= \ln \mathcal{Z}_0(\beta) + \frac{1}{4} \omega \beta \coth \left( \frac{\omega \beta}{2} \right) - \int_0^\beta dt \langle V(q(t) + q_0) \rangle_0, \end{aligned} \quad (2.89)$$

où  $\langle \bullet \rangle_0$  signifie valeur moyenne par rapport à la mesure gaussienne associée à l'oscillateur harmonique, et la fonction à deux points est donnée par les expressions (2.51, 2.46).

On remarque que l'inégalité s'exprime naturellement en terme de l'énergie libre qui est proportionnelle à  $\ln \mathcal{Z}$ .

Le cas particulier

$$V(q) = \frac{1}{2} m \nu^2 q^2,$$

permet une vérification élémentaire de la méthode. Pour des raisons de symétrie on peut se limiter à  $q_0 = 0$ . Dans ces conditions, la fonction de partition variationnelle dans le second membre devient

$$\ln \mathcal{Z}_{\text{var.}} = - \ln \sinh s + \frac{\cosh s}{2 \sinh s} \left( s - \frac{\beta^2 \nu^2}{4s} \right),$$

où nous avons posé  $s = \omega \beta / 2$ . Dérivant, on vérifie que le maximum est atteint pour  $s = \beta \nu / 2$ , et on trouve alors le résultat exact.

Un exemple plus intéressant est fourni par le potentiel

$$V(q) = \frac{1}{4!} gm^2 q^4.$$

On trouve toujours  $q_0 = 0$  par parité. Comme la solution des équations pour  $\beta$  quelconque est un peu compliquée, considérons la limite  $\beta \rightarrow \infty$  qui donne le fondamental du hamiltonien correspondant. Alors

$$\begin{aligned} E_{\text{var.}} &= - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}_{\text{var.}} \\ &= \frac{\omega}{4} + \frac{g}{32\omega^2}. \end{aligned}$$

La valeur variationnelle fournit maintenant une borne supérieure à l'énergie  $E$  du fondamental. Son minimum est donné par  $\omega = (g/4)^{1/3}$ , et on trouve

$$E \leq \frac{3}{8} \left( \frac{g}{4} \right)^{1/3},$$

ce qui fournit une borne et une estimation de l'énergie qui ne peut évidemment pas être obtenue par la théorie des perturbations puisque le potentiel est quartique au voisinage du minimum.

Notons, cependant, que comme d'habitude, les méthodes variationnelles peuvent fournir de très bonnes estimations, mais qu'il est ensuite difficile de les améliorer.

## Exercices

*Exercice 2.1.*

*Fonction de partition.* Reproduire le calcul de la section 2.7 avec la forme discrète (2.58) de l'action.

*Exercice 2.2.*

*Le puits carré.* Utiliser le résultat obtenu pour l'opérateur statistique  $e^{-\beta H}$  de l'oscillateur harmonique pour retrouver le spectre du puits carré attractif  $H = p^2/2 + \mathcal{V}(x)$ , avec

$$\mathcal{V}(x) = 0 \text{ pour } |x| > a/2, \quad \mathcal{V}(x) = V < 0 \text{ pour } |x| < a/2,$$

(exercice exigeant un peu de réflexion).

*Solution.* L'idée est de calculer le déterminant  $D(V, E)$  de l'opérateur  $H - E$ , dont les zéros donnent le spectre. Celui-ci peut être calculé par une intégrale de chemin gaussienne

$$\begin{aligned} D^{-1/2}(V, E) &\propto \int [dq(x)] \exp[-\mathcal{S}(q)], \\ \mathcal{S}(q) &= \int dx \left[ \frac{1}{2} (q'(x))^2 + (\mathcal{V}(x) - E) q^2(x) \right]. \end{aligned}$$

Cette intégrale gaussienne peut être évaluée explicitement de plusieurs façons. Une méthode est la suivante. D'abord il est commode de considérer l'intégrale comme la limite pour  $\beta \rightarrow \infty$  de la fonction de partition en temps euclidien  $\beta$  (c'est-à-dire température  $1/\beta$ ), qui est obtenue en imposant des conditions aux limites périodiques  $q(-\beta/2) = q(\beta/2)$  :

$$D^{-1/2}(V, E) \propto \lim_{\beta \rightarrow \infty} \text{tr} U(\beta)$$

avec

$$\langle q'' | U(\beta) | q' \rangle = \int_{q(-\beta/2)=q'}^{q(\beta/2)=q''} [dq(x)] \exp[-\mathcal{S}(q)].$$

Nous découpons alors l'intervalle  $[-\beta/2, \beta/2]$  en trois sous-intervalles dans lesquels le potentiel est constant :  $[-\beta/2, -a/2]$ ,  $[-a/2, a/2]$ ,  $[a/2, \beta/2]$ . Nous écrivons ensuite  $U(\beta)$  comme le produit des opérateurs statistiques correspondants à ces différents intervalles. Dans chaque intervalle, l'intégrale de chemin correspond à l'opérateur statistique d'un oscillateur harmonique. Pour ce qui suit nous introduisons la notation

$$-E = \frac{1}{2}\omega_1^2, \quad V - E = \frac{1}{2}\omega_2^2.$$

Appelons  $U_1$  et  $U_2$  les opérateurs correspondant à  $\omega_1$  et  $\omega_2$ , respectivement. Alors

$$\text{tr} U(\beta) = \text{tr} U_1(\beta/2 - a/2) U_2(a) U_1(\beta/2 - a/2) = \text{tr} U_1(\beta - a) U_2(a),$$

où nous avons utilisé la cyclicité de la trace. Dans la limite  $\beta \rightarrow \infty$ , l'opérateur  $U_1$  devient un projecteur sur l'état fondamental de l'oscillateur correspondant :

$$\text{tr} U(\beta) \underset{\beta \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{\omega_1}{\pi}} e^{-\omega_1(\beta-a)/2} \int dq' dq'' e^{-\omega_1 q'^2/2} e^{-\omega_1 q''^2/2} \langle q'' | U_2(a) | q' \rangle.$$

Il ne reste plus qu'à utiliser le résultat explicite (2.33) et à effectuer les deux intégrations gaussiennes sur  $q'$  et  $q''$ . On trouve

$$\text{tr} U(\beta) \underset{\beta \rightarrow \infty}{\sim} \left( \frac{2\omega_1\omega_2}{\sinh(a\omega_2)} \right)^{1/2} (\omega_1^2 + \omega_2^2 + 2\omega_1\omega_2 \coth(a\omega_2))^{-1/2} e^{-\omega_1(\beta-a)/2}.$$

Pour obtenir un résultat qui a une limite finie, il faut normaliser le déterminant en le divisant par sa valeur en l'absence de potentiel. On en déduit

$$e^{a\omega_1} D(V, E)/D(0, E) = \cosh(a\omega_2) + \frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2\omega_1\omega_2} \sinh(a\omega_2).$$

Nous avons fait le calcul avec  $V - E > 0$ . Le déterminant ne peut s'annuler que si  $E > V$ . Nous posons donc  $\omega_2 = i\kappa_2$ . L'équation qui donne l'énergie des états liés peut alors s'écrire

$$\tan(a\kappa_2) = \frac{2\omega_1\kappa_2}{\omega_1^2 - \kappa_2^2},$$

une équation qu'il est facile de retrouver en résolvant directement le puits carré et en combinant les deux équations correspondant aux fonctions d'onde paires et impaires.

# Chapitre 3

## Fonction de partition et spectre d'hamiltonien

UNE DES APPLICATIONS DIRECTES du calcul de la fonction de partition est la détermination du spectre d'un hamiltonien (que nous supposons pour simplifier purement discret). En effet

$$\mathcal{Z}(\beta) = \text{tr} e^{-\beta H} = \sum_{k=0} e^{-\beta E_k}.$$

En particulier

$$E_0 = \lim_{\beta \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}(\beta).$$

C'est ce que nous allons illustrer en mettant en œuvre les différentes méthodes de calcul de l'intégrale de chemin introduites au chapitre 2.

Notons cependant que nous n'allons considérer que des situations où les valeurs propres de l'hamiltonien ne sont pas dégénérées. Les cas de dégénérescence, qui en général correspondent à des symétries de l'hamiltonien, exigent une analyse plus détaillée.

### 3.1 Calcul perturbatif

La théorie des perturbations introduite en section 2.8 permet d'obtenir le développement perturbatif du niveau fondamental, et plus généralement des niveaux de nombre quantique fini, correspondant à tout potentiel qui peut être décomposé dans la somme d'un potentiel harmonique et d'une perturbation régulière. En effet, considérons un potentiel de la forme (2.66) (nous faisons ici  $m = 1$ )

$$V(q) = \frac{1}{2}\omega^2 q^2 + V_1(q).$$

Pour  $V_I$  petit, les niveaux d'énergie  $E_k$  sont proches de ceux de l'oscillateur harmonique :

$$E_k = (k + \frac{1}{2})\omega\hbar + \delta E_k.$$

Le développement de la fonction de partition va donc prendre la forme

$$\mathcal{Z}(\beta) = \sum_{k=0} e^{-(k+1/2)\beta\omega\hbar} [1 - \beta\delta E_k + O(\beta^2(\delta E_k)^2)].$$

Nous voyons que les corrections perturbatives aux niveaux d'énergie peuvent être obtenues de la manière suivante : on calcule perturbativement en puissances de  $V_I$  la fonction de partition. On développe chaque terme pour  $\beta$  grand, et on extrait le coefficient de  $-\beta e^{-(k+1/2)\beta\omega\hbar}$ .

*Exemple.* Soit le potentiel

$$V(q) = \frac{1}{2}q^2 + \frac{\lambda}{4!}q^4.$$

Cet exemple est algébriquement analogue à celui traité en section 1.3.

La fonction de partition à l'ordre  $\lambda$  est donnée par (dans ce calcul nous posons  $\hbar = 1$ )

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\beta) &= \mathcal{Z}_0(\beta) \left[ 1 - (\lambda/24) \int_0^\beta dt \langle q^4(t) \rangle_0 + O(\lambda^2) \right] \\ &= \mathcal{Z}_0(\beta) [1 - (\lambda/24) \times 3 \times \beta \Delta^2(0)] + O(\lambda^2) \\ &= \frac{1}{2 \sinh(\beta/2)} [1 - \beta(\lambda/32) (\coth^2(\beta/2))] + O(\lambda^2), \end{aligned} \quad (3.1)$$

où nous avons utilisé le résultat (2.46).

On vérifie les deux identités algébriques

$$\sum_{k=0}^{\infty} \exp[-(k + \frac{1}{2})\beta] = 1/[2 \sinh(\beta/2)]$$

et, dérivant deux fois par rapport à  $\beta$ ,

$$\sum_{k=0}^{\infty} (k + \frac{1}{2})^2 \exp[-(k + \frac{1}{2})\beta] = \frac{2 \coth^2(\beta/2) - 1}{8 \sinh(\beta/2)}.$$

Posant

$$E_k = (k + \frac{1}{2}) + \lambda\delta E_k + O(\lambda^2),$$

on trouve pour la fonction de partition

$$\mathcal{Z}(\beta) = \sum_{k=0} \exp[-(k + \frac{1}{2} + \lambda\delta E_k)\beta] = \frac{1}{2 \sinh(\beta/2)} - \beta\lambda \sum_{k=0} \delta E_k e^{-(k+1/2)\beta}.$$

Identifiant le coefficient de  $\lambda$ , on en déduit

$$E_k = k + \frac{1}{2} + \frac{1}{16}\lambda(k^2 + k + \frac{1}{2}) + O(\lambda^2).$$

On remarque que si l'on ne s'intéresse qu'au niveau fondamental, on peut négliger tous les termes qui décroissent exponentiellement pour  $\beta \rightarrow \infty$ , et les expressions se simplifient beaucoup :

$$\mathcal{Z}(\beta) \sim e^{-\beta E_0} = e^{-\beta/2} \left(1 - \frac{1}{32}\beta\lambda\right) + O(\lambda^2).$$

À l'ordre suivant, on trouve (cf. équation (1.25))

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\beta)/\mathcal{Z}_0(\beta) &= 1 - \frac{1}{8}\lambda\beta\Delta^2(0) + \frac{1}{128}\lambda^2\beta^2\Delta^4(0) + \frac{1}{16}\beta\lambda^2\Delta^2(0) \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \Delta^2(t) \\ &+ \frac{1}{48}\lambda^2\beta \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \Delta^4(t) + O(\lambda^3), \end{aligned} \quad (3.2)$$

où la périodicité de  $\Delta(t)$  a été utilisée. Prenant le logarithme (qui correspond à l'énergie libre), on vérifie que le terme non connexe disparaît (section 1.3) :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}(\beta) + \frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}_0(\beta) &= \frac{1}{8}\lambda\Delta^2(0) - \frac{1}{16}\lambda^2\Delta^2(0) \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \Delta^2(t) \\ &- \frac{1}{48}\lambda^2 \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \Delta^4(t) + O(\lambda^3), \end{aligned} \quad (3.3)$$

Pour  $\beta \rightarrow \infty$ , on peut remplacer la fonction  $\Delta$  par sa forme asymptotique (2.47) car les corrections sont exponentiellement petites. De plus, on peut intégrer sur  $t \in (-\infty, +\infty)$  avec de nouveau des erreurs exponentielles car  $\Delta(t)$  décroît exponentiellement pour  $t \rightarrow \infty$ . L'expression initiale pour  $\mathcal{Z}(\beta)$  contenait des termes d'ordre  $\beta$  et d'ordre  $\beta^2$ . Le terme proportionnel à  $\beta^2$  correspondait à une contribution non connexe. Dans le logarithme, les termes en  $\beta^2$  se sont compensés de sorte que l'expression obtenue a une limite pour  $\beta \rightarrow \infty$ .

On en déduit

$$E_0 = \frac{1}{2} + \frac{1}{32}\lambda - \frac{7}{1536}\lambda^2 + O(\lambda^3).$$

Soulignons toutefois que l'intégrale de chemin ne fournit pas la méthode la plus efficace pour calculer des ordres élevés en  $\lambda$  dans le cas particulier d'un système à une particule en mécanique quantique. En général il vaut mieux partir de l'équation de Schrödinger et la transformer en équation de Riccati.

*Développement en puissances de  $\hbar$ .* Nous avons noté en section 2.9 que quand le potentiel  $V_1$  n'est pas un simple monôme, il est possible de définir deux types de développements, en puissances de  $V_1$  ou en puissances de  $\hbar$ . Examinons ici comment ces développements se traduisent pour les niveaux d'énergie.

Le point de départ est maintenant le développement en puissances de  $\hbar$  par la méthode du col de

$$\mathcal{Z}(\tau/\hbar) = \int_{q(-\tau/2)=q(\tau/2)} [dq(t)] \exp[-\mathcal{S}(q)/\hbar] \quad (3.4)$$

avec

$$\mathcal{S}(q) = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \left[ \frac{1}{2} m \dot{q}^2(t) + V(q(t)) \right] dt. \quad (3.5)$$

Nous supposons que le potentiel  $V$  a un minimum absolu et non dégénéré à  $q = 0$  où il s'annule, de sorte que l'intégrale de chemin est dominée pour  $\hbar \rightarrow 0$  par le col  $q(t) \equiv 0$ . Elle peut donc être calculée en développant l'intégrand en puissances des termes du potentiel de degré plus grand que deux et intégrant terme à terme. Ceci conduit à un développement de  $\mathcal{Z}(\tau/\hbar)$  en puissances de  $\hbar$ , et donc, en développant ensuite pour  $\tau \rightarrow \infty$ , des niveaux d'énergie.

Puisque  $E_N$ , la  $(N + 1)$ ième valeur propre de  $H$ , satisfait

$$E_N = (N + \frac{1}{2})\omega\hbar + O(\hbar^2),$$

le développement perturbatif prend la forme

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\tau/\hbar) &= \sum_{N=0} e^{-\tau E_N/\hbar} \\ &= \sum_{N=0} e^{-(N+1/2)\omega\tau} \sum_{k=0} \frac{1}{k!} (-\tau)^k \left( E_N/\hbar - (\frac{1}{2} + N)\omega \right)^k. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Nous en déduisons que le coefficient de  $\hbar^k$  est un polynôme de degré  $k$  en  $\tau$ , que  $E_N$  peut être calculé à partir du coefficient de  $e^{-(N+1/2)\omega\tau}$ .

*Remarque.* Notons la différence entre le développement perturbatif et le développement semi-classique ou BKW que nous allons décrire en section 3.2.1. Le développement perturbatif s'applique aux niveaux dont l'énergie tend vers le minimum du potentiel quand  $\hbar \rightarrow 0$ . Au contraire, le développement BKW (cf. section 2.10) est valable pour des niveaux dont l'énergie ne tend pas vers le minimum du potentiel quand  $\hbar \rightarrow 0$ , ce qui correspond à une énergie classique finie. L'ordre  $k$  du niveau tend alors nécessairement vers l'infini.

## 3.2 Développement semi-classique ou BKW

Nous allons montrer dans cette section comment calculer le spectre d'un hamiltonien dans la limite semi-classique ou BKW, à partir du développement semi-classique de la fonction de partition obtenue en section 2.10.

### 3.2.1 Spectre et pôles de la résolvante

Nous supposons de nouveau que l'hamiltonien a un spectre discret, et donc la fonction de partition s'écrit

$$\mathcal{Z}(\beta) = \text{tr} e^{-\beta H} = \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\beta E_k},$$

avec  $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$

La transformée de Laplace de  $\mathcal{Z}(\beta)$ , qui est aussi la trace de la résolvante de  $H$ , est alors

$$G(E) = \int_0^{\infty} d\beta e^{\beta E} \mathcal{Z}(\beta) = \text{tr} \frac{1}{H - E} = \sum_k \frac{1}{E_k - E}, \quad (3.7)$$

où le résultat de droite est obtenu par prolongement analytique dans tout le plan complexe à partir des valeurs de la variable d'énergie telle que  $\text{Re } E < E_0$ . Le spectre de l'hamiltonien est donc donné par les pôles de  $G(E)$ .

Notons que la somme sur les  $E_k$  ne converge pas toujours. Cette difficulté se signale par une divergence de l'intégrale (3.7) pour  $\beta \rightarrow 0$ . On procède alors de la manière suivante : on dérive l'intégrant un certain nombre de fois par rapport à  $E$  jusqu'à ce que l'intégrale converge. On obtient ainsi

$$G^{(m)}(E) = \int_0^{\infty} d\beta e^{\beta E} \beta^m \mathcal{Z}(\beta) = m! \sum_k \frac{1}{(E_k - E)^m}.$$

On définit alors  $G(E)$  en intégrant sur  $E$   $m$  fois. Différentes définitions de  $G(E)$  diffèrent par un polynôme de degré  $m - 1$  en  $E$ . Elles ont donc les mêmes pôles avec les mêmes résidus.

Pour la suite, il est utile d'introduire la primitive de  $G(E)$  :

$$L(E) = \int^E G(E') dE' = - \sum_{k=0} \ln(E_k - E) + \text{polynôme}(E). \quad (3.8)$$

Dans l'expression de  $L(E)$ , nous supposons que la fonction  $\ln z$  est coupée sur l'axe réel négatif.

Notons que la fonction

$$\mathcal{D}(E) = e^{-L(E)}$$

s'annule sur le spectre de  $H$  et est donc une version régularisée du déterminant de Fredholm  $\det(H - E)$ .

Calculons maintenant la limite ( $\varepsilon$  réel positif)

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0_+} L(E_k + i\varepsilon) - L(E_k - i\varepsilon).$$

Pour toutes les singularités correspondant à  $E_\ell$ ,  $0 \leq \ell < k$ , on trouve la discontinuité  $2i\pi$  de la fonction logarithme. Pour la singularité  $E = E_k$  :

$$\ln(E_k - E + i\varepsilon) - \ln(E_k - E - i\varepsilon)|_{E=E_k} = \ln(i\varepsilon) - \ln(-i\varepsilon) = i\pi.$$

On en conclut

$$\frac{1}{2i\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0_+} L(E_k + i\varepsilon) - L(E_k - i\varepsilon) = k + \frac{1}{2}. \quad (3.9)$$

C'est de cette expression que nous allons nous servir pour déterminer le spectre dans l'approximation semi-classique.

### 3.2.2 Approximation semi-classique

Nous nous limitons dans ce qui suit à des systèmes unidimensionnels, avec un hamiltonien de la forme

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + V(q).$$

Nous approximons maintenant la fonction de partition

$$\mathcal{Z}(\beta) = \text{tr} e^{-\beta H}$$

par la fonction de partition classique  $\mathcal{Z}_{\text{cl.}}(\beta)$ , terme dominant du développement semi-classique (2.83) :

$$\mathcal{Z}_{\text{cl.}}(\beta) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} \int dq e^{-\beta V(q)}.$$

Nous trouvons

$$G_{\text{cl.}}(E) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{m/2} \int dq [V(q) - E]^{-1/2},$$

où les problèmes de convergence éventuels pour  $\beta \rightarrow 0$  sont transformés en problèmes à  $|q| \rightarrow \infty$ .

Nous avons choisi de couper la fonction  $\sqrt{z}$  sur l'axe réel négatif ( $\sqrt{z \pm i\varepsilon} = \pm i\sqrt{-z}$  pour  $z$  réel négatif).

Nous observons qu'au lieu de pôles, la fonction  $G_{\text{cl.}}(E)$  a une coupure sur l'axe réel à droite du minimum de  $V(q)$ . Ceci se comprend de la manière suivante : dans cette approximation semi-classique,  $\hbar \rightarrow 0$  mais l'énergie  $E$  reste finie ce qui implique que le nombre quantique  $k$  tend vers l'infini. Par contre, les différences  $E_{k+1} - E_k$  tendent vers zéro, ce qui explique que le spectre limite soit continu.

Une intégration donne la primitive (3.8) :

$$L_{\text{cl.}}(E) = \int^E dE' G_{\text{cl.}}(E') = -\frac{1}{\hbar} \int dq \sqrt{2m[V(q) - E]}.$$

On en déduit la discontinuité

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0_+} L_{\text{cl.}}(E + i\varepsilon) - L_{\text{cl.}}(E - i\varepsilon) = \frac{2i}{\hbar} \int dq \theta[E - V(q)] \sqrt{2m[E - V(q)]},$$

où  $\theta(x)$  est la fonction saut ( $\theta(x > 0) = 1$ ,  $\theta(x < 0) = 0$ ). L'équation (3.9) se réduit donc à la condition de quantification de Bohr-Sommerfeld :

$$\int dq \theta(E_k - V(q)) \sqrt{2m[E_k - V(q)]} = \hbar\pi(k + \frac{1}{2}). \quad (3.10)$$

*Remarques.*

(i) Un calcul alternatif est basé sur l'expression (2.84). On trouve alors

$$G_{\text{cl.}}(E) = \int \frac{dp dq}{2\pi\hbar} \frac{1}{H(p, q) - E},$$

où  $H$  est l'hamiltonien classique :  $H(p, q) = p^2/2m + V(q)$ . L'intégrale de contour sur  $E$  donne 0 ou 1 suivant que les valeurs de  $H$  sont à l'extérieur ou intérieur du contour. On en déduit une forme équivalente de l'équation (3.10) :

$$\int \frac{dp dq}{2\pi\hbar} \theta(E - H(p, q)) = k + \frac{1}{2}.$$

(ii) Le membre de gauche de l'équation (3.10) étant fini pour  $\hbar \rightarrow 0$ , nous vérifions en effet que cette approximation est une approximation de grands nombres quantiques  $E_k = O(1)$ ,  $k\hbar = O(1)$ , alors que la distance entre deux énergies propres tend vers zéro avec  $\hbar$ . Ceci est en accord avec le domaine de validité de l'approximation (2.83) dont nous avons vu que c'était une approximation de haute température où les quantités physiques sont dominées par les valeurs propres grandes.

*Première correction.* Les termes suivants du développement semi-classique de la fonction de partition corrigent ce résultat. Par exemple, à l'ordre  $\hbar^2$  nous avons trouvé (équation (2.83))

$$\mathcal{Z}(\beta) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} \int dq e^{-\beta V(q)} [1 - \beta^2 \hbar^2 V''(q)/24m + O(\hbar^4)].$$

Nous pouvons utiliser

$$\beta^2 e^{\beta E} = \left( \frac{\partial}{\partial E} \right)^2 e^{\beta E}.$$

La première correction à  $G_{\text{cl.}}(E)$  peut alors s'écrire

$$G^{(1)}(E) = -\frac{\hbar^2}{24m} \frac{\sqrt{m/2}}{\hbar} \left( \frac{\partial}{\partial E} \right)^2 \int dq V''(q) [V(q) - E]^{-1/2}.$$

Une primitive de  $G^{(1)}(E)$  est donnée par

$$L^{(1)}(E) = \int^E dE' G^{(1)}(E') = -\frac{\hbar^2}{24m} \frac{\sqrt{m/2}}{\hbar} \frac{\partial}{\partial E} \int dq V''(q) [V(q) - E]^{-1/2}.$$

On en déduit la discontinuité de  $L^{(1)}(E)$  sur l'axe réel :

$$L^{(1)}(E+i0) - L^{(1)}(E-i0) = \frac{i\hbar}{12\sqrt{2m}} \frac{\partial}{\partial E} \int dq \theta(E-V(q)) V''(q) [E-V(q)]^{-1/2}$$

et, donc, la première correction à la formule de Bohr-Sommerfeld (3.10).

Remarquons qu'on ne peut pas dériver directement l'intégrant par rapport à  $E$ . En effet, si  $E - V(q)$  s'annule linéairement, la singularité de  $[E - V(q)]^{-3/2}$  n'est pas intégrable.

### 3.2.3 Exemples

*L'oscillateur harmonique.* Dans l'exemple du potentiel harmonique  $V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$ , la fonction  $G(E)$  définie par l'équation (3.7) n'existe pas puisque la somme sur  $n$  ne converge pas. Par contre la fonction  $G'(E)$  a un développement convergent :

$$G'(E) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(\hbar\omega(n+1/2) - E)^2} = \frac{1}{\hbar^2\omega^2} \psi'(1/2 - E/\hbar\omega),$$

où  $\psi(z)$  est la dérivée logarithmique de la fonction  $\Gamma(z)$ . Dans ces conditions on peut choisir

$$G(E) = -\frac{1}{\hbar\omega} \psi(1/2 - E/\hbar\omega) \quad \Rightarrow \quad L(E) = \ln \Gamma(1/2 - E/\hbar\omega). \quad (3.11)$$

Évaluons alors les premiers du développement semi-classique dans ce cas. Après un changement de variables simples, la fonction  $G_{\text{cl.}}(E)$  devient formellement

$$G_{\text{cl.}}(E) = \frac{1}{\hbar\omega} \int \frac{dx}{(x^2 - E)^{1/2}}.$$

Cette intégrale ne converge pas pour  $|x| \rightarrow \infty$ . Il faut dériver une fois par rapport à  $E$ , ce qui donne

$$G'_{\text{cl.}}(E) = \frac{1}{2\hbar\omega} \int \frac{dx}{(x^2 - E)^{3/2}} = -\frac{1}{\hbar\omega E}.$$

Des primitives possibles sont

$$G_{\text{cl.}}(E) = -\frac{1}{\hbar\omega} \ln(-E/\hbar\omega), \quad L_{\text{cl.}}(E) = -\frac{E}{\hbar\omega} [\ln(-E/\hbar\omega) - 1].$$

La discontinuité de  $\ln(-E)$  sur sa coupure est  $2i\pi$  et donc à l'ordre semi-classique dominant

$$E_k = \hbar\omega(k + \frac{1}{2}),$$

ce qui se trouve être identique au résultat exact. Il s'agit là d'une propriété caractéristique de l'oscillateur harmonique quantique.

La première correction à  $G(E)$  est facilement déduite des résultats précédents et l'on trouve

$$G^{(1)}(E) = -\hbar\omega \frac{1}{24E^2} \quad \Rightarrow \quad L^{(1)}(E) = \hbar\omega \frac{1}{24E}.$$

Ces formes peuvent être vérifiées à partir du résultat exact (3.11) en remplaçant la fonction  $\psi(z)$  par l'approximation déduite de l'approximation de Stirling pour la fonction  $\Gamma(z)$  :

$$\psi(z + 1/2) = \ln z + 1/24z^2 + O(1/z^4), \quad \text{pour } |\text{Arg}z| < \pi.$$

Mais la fonction  $L^{(1)}(E)$  n'a pas de discontinuité et ne contribue donc pas au spectre. Ce résultat se généralise à tous les ordres, ce qui explique pourquoi la formule de Bohr-Sommerfeld à l'ordre dominant est exacte pour l'oscillateur harmonique.

*Autre exemple.* Considérons le potentiel homogène  $V(q) = q^{2N}$  et posons  $\hbar = m = 1$ . Nous trouvons alors à l'ordre dominant

$$E_k = [C_N(k + \frac{1}{2})]^{2N/(N+1)}, \quad C_N = \frac{\pi N \Gamma(3/2 + 1/2N)}{\sqrt{2} \Gamma(3/2) \Gamma(1/2N)}.$$

Ce résultat reflète la propriété que le terme dominant dans l'équation (3.9) est proportionnel à  $E^{1/2+1/2N}$ . La correction est proportionnelle à  $E^{-1/2-1/2N}$ . Le développement semi-classique du membre de droite de (3.9) dans ce cas est aussi un développement pour  $E \rightarrow \infty$ .

### 3.2.4 Approximation BKW et équation de Schrödinger

À titre de comparaison, nous expliquons comment les mêmes résultats peuvent être obtenus à partir de l'équation de Schrödinger. C'est pour des potentiels analytiques que l'analyse est la plus complète. Nous supposons donc que le potentiel  $V(x)$  est analytique dans une bande autour de l'axe réel  $|\text{Im}x| < \delta$ . En conséquence les fonctions d'onde sont aussi analytiques.

Nous partons de l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x). \quad (3.12)$$

Cette équation peut être exprimée en terme de la dérivée logarithmique de  $\varphi(x)$ . Nous posons

$$\frac{\varphi'(x)}{\varphi(x)} = -\frac{S(x)}{\hbar}, \quad (3.13)$$

ce qui entraîne

$$\frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} = \frac{S^2(x)}{\hbar^2} - \frac{S'(x)}{\hbar}. \quad (3.14)$$

L'équation de Schrödinger se transforme alors en équation de Riccati :

$$\hbar S'(x) - S^2(x) + U(x) = 0, \quad U(x) = 2m[V(x) - E]. \quad (3.15)$$

Cette équation peut être développée systématiquement en puissances de  $\hbar$ , à  $E$  fixé, avec à l'ordre dominant  $S(x) = U^{1/2}(x)$ . Il est commode de décomposer  $S(x)$  en parties paire et impaire en  $\hbar$ , posant

$$S(x, \hbar) = S_+(x, \hbar) + S_-(x, \hbar), \quad S_{\pm}(x, -\hbar) = \pm S_{\pm}(x, \hbar). \quad (3.16)$$

L'équation de Riccati se décompose en

$$\hbar S'_- - S_+^2 - S_-^2 + U = 0, \quad (3.17)$$

$$\hbar S'_+ - 2S_+S_- = 0, \quad (3.18)$$

où à l'ordre dominant  $S_+ = U^{1/2}$  et  $S_- = 0$ . La deuxième équation permet d'exprimer la fonction propre  $\varphi$  en terme de  $S_+$  seulement :

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{S_+(x)}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' S_+(x') \right]. \quad (3.19)$$

On démontre par ailleurs que la fonction propre associée au  $k$ ième état excité s'annule exactement  $k$  fois. Le spectre peut donc être déterminé par la condition

$$\frac{1}{2i\pi} \oint_C dz \frac{\varphi'(z)}{\varphi(z)} = k, \quad (3.20)$$

où  $k$  est le nombre de nœuds de la fonction propre et  $C$  un contour complexe qui les entoure.

Cette équation se réécrit

$$-\frac{1}{2i\pi\hbar} \oint_C dz S(z) = k.$$

Dans la limite semi-classique,  $C$  entoure la coupure de  $U^{1/2}(x)$  qui joint les deux points tournants solutions de  $U(x) = 0$ . La contribution de  $S_-$  peut être évaluée explicitement, au moins à tous les ordres en  $\hbar$ . On vérifie en effet que seul l'ordre dominant contribue, de sorte que

$$-\frac{1}{2i\pi\hbar} \oint_C dz S_-(z) = -\frac{1}{4i\pi} \oint_C dz \frac{S'_+(z)}{S_+(z)} = -\frac{1}{8i\pi} \oint_C dz \frac{U'(z)}{U(z)} = -\frac{1}{2}.$$

En terme de  $S_+$ , l'équation (3.20) devient

$$-\frac{1}{2i\pi\hbar} \oint_C dz S_+(z) = k + \frac{1}{2}. \quad (3.21)$$

Si nous substituons pour  $S_+$  son développement en puissances de  $\hbar$ , nous trouvons, en résolvant, le développement BKW ou semi-classique des niveaux d'énergie.

### 3.3 Le potentiel quartique avec symétrie $O(N)$ pour $N \rightarrow \infty$

Pour illustrer par un autre exemple l'utilité de l'intégrale de chemin, nous étudions maintenant un système à  $N$  dimensions d'espace, dans la limite  $N \rightarrow \infty$ . Dans cette limite, l'intégrale de chemin suggère une méthode simple et intuitive pour résoudre les modèles qui ont une symétrie orthogonale, ce qui fournit un schéma d'approximation alternatif à la théorie des perturbations qui peut se révéler utile dans certaines situations.

La position  $\mathbf{q}$  et l'impulsion  $\mathbf{p}$  sont donc des vecteurs à  $N$  composantes. Nous choisissons un hamiltonien de la forme

$$H = \frac{1}{2}\mathbf{p}^2 + NU(\mathbf{q}^2/N), \quad (3.22)$$

où  $\mathbf{p}^2, \mathbf{q}^2$  sont les carrés des longueurs des vecteurs  $\mathbf{p}, \mathbf{q}$ , respectivement. Le potentiel  $U$  est radial, et polynomial dans les exemples qui vont nous intéresser plus particulièrement.

Nous savons qu'un tel hamiltonien quantique commute avec les  $N(N-1)/2$  générateurs du groupe orthogonal  $SO(N)$  (rotations dans l'espace à  $N$  dimensions), ce qui permet de ramener l'équation de Schrödinger à une équation radiale. Mais, de nouveau, cette méthode est spécifique à la mécanique quantique à une particule. La méthode que nous décrivons ici est plus générale, même si nous ne faisons les calculs explicites qu'en mécanique quantique dans l'exemple d'une perturbation quartique de l'oscillateur harmonique

$$U(\mathbf{q}^2) = \frac{1}{2}\omega^2\mathbf{q}^2 + \frac{1}{24}g(\mathbf{q}^2)^2. \quad (3.23)$$

*Autre interprétation physique.* Le hamiltonien (3.22) dans le cas du potentiel (3.23) a une autre interprétation possible : on peut considérer les  $q_i$  comme des variables attachées à  $N$  sites d'un réseau. Alors le potentiel (3.23) correspond à la somme d'une interaction de particules indépendantes en chaque site et d'une interaction de paires entre tous les  $N$  sites du réseau :

$$U(\mathbf{q}^2) = \sum_i \left( \frac{1}{2}\omega^2 q_i^2 + \frac{1}{24}g q_i^4 \right) + \frac{1}{12}g \sum_{i < j} q_i^2 q_j^2. \quad (3.24)$$

Un tel système n'a en général pas de limite thermodynamique  $N \rightarrow \infty$  car l'énergie potentielle croît comme le nombre de paires, et donc comme le carré du « volume »  $N$ . Le choix d'un potentiel dépendant du nombre de sites comme dans l'expression (3.22) garantit une limite thermodynamique.

*Fonction de partition.* La fonction de partition est donnée par l'intégrale de chemin

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int [d\mathbf{q}] e^{-\mathcal{S}(\mathbf{q})}, \quad (3.25)$$

$\mathbf{q}(0) = \mathbf{q}(\beta)$ , avec comme action

$$\mathcal{S}(\mathbf{q}) = \int_0^\beta dt \left[ \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}}^2(t) + NU(\mathbf{q}^2(t)/N) \right]. \quad (3.26)$$

La symétrie orthogonale de l'action est manifeste puisqu'elle ne dépend que des carrés scalaires.

La limite  $N \rightarrow \infty$ . La méthode que nous présentons ici permet le calcul de la fonction de partition et donc aussi du spectre de l'hamiltonien (3.22) dans la limite  $N \rightarrow \infty$  avec  $U(\mathbf{q}^2)$  fixé et, plus généralement, comme un développement en  $1/N$ . Dans le cas du potentiel quartique (3.23), cette méthode donne une information complémentaire à la théorie des perturbations qui conduit à un développement en puissances de  $g$ . L'idée centrale des calculs dans la limite  $N \rightarrow \infty$ , et plus généralement du développement en  $1/N$ , est la même que celle du théorème de la limite centrale en théorie des probabilités. On s'attend à ce que pour  $N \rightarrow \infty$ , les quantités invariantes par le groupe  $O(N)$  comme

$$\mathbf{q}^2(t) = \sum_{i=1}^N q_i^2(t),$$

s'auto-moyennent et de ce fait fluctuent peu (ce qui suppose que les variables  $q_i$  sont faiblement corrélées, une propriété qu'il reste à vérifier). Par exemple, on s'attend à ce que

$$\langle \mathbf{q}^2(t) \mathbf{q}^2(t') \rangle_{N \rightarrow \infty} \sim \langle \mathbf{q}^2(t) \rangle \langle \mathbf{q}^2(t') \rangle.$$

De ce fait, il paraît judicieux de prendre  $\mathbf{q}^2(t)$  comme variable dynamique plutôt que  $\mathbf{q}(t)$ . Techniquement, nous pouvons mettre cette idée en œuvre par une suite de transformations simples, que nous expliquons d'abord dans l'exemple d'une intégrale ordinaire.

### 3.3.1 Une intégrale ordinaire pour $N \rightarrow \infty$

Nous voulons évaluer, pour  $N \rightarrow \infty$ , l'intégrale

$$\mathcal{I}_N = \int d^N \mathbf{q} e^{-NU(\mathbf{q}^2/N)}, \quad (3.27)$$

où  $U(\rho)$  est un polynôme que, par simplicité, nous supposons croissant à dérivée croissante pour  $\rho > 0$  :

$$U'(\rho) > 0, \quad U''(\rho) \geq 0.$$

La complication principale de ce problème provient de ce que la dépendance en  $N$  est partiellement implicite, à travers le nombre  $N$  de variables d'intégration. La méthode naturelle ici est de passer en variables radiale et angulaire :

$$\mathcal{I}_N = S_{N-1} \int_0^\infty \frac{dq}{q} q^N e^{-NU(q^2/N)}, \quad (3.28)$$

où  $S_{N-1}$  est la surface de la sphère :

$$S_{N-1} = \frac{2\pi^{N/2}}{\Gamma(N/2)}.$$

Il est aussi commode de poser  $q^2/N = \rho$ , ce qui conduit à

$$\mathcal{I}_N = N^{(N-1)/2} S_{N-1} \int_0^\infty \frac{d\rho}{\rho} e^{-N\sigma(\rho)} \quad (3.29)$$

avec

$$\sigma(\rho) = U(\rho) - \frac{1}{2} \ln \rho. \quad (3.30)$$

L'évaluation de l'intégrale pour  $N \rightarrow \infty$  relève clairement de la méthode du col. Les cols sont donnés par

$$\sigma'(\rho) = 0 \Leftrightarrow 2\rho U'(\rho) = 1.$$

Avec les conditions imposées à  $U(\rho)$ , cette équation a une solution unique. Le calcul se poursuit alors en suivant la méthode exposée en section 1.5.

Quoique cette méthode soit simple dans le cas de l'intégrale (3.27), elle ne se généralise pas et nous introduisons donc une autre méthode qui peut paraître plus compliquée mais qui n'a pas le même défaut.

*Méthode générale.* Nous réécrivons d'abord l'intégrale

$$\mathcal{I}_N = N \int d^N \mathbf{q} d\rho \delta(\mathbf{q}^2 - N\rho) e^{-NU(\rho)}.$$

Nous remplaçons ensuite la fonction  $\delta$  de Dirac par sa représentation de Fourier :

$$\delta(\mathbf{q}^2 - N\rho) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mu e^{i\mu(\mathbf{q}^2 - N\rho)}.$$

Il est commode pour la suite de poser  $\mu = i\lambda/2$  de sorte que la représentation prend la forme

$$\delta(\mathbf{q}^2 - N\rho) = \frac{i}{4\pi} \int d\lambda e^{-\lambda(\mathbf{q}^2 - N\rho)/2},$$

mais il faut se souvenir qu'initialement  $\lambda$  est imaginaire pur. Après cette substitution, l'intégrale (3.27) devient

$$\mathcal{I}_N = \int d^N \mathbf{q} e^{-NU(\mathbf{q}^2/N)} = \frac{N}{4i\pi} \int d^N \mathbf{q} d\rho d\lambda e^{-\lambda(\mathbf{q}^2 - N\rho)/2 - NU(\rho)}. \quad (3.31)$$

L'intégrale sur  $\mathbf{q}$  est maintenant gaussienne et peut être effectuée après une translation du contour d'intégration en  $\lambda$  qui respecte la condition  $\text{Re } \lambda \geq 0$  :

$$\mathcal{I}_N = \pi^{N/2} \frac{N}{4i\pi} \int d\rho d\lambda e^{N\lambda\rho/2 - N \ln(\lambda)/2 - NU(\rho)}.$$

Dans la limite  $N \rightarrow \infty$ , cette intégrale peut maintenant se calculer par la méthode du col complexe standard à deux variables. Les équations de col, obtenues en dérivant successivement sur  $\lambda$  et  $\rho$ , sont

$$\rho = 1/\lambda, \quad \lambda = 2U'(\rho).$$

Notons que le col en  $\lambda$  est réel mais que le contour d'intégration en  $\lambda$  est parallèle à l'axe imaginaire. Nous laissons la fin du calcul en exercice. On vérifiera que le résultat est le même que celui obtenu par un passage direct en coordonnées radiale et angulaires.

### 3.3.2 Intégrale de chemin

L'identité (3.31) se généralise à un nombre quelconque de variables et donc à une intégrale de chemin. Dans le cas de l'intégrale (3.25), il faut introduire deux chemins  $\rho(t), \lambda(t)$ , périodiques parce que nous calculons la fonction de partition :  $\rho(\beta) = \rho(0), \lambda(\beta) = \lambda(0)$ . L'intégrale de chemin transformée est obtenue en multipliant l'intégrand par

$$\mathcal{N}(\beta) \int [d\rho][d\lambda] \exp \left[ \int_0^\beta dt \lambda(t) (\mathbf{q}^2(t) - N\rho(t))/2 \right] = 1, \quad (3.32)$$

où la normalisation  $\mathcal{N}(\beta)$  dépend de la discrétisation mais pas du chemin  $\mathbf{q}(t)$ , et en remplaçant  $\mathbf{q}^2/N$  par  $\rho$  dans le potentiel  $U$ .

La fonction de partition est alors donnée par

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int [d\mathbf{q}d\rho d\lambda] e^{-\mathcal{S}(\mathbf{q}, \rho, \lambda)}$$

(où le facteur de normalisation est maintenant sous-entendu) avec

$$\mathcal{S}(\mathbf{q}, \rho, \lambda) = \int_0^\beta dt \left[ \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}}^2 + NU(\rho) + \frac{1}{2} \lambda (\mathbf{q}^2 - N\rho) \right].$$

Nous remarquons que l'intégrale sur  $\mathbf{q}(t)$  est encore gaussienne et peut être effectuée. Comme

$$\int_0^\beta dt [\dot{\mathbf{q}}^2 + \lambda(t) \mathbf{q}^2(t)] = \sum_i \int_0^\beta dt [\dot{q}_i^2 + \lambda(t) q_i^2(t)],$$

nous obtenons le produit de  $N$  intégrales identiques :

$$\int [dq] \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_0^\beta dt [\dot{q}^2 + \lambda(t) q^2(t)] \right\} \propto [\det (-d_t^2 + \lambda(\bullet))]^{-1/2}. \quad (3.33)$$

L'opérateur différentiel  $-d_t^2 + \lambda$  a la forme d'un hamiltonien quantique à une dimension,  $-d_t^2$  étant le terme cinétique et  $\lambda(t)$  le potentiel. Le déterminant de l'opérateur différentiel dépend des conditions aux limites.

Nous trouvons donc

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int [d\rho d\lambda] e^{-S_N(\rho, \lambda)} \quad (3.34)$$

avec ( $\text{tr ln} = \ln \det$ )

$$S_N(\rho, \lambda) = \int_0^\beta dt [NU(\rho) - \frac{1}{2}N\lambda\rho] + \frac{1}{2}N \text{tr ln}(-d_t^2 + \lambda(\bullet)) - \frac{1}{2}N \text{tr ln}(-d_t^2), \quad (3.35)$$

où, instruit par l'expérience, nous savons que le déterminant doit être normalisé et nous l'avons donc divisé par le déterminant pour  $\lambda = 0$ .

L'intégration a rendu la dépendance de la fonction de partition en  $N$  explicite. Nous remarquons maintenant que si nous prenons la limite  $N \rightarrow \infty$  à  $U$  fixé, et supposons que l'intégrale est dominée par des chemins  $\rho, \lambda = O(1)$ , l'action est proportionnelle à  $N$ . Dans la limite  $N \rightarrow \infty$ , nous pouvons donc calculer l'intégrale de chemin par la méthode du col (ici *complexe*).

Du fait de l'invariance par translation du temps sur le cercle  $[0, \beta]$  (un cercle du fait des conditions aux limites périodiques), un col  $\{\lambda(t), \rho(t)\}$  est soit dégénéré si  $\lambda(t), \rho(t)$  dépendent explicitement du temps (une solution et toutes celles obtenues par translation), soit unique si les fonctions sont constantes. On se convainc que la situation la plus simple est réalisée et que le col n'est pas dégénéré.

Quoique les calculs puissent être poursuivis avec un potentiel général  $U(\rho)$ , nous nous restreignons maintenant à l'exemple (3.23). Nous remarquons alors que l'intégrale sur  $\rho$  est gaussienne. Le minimum de la forme quadratique en  $\rho$  est obtenu pour

$$U'(\rho) - \frac{1}{2}\lambda = 0 \Rightarrow \rho(t) = 6(\lambda(t) - \omega^2)/g.$$

Après translation de  $\rho$ , l'intégration sur  $\rho$  engendre un déterminant qui est une constante, et qui peut donc être absorbée dans la normalisation. Après intégration, nous trouvons

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int [d\lambda] e^{-S_N(\lambda)} \quad (3.36)$$

avec

$$S_N(\lambda) = -\frac{3N}{2g} \int_0^\beta dt (\lambda(t) - \omega^2)^2 + \frac{1}{2}N \text{tr ln}(-d_t^2 + \lambda(\bullet)) - \frac{1}{2}N \text{tr ln}(-d_t^2). \quad (3.37)$$

Comme nous cherchons un col avec  $\lambda(t)$  constant, nous posons

$$\lambda(t) = r^2 + \mu(t)$$

et développons au premier ordre en  $\mu(t)$  pour obtenir l'équation du col. D'une part

$$-\frac{3}{g} \int_0^\beta dt (r^2 + \mu(t) - \omega^2)^2 = -\frac{3\beta}{g} (r^2 - \omega^2)^2 - \frac{6}{g} (r^2 - \omega^2) \int_0^\beta dt \mu(t) + O(\mu^2).$$

Par ailleurs (cf. équation (1.53) et suivantes),

$$\begin{aligned} \operatorname{tr} \ln(-d_t^2 + \lambda) &= \operatorname{tr} \ln(-d_t^2 + r^2 + \mu) \\ &= \operatorname{tr} \ln(-d_t^2 + r^2) + \operatorname{tr} \ln(\mathbf{1} + \mu(-d_t^2 + r^2)^{-1}) \\ &= \operatorname{tr} \ln(-d_t^2 + r^2) + \operatorname{tr} \mu(-d_t^2 + r^2)^{-1} + O(\mu^2) \\ &= \operatorname{tr} \ln(-d_t^2 + r^2) + \int dt \mu(t) \Delta(0) + O(\mu^2). \end{aligned}$$

Dans cette dernière expression nous avons pris en compte que  $\mu(t)$  est un opérateur diagonal et que les éléments de matrice diagonaux de  $\Delta$ , l'inverse de  $-d_t^2 + r^2$  avec conditions aux limites périodiques, sont constants (cf. (2.46)) :

$$\operatorname{tr} \mu(-d_t^2 + r^2)^{-1} = \int dt du \langle t | \mu | u \rangle \Delta(t - u) = \int dt \mu(t) \Delta(0).$$

Annulant le coefficient de  $\int \mu(t) dt$  dans l'action, nous obtenons l'équation de col

$$-\frac{6}{g}(r^2 - \omega^2) + \Delta(0) = -\frac{6}{g}(r^2 - \omega^2) + \frac{1}{2r \tanh(\beta r/2)} = 0. \quad (3.38)$$

L'action fait intervenir le déterminant de  $-d_t^2 + r^2$  avec conditions aux limites périodiques que, comparant avec l'intégrale (3.33), nous relierons directement à la fonction de partition de l'oscillateur harmonique. Donc

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_N(r^2) &= -\frac{3\beta N}{2g}(r^2 - \omega^2)^2 - N \ln \mathcal{Z}_0(\beta), \\ &= -\frac{3\beta N}{2g}(r^2 - \omega^2)^2 + N \ln \ln 2 \sinh(\beta r/2), \end{aligned} \quad (3.39)$$

où nous avons choisi  $r \geq 0$ .

On vérifie qu'en dérivant par rapport à  $r$ , on retrouve l'équation du col. Après division par  $6N\beta/g$ , l'équation s'écrit

$$r(\omega^2 - r^2) + \frac{g}{12 \tanh(\beta r/2)} = 0. \quad (3.40)$$

Utilisant la solution, nous trouvons, à l'ordre dominant pour  $N \rightarrow \infty$ ,

$$\ln \mathcal{Z}(\beta) = -\mathcal{S}_N(r^2) = \frac{3N\beta}{2g}(r^2 - \omega^2)^2 - N \ln 2 \sinh(\beta r/2). \quad (3.41)$$

L'intégrale de chemin n'est connue qu'à une normalisation près, qui peut être fixée en comparant au résultat pour  $g = 0$ . Comme  $r = \omega + O(g)$ , nous obtenons bien la fonction de partition de l'oscillateur dans cette limite.

Ce résultat représente la fonction de partition dans la limite thermodynamique dans l'interprétation (3.24). Divisant le volume  $N$  et multipliant par la température  $T = 1/\beta$ , on en déduit la densité d'énergie libre (avec notre convention de signe)

$$\mathcal{F} = \frac{1}{\beta N} \ln \mathcal{Z} = \frac{3}{2g}(r^2 - \omega^2)^2 - \frac{1}{\beta} \ln 2 \sinh(\beta r/2).$$

### 3.3.3 Énergie du fondamental

Si nous ne nous intéressons qu'à l'énergie du fondamental de l'hamiltonien (3.22) avec le potentiel (3.23), nous pouvons prendre la limite de température nulle  $\beta \rightarrow \infty$ . Nous obtenons l'équation algébrique du troisième degré

$$r^3 - \omega^2 r - \frac{1}{12}g = 0 \quad (3.42)$$

qui a une solution unique. En fonction de la solution nous trouvons alors pour  $N \rightarrow \infty$  :

$$E_0 \underset{\beta \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}(\beta) = -\frac{3N}{2g}(r^2 - \omega^2)^2 + \frac{1}{2}Nr,$$

ou encore, éliminant  $g$  entre  $E_0$  et l'équation de col,

$$E_0 = \frac{N}{8r}(3r^2 + \omega^2).$$

Pour  $g \rightarrow 0$ , nous trouvons  $r = \omega + g/(24\omega^2) + O(g^2)$  et donc

$$E_0 = \frac{1}{2}N\omega + \frac{1}{96}Ng/\omega^2 + O(g^2),$$

ce qui est cohérent avec le résultat perturbatif

$$E_0(g) = \frac{1}{2}N\omega + \frac{1}{96}(N+2)g/\omega^2 + O(g^2).$$

Pour  $g \rightarrow \infty$ , nous trouvons  $r \sim (g/12)^{1/3}$  et  $E_0(g)$  exhibe donc le comportement en  $g^{1/3}$  que l'on peut démontrer pour tout  $N$  fini :

$$E_0 \sim \frac{3}{8}(12)^{-1/3}Ng^{1/3}. \quad (3.43)$$

Ce résultat est aussi la valeur de  $E_0$  pour  $\omega = 0$ . Il ne peut donc pas être obtenu par un calcul perturbatif.

Enfin, le calcul pour  $N \rightarrow \infty$  est possible même si le coefficient du terme harmonique est négatif. Changeant  $\omega \mapsto i\omega$ , on trouve

$$r^3 + \omega^2 r - \frac{1}{12}g = 0, \quad E_0 = \frac{N}{8r}(3r^2 - \omega^2).$$

Par exemple, pour  $g \rightarrow 0$ ,  $r$  est d'ordre  $g$  et on obtient

$$\frac{1}{N}E_0 = -\frac{3\omega^4}{2g} + \frac{g}{48\omega^2} + O(g^3).$$

Ce résultat peut aussi être obtenu par des méthodes perturbatives, mais plus élaborées que celles que nous avons utilisées jusqu'à présent car le potentiel est minimum sur toute une sphère.

En développant les expressions (3.40, 3.41) pour  $\beta \rightarrow \infty$ , il est également possible de calculer la différence entre l'énergie du fondamental et les énergies des états suivants.

Les termes successifs du développement en puissances de  $1/N$  sont ensuite donnés par les corrections successives à la méthode du col. On fait le changement de variables

$$\lambda(t) - r^2 = \mu(t),$$

où l'intégrale porte sur des valeurs de  $\mu$  imaginaires, et on développe l'intégrand en puissances de  $\mu(t)$ , gardant le terme quadratique dans l'exponentielle.

La première correction est donnée par l'intégration gaussienne. En particulier, le calcul du terme quadratique en  $\mu$  permet de vérifier que la solution des équations du col choisie est bien un col, c'est-à-dire un maximum local du module de l'intégrand sur le contour. Le calcul du terme quadratique implique le développement de

$$\begin{aligned} \text{tr} \ln [(-d_t^2 + r^2 + \mu(\bullet))(-d_t^2 + r^2)^{-1}] &= \int dt \mu(t) \langle t | (-d_t^2 + r^2)^{-1} | t \rangle \\ &- \frac{1}{2} \int dt_1 dt_2 \mu(t_1) \mu(t_2) \langle t_1 | (-d_t^2 + r^2)^{-1} | t_2 \rangle \langle t_2 | (-d_t^2 + r^2)^{-1} | t_1 \rangle + O(\mu^3). \end{aligned}$$

Appelant  $\mathcal{S}^{(2)}(\mu)$  la forme quadratique en  $\mu$  :

$$\mathcal{S}^{(2)}(\mu) = -\frac{1}{2} \int dt_1 dt_2 \mu(t_1) \mu(t_2) K(t_1 - t_2),$$

nous trouvons

$$K(t) = \frac{3N}{g} \delta(t) + \frac{N}{4} \Delta^2(t),$$

où  $\Delta(t)$  est la fonction à deux points gaussienne (2.46) :

$$\Delta(t) = \frac{1}{2r \sinh(r\beta/2)} \cosh(r(\beta/2 - |t|)).$$

Pour trouver le spectre du noyau  $K(t_1 - t_2)$ , on peut le diagonaliser par transformée de Fourier. Pour simplifier, nous nous restreignons au fondamental et prenons la limite  $\beta \rightarrow \infty$ . Alors

$$\tilde{K}(\kappa) = \int dt e^{i\kappa t} K(t) = \frac{3N}{g} + \frac{N}{8r} \frac{1}{4r^2 + \kappa^2}.$$

Nous voyons que les valeurs propres  $\tilde{K}(\kappa)$  sont strictement positives quel que soit  $\kappa$ . Compte-tenu du fait que  $\mu$  est imaginaire, la partie quadratique de l'action est positive, et nous avons donc bien identifié un col. L'intégrale gaussienne donne alors  $(\det K)^{-1/2}$  qui peut être calculé explicitement.

*Remarque.* L'équation du col (3.42) a une solution jusqu'à une valeur  $g_c$  négative de  $g$  :

$$g \geq g_c, \quad g_c = -\frac{8}{3} \sqrt{3} \omega^3.$$

Ce résultat est assez surprenant puisque pour  $g < 0$  le potentiel n'est pas borné inférieurement. Classiquement, il est évidemment possible de mettre une

particule au repos dans le minimum relatif du potentiel, mais quantiquement l'état correspondant est instable et se désintègre par effet tunnel. On montre cependant que dans la limite  $N \rightarrow \infty$  telle qu'elle est prise ici, la probabilité de traversée de barrière tend vers zéro pourvu que la condition  $g > g_c$  soit satisfaite.

### 3.4 Hamiltonien : unicité du fondamental

L'unicité ou au contraire la dégénérescence de l'état fondamental de l'hamiltonien quantique jouent un rôle essentiel dans la structure d'une théorie. En particulier, au sens de la physique statistique, les transitions de phase sont liées au passage d'une situation où le fondamental est unique à une situation où il est dégénéré.

Dans ce chapitre et dans le chapitre 4, nous ne considérons que des hamiltoniens quantiques réels correspondant à un nombre fini de degrés de liberté. Dans ce cas, l'état fondamental est unique et les transitions de phase sont donc impossibles. C'est ce que nous allons montrer pour tout hamiltonien de la forme

$$H = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + V(\hat{\mathbf{q}})$$

avec potentiel borné sauf peut-être à l'infini (mais le résultat se généralise à des potentiels peu singuliers). De plus, nous allons supposer que l'énergie du fondamental correspond à un point isolé du spectre, de telle sorte que les fonctions d'ondes propres associées sont de carré sommable.

Notre analyse est basée sur un principe variationnel : l'énergie  $E_0$  du fondamental satisfait l'inégalité

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (3.44)$$

avec

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \int d^d q \psi^2(q), \\ \langle \psi | H | \psi \rangle &= \int d^d q \left[ \frac{1}{2} (\nabla \psi(q))^2 + V(q) \psi^2(q) \right], \end{aligned}$$

où l'égalité n'est possible que si  $\psi(q)$  est la fonction d'onde du fondamental.

Pour justifier l'unicité, nous allons d'abord montrer que la fonction d'onde  $\psi(q)$  du fondamental, que nous pouvons choisir réelle, ne peut pas s'annuler.

Considérons, dans un premier temps, l'exemple unidimensionnel ( $d = 1$ ) et supposons par commodité que la fonction d'onde du fondamental s'annule à l'origine. Puisque le potentiel est borné, de la solution locale de l'équation de Schrödinger, nous obtenons

$$\psi(q) = \psi'_0 q + o(q^2),$$

Considérons alors la fonction d'onde

$$\varphi(q) = |\psi(q)|.$$

La fonction  $\varphi(q)$  correspond à la même énergie  $E_0$  puisque dans (3.44) à la fois le numérateur et dénominateur sont inchangés. Au voisinage de l'origine,  $\varphi(q)$  se comporte comme  $|\psi'_0| |q|$ . Modifions la fonction  $\varphi(q)$  localement au voisinage de l'origine pour  $|q| \leq \eta \ll 1$ , en remplaçant  $|q|$  par  $\sqrt{\varepsilon^2 + q^2}$ ,  $0 < \varepsilon \ll \eta$ . Les variations des dénominateur et numérateur dues au voisinage de l'origine sont alors

$$\begin{aligned} \delta \langle \psi | \psi \rangle / \psi'_0{}^2 &= \int_{-\eta}^{\eta} dq (q^2 + \varepsilon^2 - q^2) = O(\varepsilon^2), \\ \delta \langle \psi | H | \psi \rangle / \psi'_0{}^2 &= 2\eta V(0)\varepsilon^2 + \int_{-\eta}^{\eta} \int dq \left( \frac{q^2}{q^2 + \varepsilon^2} - 1 \right) \sim -\pi\varepsilon. \end{aligned}$$

La variation du numérateur est négative et d'ordre  $\varepsilon$ , alors que la variation du dénominateur n'est que d'ordre  $\varepsilon^2$ . On voit donc que le rapport (3.44) a diminué, en contradiction avec l'hypothèse que  $\psi(q)$  était la fonction d'onde du fondamental.

Nous concluons que la fonction d'onde du fondamental est strictement positive.

Si le fondamental est dégénéré, on trouve deux fonctions d'onde strictement positives qui peuvent être choisies orthogonales puisque  $H$  est hermitien. Mais le produit scalaire de deux fonctions strictement positives est strictement positif, d'où contradiction.

Nous en concluons que l'état fondamental est unique.

Le raisonnement se généralise à des potentiels singuliers avec des singularités plus faibles que  $1/q^2$ .

Le raisonnement se généralise aussi simplement à une dimension quelconque. Si  $\psi(\mathbf{q})$  s'annule à l'origine

$$\psi(\mathbf{q}) = \mathbf{q} \cdot \nabla \psi(0) + o(\mathbf{q}^2).$$

Il suffit alors de raisonner sur la composante du vecteur  $\mathbf{q}$  sur le vecteur  $\nabla \psi(0)$ .

## Exercices

*Remarque.* Dans tous les calculs qui suivent, on suppose  $m = \hbar = 1$ . Bien entendu, pour tous ces calculs on utilisera le formalisme de l'intégrale de chemin.

*Exercice 3.1.*

Soit l'hamiltonien

$$H = \frac{1}{2} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} \hat{q}^2 + \lambda \hat{q}^N,$$

où  $\hat{p}$ ,  $\hat{q}$  sont les opérateurs impulsion et position :

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i.$$

Écrire la fonction de partition comme une intégrale de chemin. Pour  $N = 6, 8$  en déduire la correction d'ordre  $\lambda$  à l'énergie du *fondamental*, puis de tous les états en utilisant le théorème de Wick, généralisant la méthode de la section 3.

*Solution.* Pour  $N = 6$  et  $N = 8$  les énergies propres sont, respectivement,

$$E_k = n + \frac{1}{2} + \frac{5}{2}\lambda(k + \frac{1}{2})(k^2 + k + \frac{3}{2})$$

$$E_k = k + \frac{1}{2} + \frac{35}{8}\lambda(k^4 + 2k^3 + 5k^2 + 4k + \frac{3}{2}).$$

*Exercice 3.2.*

Soit l'hamiltonien

$$H = \frac{1}{2}(\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2) + \frac{1}{2}(\hat{q}_1^2 + \hat{q}_2^2) + \frac{1}{4}g(\hat{q}_1^2 + \hat{q}_2^2)^2.$$

Écrire la fonction de partition comme une intégrale de chemin, et en déduire la correction d'ordre  $g$  à l'énergie  $E_0$  du *fondamental* en utilisant le théorème de Wick.

*Solution.*

$$E_0 = 1 + g/2 + O(g^2).$$

*Exercice 3.3.*

On se propose de généraliser l'exercice précédent au cas où

$$H = \frac{1}{2}\hat{\mathbf{p}}^2 + \frac{1}{2}\hat{\mathbf{q}}^2 + \frac{1}{4}g(\hat{\mathbf{q}})^2$$

et  $\mathbf{q}$  et  $\mathbf{p}$  sont des vecteurs à  $N$  composantes (l'exercice précédent correspondant à  $N = 2$ ).

Comme exercice préparatoire, calculer, en utilisant le théorème de Wick, la valeur moyenne

$$I(N) = Z^{-1} \int d^N q (\mathbf{q}^2)^2 e^{-\mathbf{q}^2/2},$$

$$Z = \int d^N q e^{-\mathbf{q}^2/2},$$

où  $\mathbf{q}$  est un vecteur à  $N$  composantes.

Calculer ensuite l'énergie du fondamental  $E_0$  au premier ordre en  $g$ .

*Solution.*

$$I(N) = N(N + 2),$$

$$E_0(g) = \frac{1}{2}N + \frac{1}{16}N(N + 2)g + O(g^2).$$

*Exercice 3.4.*

Calculer l'énergie du *fondamental* du hamiltonien

$$H = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\hat{q}^2 + \lambda\gamma\hat{q}^3 + \frac{1}{2}\lambda^2\hat{q}^4,$$

où  $\gamma$  une constante arbitraire, à l'ordre  $\lambda^2$ .

*Solution.*

$$E_0 = \frac{1}{2} + \frac{1}{8}(3 - 11\gamma^2)\lambda^2 + O(\lambda^4).$$

*Exercice 3.5.*

Calculer les niveaux d'énergie  $E_k$  de l'hamiltonien (noter la différence de normalisation de  $\lambda$  par rapport à la section 3.1)

$$H = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\hat{q}^2 + \lambda\hat{q}^4,$$

à l'ordre  $\lambda^2$  en généralisant la méthode de la section 3.1.

*Solution.* Posant  $\nu = k + \frac{1}{2}$ , on trouve

$$E = \nu + \frac{3}{2} \left( \nu^2 + \frac{1}{4} \right) \lambda - \frac{1}{4} \nu \left( 17\nu^2 + \frac{67}{4} \right) \lambda^2 + O(\lambda^3).$$

*Exercice 3.6.*

Généraliser le calcul à l'ordre  $\lambda^2$  au potentiel

$$V(q) = \frac{1}{2}q^2 + \lambda v_1 q^4 + \lambda^2 v_2 q^6 + O(q^8),$$

où  $v_1, v_2$  sont deux constantes arbitraires. Inverser la relation entre  $\nu$  et  $E$ .

*Solution.* On trouve un développement qui peut s'écrire le plus simplement sous la forme

$$k + \frac{1}{2} = E - \lambda v_1 \left( \frac{3}{2}E^2 + \frac{3}{8} \right) + \lambda^2 \left[ E^3 \left( \frac{35}{4}v_1^2 - \frac{5}{2}v_2 \right) + E \left( \frac{85}{16}v_1^2 - \frac{25}{8}v_2 \right) \right] + \dots$$

*Exercice 3.7.*

Utiliser la méthode variationnelle de la section 2.11 dans le cas de l'hamiltonien (3.22) avec le potentiel (3.23) pour  $\omega = 0$  :

$$H = \frac{1}{2}\hat{\mathbf{p}}^2 + \frac{1}{24} \frac{g}{N} (\hat{\mathbf{q}})^2,$$

où  $\mathbf{q}$  et  $\mathbf{p}$  sont des vecteurs à  $N$  composantes. En déduire une estimation de l'énergie du fondamental et comparer avec le résultat (3.43) pour  $N \rightarrow \infty$ .

# Chapitre 4

## Mécaniques statistiques quantique et classique

LE BUT PRINCIPAL DE CE CHAPITRE est de fournir une interprétation physique simple à la limite continue formelle qui a conduit, d'une intégrale sur des variables de position correspondant à des temps discrets, à l'intégrale de chemin. Nous allons montrer comment l'intégrale correspondant aux temps discrets peut être considérée comme la fonction de partition d'un système de mécanique statistique classique à une dimension d'espace. La limite continue correspond alors à une limite où la longueur de corrélation, qui caractérise la décroissance des corrélations à grande distance, tend vers l'infini. Cette limite a des propriétés d'universalité en ce sens que, comme nous l'avons remarqué, des formes discrètes différentes conduisent à la même intégrale de chemin.

Dans ce cadre, les fonctions de corrélation introduites en section 2.5 apparaissent comme des limites continues de fonctions de corrélation de modèles statistiques classiques sur réseau unidimensionnel.

À travers l'intégrale de chemin, nous mettons ainsi en évidence une relation entre mécanique statistique classique sur la droite et mécanique statistique quantique de la particule ponctuelle à l'équilibre thermique. Ceci constitue un cas particulier d'une observation plus générale, à savoir qu'il existe des relations entre la mécanique statistique quantique à  $D$  dimensions et la mécanique statistique classique à  $D + 1$  dimensions.

Notons que cette relation entre mécaniques statistiques quantique et classique est tout à fait différente de la limite classique de la fonction de partition quantique que nous avons étudiée en section 2.10, qui fait correspondre les particules ponctuelles quantique et classique.

Dans tout le chapitre *le potentiel est indépendant du temps*.

## 4.1 Fonction de partition classique. Matrice de transfert

Nous considérons le réseau unidimensionnel des points de coordonnées entières. À chaque point  $k$  du réseau est associée une variable aléatoire  $q_k$  (par exemple la déviation d'une particule de sa position d'équilibre dans un cristal). Pour simplifier les notations et expressions, nous nous limitons au cas d'une seule variable  $q_k$  par site.

Dans un premier temps nous nous restreignons à un réseau fini  $0 \leq k < n$ . Par ailleurs, nous supposons, par commodité dans tout ce chapitre, des conditions aux limites périodiques. Le réseau appartient alors à un cercle et nous identifions  $q_n = q_0$ .

À un ensemble de valeurs des variables  $q_k$ , nous associons un poids de Boltzmann  $e^{-S}$ , exponentielle d'une énergie de configuration

$$S(q, \varepsilon) = \sum_{k=1}^n S(q_k, q_{k-1}), \quad (4.1)$$

$$S(q, q') = \left[ \frac{1}{2} \frac{(q' - q)^2}{\varepsilon} + \frac{1}{2} \varepsilon (V(q') + V(q)) \right]. \quad (4.2)$$

Cette énergie de configuration définit un modèle statistique classique avec interaction de proches voisins, comme dans la version la plus simple du modèle d'Ising. Le paramètre de contrôle  $\varepsilon$  joue ici un rôle analogue à la température (il est strictement équivalent à la température dans des cas particuliers, cf. section 4.3).

Nous remarquons alors que  $S(q, \varepsilon)$  est identique jusqu'à l'ordre  $\varepsilon$  pour  $\varepsilon \rightarrow 0$  à l'action (2.18) (pour  $t' = t + \varepsilon$ ) dans le cas  $d = 1$ ,  $m = 1$ .

Par ailleurs, il est commode d'intégrer avec la mesure  $dq/\sqrt{2\pi\varepsilon}$ . La fonction de partition classique avec conditions aux limites périodiques,  $q_0 = q_n$ , de ce modèle classique s'écrit alors

$$\mathcal{Z}(n, \varepsilon) = \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{n/2}} \int \prod_{k=1}^n dq_k \exp[-S(q, \varepsilon)]. \quad (4.3)$$

Sous cette forme, la fonction de partition classique  $\mathcal{Z}(n, \varepsilon)$  est aussi une approximation discrète de la trace de l'expression (2.19), c'est-à-dire de la fonction de partition quantique  $\text{tr} e^{-\beta H}$  (cf. l'expression (2.67)), correspondant à l'hamiltonien quantique

$$H = \frac{1}{2} \hat{p}^2 + V(\hat{q}),$$

pour  $\hbar = 1$ .

Dans l'expression (4.2), les deux termes ont maintenant l'interprétation classique suivante : le terme de potentiel détermine la distribution des variables  $q_k$  à chaque site. Pour que la distribution soit normalisable, il est nécessaire que l'intégrale  $\int dq e^{-\varepsilon V(q)}$  converge pour tout  $\varepsilon > 0$ . Ceci entraîne,

en particulier, que  $V(q) \rightarrow +\infty$  pour  $|q| \rightarrow \infty$  et donc que l'hamiltonien  $H$  a un spectre discret.

Le terme cinétique correspond à une interaction attractive (elle favorise tous les  $q_k$  égaux) de proches voisins sur le réseau. En diminuant le paramètre  $\varepsilon$ , on augmente l'interaction.

*Notation.* Dans la suite, il est commode d'introduire les notations de bras et kets de la mécanique quantique, ainsi que la base complète dans laquelle l'opérateur position  $\hat{q}$  est diagonal (équations (2.4, 2.5)) :

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle, \quad \int dq |q\rangle \langle q| = 1. \quad (4.4)$$

Nous distinguerons donc plus loin la notation  $\langle \bullet \rangle$  qui signifie valeur moyenne de  $\bullet$  par rapport au poids statistique  $e^{-S}$  et  $\langle q''|U|q' \rangle$  qui signifie élément de matrice de l'opérateur quantique  $U$  dans la base des positions.

*Matrices de transfert.* Le noyau

$$\mathcal{T}(q, q') \equiv \langle q' | \mathbf{T}(\varepsilon) | q \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\varepsilon}} \exp[-S(q, q')] \quad (4.5)$$

définit, par ses éléments de matrice dans la base des positions, un opérateur symétrique réel  $\mathbf{T}$  qui est appelé la *matrice de transfert* du modèle statistique. Avec la condition de croissance imposée à  $V$ , il a un spectre discret. En termes des opérateurs position  $\hat{q}$  et impulsion  $\hat{p}$  de la mécanique quantique, la matrice de transfert s'écrit :

$$\mathbf{T}(\varepsilon) = e^{-\varepsilon V(\hat{q})/2} e^{-\varepsilon \hat{p}^2/2} e^{-\varepsilon V(\hat{q})/2}, \quad (4.6)$$

ce qui montre en particulier que  $\mathbf{T}$  est un opérateur positif.

Utilisant la définition (4.5), on peut facilement exprimer la fonction de partition  $\mathcal{Z}(n, \varepsilon)$  du modèle statistique en fonction de la matrice de transfert :

$$\mathcal{Z}(n, \varepsilon) = \int \prod_{k=0}^{n-1} dq_k \langle q_0 | \mathbf{T} | q_1 \rangle \langle q_1 | \mathbf{T} | q_2 \rangle \dots \langle q_{n-1} | \mathbf{T} | q_0 \rangle = \text{tr } \mathbf{T}^n, \quad (4.7)$$

et donc, introduisant les valeurs propres (discrètes, réelles positives)  $t_k(\varepsilon)$  de la matrice de transfert  $t_0 > |t_1| > \dots$ ,

$$\mathcal{Z}(n, \varepsilon) = \sum_{k=0} t_k^n(\varepsilon). \quad (4.8)$$

*Limite thermodynamique.* La limite thermodynamique est la limite de volume infini, et donc ici  $n \rightarrow \infty$ . Dans cette limite, la fonction de partition est dominée par la valeur propre la plus grande de la matrice de transfert (dont on montre qu'elle n'est pas dégénérée) :

$$\ln \mathcal{Z}(n, \varepsilon) \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} -n \ln t_0(\varepsilon).$$

En particulier, nous vérifions que l'énergie libre  $\mathcal{W} = \ln \mathcal{Z}$  (omettant un facteur de température sans intérêt ici) est une quantité extensive, c'est-à-dire proportionnelle au volume  $n$ . La densité d'énergie libre est donnée par

$$\frac{1}{n} \mathcal{W}(n, \varepsilon) = \frac{1}{n} \ln \mathcal{Z}(n, \varepsilon) \sim -\ln t_0(\varepsilon).$$

## 4.2 Fonctions de corrélation

Nous introduisons maintenant les fonctions de corrélation des variables  $q_k$ . La fonction à  $m$  points est définie par

$$\begin{aligned} \langle q_{i_1} q_{i_2} \dots q_{i_m} \rangle &\equiv Z_n^{(m)}(i_1, i_2, \dots, i_m) \\ &= \mathcal{Z}^{-1}(n, \varepsilon) \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{n/2}} \int \left( \prod_{s=1}^n dq_s \right) \exp[-\mathcal{S}(q, \varepsilon)] \prod_{\ell=1}^m q_{i_\ell}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

### 4.2.1 Fonctions de corrélation et matrice de transfert

Dans le cas d'une interaction de proches voisins comme dans l'énergie de configuration (4.1), les fonctions de corrélation peuvent être réexprimées en terme de la matrice de transfert.

La fonction à un point est la valeur moyenne de  $q_k$  :

$$Z_n^{(1)}(k) \equiv \langle q_k \rangle = \mathcal{Z}^{-1}(n, \varepsilon) \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{n/2}} \int \left( \prod_{s=1}^n dq_s \right) q_k \exp[-\mathcal{S}(q, \varepsilon)].$$

L'intégrale peut s'écrire

$$\begin{aligned} \int \left( \prod_{s=1}^n dq_s \right) q_k e^{-\mathcal{S}(q, \varepsilon)} &= \int q_k dq_k \int \left( \prod_{s=1}^{k-1} dq_s \right) \exp \left[ -\sum_{l=1}^k \mathcal{S}(q_l, q_{l-1}) \right] \\ &\quad \times \int \left( \prod_{s=k+1}^n dq_s \right) \exp \left[ -\sum_{l=k+1}^n \mathcal{S}(q_l, q_{l-1}) \right]. \end{aligned}$$

Introduisant la matrice de transfert (4.5) et l'opérateur position  $\hat{q}$ , et utilisant (équation (4.4))

$$\mathbf{T}\hat{q}|q_\ell\rangle = q_\ell \mathbf{T}|q_\ell\rangle,$$

nous pouvons réécrire

$$Z_n^{(1)}(k) = \mathcal{Z}^{-1}(n, \varepsilon) \operatorname{tr} \mathbf{T}^k(\varepsilon) \hat{q} \mathbf{T}^{n-k}(\varepsilon) = \operatorname{tr}(\hat{q} \mathbf{T}^n) / \operatorname{tr} \mathbf{T}^n.$$

De la même manière, considérons la fonction de corrélation à deux points, valeur moyenne du produit des valeurs de  $q$  en deux points  $k, l$  du réseau :

$$Z_n^{(2)}(k, l) \equiv \langle q_k q_l \rangle = \mathcal{Z}^{-1}(n, \varepsilon) \int \left( \prod_{s=1}^n dq_s \right) q_k q_l \exp[-\mathcal{S}(q, \varepsilon)].$$

L'application répétée de la même méthode, par exemple pour  $k \leq l$ , conduit à l'identité

$$\begin{aligned} Z_n^{(2)}(k, l) &= Z^{-1}(n, \varepsilon) \operatorname{tr} \mathbf{T}^k(\varepsilon) \hat{q} \mathbf{T}^{l-k}(\varepsilon) \hat{q} \mathbf{T}^{n-l}(\varepsilon) \\ &= \operatorname{tr} (\hat{q} \mathbf{T}^{l-k} \hat{q} \mathbf{T}^{n+k-l}) / \operatorname{tr} \mathbf{T}^n. \end{aligned}$$

Alors que la fonction  $Z_n^{(2)}(k, l)$  est symétrique en  $k \leftrightarrow l$ , son expression en terme de la matrice de transfert ne l'est pas.

De façon générale, cette méthode permet de montrer que la fonction à  $m$  points, dans le secteur  $0 \leq i_1 \leq i_2 \dots \leq i_m \leq n$ , peut s'écrire

$$\langle q_{i_1} q_{i_2} \dots q_{i_m} \rangle = Z^{-1}(n, \varepsilon) \operatorname{tr} [\mathbf{T}^{n-i_m+i_1} \hat{q} \mathbf{T}^{i_m-i_m-1} \hat{q} \dots \mathbf{T}^{i_2-i_1} \hat{q}]. \quad (4.10)$$

## 4.2.2 Limite thermodynamique et comportement à grande distance

Nous notons  $|0\rangle, |1\rangle, \dots$  les vecteurs propres de  $\mathbf{T}$  associés aux valeurs propres  $t_0 > t_1 > \dots$ .

Pour  $n \rightarrow \infty$ ,  $\mathbf{T}$  est dominé par les valeurs propres les plus grandes :

$$\mathbf{T}(\varepsilon) \underset{n \rightarrow \infty}{=} t_0^n(\varepsilon) [ |0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1| (t_1(\varepsilon)/t_0(\varepsilon))^n + O((t_2(\varepsilon)/t_0(\varepsilon))^n) ].$$

Pour  $n \rightarrow \infty$ , la fonction à un point a donc pour limite

$$\lim_{n \rightarrow \infty} Z_n^{(1)}(k) = \langle q_k \rangle = \langle 0 | \hat{q} | 0 \rangle.$$

Plus généralement, la fonction à  $m$  points dans le secteur  $0 \leq i_1 \leq i_2 \dots \leq i_m \leq n$  a comme limite

$$\langle q_{i_1} q_{i_2} \dots q_{i_m} \rangle = t_0^{i_1-i_m} \langle 0 | \hat{q} \mathbf{T}^{i_m-i_m-1} \hat{q} \dots \mathbf{T}^{i_2-i_1} \hat{q} | 0 \rangle. \quad (4.11)$$

La fonction à deux points à grande distance. La fonction à deux points dans la limite thermodynamique devient

$$Z^{(2)}(k, l) = t_0^{-|k-l|} \langle 0 | \hat{q} \mathbf{T}^{|k-l|} \hat{q} | 0 \rangle.$$

Examinons maintenant son comportement à grande distance  $|l-k| \rightarrow \infty$  :

$$Z^{(2)}(k, l) = (\langle 0 | \hat{q} | 0 \rangle)^2 + \left( \frac{t_1(\varepsilon)}{t_0(\varepsilon)} \right)^{|k-l|} (\langle 0 | \hat{q} | 1 \rangle)^2 + O\left( (t_2(\varepsilon)/t_0(\varepsilon))^{|k-l|} \right).$$

Le terme dominant est une constante, le carré de la valeur moyenne  $\langle q_k \rangle = \langle 0 | \hat{q} | 0 \rangle$ . Introduisons alors la fonction à deux points *connexe* (cf. section 1.4.2) :

$$W^{(2)}(k, l) = Z^{(2)}(k, l) - Z^{(1)}(k) Z^{(1)}(l) = \langle (q_k - \langle q_k \rangle) (q_l - \langle q_l \rangle) \rangle.$$

Le terme dominant disparaît et

$$W^{(2)}(k, l) \underset{|k-l| \rightarrow \infty}{\sim} \left( \frac{t_1(\varepsilon)}{t_0(\varepsilon)} \right)^{|k-l|} ((0|\hat{q}|1))^2.$$

(Si  $\langle 0|\hat{q}|1 \rangle = 0$  il faut prendre le terme suivant.) La fonction à deux points connexe décroît donc exponentiellement pour  $|l - k| \rightarrow \infty$  :

$$W^{(2)}(k, l) \underset{|k-l| \rightarrow \infty}{\propto} e^{-|k-l|/\xi}$$

où nous avons introduit la *longueur de corrélation*

$$\xi = \frac{1}{\ln[t_0(\varepsilon)/t_1(\varepsilon)]}. \quad (4.12)$$

*Remarque.* Comme noté plus haut, la fonction de corrélation connexe est identique à la fonction à deux points de la variable obtenue en éliminant la valeur moyenne par une simple translation  $q_k \mapsto q'_k$  :

$$q'_k = q_k - \langle q_k \rangle \Rightarrow \langle 0|\hat{q}'|0 \rangle = \langle q'_k \rangle = 0.$$

La valeur moyenne  $\langle q_k \rangle$  n'a donc, en général, pas de signification physique particulière, puisqu'il suffit d'une translation de l'origine des positions pour la supprimer. Cependant, dans certains cas le point  $q = 0$  est privilégié, par exemple quand le système est invariant par la réflexion  $q \mapsto -q$ . Dans ce cas, une valeur moyenne non nulle a un sens de *brisure spontanée de symétrie*. En reprenant les arguments précédents, on vérifie que ceci implique que le vecteur  $|0\rangle$  n'est pas symétrique et donc que la valeur propre  $t_0$  est dégénérée. Il est possible de démontrer que cette situation ne se rencontre jamais en mécanique quantique pour un système à un nombre fini de degrés de liberté (*cf.* section 3.4).

### 4.3 Modèle classique à basse température : un exemple

Nous avons montré que l'approximation discrète de l'intégrale de chemin a une interprétation naturelle en terme de mécanique statistique classique à une dimension sur réseau. Nous illustrons ce résultat par un exemple simple. Considérons la fonction de partition

$$\mathcal{Z}_n(T) = \int \left( \prod_{k=1}^n d\rho(q_k) \right) \exp[-E(q_i)/T], \quad (4.13)$$

où  $q_i$  caractérise la configuration au point  $i$  d'un réseau unidimensionnel (par exemple, la déviation d'une particule de sa position d'équilibre),  $n$  est la taille

du réseau,  $T$  la température,  $d\rho(q)$  la distribution de la variable  $q$  et  $E(q_i)$  l'énergie de configuration que nous choisissons de la forme particulière (interaction de proches voisins)

$$E(q) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} J (q_i - q_{i-1})^2, \quad J > 0, \quad (4.14)$$

( $J$  caractérise l'intensité de l'interaction). Enfin nous imposons par commodité des conditions aux limites périodiques :  $q_n = q_0$ .

Nous posons

$$d\rho(q) = e^{-v(q)} dq.$$

L'exemple le plus simple correspond à une fonction  $v(q)$  avec un minimum unique à  $q = 0$  où elle est régulière,

$$v(q) = \frac{1}{2} v_2 q^2 + O(q^3).$$

On peut imaginer ce terme comme dû à une force de rappel effective qui ramène une particule à sa position d'équilibre et dont on suppose la dépendance dans la température négligeable.

Pour  $T \rightarrow 0$ , la configuration dominante est obtenue en minimisant l'énergie (4.13) et correspond à tous les  $q_i$  égaux. Alors pour  $n \rightarrow \infty$ , seul le voisinage de la configuration  $q_i = 0$ , qui a le poids le plus grand, contribue à la fonction de partition. Dans ces limites, après le changement de variable  $q_i \mapsto T^{1/4} q_i$ , la fonction de partition est donnée par

$$\mathcal{Z}_n(T) \propto \int \prod_{k=1}^n dq_k \exp[-\mathcal{S}(q)] \quad (4.15)$$

avec

$$\mathcal{S}(q) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left[ J (q_i - q_{i-1})^2 / \sqrt{T} + v_2 \sqrt{T} q_i^2 \right]. \quad (4.16)$$

Comparant à l'expression (2.37) pour  $\hbar = \omega = 1$ , nous trouvons pour  $T \rightarrow 0$  :

$$\mathcal{Z}_n(T) \propto \text{tr} e^{-n\varepsilon \hat{H}},$$

où  $\hat{H}$  est l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{m}{2} \hat{q}^2 \quad (4.17)$$

avec

$$\varepsilon = \sqrt{v_2 T / J} + O(T^{3/2}), \quad m = \sqrt{v_2 J} + O(T).$$

La limite continue qui conduit à l'intégrale de chemin, correspond à  $\varepsilon \propto \sqrt{T} \rightarrow 0$ , c'est-à-dire à une limite de basse température.

Le comportement à longue distance de la fonction à deux points est lié à la différence entre les deux premières valeurs propres de  $\hat{H}$ . Si l'on définit la longueur de corrélation  $\xi$  par

$$\langle q_k q_0 \rangle \underset{k \rightarrow \infty}{\propto} e^{-k/\xi},$$

on déduit de l'équation (4.12) que pour  $T \rightarrow 0$  :

$$\xi \sim 1/\varepsilon = \sqrt{J/v_2 T}.$$

L'intégrale de chemin est obtenue dans une limite où la longueur de corrélation diverge, une propriété que nous discutons dans un cadre général en section 4.4.1.

## 4.4 Limite continue et intégrale de chemin

Nous examinons maintenant de façon plus générale la limite du pas de temps  $\varepsilon \rightarrow 0$  qui, formellement, fait passer de l'intégrale avec des temps discrets à l'intégrale de chemin. Nous montrons que la limite continue est liée à la divergence de la longueur de corrélation du modèle statistique classique.

### 4.4.1 Limite continue

La représentation (4.6) montre que

$$\ln \mathbf{T}(\varepsilon) \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} -\varepsilon H,$$

ce qui est cohérent avec la discussion de la section 2.2 qui conduit à

$$\mathcal{T}(q, q') \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} \langle q' | e^{-\varepsilon H} | q \rangle.$$

Ces relations se traduisent par une relation entre valeurs propres de la matrice de transfert et valeurs propres  $E_k$  de  $H$  (qui a un spectre discret et dont le fondamental n'est pas dégénéré, cf. section 3.4) :

$$\ln t_k(\varepsilon) \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} -\varepsilon E_k.$$

Ainsi, dans la limite  $\varepsilon \rightarrow 0$ , les différences entre les valeurs propres de la matrice de transfert tendent vers zéro.

*Divergence de la longueur de corrélation.* Dans la limite  $\varepsilon \rightarrow 0$ , la longueur de corrélation (4.12) devient

$$\xi \sim \frac{1}{\varepsilon(E_1 - E_0)}.$$

La limite  $\varepsilon \rightarrow 0$ , qui conduit à l'intégrale de chemin avec temps continu, correspond donc dans le langage statistique à une limite où la longueur de corrélation diverge. Une échelle de longueur grande par rapport à la maille du réseau est ainsi engendrée dynamiquement.

*Fonction de partition dans la limite continue.* Considérons la fonction de partition classique

$$\mathcal{Z}(n, \varepsilon) = \text{tr } \mathbf{T}^n(\varepsilon).$$

En section 2.3, nous avons introduit la limite double  $n \rightarrow \infty, \varepsilon \rightarrow 0$  avec  $n\varepsilon = \beta$  fixé. Bien que le volume  $n \rightarrow \infty$ , ce n'est pas la limite thermodynamique qui elle correspond à  $n \rightarrow \infty$  avec  $\varepsilon$  fixé. Par contre, cette limite conduit à la représentation par intégrale de chemin de la fonction de partition quantique :

$$\lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \mathcal{Z}(n, \varepsilon) = \mathcal{Z}(\beta) = \text{tr } e^{-\beta H}.$$

Nous pouvons maintenant donner à cette limite, appelée *limite continue* puisque le réseau a disparu, une interprétation dans le cadre du modèle statistique classique : la limite double  $n \rightarrow \infty, \varepsilon \rightarrow 0$  à  $\beta = n\varepsilon$  fixé est une limite où la longueur  $n$  du système est fixée en unité de longueur de corrélation

$$\frac{n}{\xi} = \beta(E_1 - E_0).$$

Au sens de la mécanique statistique classique,  $\beta$  est donc la longueur du système exprimée en unité de longueur de corrélation et la limite de température nulle,  $\beta \rightarrow \infty$ , du système quantique est la limite thermodynamique du système classique. Dans cette limite

$$\ln \mathcal{Z}(\beta) \underset{\beta \rightarrow \infty}{\sim} -\beta E_0.$$

L'énergie libre du système classique  $W = \ln \mathcal{Z}(\beta)$  est extensive, elle croît comme le « volume » dans la limite de grand volume, et est proportionnelle à l'énergie du fondamental du système quantique.

Dans le modèle classique la dépendance en  $\beta$  est appelée effet de taille finie.

*Limite continue et universalité.* Dans la limite continue, une physique non triviale à l'échelle  $\xi$  émerge, qui ne dépend plus de la structure initiale de réseau. L'existence d'une limite continue reflète des propriétés d'*universalité*, c'est-à-dire d'indépendance des propriétés à longue distance de la structure détaillée du modèle microscopique (en particulier, comme la discussion de la section 2.2 l'a montré, nous aurions pu choisir une forme plus générale que l'expression (4.2)).

Le phénomène que nous observons ici a un sens profond : de façon générale, dans un modèle statistique une limite continue n'existe que quand la longueur de corrélation diverge. Cette divergence caractérise souvent un point

de transition de phase continue ou du second ordre. Ce phénomène explique pourquoi les transitions de phase continues (c'est-à-dire avec divergence de longueur de corrélation) peuvent être décrites par des théories statistiques des champs euclidiennes. À une dimension d'espace, avec interaction de courte portée, la longueur de corrélation ne peut diverger qu'à température nulle, ce qui explique le rôle de la limite  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

#### 4.4.2 Fonctions de corrélation et limite continue

Nous avons montré que la fonction à  $m$  points, dans le secteur  $0 \leq i_1 \leq i_2 \dots \leq i_m \leq n$ , peut s'écrire (équation (4.10))

$$\langle q_{i_1} q_{i_2} \dots q_{i_m} \rangle = \mathcal{Z}^{-1}(n, \varepsilon) \operatorname{tr} \mathbf{T}^{n-i_m+i_1} \hat{q} \mathbf{T}^{i_m-i_{m-1}} \hat{q} \dots \mathbf{T}^{i_2-i_1} \hat{q}.$$

Introduisons les variables

$$t_k = \varepsilon i_k \Rightarrow i_k / \xi = t_k (E_1 - E_0),$$

et la trajectoire  $q(t)$  telle que  $q(k\varepsilon) = q_k$  (cf. section 2.3) et donc  $q(t_k) = q_{i_k}$ . La limite continue est maintenant une limite  $\varepsilon \rightarrow \beta$  et  $t_k$  fixés : les distances sont fixées en prenant comme échelle de distance la longueur de corrélation au lieu de la maille de réseau ou de l'échelle microscopique. Dans cette limite, nous pouvons exprimer la matrice de transfert en fonction de l'hamiltonien quantique :

$$\begin{aligned} \langle q(t_1) q(t_2) \dots q(t_m) \rangle_\beta &= \mathcal{Z}^{-1}(\beta) \operatorname{tr} \left[ e^{-(\beta-t_m+t_1)H} \hat{q} e^{-(t_m-t_{m-1})H} \hat{q} \dots \right. \\ &\quad \left. \times e^{-(t_2-t_1)H} \hat{q} \right]. \end{aligned} \quad (4.18)$$

En même temps, les intégrales multiples tendent vers des intégrales de chemin

$$\langle q(t_1) q(t_2) \dots q(t_m) \rangle_\beta = \mathcal{Z}^{-1}(\beta) \int [dq] q(t_1) \dots q(t_m) e^{-\mathcal{S}(q)}. \quad (4.19)$$

Dans la limite continue, les fonctions de corrélation du modèle statistique tendent vers les fonctions de corrélation définies par l'intégrale de chemin. Dans cette limite, les fonctions de corrélation ont donc également des propriétés d'universalité : elles s'expriment en termes d'intégrales de chemin où toute trace du réseau initial a disparu.

*Limite thermodynamique.* La limite thermodynamique du modèle classique unidimensionnel correspond maintenant à  $\beta \rightarrow \infty$ , c'est-à-dire à la limite de basse température d'un modèle de mécanique statistique quantique à zéro dimension (une seule particule). Dans cette limite, les fonctions de corrélation

deviennent

$$\langle q(t_1)q(t_2) \dots q(t_m) \rangle = \langle 0 | \hat{q} e^{-(t_m - t_{m-1})(H - E_0)} \hat{q} \dots e^{-(t_2 - t_1)(H - E_0)} \hat{q} | 0 \rangle, \quad (4.20)$$

où  $|0\rangle$  est le fondamental du hamiltonien.

*Mécaniques statistiques quantique et classique.* Nous avons donc montré comment un modèle de mécanique statistique quantique avec une particule était obtenu comme limite continue d'un modèle de mécanique statistique classique unidimensionnel. Cette relation s'étend aux dimensions supérieures ( $D$  dimensions pour le modèle quantique,  $D + 1$  dimensions pour le modèle classique), le caractère quantique correspondant classiquement à une dimension supplémentaire de taille  $\beta$  avec conditions aux limites périodiques.

Notons, cependant, que l'analogie entre mécaniques statistiques classique et quantique n'est pas complète dans la mesure où seules les fonctions de corrélation à temps égaux ont une interprétation quantique directe, comme moyennes statistiques à température finie de puissances de la position  $q$ .

Par contre, en dimensions supérieures, il existe dans le cas classique des fonctions de corrélations à temps égaux qui ont des analogues quantiques.

Par ailleurs, après prolongement analytique à des temps réels  $t \mapsto it$  (mais pas sur  $\beta!$ ), les fonctions de corrélation classiques deviennent des fonctions de corrélation quantiques thermiques dépendantes du temps.

*Remarques.*

(i) D'autres processus aléatoires conduisent à des intégrales de chemin et ont les fonctions de corrélation correspondantes comme observables. Ainsi la marche au hasard correspond à un hamiltonien libre. L'équation de Fokker-Planck (section 5.5) qui décrit de tels processus peut être résolue en terme d'intégrale de chemin.

(ii) Quand l'action euclidienne n'est pas réelle (comme dans le cas de l'hamiltonien en champ magnétique, cf. section 5.1), les moyennes de la forme (4.19) n'ont plus d'interprétation probabiliste. Pour des raisons qui apparaissent dans l'étude de l'évolution en temps réel, elles restent pourtant des quantités utiles à étudier, et par extension nous les appellerons encore fonctions de corrélation.

*Fonctionnelles génératrices. Théorie des perturbations.* Nous avons montré en section 2.8 comment calculer l'intégrale de chemin perturbativement pour tout hamiltonien de la forme  $p^2/2m + V(q)$  en terme de l'intégrale de chemin (2.41). L'argument se généralise immédiatement aux fonctions de corrélation correspondantes. En fait, en ajoutant au potentiel un terme de couplage à une force extérieure arbitraire, on construit une fonctionnelle génératrice des fonctions de corrélation. Définissons

$$\mathcal{Z}(b) = \int [dq(t)] \exp \left[ -\mathcal{S}(q) + \int dt q(t)b(t) \right]. \quad (4.21)$$

On vérifie alors

$$\langle q(t_1) \dots q(t_n) \rangle = \mathcal{Z}^{-1}(b=0) \left( \frac{\delta}{\delta b(t_1)} \dots \frac{\delta}{\delta b(t_n)} \right) \mathcal{Z}(b) \Big|_{b=0}.$$

On peut maintenant facilement combiner cette expression et le développement perturbatif.

Enfin, la fonctionnelle  $\mathcal{W}(b) = \ln \mathcal{Z}(b)$  est la fonctionnelle des fonctions de corrélation connexes (cf. section 1.4.2).

*Équation du mouvement quantique.* De l'expression (4.21), on peut déduire des relations entre fonctions de corrélation, en exprimant que l'intégrale sur tout l'espace d'une dérivée s'annule :

$$\int [dq(t)] \frac{\delta}{\delta q(\tau)} \exp \left[ -\mathcal{S}(q) + \int dt q(t)b(t) \right] = 0,$$

ou plus explicitement :

$$\int [dq(t)] \left[ b(\tau) - \frac{\delta \mathcal{S}(q)}{\delta q(\tau)} \right] \exp \left[ -\mathcal{S}(q) + \int dt q(t)b(t) \right] = 0.$$

On remarque alors que  $q(t)$  dans l'intégrale peut être remplacé par une dérivée fonctionnelle à l'extérieur, ce qui conduit à l'équation

$$\left[ b(\tau) - \frac{\delta \mathcal{S}(\delta/\delta b(t))}{\delta q(\tau)} \right] \int [dq(t)] \exp \left[ -\mathcal{S}(q) + \int dt q(t)b(t) \right] = 0.$$

Dans l'intégrale restante, nous reconnaissons la fonctionnelle génératrice  $\mathcal{Z}(b)$ . L'équation peut donc se réécrire

$$\left[ b(\tau) - \frac{\delta \mathcal{S}(\delta/\delta b(t))}{\delta q(\tau)} \right] \mathcal{Z}(b) = 0. \quad (4.22)$$

Cette équation fonctionnelle pour  $\mathcal{Z}(b)$ , appelée équation de Schwinger-Dyson en théorie des champs, a comme solution l'intégrale de chemin initiale. Si on développe cette équation fonctionnelle en puissances de  $b$ , on trouve un ensemble infini d'équations reliant les fonctions de corrélation entre elles.

## 4.5 La fonction à deux points : calcul perturbatif, représentation spectrale

La fonction de corrélation à deux points joue un rôle important en théorie quantique des champs et en mécanique statistique. Dans le cadre de la mécanique quantique, nous allons d'abord la calculer perturbativement au premier ordre non gaussien, ce qui permettra d'illustrer certains aspects de l'analyse des sections précédentes. Nous établirons ensuite l'existence et les propriétés de sa représentation spectrale.

### 4.5.1 Calcul perturbatif

Nous calculons maintenant la fonction à deux points  $\langle q(t)q(u) \rangle_\lambda$  correspondant à l'action

$$S(q) = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \left[ \frac{1}{2} \dot{q}^2(t) + \frac{1}{2} q^2(t) + \frac{1}{4!} \lambda q^4(t) \right], \quad (4.23)$$

à l'ordre  $\lambda$ , et dans la limite  $\beta \rightarrow \infty$ . Nous faisons le calcul avec des conditions aux limites périodiques.

L'algèbre est la même qu'en section 1.4.1. Le développement à l'ordre  $\lambda$  peut s'écrire

$$\begin{aligned} Z^{(2)}(t, u) &\equiv \langle q(t)q(u) \rangle_\lambda \\ &= \frac{Z(\beta, 0)}{Z(\beta, \lambda)} \left[ \Delta(t - u) - \frac{1}{24} \lambda \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau \langle q(t)q(u)q^4(\tau) \rangle_0 \right] + O(\lambda^2), \end{aligned}$$

où la fonction de partition  $Z(\beta, \lambda)$  a été calculée à cet ordre en section 3.1 et  $\Delta(t)$  est donnée en (2.46).

L'application du théorème de Wick entraîne

$$\langle q(t)q(u)q^4(\tau) \rangle_0 = 3\Delta(t - u)\Delta^2(0) + 12\Delta(t - \tau)\Delta(u - \tau)\Delta(0).$$

Nous reconnaissons dans la première contribution le produit de la fonction à deux points gaussienne par la correction à la fonction de partition. Ce terme disparaît dans le rapport

$$\begin{aligned} Z^{(2)}(t, u) &= \left[ 1 - \frac{1}{8} \lambda \beta \Delta^2(0) \right]^{-1} \\ &\times \left[ \Delta(t - u) \left( 1 - \frac{1}{8} \lambda \beta \Delta^2(0) \right) - \frac{1}{2} \lambda \Delta(0) \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau \Delta(t - \tau) \Delta(u - \tau) \right] \end{aligned}$$

et donc

$$Z^{(2)}(t, u) = \Delta(t - u) - \frac{1}{2} \lambda \Delta(0) \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau \Delta(t - \tau) \Delta(\tau - u) + O(\lambda^2).$$

Dans la limite  $\beta \rightarrow \infty$  on trouve, en particulier,

$$Z^{(2)}(t, u) = \frac{1}{2} e^{-|t-u|} \left[ 1 - \frac{1}{8} \lambda (1 + |t - u|) \right] + O(\lambda^2). \quad (4.24)$$

On a montré que pour  $|t - u| \rightarrow \infty$

$$Z^{(2)}(t, u) \underset{|t-u| \rightarrow \infty}{\sim} A e^{-(E_1 - E_0)|t-u|} \quad (\text{cf. la discussion de la section 4.2}).$$

Les niveaux d'énergie  $E_k$  ont été calculés en section 3.1. On en déduit la différence

$$E_1 - E_0 = 1 + \frac{1}{8} \lambda + O(\lambda^2).$$

On voit donc que le terme proportionnel à  $|t - u| e^{-|t-u|}$  provient du développement de l'exponentielle

$$e^{-(1+\lambda/8)|t-u|} = e^{-|t-u|} (1 - \lambda|t-u|/8) + O(\lambda^2).$$

On conclut que la fonction à deux points peut, à cet ordre, s'écrire

$$Z^{(2)}(t, u) = \frac{1}{2} (1 - \frac{1}{8}\lambda) e^{-(E_1 - E_0)|t-u|} + O(\lambda^2).$$

On vérifie en particulier que cette expression satisfait à l'ordre  $\lambda$  la relation (4.27) ( $\hbar = m = 1$ )

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{d}{dt} Z^{(2)}(t, 0) = -\frac{1}{2} (1 - \frac{1}{8}\lambda) (E_1 - E_0) = -\frac{1}{2} + O(\lambda^2).$$

## 4.5.2 Représentation spectrale

Nous partons de la représentation (4.20) de la fonction à deux points

$$Z^{(2)}(t) \equiv \langle q(0)q(t) \rangle = \langle 0 | \hat{q} e^{-t|(H-E_0)} \hat{q} | 0 \rangle.$$

Nous supposons que l'hamiltonien  $H$  est hermitien, borné inférieurement et, pour simplifier les notations, a un spectre discret. Dans la base où  $H$  est diagonal, la fonction de corrélation à deux points peut être écrite

$$Z^{(2)}(t) = \sum_{n \geq 0} |\langle 0 | \hat{q} | n \rangle|^2 e^{-(\varepsilon_n - \varepsilon_0)|t|}, \quad (4.25)$$

où les quantités  $|n\rangle$  et  $\varepsilon_n$  sont, respectivement, les fonctions propres et les valeurs propres de  $H$ . Comme conséquence de l'hermiticité de  $H$ , les valeurs propres sont réelles et les exponentielles dans le membre de droite ont des coefficients positifs. La transformée de Fourier de la fonction à deux points

$$\tilde{Z}^{(2)}(\omega) = \int dt Z^{(2)}(t) e^{i\omega t}$$

a donc la représentation

$$\tilde{Z}^{(2)}(\omega) = 2\pi |\langle 0 | \hat{q} | 0 \rangle|^2 \delta(\omega) + 2 \sum_{n > 0} \frac{(\varepsilon_n - \varepsilon_0) |\langle 0 | \hat{q} | n \rangle|^2}{[\omega^2 + (\varepsilon_n - \varepsilon_0)^2]}. \quad (4.26)$$

Deux propriétés de la transformée de Fourier de la fonction à deux points s'en déduisent : sauf pour une possible partie distributive à  $\omega = 0$ , elle est une fonction analytique de  $\omega^2$  avec pôles uniquement sur l'axe réel négatif. De plus, les résidus des pôles sont tous positifs ; on en déduit que  $\tilde{Z}^{(2)}(\omega)$  ne peut pas décroître plus vite que  $1/\omega^2$  quand  $\omega^2$  tend vers l'infini.

Un résultat plus précis peut même être démontré. Calculons la limite quand  $t \rightarrow 0+$  de la dérivée de

$$Z^{(2)}(t) = \frac{1}{Z(\beta)} \operatorname{tr}[e^{-(\beta-t)H} \hat{q} e^{-tH} \hat{q}]$$

à  $\beta$  fini. Alors

$$\lim_{t \rightarrow 0+} \frac{d}{dt} Z^{(2)}(t) = \frac{1}{Z(\beta)} \operatorname{tr}[e^{-\beta H} (H\hat{q}^2 - \hat{q}H\hat{q})].$$

À cause de la propriété cyclique de la trace

$$2 \operatorname{tr}\{e^{-\beta H} (H\hat{q}^2 - \hat{q}H\hat{q})\} = \operatorname{tr}\{e^{-\beta H} (H\hat{q}^2 + \hat{q}^2 H - 2\hat{q}H\hat{q})\} = \operatorname{tr}\{e^{-\beta H} [\hat{q}[\hat{q}, H]]\}.$$

Pour un hamiltonien quadratique dans la variable d'impulsion  $H = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + O(\hat{p})$ , les commutateurs peuvent être évalués explicitement :

$$[\hat{q}[\hat{q}, H]] = -\frac{\hbar^2}{m} \quad \Rightarrow \quad \lim_{t \rightarrow 0+} \frac{d}{dt} Z^{(2)}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}. \quad (4.27)$$

Appliquant ce résultat dans la limite  $\beta \rightarrow \infty$  à l'expression (4.25), nous trouvons

$$\frac{\hbar^2}{2m} = \sum_{n \geq 0} |\langle 0 | \hat{q} | n \rangle|^2 (\varepsilon_n - \varepsilon_0).$$

Nous concluons

$$\tilde{Z}^{(2)}(\omega) \underset{\omega \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\hbar^2}{m\omega^2}.$$

Ce résultat utile n'est pas surprenant. Le comportement pour  $\omega \rightarrow \infty$  est relié à l'évolution à temps court et nous avons vu que la partie la plus singulière de l'opérateur d'évolution est alors déterminée par l'hamiltonien libre.

Enfin, quand le spectre de  $H$  a une partie continue, la somme dans (4.26) est remplacée par une intégrale, les pôles sont remplacés par une coupure avec une discontinuité positive et les conclusions sont les mêmes. La généralisation relativiste de la représentation (4.26) est appelée représentation de Källén-Lehmann.

*Régularité des chemins.* Le calcul précédent implique

$$\begin{aligned} \left\langle (q(t+\tau) - q(t))^2 \right\rangle &= -2 \langle q(t)(q(t+\tau) - q(t)) \rangle \\ &\underset{\tau \rightarrow 0}{\sim} \frac{\hbar}{m} \hbar |\tau|, \end{aligned}$$

ce qui généralise le résultat (2.53) (ici  $t$  a les dimensions d'une énergie inverse au lieu d'un temps). Ce résultat démontre qu'aux temps courts les chemins typiques qui contribuent à l'intégrale de chemin ont les propriétés des chemins browniens, indépendamment du potentiel.

## 4.6 Formalisme d'opérateurs. Produits chronologiques

Utilisant la définition de l'intégrale de chemin comme limite d'intégrale avec temps discrets, nous avons déjà montré que les fonctions de corrélation pouvaient dans la limite continue se calculer par intégrale de chemin (expression (4.19)), mais pouvaient aussi être exprimées en termes d'opérateurs quantiques (expression (4.18)). Nous allons à présent montrer que ce résultat peut être obtenu directement dans le continu.

Ordonnons  $n$  temps  $t_1, t_2, \dots, t_n$  de telle sorte que

$$0 \leq t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_n \leq \beta. \quad (4.28)$$

Nous décomposons alors l'intervalle  $(0, \beta)$  en  $n + 1$  sous-intervalles  $(0, t_1)$ ,  $(t_1, t_2)$ , ...,  $(t_n, \beta)$ . L'action totale est la somme des contributions correspondantes :

$$\mathcal{S}(q) = \sum_{i=1}^{n+1} \int_{t_{i-1}}^{t_i} \left[ \frac{1}{2} m \dot{q}^2 + V(q) \right] dt \quad \text{avec } t_0 = 0, \quad t_{n+1} = \beta. \quad (4.29)$$

Nous réécrivons l'intégrale (4.19) en utilisant l'identité

$$\prod_{i=1}^n q(t_i) = \int \prod_{i=1}^n dq_i \delta [q(t_i) - q_i] q_i.$$

L'intégrale de chemin se factorise alors en un produit d'intégrales de chemin correspondant aux différents sous-intervalles de temps. Retournant à la définition même de l'intégrale de chemin (équations (2.21), (2.22)), nous remarquons que le numérateur de l'expression (4.19) avec l'ordre (4.28) est exactement (se souvenant de l'ordre (2.1))

$$\mathcal{Z}(\beta) \langle q(t_1) \dots q(t_n) \rangle_\beta = \text{tr} \left[ e^{-(\beta-t_n)H} \hat{q} e^{-(t_n-t_{n-1})H} \hat{q} \dots e^{-(t_2-t_1)H} \hat{q} e^{-t_1 H} \right]$$

en accord avec les équations (4.18), (4.19).

Introduisant la représentation de Heisenberg de l'opérateur  $\hat{q}$  (prolongée analytiquement  $it \mapsto t$ )

$$Q(t) = e^{tH} \hat{q} e^{-tH}, \quad (4.30)$$

(pour  $t$  réel  $Q(t)$  n'existe pas nécessairement et la définition est alors quelque peu formelle), nous pouvons écrire

$$\langle q(t_1) \dots q(t_n) \rangle_\beta = \mathcal{Z}^{-1}(\beta) \text{tr} \left[ e^{-\beta H} Q(t_n) \dots Q(t_1) \right]. \quad (4.31)$$

*Produits chronologiques.* L'écriture des fonctions de corrélation dans le formalisme d'opérateurs oblige à choisir un ordre dans le temps alors que les

fonctions sont symétriques. Un formalisme commode permet de rétablir cette symétrie, basée sur la notion de produit chronologique d'opérateurs.

Nous introduisons maintenant l'opération  $T$  qui ordonne les temps : aux opérateurs  $A_1(t_1), \dots, A_l(t_l)$ , considérés comme fonctions du temps, elle associe le produit ordonné dans le temps ( $T$ -produit ou produit chronologique) de ces opérateurs. Par exemple, pour  $l = 2$ ,

$$T[A_1(t_1)A_2(t_2)] = A_1(t_1)A_2(t_2)\theta(t_1 - t_2) + A_2(t_2)A_1(t_1)\theta(t_2 - t_1).$$

Nous pouvons alors réécrire l'expression (4.31), sans tenir compte de l'ordre entre les temps  $t_1, \dots, t_n$ ,

$$\langle q(t_1) \dots q(t_n) \rangle = \mathcal{Z}^{-1}(\beta) \operatorname{tr} \left\{ e^{-\beta H} T [Q(t_1)Q(t_2) \dots Q(t_n)] \right\}. \quad (4.32)$$

Enfin, si  $H$  a un fondamental unique et isolé  $|0\rangle$ , dans la limite  $\beta \rightarrow \infty$  les fonctions de corrélation prennent la forme (4.20) qui peut se réécrire

$$\langle q(t_1) \dots q(t_n) \rangle_{\beta \rightarrow \infty} = \langle 0 | T [Q(t_1)Q(t_2) \dots Q(t_n)] | 0 \rangle. \quad (4.33)$$

Ces produits chronologiques sont les prolongements analytiques en temps imaginaire des produits chronologiques que l'on introduit dans la formulation en temps réel de la théorie quantique des champs. Après prolongement analytique, ils engendrent les fonctions de Green à partir desquelles on peut, par exemple, calculer les amplitudes de diffusion. Cependant, toutes les théories physiquement raisonnables du point de vue des fonctions de Green ne correspondent pas nécessairement à des actions euclidiennes réelles et donc leurs prolongements analytiques ne sont des fonctions de corrélation que dans un sens formel.

*Fonction génératrice.* En termes de produits chronologiques, la fonction génératrice (4.21) s'écrit aussi

$$\mathcal{Z}(b, \beta) = \mathcal{Z}^{-1}(\beta) \operatorname{tr} \left\{ e^{-\beta H} T \left[ \exp \int dt Q(t)b(t) \right] \right\}. \quad (4.34)$$

Cette représentation est directement reliée à l'expression du développement perturbatif (9.52) de la section 9.7.

## Exercices

On se propose d'appliquer la méthode de la matrice de transfert à la fonction de partition (4.15) du modèle gaussien de la section 4.3, réécrite sous la forme

$$\mathcal{Z}_n(T) = \int \prod_{i=1}^n \frac{dq_i}{\sqrt{2\pi T}} \exp[-\mathcal{E}(q)]$$

avec

$$\mathcal{E}(q) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left[ (q_i - q_{i-1})^2 / T + vq_i^2 \right] \quad (4.35)$$

et conditions aux limites périodiques.

*Exercice 4.1.*

*Fonction de partition et valeurs propres.* Vérifier que la matrice de transfert  $\mathcal{T}(q, q')$  du modèle peut être mise sous la forme

$$\mathcal{T}(q, q') = \sqrt{b/2\pi} \exp \left[ -\frac{1}{2}a (q^2 + q'^2) + bqq' \right] \quad (4.36)$$

avec

$$a = \frac{1}{T} + \frac{v}{2}, \quad b = \frac{1}{T}. \quad (4.37)$$

Il est aussi commode de paramétrer les coefficients  $a, b$  en termes de paramètres  $\rho, \theta$  :

$$\cosh \theta = a/b = 1 + vT/2, \quad \rho = \sqrt{a^2 - b^2} = \sqrt{(v/T)(1 + vT/4)}.$$

Vérifier par le calcul explicite que la matrice de transfert satisfait alors

$$\mathbf{T}(\theta)\mathbf{T}(\theta') = \mathbf{T}(\theta + \theta'),$$

où  $\mathbf{T}(\theta)$  est l'opérateur de noyau  $\mathcal{T}(q, q')$  et paramètre  $\theta$ .

En déduire la fonction de partition  $\mathcal{Z}_n(T)$  et les valeurs propres de la matrice de transfert.

*Solution.*

$$\mathcal{Z}_n(T) = \frac{1}{2 \sinh(n\theta/2)} = \sum_{k=0}^{\infty} e^{-n(k+1/2)\theta}.$$

Les valeurs propres  $t_k$  sont donc

$$t_k = e^{-(k+1/2)\theta},$$

où pour  $T \rightarrow 0$  :

$$\theta \sim \sqrt{vT}.$$

*Exercice 4.2.*

*Vecteurs propres de la matrice de transfert gaussienne.* Les expressions ci-dessus montrent que le spectre de la matrice de transfert est lié au spectre de l'oscillateur harmonique. Trouver les vecteurs propres correspondants par des méthodes algébriques semblables, c'est-à-dire en identifiant des opérateurs de type annihilation et création.

*Solution.* En termes des opérateurs impulsion  $\hat{p}$  et position  $\hat{q}$ ,

$$\hat{p} = \frac{1}{i} \frac{d}{dq} \Rightarrow [\hat{q}, \hat{p}] = i, \quad (4.38)$$

nous définissons alors deux opérateurs de type annihilation et création,

$$\mathbf{A} = i\hat{p} + \frac{\sinh \theta}{T} \hat{q}, \quad \mathbf{A}^\dagger = -i\hat{p} + \frac{\sinh \theta}{T} \hat{q}. \quad (4.39)$$

Déterminer la relation de commutation de  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{A}^\dagger$  et démontrer

$$\mathbf{A}\mathbf{T} = e^{-\theta} \mathbf{T}\mathbf{A}, \quad \mathbf{A}^\dagger \mathbf{T} = e^\theta \mathbf{T}\mathbf{A}^\dagger. \quad (4.40)$$

*Solution.* La relation de commutation de  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{A}^\dagger$  est

$$[\mathbf{A}, \mathbf{A}^\dagger] = \frac{2}{T} \sinh \theta.$$

Agissant alors sur un vecteur  $|\psi\rangle$  quelconque, on en déduit

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{T}|\psi\rangle &\equiv \int dq' \left( \frac{d}{dq} + \frac{\sinh \theta}{T} q \right) \mathcal{T}(q, q') \psi(q') \\ &= \frac{1}{T} \int dq' (q' - q e^{-\theta}) \mathcal{T}(q, q') \psi(q'), \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \mathbf{T}\mathbf{A}|\psi\rangle &\equiv \int dq' \mathcal{T}(q, q') \left( \frac{d}{dq'} + \frac{\sinh \theta}{T} q' \right) \psi(q') \\ &= \int dq' \psi(q') \left( \frac{\sin \theta}{T} q' - \frac{d}{dq'} \right) \mathcal{T}(q, q') \\ &= \frac{1}{T} \int dq' (q' e^\theta - q) \mathcal{T}(q, q') \psi(q'). \end{aligned}$$

Nous en déduisons les relations de commutation (4.40) (la deuxième étant impliquée par conjugaison hermitienne).

### Exercice 4.3.

Retrouver les valeurs propres et en déduire les vecteurs propres de la matrice de transfert.

*Solution.* Les relations de commutation permettent de retrouver le spectre et déterminer les vecteurs propres. Nous connaissons déjà le spectre. Du spectre et de ces relations nous déduisons

$$\mathbf{A}^\dagger \mathbf{T} |m\rangle = \tau_m \mathbf{A}^\dagger |m\rangle = e^\theta \mathbf{T}\mathbf{A}^\dagger |m\rangle.$$

Ceci implique que  $\mathbf{A}^\dagger |m\rangle$  est un vecteur propre de  $\mathbf{T}$  avec valeur propre  $e^{-\theta} \tau_m = \tau_{m+1}$ . Le même raisonnement s'applique avec  $\mathbf{A}$ . Donc

$$\mathbf{A}^\dagger |m\rangle \propto |m+1\rangle, \quad \mathbf{A} |m\rangle \propto |m-1\rangle.$$

Comme il n'y a pas de vecteur propre avec valeur propre plus grande que  $\tau_0$ , la deuxième relation appliquée pour  $m=0$  ne peut donner qu'un vecteur nul :

$$\mathbf{A} |0\rangle = 0.$$

Notant que  $\hat{q}$  est proportionnel à  $\mathbf{A} + \mathbf{A}^\dagger$ , nous en déduisons  $\hat{q} |0\rangle \propto |1\rangle$ . Utilisant les représentations de  $\mathbf{A}$ ,  $\hat{\mathbf{Q}}$  dans la base  $|q\rangle$ , nous trouvons explicitement

$$\langle q|0\rangle \propto e^{-q^2 \sinh \theta/2T}, \quad \langle q|1\rangle \propto q e^{-q^2 \sinh \theta/2T}.$$

#### Exercice 4.4.

Généraliser le calcul à la fonction à deux points de la section 4.5.1 à

$$W_{ij}(t_1, t_2) \equiv \langle q_i(t_1) q_j(t_2) \rangle = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{Z(\beta)} \int [dq(t)] q_i(t_1) q_j(t_2) e^{-S(\mathbf{q})},$$

où  $\mathbf{q}$  est un vecteur à  $N$  composantes ( $i, j = 1 \dots N$ ),  $\mathbf{q}(-\beta/2) = \mathbf{q}(\beta/2)$ ,  $Z(\beta)$  est la fonction de partition et l'action est

$$S(\mathbf{q}) = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \left( \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{q}})^2 + \frac{1}{2} \mathbf{q}^2 + \frac{\lambda}{4!} (\mathbf{q}^2)^2 \right).$$

On notera que l'action a le groupe  $O(N)$  (rotations-réflexions de l'espace à  $N$  dimensions) comme groupe de symétrie. En déduire la différence entre les deux premiers niveaux d'énergie.

*Solution.* À cause de la symétrie par le groupe  $O(N)$ , la fonction à deux points a la forme

$$W_{ij}(t) = W(t) \delta_{ij}.$$

La fonction  $W(t)$  a alors un développement tout à fait analogue au cas  $N=1$ . La seule modification concerne le coefficient devant la contribution d'ordre  $\lambda$ . On en déduit

$$E_1 - E_0 = 1 + \frac{N+2}{24} \lambda + O(\lambda^2).$$

#### Exercice 4.5.

Compléter le calcul de la fonction à deux points de la section 4.5.1 pour  $\beta$  fini. Montrer en développant  $Z^{(2)}$  en série de Fourier que le résultat peut s'écrire

$$Z^{(2)}(t, u) = \frac{1}{2\omega \sinh(\omega\tau/2)} \cosh(\omega(\tau/2 - |t|)) + O(\lambda^2)$$

avec

$$\omega = E_1 - E_0 = 1 + \frac{1}{8} \lambda.$$

*Exercice 4.6.*

Déduire, par dérivation fonctionnelle de l'équation (4.22), une relation entre les fonctions à deux et quatre points dans l'exemple de l'action (4.23).

*Solution.* D'abord

$$\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta q(t)} = -\ddot{q}(t) + q(t) + \frac{\lambda}{3!} q^3(t).$$

L'équation (4.22) s'écrit alors

$$\left\{ \left[ - \left( \frac{d}{dt} \right)^2 + 1 \right] \frac{\delta}{\delta b(t)} + \frac{\lambda}{3!} \left( \frac{\delta}{\delta b(t)} \right)^3 \right\} \mathcal{Z}(b) = b(t).$$

Dérivant alors l'équation par rapport à  $b(u)$  et prenant la limite  $b \equiv 0$ , on trouve

$$[-(d_t)^2 + 1] Z^{(2)}(t, u) + \frac{\lambda}{3!} Z^{(4)}(t, t, t, u) = \delta(t - u).$$

*Exercice 4.7.*

Retrouver la fonction à deux points (4.24) à partir de l'équation ainsi obtenue.

*Solution.* À l'ordre zéro on retrouve  $Z^{(2)}(t, u) = \Delta(t - u)$ . Pour l'ordre suivant, on a besoin de la fonction à quatre points gaussienne qui est donnée par le théorème de Wick :

$$\begin{aligned} Z^{(4)}(t_1, t_2, t_3, t_4) &= \Delta(t_1 - t_2)\Delta(t_3 - t_4) + \Delta(t_1 - t_3)\Delta(t_2 - t_4) \\ &\quad + \Delta(t_1 - t_4)\Delta(t_3 - t_2), \end{aligned}$$

et donc

$$Z^{(4)}(t, t, t, u) = 3\Delta(0)\Delta(t - u).$$

Il suffit alors de résoudre l'équation différentielle

$$[-(d_t)^2 + 1] Z^{(2)}(t, u) = \delta(t - u) - \frac{\lambda}{2} \Delta(0)\Delta(t - u)$$

avec conditions de décroissance à l'infini pour retrouver le résultat. On peut aussi procéder par transformation de Fourier.



# Chapitre 5

## Intégrales de chemin et quantification

DANS LE CHAPITRE 2, nous avons construit une représentation de l'opérateur  $e^{-\beta H}$  sous forme d'intégrale de chemin dans le cas d'hamiltoniens de la forme  $p^2/2 + V(q)$ . Ces hamiltoniens ont la propriété d'être la somme d'une fonction de  $p$  et d'une fonction de  $q$ . Dans cette situation, pour passer de l'hamiltonien classique à l'hamiltonien quantique, il suffit de remplacer les variables réelles  $p$  et  $q$  par les opérateurs quantiques correspondants. Dans ce chapitre, nous allons étendre cette construction à des hamiltoniens qui sont linéaires dans les impulsions, et donc des actions linéaires dans les vitesses. Nous prendrons deux exemples : un système quantique couplé à un champ magnétique et la diffusion décrite par l'équation de Fokker-Planck. Dans ces exemples, l'apparition de produits d'opérateurs qui ne commutent pas pose le problème de la quantification. Le principe de correspondance ne suffit plus et l'ordre des opérateurs est déterminé par des conditions supplémentaires, comme l'hermiticité ou la conservation des probabilités. Nous montrerons que le calcul de l'intégrale de chemin présente alors des ambiguïtés directement liées à ce problème de quantification, c'est-à-dire au choix d'ordre des opérateurs position et impulsion. La limite continue n'est plus unique, mais dépend de la façon dont elle est atteinte.

Dans la dernière partie de ce chapitre, nous nous intéresserons à une situation où l'espace a une topologie non triviale, en l'occurrence un cercle, et nous montrerons comment ceci influence le calcul de l'intégrale de chemin.

### 5.1 Transformations de jauge

Avant de discuter la quantification en présence d'un champ magnétique, il est utile de rappeler quelques notions de mécanique classique.

*Transformation de jauge classique.* Comme il est bien connu, les équations classiques du mouvement qui sont obtenues en variant l'intégrale d'un lagrangien  $\mathcal{L}$ , sont insensibles à l'addition au lagrangien d'une dérivée totale :

$$\mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \mapsto \mathcal{L}_\Omega = \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) + \dot{\mathbf{q}} \cdot \nabla \Omega(\mathbf{q}). \quad (5.1)$$

En effet, l'action correspondante devient

$$\mathcal{A}(\mathbf{q}) = \int_{t'}^{t''} dt \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \mapsto \mathcal{A}_\Omega(\mathbf{q}) = \int_{t'}^{t''} dt \mathcal{L}_\Omega = \mathcal{A}(\mathbf{q}) + \Omega(\mathbf{q}(t'')) - \Omega(\mathbf{q}(t'))$$

et donc

$$\frac{\delta \mathcal{A}}{\delta \mathbf{q}(\tau)} = \frac{\delta \mathcal{A}_\Omega}{\delta \mathbf{q}(\tau)}.$$

Cette addition au lagrangien affecte par contre le moment conjugué

$$\mathbf{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \mapsto \mathbf{p} = \frac{\partial \mathcal{L}_\Omega}{\partial \dot{\mathbf{q}}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{q}}} + \nabla \Omega(\mathbf{q}), \quad (5.2)$$

et donc l'hamiltonien

$$\begin{aligned} H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} - \mathcal{L}, \\ \mapsto H_\Omega(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} - \mathcal{L}_\Omega = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \dot{\mathbf{q}} - \mathcal{L} = H(\mathbf{p} - \nabla \Omega(\mathbf{q}), \mathbf{q}). \end{aligned} \quad (5.3)$$

On voit que le nouvel hamiltonien est égal à l'ancien hamiltonien dans lequel la variable  $\mathbf{p}$  est remplacée par  $\mathbf{p} - \nabla \Omega(\mathbf{q})$ . Cette transformation qui n'affecte pas la physique, mais uniquement la description, est appelée transformation de jauge. Notons toutefois que pour un système invariant par translation d'espace un choix est plus simple que les autres, celui qui correspond directement aux quantités conservées. C'est le cas de l'hamiltonien libre  $H = \mathbf{p}^2/2m$ .

*Transformation de jauge quantique.* Nous décrivons maintenant les analogues quantiques des transformations (5.2, 5.3) et leur interprétation. Dans ce qui suit, nous notons  $\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, \hat{H}$  les opérateurs correspondant aux quantités classiques  $\mathbf{q}, \mathbf{p}, H$ . Aux transformations (5.2, 5.3) de la mécanique classique correspond, en mécanique quantique, une transformation unitaire engendrée par l'opérateur

$$\Omega = e^{i\Omega(\hat{\mathbf{q}})/\hbar}. \quad (5.4)$$

En effet,

$$\Omega \hat{\mathbf{p}} \Omega^\dagger = \hat{\mathbf{p}} - \nabla \Omega(\hat{\mathbf{q}}), \quad \Omega \hat{\mathbf{q}} \Omega^\dagger = \hat{\mathbf{q}}. \quad (5.5)$$

Le nouveau moment conjugué est obtenu par une transformation unitaire qui laisse l'opérateur position  $\mathbf{q}$  invariant. On vérifie de plus que la même transformation unitaire relie les hamiltoniens quantiques  $\hat{H}$  et  $\hat{H}_\Omega$  :

$$\hat{H}_\Omega(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}}) = \hat{H}(\hat{\mathbf{p}} - \nabla \Omega, \hat{\mathbf{q}}) = \Omega \hat{H}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}}) \Omega^\dagger.$$

À l'addition d'une dérivée totale au lagrangien correspond en mécanique quantique une transformation unitaire, qui laisse donc également la physique invariante. Dans cette transformation unitaire, les fonctions d'onde  $\psi(\mathbf{q})$  sont multipliées par une fonction de la position  $\mathbf{q}$  de module 1 (un élément du groupe  $U(1)$ ) :

$$\psi_{\Omega}(\mathbf{q}) = e^{i\Omega(\mathbf{q})/\hbar} \psi(\mathbf{q}). \quad (5.6)$$

Par ailleurs, l'opérateur  $U(t'', t')$ , solution de l'équation (2.2), se transforme en

$$U_{\Omega} = \Omega U \Omega^{\dagger},$$

et donc ses éléments de matrice deviennent

$$\langle \mathbf{q}'' | U_{\Omega}(t'', t') | \mathbf{q}' \rangle = e^{i(\Omega(\mathbf{q}'') - \Omega(\mathbf{q}'))/\hbar} \langle \mathbf{q}'' | U(t'', t') | \mathbf{q}' \rangle. \quad (5.7)$$

En mécanique quantique aussi la transformation que nous venons de décrire, et qui s'appelle une *transformation de jauge*, est sans implication physique et tous les choix de définitions des variables conjuguées  $\mathbf{p}$  sont *a priori* équivalents. Cependant, dans les cas des lagrangiens de la forme  $\frac{1}{2}m\dot{q}^2 - V(q)$ , il existe un choix plus simple que les autres.

## 5.2 Couplage au champ magnétique : invariance de jauge

Nous allons maintenant rappeler comment l'introduction d'un champ magnétique engendre une symétrie particulière appelée symétrie de jauge.

### 5.2.1 Invariance de jauge classique

L'action, correspondant à une particule dans un potentiel et couplée à un champ magnétique, est l'intégrale d'un lagrangien qui peut s'écrire

$$\mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2}m(\dot{\mathbf{q}})^2 - e\mathbf{A}(\mathbf{q}) \cdot \dot{\mathbf{q}} - V(\mathbf{q}), \quad (5.8)$$

où  $\mathbf{A}(\mathbf{q})$  est un potentiel vecteur dont dérive le champ magnétique  $\mathbf{B}$  et  $e$  la charge qui n'est introduite ici que pour respecter les conventions usuelles. L'équation du mouvement correspondante est

$$m\ddot{q}_{\mu} = -e \sum_{\nu} F_{\mu\nu} \dot{q}_{\nu} - \partial_{\mu} V,$$

où

$$F_{\mu\nu} = \partial_{\mu} A_{\nu} - \partial_{\nu} A_{\mu}$$

et nous avons utilisé la notation  $\partial_{\mu} \equiv \partial/\partial x_{\mu}$ .

En dimension 3, le tenseur antisymétrique  $F_{\mu\nu}$  peut se paramétrer en terme d'un vecteur, le champ magnétique  $\mathbf{B}$ , par

$$F_{\mu\nu} = \sum_{\rho} \epsilon_{\mu\nu\rho} B_{\rho},$$

où  $\epsilon_{\mu\nu\rho}$  est le tenseur complètement antisymétrique dans ses trois indices et  $\epsilon_{123} = 1$ . Alors

$$m\ddot{\mathbf{q}}_{\mu} = -e \sum_{\nu\rho} \epsilon_{\mu\nu\rho} B_{\rho} \dot{q}_{\nu} - \partial_{\mu} V,$$

ce qui, en notation vectorielle, peut aussi s'écrire

$$m\ddot{\mathbf{q}} = e\mathbf{B} \times \dot{\mathbf{q}} - \nabla V$$

avec

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}.$$

Les équations du mouvement sont toujours insensibles à l'addition d'un terme de dérivée totale au lagrangien :

$$\mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \mapsto \mathcal{L}_{\Omega} = \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) + \dot{\mathbf{q}} \cdot \nabla \Omega(\mathbf{q}).$$

Mais maintenant, une dérivée totale peut être compensée par une *transformation de jauge* correspondante du potentiel vecteur :

$$\mathbf{A}(\mathbf{q}) \mapsto \mathbf{A}_{\Omega}(\mathbf{q}) = \mathbf{A}(\mathbf{q}) + \frac{1}{e} \nabla \Omega(\mathbf{q}). \quad (5.9)$$

En présence d'un terme de potentiel vecteur, la transformation de jauge a une implication nouvelle : puisque l'équation du mouvement est invariante par les transformations de jauge (5.1), elle est également invariante dans la transformation (5.9), ce que l'on vérifie immédiatement puisque le champ magnétique  $\mathbf{B}$  est invariant de jauge. La transformation (5.9) définit donc des classes d'équivalence de potentiels vecteurs.

L'hamiltonien classique correspondant est

$$H = \frac{1}{2m} [\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{q})]^2 + V(\mathbf{q}). \quad (5.10)$$

Réciproquement, si l'on veut construire un lagrangien invariant dans l'addition d'un terme de dérivée totale ou un hamiltonien invariant dans la transformation (5.3) :

$$\mathbf{p} \mapsto \mathbf{p} - \nabla \Omega(\mathbf{q}),$$

on voit que l'addition d'un terme de potentiel vecteur fournit une réponse. Dans le formalisme hamiltonien cela correspond à la substitution

$$\mathbf{p} \mapsto \mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{q}).$$

Ce principe d'invariance a reçu le nom de *symétrie de jauge* et conduit à l'introduction d'un *champ de jauge*, ici le potentiel vecteur.

Bien sûr, en mécanique classique seules les équations du mouvement sont physiques, et le potentiel vecteur n'apparaît que comme un outil mathématique commode. Il n'en est pas tout à fait de même en mécanique quantique.

### 5.2.2 Invariance de jauge quantique

Pour passer de l'hamiltonien classique (5.10) à l'hamiltonien quantique  $\hat{H}$ , il faut faire un choix d'ordre des opérateurs dans le produit  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q})$ . Dans le cas du champ magnétique, la condition d'hermiticité détermine l'hamiltonien

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m} [\hat{\mathbf{p}}^2 + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{q}}) \cdot \hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\hat{\mathbf{q}}) + e^2\mathbf{A}^2(\hat{\mathbf{q}})] + V(\hat{\mathbf{q}}), \\ &= \frac{1}{2m} [\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{q}})]^2 + V(\hat{\mathbf{q}}).\end{aligned}\quad (5.11)$$

On peut aussi raisonner en termes d'invariance de jauge quantique. On parle d'*invariance de jauge* si les hamiltoniens correspondant à des potentiels vecteur  $\mathbf{A}(\hat{\mathbf{q}})$  reliés par une transformation de jauge (5.9) sont unitairement équivalents. La symétrie de jauge entraîne que l'hamiltonien ne peut dépendre de l'opérateur  $\hat{\mathbf{p}}$  qu'à travers la combinaison  $\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{q}})$ . En effet, dans les transformations (5.5, 5.9)

$$\Omega[\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}_\Omega(\hat{\mathbf{q}})]\Omega^\dagger = \hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{q}}).$$

Les conditions d'hermiticité et d'invariance de jauge conduisent donc à la même quantification.

Un autre choix de quantification conduirait à ajouter un terme proportionnel au commutateur

$$e[\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{A}(\hat{\mathbf{q}})] = -ie\hbar\nabla \cdot \mathbf{A}$$

à l'hamiltonien, c'est-à-dire une correction quantique qui a la forme d'un potentiel imaginaire violant à la fois l'hermiticité et l'invariance de jauge.

La combinaison

$$\mathbf{D} = \frac{i}{\hbar}(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{q}})) = \nabla_q + \frac{ie}{\hbar}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{q}}),$$

est appelée *dérivée covariante*. Ses composantes satisfont la relation de commutation

$$[D_\mu, D_\nu] = \frac{ie}{\hbar}F_{\mu\nu}.$$

### 5.2.3 Invariance de jauge et intégrale de chemin

Montrons que le principe de symétrie de jauge détermine aussi dans une large mesure la forme de l'intégrale de chemin donnant les éléments de matrice de l'opérateur  $U(t'', t')$  (équation (2.2)).

Ces éléments se transforment de façon multiplicative comme indiqué par l'équation (5.7). Nous pouvons écrire la phase comme l'intégrale d'une dérivée totale :

$$\Omega(\mathbf{q}'') - \Omega(\mathbf{q}') = \int_{t'}^{t''} dt \dot{\mathbf{q}} \cdot \nabla\Omega(\mathbf{q}(t)).$$

Du point de vue de l'intégrale de chemin (2.22), la transformation (5.7) peut donc être interprétée comme une modification de l'action (2.21) :

$$\mathcal{S}(\mathbf{q}) \mapsto \mathcal{S}_\Omega(\mathbf{q}) = \int_{t'}^{t''} dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{q}}^2(t) + V(\mathbf{q}(t), t) - i \dot{\mathbf{q}}(t) \cdot \nabla \Omega(\mathbf{q}(t)) \right].$$

Cette variation peut alors être compensée en ajoutant un terme supplémentaire au lagrangien dépendant d'un potentiel vecteur  $\mathbf{A}(\mathbf{q})$ ,

$$\mathcal{S}(\mathbf{q}) = \int_{t'}^{t''} dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{q}}^2 + ie \mathbf{A}(\mathbf{q}) \cdot \dot{\mathbf{q}} + V(\mathbf{q}) \right], \quad (5.12)$$

qui se transforme comme (équation (5.9))

$$\mathbf{A}_\Omega(\mathbf{q}) = \mathbf{A}(\mathbf{q}) + (1/e) \nabla \Omega(\mathbf{q}).$$

L'action euclidienne (5.12) correspond alors bien au lagrangien (5.8).

Un calcul direct, basé sur la solution de l'équation d'évolution aux temps courts (*cf.* section 5.4), confirme que l'intégrale de chemin ne fait en effet intervenir que l'action euclidienne classique (5.12) :

$$\langle \mathbf{q}'' | U(t'', t') | \mathbf{q}' \rangle = \int_{\mathbf{q}(t')=\mathbf{q}'}^{\mathbf{q}(t'')=\mathbf{q}''} [d\mathbf{q}(t)] \exp[-\mathcal{S}(\mathbf{q})/\hbar], \quad (5.13)$$

comme c'est le cas en l'absence de champ magnétique.

Notons que l'action euclidienne ainsi obtenue n'est plus réelle et ne définit donc plus une mesure positive. C'est une conséquence de la propriété suivante : en présence d'un champ magnétique, l'hamiltonien est toujours hermitien mais n'est plus réel symétrique. Du point de vue du passage du lagrangien réel au lagrangien euclidien, on voit aussi qu'un terme linéaire en  $\dot{q}$  acquiert un facteur  $i$  supplémentaire.

Par ailleurs, le terme (imaginaire) de champ magnétique a une propriété remarquable : il ne dépend que de la trajectoire, mais pas de la façon dont elle est parcourue. En effet

$$\int dt \mathbf{A}(\mathbf{q}) \cdot \dot{\mathbf{q}} = \oint d\mathbf{q} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}).$$

Cette propriété a des conséquences variées en mécanique quantique, comme la quantification de la charge du monopôle magnétique, ou plus généralement des propriétés de quantification quand l'espace n'est pas simplement connexe.

### 5.3 Quantification et intégrale de chemin

L'intégrale de chemin (5.13) ne dépend apparemment que de l'action classique et pourtant elle décrit un objet quantique. On peut donc se demander

à quel choix de quantification elle correspond. La réponse est qu'elle ne correspond à aucun choix comme nous allons le montrer un peu plus loin par un calcul explicite : sans contrainte supplémentaire, l'intégrale de chemin n'est pas complètement définie.

### 5.3.1 Temps discrets et limite continue

La nature de l'ambiguïté peut être comprise en revenant aux temps discrets et à l'opérateur d'évolution pour  $t'' - t' = \varepsilon$ . Alors, pour des chemins continus, pour  $\varepsilon \rightarrow 0$ ,

$$\int_{t'}^{t''=t'+\varepsilon} dt \mathbf{A}(\mathbf{q}(t)) \cdot \dot{\mathbf{q}} \sim (\mathbf{q}'' - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}'') \sim (\mathbf{q}'' - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}').$$

*A priori* il semblerait que ces deux termes, qui ne diffèrent que par l'argument  $\mathbf{q}'$  ou  $\mathbf{q}''$  de  $\mathbf{A}(\mathbf{q})$ , correspondent à des actions discrètes équivalentes du point de vue de la limite continue, puisqu'ils sont équivalents dans la limite  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Ce n'est pas le cas. En effet, la différence entre  $\mathbf{A}(\mathbf{q}'')$  et  $\mathbf{A}(\mathbf{q}')$  est d'ordre  $\mathbf{q}'' - \mathbf{q}'$  et donc, compte-tenu du facteur  $\mathbf{q}'' - \mathbf{q}'$  déjà présent, elle induit une modification de l'action discrète d'ordre

$$(\mathbf{q}'' - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}') - (\mathbf{q}'' - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}'') \sim - \sum_{ij} (q'_i - q''_i)(q'_j - q''_j) \partial_j A_i. \quad (5.14)$$

Cette modification est d'ordre  $\varepsilon$  parce que les chemins typiques sont tels que  $|(\mathbf{q}'' - \mathbf{q}')| = O(\sqrt{\varepsilon})$ . Or, comme nous l'avons montré en section 2.3, les termes d'ordre  $\varepsilon$  de l'action discrète contribuent à la limite continue.

Nous remarquons maintenant que l'opérateur  $e^{-\varepsilon \hat{H}/\hbar}$  est hermitien comme conséquence de l'hermiticité de  $\hat{H}$ . Donc ses éléments de matrice sont invariants par les transformations conjugaison complexe et échange  $\mathbf{q}' \leftrightarrow \mathbf{q}''$ . Cette condition impose de prendre une fonction symétrique de  $\mathbf{q}'', \mathbf{q}'$  comme  $\mathbf{A}((\mathbf{q}'' + \mathbf{q}')/2)$ .

Le choix précis est ensuite indifférent parce que deux fonctions symétriques diffèrent à l'ordre  $(\mathbf{q}'' - \mathbf{q}')^2$ , ce qui ne donne qu'une contribution d'ordre  $\varepsilon^{3/2}$  à l'action.

De même, l'invariance de jauge est satisfaite en prenant l'action continue et en approximant le chemin  $\mathbf{q}(t)$  par un mouvement rectiligne uniforme. On retrouve alors une forme symétrique équivalente à la forme précédente. Nous montrons en section 5.4 que c'est la forme obtenue par un calcul direct de l'opérateur d'évolution pour des intervalles de temps infinitésimaux à partir de l'hamiltonien (5.11).

Cependant, cette subtilité n'est plus visible dans l'expression formelle de l'intégrale de chemin. À la différence du cas sans champ, il existe en réalité une famille à un paramètre de limites continues qui dépendent de la forme spécifique de l'action discrète. Notons toutefois que le concept de limite continue reste un concept utile dans la mesure où un seul paramètre survit.

On peut suppléer à cette déficience en imposant que l'intégrale de chemin donne les éléments de matrice d'un opérateur ayant les bonnes propriétés de transformation de jauge ou hermitien. Nous trouvons là un exemple particulier d'un problème plus général : les difficultés de quantification sont souvent résolues en imposant que la théorie quantique préserve certaines propriétés de symétrie. Nous rencontrerons à nouveau ce problème dans les sections 5.5, 6.2, 7.9 ou au chapitre 10.

### 5.3.2 Ambiguïté et calcul perturbatif

Pour illustrer la discussion de la section 5.3.1, nous allons maintenant examiner comment ce problème d'ambiguïté, dans la définition de l'intégrale de chemin, se manifeste dans un calcul perturbatif et comment le résoudre.

Prenons l'exemple du calcul de l'énergie du fondamental à partir de la fonction de partition (nous faisons ici  $\hbar = 1$ ) correspondant à l'action

$$\mathcal{S}(\mathbf{q}) = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{q}}^2 + ie \mathbf{A}(\mathbf{q}) \cdot \dot{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \omega^2 \mathbf{q}^2 \right],$$

où nous supposons  $\mathbf{A}(\mathbf{q})$  polynomial.

Dans un développement en puissances de la charge  $e$ , au premier ordre on trouve (*cf.* section 2.8)

$$\mathcal{Z}(\beta) = \mathcal{Z}_0(\beta) \left[ 1 - ie \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \langle \dot{q}(t) \cdot \mathbf{A}(q(t)) \rangle \right] + O(e^2), \quad (5.15)$$

où  $\langle \bullet \rangle$  veut dire valeur moyenne par rapport à la mesure de l'oscillateur harmonique. Considérons un monôme contribuant à  $\mathbf{A}$ . Il faut calculer

$$\sum_i \sum_{j_1 j_2 \dots j_p} \langle \dot{q}_i(t) A_{i, j_1 j_2 \dots j_p} q_{j_1}(t) \dots q_{j_p}(t) \rangle.$$

La moyenne peut être calculée par le théorème de Wick (2.52). Le facteur  $\dot{q}$  doit être apparié de toutes les façons possibles à un facteur  $q$ . Tous les appariements donnent le même résultat d'où un facteur  $p$ . Ensuite les autres facteurs  $q$  doivent être appariés. On vérifie que le résultat peut alors s'écrire

$$\begin{aligned} & \sum_i \sum_{j_1 j_2 \dots j_p} \langle \dot{q}_i(t) A_{i, j_1 j_2 \dots j_p} q_{j_1}(t) \dots q_{j_p}(t) \rangle \\ &= \sum_{ij} \langle \dot{q}_i(t) q_j(t) \rangle \frac{\partial}{\partial q_j(t)} \sum_{j_1 j_2 \dots j_p} \langle A_{i, j_1 j_2 \dots j_p} q_{j_1}(t) \dots q_{j_p}(t) \rangle. \end{aligned}$$

On en déduit que la valeur moyenne dans (5.15) peut se mettre sous la forme (*cf.* équation (1.19))

$$-ie \int dt \sum_{ij} \langle \dot{q}_i(t) q_j(t) \rangle \left\langle \frac{\partial A_i}{\partial q_j} \right\rangle.$$

La fonction à deux points gaussienne, dans la limite  $\beta \rightarrow \infty$ , est donnée par l'équation (2.47) :

$$\Delta_{ij}(t) = \langle q_i(t)q_j(0) \rangle = \frac{\delta_{ij}}{2\omega} e^{-\omega|t|}.$$

Le problème nouveau est lié à l'apparition de la valeur moyenne  $\langle \dot{q}_i(t)q_j(t) \rangle$ . En dérivant  $\Delta_{ij}(t - t')$ , nous trouvons

$$\langle \dot{q}_i(t)q_j(t') \rangle = \frac{d\Delta_{ij}(t - t')}{dt} = -\frac{1}{2}\delta_{ij}\epsilon(t - t') e^{-\omega|t-t'|},$$

où  $\epsilon(t) = 1$  pour  $t > 0$ ,  $\epsilon(t) = -1$  pour  $t < 0$ . Clairement,  $\epsilon(0)$  n'est pas défini. Le résultat est ambigu, et l'ambiguïté au premier ordre en  $e$  est proportionnelle à

$$\frac{1}{2}ie\epsilon(0) \int dt \langle \nabla \cdot \mathbf{A}(q(t)) \rangle$$

et donc correspond à l'addition d'un terme de commutateur à l'action, exactement comme la discussion précédente le laissait prévoir. Notons cependant que

$$\frac{d}{dt} \langle q_i(t)q_j(t) \rangle = \frac{d}{dt} \frac{\delta_{ij}}{2\omega} = 0$$

est bien défini. Si nous voulons que dérivée et valeur moyenne commutent, nous trouvons pour  $i = j$

$$\frac{d}{dt} \langle q_i(t)q_i(t) \rangle = 2 \langle \dot{q}_i(t)q_i(t) \rangle = 0,$$

ce qui n'est compatible qu'avec  $\epsilon(0) = 0$ . C'est justement cette propriété de commutation pour des *produits à temps égaux* qui est nécessaire pour démontrer directement l'invariance de jauge du terme d'ordre  $e$  dans l'expression perturbative (5.15). En effet, dans la transformation de jauge (5.9), la contribution se transforme en

$$\begin{aligned} \text{variation de } ie \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \langle \dot{\mathbf{q}}(t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}(t)) \rangle &= i \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \langle \dot{\mathbf{q}}(t) \cdot \nabla \Omega(\mathbf{q}) \rangle \\ &= i \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \left\langle \frac{d}{dt} \Omega(\mathbf{q}(t)) \right\rangle. \end{aligned}$$

Si valeur moyenne et dérivée commutent, la variation devient

$$i \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \left\langle \frac{d}{dt} \Omega(\mathbf{q}(t)) \right\rangle = i [\Omega(\mathbf{q}(\beta/2)) - \Omega(\mathbf{q}(-\beta/2))] = 0,$$

à cause des conditions aux limites périodiques.

Par ailleurs, un autre choix de quantification conduit à ajouter un terme proportionnel à  $i\nabla \cdot \mathbf{A}$  à l'hamiltonien, c'est-à-dire un terme de potentiel

imaginaire. Celui-ci se distingue dans l'action classique du terme  $i\dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{A}$  de la manière suivante :  $i\dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{A}$  ainsi que le terme de potentiel réel sont invariants par la double transformation conjugaison complexe et renversement du temps, à la différence de  $i\nabla \cdot \mathbf{A}$ . En particulier, cela conduit à faire un choix symétrique par renversement du temps et donc à poser  $\epsilon(0) = \frac{1}{2}(\epsilon(0_+) + \epsilon(0_-)) = 0$  pour satisfaire cette fois à la propriété d'hermiticité.

Notons que souvent, au lieu de la fonction signe  $\epsilon(t)$ , on introduit la fonction saut  $\theta(t) : \epsilon(t) = 2\theta(t) - 1$ . Le choix correspond alors à  $\theta(0) = \frac{1}{2}$ .

## 5.4 Champ magnétique : calcul direct

Calculons maintenant directement (pour  $m = \hbar = 1$ ) les éléments de matrice de l'opérateur  $U = e^{-tH}$  pour

$$H = \frac{1}{2}(\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{q}))^2,$$

à partir de l'équation (2.2) sous une forme généralisée de l'équation (2.11), en  $d$  dimensions et pour  $t \rightarrow 0$ .

*Notation.* Dans ce calcul, pour des raisons de compacité, quand l'indice  $\mu$  est répété deux fois, la sommation sur toutes les valeurs de  $\mu$  est supposée implicitement. De plus,  $\partial_\mu \equiv \partial/\partial q_\mu$ .

En termes d'éléments de matrice, l'équation s'écrit

$$\partial_t \langle q|U(t)|q' \rangle = \frac{1}{2} (\partial_\mu + ieA_\mu)^2 \langle q|U(t)|q' \rangle. \quad (5.16)$$

Nous posons

$$\langle q|U(t)|q' \rangle = e^{-\sigma(q,q';t)}. \quad (5.17)$$

L'équation (5.16) prend la forme

$$\nabla_q^2 \sigma - ie\partial_\mu A_\mu - (\partial_\mu \sigma - ieA_\mu)^2 = 2\partial_t \sigma. \quad (5.18)$$

La fonction  $\sigma$  admet pour  $t \rightarrow 0$  un développement de la forme

$$\sigma = \frac{1}{2t}(q - q')^2 + \frac{d}{2} \ln 2\pi t + \sigma_0 + \sigma_1 t + O(t^2). \quad (5.19)$$

Donc

$$\begin{aligned} \partial_t \sigma &= -\frac{1}{2t^2}(q - q')^2 + \frac{d}{2t} + \sigma_1 + O(t), \\ \partial_\mu \sigma &= \frac{1}{t}(q - q')_\mu + \partial_\mu \sigma_0 + \partial_\mu \sigma_1 t + O(t^2). \end{aligned}$$

On en déduit

$$\begin{aligned} (\partial_\mu \sigma)^2 &= \frac{1}{t^2}(q - q')^2 + \frac{2}{t}(q - q')_\mu \partial_\mu \sigma_0 + (\partial_\mu \sigma_0)^2 + 2(q - q')_\mu \partial_\mu \sigma_1 + O(t), \\ \nabla_q^2 \sigma &= \frac{d}{t} + \nabla_q^2 \sigma_0 + t\nabla_q^2 \sigma_1 + O(t^2). \end{aligned}$$

L'ordre  $t^{-1}$  donne la première équation non triviale :

$$(q - q')_\mu (\partial_\mu \sigma_0 - ieA_\mu(q)) = 0,$$

qui a comme solution

$$\sigma_0(q, q') = ie \int_0^1 ds (q - q')_\mu A_\mu(q' + s(q - q')).$$

Elle a les propriétés de transformation de jauge attendues :

$$\delta A_\mu(q) = (1/e) \partial_\mu \Omega(q) \Rightarrow \delta \sigma_0(q, q') = i(\Omega(q) - \Omega(q')).$$

On en déduit

$$\partial_\mu \sigma_0 - ieA_\mu(q) = ie \int_0^1 ds s(q - q')_\nu F_{\mu\nu}(q' + s(q - q')), \quad (5.20)$$

où  $F_{\mu\nu}$  est le tenseur magnétique :

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu.$$

Le terme d'ordre  $t^0$  donne

$$2\sigma_1 + 2(q - q')_\mu \partial_\mu \sigma_1 = \partial_\mu (\partial_\mu \sigma_0 - ieA_\mu(q)) - (\partial_\mu \sigma_0 - ieA_\mu(q))^2.$$

Comme  $|q - q'| = O(\sqrt{t})$ , nous n'avons besoin que de  $\sigma_1(q, q)$ .

L'équation (5.20) montre que  $\partial_\mu \sigma_0 - ieA_\mu(q)$  est d'ordre  $q - q'$  et peut donc être négligé. De plus

$$\partial_\mu (\partial_\mu \sigma_0 - ieA_\mu(q)) = ie \int_0^1 ds s^2 (q - q')_\nu \partial_\mu F_{\mu\nu}(q' + s(q - q'))$$

et donc s'annule aussi pour  $q = q'$ . Nous en déduisons

$$\sigma_1(q, q) = 0.$$

Donc en terme de la trajectoire rectiligne uniforme

$$q(\tau) = q' + \tau(q - q')/t,$$

la contribution supplémentaire à l'action due au champ magnétique s'écrit

$$ie \int_0^t d\tau \dot{q}(\tau) \cdot A(q(\tau)),$$

qui est une expression symétrique en  $q$  et  $q'$ , en accord avec la discussion de la section 5.2.2.

## 5.5 Diffusion, marche au hasard, équation de Fokker-Planck

Nous considérons maintenant des processus markoviens décrivant des phénomènes de diffusion classique, de marche aléatoire ou de mouvement brownien. Nous nous limitons à des processus dans l'espace et le temps continus, mais les équations que nous écrivons décrivent aussi des processus sur réseau avec temps discrets dans la limite asymptotique des temps grands et des grandes distances.

Nous notons  $P(\mathbf{q}'', \mathbf{q}'; t'', t')$  la densité de probabilité que la variable aléatoire  $\mathbf{q}$  qui prenait la valeur  $\mathbf{q}'$  au temps  $t'$  prenne la valeur  $\mathbf{q}''$  au temps ultérieur  $t''$ . Un processus est markovien si la distribution de probabilité pour la variable  $\mathbf{q}$  au temps  $t$  ne dépend que de sa valeur au temps  $t - dt$  et pas de l'histoire antérieure. Introduisant un opérateur  $P$  dont les éléments de matrice sont les densités de probabilité :

$$\langle \mathbf{q}'' | P(t'', t') | \mathbf{q}' \rangle \equiv P(\mathbf{q}'', \mathbf{q}'; t'', t'),$$

nous pouvons exprimer cette propriété par la loi de semi-groupe

$$P(t_3, t_2)P(t_2, t_1) = P(t_3, t_1), \quad t_3 \geq t_2 \geq t_1. \quad (5.21)$$

Nous reconnaissons dans l'équation (5.21) la relation (2.1) satisfaite par l'opérateur statistique.

Cependant,  $P$  satisfait deux contraintes supplémentaires. Par définition

$$P(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; t, t') \geq 0,$$

et de plus la probabilité totale est conservée au cours du temps :

$$\int d^d q P(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; t, t') = 1. \quad (5.22)$$

On pourra vérifier que ces contraintes sont compatibles avec la loi de semi-groupe.

Nous supposons maintenant que  $P$  est une fonction dérivable du temps et posons

$$P(t + \varepsilon, t) = 1 - \varepsilon H(t) + O(\varepsilon^2).$$

Faisant tendre  $t_3 \rightarrow t_2$  dans l'équation (5.21), nous retrouvons une équation de type (2.2) :

$$\frac{\partial}{\partial t} P(t, t') = -H(t)P(t, t'), \quad (5.23)$$

où, par analogie avec la mécanique quantique, nous appellerons  $H$  l'hamiltonien de Fokker-Planck.

### 5.5.1 Un exemple simple : marche au hasard ou mouvement brownien

Nous considérons une dynamique, indépendante du temps, isotrope, invariante par translation de type donc marche au hasard. Ceci signifie que la distribution de probabilité est de la forme

$$P(\mathbf{q}'', \mathbf{q}'; t'', t') = p(|\mathbf{q}'' - \mathbf{q}'|; t'' - t'),$$

et donc l'opérateur  $H$  de l'équation (5.23) est indépendant du temps. Formellement

$$P(t'', t') = e^{-(t'' - t')H}.$$

Il est alors naturel d'introduire la transformée de Fourier de la distribution  $p(|\mathbf{q}|, t)$  :

$$\tilde{p}(\mathbf{k}, t) = \int d^d q e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}} p(|\mathbf{q}|; t).$$

Dans cette base, les opérateurs  $P$  et  $H$  sont diagonaux et donc

$$\tilde{p}(\mathbf{k}, t) = e^{-t\tilde{h}(\mathbf{k})},$$

où nous avons noté  $\tilde{h}(\mathbf{k})$  les éléments de matrice de  $H$ .

La fonction  $\tilde{p}$  est une fonction réelle ne dépendant que de  $|\mathbf{k}|$ . De plus, la positivité de  $p(|\mathbf{q}|, t)$  et sa normalisation entraîne

$$|\tilde{p}(\mathbf{k}, t)| \leq \tilde{p}(0, t) = 1.$$

Enfin, la borne supérieure n'est atteinte que pour  $\mathbf{k} = 0$ . On en déduit

$$\tilde{h}(\mathbf{k}) \geq 0, \quad \tilde{h}(0) = 0.$$

Nous supposons maintenant une dynamique de courte portée, c'est-à-dire que  $p(|\mathbf{q}|, t)$  décroît suffisamment vite pour  $|\mathbf{q}| \rightarrow \infty$ . Nous retrouvons ici la condition de localité déjà imposée à l'hamiltonien quantique. Techniquement, il suffit que le second moment de la distribution existe. Alors

$$\tilde{p}(\mathbf{k}, t) = 1 - \frac{\mathbf{k}^2}{2d} \int d^d q \mathbf{q}^2 p(|\mathbf{q}|; t) + o(\mathbf{k}^2)$$

et

$$\tilde{h}(\mathbf{k}) \underset{\mathbf{k} \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2} D \mathbf{k}^2,$$

où  $D$  est une constante. La distribution est obtenue en inversant la transformation de Fourier :

$$p(\mathbf{q}; t) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d p \exp \left[ i\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - t\tilde{h}(\mathbf{k}) \right].$$

Pour  $t \rightarrow \infty$ , l'intégrale est dominée par le minimum unique de  $\tilde{h}$  qui est atteint pour  $\mathbf{k} = 0$ . On peut donc remplacer  $\tilde{h}$  par son comportement à  $\mathbf{k} \rightarrow 0$  :

$$\begin{aligned} p(\mathbf{q}; t) &\underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k \exp \left[ i\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - \frac{1}{2} t D \mathbf{k}^2 \right] \\ &= \frac{1}{(2\pi D t)^{d/2}} e^{-\mathbf{q}^2 / 2Dt}. \end{aligned}$$

Ce résultat est en particulier celui de la marche au hasard. On aura reconnu l'analogie entre ces arguments et la démonstration du théorème de la limite centrale.

Nous reconnaissons que  $p(\mathbf{q}; t)$ , dans cette limite asymptotique, est de la forme (2.9). Nous en déduisons aussi que  $p(\mathbf{q}; t)$  a une représentation par intégrale de chemin, avec comme action

$$\mathcal{S}(\mathbf{q}) = \int_0^t d\tau (\dot{\mathbf{q}}(\tau))^2 / 2D,$$

c'est-à-dire l'action de la particule libre en mécanique quantique.

### 5.5.2 Équation de diffusion générale

Comme dans le cas de l'opérateur d'évolution, la loi (5.21) permet de déduire  $P(t'', t')$  de sa forme aux intervalles de temps courts,  $P(t + \varepsilon, t)$ ,  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Nous supposons que la diffusion est toujours dominée aux temps courts par le terme brownien, mais nous autorisons de plus une anisotropie dépendante de la position, de sorte qu'aux temps courts  $P(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; t, t')$  prenne la forme

$$\log[(2\pi D\varepsilon)^{d/2} P(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; t' + \varepsilon, t')] = -\frac{(\mathbf{q} - \mathbf{q}')^2}{2D\varepsilon} + (\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}') + B(\mathbf{q}'). \quad (5.24)$$

La conservation de la probabilité implique

$$(2\pi D\varepsilon)^{d/2} = \int d^d q e^{-(\mathbf{q} - \mathbf{q}')^2 / (2D\varepsilon) + (\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}') + B(\mathbf{q}')}.$$

Après intégration sur  $\mathbf{q}$ , on trouve  $\exp(\frac{1}{2} D\varepsilon \mathbf{A}^2 + B)$  ce qui implique

$$B = -\frac{1}{2} \varepsilon D \mathbf{A}^2.$$

Donc

$$P(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; t' + \varepsilon, t') \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{(2\pi D\varepsilon)^{d/2}} \exp \left[ -\frac{(\mathbf{q} - \mathbf{q}' - D\varepsilon \mathbf{A}(\mathbf{q}'))^2}{2D\varepsilon} \right]. \quad (5.25)$$

Utilisant la même stratégie qu'au chapitre 2, on en déduit une représentation par intégrale de chemin :

$$P(\mathbf{q}'', \mathbf{q}'; t'', t') = \int [d\mathbf{q}(t)] e^{-\mathcal{S}(\mathbf{q})} \quad (5.26)$$

avec

$$S(\mathbf{q}) = \int_{t'}^{t''} dt \frac{1}{2D} [\dot{\mathbf{q}}(t) - D\mathbf{A}(\mathbf{q})]^2,$$

et les conditions aux limites  $\mathbf{q}(t') = \mathbf{q}'$  et  $\mathbf{q}(t'') = \mathbf{q}''$ .

L'intégrale de chemin donne une représentation de la distribution de probabilité  $P$  qui est évidemment positive et obéit à la loi de semi-groupe.

*Ambiguïtés de quantification.* La forme de l'intégrale de chemin suggère que la distribution  $P$  dans le cas plus général satisfait encore à une équation de type Schrödinger, appelée équation de Fokker-Planck, avec un hamiltonien linéaire dans les impulsions mais non-hermitien. Celle-ci peut être obtenue par transformation de Fourier sur  $\mathbf{q}$  de l'expression (5.25) :

$$\int d^d q e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{p}} P(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; \varepsilon) = e^{-D\varepsilon \mathbf{p}^2 / 2 - i\varepsilon D \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}')} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{q}'}. \quad (5.27)$$

On en déduit les éléments de matrice dans la représentation mixte position-impulsion de l'hamiltonien correspondant :

$$\langle \mathbf{p} | H | \mathbf{q}' \rangle = \frac{1}{2} D [\mathbf{p}^2 + 2i\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}')] e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{q}'}.$$

Après transformée de Fourier sur  $\mathbf{p}$ , on trouve les éléments de matrice de l'hamiltonien dans la base des positions. On en déduit que  $P(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; t)$  satisfait une équation analogue à l'équation (2.11) :

$$\dot{P}(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; t) = \frac{1}{2} D \sum_i \partial_i [\partial_i - 2A_i(\mathbf{q})] P(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; t),$$

appelée équation de Fokker-Planck. Le membre de droite a la forme d'une divergence ce qui garantit la conservation des probabilités.

Si l'on ne se donnait que la forme « classique » de l'hamiltonien, on serait donc confronté à une ambiguïté de quantification. Dans ce contexte, la forme de l'hamiltonien est fixée par la condition de conservation des probabilités qui implique que  $\dot{P}$  ait la forme d'une divergence.

De nouveau, on s'attend donc à retrouver ce problème dans la définition de l'intégrale de chemin. La nature du problème a déjà été exhibée par les développements (5.14) et (5.15). Si nous remplaçons dans l'équation (5.24)  $(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}')$  par  $(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q})$ , deux expressions qui ont la même limite continue formelle, nous savons du développement (5.14) que la limite de l'intégrale sur des temps discrets est modifiée car pour un chemin brownien la différence entre ces deux termes est d'ordre  $\varepsilon$ .

De nouveau, les multiples choix correspondent à des valeurs différentes de  $\varepsilon(0)$ . Dans le cas de difficultés, il vaut mieux retourner à la forme discrète pour lever les ambiguïtés. En particulier, si l'on veut avoir un formalisme symétrique dans le temps (avec  $\varepsilon(0) = 0$ ), on découvre après un peu d'algèbre qu'il faut prendre dans l'intégrale de chemin l'action

$$S(\mathbf{q}) = \int_{t'}^{t''} dt \left[ \frac{1}{2D} (\dot{\mathbf{q}}(t) - D\mathbf{A}(\mathbf{q}))^2 + \frac{1}{2} D \nabla \cdot \mathbf{A} \right]. \quad (5.28)$$

*Équation de Fokker-Planck dissipative.* Si le vecteur  $\mathbf{A}$  est lui-même un gradient,

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{2}\nabla E(\mathbf{q})/D,$$

on vérifie que l'hamiltonien de Fokker-Planck est équivalent à un opérateur hermitien et positif. De plus,  $e^{-E(\mathbf{q})/D}$  est une solution stationnaire de l'équation de Fokker-Planck. Si  $e^{-E(\mathbf{q})/D}$  est une distribution normalisable, elle est la distribution limite pour  $t \rightarrow \infty$ , appelée distribution d'équilibre. Dans l'action (5.28), le terme linéaire dans la vitesse est alors une dérivée totale et peut s'intégrer. L'action devient

$$\mathcal{S}(\mathbf{q}) = \int_{t'}^{t''} dt \left[ \frac{1}{2D} \left( \dot{\mathbf{q}}^2(t) + \frac{1}{4}(\nabla E(\mathbf{q}))^2 \right) - \frac{1}{4}\nabla^2 E(\mathbf{q}) \right] + \frac{1}{2D} [E(\mathbf{q}'') - E(\mathbf{q}')]. \quad (5.29)$$

Cependant, pour que cette intégration reste licite dans l'intégrale de chemin, il faut que dérivée et valeur moyenne commutent ce qui impose la convention  $\epsilon(0) = 0$ .

## 5.6 Le spectre du rotateur rigide avec symétrie $O(2)$

Nous allons discuter le spectre de l'hamiltonien quantique du rotateur rigide plan invariant par rotations-réflexion en utilisant l'intégrale de chemin. Nous rappelons que le groupe abélien (ou commutatif) des rotations du plan est noté  $SO(2)$  et le groupe orthogonal du plan (rotations-réflexions)  $O(2)$ .

Cet exemple est particulièrement simple et peut être traité exactement. Il fournit cependant une illustration des particularités de l'intégrale de chemin quand l'espace des positions a, comme le cercle, une topologie non triviale, ainsi qu'une illustration explicite du problème de la quantification des hamiltoniens quadratiques dans les impulsions, problème qui sera discuté dans sa généralité en section 10.3.

Nous considérons donc un système plan invariant par rotation et qui peut être simplement caractérisé par un angle  $\theta(t)$ . Le lagrangien classique prend alors la forme du mouvement libre sur un cercle

$$\mathcal{L}(\theta, \dot{\theta}) = \frac{1}{2}mR^2\dot{\theta}^2.$$

Il a la même forme que le lagrangien du mouvement libre sur la droite. La différence entre ces deux dynamiques n'apparaît que dans le caractère angulaire de la variable  $\theta$  qui n'est définie que modulo  $2\pi$ . La variable conjuguée à  $\theta$  est le moment cinétique

$$L = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} = mR^2\dot{\theta},$$

et l'hamiltonien classique correspondant s'écrit

$$H = L\dot{\theta} - \mathcal{L} = L^2/2mR^2.$$

La quantification ne pose aucun problème et conduit à l'hamiltonien quantique

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2mR^2} = -\frac{\hbar^2}{2mR^2} \frac{\partial^2}{(\partial\theta)^2}. \quad (5.30)$$

La symétrie  $SO(2)$  est explicite puisque l'opérateur moment cinétique

$$\hat{L} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\theta},$$

qui est proportionnel au générateur de l'algèbre de Lie du groupe  $SO(2)$ , commute avec l'hamiltonien (5.30) (la réflexion correspond à  $\theta \mapsto -\theta$ ).

L'hamiltonien quantique a également la forme du hamiltonien libre. Mais comme  $\theta$  est une variable angulaire, les fonctions d'onde  $\psi(\theta)$  sont des fonctions périodiques de période  $2\pi$  qui ont un développement en série de Fourier :

$$\psi(\theta) = \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} e^{i\ell\theta} \psi_\ell,$$

au lieu d'une transformée de Fourier. Ceci conduit à la quantification du spectre :

$$\hat{L} e^{i\ell\theta} = \hbar\ell e^{i\ell\theta} \Rightarrow \hat{H} e^{i\ell\theta} = E_\ell e^{i\ell\theta}, \quad E_\ell = \frac{\ell^2 \hbar^2}{2mR^2}.$$

### 5.6.1 Intégrale de chemin

Les éléments de matrice de l'opérateur  $e^{-\beta H}$  sont donnés par l'intégrale de chemin

$$\langle \theta'' | e^{-\beta H} | \theta' \rangle = \int_{\theta(-\beta/2)=\theta'}^{\theta(\beta/2)=\theta''} [d\theta(t)] \exp \left[ -\frac{\sigma}{2} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} \dot{\theta}^2(t) dt \right] \quad (5.31)$$

avec  $\sigma = mR^2/\hbar^2$ .

Notons que cette intégrale de chemin décrit aussi le mouvement brownien sur le cercle.

L'intégrale de chemin est gaussienne et nous la calculons comme d'habitude en résolvant d'abord l'équation du mouvement classique pour déterminer la dépendance en  $\theta'$  et  $\theta''$ . Le caractère cyclique de la variable  $\theta$  intervient alors de la manière suivante : comme  $\theta'$  et  $\theta''$  sont des angles, nous devons prendre en compte *toutes* les trajectoires qui vont de  $\theta'$  à  $\theta''$  modulo  $2\pi$ . Elles sont données par

$$\theta_n(t) = \frac{1}{2}(\theta' + \theta'') + (\theta'' - \theta' + 2\pi n)t/\beta, \quad \text{avec } n \in \mathbb{Z}.$$

En effet, le nombre  $n$  de tours est un nombre *topologique* en ce sens que deux trajectoires faisant un nombre de tours différent ne peuvent pas être déformées de façon continue l'une dans l'autre. L'intégrale sur les fluctuations autour d'une trajectoire de  $n$  donné ne contient donc pas les contributions des trajectoires de  $n$  différents. À la différence du mouvement libre sur la droite, l'intégrale de chemin (5.31) devient une somme de contributions.

Pour une valeur de  $n$  fixée, nous faisons le changement de variables  $\theta(t) \mapsto u(t)$  :

$$\theta(t) = \theta_n(t) + u(t), \quad u(0) = u(\beta) = 0. \quad (5.32)$$

Il en résulte

$$\langle \theta'' | e^{-\beta H} | \theta' \rangle = \mathcal{N} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \exp \left[ -\frac{\sigma}{2\beta} (\theta'' - \theta' + 2\pi n)^2 \right], \quad (5.33)$$

où nous avons factorisé la normalisation

$$\mathcal{N}(\beta/\sigma) = \int_{u(-\beta/2)=0}^{u(\beta/2)=0} [du(t)] \exp \left[ -\frac{1}{2}\sigma \int_{-\beta/2}^{\beta/2} \dot{u}^2(t) dt \right]$$

parce qu'elle est indépendante de  $n$ . La normalisation est aussi indépendante de  $\theta'$ ,  $\theta''$  et pour des raisons dimensionnelles ne dépend donc que du rapport  $\beta/\sigma$ . Puisque l'intégration sur  $u(t)$  somme les fluctuations autour de la trajectoire classique, on s'attend à ce que le caractère angulaire de  $u(t)$  ne joue pas de rôle et donc

$$\mathcal{N}(\beta/\sigma) = \sqrt{2\pi\sigma/\beta} = \hbar^{-1} \sqrt{2\pi m/\beta}, \quad (5.34)$$

mais cela n'est pas évident dans la mesure où l'on ne veut sommer que sur des configurations du secteur topologique zéro. On ne peut donc exclure des corrections d'ordre  $e^{-2\pi^2\sigma/\beta}$ . Avec cette hypothèse, on trouve

$$\langle \theta'' | e^{-\beta H} | \theta' \rangle = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \exp \left[ -\frac{\sigma}{2\beta} (\theta'' - \theta' + 2\pi n)^2 \right]. \quad (5.35)$$

Parce que toutes les trajectoires  $\theta_n$  ont été prises en compte, nous avons obtenu une expression qui est périodique en  $\theta'$  et  $\theta''$ .

## 5.6.2 Spectre de l'hamiltonien

L'expression (5.35) n'est fonction que de  $\theta'' - \theta'$ . Elle peut donc être développée en séries de Fourier sous la forme

$$\langle \theta'' | e^{-\beta H} | \theta' \rangle = \frac{1}{2\pi} \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} e^{i\ell(\theta''-\theta')} e^{-\beta E_\ell}. \quad (5.36)$$

Nous avons identifié les coefficients de la série de Fourier avec les valeurs propres de  $e^{-\beta H}$  parce que les fonctions  $e^{i\ell\theta}/(2\pi)^{1/2}$  forment une base ortho-normée et donc l'opérateur  $e^{-\beta H}$  est ainsi directement diagonalisé.

Les coefficients de la série de Fourier peuvent enfin être obtenus à partir de l'expression (5.35) en utilisant la formule de Poisson.

*Formule de Poisson.* Soit une fonction  $g(\theta)$  continue et à décroissance suffisamment rapide pour  $|\theta| \rightarrow \infty$ . On lui associe la fonction périodique, de période  $2\pi$ ,

$$f(\theta) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} g(\theta + 2n\pi).$$

Une fonction périodique peut être développée en série de Fourier :

$$f(\theta) = \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} e^{i\ell\theta} f_{\ell}$$

et donc

$$f_{\ell} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{-i\ell\theta} f(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{-i\ell\theta} \sum_n g(\theta + 2n\pi).$$

Inversant somme sur  $n$  et intégration et changeant de variables,  $\theta + 2n\pi \mapsto \theta$ , on trouve alors

$$f_{\ell} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \int_{2n\pi}^{2(n+1)\pi} d\theta e^{-i\ell\theta} g(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\theta e^{-i\ell\theta} g(\theta). \quad (5.37)$$

Ces identités peuvent aussi être résumées sous la forme

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} g(\theta + 2n\pi) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\theta' e^{i\ell(\theta-\theta')} g(\theta').$$

*Application.* Nous appliquons maintenant la formule de Poisson (5.37) à l'expression (5.35) ( $\theta \equiv \theta'' - \theta'$ ) avec

$$g(\theta) = \mathcal{N}(\beta) e^{-\sigma\theta^2/2\beta}.$$

Comparant avec le développement (5.36), nous obtenons

$$\exp(-\beta E_{\ell}) = \mathcal{N}(\beta/\sigma) \int_{-\infty}^{+\infty} d\theta e^{-i\ell\theta - \sigma\theta^2/2\beta} = \mathcal{N}(\beta/\sigma) \sqrt{\frac{2\pi\beta}{\sigma}} e^{-\ell^2\beta/2\sigma}. \quad (5.38)$$

Ce résultat confirme la normalisation (5.34) et donne le spectre

$$E_{\ell} = \frac{1}{2\sigma} \ell^2 = \frac{\hbar^2 \ell^2}{2mR^2}, \quad (5.39)$$

ce qui est en effet le résultat exact. Il a été possible de faire un calcul exact parce que le groupe  $SO(2)$  des rotations du plan est abélien. La discussion du rotateur rigide avec symétrie  $O(N)$  (le groupe orthogonal ou rotations-réflexions de l'espace à  $N$  dimensions) générale ou du mouvement libre sur la sphère  $S_{N-1}$  est plus compliquée (cf. section 10.4.2).

### 5.6.3 Autre paramétrisation

Puisque la paramétrisation du cercle par un angle est en un sens redondante, on peut songer à d'autres paramétrisations. Introduisons une variable périodique  $q(\theta)$ , mais monotone sur  $[0, 2\pi[$  et donc discontinue à  $\theta = 2n\pi$ , pour décrire le système. Alors le lagrangien classique prend la forme

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}g(q)\dot{q}^2$$

avec

$$g(q) = mR^2(\theta'(q))^2.$$

Comme fonction  $q(\theta)$  on pourrait songer à  $2R \tan(\theta/2)$  qui est inversible sur  $] -\pi, \pi[$  mais singulier à  $\theta = \pm\pi$  (un point singulier est inévitable). Par contre la fonction  $R \sin \theta$  est régulière, adéquate au voisinage de  $\theta = 0$ , mais globalement n'est pas inversible sur  $[-\pi, \pi[$ .

Dans ce type de paramétrisations, après passage à l'hamiltonien :

$$H = \frac{1}{2}p^2/g(q),$$

un problème de quantification dû à l'ordre des opérateurs apparaît. La forme de l'hamiltonien quantique  $\hat{H}$  est fixée ici par l'invariance  $SO(2)$  et la condition que  $\hat{H}$  doit commuter avec l'opérateur moment cinétique  $\hat{L}$ , générateur de l'algèbre de Lie de  $SO(2)$ . Dans cette paramétrisation

$$\hat{L} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial q}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial q} = \frac{\hbar}{i} R \sqrt{m/g(q)} \frac{\partial}{\partial q}.$$

La commutation impose alors

$$\hat{H} = \hat{L}^2/2mR^2 + \text{constante}.$$

L'hamiltonien quantique est donc déterminé à une constante additive près.

Du point de vue de l'intégrale de chemin, le changement de variables conduit à une mesure d'intégration qui pour des temps discrets prend la forme

$$dq_k = \frac{d\theta_k}{dq_k} dq_k \equiv \sqrt{g(q_k)} dq_k,$$

et donc

$$\prod_k \sqrt{g(q_k)} dq_k = \exp \left[ \frac{1}{2} \sum_k \ln(g(q(t_k))) \right] \prod_k dq_k.$$

Ceci introduit un terme additionnel dans l'action mais avec un coefficient divergent dans la limite continue :

$$\frac{1}{2} \sum_k \ln(g(q(t_k))) = \frac{1}{2\varepsilon} \sum_k \varepsilon \ln(g(q(t_k))) \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2\varepsilon} \int dt \ln(g(q(t))).$$

Ce terme est une correction quantique puisqu'il n'a pas de facteur  $1/\hbar$ . Dans le développement perturbatif de la théorie continue, on observe alors des compensations formelles de divergences et le résultat qui est la partie finie est ambiguë. C'est l'invariance par rotation qui détermine la forme des parties finies. Ce problème sera discuté plus en détail en section 10.3.

On voit que la paramétrisation du rotateur plan choisie initialement, dans laquelle l'action du groupe  $SO(2)$  est triviale et l'ordre des opérateurs évident, est beaucoup plus simple. Une telle paramétrisation n'existe pas en dimensions supérieures parce que les sphères ont une courbure locale (au sens de la géométrie Riemannienne).

## Exercices

### Exercice 5.1.

Utilisant l'expression (5.12), calculer les éléments de matrice de l'opérateur statistique  $U(\beta) = e^{-\beta H}$  pour  $\mathbf{A}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{q}$ ,  $\mathbf{B}$  constant, c'est-à-dire pour un champ magnétique constant et  $V(\mathbf{q}) = 0$ .

*Solution.* Nous considérons d'abord l'effet d'une translation sur l'opérateur statistique. Dans l'intégrale de chemin nous changeons de variables, posant

$$\mathbf{q}(t) \mapsto \mathbf{q}(t) + \mathbf{a},$$

où  $\mathbf{a}$  est un vecteur constant. Les conditions aux limites deviennent alors

$$\mathbf{q}(-\beta/2) = \mathbf{q}' - \mathbf{a}, \quad \mathbf{q}(\beta/2) = \mathbf{q}'' - \mathbf{a}, \quad \beta = t'' - t'.$$

L'effet de la translation est d'ajouter au terme de champ magnétique de l'action la contribution  $\frac{1}{2}ie\mathbf{B} \times \mathbf{a}(\mathbf{q}'' - \mathbf{q}')$ , ce qui conduit à la relation

$$\langle \mathbf{q}'' | U(\beta) | \mathbf{q}' \rangle = \exp[\frac{1}{2}ie(\mathbf{B} \times \mathbf{a})(\mathbf{q}'' - \mathbf{q}')] \langle \mathbf{q}'' - \mathbf{a} | U(\beta) | \mathbf{q}' - \mathbf{a} \rangle.$$

Nous pouvons utiliser cette relation pour  $\mathbf{a} = \mathbf{q}'$  pour simplifier le calcul. Le facteur de phase devient alors  $\frac{1}{2}ie\mathbf{B} \cdot (\mathbf{q}' \times \mathbf{q}'')$ .

Il reste à calculer  $\langle \mathbf{q}'' - \mathbf{q}' | U(\beta) | \mathbf{0} \rangle$ .

Nous résolvons donc l'équation du mouvement classique. Le mouvement parallèle à  $\mathbf{B}$  étant libre, nous nous restreignons au plan perpendiculaire à  $\mathbf{B}$ . Nous trouvons

$$\mathcal{S}_c = \frac{eB}{4 \tanh(eB\beta/2m)} (\mathbf{q}'' - \mathbf{q}')^2.$$

Nous évaluons ensuite le déterminant résultant de l'intégration gaussienne. Nous devons calculer les valeurs propres de l'opérateur différentiel

$$-m \frac{d^2}{(dt)^2} \delta_{ij} + ieB_k \epsilon_{kij} \frac{d}{dt}$$

avec comme conditions aux limites que les fonctions propres s'annulent à  $\pm\beta/2$ . Après transformation de Fourier cet opérateur prend la forme

$$\begin{pmatrix} m\omega^2 & -\omega eB \\ \omega eB & m\omega^2 \end{pmatrix},$$

où  $\omega$  est la fréquence correspondante. Les valeurs propres sont donc

$$\lambda_n = n^2 \pi^2 / \beta^2 + e^2 B^2 / 4m^2,$$

chaque valeur propre étant doublement dégénérée. Le produit des valeurs propres divisé par la valeur en champ nul se calcule au moyen de l'identité

$$\det \left[ \left( -\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) / \left( -\frac{d^2}{dt^2} \right) \right] = \prod_{n>0} \left( 1 + \frac{\omega^2 \beta^2}{n^2 \pi^2} \right) = \frac{\sinh \omega \beta}{\omega \beta}. \quad (5.40)$$

Normalisant par rapport à l'hamiltonien libre, nous obtenons enfin

$$\langle \mathbf{q}'' | U(\beta) | \mathbf{q}' \rangle = \frac{eB}{4\pi \sinh(\beta eB/2m)} \exp \left[ \frac{1}{2} ie\mathbf{B} \cdot (\mathbf{q}' \times \mathbf{q}'') \right] \exp[-\mathcal{S}_c].$$

*Exercice 5.2.*

Ajouter à l'action précédente un terme de potentiel harmonique

$$V(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} m \omega^2 q^2$$

et calculer à nouveau les éléments de matrice de l'opérateur statistique.

*Solution.* L'action classique devient alors

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_c = & \frac{m\omega'}{2 \sinh \beta\omega'} \left[ (\mathbf{q}'^2 + \mathbf{q}''^2) \cosh \beta\omega' - 2\mathbf{q}'\mathbf{q}'' \cosh \left( \frac{eB\beta}{2m} \right) \right. \\ & \left. - 2i \sinh \left( \frac{eB\beta}{2m} \right) \hat{\mathbf{B}} \cdot (\mathbf{q}' \times \mathbf{q}'') \right], \end{aligned}$$

où

$$\hat{\mathbf{B}} = \mathbf{B}/B, \quad \omega' = \sqrt{\omega^2 + e^2 B^2 / 4m^2}.$$

L'intégration gaussienne engendre le facteur

$$\mathcal{N} = \frac{eB}{4\pi \sinh(\beta\omega')}.$$

Exercice 5.3.

Équation de Fokker-Planck.

1. Calculer la distribution probabilité  $P(x, \tau; x_0, 0)$  solution de l'équation de Fokker-Planck

$$\frac{\partial}{\partial t} P(q, t; q_0, t_0) = \frac{1}{2} D \frac{\partial}{\partial q} \left[ \frac{\partial}{\partial q} P + \frac{1}{D} \frac{\partial E}{\partial q} P \right],$$

à partir de l'intégrale de chemin (5.26) avec l'action (5.29) pour la fonction

$$E(q) = q^2.$$

On pourra se ramener à l'oscillateur harmonique et utiliser le résultat correspondant. En déduire la distribution limite pour  $\tau \rightarrow +\infty$ .

2. Calculer pour  $x_0 = 0$  l'intégrale de chemin pour la fonction

$$E(q) = -q^2.$$

Que se passe-t-il dans la limite  $\tau \rightarrow +\infty$  ?

*Solutions.*

1. Dans le cas de la fonction

$$E(q) = q^2$$

on peut se ramener à l'oscillateur harmonique et utiliser le résultat correspondant :

$$P(x, \tau; x_0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D(1 - e^{-2\tau})}} e^{-(x^2 - x_0^2)/2D} e^{-[(x^2 + x_0^2) \cosh \tau - 2x_0 x]/2D \sinh \tau}.$$

La distribution limite pour  $\tau \rightarrow +\infty$  est alors

$$P(x, \tau; x_0, 0) \underset{\tau \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\sqrt{\pi D}} e^{-x^2/D} \propto e^{-E(q)/D}.$$

2. Dans le cas de la fonction

$$E(q) = -q^2,$$

pour  $x_0 = 0$  l'intégrale de chemin donne

$$P(x, \tau; x_0, 0) = \frac{1}{\sqrt{\pi D(e^{2\tau} - 1)}} e^{-x^2/D(e^{2\tau} - 1)}.$$

Dans la limite  $\tau \rightarrow +\infty$  la distribution devient uniforme et tend vers zéro en tout point. Ce résultat est la conséquence de la propriété que la distribution  $e^{-E(q)/D}$  n'est pas normalisable et ne peut donc pas être une distribution d'équilibre.



## Chapitre 6

# Intégrale de chemin et formalisme holomorphe

NOUS ALLONS MAINTENANT INTRODUIRE une description de la mécanique quantique en terme d'un espace de Hilbert de fonctions analytiques de carré sommable et construire la représentation de l'opérateur statistique par intégrale de chemin correspondante. Ce formalisme holomorphe est particulièrement simple dans l'exemple de l'oscillateur harmonique et est donc bien adapté aux oscillateurs harmoniques perturbés.

On peut se demander, néanmoins, s'il est bien utile de construire une nouvelle représentation de l'oscillateur harmonique, que le formalisme de l'intégrale de chemin ordinaire a déjà permis d'étudier en détail. La raison principale est à rechercher du côté des problèmes à  $N$  particules quantiques (on parle aussi de problème à  $N$  corps). Elle est basée sur une propriété caractéristique de l'oscillateur harmonique, à savoir que son spectre est additif : l'énergie du niveau  $N$  de l'oscillateur harmonique est la somme de l'énergie du fondamental (le vide) et de  $N$  fois le niveau un. C'est exactement l'énergie totale de  $N$  particules identiques et indépendantes. Les perturbations de l'oscillateur harmonique correspondent alors à l'interaction entre particules.

Ceci permet de comprendre intuitivement pourquoi les généralisations de l'intégrale de chemin holomorphe conduisent à des représentations de la fonction de partition du gaz de Bose quantique et, en théorie quantique des champs, de la matrice de diffusion ou matrice  $S$ .

Au chapitre 7, nous montrerons comment construire un formalisme parallèle pour les fermions. Pour cela, il faut remplacer les variables complexes par des variables de Grassmann, c'est-à-dire sur des éléments d'une algèbre antisymétrique qui permet de prendre en compte les propriétés statistiques des fermions.

Avant de décrire le formalisme holomorphe, quelques rappels sur un certain type d'intégrales de variables complexes sont utiles.

## 6.1 Intégrales complexes et théorème de Wick

Considérons une intégrale sur  $2n$  variables réelles  $\{x_\alpha\}$  et  $\{y_\alpha\}$ ,  $\alpha = 1, \dots, n$ , et dans laquelle l'intégrand est invariant par une rotation simultanée identique dans tous les plans  $(x_\alpha, y_\alpha)$ . Il est alors naturel d'introduire, dans chaque plan, une paramétrisation complexe sur laquelle les rotations agissent par multiplication.

Soit donc l'intégrale

$$I = \int_{\mathbb{R}^2} dx dy f(x, y).$$

Si  $f$  est une fonction holomorphe, nous pouvons plonger le plan  $\mathbb{R}^2$  dans  $\mathbb{C}^2$ , et considérer les variables  $x, y$  comme des variables complexes, le domaine d'intégration initial étant le domaine  $\text{Im } x = \text{Im } y = 0$ . Dans  $\mathbb{C}^2$  nous pouvons alors faire un changement de variables linéaire  $(x, y) \mapsto (z, z')$  défini en termes d'une matrice unitaire :

$$z = (x + iy)/\sqrt{2}, \quad z' = (x - iy)/\sqrt{2} \quad \Rightarrow \quad dz' \wedge dz = i dx \wedge dy. \quad (6.1)$$

Le domaine d'intégration est maintenant défini par  $z' = \bar{z}$  :

$$I = -i \int_{z'=\bar{z}} dz dz' f(x(z, z'), y(z, z')).$$

Par ailleurs, une rotation agissant sur le vecteur  $(x, y)$  se traduit par

$$z \mapsto z e^{i\theta}, \quad z' \mapsto e^{-i\theta} z'.$$

En particulier, si la fonction  $f$  est invariante par rotation, c'est-à-dire n'est qu'une fonction de  $x^2 + y^2$ , après le changement de variable elle n'est fonction que du produit  $zz'$ .

*Conjugaison complexe formelle. Notation.* Nous allons maintenant introduire une notation très utile, quoique un peu dangereuse : nous notons  $z' \mapsto \bar{z}$ . Soulignons que les variables complexes  $z$  et  $\bar{z}$  restent des *variables d'intégration indépendantes* et ne sont conjuguées que formellement. En effet, les intégrales sur les variables  $x$  et  $y$  peuvent parfois être déformées dans le plan complexe et donc ces variables prendre elles-mêmes des valeurs complexes. Le symbole  $dzd\bar{z}$  correspond à une intégrale sur une surface de dimension réelle deux pluggée dans  $\mathbb{C}^2$ .

Cette notation est motivée par l'utilité de la notion de conjuguée complexe formelle qui correspond à la réflexion  $y \mapsto -y$  combinée avec une conjugaison des coefficients

$$f_{mn} x^m y^n \mapsto \bar{f}_{mn} x^m (-y)^n.$$

Dans les variables  $z, \bar{z}$  ceci s'écrit formellement de façon très simple  $f(z, \bar{z}) \mapsto \bar{f}(z, \bar{z})$ .

Dans ce chapitre, consacré à la représentation holomorphe de la mécanique quantique, les variables complexes  $z$  et  $\bar{z}$  correspondent à une paramétrisation de l'espace de phase alternative aux variables position-impulsion.

### 6.1.1 Intégrales gaussiennes

L'intégrale gaussienne la plus simple dont l'intégrand est invariant par rotation est

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} dx dy e^{-a(x^2+y^2)/2} = \int \frac{dzd\bar{z}}{2i\pi} e^{-a\bar{z}z} = \frac{1}{a},$$

où l'intégrale initiale sur les variables  $(x, y)$  porte sur tout le plan réel et nous avons supposé  $\operatorname{Re} a > 0$ .

Plus généralement, considérons des intégrales gaussiennes de la forme

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = \int \left( \prod_{i=1}^n \frac{dz_i d\bar{z}_i}{2i\pi} \right) e^{-A(\bar{\mathbf{z}}, \mathbf{z})},$$

où  $A(\bar{\mathbf{z}}, \mathbf{z})$  est la forme quadratique

$$A(\bar{\mathbf{z}}, \mathbf{z}) = \sum_{i,j=1}^n \bar{z}_i A_{ij} z_j. \quad (6.2)$$

Nous supposons que le déterminant de la matrice complexe  $\mathbf{A}$  d'éléments  $A_{ij}$  ne s'annule pas. On notera l'absence de termes de type  $zz$  et  $\bar{z}\bar{z}$ , de sorte que l'intégrale est invariante dans le changement de variables

$$z_i \mapsto z_i e^{i\theta}, \quad \bar{z}_i \mapsto \bar{z}_i e^{-i\theta}. \quad (6.3)$$

Si  $\mathbf{A}$  est une matrice hermitienne positive, elle peut être diagonalisée par une transformation unitaire :

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^\dagger,$$

où  $\mathbf{U}$  est une matrice unitaire et  $\mathbf{D}$  la matrice diagonale des valeurs propres  $a_i > 0$ . Le changement de variables

$$z_i = \sum_j U_{ij} z'_j, \quad \bar{z}_i = \sum_j U_{ij}^* \bar{z}'_j$$

a comme jacobien  $|\det \mathbf{U}|^2 = 1$ , ce qui ramène l'intégrale à

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = \prod_i \int \frac{dz'_i d\bar{z}'_i}{2i\pi} e^{-a_i \bar{z}'_i z'_i} = \prod_i \frac{1}{a_i} = \frac{1}{\det \mathbf{A}}.$$

*Remarque.* À la différence de l'intégrale gaussienne réelle, le résultat est une fonction algébrique des éléments de la matrice et peut donc être étendu par prolongement analytique à toute matrice complexe. D'ailleurs, du point de vue purement algébrique, il est possible de faire un changement de variables

asymétrique comme  $A_{ij}z_j = z'_i$  dont le jacobien est  $1/\det \mathbf{A}$ , sans toucher aux variables  $\bar{z}$ . On obtient alors

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = \frac{1}{\det \mathbf{A}} \int \left( \prod_{i=1}^n \frac{dz_i d\bar{z}_i}{2i\pi} \right) \exp \left[ - \sum_i \bar{z}_i z_i \right] = \frac{1}{\det \mathbf{A}} \left[ \int \frac{dz d\bar{z}}{2i\pi} e^{-\bar{z}z} \right]^n$$

ce qui confirme

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = \int \left( \prod_{i=1}^n \frac{dz_i d\bar{z}_i}{2i\pi} \right) e^{-A(\bar{\mathbf{z}}, \mathbf{z})} = \frac{1}{\det \mathbf{A}}. \quad (6.4)$$

### 6.1.2 Intégrale gaussienne générale

L'intégrale gaussienne générale

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}; \mathbf{b}, \bar{\mathbf{b}}) = \int \left( \prod_{i=1}^n \frac{dz_i d\bar{z}_i}{2i\pi} \right) \exp \left[ -A(\bar{\mathbf{z}}, \mathbf{z}) + \sum_{i=1}^n (\bar{b}_i z_i + b_i \bar{z}_i) \right], \quad (6.5)$$

engendre toutes les valeurs moyennes avec le poids  $e^{-A(\bar{\mathbf{z}}, \mathbf{z})}$ . Comme d'habitude, cette intégrale peut être calculée en éliminant d'abord les termes linéaires en  $z_i$  et  $\bar{z}_i$  par une translation :

$$z_i = v_i + \sum_j (A^{-1})_{ij} b_j, \quad \bar{z}_i = \bar{v}_i + \sum_j \bar{b}_j (A^{-1})_{ji}. \quad (6.6)$$

L'intégrale gaussienne restante sur les variables  $v, \bar{v}$  est simplement l'intégrale (6.4) et donc

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}; \mathbf{b}, \bar{\mathbf{b}}) = (\det \mathbf{A})^{-1} \exp \left[ \sum_{i,j=1}^n \bar{b}_i (A^{-1})_{ij} b_j \right]. \quad (6.7)$$

*Valeurs moyennes gaussiennes.* Ce résultat permet de calculer les valeurs moyennes gaussiennes avec le poids gaussien (6.4) :

$$\langle \bar{z}_{i_1} \dots \bar{z}_{i_p} z_{j_1} \dots z_{j_q} \rangle = \det \mathbf{A} \int \left( \prod_{i=1}^n \frac{dz_i d\bar{z}_i}{2i\pi} \right) \bar{z}_{i_1} \dots \bar{z}_{i_p} z_{j_1} \dots z_{j_q} e^{-A(\bar{\mathbf{z}}, \mathbf{z})}. \quad (6.8)$$

À cause de la symétrie (6.3), seuls les monômes avec un nombre égal de facteurs  $z$  et  $\bar{z}$  ont une moyenne gaussienne non nulle. En effet, faisons le changement de variables  $z_i \mapsto e^{i\theta} z_i$ ,  $\bar{z}_i \mapsto e^{i\theta} \bar{z}_i$ . L'élément d'intégration et  $A(\bar{\mathbf{z}}, \mathbf{z})$  sont invariants et donc

$$\langle \bar{z}_{i_1} \dots \bar{z}_{i_p} z_{j_1} \dots z_{j_q} \rangle = e^{i(q-p)\theta} \langle \bar{z}_{i_1} \dots \bar{z}_{i_p} z_{j_1} \dots z_{j_q} \rangle = 0 \quad \text{si } p \neq q.$$

*Théorème de Wick.* Les valeurs moyennes gaussiennes (6.8) sont obtenues à partir de l'expression (6.5) en dérivant par rapport à  $b$  et  $\bar{b}$ . Utilisant le résultat (6.7) on trouve

$$\langle \bar{z}_{i_1} z_{j_1} \dots \bar{z}_{i_p} z_{j_p} \rangle = \frac{\partial}{\partial b_{i_1}} \frac{\partial}{\partial \bar{b}_{j_1}} \dots \frac{\partial}{\partial b_{i_p}} \frac{\partial}{\partial \bar{b}_{j_p}} \exp \left[ \sum_{i,j=1}^n \bar{b}_i (A^{-1})_{ij} b_j \right] \Bigg|_{b=\bar{b}=0}.$$

Pour obtenir une contribution qui ne s'annule pas dans la limite  $b = \bar{b} = 0$ , il faut appairer les dérivées par rapport à  $b$  avec les dérivées par rapport à  $\bar{b}$  de toutes les façons possibles. On trouve donc

$$\langle \bar{z}_{i_1} z_{j_1} \dots \bar{z}_{i_p} z_{j_p} \rangle = \sum_{\substack{\text{toutes les permutations} \\ P \text{ de } \{j_1, \dots, j_p\}}} A_{j_{P_1} i_1}^{-1} A_{j_{P_2} i_2}^{-1} \dots A_{j_{P_p} i_p}^{-1} \quad (6.9a)$$

$$= \sum_{\substack{\text{toutes les permutations} \\ P \text{ de } \{j_1, \dots, j_p\}}} \langle \bar{z}_{i_1} z_{j_{P_1}} \rangle \langle \bar{z}_{i_2} z_{j_{P_2}} \rangle \dots \langle \bar{z}_{i_p} z_{j_{P_p}} \rangle. \quad (6.9b)$$

## 6.2 Représentation holomorphe

L'idée à la base du formalisme holomorphe est l'association des variables classiques (complexes)  $z, \bar{z}$  aux opérateurs de création et annihilation  $a^\dagger, a$ , tels qu'ils apparaissent par exemple dans le traitement algébrique de l'oscillateur harmonique.

### 6.2.1 Espace de Hilbert des fonctions analytiques

On considère l'espace vectoriel complexe des fonctions analytiques entières et on le munit d'un produit scalaire pour lui donner une structure d'espace de Hilbert.

Le produit scalaire de deux fonctions entières  $f$  et  $g$  est défini par

$$(g, f) = \int \frac{dz d\bar{z}}{2i\pi} e^{-z\bar{z}} \overline{g(z)} f(z), \quad (6.10)$$

où  $\bar{z}$  est la variable formellement complexe conjuguée de  $z$ . Le carré scalaire  $(f, f)$ , s'il existe, définit une norme positive  $\|f\| = (f, f)^{1/2}$ . Les fonctions entières de norme finie forment un espace de Hilbert  $\mathfrak{H}$ .

Cette description de la mécanique quantique est appelée représentation holomorphe.

Notons qu'une condition nécessaire pour que la norme soit finie est qu'il existe une constante  $C$  telle que

$$|f(z)| \leq C e^{|z|^2/2}. \quad (6.11)$$

*Base orthonormée.* Les monômes  $z^n/\sqrt{n!}$  forment une base orthonormée de l'espace de Hilbert  $\mathfrak{H}$ . En effet

$$\int \frac{dzd\bar{z}}{2i\pi} e^{-z\bar{z}} \bar{z}^n z^m = n! \delta_{mn}. \quad (6.12)$$

Ce résultat peut être aisément vérifié, soit en appliquant le théorème de Wick (6.9), soit directement en changeant de variables  $z, \bar{z} \mapsto \rho, \theta$ , où  $\rho$  et  $\theta$  sont respectivement le module et argument du nombre complexe  $z$ . En effet

$$\int \frac{dzd\bar{z}}{2i\pi} e^{-z\bar{z}} \bar{z}^n z^m = \int \rho d\rho \frac{d\theta}{\pi} e^{-\rho^2} \rho^{n+m} e^{i\theta(m-n)} = \delta_{mn} \int_0^\infty 2\rho d\rho \rho^{2n} e^{-\rho^2}.$$

Enfin la norme d'une fonction

$$f(z) = \sum_{n \geq 0} f_n z^n,$$

exprimée dans cette base, est finie si

$$(f, f) = \sum_n |f_n|^2 n! < \infty, \quad (6.13)$$

ce qui implique aussi la condition (6.11).

*Fonction  $\delta$ .* Dans le formalisme holomorphe, le rôle de la fonction  $\delta$  de Dirac est jouée par la fonction

$$\delta(z) \equiv \frac{1}{2i\pi} \int d\bar{z} e^{-z\bar{z}}. \quad (6.14)$$

En effet, comme conséquence des relations d'orthogonalité,

$$\int \frac{dzd\bar{z}}{2i\pi} e^{-z\bar{z}} f(z) = \int \frac{dzd\bar{z}}{2i\pi} e^{-z\bar{z}} \sum_{n=0} \frac{\bar{z}^n}{n!} f^{(n)}(0) = f(0).$$

Cette remarque sera utile en section 6.3.

### 6.2.2 Oscillateur harmonique et représentation holomorphe

Il nous faut maintenant représenter les opérateurs de la mécanique quantique agissant sur l'espace de Hilbert  $\mathfrak{H}$ . Dans ce but, nous montrons que les opérateurs  $z$ , agissant par multiplication, et  $d/dz$  peuvent être associés aux opérateurs de création et d'annihilation  $a^\dagger, a$  qui permettent de diagonaliser l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique

$$H_0 = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\omega^2\hat{q}^2, \quad (6.15)$$

de façon algébrique.

*Opérateurs de création et annihilation.* Nous rappelons que les opérateurs de création et annihilation  $a^\dagger$  et  $a$ , associés à l'hamiltonien (6.15), sont définis par (dans ce chapitre  $\hbar = 1$  sauf en sections 6.8 et 6.9)

$$\hat{p} - i\omega\hat{q} = -i\sqrt{2\omega}a, \quad \hat{p} + i\omega\hat{q} = i\sqrt{2\omega}a^\dagger \Rightarrow [a, a^\dagger] = 1. \quad (6.16)$$

En terme de  $a, a^\dagger$ , l'hamiltonien prend la forme simple

$$H_0 = \omega a^\dagger a + \frac{1}{2}\omega$$

avec  $\omega > 0$ , une *convention de signe que nous adoptons dans tout le chapitre.*

Les états propres  $|k\rangle$  de cet hamiltonien sont alors construits à partir de l'état fondamental  $|0\rangle$  qui satisfait

$$a|0\rangle = 0$$

en faisant agir de façon répétée l'opérateur de création  $a^\dagger$  :

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{k!}}(a^\dagger)^k|0\rangle,$$

et les valeurs propres correspondantes sont  $E_k = (k + 1/2)\omega$ . Nous omettons par la suite, en général, le déplacement global d'énergie  $\omega/2$ .

*Représentation holomorphe.* L'opérateur  $a^\dagger$  est représenté par la multiplication par la variable complexe  $z$  :

$$a^\dagger f \mapsto zf(z).$$

L'opérateur  $a$  est alors représenté par l'opérateur dérivée  $d/dz$

$$af \mapsto df(z)/dz,$$

qui avec  $z$  satisfait les relations de commutation (6.16) :

$$[d/dz, z] = 1.$$

Par ailleurs, considérons le produit scalaire de  $g(z)$  et  $df(z)/dz \equiv f'(z)$  et intégrons par parties :

$$\begin{aligned} (g, f') &= \int \frac{dzd\bar{z}}{2i\pi} e^{-z\bar{z}} \overline{g(z)} f'(z) \\ &= - \int \frac{dzd\bar{z}}{2i\pi} f(z) \overline{g(z)} \frac{d}{dz} e^{-z\bar{z}} \\ &= \int \frac{dzd\bar{z}}{2i\pi} \overline{zg(z)} f(z). \end{aligned}$$

Cette identité démontre que par rapport au produit scalaire (6.10),  $z$  et  $d/dz$  sont des opérateurs hermitiens conjugués, une convention cohérente avec les propriétés des opérateurs  $a^\dagger$  et  $a$ . En conséquence, un hamiltonien hermitien  $H(a^\dagger, a)$  reste bien hermitien par rapport à ce produit scalaire.

La représentation holomorphe de la mécanique quantique est donc isomorphe à la représentation habituelle.

*Oscillateur harmonique.* L'hamiltonien  $H_0 = \omega a^\dagger a$  est alors représenté par

$$H_0 = \omega z \frac{d}{dz}. \quad (6.17)$$

Il est clair que la représentation holomorphe est particulièrement bien adaptée à l'étude de l'oscillateur harmonique. En effet,

$$H_0 z^n = \omega z \frac{d}{dz} z^n = \omega n z^n$$

et donc les monômes  $z^n$  sont les fonctions propres de l'hamiltonien. Nous avons déjà vu que les monômes  $z^n$  sont orthogonaux (équation (6.12)) par le produit scalaire (6.10), ce qui est cohérent avec la propriété d'hermiticité de  $H_0$ .

L'action de l'opérateur statistique quantique

$$U_0(t) = e^{-H_0 t} \quad (6.18)$$

est alors

$$U_0(t) z^n = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{t^k H_0^k}{k!} z^n = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(\omega n t)^k}{k!} z^n = (e^{-\omega t})^n z^n$$

et donc pour toute fonction de  $z$  :

$$U_0(t) f(z) = f(e^{-\omega t} z), \quad (6.19)$$

ce qui peut se vérifier directement en dérivant par rapport à  $t$  les deux membres.

### 6.3 Noyaux d'opérateurs

De la base orthonormée  $\{z^n/\sqrt{n!}\}$ , on déduit une représentation de l'identité sous forme de noyau :

$$\mathcal{I}(z, \bar{z}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{z}^n}{\sqrt{n!}} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} = e^{z\bar{z}}, \quad (6.20)$$

ce qu'un calcul direct permet de vérifier. En effet

$$\int \frac{dz' d\bar{z}'}{2i\pi} e^{-z'\bar{z}'} \mathcal{I}(z, \bar{z}') f(z') = \int \frac{dz' d\bar{z}'}{2i\pi} e^{-(z'-z)\bar{z}'} f(z') = f(z), \quad (6.21)$$

comme conséquence de la représentation (6.14) de la fonction  $\delta$ .

L'identité (6.21) conduit à une nouvelle représentation de tout opérateur fonction des  $a$  et  $a^\dagger$ . Avec l'aide de la relation de commutation (6.16), tout opérateur peut être développé sur une base de produits écrits de façon canonique avec tous les opérateurs  $a$  à droite (ordre dit *normal*)

$$a^\dagger m a^n \mapsto z^m \left( \frac{d}{dz} \right)^n.$$

Faisons alors agir l'opérateur dans sa représentation holomorphe sur l'équation (6.21). Nous trouvons

$$\begin{aligned} z^m \left( \frac{d}{dz} \right)^n f(z) &= \int \frac{dz' d\bar{z}'}{2i\pi} e^{-z'\bar{z}'} z^m \left( \frac{d}{dz} \right)^n \mathcal{I}(z, \bar{z}') f(z') \\ &= \int \frac{dz' d\bar{z}'}{2i\pi} e^{-z'\bar{z}'} \left[ z^m \bar{z}'^n e^{z\bar{z}'} \right] f(z'). \end{aligned}$$

À tout opérateur  $\mathcal{O}$  écrit sous forme normale,

$$\mathcal{O} = \sum_{mn} \mathcal{O}_{mn} a^\dagger m a^n,$$

est donc associé le noyau

$$\mathcal{O}(z, \bar{z}) = \mathcal{O}(z, \bar{z}) e^{z\bar{z}} \quad \text{avec} \quad (6.22a)$$

$$\mathcal{O}(z, \bar{z}) = \sum_{mn} \mathcal{O}_{mn} z^m \bar{z}^n. \quad (6.22b)$$

Pour rendre les expressions plus suggestives, nous utilisons aussi ci-dessous une notation formelle d'éléments de matrice avec bras et kets :

$$\mathcal{O}(z, \bar{z}) \equiv \langle z | \mathcal{O} | \bar{z} \rangle, \quad (6.23)$$

sans essayer de définir trop précisément les vecteurs correspondants.

L'action d'un opérateur  $\mathcal{O}$  avec noyau  $\mathcal{O}(z, \bar{z})$  sur un vecteur  $f(z)$  est alors donnée par

$$(\mathcal{O}f)(z) = \int \frac{dz' d\bar{z}'}{2i\pi} \langle z | \mathcal{O} | \bar{z}' \rangle e^{-z'\bar{z}'} f(z').$$

Le noyau associé au produit de deux opérateurs s'en déduit :

$$\int \frac{d\bar{z}' dz'}{2i\pi} \langle z | \mathcal{O}_2 | \bar{z}' \rangle e^{-z'\bar{z}'} \langle z' | \mathcal{O}_1 | \bar{z} \rangle = \langle z | \mathcal{O}_2 \mathcal{O}_1 | \bar{z} \rangle. \quad (6.24)$$

Par ailleurs, la trace de l'opérateur  $\mathcal{O}$  est donnée par

$$\text{tr } \mathcal{O} = \int \frac{d\bar{z}dz}{2i\pi} e^{-z\bar{z}} \langle z | \mathcal{O} | \bar{z} \rangle. \quad (6.25)$$

Utilisant l'expression (6.24), on vérifie que cette définition satisfait bien à la condition de cyclicité  $\text{tr } \mathcal{O}_1 \mathcal{O}_2 = \text{tr } \mathcal{O}_2 \mathcal{O}_1$ .

*Remarques.*

(i) La propriété que  $z$  et  $d/dz$  sont hermitiens conjugués entraîne que la conjugaison hermitienne est représentée par la conjugaison complexe formelle :

$$\mathcal{O} \mapsto \mathcal{O}^\dagger \quad \Rightarrow \quad \mathcal{O}(z, \bar{z}) \mapsto \overline{\mathcal{O}}(z, \bar{z}). \quad (6.26)$$

(ii) À un opérateur  $\mathcal{O}$  qui a des éléments de matrice  $O_{mn}$  dans la base de l'oscillateur harmonique, est associé le noyau  $\sum_{m,n} O_{mn} (z^m/\sqrt{m!})(\bar{z}^n/\sqrt{n!})$ . La définition (6.25) de la trace entraîne le résultat attendu :

$$\text{tr } \mathcal{O} = \int \frac{d\bar{z}dz}{2i\pi} e^{-z\bar{z}} \sum_{mn} O_{mn} \frac{\bar{z}^n}{\sqrt{n!}} \frac{z^m}{\sqrt{m!}} = \sum_n O_{nn}.$$

(iii) Les éléments de matrice des opérateurs dans la représentation holomorphe sont analogues aux éléments de matrice dans la représentation mixte position-impulsion. Ces derniers sont obtenus à partir des éléments de matrice  $\langle q | \mathcal{O} | q' \rangle$  d'un opérateur dans la base des positions par une transformation de Fourier sur l'argument de droite :

$$\langle q | \mathcal{O} | p \rangle = \int dq' e^{ipq'/\hbar} \langle q | \mathcal{O} | q' \rangle.$$

Dans la limite classique, les variables  $(p, q)$  et  $(z, \bar{z})$  paramètrent respectivement, de façon réelle et complexe, l'espace de phase (*cf.* section 10.1).

*Hamiltonien et opérateur statistique.* Les éléments de matrice de l'hamiltonien (6.17) et de l'opérateur statistique (6.18) sont, respectivement,

$$\langle z | H_0 | \bar{z} \rangle = \omega z \bar{z} e^{z\bar{z}}, \quad \langle z | U_0(t) | \bar{z} \rangle = \mathcal{I}(e^{-\omega t} z, \bar{z}) = e^{z\bar{z} e^{-\omega t}}, \quad (6.27)$$

où nous avons utilisé la forme (6.19). On vérifie que  $\langle z | U_0(t) | \bar{z} \rangle$  satisfait bien

$$-\omega z \frac{\partial}{\partial z} \langle z | U_0(t) | \bar{z} \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle z | U_0(t) | \bar{z} \rangle.$$

Par ailleurs, utilisant la propriété (6.26), on vérifie directement que  $H_0$  et  $U_0(t)$  sont hermitiens.

La fonction de partition  $\mathcal{Z}_0(\beta)$  correspondant à  $H_0$  est la trace de  $U_0(\beta)$ . Utilisant les équations (6.25, 6.27), on obtient le résultat attendu :

$$\mathcal{Z}_0(\beta) = \text{tr } U_0(\beta) = \int \frac{d\bar{z}dz}{2i\pi} e^{-z\bar{z}} e^{z\bar{z} e^{-\omega\beta}} = \frac{1}{1 - e^{-\omega\beta}}. \quad (6.28)$$

## 6.4 Intégrale de chemin : l'oscillateur harmonique

Nous construisons maintenant une représentation par intégrale de chemin de l'opérateur statistique quantique basée sur le formalisme holomorphe. Comme dans le cas des coordonnées réelles, nous considérons d'abord l'oscillateur harmonique et ensuite des systèmes plus généraux.

*Intégrale de chemin.* Les éléments de matrice de l'opérateur statistique (6.18) sont donnés en (6.27) et donc, au premier ordre en  $t$ ,

$$\langle z | U_0(t) | \bar{z} \rangle = \exp [\bar{z}z(1 - \omega t) + O(t^2)]. \quad (6.29)$$

La propriété de groupe  $U_0(t) = U_0^n(t/n)$  permet alors de calculer  $U_0(t)$  à temps fini. Utilisant l'équation (6.24) itérativement pour calculer les éléments de matrice du produit, nous obtenons

$$\langle z'' | U_0(t'', t') | \bar{z}' \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^{n-1} \frac{dz_k d\bar{z}_k}{2i\pi} \exp [-\mathcal{S}_\varepsilon(z, \bar{z})] \quad (6.30)$$

avec

$$\mathcal{S}_\varepsilon(z, \bar{z}) = \left[ -\sum_{k=1}^{n-1} \bar{z}_k (z_{k+1} - z_k) - \bar{z}_0 z_1 + \omega \varepsilon \sum_{k=0}^{n-1} \bar{z}_k z_{k+1} \right], \quad (6.31)$$

où  $\varepsilon = (t'' - t')/n$  est l'intervalle de temps et les conditions aux limites sont

$$\bar{z}_0 = \bar{z}', \quad z_n = z''. \quad (6.32)$$

Dans la limite formelle  $n \rightarrow \infty$ , nous obtenons une intégrale de chemin donnant les éléments de matrice de  $U_0(t'', t')$  :

$$U_0(z'', \bar{z}'; t'', t') = \int \left[ \frac{d\bar{z}(t) dz(t)}{2i\pi} \right] \exp [-\mathcal{S}_0(z, \bar{z})], \quad (6.33)$$

$$\mathcal{S}_0(z, \bar{z}) = -\bar{z}(t'')z(t'') + \int_{t'}^{t''} dt \bar{z}(t) [-\dot{z}(t) + \omega z(t)]$$

avec les conditions aux limites  $z(t'') = z''$ ,  $\bar{z}(t') = \bar{z}'$ . La symétrie de l'action entre temps initial et final, qui n'est pas explicite, peut être vérifiée par une intégration par parties du terme  $\bar{z}\dot{z}$  :

$$\mathcal{S}_0(z, \bar{z}) = -\bar{z}(t'')z(t'') + \int_{t'}^{t''} dt z(t) [\dot{\bar{z}}(t) + \omega \bar{z}(t)].$$

Notons, cependant, que cette intégration suppose que dérivée et valeur moyenne pour des produits à temps égaux commutent.

Enfin, dans le cas de l'intégrale de chemin holomorphe, la discussion de l'existence d'une limite continue est compliquée et de nature semblable à celle de l'intégrale sur l'espace des phases (*cf.* section 10.2.1).

### 6.4.1 Intégrale gaussienne générale

L'expression (6.33) se généralise immédiatement à un système couplé linéairement à des sources externes  $b(t)$  et  $\bar{b}(t)$ . À l'hamiltonien

$$H(t) = \omega a^\dagger a - b(t)a - \bar{b}(t)a^\dagger \quad (6.34)$$

sont associés l'opérateur différentiel et le noyau

$$\omega z \partial_z - b(t) \partial_z - \bar{b}(t) z \mapsto [\omega z \bar{z} - b(t) \bar{z} - \bar{b}(t) z] e^{\bar{z}z}.$$

À l'ordre  $\varepsilon$  l'opérateur statistique correspondant  $U_G(t + \varepsilon, t) = 1 - \varepsilon H(t)$  et donc

$$\begin{aligned} \langle z | U_G(t + \varepsilon, t) | \bar{z} \rangle &= e^{\bar{z}z} [1 - \varepsilon (\omega z \bar{z} - b(t) \bar{z} - \bar{b}(t) z)] + O(\varepsilon^2) \\ &= \exp [\bar{z}z - \varepsilon (\omega z \bar{z} - b(t) \bar{z} - \bar{b}(t) z)] + O(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

L'action correspondante est

$$\mathcal{S}_G(z, \bar{z}) = -\bar{z}(t')z(t'') + \int_{t'}^{t''} dt \{ \bar{z}(t) [-\dot{z}(t) + \omega z(t)] - \bar{z}(t)b(t) - \bar{b}(t)z(t) \}. \quad (6.35)$$

Pour calculer l'intégrale de chemin gaussienne

$$U_G(b; z'', \bar{z}'; t'', t') = \int \left[ \frac{d\bar{z}(t) dz(t)}{2i\pi} \right] \exp [-\mathcal{S}_G(z, \bar{z})] \quad (6.36)$$

explicitement, on procède de la manière habituelle.

On résout d'abord les équations classiques obtenues en variant  $\bar{z}(t)$  et  $z(t)$  :

$$\begin{aligned} -\dot{z}(t) + \omega z(t) - b(t) &= 0, \\ \dot{\bar{z}}(t) + \omega z(t) - \bar{b}(t) &= 0. \end{aligned}$$

Les solutions satisfaisant aux conditions aux limites sont

$$\begin{aligned} z(t) &= z'' e^{-\omega(t''-t)} + \int_t^{t''} e^{-\omega(u-t)} b(u) du, \\ \bar{z}(t) &= \bar{z}' e^{-\omega(t-t')} + \int_{t'}^t e^{-\omega(t-u)} \bar{b}(u) du. \end{aligned}$$

L'action classique correspondant à cette solution est alors

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_G(z, \bar{z}) &= -\bar{z}(t')z(t'') - \int_{t'}^{t''} dt \bar{b}(t)z(t) \\ &= -\bar{z}' z'' e^{-\omega(t''-t')} - \int_{t'}^{t''} dt \left[ \bar{b}(t) e^{-\omega(t''-t)} z'' + \bar{z}' e^{-\omega(t-t')} b(t) \right] \\ &\quad - \int_{t'}^{t''} du dt \bar{b}(u) \theta(t-u) e^{-\omega(t-u)} b(t). \end{aligned}$$

Le résultat de l'intégration prend la forme

$$U_G(b; z'', \bar{z}'; t'', t') = \mathcal{N}(\omega(t'' - t')) e^{-S_G}, \quad (6.37)$$

où  $\mathcal{N}$  est une normalisation qui, comme dans le cas de l'intégrale de chemin conventionnelle, ne peut être entièrement déterminée que par comparaison avec une intégrale de chemin de référence.

### 6.4.2 Fonctions de corrélation gaussiennes

La trace de l'expression (6.37) (équation (6.25)) fournit, à une normalisation près, une fonctionnelle génératrice de fonctions de corrélation  $z, \bar{z}$  avec poids gaussien  $e^{-S_0}$  et, comme on le verra, conditions aux limites périodiques. Posant  $\beta = t'' - t'$ , on trouve

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_G(b, \bar{b}; \beta) &= \text{tr } U_G(b; \beta/2, -\beta/2) = \int \frac{dz d\bar{z}}{2i\pi} e^{-z\bar{z}} U_G(b; z, \bar{z}; \beta/2, -\beta/2) \\ &= \int \frac{d\bar{z} dz}{2i\pi} \exp[-\Sigma(z, \bar{z})] \end{aligned} \quad (6.38)$$

avec

$$\begin{aligned} \Sigma(z, \bar{z}) &= \bar{z}z (1 - e^{-\omega\beta}) + \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \left[ \bar{b}(t) e^{-\omega(\beta/2-t)} z + \bar{z} e^{-\omega(t+\beta/2)} b(t) \right] \\ &\quad - \int_{-\beta/2}^{\beta/2} du dt \bar{b}(u) \theta(t-u) e^{-\omega(t-u)} b(t). \end{aligned}$$

L'intégration donne

$$\mathcal{Z}_G(b, \bar{b}; \beta) = \mathcal{Z}_0(\beta) \exp \left[ \int_{-\beta/2}^{\beta/2} du dt \bar{b}(u) \Delta(t-u) b(t) \right], \quad (6.39)$$

où  $\mathcal{Z}_0(\beta) = \text{tr } e^{-\beta H_0}$  est la fonction de partition qui est obtenue sous la forme

$$\mathcal{Z}_0(\beta) = \frac{\mathcal{N}(\omega\beta)}{1 - e^{-\omega\beta}} \Rightarrow \mathcal{N}(\omega\beta) = 1,$$

et le *propagateur*

$$\Delta(t) = \frac{1}{2} e^{-\omega t} [\epsilon(t) + 1/\tanh(\omega\beta/2)] \quad (6.40)$$

( $\epsilon(t) = 1$  pour  $t > 0$ ,  $\epsilon(t) = -1$  pour  $t < 0$ ) est la solution de l'équation différentielle

$$\dot{\Delta}(t) + \omega\Delta(t) = \delta(t), \quad (6.41)$$

avec conditions aux limites périodiques sur l'intervalle  $[-\beta/2, \beta/2]$  (nous rap- pelons qu'au sens des distributions  $\dot{\epsilon}(t) = 2\delta(t)$ ).

Dans la limite  $\beta \rightarrow \infty$ , le propagateur  $\Delta$  se réduit à

$$\Delta(t) = \theta(t) e^{-\omega t}, \quad (6.42)$$

où  $\theta(t) = (1 + \epsilon(t))/2$  est la fonction saut.

Notons que, malgré la façon non triviale dont la trace est définie, le résultat obtenu est le même que celui qu'aurait donné une intégrale de chemin avec conditions aux limites périodiques :

$$\mathcal{Z}_G(b, \bar{b}; \beta) = \int \left[ \frac{dz(t) d\bar{z}(t)}{2i\pi} \right] \exp[-\mathcal{S}_G(z, \bar{z})] \quad (6.43)$$

avec  $z(-\beta/2) = z(\beta/2)$ ,  $\bar{z}(-\beta/2) = \bar{z}(\beta/2)$  et

$$\mathcal{S}_G(z, \bar{z}) = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \{ \bar{z}(t) [-\dot{z}(t) + \omega z(t)] - \bar{z}(t)b(t) - \bar{b}(t)z(t) \}. \quad (6.44)$$

Avec un peu de soin, ces conditions aux limites peuvent aussi être obtenues en prenant directement la trace de l'expression initiale (6.33).

La fonctionnelle génératrice des fonctions de corrélation avec conditions aux limites périodiques, qui est déterminée par la condition  $\langle 1 \rangle = 1$ , est alors

$$\mathcal{Z}_G(b, \bar{b}; \beta) / \mathcal{Z}_0(\beta) = \exp \left[ \int du dt \bar{b}(u) \Delta(t-u) b(t) \right]. \quad (6.45)$$

L'expression initiale (6.36), montre que la dérivée par rapport à  $b$  et  $\bar{b}$  prise pour  $b = \bar{b} = 0$  est la fonction à deux points, et donc

$$\langle \bar{z}(t) z(u) \rangle = \Delta(t-u). \quad (6.46)$$

### 6.4.3 Fonction de partition

La dérivée par rapport à  $\omega$  de l'intégrale de chemin (6.43), prise pour  $b = \bar{b} = 0$ , est la dérivée de la fonction de partition, et donc

$$\frac{d}{d\omega} \ln \mathcal{Z}_0(\beta) = - \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \langle \bar{z}(t) z(t) \rangle = -\beta \Delta(0).$$

Comme  $\Delta(0)$  contient  $\epsilon(0)$ , le résultat n'est clairement pas défini et dépend d'une convention sur la valeur de  $\epsilon(0)$ . Examinons les cas extrêmes. Si nous choisissons  $\epsilon(0) = 0$ , un choix dont nous avons souligné les mérites dans le cas des intégrales de chemin usuelles, nous trouvons

$$\frac{d}{d\omega} \ln \mathcal{Z}_0(\beta) = - \frac{\beta \cosh(\omega\beta/2)}{2 \sinh(\omega\beta/2)}.$$

Utilisant la propriété que le fondamental n'est pas dégénéré, ce qui fixe la normalisation qui est un nombre, nous concluons

$$\mathcal{Z}_0(\beta) = \frac{1}{2 \sinh(\omega\beta/2)}.$$

Ce résultat correspond à l'hamiltonien symétrique  $H_0 = \frac{1}{2}\omega(aa^\dagger + a^\dagger a)$ . Un choix différent comme  $\Delta(0) = \Delta(0_-)$  conduit à

$$\frac{d}{d\omega} \ln \mathcal{Z}_0(\beta) = -\frac{\beta e^{-\omega\beta}}{1 - e^{-\omega\beta}} \Rightarrow \mathcal{Z}_0(\beta) = \frac{1}{1 - e^{-\omega\beta}},$$

ce qui correspond à l'ordre normal  $H_0 = \omega a^\dagger a$ . Enfin  $\Delta(0) = \Delta(0_+)$  correspond à l'hamiltonien  $H_0 = \omega a a^\dagger$ . Dans tous les cas  $\mathcal{N}(\beta) = e^{-\beta E_0}$  où  $E_0$  est l'énergie du fondamental.

Cette ambiguïté, qui se manifeste par l'apparition de la quantité  $\epsilon(0)$ , est liée au problème de l'ordre des opérateurs  $a$  et  $a^\dagger$  qui n'est plus apparent dans la limite continue formelle. Des problèmes analogues ont déjà été rencontrés en sections 5.3 et 5.5.2. Différents choix de  $\Delta(0)$  correspondent à différents choix de quantification.

Nous avons cependant déjà souligné en section 5.1 les difficultés liées à un choix autre que  $\epsilon(0) = 0$  et nous allons de nouveau l'illustrer ici. Calculons la valeur moyenne

$$\langle [\bar{z}(t+\delta) - \bar{z}(t)][z(t+\delta) - z(t)] \rangle = 2\Delta(0) - \frac{\cosh \omega(\beta/2 - |\delta|)}{\sinh(\omega\beta/2)}.$$

Seul le choix symétrique  $\epsilon(0) = 0$  et donc (équation (6.40))

$$2\Delta(0) = \frac{\cosh(\omega\beta/2)}{\sinh \omega\beta/2},$$

assure la continuité de cette fonction quand  $\delta$  tend vers zéro. Alors les valeurs typiques de  $z(t+\delta) - z(t)$  et  $\bar{z}(t+\delta) - \bar{z}(t)$  sont d'ordre  $1/\sqrt{\delta}$  dans le cas de l'oscillateur harmonique.

## 6.5 Intégrale de chemin : hamiltoniens généraux

Nous construisons maintenant une représentation par une intégrale de chemin basée sur le formalisme holomorphe de l'opérateur statistique pour un hamiltonien général. En section 10.2.1, nous définirons une intégrale sur des chemins dans l'espace de phase position-impulsion. Les intégrales de chemin holomorphe et sur l'espace de phase (10.24) sont en fait reliées par un simple changement de variables de la forme (6.16) (les opérateurs quantiques étant remplacés par les variables classiques correspondantes), mais avec des conditions aux limites et des termes de bord différents.

### 6.5.1 Intégrale de chemin

Les éléments de matrice de l'opérateur statistique satisfont l'équation

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle z'' | U(t, t') | \bar{z}' \rangle = - \int \frac{d\bar{z} dz}{2i\pi} \langle z'' | H(t) | \bar{z} \rangle e^{-z\bar{z}} \langle z | U(t, t') | \bar{z}' \rangle. \quad (6.47)$$

Un hamiltonien général peut être mis sous la forme

$$H = \sum_{mn} H_{mn} a^{\dagger m} a^n \Rightarrow \langle z | H | \bar{z} \rangle = e^{z\bar{z}} \tilde{H}(z, \bar{z}) = e^{z\bar{z}} \sum_{mn} H_{mn} z^m \bar{z}^n. \quad (6.48)$$

Nous considérons un hamiltonien indépendant du temps et donc l'opérateur statistique  $U(t) = e^{-tH}$ . Utilisant la forme (6.48) de l'hamiltonien, on peut intégrer l'équation (6.47) pour les éléments de matrice de  $U(t)$  à l'ordre  $t$  :

$$\begin{aligned} \langle z'' | U(t) | \bar{z}' \rangle &= e^{\bar{z}' z''} - t e^{-\bar{z}' z''} \tilde{H}(z'', \bar{z}') + O(t^2) \\ &= \exp \left[ \bar{z}' z'' - t \tilde{H}(z'', \bar{z}') + O(t^2) \right]. \end{aligned}$$

Une généralisation simple des arguments de la section 6.4 montre que l'intégrale de chemin prend alors la forme

$$U(z'', \bar{z}'; t'', t') = \int \left[ \frac{d\bar{z}(t) dz(t)}{2i\pi} \right] \exp[-\mathcal{S}(z, \bar{z})] \quad (6.49)$$

avec l'action euclidienne

$$\mathcal{S}(z, \bar{z}) = -\bar{z}(t') z(t') + \int_{t'}^{t''} dt \left[ -\bar{z}(t) \dot{z}(t) + \tilde{H}(z(t), \bar{z}(t)) \right], \quad (6.50)$$

et les conditions aux limites  $z(t'') = z''$ ,  $\bar{z}(t') = \bar{z}'$ .

*Expression perturbative.* Décomposons l'hamiltonien en la somme d'un terme d'oscillateur harmonique et un reste appelé interaction :

$$\tilde{H}(z, \bar{z}) = \omega z \bar{z} + H_I(z, \bar{z}).$$

Les résultats de la section 6.4, et en particulier le théorème de Wick, permettent alors de calculer l'intégrale de chemin comme un développement en puissances de  $H_I$ . Formellement

$$U(z'', \bar{z}'; t'', t') = \exp \left[ - \int_{t'}^{t''} dt H_I \left( \frac{\partial}{\partial \bar{b}(t)}, \frac{\partial}{\partial b(t)} \right) \right] U_G(b; z'', \bar{z}'; t'', t') \Big|_{b=\bar{b}=0}. \quad (6.51)$$

*Fonction de partition.* La fonction de partition se déduit des éléments de matrice de  $U(\beta)$  en prenant la trace et donc

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int \frac{dz d\bar{z}}{2i\pi} e^{-z\bar{z}} U(z, \bar{z}; \beta/2, -\beta/2).$$

Combinant le résultat (6.43) avec l'expression perturbative (6.51), on vérifie que l'opération de trace induit des conditions aux limites périodiques dans l'intégrale de chemin. On trouve alors

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int \left[ \frac{d\bar{z}(t) dz(t)}{2i\pi} \right] \exp[-\mathcal{S}(z, \bar{z})] \quad (6.52)$$

avec

$$\mathcal{S}(z, \bar{z}) = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \left[ -\bar{z}(t)\dot{z}(t) + \tilde{H}(z(t), \bar{z}(t)) \right]$$

et les conditions  $z(-\beta/2) = z(\beta/2)$ ,  $\bar{z}(-\beta/2) = \bar{z}(\beta/2)$ .

### 6.5.2 Discussion

*Ordre des opérateurs et ambiguïtés de l'intégrale de chemin.* Les difficultés liées à l'ordre des opérateurs augmentent évidemment dans le cas de hamiltoniens quantiques plus généraux dans la mesure où, dans la plupart des exemples intéressants, les interactions contiennent des monômes impliquant à la fois des  $a$  et des  $a^\dagger$ . Dans  $H(z, \bar{z})$ , un facteur en  $(\bar{z}z)^p$  va engendrer des ambiguïtés équivalentes à un polynôme en  $\bar{z}z$  de degré  $p - 1$ , ce qui rend difficile une discussion de fonctions  $H(z, \bar{z})$  qui ne sont pas des polynômes de degré faible. Nous laissons en exercice de vérifier qu'en effet, dans le calcul perturbatif de l'intégrale de chemin, la quantité  $\Delta(0)$  apparaît comme résultat des auto-contractions des produits  $(z\bar{z})^p$ , engendrés par les produits des opérateurs  $a, a^\dagger$  qui ne commutent pas.

*Formalisme holomorphe et espace de phase position-impulsion.* En section 10.2.1, nous montrons comment construire formellement une intégrale de chemin où les chemins sont des trajectoires dans l'espace de phase position-impulsion. Si dans le formalisme holomorphe on passe en variables réelles avec le changement de variables

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip), \quad \bar{z} = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip), \quad (6.53)$$

on trouve l'action classique euclidienne dans le formalisme hamiltonien, exprimée en termes des variables d'espace de phase (équation (10.25)) :

$$\mathcal{S}(p, q) = \int dt [-ip(t)\dot{q}(t) + H(p, q)],$$

aux termes tous intégrés près, ainsi que la mesure de Liouville dans l'intégration. Par contre, les conditions aux limites dans l'intégration sont différentes, ce qui est normal puisque les éléments de matrice sont différents.

*Fonctions de plusieurs variables complexes.* Il est facile de généraliser tout ce formalisme holomorphe aux fonctions entières de  $N$  variables complexes  $z_i$ . Le produit scalaire de deux fonctions s'écrit alors

$$(g, f) = \int \left( \prod_{i=1}^N \frac{dz_i d\bar{z}_i}{2i\pi} e^{-z_i \bar{z}_i} \right) \overline{g(z)} f(z). \quad (6.54)$$

En termes du développement en série de Taylor

$$f(z) = \sum_{k, i_1, \dots, i_k} f_{i_1, \dots, i_k} z_{i_1} \dots z_{i_k},$$

où les coefficients  $f_{i_1, \dots, i_k}$  sont symétriques dans les  $k$  indices, le carré scalaire s'écrit

$$(f, f) = \sum_{k, i_1, \dots, i_k} k! |f_{i_1, \dots, i_k}|^2.$$

Les fonctions de norme finie engendrent un espace de Hilbert dont l'utilité apparaîtra dans l'étude des systèmes de bosons en section 6.6.

### 6.5.3 Oscillateur harmonique : perturbation réelle

Montrons, à titre d'exercice, comment retrouver le développement perturbatif de la fonction de partition (2.69) autour de l'oscillateur harmonique dans l'exemple d'un hamiltonien de la forme

$$H = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\omega^2\hat{q}^2 + V_I(\hat{q}).$$

L'opérateur position s'exprime par les relations (6.16) en termes des opérateurs  $a, a^\dagger$  :

$$\hat{q} = \frac{1}{\sqrt{2\omega}}(a + a^\dagger).$$

Vérifions que l'action de l'intégrale de chemin holomorphe correspondante est alors

$$S(z, \bar{z}) = -\bar{z}(t')z(t') + \int_{t'}^{t''} dt \left\{ \bar{z}(t) [-\dot{z}(t) + \omega z(t)] + V_I((z(t) + \bar{z}(t))/\sqrt{2\omega}) \right\}.$$

Le développement perturbatif en  $V_I$  peut alors être exprimé en termes des dérivées fonctionnelles agissant sur l'intégrale de chemin de l'oscillateur harmonique perturbé par un terme de source couplé linéairement à  $z + \bar{z}$ , sous une forme analogue à l'expression (2.69). Il suffit pour cela de considérer l'intégrale gaussienne (6.35) avec une source réelle :  $b(t) = \bar{b}(t)$ . Donc les expressions (6.37) et (6.40) peuvent être symétrisées dans le temps. Changeant aussi  $b(t) \mapsto b(t)/\sqrt{2\omega}$ , on trouve

$$U(z'', \bar{z}'; t'', t') = \exp \left[ -V_I \left( \frac{\delta}{\delta b(t)} \right) \right] U_G(b; z'', \bar{z}'; t'', t') \Big|_{b=0} \quad (6.55)$$

avec (cf. équation (6.37))

$$\begin{aligned} U_G(b; z'', \bar{z}'; t'', t') &= \exp \left[ -\omega(t'' - t')/2 + \bar{z}' z'' e^{-\omega(t'' - t')} \right] \\ &\times \exp \left[ \int_{t'}^{t''} dt \left( z'' e^{-\omega(t'' - t)} + \bar{z}' e^{\omega(t' - t)} \right) \frac{b(t)}{\sqrt{2\omega}} \right. \\ &\left. + \frac{1}{2} \int_{t'}^{t''} dt d\tau b(t) \frac{e^{-\omega|t - \tau|}}{2\omega} b(\tau) \right]. \end{aligned} \quad (6.56)$$

De la même manière, l'équation (6.39) peut être réécrite

$$\text{tr } U_G(b; t'', t') = \frac{1}{2 \sinh(\omega\beta/2)} \exp \left[ \frac{1}{2} \int dt d\tau b(t) D(t - \tau) b(\tau) \right], \quad (6.57)$$

où  $D(t)$  s'exprime en fonction de  $\Delta(t)$  (équation (6.40)) :

$$D(t) = \frac{1}{4\omega} (\Delta(t) + \Delta(-t)) = \frac{\cosh \omega(\beta/2 - |t|)}{2\omega \sinh(\omega\beta/2)}, \quad (6.58)$$

résultat en accord avec l'équation (2.46).

## 6.6 Systèmes de bosons : seconde quantification

Nous allons maintenant étudier la mécanique quantique de systèmes de bosons, dans un formalisme dit de seconde quantification. Dans un premier temps, nous supposons que ces bosons ne peuvent occuper qu'un nombre fini d'états, par exemple en ne prenant en compte que des états de spin, ou parce qu'ils appartiennent à un réseau spatial fini.

### 6.6.1 États de bosons et hamiltonien

*États à une particule.* L'état à un boson est défini par un vecteur que nous notons  $\psi_i$  et qui appartient à un espace vectoriel complexe  $\mathfrak{H}_1$  de dimension finie  $N$ .

*États à  $n$  particules.* Un état à  $n$  particules est décrit par un vecteur  $\psi_{i_1 i_2 \dots i_n}$  où les indices  $i_k$  prennent  $N$  valeurs. Cependant, le principe de Pauli appliqué aux bosons implique l'invariance du vecteur  $\psi_{i_1 i_2 \dots i_n}$  par toute permutation  $P$  des indices  $\{i_1, \dots, i_n\}$  :

$$\psi_{i_1 i_2 \dots i_n} = \psi_{i_{P_1} i_{P_2} \dots i_{P_n}}.$$

Les vecteurs  $\psi_{i_1 i_2 \dots i_n}$  sont des tenseurs symétriques à  $n$  indices et appartiennent à un espace vectoriel complexe  $\mathfrak{H}_n$  de dimension  $\binom{N+n-1}{n}$ .

*Hamiltonien de particules indépendantes.* L'hamiltonien à un corps ou à une particule  $\mathbf{H}^{(1)}$  est défini par son action sur un état à une particule : il est alors représenté par une matrice hermitienne  $N \times N$  qui peut être diagonalisée. Notons  $\omega_i$  ses valeurs propres. Alors

$$\mathbf{H}^{(1)} \psi_i = \omega_i \psi_i.$$

Son action sur un état à  $n$  particules est additive :

$$\mathbf{H}^{(1)} \psi_{i_1 i_2 \dots i_n} = \sum_{\ell} \omega_{i_\ell} \psi_{i_1 i_2 \dots i_n}.$$

Si l'hamiltonien total a cette forme, les bosons sont sans interactions mutuelles : on parle alors de particules indépendantes.

*Interaction à deux corps.* Une interaction à deux corps ou interaction de paires  $\mathbf{H}^{(2)}$  est déterminée par son action sur un état à deux particules, et donc par une matrice  $H_{i_1 i_2, j_1 j_2}^{(2)}$  qui satisfait

$$H_{i_1 i_2, j_1 j_2}^{(2)} = H_{i_2 i_1, j_2 j_1}^{(2)},$$

ce qui en fait une application interne de l'espace vectoriel  $\mathfrak{H}_2$  des tenseurs symétriques. Quand elle n'agit que sur des tenseurs symétriques, on peut la symétriser en lui imposant de plus

$$H_{i_1 i_2, j_1 j_2}^{(2)} = H_{i_1 i_2, j_2 j_1}^{(2)} = H_{i_2 i_1, j_1 j_2}^{(2)}.$$

Il est évidemment possible, sur le même modèle, de construire des interactions à trois corps, mais nous nous limitons à cet exemple pour des raisons de simplicité.

L'action de  $\mathbf{H}^{(2)}$  sur un état à  $n$  particules prend la forme

$$\mathbf{H}^{(2)} \psi_{i_1 i_2 \dots i_n} = \sum_{\ell, m} \sum_{jk} H_{i_\ell i_m, jk}^{(2)} \psi_{i_1 i_2 \dots i_{\ell-1} j i_{\ell+1} \dots i_{m-1} k i_{m+1} \dots i_n}.$$

## 6.6.2 Vecteurs d'état : fonction génératrice et hamiltonien

Nous considérons maintenant l'ensemble des vecteurs d'état d'un nombre quelconque de particules, qui appartient à l'espace  $\oplus_n \mathfrak{H}_n$ ,  $i = 0, 1, \dots, \infty$ . Nous introduisons un vecteur complexe  $z_i \in \mathbb{C}^N$  et la fonction de  $N$  variables

$$\Psi(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} z_{i_1} z_{i_2} \dots z_{i_n} \psi_{i_1 i_2 \dots i_n},$$

qui est une fonction génératrice des vecteurs d'état. Notons qu'il est essentiel que les tenseurs soient symétriques pour qu'ils puissent être déterminés par la donnée de  $\Psi(z)$ .

Les fonctions  $\Psi(z)$  normalisables par rapport au produit scalaire (6.54) appartiennent à l'espace de Hilbert des fonctions entières de  $N$  variables, ce qui explique la terminologie de formalisme de seconde quantification.

Nous remarquons alors

$$\begin{aligned} \sum_j \omega_j z_j \frac{\partial \Psi(z)}{\partial z_j} &= \sum_n \frac{1}{(n-1)!} \sum_j z_j \omega_j \sum_{i_1, i_2, \dots, i_{n-1}} z_{i_1} z_{i_2} \dots z_{i_{n-1}} \psi_{i_1 i_2 \dots i_{n-1} j} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} z_{i_1} z_{i_2} \dots z_{i_n} \sum_{\ell} \omega_{i_\ell} \psi_{i_1 i_2 \dots i_n}. \end{aligned}$$

L'opérateur

$$\mathbf{H}^{(1)} \equiv \sum_i z_i \omega_i \frac{\partial}{\partial z_i} \quad (6.59)$$

représente donc l'hamiltonien à un corps agissant sur le vecteur  $\Psi(z)$ .

Un calcul analogue montre que l'interaction de paires est représentée par l'opérateur

$$\mathbf{H}^{(2)} = \sum_{i_1 i_2, j_1 j_2} z_{i_1} z_{i_2} H_{i_1 i_2, j_1 j_2}^{(2)} \frac{\partial^2}{\partial z_{j_1} \partial z_{j_2}}. \quad (6.60)$$

L'hamiltonien total

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^{(1)} + \mathbf{H}^{(2)} \quad (6.61)$$

a donc exactement la forme des hamiltoniens discutés dans le cadre de la représentation holomorphe, généralisée à  $N$  variables complexes.

*Opérateur nombre de particules.* L'hamiltonien  $\mathbf{H}$  conserve le nombre de particules, ce qui se traduit explicitement par l'égalité entre le nombre de facteurs  $z$  et  $\partial/\partial z$  dans chaque terme. Il est alors utile d'introduire l'opérateur nombre de particules  $\mathbf{N}$ , qui, agissant sur  $\Psi(z)$ , a comme représentation

$$\mathbf{N} = \sum_i z_i \frac{\partial}{\partial z_i}, \quad (6.62)$$

comme on le vérifie immédiatement. L'opérateur  $\mathbf{N}$  commute donc avec  $\mathbf{H}$  :

$$[\mathbf{N}, \mathbf{H}] = 0.$$

*Noyaux associés.* Le noyau associé à l'identité, généralisation du noyau (6.20), est maintenant

$$\mathcal{I}(z, \bar{z}) = \exp \sum_i z_i \bar{z}_i. \quad (6.63)$$

L'hamiltonien (6.59) et l'opérateur nombre de particules sont alors représentés, respectivement, par

$$H^{(1)}(z, \bar{z}) = \mathcal{I}(z, \bar{z}) \sum_i \omega_i z_i \bar{z}_i, \quad N(z, \bar{z}) = \mathcal{I}(z, \bar{z}) \sum_i z_i \bar{z}_i. \quad (6.64)$$

Enfin, l'interaction à deux particules (6.60) a comme représentation

$$H^{(2)}(z, \bar{z}) = \mathcal{I}(z, \bar{z}) \sum_{i_1 i_2, j_1 j_2} z_{i_1} z_{i_2} H_{i_1 i_2, j_1 j_2}^{(2)} \bar{z}_{j_1} \bar{z}_{j_2}. \quad (6.65)$$

## 6.7 Fonction de partition

Du point de vue de la mécanique statistique, le formalisme précédent conduit à la formulation grand canonique. Il existe en effet deux stratégies pour étudier la limite thermodynamique d'un système de particules quantiques : on peut soit travailler à nombre de particules  $n$  fixé et ensuite prendre la limite  $n \rightarrow \infty$ , soit considérer la somme directe des espaces de Hilbert  $\oplus \mathfrak{H}_n$ ,  $n = 1, \dots, \infty$ , et imposer la contrainte du nombre de particules en moyenne à l'aide du potentiel chimique (physiquement, cela suppose le couplage à un réservoir de particules équivalent du bain thermique pour la température). C'est dans ce cadre que nous nous plaçons ici.

*Potentiel chimique.* L'existence d'une loi de conservation, comme la conservation du nombre de particules, correspond du point de vue statistique à une brisure d'ergodicité. Dans cette situation, il faut ajouter à l'hamiltonien un multiple de l'opérateur qui commute avec l'hamiltonien. Ici on remplace  $\mathbf{H}$  par l'opérateur

$$\mathbf{H} - \mu \mathbf{N},$$

ce qui revient simplement à modifier  $\mathbf{H}^{(1)}$ . Le paramètre  $\mu$  couplé à l'opérateur nombre de particules  $\mathbf{N}$  est appelé *potentiel chimique*. Il permet de faire varier le nombre moyen de particules.

*Fonction de partition.* Pour calculer la fonction de partition

$$\mathcal{Z}(\beta, \mu) = \text{tr} e^{-\beta(\mathbf{H} - \mu \mathbf{N})},$$

on utilise maintenant le formalisme holomorphe introduit dans la première partie du chapitre. La fonction de partition est alors donnée par une intégrale de chemin (cf. équation (6.52))

$$\mathcal{Z}(\beta, \mu) = \int [dz(t)d\bar{z}(t)] \exp [-\mathcal{S}(z, \bar{z})] \quad (6.66)$$

avec une action de la forme

$$\mathcal{S}(z, \bar{z}) = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \left[ -\sum_i \bar{z}_i(t) \dot{z}_i(t) + \tilde{H}(z(t), \bar{z}(t)) \right] \quad (6.67)$$

et des conditions aux limites périodiques

$$z_i(-\beta/2) = z_i(\beta/2), \quad \bar{z}_i(-\beta/2) = \bar{z}_i(\beta/2).$$

Dans le cas de l'hamiltonien (6.61), le noyau associé peut s'écrire

$$H(z, \bar{z}) = \mathcal{I}(z, \bar{z}) \tilde{H}(z, \bar{z}),$$

où  $\mathcal{I}$  est défini en (6.63), et  $H(z, \bar{z})$  se déduit des expressions (6.64, 6.65). On trouve alors

$$\tilde{H}(z, \bar{z}) = \sum_i z_i (\omega_i - \mu) \bar{z}_i + \sum_{i_1 i_2, j_1 j_2} z_{i_1} z_{i_2} H_{i_1 i_2, j_1 j_2}^{(2)} \bar{z}_{j_1} \bar{z}_{j_2}. \quad (6.68)$$

La conservation du nombre de particules se traduit par une symétrie  $U(1) \sim SO(2)$  de l'action, puisque seuls des monômes avec un nombre égal de facteurs  $z$  et  $\bar{z}$  apparaissent :

$$z_i \mapsto e^{i\theta} z_i, \quad \bar{z}_i \mapsto e^{i\theta} \bar{z}_i.$$

Bien entendu, le même formalisme permet aussi de traiter des situations où l'hamiltonien ne conserve pas le nombre de particules et où cette symétrie n'est donc plus présente (le potentiel chimique est alors sans objet).

*Équation d'état.* L'équation d'état est la relation entre nombre moyen de particules, température et potentiel chimique. Elle se déduit de la fonction de partition par la relation

$$\langle \mathbf{N} \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \mu}.$$

Utilisant l'intégrale de chemin, on obtient

$$\langle \mathbf{N} \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_i \int_{-\beta/2}^{\beta/2} \langle z_i(t) \bar{z}_i(t) \rangle = \sum_i \langle z_i(0) \bar{z}_i(0) \rangle, \quad (6.69)$$

à cause de l'invariance par translation dans le temps.

*Ordre des opérateurs.* Dans tout calcul explicite de l'intégrale de chemin, des ambiguïtés, dont nous savons qu'elles sont reliées au problème de l'ordre des opérateurs, apparaissent de nouveau. Les produits qui figurent dans les expressions (6.59, 6.60) sont naturellement dans l'ordre normal. Si nous choisissons la convention symétrique  $\epsilon(0) = 0$ , nous devons donc modifier  $\mathbf{H}^{(1)}$  et lui ajouter un terme constant pour que l'énergie du fondamental s'annule.

## 6.8 Condensation de Bose-Einstein

Nous allons d'abord discuter l'exemple d'un système de particules indépendantes. Dans ce cas, bien sûr, nous n'avons pas besoin d'un formalisme aussi élaboré. Mais cela va nous servir de transition avec la section 6.9, et nous permettre d'évoquer la condensation de Bose-Einstein.

Dans ce cas de bosons indépendants, la fonction de partition se factorise en un produit de fonctions de partition d'oscillateurs harmoniques correspondant à chaque niveau d'énergie, un résultat que l'on retrouve évidemment à partir de l'intégrale de chemin (6.66).

En l'absence d'interactions, utilisant la fonction de partition ou directement l'équation (6.69) avec la fonction à deux points gaussienne (6.40) (avec  $\epsilon(0) = -1$ ), on obtient l'équation d'état

$$\langle \mathbf{N} \rangle = \sum_i \langle n_i \rangle, \quad \langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\omega_i - \mu)} - 1}, \quad (6.70)$$

où  $\langle n_i \rangle$  est le nombre moyen d'occupation correspondant à l'état  $i$ .

Cette expression peut aussi s'écrire en termes de l'hamiltonien à une particule

$$\langle \mathbf{N} \rangle = \text{tr} \frac{1}{e^{\beta(\mathbf{H}^{(1)} - \mu)} - 1}.$$

Notons que le système de bosons n'est stable que pour  $\mu < \inf \omega_i$ .

*De l'espace vectoriel à l'espace de Hilbert.* Jusqu'ici nous avons supposé que les états à une particule appartenaient à un espace vectoriel de dimension finie. Nous pouvons maintenant généraliser le formalisme à la situation où les états à une particule appartiennent eux-mêmes à un espace de Hilbert. C'est ce que nous montrons de façon plus systématique en section 6.9. Ici, comme introduction, nous étudions l'équation d'état pour des particules indépendantes. Son expression formelle n'a pas changé mais  $\mathbf{H}^{(1)}$  est maintenant un opérateur hamiltonien.

### 6.8.1 Potentiel harmonique

Étudions d'abord l'exemple de particules dans un puits harmonique isotrope dans l'espace à  $d$  dimensions. L'hamiltonien à une particule  $\mathbf{H}^{(1)}$  prend la forme

$$H(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{\mathbf{q}}^2.$$

Une application simple du formalisme semi-classique de la section 2.10 permet d'évaluer le nombre moyen de particules à haute température (grande par rapport à la séparation  $\hbar\omega$  des niveaux d'énergie et donc pour  $\beta\hbar\omega \ll 1$ ). On déduit alors de l'équation (2.84) :

$$\langle \mathbf{N} \rangle \sim \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int \frac{d^d p d^d q}{e^{\beta(H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - \mu)} - 1}. \quad (6.71)$$

Le nombre moyen de particules est une fonction croissante de  $\mu$ . Dans cette approximation semi-classique,  $\mu$  doit être négatif ou nul. Nous notons alors que pour  $d > 1$ , l'intégrale a une limite finie pour  $\mu = 0$ , que l'on peut calculer explicitement :

$$\langle \mathbf{N} \rangle = \frac{1}{(\hbar\omega\beta)^d} \zeta(d),$$

où  $\zeta$  est la fonction de Riemann. Ce résultat semble conduire à un paradoxe si l'on baisse la température à nombre moyen de particules fixé. On trouve

une température limite

$$T_c = \frac{1}{\beta} = \hbar\omega \left( \frac{\langle \mathbf{N} \rangle}{\zeta(d)} \right)^{1/d}.$$

En réalité, ce phénomène signale d'abord une déficience de l'approximation semi-classique puisque, pour un hamiltonien avec spectre discret,  $\langle \mathbf{N} \rangle$  diverge quand  $\mu$  tend vers l'énergie du fondamental.

Examinons de façon plus précise ce qui se passe pour les niveaux d'énergie proches du fondamental quand, à  $\beta$  ou  $T = T_c$  fixé,  $\langle \mathbf{N} \rangle$  augmente d'une quantité  $\delta N$  macroscopique, c'est-à-dire  $\delta N = O(\langle \mathbf{N} \rangle) = O((\hbar\omega\beta)^{-d})$ .

Le potentiel chimique tend alors vers l'énergie  $E_0 = d\hbar\omega/2$  du fondamental. Pour tous les états autres que le fondamental l'énergie  $E$  satisfait  $E - \mu \geq E - E_0 \geq \hbar\omega$ , et donc leurs nombres d'occupation individuels  $n$  sont au plus d'ordre

$$n \leq \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = O(1/\beta\hbar\omega) \ll \delta N = O((\hbar\omega\beta)^{-d}).$$

Ils ne peuvent par conséquent absorber qu'une fraction négligeable de l'augmentation. Au contraire, pour le fondamental, l'équation

$$\delta N \sim \frac{1}{e^{\beta(\hbar\omega - \mu)} - 1} \sim \frac{1}{\beta(d\hbar\omega/2 - \mu)}$$

a comme solution

$$\beta(d\hbar\omega/2 - \mu) = \frac{1}{\delta N} = O(\hbar\omega\beta)^d \ll \hbar\omega\beta.$$

Nous constatons donc, en dimension d'espace supérieure à un, un phénomène remarquable typique des bosons : à valeur moyenne du nombre de particules fixé, en dessous de  $T_c$ , une fraction macroscopique du gaz occupe un seul état quantique, le fondamental du hamiltonien à une particule. C'est l'essence du phénomène physique appelé *condensation de Bose-Einstein* et  $T_c$  est la température de condensation.

### 6.8.2 Particules libres dans une boîte

On considère maintenant l'hamiltonien de la particule libre dans la limite d'une boîte cubique de grande taille  $L$  et donc de volume  $L^d$  en dimension  $d$ . Dans cette situation, les impulsions sont quantifiées par les conditions aux limites (ici supposées périodiques, mais cela ne joue aucun rôle dans l'argument)

$$\mathbf{p} = 2\pi\hbar \mathbf{n}/L, \quad \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^d,$$

ainsi donc que les niveaux d'énergie  $E = \mathbf{p}^2/2m$ . Dans la limite thermodynamique  $L \rightarrow \infty$ , on se retrouve toujours dans une situation de haute

température, puisque les différences entre deux niveaux d'énergie sont d'ordre  $\hbar^2/2mL^2$ .

L'équation d'état, limite de l'équation (6.70) où les sommes sont remplacées par des intégrales, prend en  $d$  dimensions d'espace une forme analogue à l'équation (6.71). L'intégrale sur  $\mathbf{q}$  donne  $L^d$  et donc

$$\rho(\beta, \mu) = \frac{\langle \mathbf{N} \rangle}{L^d} \underset{L \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int \frac{d^d p}{e^{\beta(p^2/2m - \mu)} - 1},$$

où  $\rho$  est la densité. On note que  $\mu$  est forcément négatif, sinon le système de bosons est instable, et  $\rho$ , fonction croissante de  $\mu$ , est donc bornée par (cette fois pour  $d > 2$ )

$$\rho_c = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int \frac{d^d p}{e^{\beta p^2/2m} - 1} = \zeta(d/2)/\lambda^d,$$

où  $\zeta(z)$  est la fonction de Riemann et  $\lambda$  la longueur d'onde thermique :

$$\lambda^2 = \frac{2\pi\hbar}{mT}.$$

Alternativement à  $\rho$  fixé, cette équation d'état n'a donc pas de solution pour toute température  $T < T_c(\rho)$ . Un retour à une boîte de taille finie où les impulsions sont quantifiées et les niveaux d'énergie discrets (comme dans l'équation (6.70)) permet de vérifier que les particules restantes s'accumulent dans l'état fondamental, ici d'impulsion nulle. C'est un autre exemple de la condensation de Bose-Einstein.

*Remarque.* Par deux fois nous avons utilisé implicitement l'identité

$$\int_0^\infty \frac{ds s^{\alpha-1}}{e^s - 1} = \Gamma(\alpha)\zeta(\alpha)$$

qui peut, par exemple, être démontrée en développant

$$\frac{1}{e^s - 1} = \sum_{n=1}^\infty e^{-ns},$$

en intégrant terme à terme, et en resommant.

## 6.9 Intégrale de chemin généralisée : gaz de Bose quantique

Nous allons montrer dans cette section comment une généralisation naturelle du formalisme d'intégrale de chemin développé en sections 6.6 et 6.7 permet de construire une représentation par intégrale de champs ou fonctionnelle (on intègre alors sur des champs classiques) de la fonction de partition pour des systèmes de bosons non relativistes.

Nous considérons de nouveau les propriétés thermodynamiques de systèmes de particules obéissant à la statistique de Bose-Einstein dans le formalisme grand canonique.

### 6.9.1 Hamiltonien dans l'espace de Fock

Nous allons construire une représentation sous forme d'intégrale fonctionnelle de la fonction de partition quantique d'un système de bosons régi par un hamiltonien

$$\mathbf{H} = \mathbf{T} + \mathbf{V} \quad (6.72)$$

où  $\mathbf{T}$  est le terme cinétique qui, dans le sous-espace des fonctions d'onde à  $n$  particules, est représenté par

$$T_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \frac{d^2}{(dx_i)^2} \quad (6.73)$$

et  $\mathbf{V}$  une interaction de paires représentée par

$$V_n = \sum_{i < j \leq n} V(x_i - x_j) \quad \text{avec} \quad V(x) = V(-x). \quad (6.74)$$

Pour des raisons de simplicité, nous n'introduisons pas de potentiel à une particule et nous nous limitons à une dimension d'espace.

Nous utilisons alors directement le formalisme développé dans les sections 6.6 et 6.7. Pour montrer comment les méthodes fonctionnelles peuvent être utilisées dans ce contexte, nous procédons par étapes.

Nous notons  $\psi_n(x_1, \dots, x_n)$  la fonction d'onde à  $n$  bosons, une fonction invariante par permutation de ses arguments. Compte-tenu de cette symétrie par permutation, il est possible de construire une fonctionnelle génératrice  $\Psi(\varphi)$  pour ces fonctions d'onde  $\psi_n(x_1, \dots, x_n)$  (cf. section 1.7). Nous introduisons donc une fonction complexe  $\varphi(x)$  (qui généralise le vecteur complexe  $z_i$  de la section 6.6) et la fonctionnelle

$$\Psi(\varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \int \prod_i dx_i \varphi(x_i) \right) \psi_n(x_1, \dots, x_n). \quad (6.75)$$

L'espace vectoriel des fonctionnelles génératrices est appelé espace de Fock.

Il faut ensuite représenter les termes cinétique et potentiel comme opérateur agissant sur  $\Psi$ .

Pour identifier la représentation du terme cinétique  $\mathbf{T}$ , nous calculons

$$\begin{aligned} \int dx \varphi(x) \frac{d^2}{(dx)^2} \frac{\delta}{\delta \varphi(x)} \Psi(\varphi) &= \int dx \varphi(x) \frac{d^2}{(dx)^2} \sum_n \frac{1}{(n-1)!} \\ &\times \int \left( \prod_{i < n} dx_i \varphi(x_i) \right) \psi_n(x_1, \dots, x_{n-1}, x). \end{aligned}$$

Dans le membre de droite l'argument  $x$  peut être renommé  $x_n$ , et le coefficient de  $\prod_{i \leq n} \varphi(x_i)$  peut alors être symétrisé. Ceci introduit un facteur  $1/n$  et fait apparaître la somme de toutes les dérivées secondes, reconstituant, à un facteur près, le terme cinétique (6.73). Donc

$$\mathbf{T}\Psi(\varphi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \varphi(x) \frac{d^2}{(dx)^2} \frac{\delta}{\delta\varphi(x)} \Psi(\varphi). \quad (6.76)$$

Pour le terme de potentiel à deux corps  $\mathbf{V}$ , qui dans le sous-espace à  $n$  particules est donné par (6.74), il faut dériver deux fois par rapport à  $\varphi$  en deux points différents. On trouve alors

$$\mathbf{V}\Psi(\varphi) = \frac{1}{2} \int dx dy \varphi(x)\varphi(y)V(x-y) \frac{\delta^2}{\delta\varphi(x)\delta\varphi(y)} \Psi(\varphi). \quad (6.77)$$

Nous avons maintenant une représentation de l'hamiltonien total  $\mathbf{H} = \mathbf{T} + \mathbf{V}$  agissant sur les fonctionnelles génératrices. Enfin, la représentation de l'opérateur nombre de particules est simplement

$$\mathbf{N} = \int dx \varphi(x) \frac{\delta}{\delta\varphi(x)} \quad \text{avec} \quad [\mathbf{N}, \mathbf{H}] = 0. \quad (6.78)$$

Pour les raisons déjà expliquées en section 6.7, nous considérons par la suite l'hamiltonien  $\mathbf{H} - \mu\mathbf{N}$ , où le paramètre  $\mu$  est le potentiel chimique qui permet d'ajuster la valeur moyenne de  $\mathbf{N}$ .

### 6.9.2 Intégrale fonctionnelle

La représentation sous forme d'intégrale fonctionnelle des éléments de matrice de l'opérateur statistique se déduit alors assez directement des résultats déjà obtenus en mécanique quantique dans les sections 6.6 et 6.7. Les variables complexes  $z_i$  de la représentation holomorphe (section 6.2) sont remplacées par  $\varphi(x)$  où les coordonnées continues  $x$  jouent le rôle des indices  $i$ . Appelons  $\bar{\varphi}(x)$  la quantité conjuguée à  $\varphi(x)$ . Dans la représentation mixte  $\bar{\varphi}, \varphi$ , l'identité (cf. équation (6.20)) prend alors la forme

$$\mathcal{I}(\varphi, \bar{\varphi}) = \exp \int dx \bar{\varphi}(x)\varphi(x)$$

et l'hamiltonien s'écrit

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \mathbf{H} | \bar{\varphi} \rangle = & \left( \exp \int dx \bar{\varphi}(x)\varphi(x) \right) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \varphi(x) \frac{d^2}{(dx)^2} \bar{\varphi}(x) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \int dx dy \varphi(x)\varphi(y)V(x-y)\bar{\varphi}(x)\bar{\varphi}(y) \right]. \end{aligned} \quad (6.79)$$

L'opérateur nombre de particules est lui proportionnel à  $\int dx \bar{\varphi}(x)\varphi(x)$ .

Adaptant les expressions de la section 6.7, en particulier l'équation (6.66), on obtient une représentation de la fonction de partition comme *intégrale fonctionnelle* :

$$\text{tr } \mathbf{U}(\tau/2, -\tau/2) = \int [d\varphi(x, t) d\bar{\varphi}(x, t)] \exp[-\mathcal{S}(\bar{\varphi}, \varphi)] \quad (6.80)$$

avec les conditions aux limites périodiques

$$\varphi(x, \tau/2) = \varphi(x, -\tau/2), \quad \bar{\varphi}(x, \tau/2) = \bar{\varphi}(x, -\tau/2),$$

et l'action euclidienne

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(\bar{\varphi}, \varphi) = & \int dt dx \bar{\varphi}(x, t) \left( \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{(\partial x)^2} - \frac{\mu}{2\hbar} \right) \varphi(x, t) \\ & + \frac{1}{2\hbar} \int dt dx dy \bar{\varphi}(x, t) \varphi(x, t) V(x-y) \bar{\varphi}(y, t) \varphi(y, t). \end{aligned} \quad (6.81)$$

L'ajout d'un potentiel  $V_1(x)$  à une particule se traduit simplement par la substitution  $\mu \mapsto \mu - V_1(x)$ . Par ailleurs, nous avons donné ici la représentation de  $e^{-\tau(\mathbf{H} - \mu \mathbf{N})/\hbar}$ . Pour passer à l'opérateur statistique, il faut encore poser  $\tau = \hbar\beta$ .

En présence de faibles interactions répulsives, ce formalisme permet, par exemple, d'étudier le passage de la condensation de Bose-Einstein à la transition de l'hélium superfluide.

Notons finalement qu'à ce stade, nous avons construit une théorie des champs non-relativiste et que le passage à la théorie relativiste n'est plus, essentiellement, qu'une question de cinématique.

## Exercices

### Exercice 6.1.

Utiliser le résultat (6.7) pour démontrer simplement l'identité sur le calcul des déterminants par blocs : on écrit la matrice  $\mathbf{A}$  sous la forme

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{pmatrix},$$

où les quatre matrices,  $\mathbf{A}_{11}$ ,  $\mathbf{A}_{12}$ ,  $\mathbf{A}_{21}$  et  $\mathbf{A}_{22}$  sont des matrices  $p \times p$ ,  $p \times n-p$ ,  $n-p \times p$  et  $n-p \times n-p$ , respectivement. Alors

$$\det \mathbf{A} = \det \mathbf{A}_{11} \det (\mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12}).$$

*Solution.* On écrit le déterminant de  $\mathbf{A}$  comme une intégrale gaussienne complexe. Dans l'intégrale gaussienne, on intègre d'abord sur les  $p$  premières variables puis les  $n-p$  restantes. On vérifie que cela conduit à l'identité recherchée.

*Exercice 6.2.*

Calculer la valeur moyenne

$$\langle \bar{z}_1 z_1 \bar{z}_2 z_2 \rangle,$$

où  $\bar{z}_1, z_1, \bar{z}_2, z_2$  sont des variables complexes, avec la mesure

$$\frac{d\bar{z}_1 dz_1}{2i\pi} \frac{d\bar{z}_2 dz_2}{2i\pi} \exp[-2\bar{z}_1 z_1 - \bar{z}_1 z_2 - \bar{z}_2 z_1 - \bar{z}_2 z_2].$$

*Solution.* La matrice associée à la forme quadratique est

$$M = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \det M = 1, \quad M^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix},$$

et donc

$$\langle \bar{z}_1 z_1 \bar{z}_2 z_2 \rangle = 3.$$

*Exercice 6.3.*

Calculer les valeurs moyennes

$$\langle \bar{z}_1 z_1 \rangle, \quad \langle \bar{z}_2 z_1 \rangle, \quad \langle \bar{z}_1 z_2 \rangle, \quad \langle \bar{z}_2 z_2 \rangle, \quad \langle (\bar{z}_1)^2 z_1 z_2 \rangle, \quad \langle \bar{z}_1 z_1 \bar{z}_2 z_2 \rangle,$$

où  $\bar{z}_1, z_1, \bar{z}_2, z_2$  sont des variables complexes, avec la mesure

$$\frac{d\bar{z}_1 dz_1}{2i\pi} \frac{d\bar{z}_2 dz_2}{2i\pi} \exp[-2\bar{z}_1 z_1 - 3\bar{z}_1 z_2 - 3\bar{z}_2 z_1 - 5\bar{z}_2 z_2].$$

*Solution.*

$$\langle \bar{z}_1 z_1 \rangle = 5, \quad \langle \bar{z}_2 z_1 \rangle = -3, \quad \langle \bar{z}_1 z_2 \rangle = -3, \quad \langle \bar{z}_2 z_2 \rangle = 2, \quad \langle (\bar{z}_1)^2 z_1 z_2 \rangle = -30, \\ \langle \bar{z}_1 z_1 \bar{z}_2 z_2 \rangle = 19,$$

*Exercice 6.4.*

Calculer le carré scalaire de la fonction holomorphe

$$f = 1 + 2z_1 + 5z_1^3 + 3z_1^2 z_2^2$$

où  $\bar{z}_1, z_1, \bar{z}_2, z_2$  sont des variables complexes, avec la mesure

$$\frac{1}{2} \frac{d\bar{z}_1 dz_1}{2i\pi} \frac{d\bar{z}_2 dz_2}{2i\pi} \exp[-\bar{z}_1 z_1 - \bar{z}_2 z_2 / 2].$$

*Solution.* 299.

*Exercice 6.5.*

On représente, dans la formalisme holomorphe de la mécanique quantique, les opérateurs position et impulsion par

$$\hat{q} \mapsto (2\omega)^{-1/2} \left( z + \frac{d}{dz} \right), \quad \hat{p} \mapsto i(\omega/2)^{1/2} \left( z - \frac{d}{dz} \right). \quad (6.82)$$

On considère alors les états correspondant à la fonction entière  $\psi(z) = e^{\alpha z}$ , où  $\alpha$  est un nombre complexe arbitraire.

Calculer les valeurs moyennes des opérateurs de position et d'impulsion  $\hat{q}, \hat{p}$  ainsi que les écarts quadratiques moyens  $\Delta q = (\langle \hat{q}^2 \rangle - \langle \hat{q} \rangle^2)^{1/2}$ ,  $\Delta p = (\langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2)^{1/2}$  (on posera  $\hbar = 1$ ). Montrer que ces états  $\psi$  sont des états de dispersion minimale :  $\Delta q \Delta p = \frac{1}{2}$  (c'est-à-dire la valeur minimale autorisée par le principe d'incertitude de Heisenberg).

*Solution.* Il faut d'abord calculer la norme de  $\psi(z)$ , et on trouve  $e^{\alpha \bar{\alpha}}$ . Un calcul simple donne alors

$$\langle \hat{q} \rangle = (2/\omega)^{1/2} \operatorname{Re} \alpha, \quad \langle \hat{p} \rangle = (2\omega)^{1/2} \operatorname{Im} \alpha, \quad (\Delta q)^2 = \frac{1}{2\omega}, \quad (\Delta p)^2 = \frac{\omega}{2},$$

ce qui montre que les états  $\psi$  sont des états de dispersion minimale.

### Exercice 6.6.

Calculer le carré scalaire de la fonction  $f(z) = e^{-\alpha z^2/2}$ , avec  $\alpha$  réel, utilisant la définition (6.10). Commenter. Généraliser à  $\alpha$  complexe.

*Solution.* On peut revenir aux variables « réelles » (6.1) pour intégrer. On trouve

$$(f, f) = \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha^2}}.$$

En accord avec la borne générale, la fonction n'est normalisable que pour  $|\alpha| < 1$ .

Le cas  $\alpha$  complexe se ramène au cas réel par un changement de variables  $z \mapsto e^{i\theta} z$ ,  $\bar{z} \mapsto e^{-i\theta} \bar{z}$  avec  $\theta = -\operatorname{Arg}(\alpha)/2$ . Alors  $\alpha^2$  est remplacé par  $|\alpha|^2$ .

### Exercice 6.7.

*Opérateurs de translation et changement d'impulsion.* Dans cet exercice, on représente toujours les opérateurs  $\hat{p}, \hat{q}$  par (6.82), mais on pose  $\omega = 1$ .

1. Trouver les vecteurs propres de l'opérateur position  $\hat{q}$  dans l'espace des fonctions entières. Calculer le produit scalaire des deux vecteurs propres (on aura intérêt à retourner aux variables d'intégration réelles).

*Solution.* Les vecteurs propres  $f_q(z)$  correspondant à la valeur propre réelle  $q$  sont solutions de

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( z + \frac{d}{dz} \right) f_q(z) = q f_q(z).$$

Le vecteur propre peut s'écrire

$$f_q(z) = e^{-(z - q\sqrt{2})^2/2}.$$

Alors

$$(f_{q'}, f_q) = \sqrt{\pi} e^{-q^2} \delta(q - q').$$

2. On considère l'opérateur  $T(\alpha)$  défini par son action sur des vecteurs holomorphes :

$$[T(\alpha)f](z) \equiv f(z, \alpha) = e^{-\alpha z / \sqrt{2} - \alpha^2 / 4} f(z + \alpha / \sqrt{2}),$$

avec  $\alpha$  réel. Vérifier la loi de groupe abélien

$$T(\alpha)T(\beta) = T(\alpha + \beta),$$

en agissant sur un vecteur  $f$ .

Vérifier explicitement que l'opérateur  $T(\alpha)$  préserve le produit scalaire (et donc qu'il est unitaire).

Montrer qu'agissant sur les vecteurs propres  $f_q$  de  $\hat{q}$ ,

$$[T(\alpha)f_q](z) = f_{q+\alpha}(z).$$

Montrer que  $f(z, \alpha)$  satisfait l'équation aux dérivées partielles

$$\frac{\partial f(z, \alpha)}{\partial \alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\partial}{\partial z} - z \right) f(z, \alpha). \quad (6.83)$$

En déduire que  $T(\alpha)$  est l'opérateur de translation :  $T(\alpha) = e^{i\alpha \hat{p}}$ .

3. Trouver le noyau associé à  $T(\alpha)$  et vérifier directement l'unitarité. *Solution.* On fait agir  $T(\alpha)$  sur le noyau identité  $\mathcal{I}$  :

$$T(\alpha, z, \bar{z})[T(\alpha)\mathcal{I}](z, \bar{z}) = e^{-\alpha z / \sqrt{2} - \alpha^2 / 4} \mathcal{I}(z + \alpha / \sqrt{2}, \bar{z}) = e^{z\bar{z} + \alpha(\bar{z} - z) / \sqrt{2} - \alpha^2 / 4}.$$

L'unitarité repose ensuite sur la vérification

$$\int \frac{dv d\bar{v}}{2i\pi} e^{-v\bar{v}} \overline{T(\alpha, z, \bar{v})} T(\alpha, v, \bar{z}) = e^{z\bar{z}}.$$

4. On considère maintenant l'opérateur  $V(\beta)$  défini par

$$[V(\beta)f](z) = e^{-i\beta z / \sqrt{2} - \beta^2 / 4} f(z - i\beta / \sqrt{2}),$$

avec  $\beta$  réel. Répondre aux mêmes questions que pour  $T(\alpha)$ , l'équation (6.83) étant remplacée par

$$\frac{\partial [V(\beta)f]}{\partial \beta} = -\frac{i}{\sqrt{2}} \left( \frac{\partial}{\partial z} + z \right) [V(\beta)f].$$

En déduire que  $V(\beta)$  est l'opérateur de changement d'impulsion  $V(\alpha) = e^{-i\alpha \hat{q}}$ .

5. En agissant sur des vecteurs holomorphes, démontrer la relation de commutation

$$V(\beta)T(\alpha) = e^{i\alpha\beta} T(\alpha)V(\beta).$$

## Exercice 6.8.

## Systèmes de bosons en représentation holomorphe.

On considère l'espace de Hilbert des fonctions analytiques  $f(z)$  muni du produit scalaire (6.10).

L'hamiltonien non perturbé, dans la représentation holomorphe,

$$H_0 = z \frac{d}{dz},$$

décrit un système de bosons ne pouvant occuper qu'un seul état d'énergie 1. On met les bosons en contact avec un milieu qui peut absorber et émettre des paires de bosons avec la même probabilité. Ceci consiste à ajouter à  $H_0$  un potentiel

$$V = \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} \left[ \left( \frac{d}{dz} \right)^2 + z^2 \right],$$

où  $\alpha$  est choisi réel et la paramétrisation choisie est commode pour la suite. Dans ces conditions l'hamiltonien  $H = H_0 + V$  est aussi hermitien.

## 1. Introduisant l'opérateur

$$B = \frac{d}{dz} + \alpha z,$$

exprimer  $H$  en termes de  $B^\dagger B$ .

*Solution.*

$$B^\dagger = \alpha \frac{d}{dz} + z, \quad H = \frac{B^\dagger B - \alpha^2}{1 + \alpha^2}.$$

2. Déterminer les vecteurs propres holomorphes  $f_\pm(z)$  avec  $f_\pm(0) = 1$ , tels que

$$B f_+ = 0, \quad B^\dagger f_- = 0,$$

et calculer leur norme. À quelles conditions ont-ils des normes finies ?

*Solution.*  $f_+(z) = e^{-\alpha z^2/2}$  et donc, suivant l'exercice 7.6,

$$(f_+, f_+) = \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha^2}}.$$

La norme est finie si  $|\alpha| < 1$ .

Par ailleurs

$$[B^\dagger f_-](z) = \alpha f'_-(z) + z f_-(z).$$

Donc  $f_-(z) = e^{-z^2/2\alpha}$  et

$$(f_-, f_-) = \frac{|\alpha|}{\sqrt{\alpha^2 - 1}}.$$

On trouve donc la condition  $\alpha^2 > 1$ . Les vecteurs ne peuvent pas être normalisables en même temps et pour  $\alpha^2 = 1$ , aucun n'est normalisable.

3. Calculer le commutateur  $[B, B^\dagger]$  et relier  $B$  et  $B^\dagger$  aux opérateurs de création et annihilation d'un oscillateur harmonique (on distinguera les deux cas). En déduire le spectre de  $H$ . Montrer que pour  $|\alpha| \neq 1$  c'est un spectre de particules indépendantes, que l'on peut appeler des quasi-bosons.

*Solution.*  $[B, B^\dagger] = 1 - \alpha^2$ .

Pour  $|\alpha| < 1$  on peut poser  $B = \sqrt{1 - \alpha^2}A$ , où  $A$  est l'opérateur d'annihilation avec la normalisation standard  $[A, A^\dagger] = 1$  et donc

$$H = \frac{(1 - \alpha^2)A^\dagger A - \alpha^2}{1 + \alpha^2} \Rightarrow E_N = \frac{(1 - \alpha^2)N - \alpha^2}{1 + \alpha^2}, \quad N \geq 0.$$

Pour  $|\alpha| > 1$  on peut poser  $B^\dagger = A\sqrt{\alpha^2 - 1}$  et le spectre de  $H$  est alors donné par

$$E_N = \frac{(\alpha^2 - 1)N - 1}{1 + \alpha^2}, \quad N \geq 0.$$

Ces résultats sont cohérents avec les conditions de normalisabilité de  $f_\pm$ . On vérifie que, comme l'hamiltonien, le spectre est invariant par  $\alpha \mapsto 1/\alpha$ . Le changement  $z \mapsto iz$  montre aussi que  $H(\alpha)$  a le même spectre que  $H(-\alpha)$  ce qui est bien le cas.

Pour  $|\alpha| \neq 1$ , on trouve donc un spectre de particules indépendantes, des quasi-bosons en ce sens que ce sont des états de bosons formés d'une superposition d'états à 1,3,..., bosons initiaux.

4. Écrire le noyau  $H(z, \bar{z})$  correspondant à l'hamiltonien  $H$ . En déduire alors la représentation par intégrale de chemin du noyau  $U(z, \bar{z}; \beta, 0)$  associée à l'opérateur statistique  $U(\beta) = e^{-\beta H}$ .

*Solution.*

$$H(z, \bar{z}) = e^{\bar{z}z} \tilde{H}(z, \bar{z}), \quad \tilde{H}(z, \bar{z}) = z\bar{z} + \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} (z^2 + \bar{z}^2).$$

On en déduit la représentation par intégrale de chemin

$$U(z, \bar{z}; \beta, 0) = \int \left[ \frac{d\bar{z}(t)dz(t)}{2i\pi} \right] \exp[-S(z, \bar{z})]$$

avec l'action euclidienne

$$S(z, \bar{z}) = -\bar{z}(0)z(0) + \int_0^\beta dt \left[ -\bar{z}(t)\dot{z}(t) + z(t)\dot{\bar{z}}(t) + \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} (z^2(t) + \bar{z}^2(t)) \right], \quad (1)$$

et les conditions aux limites  $z(\beta) = z, \bar{z}(0) = \bar{z}$ .

5. À partir d'ici on pourra se restreindre à  $0 < \alpha < 1$  et poser

$$\beta(1 - \alpha^2)/(1 + \alpha^2) = \lambda, \quad \alpha = e^{-\mu}.$$

Déduire du calcul de l'intégrale de chemin la dépendance de  $U(z, \bar{z}; \beta, 0)$  en  $z, \bar{z}$ .

On pourra utiliser des combinaisons linéaires des équations du mouvement classique pour mettre l'action sous la forme

$$\mathcal{S}(z_c, \bar{z}_c) = -\frac{1}{2} [z_c(\beta)\bar{z}_c(\beta) + z_c(0)\bar{z}_c(0)],$$

où  $z_c(t), \bar{z}_c(t)$  sont les solutions. Pour ensuite résoudre les équations, on pourra introduire les deux combinaisons linéaires  $z(t) \pm \bar{z}(t)$ .

*Solution.* L'intégrale est gaussienne et peut donc se calculer. On résout d'abord les équations du mouvement pour éliminer les conditions aux limites

$$-\dot{z}(t) + z(t) + \frac{2\alpha}{1 + \alpha^2} \bar{z}(t) = 0, \quad (2)$$

$$\dot{\bar{z}}(t) + \bar{z}(t) + \frac{2\alpha}{1 + \alpha^2} z(t) = 0. \quad (3)$$

Ajoutant  $\bar{z}(t)$  fois l'équation (2) à  $z(t)$  fois l'équation (3), on trouve

$$z(t)\bar{z}(t) + \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} (z^2(t) + \bar{z}^2(t)) = \frac{1}{2} (\bar{z}(t)\dot{z}(t) - \dot{\bar{z}}(t)z(t)).$$

Substituant cette identité dans l'action (1) on obtient une dérivée totale, ce qui conduit au premier résultat recherché

$$\mathcal{S}(z, \bar{z}) = -\frac{1}{2} [z(\beta)\bar{z}(\beta) + z(0)\bar{z}(0)].$$

Puisque  $z(\beta)$  et  $\bar{z}(0)$  sont fixés par les conditions aux limites, il suffit de calculer  $z(0)$  et  $\bar{z}(\beta)$ . Les solutions des équations peuvent s'écrire

$$\begin{aligned} z(t) &= A e^{\omega t} - \alpha B e^{-\omega t} \\ \bar{z}(t) &= -\alpha A e^{\omega t} + B e^{-\omega t}, \end{aligned}$$

avec  $\omega = (1 - \alpha^2)/(1 + \alpha^2)$  et

$$A = \frac{z e^{\mu} + \bar{z} e^{-\lambda}}{2 \sinh(\lambda + \mu)}, \quad B = \frac{z + \bar{z} e^{\lambda + \mu}}{2 \sinh(\lambda + \mu)}.$$

Donc

$$z(0) = \frac{z \sinh \mu - \bar{z} \sinh \lambda}{\sinh(\lambda + \mu)}, \quad \bar{z}(\beta) = \frac{\bar{z} \sinh \mu - z \sinh \lambda}{\sinh(\lambda + \mu)},$$

et enfin

$$\mathcal{S} = \frac{(z^2 + \bar{z}^2) \sinh \lambda - 2z\bar{z} \sinh \mu}{2 \sinh(\lambda + \mu)}.$$

**6.** Déduire la normalisation du calcul de  $\text{tr} U(\beta)$  en comparant le résultat, par exemple, de l'expression déduite directement du spectre déjà obtenu.

*Solution.* L'intégration gaussienne donne une normalisation  $\mathcal{N}$  :

$$U(z, \bar{z}; \beta, 0) = \mathcal{N} e^{-S}.$$

Calculant la trace, on trouve la fonction de partition

$$\mathcal{Z}(\beta) = \mathcal{N} \int \frac{dz d\bar{z}}{2i\pi} e^{-z\bar{z}} e^{-S} = \frac{\mathcal{N}}{2 \sinh(\lambda/2)} \sqrt{\frac{\sinh(\lambda + \mu)}{\sinh \mu}}.$$

Le calcul direct à partir du spectre donne

$$\mathcal{Z}(\beta) = \frac{e^{\beta/2}}{2 \sinh(\lambda/2)}.$$

On en déduit

$$\mathcal{N} = e^{\beta/2} \sqrt{\frac{\sinh \mu}{\sinh(\lambda + \mu)}}.$$

*Exercice 6.9.*

Utiliser l'intégrale de chemin dans la représentation holomorphe pour calculer la correction d'ordre  $\lambda$  aux niveaux d'énergie de l'hamiltonien

$$H = \frac{1}{2} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} \hat{q}^2 + \lambda \hat{q}^4.$$

Faire le calcul par deux méthodes différentes, la première consistant à remplacer directement  $\hat{q}$  par la variable classique  $(z + \bar{z})/\sqrt{2}$  dans le terme quartique, la deuxième en écrivant le terme quartique en termes des opérateurs de création et annihilation suivant l'ordre normal et les remplaçant ensuite par les variables classiques  $z, \bar{z}$ , selon la méthode indiquée en section 6.5.

*Solution.* Dans le premier cas, le terme quartique conduit à la contribution

$$\frac{1}{4} \lambda \int dt (\bar{z}(t) + z(t))^4,$$

à l'action. À l'ordre  $\lambda$  seul le terme proportionnel à  $(\bar{z}z)^2$  contribue. Utilisant le théorème de Wick, on obtient

$$\text{tr} e^{-\beta H} = \frac{1}{2 \sinh(\omega\beta/2)} \left[ 1 - 3\lambda \int dt \langle \bar{z}(t)z(t) \rangle^2 + O(\lambda^2) \right],$$

où  $\langle \bar{z}(t)z(t) \rangle$  est donné par le propagateur (6.40) à temps 0 :

$$\langle \bar{z}(t)z(t) \rangle \equiv \Delta(0) = \frac{1 + e^{-\beta}}{1 - e^{-\beta}} \theta(0).$$

Avec la convention  $\theta(0) = \frac{1}{2}$ , on trouve

$$\text{tr} e^{-\beta H} = \frac{1}{2 \sinh(\omega\beta/2)} \left[ 1 - \frac{3}{4} \lambda \beta \coth^2(\beta/2) + O(\lambda^2) \right],$$

ce qui coïncide avec le résultat (3.1).

Dans la seconde méthode, il est commode d'utiliser d'abord l'identité générale (conséquence de la formule de Baker-Hausdorff)

$$e^{x(a+a^\dagger)} = e^{xa^\dagger} e^{xa} e^{x^2/2}.$$

On en déduit

$$(a + a^\dagger)^4 = a^{\dagger 4} + a^4 + 4a^\dagger a^3 + 4a^{\dagger 3} a + 6a + 6a^\dagger + 3 + 12a^\dagger a + 6a^{\dagger 2} a^2.$$

On remplace alors les opérateurs quantiques  $a, a^\dagger$  par les variables classiques  $z, \bar{z}$ . À cet ordre, seuls les termes avec un nombre égal de facteurs  $z$  et  $\bar{z}$  contribuent. On obtient donc

$$\text{tr} e^{-\beta H} = \frac{1}{2 \sinh(\omega\beta/2)} \left[ 1 - \frac{3}{4} \lambda \beta \lambda (1 + 4\Delta(0) + 4\Delta^2(0)) + O(\lambda^2) \right].$$

Pour trouver le résultat correct, nous devons alors attribuer à  $\theta(0)$  la valeur  $\theta(0_-) = 0$ .

*Exercice 6.10.*

On considère la fonction de partition (6.52) avec

$$\mathcal{S}(z, \bar{z}) = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \left\{ \bar{z}(t) [-\dot{z}(t) + \omega z(t)] + \frac{1}{2} \lambda [\bar{z}(t) z(t)]^2 \right\},$$

où  $\omega, \lambda$  sont deux constantes positives. Calculer  $E_0$ , l'énergie du fondamental, au premier ordre en  $\lambda$  avec la convention  $\theta(0) = \frac{1}{2}$  ou de façon équivalente  $\text{signe}(0) = 0$ .

*Solution.* On se ramène immédiatement au calcul précédent et dans la limite  $\beta \rightarrow \infty$ , on trouve

$$E_0 = \frac{1}{2} + \frac{1}{8} \lambda + O(\lambda^2).$$

*Exercice 6.11.*

Calculer alors la fonction à deux points  $\langle \bar{z}(u) z(v) \rangle$  correspond au poids  $e^{-\mathcal{S}}$  au premier ordre en  $\lambda$ , pour  $\beta \rightarrow \infty$ . En déduire l'énergie  $\Omega = E_1 - E_0$ , où  $E_1$  correspond au premier état au-dessus du fondamental (l'état à une particule).

*Solution.* Développant en puissances de  $\lambda$  et utilisant le théorème de Wick, on trouve

$$\begin{aligned} \langle \bar{z}(u) z(v) \rangle &= \theta(u-v) e^{-\omega(u-v)} (1 - \lambda(u-v)) + O(\lambda^2) \\ &= \theta(u-v) e^{-(\omega+\lambda)(u-v)}. \end{aligned}$$

Donc  $\Omega = \omega + \lambda + O(\lambda^2)$ .



# Chapitre 7

## Intégrale de chemin : fermions

LES MÉTHODES QUE NOUS AVONS DÉVELOPPÉES jusqu'à présent nous ont permis de traiter de façon générale des modèles statistiques de bosons. Elles étaient directement basées sur l'introduction d'une fonction génératrice des fonctions d'onde symétriques de  $n$  bosons, comme nous l'avons montré en section 6.6.

Par contre, dans le cas de modèles contenant des fermions, nous nous heurtons à la difficulté suivante : les fonctions d'onde de fermions, ainsi que les fonctions de corrélation (ou fonctions de Green), sont antisymétriques par rapport à l'échange de deux arguments. La construction de fonctionnelles génératrices requiert donc l'introduction d'une algèbre de fonctions « classiques » anti-commutantes ou algèbre de Grassmann.

De façon assez remarquable, il est possible de généraliser aux algèbres de Grassmann les notions de dérivées et d'intégrales. Ceci permet de développer un formalisme tout à fait parallèle à celui des bosons et, en particulier, de construire une intégrale de chemin dans le cas de systèmes de fermions, analogue à l'intégrale de chemin holomorphe des bosons. En conséquence, la fonction de partition du gaz de Fermi peut se calculer à partir d'une intégrale sur des champs grassmanniens avec conditions aux limites antipériodiques.

### 7.1 Algèbres de Grassmann

Une algèbre de Grassmann  $\mathfrak{A}$  sur  $\mathbb{R}$  ou  $\mathbb{C}$  (réels ou complexes) est une algèbre associative engendrée par l'unité (notée 1 par la suite) et un ensemble de générateurs  $\{\theta_i\}$  dont les produits obéissent aux relations d'anticommutation

$$\theta_i \theta_j + \theta_j \theta_i = 0 \quad \forall i, j. \quad (7.1)$$

(Dans ce qui suit, sauf indication contraire, nous ne considérerons que des algèbres complexes et quand nous parlerons de générateurs nous omettrons l'unité qui joue un rôle singulier.)

En conséquence :

(i) Tous les éléments d'une algèbre de Grassmann, considérés comme des fonctions des générateurs  $\theta_i$ , sont des polynômes du premier degré dans chaque générateur, c'est-à-dire des fonctions affines.

(ii) Si le nombre  $n$  de générateurs est fini, les éléments de l'algèbre forment un espace vectoriel de dimension finie  $2^n$  sur  $\mathbb{R}$  ou  $\mathbb{C}$ . Tous les éléments peuvent être écrits comme des combinaisons linéaires des éléments  $1$  et  $\{\theta_{i_1}\theta_{i_2}\dots\theta_{i_p}\}$  avec  $i_1 < i_2 < \dots < i_p$ ,  $1 \leq p \leq n$ .

$\mathfrak{A}$  est aussi une algèbre graduée, dans le sens qu'à chaque monôme  $\theta_{i_1}\theta_{i_2}\dots\theta_{i_p}$  nous pouvons associer un entier  $p$  comptant le nombre de générateurs dans le produit.

Enfin, notons que les éléments de  $\mathfrak{A}$  sont inversibles si et seulement si leur développement dans une somme de produits de générateurs contient un terme de degré zéro qui est inversible. Par exemple l'élément  $1 + \theta$  est inversible, et a  $1 - \theta$  comme inverse ; par contre  $\theta$  n'est pas inversible. Le calcul de l'inverse peut d'ailleurs s'effectuer en développant en série autour de l'inverse du terme de degré zéro.

*Réflexion.* L'algèbre  $\mathfrak{A}$  possède un automorphisme,

$$\begin{aligned} P(A + B) &= P(A) + P(B), & P(AB) &= P(A)P(B), \\ P(\lambda A) &= \lambda P(A) \quad \forall A, B \in \mathfrak{A}, \quad \lambda \in \mathbb{C}, \end{aligned}$$

très simple défini par

$$P(\theta_i) = -\theta_i, \tag{7.2}$$

et qui donc a la nature d'une réflexion :  $P^2 = \mathbf{1}$ .

L'action sur un monôme de degré  $p$  est alors

$$P(\theta_{i_1}\dots\theta_{i_p}) = (-1)^p \theta_{i_1}\dots\theta_{i_p}. \tag{7.3}$$

Les éléments de l'algèbre  $\mathfrak{A}$  sont séparés en deux sous-ensembles  $\mathfrak{A}^\pm$  contenant les éléments pairs et impairs par réflexion :

$$P(\mathfrak{A}^\pm) = \pm \mathfrak{A}^\pm. \tag{7.4}$$

Notons enfin la propriété

$$A\theta_i = \theta_i P(A). \tag{7.5}$$

Si  $A_+$  appartient à  $\mathfrak{A}^+$ , il commute avec tous les éléments de  $\mathfrak{A}$  :

$$A_+ \in \mathfrak{A}^+ \Rightarrow A_+ B = B A_+ \quad \forall B.$$

En particulier  $\mathfrak{A}^+$  est la sous-algèbre commutative maximale de  $\mathfrak{A}$ .

Si par contre  $A_-, B_-$  appartiennent tous deux à  $\mathfrak{A}^-$ , ils anticommulent :

$$A_- \text{ et } B_- \in \mathfrak{A}^- \Rightarrow A_- B_- + B_- A_- = 0.$$

En particulier, tous les éléments de  $\mathfrak{A}^-$  sont *nilpotents* de carré nul.

*Conjugaison complexe.* En mécanique quantique, on rencontre principalement des algèbres de Grassmann  $\mathfrak{A}$  avec un nombre pair de générateurs qui sont naturellement regroupés en deux sous-ensembles  $\{\theta_i\}$  et  $\{\bar{\theta}_i\}$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Il est alors souvent utile d'introduire l'analogie de la conjugaison complexe pour les éléments de l'algèbre engendrée par  $\{\theta_i, \bar{\theta}_i\}$ . L'opération qui joue le rôle de la conjugaison complexe est définie dans ce cas comme la conjugaison hermitienne des opérateurs :

$$\theta^\dagger = \bar{\theta}, \quad \bar{\theta}^\dagger = \theta, \quad (A_1 A_2)^\dagger = A_2^\dagger A_1^\dagger \quad \forall A_1, A_2 \in \mathfrak{A}. \quad (7.6)$$

## 7.2 Dérivations dans les algèbres de Grassmann

Il est possible de définir une dérivation généralisée dans les algèbres de Grassmann. Une définition naïve, cependant, serait incohérente avec le caractère non commutatif de l'algèbre.

Considérons les éléments de  $\mathfrak{A}$  comme des fonctions d'un générateur  $\theta_i$ . Tous les éléments  $A$  de  $\mathfrak{A}$  peuvent être écrits (en général après quelques commutations)

$$A = A_1 + \theta_i A_2,$$

où  $A_1$  et  $A_2$  ne dépendent pas de  $\theta_i$ . On définit alors la dérivée par rapport à  $\theta_i$  par

$$\frac{\partial A}{\partial \theta_i} = A_2. \quad (7.7)$$

Comme la dérivée ordinaire, c'est une opération linéaire. Par contre, l'opérateur de dérivation  $\partial/\partial\theta_i$  est *nilpotent* de carré nul :  $(\partial/\partial\theta_i)^2 = 0$ .

*Remarque.* L'équation (7.7) définit une dérivation à gauche en ce sens que l'action de  $\partial/\partial\theta_i$  consiste à ramener  $\theta_i$  à la gauche de tout monôme et à ensuite le supprimer. De manière analogue, on pourrait définir une dérivation à droite en commutant  $\theta_i$  vers la droite.

*Dérivée d'un produit.* Il découle de la définition (7.7) que la dérivée d'un produit ne satisfait pas la règle habituelle  $D(AB) = AD(B) + D(A)B$ . Utilisant la remarque (7.5), on vérifie que cette règle est remplacée par

$$\frac{\partial(AB)}{\partial\theta_i} = P(A) \frac{\partial B}{\partial\theta_i} + \frac{\partial A}{\partial\theta_i} B, \quad (7.8)$$

règle qui est cohérente pour toute algèbre associative et homomorphisme  $P$ .

*Fonctions composées.* La dérivation grassmannienne implique aussi une règle de dérivation de fonction composée. Si  $\sigma(\theta)$  appartient à  $\mathfrak{A}^-$  et  $x(\theta)$  appartient à  $\mathfrak{A}^+$ , on trouve

$$\frac{\partial}{\partial \theta} f(\sigma, x) = \frac{\partial \sigma}{\partial \theta} \frac{\partial f}{\partial \sigma} + \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial f}{\partial x}. \quad (7.9)$$

La vérification est facile puisque que  $F$  est nécessairement une fonction affine de  $\sigma$ , et  $\sigma$  et  $x$  des fonctions affines de  $\theta$ .

Dans le second terme du membre de droite, l'ordre des facteurs est important.

*Algèbre de Clifford.* Les opérateurs de dérivation *nilpotents*  $\partial/\partial\theta_i$ , combinés avec les générateurs  $\theta_i$  considérés comme opérateurs agissant sur  $\mathfrak{A}$  par multiplication à gauche, engendrent une algèbre d'opérateurs dont les générateurs satisfont les relations d'anticommutation

$$\theta_i \theta_j + \theta_j \theta_i = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \theta_i} \frac{\partial}{\partial \theta_j} + \frac{\partial}{\partial \theta_j} \frac{\partial}{\partial \theta_i} = 0, \quad \theta_i \frac{\partial}{\partial \theta_j} + \frac{\partial}{\partial \theta_j} \theta_i = \delta_{ij}. \quad (7.10)$$

Les opérateurs

$$D_i^\pm = \frac{\partial}{\partial \theta_i} \pm \theta_i$$

satisfont alors les relations d'anticommutation

$$\{D_i^\pm, D_j^\pm\} = \pm 2\delta_{ij}, \quad \{D_i^+, D_j^-\} = 0.$$

Cette algèbre est la somme directe de deux algèbres qui chacune satisfont à la définition d'une algèbre de Clifford.

### 7.3 Intégration dans les algèbres de Grassmann

L'intégration sur des variables de Grassmann, que nous représentons par le symbole intégrale, est définie comme une opération identique à la dérivation :

$$\int d\theta_i A \equiv \frac{\partial}{\partial \theta_i} A, \quad \forall A \in \mathfrak{A}. \quad (7.11)$$

On peut donc se demander pourquoi il est utile d'introduire deux symboles, intégrale et de dérivée, pour une seule opération. On vérifie d'abord que cette opération satisfait les propriétés formelles auxquelles on s'attend pour une intégrale *définie*. L'intégrale d'une dérivée totale s'annule ; si nous intégrons sur une variable, le résultat ne dépend plus de cette variable ; enfin un facteur dont la dérivée par rapport à la variable d'intégration s'annule peut être factorisé devant le signe d'intégration.

Par ailleurs, l'utilisation, suivant le contexte, de l'un ou l'autre de ces deux symboles permet de construire un formalisme pour les fermions très parallèle à celui des bosons, comme nous allons le montrer.

*Changement de variables.* Considérons l'intégrale

$$\int d\theta f(\theta), \quad (7.12)$$

et faisons le changement de variables (nécessairement) affine

$$\theta = \theta' A + B. \quad (7.13)$$

Nous exigeons que la parité soit conservée :  $P(\theta) = -\theta$  et donc

$$P(\theta') = -\theta' \Rightarrow A \in \mathfrak{A}^+, \quad B \in \mathfrak{A}^-.$$

L'élément  $A$  doit être inversible, et donc son terme de degré zéro dans les variables de Grassmann doit être différent de zéro. Ces conditions impliquent que dans l'algèbre on peut substituer  $\theta'$  à  $\theta$  comme générateur.

Alors, utilisant la définition (7.11), nous trouvons

$$\int d\theta f(\theta) = A^{-1} \int d\theta' f(\theta' A + B).$$

Nous obtenons ainsi une propriété très importante des intégrales grassmanniennes : le jacobien est  $A^{-1}$ , alors que dans le cas de variables réelles ou complexes on trouve  $A$ . Cette différence reflète l'identité des opérations de dérivation et d'intégration pour les variables de Grassmann.

*Généralisation.* Plus généralement, montrons qu'un changement de variables

$$\theta_i = \theta_i(\theta'), \quad \theta_i, \theta'_i \in \mathfrak{A}^-,$$

où la matrice  $\partial\theta_i/\partial\theta'_j$  a une partie inversible de degré zéro, conduit à un jacobien qui est l'inverse du déterminant de  $\partial\theta_i/\partial\theta'_j$  :

$$d\theta_1 \dots d\theta_n = d\theta'_1 \dots d\theta'_n J(\theta') \quad (7.14)$$

avec

$$J^{-1} = \det \frac{\partial\theta_i}{\partial\theta'_j}. \quad (7.15)$$

Notons que le déterminant est bien défini parce que tous les éléments de la matrice  $\partial\theta_i/\partial\theta'_j$  appartiennent à  $\mathfrak{A}^+$ .

Ce résultat se démontre en utilisant à nouveau l'identité entre dérivation et intégration sous la forme

$$\int d\theta_1 \dots d\theta_n f(\theta) \equiv \prod_i \frac{\partial}{\partial\theta_i} f(\theta),$$

où le produit du membre de gauche est ordonné. Nous considérons alors  $f$  comme une fonction de variables  $\theta'_i$  et donc, utilisant la règle de dérivation en chaîne (7.9),

$$\prod_i \frac{\partial}{\partial\theta_i} f(\theta) = \prod_i \frac{\partial\theta'_{j_i}}{\partial\theta_i} \frac{\partial}{\partial\theta'_{j_i}} f(\theta).$$

Les éléments  $\partial\theta'_{j_i}/\partial\theta_i$  commutent et peuvent être factorisés. Les dérivations  $\partial/\partial\theta'_{j_i}$  anticommulent (voir les équations (7.10)) et donc les produits sont tous proportionnels au produit ordonné de 1 à  $n$ . Un signe apparaît qui est la signature de la permutation  $j_1, j_2, \dots, j_n$ . Nous reconnaissons le déterminant de la matrice  $\partial\theta'_{j_i}/\partial\theta_i$  :

$$\prod_i \frac{\partial}{\partial\theta_i} = \det \frac{\partial\theta'_{j_i}}{\partial\theta_i} \prod_k \frac{\partial}{\partial\theta'_k}.$$

L'identité entre différentiation et intégration conduit alors immédiatement aux équations (7.14, 7.15).

*Remarque.* L'exemple qui suit permet une vérification directe de l'équation (7.14) :

$$1 = \int d\theta_1 \dots d\theta_n \theta_n \dots \theta_1.$$

Faisons le changement de variables linéaires

$$\theta_i = \sum_j a_{ij} \theta'_j.$$

Le résultat repose alors sur l'identité

$$\theta_n \dots \theta_1 = \theta'_n \dots \theta'_1 \det \mathbf{a}.$$

## 7.4 Changement de variables mixte : Bérézinién et supertrace

On rencontre des intégrales qui impliquent à la fois des variables commutantes et anticommutantes (bosons et fermions). Il est donc parfois utile de faire des changements de variables mixtes.

Notant  $\theta, \theta'$  et  $x, x'$  les variables anticommutantes et commutantes respectivement, nous posons (respectant la parité)

$$x_a = x_a(x', \theta'), \quad \theta_i = \theta_i(x', \theta'). \quad (7.16)$$

Nous introduisons la matrice des dérivées partielles

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix}$$

avec

$$\mathbf{A}_{ab} = \frac{\partial x_a}{\partial x'_b}, \quad \mathbf{B}_{ai} = \frac{\partial x_a}{\partial \theta'_i}, \quad \mathbf{C}_{ia} = \frac{\partial \theta_i}{\partial x'_a}, \quad \mathbf{D}_{ij} = \frac{\partial \theta_i}{\partial \theta'_j},$$

et donc

$$\mathbf{A} \text{ et } \mathbf{D} \in \mathfrak{A}_+, \quad \mathbf{B} \text{ et } \mathbf{C} \in \mathfrak{A}_-.$$

Il est commode de changer de variables en deux étapes :

(i) On passe d'abord de  $(\theta, x)$  à  $(\theta, x')$ . Cette étape engendre le jacobien

$$J_1 = \det \left. \frac{\partial x_a}{\partial x'_b} \right|_{\theta} = \det (\mathbf{A} - \mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}). \quad (7.17)$$

(ii) On va alors de  $(\theta, x')$  to  $(\theta', x')$ . Cette seconde étape engendre, comme expliqué plus haut, le jacobien

$$J_2 = (\det \mathbf{D})^{-1}. \quad (7.18)$$

Le jacobien complet  $J$ , aussi appelé *bérézinien* de la matrice des dérivées, est donc

$$J \equiv \frac{D(x, \theta)}{D(x', \theta')} = J_1 J_2 = \text{Ber } \mathbf{M} \equiv \det (\mathbf{A} - \mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}) (\det \mathbf{D})^{-1}. \quad (7.19)$$

Pour que le jacobien ne soit pas singulier, les matrices  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{D}$  doivent être inversibles (et donc leurs contributions de degré zéro en  $\theta'$ ). Notons que par construction

$$\text{Ber } \mathbf{M}_1 \text{Ber } \mathbf{M}_2 = \text{Ber}[\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2].$$

*Trace de matrices mixtes.* Dans le cas de l'intégration sur des variables ordinaires commutantes, un changement de variables infinitésimalement proche de l'identité,

$$x_a = x'_a + \varepsilon f_a(x'),$$

à cause de l'identité  $\ln \det = \text{tr } \ln$ , conduit au jacobien

$$J = \det \frac{\partial x_a}{\partial x'_b} = 1 + \varepsilon \text{tr} \frac{\partial f_a}{\partial x'_b} + O(\varepsilon^2) = 1 + \varepsilon \sum_a \frac{\partial f_a}{\partial x'_a} + O(\varepsilon^2).$$

Considérons maintenant le cas mixte

$$x_a = x'_a + \varepsilon f_a(x', \theta'), \quad \theta_i = \theta'_i + \varepsilon \varphi_i(x', \theta'). \quad (7.20)$$

Posant alors

$$\mathbf{M} = 1 + \varepsilon \mathbf{M}_1 + O(\varepsilon^2), \quad \mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_1 \\ \mathbf{C}_1 & \mathbf{D}_1 \end{pmatrix},$$

nous trouvons, comme conséquence de l'identité (7.19),

$$J = 1 + \varepsilon (\text{tr } \mathbf{A}_1 - \text{tr } \mathbf{D}_1) + O(\varepsilon^2), \quad \text{tr } \mathbf{A}_1 - \text{tr } \mathbf{D}_1 = \sum_a \frac{\partial f_a}{\partial x_a} - \sum_i \frac{\partial \varphi_i}{\partial \theta_i}. \quad (7.21)$$

Pour maintenir la relation entre jacobien d'un changement de variables infinitésimal et trace, nous sommes donc amenés à définir la *supertrace* d'une matrice mixte, notée  $\text{Str}$ , comme la différence des traces :

$$\text{Str } \mathbf{M}_1 = \text{tr } \mathbf{A}_1 - \text{tr } \mathbf{D}_1. \quad (7.22)$$

On vérifie directement que cette supertrace possède la propriété cyclique

$$\text{Str}[\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2] = \text{Str}[\mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1].$$

En effet, par définition

$$\text{Str}[\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2] = \text{tr}(\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 + \mathbf{B}_1 \mathbf{C}_2) - \text{tr}(\mathbf{C}_1 \mathbf{B}_2 + \mathbf{D}_1 \mathbf{D}_2).$$

Alors

$$\text{tr}(\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2) = \text{tr}(\mathbf{A}_2 \mathbf{A}_1), \quad \text{tr}(\mathbf{D}_1 \mathbf{D}_2) = \text{tr}(\mathbf{D}_2 \mathbf{D}_1),$$

mais

$$\text{tr}(\mathbf{B}_1 \mathbf{C}_2) = -\text{tr}(\mathbf{C}_2 \mathbf{B}_1), \quad \text{tr}(\mathbf{C}_1 \mathbf{B}_2) = -\text{tr}(\mathbf{B}_2 \mathbf{C}_1),$$

où les signes sont la conséquence de la cyclicité de la trace ordinaire et du signe de l'anticommutation de  $\mathbf{B}$  et  $\mathbf{C}$ .

Cela permet de démontrer une généralisation de la relation habituelle entre trace et déterminant :  $\text{tr } \ln = \ln \det$ , qui devient maintenant

$$\text{Str } \ln = \ln \text{Ber}.$$

## 7.5 Intégrales gaussiennes

Nous définissons maintenant des intégrales gaussiennes avec intégrations sur deux familles de générateurs  $\{\theta_i, \bar{\theta}_i\}$ ,  $1 = 1, \dots, n$ , analogues des intégrales gaussiennes complexes de la section 6.1.

*Forme quadratique hermitienne.* Avec la définition (7.6) de la conjugaison complexe,  $\theta_i$  et  $\bar{\theta}_i$  sont conjugués et la mesure  $d\theta_i d\bar{\theta}_i$  est invariante par conjugaison complexe. Considérons par ailleurs la forme quadratique

$$\sum_{i,j=1}^n (\bar{\theta}_i M_{ij} \theta_j)^\dagger = \sum_{i,j=1}^n \bar{\theta}_j \bar{M}_{ij} \theta_i = \sum_{i,j=1}^n \bar{\theta}_i M_{ij}^\dagger \theta_j.$$

La forme quadratique est donc invariante par conjugaison complexe si la matrice  $\mathbf{M}$  est hermitienne.

### 7.5.1 Intégrales gaussiennes

Comme dans le cas de variables complexes, nous calculons d'abord des intégrales gaussiennes et, pour la même raison, nous essayerons ensuite de réduire

toute intégrale à une somme formelle d'un nombre fini ou infini d'intégrales gaussiennes.

Considérons d'abord l'intégrale

$$\mathcal{Z}(\mathbf{M}) = \int d\theta_1 d\bar{\theta}_1 d\theta_2 d\bar{\theta}_2 \dots d\theta_n d\bar{\theta}_n \exp \left( \sum_{i,j=1}^n \bar{\theta}_i M_{ij} \theta_j \right). \quad (7.23)$$

D'après les règles de l'intégration grassmannienne, le résultat est simplement le coefficient du produit  $\theta_n \theta_n \dots \theta_1 \theta_1$  dans le développement de l'intégrant. L'argument de l'exponentielle ne contient que des termes appartenant à  $\mathfrak{A}^+$ , qui commutent. L'intégrant peut donc être réécrit

$$\exp \left( \sum_{i,j=1}^n \bar{\theta}_i M_{ij} \theta_j \right) = \prod_{i=1}^n \exp \left( \bar{\theta}_i \sum_{j=1}^n M_{ij} \theta_j \right) = \prod_{i=1}^n \left( 1 + \bar{\theta}_i \sum_{j=1}^n M_{ij} \theta_j \right).$$

Développant le produit, nous voyons que dans chaque facteur seul le terme proportionnel à  $\bar{\theta}_i$  contribue à l'intégrale. Il reste donc à intégrer

$$\prod_{i=1}^n \bar{\theta}_i \left( \sum_{j_i=1}^n M_{ij_i} \theta_{j_i} \right).$$

Les termes qui donnent une contribution non nulle à l'intégrale sont ceux qui contiennent le produit  $\theta_n \dots \theta_2 \theta_1$  à une permutation des facteurs  $\theta_j$  près. Ils sont donc de la forme

$$\sum_{\substack{\text{permutations} \\ \{j_1 \dots j_n\}}} M_{nj_n} M_{n-1j_{n-1}} \dots M_{1j_1} \bar{\theta}_n \theta_{j_n} \dots \bar{\theta}_1 \theta_{j_1}.$$

Commutant les générateurs pour les ramener dans un ordre standard, par exemple  $\bar{\theta}_n \theta_n \dots \bar{\theta}_1 \theta_1$ , nous factorisons un signe, la signature de la permutation, et reconnaissons dans le coefficient le déterminant de la matrice  $\mathbf{M}$  :

$$\mathcal{Z}(\mathbf{M}) = \det \mathbf{M}. \quad (7.24)$$

Le résultat est l'inverse du résultat (6.4), obtenu en intégrant sur des variables complexes.

Le calcul ci-dessus est essentiellement une vérification puisque, pour  $\det \mathbf{M} \neq 0$ , nous pouvons aussi changer de variables,

$$\sum_j M_{ij} \theta_j = \theta'_i \quad (7.25)$$

et utiliser la forme (7.14) du jacobien. Nous retrouvons

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\mathbf{M}) &= \det \mathbf{M} \int d\theta'_1 d\bar{\theta}_1 \dots d\theta'_n d\bar{\theta}_n \exp \left( \sum_{i=1}^n \bar{\theta}_i \theta'_i \right) \\ &= \det \mathbf{M} \int \prod_{i=1}^n d\theta'_i d\bar{\theta}_i (1 + \bar{\theta}_i \theta'_i) = \det \mathbf{M}. \end{aligned}$$

Notons que quand l'intégrand est invariant par conjugaison complexe, ce qui entraîne que la matrice  $\mathbf{M}$  est hermitienne, le résultat de l'intégrale est réel puisque

$$\det \mathbf{M} = \det \mathbf{M}^\dagger = \overline{\det \mathbf{M}}.$$

## 7.5.2 Intégrales gaussiennes générales

Nous introduisons maintenant une autre copie de l'algèbre de Grassmann  $\mathfrak{A}$  dont les générateurs seront notés  $\eta_i$  et  $\bar{\eta}_i$ , et considérons l'algèbre de Grassmann engendrée par l'ensemble  $\{\theta, \bar{\theta}, \eta, \bar{\eta}\}$ . Suivant la stratégie de la section 6.1, nous calculons d'abord l'intégrale

$$\mathcal{Z}_G(\eta, \bar{\eta}) = \int \prod_i d\theta_i d\bar{\theta}_i \exp E_G(\theta, \bar{\theta}, \eta, \bar{\eta}) \quad (7.26)$$

avec

$$E_G(\theta, \bar{\theta}, \eta, \bar{\eta}) = \sum_{i,j=1}^n M_{ij} \bar{\theta}_i \theta_j + \sum_{i=1}^n (\bar{\eta}_i \theta_i + \bar{\theta}_i \eta_i),$$

où  $E_G$  est un élément de la somme directe des deux algèbres de Grassmann.

Pour éliminer les termes linéaires en  $\theta$  et  $\bar{\theta}$ , nous cherchons la solution  $\theta^s, \bar{\theta}^s$  des équations

$$\frac{\partial E_G}{\partial \theta_i} = 0, \quad \frac{\partial E_G}{\partial \bar{\theta}_i} = 0.$$

Nous trouvons

$$\theta_i^s = - \sum_j (M^{-1})_{ij} \eta_j, \quad \bar{\theta}_i^s = - \sum_j \bar{\eta}_j (M^{-1})_{ji}.$$

Comme dans le cas d'intégrales ordinaires, nous changeons alors de variables :  $\{\theta_i\} \mapsto \{\theta'_i\}$  :

$$\theta_i = \theta'_i - \sum_j (M^{-1})_{ij} \eta_j, \quad \bar{\theta}_i = \bar{\theta}'_i - \sum_j \bar{\eta}_j (M^{-1})_{ji}. \quad (7.27)$$

Après cette translation, l'intégrale sur  $\theta', \bar{\theta}'$  prend la forme (7.23) calculée plus haut. Le résultat est donc

$$\mathcal{Z}_G(\eta, \bar{\eta}) = \det \mathbf{M} \exp \left[ - \sum_{i,j=1}^n \bar{\eta}_i (M^{-1})_{ij} \eta_j \right]. \quad (7.28)$$

### 7.5.3 Valeurs moyennes gaussiennes, théorème de Wick et perturbations

Notons  $\langle \bullet \rangle_\eta$  les moyennes par rapport au poids gaussien de l'intégrant (7.26). Avec notre définition de  $\mathcal{Z}_G$ , nous trouvons

$$\langle \theta_i \rangle_\eta = \mathcal{Z}_G^{-1} \frac{\partial}{\partial \bar{\eta}_i} \mathcal{Z}_G, \quad (7.29)$$

$$\langle \bar{\theta}_i \rangle_\eta = -\mathcal{Z}_G^{-1} \frac{\partial}{\partial \eta_i} \mathcal{Z}_G. \quad (7.30)$$

Remarquons le signe dans l'équation (7.30). Une autre identité, utile plus loin, est obtenue en dérivant deux fois (noter l'ordre des dérivées) :

$$\langle \bar{\theta}_i \theta_j \rangle_\eta = \mathcal{Z}_G^{-1} \frac{\partial}{\partial \bar{\eta}_j} \frac{\partial}{\partial \eta_i} \mathcal{Z}_G - \left( \mathcal{Z}_G^{-1} \frac{\partial}{\partial \bar{\eta}_j} \mathcal{Z}_G \right) \left( \mathcal{Z}_G^{-1} \frac{\partial}{\partial \eta_i} \mathcal{Z}_G \right). \quad (7.31)$$

Dérivant de façon plus générale par rapport aux  $\theta$  et  $\bar{\theta}$ , on peut démontrer un théorème de Wick pour les variables de Grassmann.

*Théorème de Wick.* Nous définissons maintenant

$$\begin{aligned} \det \mathbf{M} \langle \bar{\theta}_{i_1} \theta_{j_1} \bar{\theta}_{i_2} \theta_{j_2} \dots \bar{\theta}_{i_p} \theta_{j_p} \rangle &= \int \left( \prod_i d\theta_i d\bar{\theta}_i \right) \bar{\theta}_{i_1} \theta_{j_1} \dots \bar{\theta}_{i_p} \theta_{j_p} \\ &\times \exp \left( \sum_{i,j=1}^n M_{ij} \bar{\theta}_i \theta_j \right) \end{aligned} \quad (7.32)$$

avec  $p \leq n$ . Nous n'avons besoin de calculer que les intégrales avec un nombre égal de facteurs  $\theta$  et  $\bar{\theta}$  car les autres intégrales s'annulent trivialement.

Dérivant de façon répétée l'intégrale (7.26) par rapport à  $\eta$  et  $\bar{\eta}$  et utilisant les remarques (7.29 à 7.31), nous obtenons l'identité

$$\det \mathbf{M} \langle \bar{\theta}_{i_1} \theta_{j_1} \bar{\theta}_{i_2} \theta_{j_2} \dots \bar{\theta}_{i_p} \theta_{j_p} \rangle = \left[ \frac{\partial}{\partial \bar{\eta}_{j_1}} \frac{\partial}{\partial \eta_{i_1}} \dots \frac{\partial}{\partial \bar{\eta}_{j_p}} \frac{\partial}{\partial \eta_{i_p}} \mathcal{Z}_G(\eta, \bar{\eta}) \right] \Bigg|_{\eta=\bar{\eta}=0}. \quad (7.33)$$

Remplaçant  $\mathcal{Z}_G$  par le résultat explicite (7.28), nous trouvons

$$\begin{aligned} \langle \bar{\theta}_{i_1} \theta_{j_1} \bar{\theta}_{i_2} \theta_{j_2} \dots \bar{\theta}_{i_p} \theta_{j_p} \rangle &= \\ &\left\{ \frac{\partial}{\partial \bar{\eta}_{j_1}} \frac{\partial}{\partial \eta_{i_1}} \dots \frac{\partial}{\partial \bar{\eta}_{j_p}} \frac{\partial}{\partial \eta_{i_p}} \exp \left[ - \sum_{i,j=1}^n \bar{\eta}_j (M^{-1})_{ji} \eta_i \right] \right\} \Bigg|_{\eta=\bar{\eta}=0}. \end{aligned} \quad (7.34)$$

Toutes les variables  $\eta$  et  $\bar{\eta}$  sur lesquelles n'agissent aucune dérivée peuvent immédiatement être supprimées. La matrice  $\mathbf{M}$  est alors réduite à une matrice

$p \times p$  d'éléments  $M_{j_i i_k}$ . L'identité entre dérivation et intégration permet enfin de ramener le calcul explicite à une intégration gaussienne. On en déduit

$$\begin{aligned} \langle \bar{\theta}_{i_1} \theta_{j_1} \dots \bar{\theta}_{i_p} \theta_{j_p} \rangle &= \det M_{j_i i_k}^{-1} \\ &= \sum_{\substack{\text{permutations} \\ P \text{ de } \{j_1 \dots j_p\}}} \varepsilon(P) (M^{-1})_{j_{P_1} i_1} (M^{-1})_{j_{P_2} i_2} \dots (M^{-1})_{j_{P_p} i_p}, \\ &= \sum_{\substack{\text{permutations} \\ P \text{ de } \{j_1 \dots j_p\}}} \varepsilon(P) \langle \bar{\theta}_{i_1} \theta_{j_{P_1}} \rangle \langle \bar{\theta}_{i_2} \theta_{j_{P_2}} \rangle \dots \langle \bar{\theta}_{i_p} \theta_{j_{P_p}} \rangle, \end{aligned} \quad (7.35)$$

où  $\varepsilon(P)$  est la signature de la permutation  $P$ . Ce résultat est similaire à l'expression (6.9a) obtenue dans le cas de l'intégrale sur des variables complexes, à la signature près.

*Développement perturbatif.* Les expressions (7.29, 7.30) forment la base de la théorie des perturbations. Pour calculer l'intégrale

$$\mathcal{Z}(\eta, \bar{\eta}) = \int \prod_i d\bar{\theta}_i d\theta_i e^{E(\theta, \bar{\theta}, \eta, \bar{\eta})} \quad (7.36)$$

avec

$$E(\theta, \bar{\theta}, \eta, \bar{\eta}) = \sum_{i,j=1}^n M_{ij} \bar{\theta}_i \theta_j + V(\bar{\theta}, \theta) + \sum_{i=1}^n (\bar{\eta}_i \theta_i + \bar{\theta}_i \eta_i), \quad (7.37)$$

nous pouvons développer en une série de puissances de  $V$  et calculer les valeurs moyennes gaussiennes au moyen du théorème de Wick. L'intégration conduit aussi à une expression formelle compacte

$$\mathcal{Z}(\eta, \bar{\eta}) = \exp \left[ V \left( -\frac{\partial}{\partial \eta}, \frac{\partial}{\partial \bar{\eta}} \right) \right] \mathcal{Z}_G(\eta, \bar{\eta}). \quad (7.38)$$

## 7.6 Intégrales gaussiennes réelles.

### Théorème de Wick

Les intégrales gaussiennes que nous avons calculées en section 7.5 ont des propriétés analogues aux intégrales complexes du formalisme holomorphe de la section 6.1. Nous pouvons aussi plus généralement calculer des intégrales gaussiennes de la forme

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = \int d\theta_{2n} \dots d\theta_2 d\theta_1 \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{2n} \theta_i A_{ij} \theta_j \right). \quad (7.39)$$

Comme le produit  $\theta_i \theta_j$  est antisymétrique en  $(ij)$ , la matrice  $A_{ij}$  peut être choisie antisymétrique :

$$A_{ij} + A_{ji} = 0. \quad (7.40)$$

Ces intégrales ont, elles, des propriétés quelque peu analogues aux intégrales ordinaires. En particulier, elles ne conduisent à des résultats réels que si l'algèbre de Grassmann est définie sur les réels.

Développant l'exponentielle en une série de puissances, nous observons que seul le terme d'ordre  $n$  qui contient tous les produits de degré  $2n$  en  $\theta$  donne une contribution non nulle :

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = \frac{1}{2^n n!} \int d\theta_{2n} \dots d\theta_1 (\theta_i A_{ij} \theta_j)^n. \quad (7.41)$$

Dans le développement du produit, seuls les termes contenant une permutation de  $\theta_1 \dots \theta_{2n}$  ne s'annulent pas. Ordonnant alors tous les termes pour factoriser le produit  $\theta_1 \theta_2 \dots \theta_{2n}$ , nous trouvons

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = \frac{1}{2^n n!} \sum_{\substack{\text{permutations } P \\ \text{de } \{i_1 \dots i_{2n}\}}} \varepsilon(P) A_{i_1 i_2} A_{i_3 i_4} \dots A_{i_{2n-1} i_{2n}}, \quad (7.42)$$

où  $\varepsilon(P) = \pm 1$  est la signature de la permutation. Cette expression peut être réduite en observant que les seuls termes distincts correspondent à tous les appariements des indices  $1, 2, \dots, 2n$ . Donc

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = \sum_{\substack{\text{appariements } P \\ \text{de } \{i_1 \dots i_{2n}\}}} \varepsilon(P) A_{i_1 i_2} A_{i_3 i_4} \dots A_{i_{2n-1} i_{2n}}, \quad (7.43)$$

où  $\varepsilon(P)$  est la signature de la permutation des indices.

La quantité dans le membre de droite est appelée le *pfaffien* de la matrice antisymétrique  $\mathbf{A}$ , et nous notons

$$\mathcal{Z}(\mathbf{A}) = \text{Pf}(\mathbf{A}). \quad (7.44)$$

*Pfaffien et déterminant.* Les techniques d'intégrales de Grassmann permettent de démontrer l'identité algébrique classique

$$\text{Pf}^2(\mathbf{A}) = \det \mathbf{A}, \quad (7.45)$$

de sorte que, de façon analogue aux intégrales gaussiennes réelles,

$$\int d\theta_{2n} \dots d\theta_2 d\theta_1 \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{2n} \theta_i A_{ij} \theta_j \right) = \pm \sqrt{\det \mathbf{A}}.$$

Calculons en effet

$$\mathcal{Z}^2(\mathbf{A}) = \int d\theta_{2n} \dots d\theta_1 d\theta'_{2n} \dots d\theta'_1 \exp \left[ \frac{1}{2} \sum_{ij} (\theta_i A_{ij} \theta_j + \theta'_i A_{ij} \theta'_j) \right]. \quad (7.46)$$

Nous changeons de variables, posant

$$\eta_k = \frac{1}{\sqrt{2}} (\theta_k + i\theta'_k), \quad \bar{\eta}_k = \frac{1}{\sqrt{2}} (\theta_k - i\theta'_k). \quad (7.47)$$

Le jacobien est  $(-1)^n$ . De plus

$$\theta_i \theta_j + \theta'_i \theta'_j = \bar{\eta}_i \eta_j - \eta_i \bar{\eta}_j, \quad (7.48)$$

$$d\eta_{2n} \dots d\eta_1 d\bar{\eta}_{2n} \dots d\bar{\eta}_1 = (-1)^n \prod_i d\eta_i d\bar{\eta}_i. \quad (7.49)$$

Utilisant l'antisymétrie de la matrice  $\mathbf{A}$ , nous trouvons

$$\text{Pf}^2(\mathbf{A}) = \int d\eta_1 d\bar{\eta}_1 \dots d\eta_{2n} d\bar{\eta}_{2n} \exp \left( \sum_{ij} \bar{\eta}_i A_{ij} \eta_j \right) = \det \mathbf{A}. \quad (7.50)$$

*Théorème de Wick.* On peut aussi démontrer une autre forme du théorème de Wick pour des moyennes gaussiennes avec la mesure  $\exp[\sum_{ij} \theta_i A_{ij} \theta_j / 2]$ . On trouve

$$\langle \theta_{i_1} \theta_{i_2} \dots \theta_{i_{2p}} \rangle = \sum_{\substack{\text{tous les appariements} \\ \text{of } (1, 2, \dots, 2p)}} \epsilon(P) \langle \theta_{i_{P_1}} \theta_{i_{P_2}} \rangle \dots \langle \theta_{i_{P_{2p-1}}} \theta_{i_{P_{2p}}} \rangle, \quad (7.51)$$

où  $\epsilon(P)$  est la signature de la permutation  $P$ . Notez que ce résultat ne diffère du théorème de Wick (1.16) que par des signes.

## 7.7 Espace de Hilbert de fermions et opérateurs

Cet outil grassmannien va nous permettre de traiter les fermions de façon tout à fait analogue aux bosons, en construisant un formalisme parallèle à la représentation holomorphe.

Nous avons vu en section 6.1 qu'il était possible de définir un produit scalaire entre fonctions analytiques (équation (6.10)). Ce produit scalaire permet alors de construire un espace de Hilbert de fonctions entières. Du point de vue de la mécanique quantique, les coefficients du développement en série de Taylor représentent les composantes de la fonction d'onde  $\Psi(z)$  sur les états à nombre de particules donné (voir section 6.6).

Suivant le même schéma, nous commençons par définir des fonctions grassmanniennes « analytiques », un produit scalaire de ces fonctions et l'espace de Hilbert correspondant. Nous exhibons ensuite différentes représentations de l'algèbre des opérateurs (7.10) agissant sur ces fonctions.

### 7.7.1 Fonctions grassmanniennes analytiques et produit scalaire

Nous considérons de nouveau une algèbre de Grassmann  $\mathfrak{A}$  avec des générateurs  $\{\theta_i, \bar{\theta}_i\}$ . Nous définissons les fonctions grassmanniennes analytiques comme les éléments qui ne dépendent que des seules variables  $\theta_i$  :

$$\frac{\partial f}{\partial \bar{\theta}_i} = 0 \quad \forall i.$$

Elles forment une sous-algèbre  $\mathfrak{A}_{\text{an}}$  de l'algèbre  $\mathfrak{A}$ .

Prenons d'abord l'exemple d'une seule paire de générateurs  $\theta, \bar{\theta}$ . Une fonction analytique  $f(\theta)$  est automatiquement une fonction affine,

$$f(\theta) = f_0 + f_1\theta,$$

où  $(f_0, f_1)$  est un vecteur complexe d'un espace vectoriel de dimension deux. Ceci est en correspondance directe avec la statistique de Fermi-Dirac : le nombre d'occupation de fermion ne peut prendre que les valeurs 0 ou 1.

La fonction complexe conjuguée de la fonction  $f$  est (cf. équation (7.6))

$$\bar{f}(\theta) \equiv \bar{f}_0 + \bar{f}_1\bar{\theta}.$$

Nous pouvons alors, comme pour les fonctions de variables complexes analytiques, définir un produit scalaire entre fonctions de  $\theta$  :

$$(f, g) = \int d\theta d\bar{\theta} e^{\theta\bar{\theta}} \bar{f}(\bar{\theta}) g(\theta). \quad (7.52)$$

Paramétrant la fonction  $g$  sous la forme

$$g(\theta) = g_0 + g_1\theta,$$

on vérifie que l'intégrale donne le produit scalaire habituel des vecteurs complexes  $(f_0, f_1)$  et  $(g_0, g_1)$  correspondants :

$$(f, g) = \bar{f}_0g_0 + \bar{f}_1g_1.$$

La généralisation à un nombre  $n$  quelconque de générateurs  $\theta_i$  est simple. La conjugaison complexe est alors remplacée par la conjugaison hermitienne des opérateurs comme définie en (7.6) :

$$(f, g) = \int \left( \prod_i d\theta_i d\bar{\theta}_i \right) \exp \left( \sum_i \bar{\theta}_i \theta_i \right) f^\dagger(\theta) g(\theta). \quad (7.53)$$

La positivité de  $(f, f)$  se démontre par exemple par récurrence. Privilégiant la variable  $\theta_n$ , nous pouvons écrire

$$f = A_n + \theta_n B_n$$

et intégrer d'abord sur  $\theta_n$  :

$$\int d\theta_n d\bar{\theta}_n e^{\bar{\theta}_n \theta_n} (A_n^\dagger + B_n^\dagger \bar{\theta}_n) (A_n + \theta_n B_n) = A_n^\dagger A_n + B_n^\dagger B_n.$$

Nous pouvons maintenant intégrer chacun des deux termes sur  $\theta_{n-1}$  et répéter l'argument. Après intégration sur toutes les variables, on obtient une somme de termes positifs. Le produit scalaire définit donc une norme  $\|f\|$ . Avec cette définition, les  $2^n$  monômes distincts  $\psi_\nu(\theta)$ ,  $\nu = 1, \dots, 2^n$  :

$$\{\psi_\nu(\theta)\} = \{1, \theta_{i_1} \theta_{i_2} \dots \theta_{i_p} \quad \forall p \text{ et } \forall i_1 < i_2 < \dots < i_p\}, \quad (7.54)$$

forment une base orthonormée de  $\mathfrak{A}_{\text{an}}$ , considérée comme espace vectoriel complexe. Par exemple

$$\begin{aligned} \|\theta_1 \theta_2\|^2 &= \int d\theta_1 d\bar{\theta}_1 d\theta_2 d\bar{\theta}_2 e^{\bar{\theta}_1 \theta_1 + \bar{\theta}_2 \theta_2} \bar{\theta}_2 \bar{\theta}_1 \theta_1 \theta_2 \\ &= \int d\theta_1 d\bar{\theta}_1 e^{\bar{\theta}_1 \theta_1} \bar{\theta}_1 \theta_1 \int d\theta_2 d\bar{\theta}_2 e^{\bar{\theta}_2 \theta_2} \bar{\theta}_2 \theta_2 = 1. \end{aligned}$$

*La fonction  $\delta$  de Dirac.* Dans les algèbres de Grassmann, le rôle de la fonction  $\delta$  de Dirac est joué par la fonction

$$\delta(\theta) \equiv \theta. \quad (7.55)$$

En effet

$$\int d\theta \theta f(\theta) = f(0),$$

où  $f(0)$  signifie la partie constante de la fonction affine  $f(\theta)$ . Cette fonction  $\delta(\theta)$  a une représentation intégrale fort utile, analogue de la transformation de Fourier habituelle,

$$\delta(\theta) = \int d\bar{\theta} e^{\bar{\theta}\theta}, \quad (7.56)$$

où  $\bar{\theta}$  est une variable (donc un générateur) de Grassmann supplémentaire. On vérifie directement

$$f(0) = \int d\theta d\bar{\theta} e^{\bar{\theta}\theta} f(\theta).$$

### 7.7.2 Noyaux d'opérateurs

*Noyau de l'identité.* Le produit scalaire (7.53) permet de définir une base orthonormée et donc une représentation de l'identité sous forme de noyau :

$$\mathcal{I}(\theta, \bar{\theta}) = \prod_i (1 + \theta_i \bar{\theta}_i) = \exp\left(-\sum_i \bar{\theta}_i \theta_i\right). \quad (7.57)$$

La vérification explicite découle de la représentation (7.56) de la fonction  $\delta$ . En effet,

$$\int \prod_i d\theta'_i d\bar{\theta}'_i \mathcal{I}(\theta, \bar{\theta}') \exp \left( \sum_i \bar{\theta}'_i \theta'_i \right) f(\theta') = \int \prod_i d\theta'_i d\bar{\theta}'_i \exp \left( \sum_i \bar{\theta}'_i (\theta'_i - \theta_i) \right) f(\theta') = f(\theta). \quad (7.58)$$

*Algèbre d'opérateurs.* Nous avons déjà introduit (cf. (7.10)) l'algèbre des opérateurs de multiplication et différentiation agissant sur l'algèbre de Grassmann  $\mathfrak{A}_{\text{an}}$ . Si, utilisant les relations d'anticommutation, nous amenons dans un élément de l'algèbre tous les opérateurs différentiels à droite (ordre dit « normal »), nous pouvons utiliser l'équation (7.58) pour représenter tout élément de cette algèbre d'opérateurs sous forme d'un noyau

$$\theta_{i_1} \theta_{i_2} \dots \theta_{i_p} \frac{\partial}{\partial \theta_{j_1}} \frac{\partial}{\partial \theta_{j_2}} \dots \frac{\partial}{\partial \theta_{j_q}} \mathcal{I}(\theta, \bar{\theta}) = \theta_{i_1} \theta_{i_2} \dots \theta_{i_p} \bar{\theta}_{j_1} \bar{\theta}_{j_2} \dots \bar{\theta}_{j_q} \mathcal{I}(\theta, \bar{\theta}), \quad (7.59)$$

qui est un élément de l'algèbre de Grassmann engendré par les  $\theta$  et  $\bar{\theta}$ .

Un opérateur  $\mathcal{O}(\theta, \partial/\partial\theta)$  représenté par son noyau,

$$\mathcal{O}(\theta, \bar{\theta}) = \mathcal{O}(\theta, \bar{\theta}) \mathcal{I}(\theta, \bar{\theta}),$$

agit alors sur une fonction par

$$(\mathcal{O}f)(\theta) = \int \prod_i d\theta'_i d\bar{\theta}'_i \mathcal{O}(\theta, \bar{\theta}') \exp \left( \sum_i \bar{\theta}'_i \theta'_i \right) f(\theta'). \quad (7.60)$$

Comme dans le cas holomorphe, nous utiliserons ici aussi une notation assez suggestive d'éléments de matrice :

$$\langle \theta | \mathcal{O} | \bar{\theta} \rangle \equiv \mathcal{O}(\theta, \bar{\theta}), \quad (7.61)$$

sans définir précisément les sens des vecteurs.

Enfin, le noyau correspondant au produit  $\mathcal{O}_2 \mathcal{O}_1$  est donné par

$$\langle \theta | \mathcal{O}_2 \mathcal{O}_1 | \bar{\theta} \rangle = \int \prod_i d\theta'_i d\bar{\theta}'_i \langle \theta | \mathcal{O}_2 | \bar{\theta}' \rangle \exp \left( \sum_i \bar{\theta}'_i \theta'_i \right) \langle \theta' | \mathcal{O}_1 | \bar{\theta} \rangle. \quad (7.62)$$

Tout opérateur peut s'écrire en termes des éléments de la base (7.54) :

$$\mathcal{O}(\theta, \bar{\theta}) = \sum_{\mu\nu} \mathcal{O}_{\mu\nu} \psi_\mu(\theta) \psi_\nu^\dagger(\theta), \quad (7.63)$$

où les coefficients  $\mathcal{O}_{\mu\nu}$  sont les éléments de matrice de  $\mathcal{O}$  dans cette base.

*Trace.* En terme du noyau, la trace d'un opérateur s'écrit

$$\text{tr } \mathcal{O} = \int \prod_i d\bar{\theta}_i d\theta_i \exp\left(-\sum_i \bar{\theta}_i \theta_i\right) \langle \theta | \mathcal{O} | \bar{\theta} \rangle. \quad (7.64)$$

Une comparaison des expressions (7.62) et (7.64) peut surprendre à cause de l'échange entre les  $\bar{\theta}_i$  et les  $\theta_i$  : la compatibilité de la définition avec la cyclicité de la trace n'est pas évidente, mais on peut la vérifier en remplaçant dans l'équation (7.62)  $\mathcal{O}_1$  et  $\mathcal{O}_2$  par deux monômes génériques et en prenant la trace de l'équation. D'ailleurs, utilisant l'expression (7.63), on trouve

$$\text{tr } \mathbf{O} = \sum_{\nu} \mathcal{O}_{\nu\nu}.$$

*Conjugaison hermitienne des noyaux.* La conjugaison hermitienne des noyaux d'opérateurs est définie de façon identique aux fonctions. Avec cette définition,  $\mathcal{I}(\theta\bar{\theta})$  correspond bien à un opérateur hermitien.

## 7.8 Hamiltonien à un fermion

Nous généralisons maintenant aux fermions les considérations de la section 6.6. L'espace de Hilbert pour un nombre arbitraire de particules obéissant à la statistique de Fermi-Dirac (fermions) qui ne peuvent occuper qu'un seul état d'énergie  $\omega$  se réduit à un espace vectoriel complexe de dimension 2, comme conséquence du principe de Pauli : un état ne peut être que vide (état à zéro particule) ou occupé une fois. L'intégrale de chemin n'est évidemment pas nécessaire pour calculer l'opérateur statistique qui est une matrice  $2 \times 2$ . Mais la solution sous forme d'intégrale de chemin est utile parce qu'elle se généralise facilement à un nombre arbitraire d'états possibles (dans cette première partie nous faisons  $\hbar = 1$ ).

Un vecteur correspondant à une combinaison linéaire d'un état à zéro particule et d'un état à une particule peut être représenté par une fonction affine

$$\psi(\theta) = \psi_0 + \psi_1 \theta$$

où, en choisissant pour  $\theta$  le générateur d'une algèbre de Grassmann  $\mathfrak{A}$ , on s'assure qu'un état ne peut être occupé qu'une fois puisque  $\theta^2 = 0$ .

Les valeurs propres d'un hamiltonien  $H_0$  qui conserve le nombre de particules ne peuvent être que 0 pour l'état à zéro particule et une valeur, que nous notons  $\omega$ , pour l'état à une particule. Il peut donc être représenté par

$$H_0 = \omega \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (7.65)$$

et c'est l'hamiltonien le plus général à un fermion.

Les éléments de matrice de l'hamiltonien  $H_0$  sont obtenus en faisant agir l'opérateur différentiel (7.65) sur l'identité :

$$\langle \theta | H_0 | \bar{\theta} \rangle = \omega \theta \frac{\partial}{\partial \theta} e^{-\bar{\theta} \theta} = \omega \theta \bar{\theta} e^{-\bar{\theta} \theta} = -\omega \bar{\theta} \theta.$$

Notons que la préservation du caractère fermionique implique que dans la réflexion (7.2)

$$P(H_0) = H_0,$$

et donc comme les éléments de matrice de  $H_0$  comme ceux de  $U_0(t) = e^{-H_0 t}$  appartiennent à la sous-algèbre commutative de  $\mathfrak{A}$ .

Les éléments de matrice de l'opérateur  $U_0(t)$  satisfont l'équation

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \theta | U_0(t) | \bar{\theta} \rangle = -\omega \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \langle \theta | U_0(t) | \bar{\theta} \rangle \quad (7.66)$$

avec

$$\langle \theta | U_0(0) | \bar{\theta} \rangle = e^{-\bar{\theta} \theta}.$$

On vérifie que la solution est

$$\langle \theta | U_0(t) | \bar{\theta} \rangle = e^{-\bar{\theta} \theta} e^{-\omega t} = 1 + \bar{\theta} \theta e^{-\omega t}. \quad (7.67)$$

Remplaçant  $\mathcal{O}_1$  et  $\mathcal{O}_2$  par  $U(t_1)$  et  $U(t_2)$ , respectivement, dans (7.62), on vérifie aussi directement la loi de groupe.

Notons enfin qu'avec notre définition  $H_0$  et  $U_0(t)$  sont hermitiens car les noyaux correspondants sont invariants par la conjugaison complexe (7.6).

De l'expression explicite (7.67) et de la définition (7.64) de la trace, nous déduisons la fonction de partition

$$\mathcal{Z}_0(\beta) = \text{tr } U_0(\beta) = \int d\bar{\theta} d\theta e^{-\bar{\theta} \theta} e^{-\bar{\theta} \theta} e^{-\omega \beta} = 1 + e^{-\omega \beta}. \quad (7.68)$$

*Formalisme des opérateurs d'annihilation et de création.* Il existe un formalisme alternatif à celui que nous avons introduit ici, basé sur les opérateurs d'annihilation et de création  $a$  et  $a^\dagger$  de fermions. Ceux-ci satisfont les relations de commutation

$$a^2 = a^{\dagger 2} = 0, \quad a a^\dagger + a^\dagger a = 1, \quad (7.69)$$

qui évidemment reflètent le même principe de Pauli.

Dans le formalisme grassmannien, ces opérateurs sont représentés par les opérateurs  $\theta$  et  $\partial/\partial\theta$  :

$$a^\dagger \mapsto \theta, \quad a \mapsto \frac{\partial}{\partial \theta},$$

qui en effet satisfont aux mêmes relations de commutation.

Dans ces notations, l'hamiltonien à un fermion s'écrit

$$H_0 = \omega a^\dagger a, \quad (7.70)$$

Le problème à un fermion est un exercice plutôt trivial de matrices  $2 \times 2$ . Utilisant les relations (7.69), on vérifie que

$$H_0^2 = \omega H_0, \quad (7.71)$$

et donc ses deux valeurs propres sont  $0, \omega$ . Le fondamental  $|0\rangle$  satisfait  $a|0\rangle = 0$  et  $\langle 0|0\rangle = 1$ . Appliquant  $a^\dagger$  au fondamental, on obtient le deuxième vecteur propre

$$|1\rangle = a^\dagger |0\rangle.$$

Les relations d'anticommuation impliquent que ces deux vecteurs forment une base orthonormée.

L'opérateur  $U_0(t)$  se déduit de la relation (7.71), par exemple par la formule de Lagrange :

$$U_0(t) = e^{-H_0 t} = \frac{\omega - H_0}{\omega} + e^{-\omega t} \frac{H_0}{\omega} = 1 + (e^{-\omega t} - 1) a^\dagger a.$$

## 7.9 Intégrales de chemin

Nous construisons maintenant une intégrale de chemin donnant les éléments de matrice de l'opérateur statistique quantique  $U_0(t) = e^{-tH_0}$ . La solution par intégrale de chemin de ce problème élémentaire peut apparaître comme excessivement compliquée. Toutefois, la généralisation de l'intégrale de chemin obtenue à un nombre quelconque de fermions est simple, ce qui justifie le choix d'une telle stratégie.

La construction d'une intégrale de chemin associée à un hamiltonien de fermions suit fidèlement la méthode de la section 6.4, la différence principale étant que les variables complexes sont remplacées par des variables de Grassmann.

### 7.9.1 Intégrales de chemin gaussiennes

Au premier ordre pour  $t \rightarrow 0$ , l'expression (7.67) peut se réécrire

$$\langle \theta | U_0(t) | \bar{\theta} \rangle = \exp [-\bar{\theta}\theta (1 - \omega t) + O(t^2)]. \quad (7.72)$$

La propriété de groupe dans la forme (7.62) permet alors d'écrire l'opérateur d'évolution à temps fini

$$\langle \theta'' | U_0(t'', t') | \bar{\theta}' \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^{n-1} d\theta_k d\bar{\theta}_k \exp [-S_\varepsilon(\theta, \bar{\theta})] \quad (7.73)$$

avec

$$S_\varepsilon(\theta, \bar{\theta}) = \bar{\theta}_0 \theta_0 + \sum_{k=1}^n [\bar{\theta}_{k-1} (\theta_k - \theta_{k-1}) - \omega \varepsilon \bar{\theta}_{k-1} \theta_k], \quad (7.74)$$

$\varepsilon = (t'' - t')/n$ , et les définitions

$$\bar{\theta}_0 = \bar{\theta}', \quad \theta_n = \theta'' \quad (7.75)$$

La limite formelle  $n \rightarrow \infty$  est une intégrale de chemin, avec des chemins grassmanniens. Les éléments de matrice de  $U_0(t)$  sont donnés par

$$\langle \theta'' | U_0(t'', t') | \bar{\theta}' \rangle = \int_{\bar{\theta}(t')=\bar{\theta}'}^{\theta(t'')=\theta''} [d\theta(t)d\bar{\theta}(t)] \exp [-S_0(\theta, \bar{\theta})] \quad (7.76)$$

avec

$$S_0(\theta, \bar{\theta}) = \int_{t'}^{t''} dt \bar{\theta}(t) [\dot{\theta}(t) - \omega\theta(t)] + \bar{\theta}(t')\theta(t'). \quad (7.77)$$

*Intégrale gaussienne générale.* Il est commode pour la suite de considérer immédiatement une intégrale plus générale en ajoutant à l'action  $S_0$  des termes linéaires correspondant à un couplage à des sources grassmanniennes externes  $\bar{\eta}(t)$  et  $\eta(t)$ . Nous considérons donc l'intégrale

$$\langle \theta'' | U_0(t'', t'; \eta, \bar{\eta}) | \bar{\theta}' \rangle = \int_{\bar{\theta}(t')=\bar{\theta}'}^{\theta(t'')=\theta''} [d\theta(t)d\bar{\theta}(t)] \exp [-S_G(\theta, \bar{\theta}; \eta, \bar{\eta})] \quad (7.78)$$

avec

$$S_G(\theta, \bar{\theta}; \eta, \bar{\eta}) = S_0(\theta, \bar{\theta}) - \int_{t'}^{t''} dt [\bar{\eta}(t)\theta(t) + \bar{\theta}(t)\eta(t)], \quad (7.79)$$

où maintenant les ensembles indépendants  $\{\theta(t)\}$ ,  $\{\bar{\theta}(t)\}$ ,  $\{\eta(t)\}$  et  $\{\bar{\eta}(t)\}$  forment un ensemble de générateurs de l'algèbre de Grassmann.

*Calcul de l'intégrale gaussienne.* L'intégrale (7.78) est gaussienne et peut être calculée exactement. L'équation du « col » obtenue en variant  $\theta(t)$  donne, compte-tenu des conditions aux limites,

$$\dot{\bar{\theta}}(t) + \omega\bar{\theta}(t) + \bar{\eta}(t) = 0 \quad \Rightarrow \quad \bar{\theta}(t) = \bar{\theta}_s(t) \equiv e^{-\omega(t-t')} \bar{\theta}' - \int_{t'}^t e^{-\omega(t-u)} \bar{\eta}(u) du. \quad (7.80)$$

De même la variation de  $\bar{\theta}(t)$  donne

$$\dot{\theta}(t) - \omega\theta(t) - \eta(t) = 0 \quad \Rightarrow \quad \theta(t) = \theta_s(t) \equiv e^{-\omega(t''-t)} \theta'' - \int_t^{t''} e^{-\omega(u-t)} \eta(u) du. \quad (7.81)$$

Translatant  $\theta(t)$  et  $\bar{\theta}(t)$  par les solutions des équations « classiques » :  $\theta \mapsto \theta_s + \theta$ ,  $\bar{\theta} \mapsto \bar{\theta}_s + \bar{\theta}$ , nous obtenons alors

$$\langle \theta'' | U(t'', t'; \eta, \bar{\eta}) | \bar{\theta}' \rangle = \mathcal{N}(t', t'') \exp [-S_c(\theta'', \bar{\theta}'; \bar{\eta}, \eta)] \quad (7.82)$$

avec

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_c &= \bar{\theta}(t')\theta(t') - \int \bar{\eta}(t)\theta(t)dt \\ &= \bar{\theta}'\theta'' e^{-\omega(t''-t')} - \int_{t'}^{t''} dt \left[ \bar{\theta}' e^{-\omega(t-t')} \eta(t) + \bar{\eta}(t) e^{-\omega(t''-t)} \theta'' \right] \\ &\quad + \int_{t'}^{t''} du \int_u^{t''} dt \bar{\eta}(u) e^{-\omega(t-u)} \eta(t). \end{aligned} \quad (7.83)$$

Pour calculer la normalisation

$$\mathcal{N} = \int_{\bar{\theta}(t')=0}^{\theta(t'')=0} [d\theta(t)d\bar{\theta}(t)] \exp \left[ - \int_{t'}^{t''} dt \bar{\theta}(t)(\dot{\theta}(t) - \omega\theta(t)) \right],$$

nous posons encore

$$\bar{\theta}(t) = e^{-\omega t} \bar{\zeta}(t), \quad \theta(t) = e^{\omega t} \zeta(t).$$

Le jacobien est égal à un. Après ce changement de variables la dépendance en  $\omega$  a disparu. On trouve pour  $\mathcal{N}$  l'identité dans la représentation mixte, prise pour  $\theta = \bar{\theta} = 0$ . Donc  $\mathcal{N} = 1$ .

Comme dans le cas bosonique, les fonctions de corrélation sont obtenues en dérivant les expressions (7.82, 7.83) par rapport à  $\eta$  et  $\bar{\eta}$ .

## 7.9.2 La fonction de partition

La fonction de partition généralisée  $\text{tr} U(\beta/2, -\beta/2; \eta, \bar{\eta})$  peut être déduite de l'expression (7.82), la trace étant définie par l'expression (7.64) :

$$\text{tr} U(\beta/2, -\beta/2; \eta, \bar{\eta}) = \int d\bar{\theta} d\theta e^{-\bar{\theta}\theta} \langle \theta | U(\beta/2, -\beta/2) | \bar{\theta} \rangle. \quad (7.84)$$

Un calcul simple d'intégrales grassmanniennes donne

$$\text{tr} U(\beta/2, -\beta/2; \eta, \bar{\eta}) = (1 + e^{-\omega\beta}) \exp \left[ - \int_{-\beta/2}^{\beta/2} du dt \bar{\eta}(u) \Delta(t-u) \eta(t) \right] \quad (7.85)$$

avec

$$\Delta(t) = \frac{1}{2} e^{-\omega t} [\epsilon(t) + \tanh(\omega\beta/2)], \quad (7.86)$$

où  $\epsilon(t)$  la fonction signe de  $t$ ,  $\epsilon(t) = 1$  pour  $t > 0$ ,  $\epsilon(t) = -1$  pour  $t < 0$ .

La fonction  $\Delta(t)$  est la solution de l'équation différentielle

$$\dot{\Delta} + \omega\Delta = \delta(t),$$

avec, à la différence du cas bosonique (équations (2.46, 6.41)), conditions aux limites anti-périodiques :

$$\Delta(\beta/2) = -\Delta(-\beta/2).$$

Dans la limite  $\beta \rightarrow \infty$ , elle se réduit à

$$\Delta(t) = \frac{1}{2} e^{-\omega t} (\epsilon(t) + 1).$$

Cette expression est identique à celle obtenue dans le cas des intégrales complexes (cf. équation (6.42)).

Notons ici aussi que, malgré la façon non triviale dont la trace est définie, le résultat obtenu est le même que celui qu'aurait donné une intégrale de chemin avec *conditions aux limites anti-périodiques* :

$$\text{tr } U_G(\beta/2, -\beta/2; \eta, \bar{\eta}) = \int [d\theta(t)d\bar{\theta}(t)] \exp[-\mathcal{S}_G(\theta, \bar{\theta}; \eta, \bar{\eta})] \quad (7.87)$$

avec  $\theta(-\beta/2) = \theta(\beta/2)$ ,  $\bar{\theta}(-\beta/2) = \bar{\theta}(\beta/2)$  et

$$\mathcal{S}_G(\theta, \bar{\theta}; \eta, \bar{\eta}) = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \left\{ \bar{\theta}(t) [\dot{\theta}(t) - \omega\theta(t)] - \bar{\eta}(t)\theta(t) - \bar{\theta}(t)\eta(t) \right\}. \quad (7.88)$$

La solution avec conditions aux limites périodiques apparaît au contraire dans le calcul de  $\text{tr}(-1)^F e^{-\beta H}$ , où  $F$  est le nombre de fermions, qui est obtenu en intégrant l'expression (7.82) avec  $e^{\theta\bar{\theta}}$ .

Avec ces *conditions aux limites anti-périodiques*, la fonction à deux points correspondant à la mesure gaussienne  $e^{-S_0}$  est donnée par

$$\langle \bar{\theta}(t)\theta(u) \rangle = \Delta(t - u). \quad (7.89)$$

De nouveau, la dérivée de  $\ln \mathcal{Z}_0$  par rapport à  $\omega$  est reliée à la fonction à deux points (7.86) :

$$\frac{d \ln \mathcal{Z}_0}{d\omega} = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \langle \bar{\theta}(t)\theta(t) \rangle = \beta\Delta(0).$$

On retrouve toutes les difficultés du cas complexe. Le choix  $\epsilon(0) = 0$  conduit à la fonction de partition solution de

$$\frac{d \ln \mathcal{Z}_0}{d\omega} = \frac{1}{2}\beta \tanh(\omega\beta/2) \Rightarrow \mathcal{Z}_0 = 2 \cosh(\omega\beta/2) = e^{\omega\beta/2}(1 + e^{-\omega\beta}).$$

Ce choix correspond à l'hamiltonien  $\omega[a^\dagger, a]/2$  qui est la version « symétrisée » de l'opérateur (7.65). Le choix  $\epsilon(0) = -1$ , par contre, correspond à l'ordre normal (7.65), mais conduit aux mêmes difficultés que dans le cas commutatif.

### 7.9.3 Généralisation

Le formalisme précédent peut être généralisé à une algèbre de Grassmann à un nombre quelconque de générateurs  $\theta_i$ . Un hamiltonien est alors représenté par un opérateur différentiel  $h(\theta, \partial/\partial\theta)$  agissant sur une fonction des  $\theta_i$ . Si on

l'écrit sous forme normale avec toutes les dérivées à droite, on peut aussi lui associer le noyau

$$h(\theta, \bar{\theta})\mathcal{I}(\theta, \bar{\theta}).$$

Une restriction importante est que les éléments de matrice de l'hamiltonien fassent partie de la sous-algèbre commutative,

$$P[h(\theta, \bar{\theta})] = h(\theta, \bar{\theta}),$$

c'est-à-dire ne mélangent pas les fermions et les bosons. Par contre, il n'est pas indispensable que le hamiltonien conserve le nombre de fermions, c'est-à-dire que tout monôme comporte un nombre égal de facteurs  $\theta$  et  $\bar{\theta}$ .

L'équation (7.72) se généralise alors sous la forme

$$\langle \theta | U(t) | \bar{\theta} \rangle = \exp \left[ - \sum_i \theta_i \bar{\theta}_i - t h(\theta, \bar{\theta}) + O(t^2) \right]. \quad (7.90)$$

À temps fini, une représentation sous forme d'intégrale de chemin s'en déduit :

$$\langle \theta'' | U(t'', t') | \bar{\theta}' \rangle = \int_{\bar{\theta}(t')=\bar{\theta}'}^{\theta(t'')=\theta''} [d\theta(t)d\bar{\theta}(t)] \exp [-\mathcal{S}(\theta, \bar{\theta})] \quad (7.91)$$

avec

$$\mathcal{S}(\theta, \bar{\theta}) = \sum_i \bar{\theta}_i(t')\theta_i(t') + \int_{t'}^{t''} dt \left\{ \sum_i \bar{\theta}_i(t)\dot{\theta}_i(t) + h[\theta(t), \bar{\theta}(t)] \right\}. \quad (7.92)$$

Nous avons vu en section 7.5 comment calculer les intégrales gaussiennes et les moyennes de polynômes. Nous utilisons ici les mêmes méthodes pour calculer l'intégrale de chemin (7.92) perturbativement. Décomposant l'hamiltonien en un terme quadratique et un terme d'interaction,

$$h(\theta, \bar{\theta}) = - \sum_i \omega_i \bar{\theta}_i \theta_i + h_1(\theta, \bar{\theta}),$$

nous développons l'intégrale en puissances de  $h_1$  et calculons les termes successifs par exemple en utilisant le théorème de Wick (7.35). De nouveau, le développement perturbatif a une expression formelle compacte :

$$\langle \theta'' | U(t'', t') | \bar{\theta}' \rangle = \exp \left[ - \int dt h(\partial/\partial \bar{\eta}, -\partial/\partial \eta) \right] \langle \theta'' | U_G(\eta; t'', t') | \bar{\theta}' \rangle \Big|_{\eta=\bar{\eta}=0}.$$

Toutefois, des problèmes dus à l'ordre des opérateurs surgissent. En particulier, comme dans le cas de l'intégrale de chemin holomorphe du cas commutatif, les calculs perturbatifs impliquent  $\epsilon(0)$ . L'ansatz correct, cohérent avec cette construction, serait de nouveau de poser  $\epsilon(0_-) = -1$ , mais cela

conduit à certaines difficultés. Il vaut mieux remplacer  $h(\theta, \bar{\theta})$  par l'expression équivalente compatible avec  $\epsilon(0) = 0$ .

Notons enfin que, comme conséquence de la représentation (7.87), la fonction de partition, trace de  $U(\beta/2, -\beta/2)$ , est donnée par une intégrale de chemin avec *conditions aux limites anti-périodiques*.

*Remarque.* Comme dans le cas à une variable, les opérateurs  $\theta_i$  et  $\partial/\partial\theta_i$  satisfont aux relations de commutation des opérateurs d'annihilation et création de fermions  $a_i, a_i^\dagger$ ,

$$a_i^\dagger a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i^\dagger = a_i a_j + a_j a_i = 0 \quad \text{et} \quad a_i^\dagger a_j + a_j a_i^\dagger = \delta_{ij}, \quad (7.93)$$

avec la correspondance

$$a_i^\dagger \mapsto \theta_i, \quad a_i \mapsto \partial/\partial\theta_i \mapsto \bar{\theta}_i.$$

## 7.10 Fonction de partition de systèmes de fermions

Nous allons d'abord définir les vecteurs d'états de fermions et l'action des hamiltoniens sur ces états. Nous construirons ensuite une fonction génératrice des vecteurs d'états et déterminerons la représentation des hamiltoniens correspondante. Nous en déduirons une représentation par intégrale de chemin de la fonction de partition.

### 7.10.1 États de fermions. Hamiltoniens

*États à une particule.* Nous considérons d'abord un espace d'états à une particule de dimension finie. À cause du principe de Pauli, cette hypothèse est beaucoup plus drastique pour des fermions que des bosons. L'état à un fermion est donc défini par un vecteur que nous notons  $\psi_i$  qui appartient à un espace vectoriel complexe  $\mathfrak{H}_1$  de dimension finie  $N$ .

*États à  $n$  particules.* Un état à  $n$  particules est alors décrit par un vecteur  $\psi_{i_1 i_2 \dots i_n}$  où les indices  $i_k$  prennent  $N$  valeurs. Cependant, le principe de Pauli pour les fermions implique que le vecteur  $\psi_{i_1 i_2 \dots i_n}$  doit être antisymétrique dans l'échange de tous les indices

$$\psi_{i_1 i_2 \dots i_k i_{k+1} \dots i_n} = -\psi_{i_1 i_2 \dots i_{k+1} i_k \dots i_n} \quad \forall k.$$

Les vecteurs  $\psi_{i_1 i_2 \dots i_n}$  sont des tenseurs antisymétriques à  $n$  indices, et appartiennent à un espace vectoriel complexe  $\mathfrak{H}_n$  de dimension  $\binom{N-n+1}{n}$ .

*Hamiltonien de particules indépendantes.* Un hamiltonien  $\mathbf{H}^{(1)}$  à un corps ou une particule est défini par son action sur un état à une particule : il est

alors représenté par une matrice hermitienne  $N \times N$  qui peut être diagonalisée. Notons  $\omega_i$  ses valeurs propres. Alors

$$\mathbf{H}^{(1)} \psi_i = \omega_i \psi_i.$$

Son action sur un état à  $n$  particules est additive :

$$\mathbf{H}^{(1)} \psi_{i_1 i_2 \dots i_n} = \sum_{\ell} \omega_{i_{\ell}} \psi_{i_1 i_2 \dots i_n}.$$

Si l'hamiltonien total se réduit à un hamiltonien à une particule, les fermions sont sans interactions mutuelles : on parle alors de particules indépendantes.

*Interaction à deux corps.* Une interaction à deux corps ou interaction de paires  $\mathbf{H}^{(2)}$  est déterminée par son action sur un état à deux particules, et donc par une matrice  $H_{i_1 i_2, j_1 j_2}^{(2)}$  qui satisfait

$$H_{i_1 i_2, j_1 j_2}^{(2)} = H_{i_2 i_1, j_2 j_1}^{(2)},$$

ce qui en fait aussi une application interne de l'espace vectoriel  $\mathfrak{H}_2$  des tenseurs antisymétriques. Il est évidemment possible de construire sur le même modèle des interactions à trois corps..., mais nous nous limitons à cet exemple pour des raisons de simplicité. L'action de  $\mathbf{H}^{(2)}$  sur un état à  $n$  particules prend la forme

$$\mathbf{H}^{(2)} \psi_{i_1 i_2 \dots i_n} = \sum_{\ell, m} \sum_{jk} H_{i_{\ell} i_m, jk}^{(2)} \psi_{i_1 i_2 \dots i_{\ell-1} j i_{\ell+1} \dots i_{m-1} k i_{m+1} \dots i_n}.$$

### 7.10.2 Fonction génératrice des vecteurs d'états

Nous considérons maintenant l'ensemble des vecteurs d'état d'un nombre quelconque de particules qui appartiennent à un espace  $\oplus_n \mathfrak{H}_n$ ,  $n = 0, 1, \dots$ , et nous voulons les représenter par une fonction génératrice. Les tenseurs  $\psi_{i_1 i_2 \dots i_n}$  étant antisymétriques, il nous faut introduire une algèbre de Grassmann à  $N$  générateurs  $\theta_i$ . Une fonction génératrice des vecteurs d'état est alors

$$\Psi(\theta) = \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \theta_{i_1} \theta_{i_2} \dots \theta_{i_n} \psi_{i_1 i_2 \dots i_n}.$$

Avec nos hypothèses,  $\Psi(\theta)$  est un polynôme de degré  $N$ . Notons qu'il est essentiel que les tenseurs soient antisymétriques pour qu'ils puissent être calculés en dérivant  $\Psi(\theta)$ .

La fonction  $\Psi(\theta)$  peut être considérée comme une fonction grassmannienne analytique. Ces fonctions forment un espace vectoriel qui peut être muni du produit scalaire (7.53).

Nous remarquons à nouveau

$$\begin{aligned} \sum_j \theta_j \omega_j \frac{\partial \Psi(\theta)}{\partial \theta_j} &= \sum_n \frac{1}{(n-1)!} \sum_j \theta_j \omega_j \sum_{i_2, i_3, \dots, i_n} \theta_{i_2} \theta_{i_3} \dots \theta_{i_n} \psi_{j i_2 \dots i_n} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \theta_{i_1} \theta_{i_2} \dots \theta_{i_n} \sum_{\ell} \omega_{\ell} \psi_{i_1 i_2 \dots i_n}. \end{aligned}$$

La représentation de l'hamiltonien  $\mathbf{H}^{(1)}$  à une particule agissant sur les fonctions génératrices  $\Psi(\theta)$  est donc

$$\mathbf{H}^{(1)} \equiv \sum_i \theta_i \omega_i \frac{\partial}{\partial \theta_i}.$$

Un calcul analogue montre que l'interaction à deux corps est représentée par

$$\mathbf{H}^{(2)} = \sum_{i_1 i_2, j_1, j_2} \theta_{i_1} \theta_{i_2} H_{i_1 i_2, j_1 j_2}^{(2)} \frac{\partial^2}{\partial \theta_{j_1} \partial \theta_{j_2}}.$$

L'hamiltonien total

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^{(1)} + \mathbf{H}^{(2)}$$

a une représentation analogue aux hamiltoniens de la représentation holomorphe et le formalisme développé en sections 6.6 et 6.7 s'applique immédiatement.

*Opérateur nombre de particules.* Du point de vue de la mécanique statistique, le formalisme précédent conduit à la formulation grand canonique, c'est-à-dire à travailler avec un nombre de particules variables.

L'hamiltonien  $\mathbf{H}$  conserve le nombre de particules. L'opérateur nombre de particules  $\mathbf{N}$  qui, agissant sur  $\Psi(\theta)$ , prend la forme

$$\mathbf{N} = \sum_i \theta_i \frac{\partial}{\partial \theta_i}$$

comme on le vérifie immédiatement, commute donc avec  $\mathbf{H}$  :

$$[\mathbf{N}, \mathbf{H}] = 0.$$

Pour faire varier le nombre moyen de particules, on introduit alors un *potentiel chimique*  $\mu$  couplé à  $\mathbf{N}$ , ce qui conduit à remplacer  $\mathbf{H}$  par l'opérateur

$$\mathbf{H} - \mu \mathbf{N}.$$

Ici cela revient simplement à modifier  $\mathbf{H}^{(1)}$ .

### 7.10.3 Fonction de partition : intégrale de chemin

La fonction de partition est donc donnée par l'intégrale de chemin grassmannienne

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int [d\theta(t)d\bar{\theta}(t)] \exp[-\mathcal{S}(\theta, \bar{\theta})], \quad (7.94)$$

où l'action a la forme (6.50) :

$$\mathcal{S}(\theta, \bar{\theta}) = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \left[ \sum_i \bar{\theta}_i(t) \dot{\theta}_i(t) + \tilde{H}(\theta(t), \bar{\theta}(t)) \right], \quad (7.95)$$

$$\tilde{H}(\theta, \bar{\theta}) = \sum_i \theta_i (\omega_i - \mu) \bar{\theta}_i + \frac{1}{2} \sum_{i_1 i_2, j_1 j_2} \theta_{i_1} \theta_{i_2} H_{i_1 i_2, j_1 j_2}^{(2)} \bar{\theta}_{j_1} \bar{\theta}_{j_2}, \quad (7.96)$$

et les conditions aux limites sont anti-périodiques :

$$\theta(-\beta/2) = -\theta(\beta/2), \quad \bar{\theta}(-\beta/2) = -\bar{\theta}(\beta/2).$$

*Équation d'état.* Dérivant l'intégrale de chemin (7.94), on en déduit que l'équation d'état peut s'écrire

$$\langle \mathbf{N} \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \mu} = \sum_i \langle \theta_i(0) \bar{\theta}_i(0) \rangle,$$

où dans la deuxième expression la valeur moyenne est prise avec le poids  $e^{-\mathcal{S}}$ .

Dans le cas de particules indépendantes, les valeurs moyennes s'expriment en terme de la fonction à deux points gaussienne (7.86) (de nouveau avec le choix  $\epsilon(0) = -1$ ). On retrouve l'expression classique

$$\langle \mathbf{N} \rangle = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\omega_i - \mu)} + 1}.$$

À basse température, c'est-à-dire  $\beta \rightarrow \infty$ ,

$$\langle \mathbf{N} \rangle \sim \sum_i \theta(\mu - \omega_i),$$

où  $\theta(s)$  est la fonction saut. Le potentiel chimique s'identifie avec l'énergie de Fermi : tous les états en dessous de l'énergie de Fermi sont occupés ; tous les états au-dessus de l'énergie de Fermi sont vides.

Mais, comme nous l'avons déjà souligné, l'hypothèse d'espace vectoriel des états à une particule de dimension finie, est pour des fermions très restrictive puisque le nombre de particules est alors borné. Une physique plus intéressante n'apparaît que pour des espaces de Hilbert à une particule, généralisation que nous allons maintenant décrire.

## 7.11 Gaz de Fermi quantique

Nous allons montrer dans cette section comment une généralisation simple du formalisme d'intégrale de chemin de la section 7.10.1 permet de construire une représentation par intégrale fonctionnelle (on intègre alors sur des champs grassmanniens) de la fonction de partition pour des systèmes de fermions non relativistes.

Nous partons du même hamiltonien  $\mathbf{H}$  qu'en section 6.9 avec la forme (6.72) dans l'espace à  $n$  particules et suivons la même stratégie. La différence est simplement que maintenant nous nous intéressons à des systèmes de fermions et donc les fonctions d'onde  $\psi_n$  sont antisymétriques. Dans ces conditions, si nous voulons construire une fonctionnelle génératrice, nous devons introduire des fonctions  $\varphi(x)$  génératrices d'une algèbre de Grassmann, et donc

$$\varphi(x)\varphi(x') + \varphi(x')\varphi(x) = 0.$$

Nous définissons alors la fonctionnelle

$$\Psi(\varphi) = \sum_{n=0} \frac{1}{n!} \left( \int \prod_i dx_i \varphi(x_i) \right) \psi_n(x_1, \dots, x_n). \quad (7.97)$$

La suite des opérations est tout à fait semblable à ce qui a été fait dans le cas bosonique, à ceci près qu'il est nécessaire de prêter une attention particulière à l'ordre des facteurs et aux signes. De nouveau, pour des raisons de simplicité de notation, nous nous limitons à une seule dimension d'espace.

Le terme cinétique n'a formellement pas changé. Le terme de potentiel reste également le même avec un ordre spécifié des champs. Avec les conventions de la section 7.9, on trouve pour  $\mathbf{H}$  :

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \mathbf{H} | \bar{\varphi} \rangle = & \left( \exp - \int dx \bar{\varphi}(x) \varphi(x) \right) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \varphi(x) \frac{d^2}{(dx)^2} \bar{\varphi}(x) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \int dx dy \varphi(x) \varphi(y) V(x-y) \bar{\varphi}(x) \bar{\varphi}(y) \right]. \end{aligned} \quad (7.98)$$

On en déduit une représentation par l'intégrale fonctionnelle de la fonction de partition d'un gaz de Fermi :

$$\text{tr } \mathbf{U}(\tau/2, -\tau/2) = \int [d\varphi(x, t) d\bar{\varphi}(x, t)] \exp[-\mathcal{S}(\bar{\varphi}, \varphi)] \quad (7.99)$$

avec les conditions aux limites anti-périodiques :

$$\varphi(x, \tau/2) = -\varphi(x, -\tau/2), \quad \bar{\varphi}(x, \tau/2) = -\bar{\varphi}(x, -\tau/2),$$

et l'action euclidienne

$$\begin{aligned} \mathcal{S} = & \int dt dx \varphi(x, t) \left( -\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{(\partial x)^2} - \frac{\mu}{2\hbar} \right) \bar{\varphi}(x, t) \\ & + \frac{1}{2\hbar} \int dt dx dy \varphi(x, t) \varphi(y, t) V(x-y) \bar{\varphi}(x, t) \bar{\varphi}(y, t). \end{aligned} \quad (7.100)$$

Le potentiel  $\delta(x)$ . Un exemple intéressant est fourni par le pseudo-potentiel à deux corps  $\delta(x)$ . L'action devient alors locale, en ce sens que l'action devient l'intégrale d'une densité de lagrangien dépendant des champs et de leurs dérivées. Dans le cas de fermions qui n'ont pas de degré de liberté interne, l'interaction à deux corps s'annule puisque le carré d'une variable de Grassmann s'annule. Les fermions sont alors libres.

Un cas plus intéressant est celui de fermions avec un degré de liberté interne à deux valeurs (comme le spin d'un électron). L'action dépend alors de deux paires de champs  $\varphi_i(x, t)$ ,  $i = 1, 2$  et l'interaction ne s'annule plus.

Ce système quantique unidimensionnel est complètement intégrable, en ce sens que tous les états propres de l'hamiltonien sont des combinaisons linéaires d'un nombre fini d'ondes planes (ansatz de Bethe).

Notons finalement qu'une généralisation relativiste est le modèle de Thirring qui est également intégrable.

## Exercices

### Exercice 7.1.

Calculer la valeur moyenne

$$\langle \bar{\theta}_1 \theta_1 \bar{\theta}_2 \theta_2 \rangle,$$

où  $\bar{\theta}_1, \theta_1, \bar{\theta}_2, \theta_2$  sont des variables de Grassmann, avec la mesure

$$d\theta_1 d\bar{\theta}_1 d\theta_2 d\bar{\theta}_2 \exp[\bar{\theta}_1 \theta_2 + \bar{\theta}_2 \theta_1].$$

*Solution.* Écrivant l'argument de l'exponentielle  $\sum_{ij} \bar{\theta}_i M_{ij} \theta_j$ , on trouve

$$\det M = -1 \quad M^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \langle \bar{\theta}_1 \theta_1 \bar{\theta}_2 \theta_2 \rangle = (-1) \times 1 = -1.$$

### Exercice 7.2.

Calculer le carré scalaire de la fonction  $f$  des variables grassmanniennes  $\theta_1, \theta_2$

$$f(\theta_1, \theta_2) = 2\theta_1 + 3\theta_1\theta_2,$$

où le produit scalaire  $(f, g)$  de  $f$  et  $g$  est défini par

$$(f, g) = \int d\theta_1 d\bar{\theta}_1 d\theta_2 d\bar{\theta}_2 e^{\bar{\theta}_1 \theta_1 + \bar{\theta}_2 \theta_2} f^\dagger(\theta) g(\theta).$$

*Solution.*

$$(f, g) = 13.$$

*Exercice 7.3.*

Déterminer la constante de normalisation  $\mathcal{N}$  à partir de la définition

$$\mathcal{N}(\mathbf{M}) \langle \bar{\theta}_{i_1} \theta_{j_1} \bar{\theta}_{i_2} \theta_{j_2} \dots \bar{\theta}_{i_p} \theta_{j_p} \rangle = \int \left( \prod_i d\theta_i d\bar{\theta}_i \right) \bar{\theta}_{i_1} \theta_{j_1} \dots \bar{\theta}_{i_p} \theta_{j_p} \times \exp \left( \sum_{i,j=1}^n M_{ij} \bar{\theta}_i \theta_j \right), \quad (7.101)$$

et du théorème de Wick (7.35).

La même question est posée dans le cas de la mesure  $\exp[\frac{1}{2} \sum_{ij} \theta_i A_{ij} \theta_j]$ .

*Solution.* La solution dans les deux cas est similaire. Par exemple, dans le premier cas, on calcule la valeur moyenne du produit

$$\prod_{i=1}^n \bar{\theta}_i \theta_i.$$

Dans ce cas, le facteur  $\exp(\sum_{i,j=1}^n M_{ij} \bar{\theta}_i \theta_j)$  dans l'intégrant peut être remplacé par 1, l'intégrale donne 1, et le théorème de Wick reconstruit le déterminant de la matrice  $\mathbf{M}$ .

*Exercice 7.4.*

Utiliser le formalisme d'intégrale sur les variables de Grassman pour obtenir un développement en puissances de  $\lambda$  jusqu'à l'ordre  $\lambda^3$  inclus du déterminant  $\det(M + \lambda)$  où la matrice  $M$  est inversible. On notera  $X = M^{-1}$ . Il est suggéré d'utiliser le théorème de Wick.

*Solution.* Notant  $t_n = \text{tr } X^n$  on trouve

$$\det(M + \lambda) = \det M \left[ 1 + t_1 \lambda + \frac{1}{2} (t_1^2 - t_2) \lambda^2 + \frac{1}{6} (t_1^3 - 3t_1 t_2 + 2t_3) \lambda^3 \right] + O(\lambda^4).$$

*Exercice 7.5.*

Généraliser au développement de  $\det(M + \Lambda)$  où  $\Lambda$  est une matrice diagonale  $\Lambda_{ij} = \lambda_i \delta_{ij}$ , en puissances des  $\lambda_i$ .

*Solution.*

$$\det[M + \Lambda] = \det M \left[ \sum_n \frac{1}{n!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \lambda_{i_1} \lambda_{i_2} \dots \lambda_{i_n} \det X_{i_l i_k} \right].$$

*Exercice 7.6.*

Les ensembles des matrices hermitiennes aléatoires, dans la limite où leur taille tend vers l'infini, peuvent fournir de bons modèles pour des hamiltoniens complexes. Un exemple simple est l'ensemble avec mesure de probabilité gaussienne, invariante unitaire.

Un objet d'étude particulièrement intéressant est le spectre de telles matrices. On se propose donc ici de calculer la valeur moyenne avec poids gaussien du polynôme caractéristique d'une matrice hermitienne.

On considère un ensemble de matrices hermitiennes aléatoires  $N \times N$  avec comme mesure de probabilité

$$d\rho(M) = \mathcal{N}^{-1} d^{N^2} M e^{-N \operatorname{tr} M^2/2}, \quad d^{N^2} M \equiv \prod_i dM_{ii} \prod_{i < j} d \operatorname{Re} M_{ij} d \operatorname{Im} M_{ij}. \quad (7.102)$$

La constante de normalisation  $\mathcal{N}$  est déterminée par la condition que la valeur moyenne de 1 est bien 1, et donc

$$\mathcal{N} = \int d^{N^2} M e^{-N \operatorname{tr} M^2/2}.$$

La mesure (7.102) est invariante par les transformations unitaires,

$$M \mapsto U^\dagger M U, \quad U U^\dagger = 1,$$

et donne donc le même poids aux matrices qui ont le même spectre. On appelle cet ensemble de matrices aléatoires l'ensemble gaussien unitaire (GUE). On notera la valeur moyenne d'une fonction  $F(M)$  avec la mesure (7.102)

$$\langle F(M) \rangle = \mathcal{N}^{-1} \int d^{N^2} M e^{-N \operatorname{tr} M^2/2} F(M).$$

(i) Justifier que si  $X$  est une matrice quelconque  $N \times N$

$$\langle e^{\operatorname{tr} X M} \rangle = e^{\operatorname{tr} X^2/2N}.$$

(ii) Représenter le polynôme caractéristique  $\det(M - z)$  de la matrice  $M$  par une intégrale grassmannienne.

(iii) Calculer alors la moyenne  $\mathcal{H}_N(z) = \langle \det(M - z) \rangle$  sur les matrices.

(iv) L'intégrand prend la forme de l'exponentielle d'un polynôme du quatrième degré dans les variables de Grassmann. Remarquer qu'il peut se réécrire comme l'intégrale gaussienne (à une variable) de l'exponentielle d'une forme quadratique dans les variables de Grassmann.

(v) Faire alors l'intégrale gaussienne sur les variables de Grassmann. Le résultat est une intégrale simple (sur une variable ordinaire).

(vi) Généraliser la méthode pour calculer la valeur moyenne de  $[\det(M - z)]^n$  (cette question n'est pas utile pour la suite).

(vii) On démontre de façon générale qu'en moyennant  $\det(M - z)$  sur  $M$  avec la mesure  $e^{-\text{tr} V(M)}$ , on engendre les polynômes orthogonaux par rapport à la mesure  $e^{-V(z)}$ . Vérifier ici cette propriété explicitement en montrant que les fonctions  $\psi_N(z)$ ,

$$\psi_N(z) = e^{-Nz^2/4} \mathcal{H}_N(z),$$

satisfont une équation de Schrödinger. (Cette question n'est pas utile pour la suite.)

(viii) Utiliser la méthode du col pour évaluer l'intégrale donnant  $\mathcal{H}_N$  (obtenue en (v)) pour  $N \rightarrow \infty$ . Que peut-on dire du support des zéros de  $\mathcal{H}_N(z)$ ? Trouver ces zéros dans cette limite.

(ix) Comment se modifie le calcul pour des matrices *symétriques réelles* avec mesure gaussienne (l'ensemble GOE de la littérature)?

*Solution.*

$$\det(M - z) = \int \prod_i d\bar{\theta}_i d\theta_i e^{\text{tr} X M - z \text{tr} X}$$

avec

$$X_{ij} = \bar{\theta}_i \theta_j.$$

Dans ces conditions

$$\text{tr} X^2 = \bar{\theta}_i \theta_j \bar{\theta}_j \theta_i = - \left( \sum_i \bar{\theta}_i \theta_i \right)^2 = -(\text{tr} X)^2.$$

On remarque alors

$$e^{\text{tr} X^2/2N} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int ds e^{-s^2/2 + is \sum_i \bar{\theta}_i \theta_i / \sqrt{N}}.$$

On voit qu'on a intérêt à poser  $s \mapsto s\sqrt{N}$ . L'intégrale sur les variables de Grassmann est immédiate :

$$\mathcal{H}_N(z) = \sqrt{N/2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{-Ns^2/2} (is - z)^N, \tag{7.103}$$

ce qui donne une représentation des polynômes de Hermite.

Pour la valeur moyenne de  $[\det(M - z)]^n$ , il faut introduire une matrice hermitienne  $S$   $n \times n$  et l'expression ci-dessus est remplacée par

$$\langle [\det(M - z)]^n \rangle = (N/2\pi)^n / 2 \int dS e^{-N \text{tr} S^2/2} [\det(is - z)]^N.$$

Les fonctions  $\psi_N(z)$  satisfont l'équation de Schrödinger de l'oscillateur harmonique (avec une force dépendant de  $N$ )

$$-\psi_N'' + \frac{1}{8} N^2 z^2 \psi_N = N(N + \frac{1}{2}) \psi_N.$$

*Autre version.* Nous introduisons les polynômes  $H_N(z)$

$$H_N(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{-s^2} (is - z)^N \propto \mathcal{H}_N(z\sqrt{2/N}).$$

Les fonctions propres de l'oscillateur harmonique sont alors

$$\psi_N(z) = e^{-z^2/2} H_N(z).$$

Posant alors dans l'intégrale  $s + iz = s'$ . Après ce changement de variables, on trouve

$$\psi_N(z) = e^{z^2/2} \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{-s^2 + 2izs} (is)^N.$$

On vérifie alors immédiatement

$$(x - d/dx)\psi_N(z) = 2\psi_{N+1}(z),$$

et donc

$$\psi_N(z) = \sqrt{\pi} 2^{-N} (x - d/dx)^N e^{-z^2/2}.$$

On reconnaît l'opérateur de création agissant sur le fondamental de l'oscillateur harmonique.

Pour  $N \rightarrow \infty$ , l'intégrale (7.103) peut se calculer par la méthode du col. Les cols sont

$$s = \frac{1}{s + iz} \Rightarrow s_{\pm} = -\frac{1}{2}iz \pm \sqrt{1 - z^2/4}.$$

On trouve deux cols. Les zéros sont donnés par la condition que les contributions des deux cols se compensent. Ceci implique d'abord qu'ils sont à la même hauteur, donc que  $z$  soit réel (ce résultat est attendu puisque les zéros des fonctions propres d'un hamiltonien hermitien de type  $p^2 + V(q)$  sont réels). De plus, il faut que  $\sqrt{1 - z^2/4}$  soit réel ce qui implique que le support des zéros est l'intervalle  $-2 \leq z \leq 2$ . Ensuite, à l'ordre dominant,

$$e^{-s_+^2/2} (is_+ - z) = e^{2i\pi k/N} e^{-s_-^2/2} (is_- - z),$$

où le second membre vient de la racine  $N$ ième et  $1 \leq k \leq N$ . Il est commode de poser  $z = 2 \cos \varphi$ ,  $0 \leq \varphi \leq \pi$ . Alors

$$s_{\pm} = -i e^{\pm i\varphi},$$

et donc

$$2\varphi - \sin(2\varphi) = 2\pi k/N \pmod{2\pi}.$$

On en déduit que la densité  $\omega(\varphi)$  pour  $N \rightarrow \infty$  des valeurs de  $\varphi$  est donnée par la dérivée du membre de gauche

$$\omega(\varphi) = \frac{N}{2\pi} (1 - \cos(2\varphi)).$$

La densité des valeurs propres de la matrice est alors

$$\omega(z) = \left| \frac{d\varphi}{dz} \right| \omega(\varphi) = \frac{N}{\pi} \sqrt{1 - z^2/4}.$$

Ce résultat est classique et porte le nom de loi du demi-cercle de Wigner.

Pour des matrices symétriques réelles, les seuls changements viennent du fait qu'il faut symétriser la matrice  $X$  et donc

$$X_{ij} = \frac{1}{2} (\bar{\theta}_i \theta_j + \bar{\theta}_j \theta_i),$$

$$\text{tr } X^2 = -\frac{1}{2} \left( \sum_i \bar{\theta}_i \theta_i \right)^2.$$

Le calcul est ensuite le même.



# Chapitre 8

## Effet tunnel : approximation semi-classique

EN MÉCANIQUE CLASSIQUE une particule est toujours réfléchiée par une barrière de potentiel si son énergie est inférieure à la valeur du potentiel. En mécanique quantique, au contraire, une particule a une probabilité finie de traverser une barrière, phénomène que l'on appelle l'effet tunnel.

Ce chapitre est consacré à la mise en évidence grâce à l'intégrale de chemin de différentes manifestations de l'effet tunnel, dans l'approximation semi-classique. Ainsi nous allons évaluer, dans la limite semi-classique  $\hbar \rightarrow 0$ , la différence d'énergie entre deux niveaux dégénérés correspondant à deux minima symétriques d'un potentiel ainsi que le taux de désintégration, et donc le temps de vie, d'états métastables, deux conséquences de l'effet tunnel.

Comme il n'existe aucune trajectoire classique correspondant à l'effet tunnel, on peut se demander comment évaluer cet effet même dans la limite semi-classique. En fait, il a été remarqué depuis longtemps que, formellement, l'effet tunnel peut être interprété, dans la limite semi-classique, comme résultant de déplacements de particules classiques en temps imaginaire. Le formalisme euclidien que nous avons utilisé jusqu'ici, basé sur le calcul de  $e^{-\beta H}$ , décrit formellement une évolution en temps imaginaire. Nous allons vérifier qu'il nous permet en effet de calculer des effets physiques liés à l'effet tunnel.

Bien que la méthode se généralise, nous allons surtout discuter les propriétés du fondamental, ou de niveaux excités proches, et donc, par exemple, la fonction de partition pour  $\beta \rightarrow \infty$ . Notre outil principal est la méthode du col appliquée à l'intégrale de chemin, mais les cols ici sont non triviaux, c'est-à-dire correspondent à des solutions des équations classiques euclidiennes qui ne sont pas constantes. Ces solutions satisfont à une condition : la différence entre leur action et l'action de la solution constante minimale reste finie quand  $\beta \rightarrow \infty$ . On associe à de telles solutions le nom d'*instanton*.

Pour calculer la contribution des instantons, il faut maîtriser deux problèmes de difficulté croissante, trouver les configurations dominantes dans

l'intégrale de chemin, évaluer l'intégrale de chemin à l'ordre dominant en intégrant sur les fluctuations gaussiennes.

Notons enfin que le calcul par la méthode du col basé sur un développement autour de ces solutions non triviales conduit à des résultats semi-classiques qui peuvent aussi être obtenus par la méthode BKW de la mécanique quantique, mais la méthode du col a l'avantage de se généraliser beaucoup plus facilement à la théorie quantique des champs.

## 8.1 Double puits quartique et instantons

Nous étudions une première famille de systèmes quantiques où l'effet tunnel joue un rôle : l'hamiltonien a des symétries d'espace discrètes, mais le potentiel est minimum en des points qui ne sont pas invariants par symétrie. Les positions des minima dégénérés sont alors reliées par des transformations du groupe de symétrie.

Classiquement, les états d'énergie minimum correspondent à une particule au repos dans un quelconque des minima du potentiel. La position de la particule brise (spontanément) la symétrie du système. Pour un système quantique, au contraire, le fondamental ne peut pas être dégénéré, comme nous l'avons montré en section 3.4. Nous nous attendons donc à ce que la fonction d'onde du fondamental soit symétrique, atteignant son module maximal dans tous les minima du potentiel. Ce phénomène est une conséquence de l'effet tunnel, une particule ayant initialement dans un des minima une probabilité finie de passer dans les autres.

### 8.1.1 Le double puits quartique

Nous allons discuter dans cette section l'effet tunnel dans un système simple qui admet une symétrie de réflexion, un hamiltonien avec un potentiel quartique et double puits symétrique :

$$H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}\left(x^2 - \frac{1}{4}\right)^2.$$

Cet hamiltonien est clairement symétrique dans la réflexion  $(p, x) \mapsto (-p, -x)$ , et le potentiel a deux minima dégénérés  $x = \pm 1/2$ . Quantiquement,  $H$  commute avec l'opérateur de réflexion  $P$  :

$$[P, H] = 0.$$

Les deux opérateurs  $P$  et  $H$  peuvent donc être diagonalisés simultanément : les fonctions propres de  $H$  sont des fonctions paires ou impaires. Comme nous avons démontré que la fonction d'onde du fondamental peut être choisie positive (section 3.4), le fondamental  $\psi_+$ , d'énergie  $E_+$ , est nécessairement pair :

$$\psi_+(x) = \psi_+(-x).$$

La théorie générale nous apprend que la fonction d'onde du premier état excité  $\psi_-(x)$ , d'énergie  $E_-$ , s'annule une fois et est donc impaire :

$$\psi_-(x) = -\psi_-(-x).$$

Dans la limite  $\hbar \rightarrow 0$ , on s'attend à ce que, si  $\psi_+$  et  $\psi_-$  ont la même normalisation,  $\psi_+ \pm \psi_-$  soient presque entièrement localisés dans chacun des puits.

*Théorie des perturbations.* Les propriétés du fondamental, dans la limite semi-classique, se déduisent de la fonction de partition  $\mathcal{Z}(\tau/\hbar)$  dans la limite  $\hbar \rightarrow 0$  puis  $\tau \rightarrow \infty$  (cf. la discussion des sections 2.9 et 3.1). Elle est donnée par l'intégrale de chemin

$$\mathcal{Z}(\tau/\hbar) = \int_{x(-\tau/2)=x(\tau/2)} [dx(t)] \exp[-\mathcal{S}(x)/\hbar] \quad (8.1)$$

avec

$$\mathcal{S}(x) = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \left[ \frac{1}{2} \dot{x}^2(t) + \frac{1}{2} (x^2(t) - \frac{1}{4})^2 \right] dt. \quad (8.2)$$

Pour  $\hbar \rightarrow 0$ , l'intégrand a deux cols qui correspondent aux fonctions constantes  $x(t) = \pm 1/2$ , et qui, par symétrie, donnent des contributions identiques. Il suffit donc de calculer la contribution d'un col. On peut poser, par exemple,

$$x(t) = -\frac{1}{2} + q(t)\sqrt{\hbar},$$

de sorte que l'action devient

$$\mathcal{S}(q)/\hbar = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \left[ \frac{1}{2} \dot{q}^2(t) + \frac{1}{2} q^2(t) (1 - q(t)\sqrt{\hbar})^2 \right] dt. \quad (8.3)$$

On développe ensuite en puissances de  $\hbar$ . Le facteur 2, dû aux 2 cols, nous indique simplement qu'il existe deux états d'énergie  $E_0$  dégénérés à tous les ordres en  $\hbar$ , et correspondant à des fonctions d'onde localisées dans chacun des puits du potentiel.

*Clivage des niveaux.* La différence d'énergie  $E_- - E_+$  tend donc vers zéro plus vite que toute puissance de  $\hbar$ , et le calcul de  $\text{tr} e^{-\tau H/\hbar}$  ne permet pas de la calculer facilement. Dans la double limite  $\hbar \rightarrow 0$  puis  $\tau \rightarrow \infty$ , nous trouvons en effet

$$\begin{aligned} \text{tr} e^{-\tau H/\hbar} &\sim e^{-\tau E_+/\hbar} + e^{-\tau E_-/\hbar} \sim 2 e^{-\tau(E_+ + E_-)/2\hbar} \cosh[\tau(E_+ - E_-)/2\hbar] \\ &\text{pour } \hbar \rightarrow 0, \quad \tau \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (8.4)$$

La fonction de partition est donc dominée par le développement perturbatif de la demi-somme  $E_0 = \frac{1}{2}(E_+ + E_-)$ , et ne dépend de la différence non perturbative entre  $E_+$  et  $E_-$  qu'à l'ordre  $(E_+ - E_-)^2$ .

Pour calculer la différence  $E_+ - E_-$ , il est plus commode d'évaluer la quantité  $\text{tr P} e^{-\tau H/\hbar}$ . Dans les mêmes limites  $\hbar \rightarrow 0$  puis  $\tau \rightarrow \infty$ , on trouve

$$\text{tr P} e^{-\tau H/\hbar} \sim e^{-\tau E_+/\hbar} - e^{-\tau E_-/\hbar} \sim -2 \sinh[\tau(E_+ - E_-)/2\hbar] e^{-\tau(E_+ + E_-)/2\hbar}. \quad (8.5)$$

Comme  $E_+ - E_-$  s'annule à tous les ordres en  $\hbar$ , à l'ordre dominant (puisque  $E_{\pm} \sim \frac{1}{2}\hbar$ )

$$\text{tr P} e^{-\tau H/\hbar} \sim -\tau e^{-\tau/2} \frac{E_+ - E_-}{\hbar}. \quad (8.6)$$

Il est en fait commode de considérer le rapport entre les quantités (8.4) et (8.5) :

$$\text{tr P} e^{-\tau H/\hbar} / \text{tr} e^{-\tau H/\hbar} \sim -\frac{\tau}{2\hbar}(E_+ - E_-). \quad (8.7)$$

La représentation par intégrale de chemin de  $\text{tr P} e^{-\tau H/\hbar}$  ne diffère de la représentation de la fonction de partition que par les conditions aux limites. En effet, en termes d'éléments de matrice

$$\langle x | \text{P} | x' \rangle = \delta(x + x').$$

En conséquence, pour tout opérateur  $U$ ,

$$\text{tr P} U = \int dy dx \delta(y + x) \langle x | U | y \rangle = \int dx \langle x | U | -x \rangle.$$

Appliquant cette remarque à l'intégrale de chemin, on en déduit

$$\text{tr P} e^{-\tau H/\hbar} = \int_{x(-\tau/2)=-x(\tau/2)} [dx(t)] \exp[-\mathcal{S}(x)/\hbar] \quad (8.8)$$

avec la même action (8.2).

### 8.1.2 Instantons

Alors que l'intégrale de chemin représentant  $\text{tr} e^{-\tau H/\hbar}$  est dominée par les cols constants  $x(t) = \pm 1/2$ , ces chemins ne contribuent pas à l'intégrale (8.8) car ils ne satisfont pas aux conditions aux limites. Ce n'est pas trop surprenant puisque nous avons montré que la différence  $E_+ - E_-$  s'annule plus vite que toute puissance de  $\hbar$ . Nous devons donc rechercher des solutions non constantes des équations du mouvement euclidien classique. De plus, l'action de ces solutions doit avoir une limite finie dans la limite qui nous intéresse :  $\tau \rightarrow \infty$ , sinon elles ne contribuent pas. On associe à de telles solutions le nom d'*instanton* comme si elles représentaient des particules.

Comme à la fois le terme cinétique et le potentiel sont positifs, cette condition impose que tous deux s'annulent pour  $|t| \rightarrow \infty$ . En particulier,

$$x(-\infty) = \pm \frac{1}{2} \quad \text{et} \quad x(+\infty) = \mp \frac{1}{2}.$$

Le clivage entre les deux niveaux d'énergie dépend donc de l'existence de solutions de type instanton reliant les deux minima symétriques du potentiel.

L'équation du col, ou équation du mouvement classique en temps euclidien, ou imaginaire, est

$$-\ddot{x}(t) + 2x(t)(x^2(t) - \frac{1}{4}) = 0. \quad (8.9)$$

Dans la limite  $\tau \rightarrow \infty$ , cette équation a en effet deux familles de solutions avec action finie :

$$x_c^\pm(t) = \pm \frac{1}{2} \tanh(t - t_0)/2, \quad (8.10)$$

où  $t_0$  est une constante d'intégration liée à l'invariance par translation dans le temps pour  $\tau$  infini.

La valeur correspondante de l'action est

$$\mathcal{S}(x_c) = \frac{1}{6}. \quad (8.11)$$

Une fois le col déterminé, il reste à calculer l'intégrale gaussienne des fluctuations autour du col, un problème assez subtil dont nous donnerons quelques éléments importants plus loin. Notons cependant que, comme nous avons trouvé deux familles de cols dégénérés dépendant d'un paramètre  $t_0$  qui pour  $\tau$  grand mais fini varie dans un intervalle de longueur  $\tau$ , la somme sur tous les cols engendre un facteur  $\tau$ , en accord avec l'expression (8.7).

Le calcul complet donne alors

$$\text{tr P } e^{-\tau H/\hbar} \sim 2\sqrt{\frac{\hbar}{\pi}} \tau e^{-\tau/2} e^{-1/6\hbar}. \quad (8.12)$$

Utilisant l'équation (8.7), nous trouvons le comportement asymptotique de  $E_+ - E_-$  pour  $\hbar \rightarrow 0$  :

$$E_+ - E_- \underset{\hbar \rightarrow 0}{=} -2\sqrt{\frac{\hbar}{\pi}} e^{-1/6\hbar} (1 + O(\hbar)). \quad (8.13)$$

La différence décroît exponentiellement pour  $\hbar \rightarrow 0$ , et donc plus vite que toute puissance de  $\hbar$ , en accord avec les arguments perturbatifs.

## 8.2 Minima dégénérés : approximation semi-classique

Pour évaluer la contribution des instantons à l'ordre dominant, il est commode de considérer un potentiel  $V$  général avec les mêmes propriétés : le potentiel est une fonction régulière, paire ; il est minimum en deux points symétriques  $\pm x_0 \neq 0$  où il s'annule :

$$V(x) = V(-x), \quad V(\pm x_0) = 0, \quad V \geq 0.$$

### 8.2.1 Instantons

Pour les raisons expliquées en section 8.1.2, nous calculons la fonction

$$\text{tr P e}^{-\tau H/\hbar} = \int_{x(\tau/2)=-x(-\tau/2)} [dx(t)] \exp[-\mathcal{S}(x)/\hbar] \quad (8.14)$$

avec

$$\mathcal{S}(x) = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \left[ \frac{1}{2} \dot{x}^2(t) + V(x(t)) \right] dt, \quad (8.15)$$

pour  $\hbar \rightarrow 0$  et  $\tau \rightarrow \infty$ .

L'équation des cols, obtenue en variant l'action euclidienne, est identique à l'équation du mouvement classique dans le potentiel  $-V(x)$  :

$$-\ddot{x} + V'(x) = 0 \quad (8.16)$$

avec les conditions aux limites  $x(-\infty) = -x(\infty)$ .

De nouveau, comme à la fois le terme cinétique et le potentiel sont positifs, une solution d'action finie pour  $\tau \rightarrow \infty$  doit relier des minima du potentiel. Dans la limite  $\tau \rightarrow \infty$ , pour les solutions d'action finie, l'équation s'intègre donc en

$$\frac{1}{2} \dot{x}_c^2(t) - V(x_c(t)) = 0. \quad (8.17)$$

Par ailleurs, si  $x_c(t)$  est solution,  $x_c(t - t_0)$  est solution. Pour  $\tau$  grand mais fini, le paramètre  $t_0$  varie dans un intervalle de longueur  $\tau$ .

Les solutions sont donc données par

$$t - t_0 = \pm \int_0^{x_c} \frac{dy}{\sqrt{2V(y)}}.$$

Par ailleurs, on déduit de l'équation (8.17) que l'action correspondante peut s'écrire

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \dot{x}_c^2(t) > 0. \quad (8.18)$$

### 8.2.2 Intégration gaussienne et mode zéro

Développons l'action  $\mathcal{S}(x)$  autour d'un col, posant

$$x(t) = x_c(t) + r(t), \quad r(\tau/2) = -r(-\tau/2).$$

Nous trouvons

$$\mathcal{S}(x_c + r) = A + \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \left[ \frac{1}{2} \dot{r}^2(t) + V''(x_c(t)) r^2(t) \right] + O(r^3).$$

La forme quadratique en  $r$  peut se réécrire

$$\Sigma(r) = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \left[ \frac{1}{2} \dot{r}^2(t) + \frac{1}{2} V''(x_c(t)) r^2(t) \right] = \frac{1}{2} \int dt_1 dt_2 r(t_1) M(t_1, t_2) r(t_2),$$

où l'opérateur

$$M(t_1, t_2) = \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta x_c(t_1) \delta x_c(t_2)} = [-d_{t_1}^2 + V''(x_c(t_1))] \delta(t_1 - t_2). \quad (8.19)$$

Son action sur une fonction  $r(t)$  est donnée par

$$\int dt' M(t, t') r(t') = \frac{\delta}{\delta r(t)} \Sigma(r) = -\ddot{r}(t) + V''(x_c(t)) r(t). \quad (8.20)$$

L'opérateur  $M$  a donc la forme d'un hamiltonien quantique hermitien,  $t$  jouant le rôle de variable de position, avec potentiel  $V''(x_c(t))$ . Toutes ses valeurs propres sont donc réelles ainsi que son déterminant.

Notons que dans la limite  $\tau \rightarrow \infty$  les seules trajectoires qui contribuent à l'intégrale de chemin satisfont  $r(\pm\infty) = 0$  de sorte que la condition aux limites est automatiquement satisfaite.

Naïvement, l'intégrale gaussienne sur  $r(t)$  conduit alors à

$$\text{tr P e}^{-\tau/\hbar} \propto e^{-A/\hbar} \int [dr(t)] \exp(-\Sigma(r)) \propto \frac{e^{-A/\hbar}}{\sqrt{\det(M/\hbar)}},$$

qu'il faut évaluer dans la limite  $\tau \rightarrow \infty$ .

*Le mode zéro.* Dérivant l'équation du mouvement (8.16) par rapport à  $t$ , on trouve

$$[-d_t^2 + V''(x_c(t))] \dot{x}_c(t) = 0. \quad (8.21)$$

Comparant avec l'équation (8.20), on reconnaît l'action de  $M$  sur  $\dot{x}_c$ . Comme la fonction  $\dot{x}_c(t)$  est de carré sommable (équation (8.18)), cette équation implique que  $\dot{x}_c(t)$  est un vecteur propre de  $M$  avec valeur propre nulle :

$$M \dot{x}_c = 0. \quad (8.22)$$

Le calcul gaussien naïf donne un résultat proportionnel à  $(\det M)^{-1/2}$ , qui est donc infini !

Ce résultat ne devrait pas trop nous surprendre : comme nous l'avons noté plus haut, à cause de l'invariance par translation du temps, il existe une famille à un paramètre de cols dégénérés continûment reliés. Une variation infinitésimale de  $x_c(t)$  qui correspond à une variation du paramètre  $t_0$ , et est donc proportionnelle à  $\dot{x}_c$ , laisse l'action invariante. Le problème que nous rencontrons ici n'est en rien spécifique aux intégrales de chemin comme l'exemple d'une intégrale ordinaire va le montrer. Sa solution nécessite l'introduction de coordonnées collectives associées aux symétries de l'intégrant.

Une autre remarque très importante s'impose également. La théorie générale des fonctions orthogonales montre que le nombre de zéros des fonctions propres de l'hamiltonien  $M$  est directement lié à la hiérarchie des valeurs propres : le fondamental de  $M$  n'a pas de zéro, le premier état excité a un zéro... Dans le cas qui nous occupe, la fonction propre  $\dot{x}_c(t)$  ne s'annule pas (cf. figure 8.1) : c'est donc le fondamental, et toutes les autres valeurs propres de  $M$  sont positives.

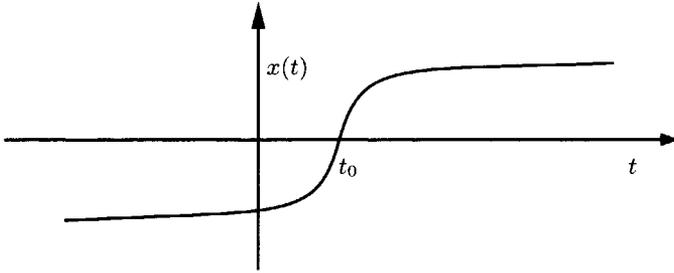


FIG. 8.1 – Solution de type instanton.

### 8.3 Coordonnées collectives et intégration gaussienne

Nous allons d'abord illustrer le problème du mode zéro par l'exemple d'une intégrale ordinaire dans lequel l'intégrand est invariant par un groupe, ici le groupe des rotations du plan. Nous montrerons comment le problème peut être résolu par l'introduction de coordonnées collectives au moyen de la méthode de Faddeev-Popov et nous généraliserons ensuite la méthode à l'intégrale de chemin.

#### 8.3.1 Modes zéro dans des intégrales simples

Prenons l'exemple d'une intégrale simple de type (3.27) :

$$I(g) = \int d^2\mathbf{x} e^{-S(\mathbf{x})/g}, \quad S(\mathbf{x}) = -\mathbf{x}^2/2 + (\mathbf{x}^2)^2/4, \quad (8.23)$$

où  $\mathbf{x}$  est un vecteur à deux composantes  $x_\mu$ , et l'intégrand ne dépend que de la longueur du vecteur  $\mathbf{x}$ .

Pour  $g \rightarrow 0_+$ , cette intégrale peut être calculée par la méthode du col. Une approche naïve est la suivante : Les cols sont solutions de l'équation

$$\frac{\partial S}{\partial x_\mu} = -x_\mu(1 - \mathbf{x}^2) = 0. \quad (8.24)$$

L'origine  $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ , qui correspond à un maximum relatif, n'est pas un col. Les minima sont donnés par

$$|\mathbf{x}| = 1. \quad (8.25)$$

À cause de l'invariance par rotation de l'intégrand, nous trouvons ici aussi une famille à un paramètre de cols dégénérés, appartenant à un cercle puisque seule la longueur du vecteur  $\mathbf{x}$  est déterminée par l'équation du col. Si nous isolons un col et évaluons sa contribution dans l'approximation gaussienne,

nous sommes conduit à calculer le déterminant de la matrice

$$M_{\mu\nu} = \frac{\partial^2 S}{\partial x_\mu \partial x_\nu} \Big|_{|\mathbf{x}|=1} = 2x_\mu x_\nu, \quad (8.26)$$

qui est le projecteur sur  $\mathbf{x}$  et a donc une valeur propre nulle.

La solution de ce problème est ici évidente : il est nécessaire de calculer l'intégrale sur la variable angulaire, qui paramètre l'ensemble des cols, exactement ; seule l'intégrale sur la variable radiale peut être évaluée par la méthode du col.

Comme l'introduction des variables qui décrivent les cols n'est pas toujours aussi évidente qu'ici, la méthode dite de Faddeev-Popov (qui a permis de quantifier les théories de jauge non-abéliennes) peut souvent être utilisée. On part d'une fonction du vecteur qui n'est pas invariante par rotation et on l'intègre sur le groupe des rotations. Par exemple

$$\int_0^{2\pi} d\theta \delta(x_1 \sin \theta + x_2 \cos \theta) = \frac{2}{|\mathbf{x}|},$$

où  $\delta$  est la fonction de Dirac. On introduit cette identité dans l'intégrale initiale sous la forme

$$I(g) = \frac{1}{2} \int d^2\mathbf{x} \int_0^{2\pi} d\theta |\mathbf{x}| \delta(x_1 \sin \theta + x_2 \cos \theta) e^{-S(\mathbf{x})/g}.$$

On inverse alors l'ordre des intégrations et on fait un changement de variables  $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{y}$  qui a la forme d'une rotation :

$$y_1 = x_1 \cos \theta - x_2 \sin \theta, \quad y_2 = x_1 \sin \theta + x_2 \cos \theta.$$

La fonction  $e^{-S}/g$  et l'élément d'intégration ne sont pas affectés. Donc

$$\begin{aligned} I(g) &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\theta \int d^2\mathbf{y} |\mathbf{y}| \delta(y_2) e^{-S(\mathbf{y})/g} \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_{-\infty}^{+\infty} dy_1 |y_1| e^{-S(y_1)/g} \\ &= 2\pi \int_0^{+\infty} y_1 dy_1 e^{-S(y_1)/g}, \end{aligned}$$

qui est bien l'intégrale radiale.

### 8.3.2 Coordonnées collectives et intégrale de chemin

Dans le cas de l'intégrale de chemin, il est également nécessaire d'intégrrer exactement sur les variables qui paramètrent les cols, dans la solution de l'équation (8.17) le paramètre de translation du temps. Il faut trouver un

ensemble de variables d'intégration dans lequel le paramètre de temps apparaît explicitement. C'est la méthode dite des *coordonnées collectives*. Ce problème est un peu plus subtil que dans l'exemple 8.23 parce que le nombre de variables d'intégration est infini.

*Coordonnées collectives et méthode de Faddeev-Popov.* Pour introduire une variable d'intégration associée aux translations dans le temps (la coordonnée collective), nous utilisons de nouveau une méthode analogue à celle de Faddeev-Popov, adaptée à cette nouvelle situation.

Nous notons maintenant par  $x_c(t)$  une solution particulière de l'équation de col (8.17) correspondant à  $t_0 = 0$  et la solution générale est  $x_c(t - t_0)$ .

Nous partons de l'identité

$$1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\xi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda e^{-\lambda^2/2\xi},$$

où  $\xi$  est une constante arbitraire. Nous faisons alors le changement de variables  $\lambda \mapsto t_0$  avec

$$\lambda = \int dt \dot{x}_c(t)(x(t + t_0) - x_c(t)).$$

Nous obtenons l'identité

$$1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\xi}} \int dt_0 \left[ \int dt \dot{x}_c(t)\dot{x}(t + t_0) \right] \times \exp \left\{ -\frac{1}{2\xi} \left[ \int dt \dot{x}_c(t)(x(t + t_0) - x_c(t)) \right]^2 \right\}. \quad (8.27)$$

La constante  $\xi$  a été introduite partiellement pour des raisons cosmétiques, mais doit être considérée d'ordre  $\hbar$ .

Nous insérons l'identité (8.27) dans l'intégrale de chemin (8.14) :

$$\text{tr P e}^{-\tau H/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\xi}} \int dt_0 \int [dx(t)] \left[ \int dt \dot{x}_c(t)\dot{x}(t + t_0) \right] \exp[-\mathcal{S}_\xi(x)/\hbar],$$

où l'action totale

$$\mathcal{S}_\xi(x) = \mathcal{S}(x) + \frac{\hbar}{2\xi} \left[ \int dt \dot{x}_c(t)(x(t + t_0) - x_c(t)) \right]^2$$

n'est alors plus invariante par translation du temps, car le temps apparaît de façon explicite à travers la fonction  $x_c(t)$ .

La fonction  $x(t + t_0)$  peut maintenant être rebaptisée  $x(t)$ . Ceci affecte  $\mathcal{S}(x)$ , mais nous pouvons faire dans l'action le changement de variables  $t - t_0 \mapsto t$ . De plus, pour  $\tau = \infty$ , on retrouve l'action initiale car les bornes d'intégration ne sont pas modifiées.

L'intégrand ne dépend plus alors de la variable  $t_0$  et l'intégrale sur  $t_0$  est immédiate. Pour  $\tau \rightarrow \infty$ ,

$$\text{tr P } e^{-\tau H/\hbar} \sim \frac{\tau}{\sqrt{2\pi\xi}} \int [dx(t)] \left[ \int dt \dot{x}_c(t) \dot{x}(t) \right] \exp[-\mathcal{S}_\xi(x)/\hbar]$$

avec

$$\mathcal{S}_\xi(x) = \mathcal{S}(x) + \frac{\hbar}{2\xi} \left[ \int dt \dot{x}_c(t) (x(t) - x_c(t)) \right]^2$$

### 8.3.3 Intégration gaussienne

L'équation du col devient

$$\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta x(t)} + \frac{\hbar}{\xi} \dot{x}_c(t) \int dt' \dot{x}_c(t') (x(t') - x_c(t')) = 0. \quad (8.28)$$

Cette équation a clairement comme solution  $x(t) = x_c(t)$ . L'opérateur dérivée seconde au col, dont le déterminant intervient dans l'intégration gaussienne au voisinage du col, est modifié par les termes supplémentaires :

$$\frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta x_c(t_1) \delta x_c(t_2)} \mapsto M(t_1, t_2) \equiv \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta x_c(t_1) \delta x_c(t_2)} + \frac{\hbar}{\xi} \dot{x}_c(t_1) \dot{x}_c(t_2).$$

Le terme additionnel est un projecteur sur le vecteur propre de  $\delta^2 \mathcal{S} / \delta x_c \delta x_c$  correspondant à la valeur propre nulle. L'opérateur modifié a donc les mêmes vecteurs propres et les mêmes valeurs propres que l'opérateur initial sauf une : la valeur propre qui correspond au vecteur propre  $\dot{x}_c$  est maintenant

$$\mu = \hbar \|\dot{x}_c\|^2 / \xi \quad (8.29)$$

au lieu de 0. Le problème de la valeur propre nulle est donc bien résolu.

Pour normaliser l'intégrale de chemin, nous la comparons à la fonction de partition  $\mathcal{Z}_0(\tau/\hbar)$  de l'oscillateur harmonique :

$$\mathcal{Z}_0(\tau/\hbar) = \int_{x(-\tau/2)=x(\tau/2)} [dx(t)] \exp \left\{ -\frac{1}{2\hbar} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt [\dot{x}^2(t) + x^2(t)] \right\}, \quad (8.30)$$

qui pour  $\tau \rightarrow \infty$  se réduit à  $e^{-\tau/2}$ . Dans cette limite, l'intégrale gaussienne s'exprime en terme de l'opérateur

$$M_0(t_1, t_2) = \left[ -(\mathbf{d}_{t_1})^2 + 1 \right] \delta(t_1 - t_2). \quad (8.31)$$

Comme nous le montrons plus loin, ce qu'il est possible de calculer est le déterminant du produit des opérateurs  $(M + \varepsilon)(M_0 + \varepsilon)^{-1}$ , où  $\varepsilon$  est une constante arbitraire. Pour  $\varepsilon \rightarrow 0$ , cette expression s'annule linéairement en  $\varepsilon$  et nous posons donc

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \det(M + \varepsilon) (M_0 + \varepsilon)^{-1} \equiv \det' M M_0^{-1}. \quad (8.32)$$

En réalité, ce que nous cherchons à calculer a la forme (les facteurs  $\hbar$  se compensant dans le rapport des intégrales gaussiennes)

$$\det(M + \mu |0\rangle \langle 0|) M_0^{-1} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \det(M + \varepsilon + \mu |0\rangle \langle 0|) (M_0 + \varepsilon)^{-1},$$

où  $|0\rangle$  est le vecteur proportionnel à  $\dot{x}_c$  mais de norme unité. Alors, avec un peu d'algèbre,

$$\begin{aligned} \det(M + \varepsilon + \mu |0\rangle \langle 0|) (M_0 + \varepsilon)^{-1} &= \det(M + \varepsilon) (M_0 + \varepsilon)^{-1} \\ &\quad \times \det(1 + \mu |0\rangle \langle 0| (M + \varepsilon)^{-1}) \\ &= (1 + \mu/\varepsilon) \det(M + \varepsilon) (M_0 + \varepsilon)^{-1}. \end{aligned}$$

Dans la limite  $\varepsilon \rightarrow 0$ , on trouve donc

$$\det' M M_0^{-1} \|\dot{x}_c\|^2 \hbar / \xi.$$

Ceci conduit au facteur

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\xi}} \tau \|\dot{x}_c\|^2.$$

En conclusion, l'intégration gaussienne sur les fluctuations autour du col engendre le facteur

$$\frac{\tau}{\sqrt{2\pi\hbar}} \|\dot{x}_c\| (\det' M M_0^{-1})^{-1/2} e^{-\tau/2}.$$

Comme attendu, la dépendance en  $\xi$  a disparu.

Prenant en compte les deux familles de cols et le rapport 2 entre  $\mathcal{Z}_0(\tau/\hbar)$  et  $\text{tr} e^{-\tau H/\hbar}$  pour  $\tau \rightarrow \infty$ , on obtient

$$\text{tr} P e^{-\tau H/\hbar} / \text{tr} e^{-\tau H/\hbar} \sim \frac{\tau}{\sqrt{2\pi\hbar}} \|\dot{x}_c\| \left[ \det' M (\det M_0)^{-1} \right]^{-1/2} e^{-A/\hbar}, \quad (8.33)$$

et donc, utilisant le résultat (8.7), le clivage des niveaux

$$E_- - E_+ \sim 2\sqrt{\frac{\hbar}{2\pi}} \|\dot{x}_c\| \left[ \det' M (\det M_0)^{-1} \right]^{-1/2} e^{-A/\hbar}$$

### 8.3.4 Application au double puits

Une solution des équations classiques est

$$x_c(t) = \frac{1}{2} \tanh(t/2).$$

Par ailleurs (équation (8.18))

$$\|x_c\| = \sqrt{A} = \frac{1}{\sqrt{6}}.$$

Enfin

$$M = -d_t^2 + 1 - \frac{3}{2 \cosh^2(t/2)}.$$

Le potentiel de ce hamiltonien est du type Bargmann-Wigner : l'équation de Schrödinger est explicitement soluble et la diffusion se fait sans réflexion (la matrice  $S$  est présentée dans l'exercice 9.2 ; ses pôles donnent le spectre). Le déterminant peut être calculé explicitement. De façon générale, pour

$$M = -d_t^2 + 1 - \frac{\lambda(\lambda + 1)\omega^2}{\cosh^2(\omega t)},$$

on trouve

$$\det(M + \varepsilon)(M_0 + \varepsilon)^{-1} = \frac{\Gamma(1+z)\Gamma(z)}{\Gamma(1+\lambda+z)\Gamma(z-\lambda)}, \quad (8.34)$$

avec

$$z = \sqrt{1 + \varepsilon}/\omega.$$

Ici  $\omega = 1/2$ ,  $\lambda = 2$  et donc  $z - 2 \sim \varepsilon$ ,

$$\det(M + \varepsilon)(M_0 + \varepsilon) = \frac{(z-2)(z-1)}{(z+1)(z+2)} \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} \frac{\varepsilon}{12}.$$

On en déduit

$$E_- - E_+ \sim 2\sqrt{\frac{\hbar}{\pi}} e^{-1/6\hbar}.$$

*Remarques.*

(i) Nous n'avons fait le calcul de la contribution de l'instanton que pour  $\tau = \infty$ , limite dans laquelle l'action avec conditions aux limites est invariante par translation dans le temps. Le calcul pour  $\tau$  grand, mais fini, conduit à quelques subtilités supplémentaires.

(ii) Il est possible de prendre en compte les effets semi-classiques à tous les ordres dans un développement en puissances de  $e^{-1/6\hbar}$ . Cela a conduit à une conjecture, depuis démontrée, sur la généralisation de la formule de Bohr-Sommerfeld au cas de potentiels à minima dégénérés. Les valeurs propres  $E$  de l'hamiltonien sont les solutions d'une équation qui peut être écrite dans le cas du double puits quartique

$$\Gamma^2\left(\frac{1}{2} - B(E, \hbar)\right) \left(-\frac{2}{\hbar}\right)^{2B(E, \hbar)} e^{-A(E, \hbar)} + 2\pi = 0 \quad (8.35)$$

avec

$$B(E, \hbar) = -B(E, -\hbar) = \frac{E}{\hbar} + \sum_{k=1}^{\infty} \hbar^k b_{k+1}(E/\hbar), \quad (8.36)$$

$$A(E, \hbar) = -A(E, -\hbar) = \frac{1}{3\hbar} + \sum_{k=1}^{\infty} \hbar^k a_{k+1}(E/\hbar). \quad (8.37)$$

Les coefficients  $a_k(s)$  et  $b_k(s)$  sont des polynômes de  $s$  pairs ou impairs de degré  $k$ .

Le développement perturbatif pour  $\hbar \rightarrow 0$  consiste à supposer  $E = O(\hbar)$ , et le développement semi-classique  $E = O(1)$ , ce qui revient à sommer les termes de degré le plus élevé en  $E$  à tous les ordres en  $\hbar$ .

## 8.4 Instantons et états métastables

Nous allons maintenant étudier une autre situation où l'effet tunnel joue un rôle : la désintégration des états métastables. On suppose une particule quantique initialement localisée dans un puits de potentiel qui ne correspond qu'à un minimum relatif. Un exemple d'un tel potentiel est exhibé dans la figure 8.2, où l'origine ne correspond pas au minimum absolu du potentiel. Par un effet purement quantique, la particule a une probabilité finie par unité de temps de quitter le puits et c'est cette probabilité que nous voulons déterminer dans la limite  $\hbar \rightarrow 0$ .

Par ailleurs, nous allons nous intéresser uniquement à des états initiaux proches du pseudo-fondamental dans le puits (l'équivalent d'une particule classique au repos). Nous allons voir que, comme dans le calcul perturbatif, nous pouvons utiliser la fonction de partition  $\mathcal{Z}(\tau/\hbar) = \text{tr} e^{-\tau H/\hbar}$  pour  $\tau \rightarrow \infty$  (cf. sections 2.9, 3.1).

*Cas métastable.* Pour un potentiel du type exhibé en figure 8.2, l'origine n'est pas le minimum absolu du potentiel. Un état correspondant à une fonction d'onde  $\psi(t)$ , localisée au temps initial  $t = 0$  ( $t$  est ici le *temps physique réel* de l'équation de Schrödinger) dans le puits du potentiel près de  $q = 0$ , se désintègre par effet tunnel. Pour imaginer comment calculer le taux de désintégration, nous pouvons raisonner de la manière suivante : nous faisons varier

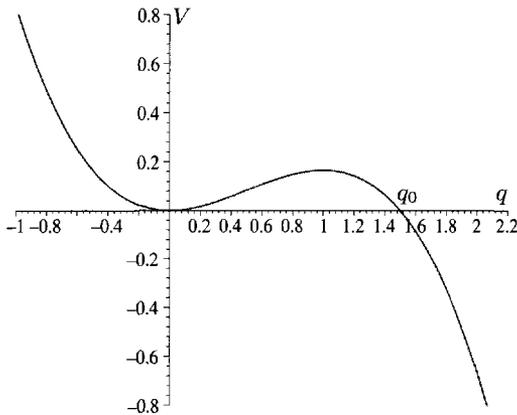


FIG. 8.2 – Puits à états métastables.

un paramètre du potentiel de façon à passer continûment de la situation où l'origine est un minimum absolu à la situation où il n'est plus qu'un minimum relatif. Dans le cas stable, la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps associée au fondamental d'énergie  $E_0$  se comporte comme

$$\psi_0(t) \sim e^{-iE_0 t/\hbar}.$$

Après prolongement analytique,  $E_0$  devient complexe et donc  $\psi_0(t)$  décroît exponentiellement avec le temps :

$$|\psi_0(t)| \underset{t \rightarrow +\infty}{\sim} e^{-|\operatorname{Im} E_0|t/\hbar}.$$

Le paramètre  $|\hbar/\operatorname{Im} E_0|$  est le temps de vie de l'état maintenant métastable de fonction d'onde  $\psi(t)$ . En réalité, la désintégration d'un état peut impliquer aussi la partie imaginaire du prolongement de tous les états excités. Cependant, nous nous attendons pour des raisons intuitives à ce que, quand la partie réelle de l'énergie augmente, le temps de vie décroît, ce qui peut en effet être facilement vérifié dans les exemples. Donc, à temps long, seule la composante correspondant au fondamental survit. Nous nous proposons maintenant de calculer  $\operatorname{Im} E_0$  pour  $\hbar \rightarrow 0$ .

### 8.4.1 Une intégrale simple

Nous étudions d'abord une intégrale simple qui présente une situation quelque peu analogue :

$$I(\lambda, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-S(x)},$$

$$S(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}\lambda x^3 + \frac{1}{4}\varepsilon x^4.$$

Initialement, les deux paramètres  $\varepsilon$  et  $\lambda$  sont positifs. Pour  $\varepsilon > \lambda^2/4$ , la fonction  $S(x)$  est minimum à  $x = 0$ . La fonction  $I(\lambda, \varepsilon)$  peut être développée en puissances de  $\lambda$  :

$$I(\lambda, \varepsilon) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^k}{3^k k!} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^{3k} e^{-x^2/2 - \varepsilon x^4/4},$$

et le développement est convergent.

Chaque terme du développement a une limite finie quand  $\varepsilon \rightarrow 0$  et formellement

$$I(\lambda, 0) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^k}{3^k k!} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^{3k} e^{-x^2/2}$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda^{2k} 2^{3k-1/2} \Gamma(3k+1/2)}{3^{2k} (2k)!}. \quad (8.38)$$

Comme l'intégrale donnant  $I(\lambda, 0)$  ne converge pas, on peut se demander quel est le sens de ce développement. Notons que la série limite (8.38) ne converge pour aucune valeur de  $\lambda$ . On appelle une telle série une série divergente. On parle aussi de développement asymptotique. Une série asymptotique ne définit pas, en général, une fonction analytique unique, mais peut en constituer une très bonne approximation quand le paramètre de développement est suffisamment petit et que l'on ne retient qu'un nombre fini de termes (*cf.* la formule de Stirling (1.35) pour la fonction  $\Gamma$ ).

Cependant, si au lieu de faire tendre  $\varepsilon$  vers zéro par valeurs réelles positives, on passe par des valeurs complexes

$$\pi/3 < \text{Arg } \varepsilon < \pi/2 \quad \text{ou} \quad -\pi/2 < \text{Arg } \varepsilon < -\pi/3,$$

alors le contour d'intégration initial peut être déformé dans les contours

$$C_{\pm} : \text{Im } x = 0 \text{ pour } \text{Re } x > 0, \quad \text{Arg } x = \pi \pm 5\pi/24 \text{ pour } \text{Re } x < 0,$$

respectivement, et l'intégrale finale converge toujours mais définit deux fonctions limites suivant le choix du contour :

$$I_{\pm}(\lambda) = \oint_{C_{\pm}} e^{-x^2/2 - \lambda x^3/3} dx.$$

Les deux fonctions sont complexes conjuguées :

$$I_{-}(\lambda) = \bar{I}_{+}(\lambda).$$

Quand  $\lambda \rightarrow 0$ , ces intégrales peuvent être évaluées par la méthode du col. Les cols sont donnés par

$$S'(x) = x + \lambda x^2 = 0 \Rightarrow x = 0 \quad \text{ou} \quad x = -1/\lambda.$$

Les valeurs de  $S(x)$  correspondantes sont

$$S(0) = 0, \quad S(-1/\lambda) = 1/6\lambda^2.$$

Pour  $\lambda \rightarrow 0$ , le col dominant est toujours  $x = 0$ , et le développement (8.38) en puissances de  $\lambda$  est bien le développement engendré par la méthode du col. À tous les ordres en  $\lambda$ , les deux fonctions ont un développement réel identique. Le second col est sous-dominant et donne une contribution négligeable.

La différence entre les deux intégrales est purement imaginaire. Elle est donnée par le contour  $C_{+} - C_{-}$  qui peut être déformé de façon à ne plus passer par l'origine. L'intégrale de contour ainsi obtenue est dominée pour  $\lambda \rightarrow 0$  par le second col. Les parties imaginaires ne se voient pas dans le développement (8.38) parce qu'elles décroissent plus vite que toute puissance. Un calcul de la contribution du col donne alors à l'ordre dominant

$$I_{+}(\lambda) - I_{-}(\lambda) = 2i \text{Im } I_{+}(\lambda) \sim i\sqrt{2\pi} e^{-1/6\lambda^2}.$$

### 8.4.2 Intégrale de chemin et méthode du col : instantons

Nous voulons maintenant appliquer une stratégie analogue à l'intégrale de chemin. Nous partons d'une situation où dans l'hamiltonien

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + V(q),$$

le potentiel a un minimum absolu à l'origine avec

$$V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2q^2 + O(q^3).$$

Par prolongement analytique dans un paramètre de  $V$ , nous passons à une situation où le minimum du potentiel à  $q = 0$  n'est plus que relatif et il existe donc des valeurs de  $q$  pour lesquelles  $V < 0$ . Nous écartons ci-dessous le cas particulier où le minimum du potentiel est dégénéré. Il a déjà été étudié en sections 8.1 à 8.3.2.

Nous calculons ici  $\mathcal{Z}(\tau/\hbar) = \text{tr} e^{-\tau H/\hbar}$  pour  $\tau \rightarrow \infty$ . Le résultat doit prendre la forme

$$\text{Im} \mathcal{Z}(\tau/\hbar) \sim \text{Im} e^{-\tau E_0/\hbar} \sim -\frac{\tau}{\hbar} \text{Im} E_0 e^{-\tau \text{Re} E_0/\hbar}.$$

À l'ordre dominant en  $\hbar$ , nous pouvons remplacer  $\text{Re} E_0$  par sa valeur dans l'approximation harmonique, et donc

$$\text{Im} \mathcal{Z}(\tau/\hbar) \sim -\frac{\omega\tau}{\hbar} e^{-\omega\tau/2} \text{Im} E_0. \quad (8.39)$$

*Instantons.* Nous cherchons des cols non triviaux de l'intégrale de chemin. Les équations de col sont obtenues en variant l'action euclidienne

$$-m\ddot{q} + V'(q) = 0 \quad (8.40)$$

avec  $q(-\tau/2) = q(\tau/2)$ .

Les fonctions

$$q(t) = q_{\text{ext.}} = \text{constante}, \quad (8.41)$$

où  $q_{\text{ext.}}$  correspond à un extremum du potentiel, sont évidemment des solutions. Nous ne prenons pas en compte les cols avec  $V < 0$  pour les raisons déjà expliquées dans le cas de l'intégrale simple : le prolongement analytique a conduit à un contour d'intégration qui évitent de tels cols. D'un autre côté, la contribution des cols correspondant à des extrema où  $V > 0$  est d'ordre  $e^{-\tau V_{\text{ext.}}/\hbar}$  et donc négligeable pour  $\tau \rightarrow \infty$  et  $\hbar \ll 1$  puisque nous ne prenons en compte que des niveaux d'énergie d'ordre  $\hbar$ .

Nous devons chercher des solutions qui ont une action qui reste finie quand  $\tau \rightarrow +\infty$ , c'est-à-dire des solutions de type *instanton*.

Les solutions de l'équation (8.40) avec conditions aux limites périodiques correspondent à des mouvements périodiques en *temps réel* dans le potentiel

$-V(q)$ . Il est clair qu'il existe des trajectoires oscillant autour des minima de  $-V$ . Une première intégration de l'équation du mouvement (8.40), donne

$$\frac{1}{2}m\dot{q}^2 - V(q) = \epsilon,$$

avec  $\epsilon < 0$ . Appelant  $q_- < q_+$  les deux points où la vitesse  $\dot{q}$  s'annule, nous trouvons pour la période d'une telle solution

$$\tau = 2\sqrt{m} \int_{q_-}^{q_+} \frac{dq}{\sqrt{2V(q) + 2\epsilon}}.$$

La période  $\tau$  ne peut diverger que pour des constantes  $\epsilon$  telles que  $V(q) + \epsilon$  a un zéro double à  $q_-$  ou  $q_+$ , ce qui implique que  $V'(q)$  s'annule. Par ailleurs, l'action ne peut rester finie dans cette limite que si  $V(q(t))$  s'annule pour  $|t| \rightarrow \infty$ , ainsi que  $\dot{q}$ . Ces conditions ne sont compatibles que si  $\epsilon$  et donc par exemple  $q_-$  tendent vers zéro. La trajectoire classique s'approche de plus en plus de l'origine. La limite  $q_0 > 0$  de  $q_+$  est alors le point où la vitesse sur la trajectoire s'annule. Dans la limite  $\tau$  infini, la solution classique est donnée par ( $t_0$  est une constante d'intégration)

$$t - t_0 = \sqrt{m} \int_{q_0}^q \frac{dq'}{\sqrt{2V(q')}} \quad \text{pour } t < t_0,$$

$$t - t_0 = \sqrt{m} \int_q^{q_0} \frac{dq'}{\sqrt{2V(q')}} \quad \text{pour } t > t_0.$$

Une remarque de type théorème du viriel, intéressante car généralisable a des exemples plus compliqués, est ici utile. Si  $q_c(t)$  est une solution d'action finie sur l'intervalle  $t \in (-\infty, +\infty)$ , alors  $q_c(\lambda t)$  a aussi une action finie. L'action classique correspondante, après le changement de variables  $\lambda t = t'$ , devient

$$\mathcal{S}(\lambda) = \frac{1}{2}m\lambda \int dt (\dot{q}_c)^2 + \frac{1}{\lambda} \int dt V(q_c(t)).$$

Comme  $\mathcal{S}(q)$  est stationnaire pour  $q(t) = q_c(t)$ , la dérivée  $d\mathcal{S}/d\lambda$  doit s'annuler à  $\lambda = 1$ . On en déduit

$$\frac{1}{2}m \int dt (\dot{q}_c)^2 = \int dt V(q_c(t)),$$

et donc l'action classique correspondante est positive :

$$\mathcal{S}(q_c) \equiv A = m \int_{-\infty}^{+\infty} dt \dot{q}_c^2(t) = 2 \int_0^{q_0} \sqrt{2V(q)} dq. \quad (8.42)$$

L'instanton donne une contribution d'ordre  $e^{-A/\hbar}$  et donc exponentiellement petite quand  $\hbar/A \rightarrow 0$ .

*Remarques.*

(i) On peut se demander si prendre en compte des termes aussi petits a un sens, alors que  $E_0$  a d'abord un développement à tous les ordres en  $\hbar$ . En fait, si l'on part d'une situation stable et que l'on procède par prolongement analytique, on peut obtenir deux résultats complexes conjugués. Chacun est dominé par le même col trivial  $q(t) \equiv 0$ , qui engendre la série des perturbations dont tous les termes sont réels. Si, par contre, on calcule la différence entre les deux prolongements, les contributions du col dominant se compensent et la différence est dominée par l'instanton. Nous devons donc vérifier que la contribution de l'instanton est imaginaire et la diviser par un facteur  $2i$  pour obtenir la partie imaginaire de  $\mathcal{Z}(\tau/\hbar)$  sous la forme (8.39).

(ii) Puisque l'action euclidienne est invariante par translation du temps, la solution classique dépend d'un paramètre arbitraire  $t_0$ , qui pour  $\tau$  fini, varie dans l'intervalle  $[-\tau/2, \tau/2]$ . Comme dans l'exemple de la section 8.2, nous trouvons une famille à un paramètre de cols dégénérés. Le calcul de la contribution d'un col ne dépend pas de  $t_0$  et tous les cols donnent donc la même contribution.

(iii) Nous aurions pu aussi considérer des trajectoires qui oscillent  $n$  fois autour du maximum du potentiel dans l'intervalle de temps  $\tau$ . Il est facile de se convaincre que l'action correspondante dans la limite  $\tau \rightarrow \infty$  devient

$$\mathcal{S}(q_c) = nA, \quad (8.43)$$

et donne une contribution d'ordre  $e^{-nA/\hbar}$ . Pour  $\hbar \rightarrow 0$ , le terme  $n = 1$  domine donc l'intégrale de chemin.

*Contribution à l'ordre dominant : l'approximation gaussienne.* De nouveau les arguments de la section 8.2 s'appliquent. La méthode du col naïve avec intégration gaussienne implique le déterminant de l'opérateur

$$M(t_1, t_2) = \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta q_c(t_1) \delta q_c(t_2)} = [-md_{t_1}^2 + V''(q_c(t_1))] \delta(t_1 - t_2). \quad (8.44)$$

L'opérateur hermitien  $M$  a une valeur propre nulle, avec  $\dot{q}_c$  (qui est de carré sommable, cf. équation (8.42)) comme vecteur propre, comme une dérivation par rapport au temps de l'équation du mouvement (8.40) le montre :

$$[-md_t^2 + V''(q_c(t))] \dot{q}_c(t) = 0. \quad (8.45)$$

Cependant, une différence importante est à noter. La théorie générale des fonctions orthogonales montre que le nombre de zéros des fonctions propres de l'hamiltonien  $M$  est directement lié à la hiérarchie des valeurs propres : le fondamental de  $M$  n'a pas de zéro, le premier état excité a un zéro... Donc la fonction propre  $\dot{q}_c(t)$ , qui s'annule une fois et une seule pour  $t = t_0$ , correspond au premier état excité, ce qui entraîne qu'ici  $M$  a une valeur propre négative.

## 8.5 Coordonnées collectives : autre méthode

Il faut donc de nouveau prendre le temps comme coordonnée collective et n'utiliser l'approximation gaussienne que pour les modes orthogonaux à  $\dot{q}_c$ . Nous pourrions adapter la méthode de la section 8.3.2, mais pour présenter plusieurs aspects du problème nous choisissons ici une méthode différente.

Nous notons maintenant par  $q_c(t)$  la solution particulière de l'équation de col (8.40) correspondant à  $t_0 = 0$  et donc la solution générale est  $q_c(t - t_0)$ .

Pour pouvoir prendre une variable associée aux translations du temps comme variable d'intégration, nous posons

$$\begin{cases} q(t) = q_c(t - t_0) + r(t - t_0)\sqrt{\hbar}, \\ r(t) = \sum_{n=1}^{\infty} q_n f_n(t), \end{cases} \quad (8.46)$$

où  $t_0$  n'est plus un paramètre, mais forme, avec l'ensemble  $\{q_n\}$ , un nouvel ensemble de variables d'intégration. Nous imposons aux fonctions  $\{f_n\}$  de former une base orthonormée à un détail près. Une variation infinitésimale de  $t_0$  ajoute à  $q(t)$  un terme proportionnel à  $\dot{q}_c$ . Pour que notre nouvel ensemble  $\{t_0, \{q_n\}\}$  ne comportent que des variables indépendantes, il faut imposer une contrainte. Nous choisissons

$$\int \dot{q}_c(t - t_0) r(t - t_0) dt = 0. \quad (8.47)$$

Cette condition est satisfaite si les fonctions  $f_n(t)$  sont les vecteurs propres normalisés de l'opérateur hermitien  $M(t_1, t_2)$  correspondant aux valeurs propres non nulles puisqu'ils sont orthogonaux au dernier vecteur propre  $\dot{q}_c$  et forment avec  $\dot{q}_c$  une base complète. Avec ce choix l'argument de l'exponentielle dans le membre de droite prend une forme très simple :

$$\frac{1}{2} \int dt_1 dt_2 r(t_1) M(t_1, t_2) r(t_2) = \frac{1}{2} \sum_{n>0} m_n q_n^2, \quad (8.48)$$

où  $\{m_n\}$  est l'ensemble de toutes les valeurs propres non nulles de  $M$ .

Il est utile à ce point de rappeler que la mesure fonctionnelle  $[dq(t)]$  peut aussi être définie dans le continu comme la mesure d'intégration euclidienne sur les coefficients  $c_m$  du développement de  $q(t)$  sur une base orthonormée de fonctions de carré sommable (cf. la discussion de la section 2.7) :

$$q(t) = \sum_{m=0}^{\infty} c_m g_m(t), \quad g_m(t) \in \mathcal{L}^2,$$

$$[dq(t)] = \mathcal{N} \prod_{m=0}^{\infty} dc_m.$$

Le jacobien de la transformation qui fait passer de l'ensemble  $\{c_m\}$  à l'ensemble  $\{t_0, \{q_n\}\}$  est donné à l'ordre dominant en  $\hbar$  par (cf. section 8.6)

$$J \sim \|\dot{q}_c\|/\sqrt{\hbar} = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \left[ \int \dot{q}_c^2(t) dt \right]^{1/2} = \sqrt{A/m\hbar}. \quad (8.49)$$

Puisque l'intégrand ne dépend pas de  $t_0$ , l'intégration sur la coordonnée collective  $t_0$  donne simplement un facteur  $\tau$ . L'intégration sur les variables  $q_n$  donne  $(\det' M)^{-1/2}$ , où  $\det' M$  est le produit de toutes les valeurs propres non nulles de  $M$ , ce qui est aussi le déterminant de  $M$  dans le sous-espace orthogonal à  $\dot{q}_c$ .

*La normalisation.* Pour normaliser l'intégrale de chemin, nous la comparons à sa limite à  $\hbar = 0$  (l'oscillateur harmonique) qui, dans la limite  $\tau \rightarrow \infty$ , se réduit à  $e^{-\omega\tau/2}$ . Pour  $\hbar \rightarrow 0$ , l'opérateur  $M$  tend vers l'opérateur

$$M_0(t_1, t_2) = [-m d_{t_1}^2 + m\omega^2] \delta(t_1 - t_2),$$

$$\int dt_2 M_0(t_1, t_2) f(t_2) = -m \ddot{f}(t_1) + m\omega^2 f(t_1). \quad (8.50)$$

Quand nous comparons la contribution de l'instanton à une intégrale de chemin de référence correspondant à l'oscillateur harmonique, nous devons nous rappeler que dans le cas de l'instanton nous avons exclu un mode de l'intégration gaussienne. Les deux intégrales de chemin diffèrent d'une intégration gaussienne. Il faut donc diviser la contribution de l'instanton par le facteur

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda^2/2} d\lambda = (2\pi)^{1/2}.$$

Rassemblant tous les facteurs, on obtient

$$\text{Im } \mathcal{Z}(\tau/\hbar) \sim \frac{1}{2i} [\det'(MM_0^{-1})]^{-1/2} \sqrt{\frac{A}{m\hbar}} \frac{\tau}{\sqrt{2\pi}} e^{-\omega\tau/2} e^{-A/\hbar},$$

et par conséquent

$$\text{Im } E_0 \sim \frac{1}{2i} [\det'(MM_0^{-1})]^{-1/2} \sqrt{\frac{A\hbar}{2\pi m}} e^{-A/\hbar}. \quad (8.51)$$

Le résultat est fini et réel puisque, comme nous l'avons montré,  $M$  a une valeur propre négative. Il est dimensionnellement correct car une valeur propre de  $M$  a dimension masse/temps<sup>2</sup> et nous avons supprimé une valeur propre de  $M$ .

## 8.6 Le jacobien

Nous calculons ici le jacobien de la transformation de  $q(t)$  à l'ensemble  $\{t_0, q_n\}$ . Pour éviter la prolifération de facteurs  $\hbar$ , nous faisons le changement

$q(t) \mapsto q(t)\sqrt{\hbar}$  de sorte que dans la suite  $q_c(t)$  correspond à  $q_c(t)/\sqrt{\hbar}$  où  $q_c$  est une solution particulière de l'équation (8.40).

Nous développons  $q(t)$  sur un ensemble complet de fonctions réelles, périodiques de période  $\tau$  et orthonormées (au sens  $\mathcal{L}^2$ ) :

$$q(t) = \sum_{m=0}^{\infty} c_m g_m(t), \quad (8.52)$$

$$\delta_{nm} = \int_0^{\tau} dt g_m(t) g_n(t). \quad (8.53)$$

Dans l'évaluation explicite de la section 2.4 (cf. l'équation (2.63)), nous avons défini la mesure fonctionnelle comme

$$[dq(t)] = \mathcal{N} \prod_{m=0}^{\infty} dc_m, \quad (8.54)$$

où  $\mathcal{N}$  est la constante de normalisation habituelle. Nous changeons maintenant de variables :

$$q(t) = q_c(t - t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} f_n(t - t_0) q_n, \quad (8.55)$$

de telle sorte que l'ensemble  $\{\dot{q}_c(t - t_0), f_n(t - t_0)\}$  forme une base orthogonale, et les  $f_n$  sont normées. Les nouvelles variables sont  $t_0$  et l'ensemble  $\{q_n\}$ .

Calculons les variables  $c_m$  en termes des nouvelles variables :

$$c_m = \int dt g_m(t) q_c(t - t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} q_n \int dt g_m(t) f_n(t - t_0). \quad (8.56)$$

Le jacobien de la transformation est le déterminant de la matrice

$$\left[ \frac{\partial c_m}{\partial t_0}, \frac{\partial c_m}{\partial q_n} \right] \quad (8.57)$$

avec

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_m}{\partial t_0} &= - \int dt g_m(t) \dot{q}_c(t - t_0) - \sum_{n=1}^{\infty} q_n \int dt g_m(t) \dot{f}_n(t - t_0), \\ \frac{\partial c_m}{\partial q_n} &= \int dt g_m(t) f_n(t - t_0). \end{aligned} \quad (8.58)$$

Parce que nous ne faisons un calcul qu'à l'ordre dominant, nous pouvons négliger la dépendance du jacobien dans les  $\{q_n\}$ . Puisque l'ensemble

$$\left\{ \frac{\dot{q}_c(t - t_0)}{|\dot{q}_c|}, f_n \right\}$$

forme une base orthonormée, la matrice

$$\left[ \int dt g_m(t) \frac{\dot{q}_c(t-t_0)}{|\dot{q}_c|}, \int dt g_n(t) f_n(t-t_0) \right] \quad (8.59)$$

est orthogonale et son déterminant vaut 1. Donc le jacobien de notre transformation est simplement

$$\|\dot{q}_c\| = \left\{ \int dt [\dot{q}_c(t)]^2 \right\}^{1/2}. \quad (8.60)$$

## 8.7 Instantons : l'oscillateur anharmonique quartique

Nous explicitons les résultats précédents dans un cas relativement simple : le potentiel anharmonique quartique dans lequel le signe du terme quartique est négatif. L'hamiltonien correspondant est

$$H = -\frac{1}{2} (d/dq)^2 + \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{4}gq^4. \quad (8.61)$$

Dans ce qui suit, nous posons  $\hbar = 1$  parce que nous verrons que le paramètre  $g$  joue ici le rôle de  $\hbar$ .

Nous calculons donc les valeurs propres de  $H$  à partir de la représentation par intégrale de chemin de la fonction de partition

$$\text{tr} e^{-\beta H} = \int_{q(-\beta/2)=q(\beta/2)} [dq(t)] \exp[-\mathcal{S}(q)], \quad (8.62)$$

où  $\mathcal{S}(q)$  est l'action euclidienne :

$$\mathcal{S}(q) = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} \left[ \frac{1}{2}\dot{q}^2(t) + \frac{1}{2}q^2(t) + \frac{1}{4}gq^4(t) \right] dt. \quad (8.63)$$

Une généralisation des arguments applicables à des intégrales sur un nombre fini de variables indique que l'intégrale de chemin (8.62) définit une fonction de  $g$  analytique dans le demi-plan  $\text{Re}(g) > 0$ . Dans ce domaine, l'intégrale est dominée pour  $g \rightarrow 0$  par le col  $q(t) \equiv 0$ . Elle peut donc être calculée en développant l'intégrand en puissances de  $g$  et intégrant terme à terme. Ceci conduit au développement perturbatif de la fonction de partition et donc de l'état fondamental  $E_0(g)$  dans la limite  $\beta \rightarrow \infty$ .

*Remarque.*

Après le changement

$$q(t) \mapsto q(t)g^{-1/2},$$

le paramètre  $g$  se factorise devant l'action :

$$\mathcal{S}(q) = \frac{1}{g} \mathcal{S}(q\sqrt{g}). \quad (8.64)$$

La constante de couplage  $g$  joue formellement le même rôle que  $\hbar$  dans le développement perturbatif.

*Couplage négatif.* Pour  $g < 0$  l'hamiltonien n'est borné inférieurement pour aucune valeur de  $g$ . C'est pourquoi les énergies, considérées comme fonctions analytiques de  $g$ , ont une singularité à  $g = 0$  et la série des perturbations est toujours divergente.

Pour comprendre comment définir et évaluer  $E_0(g)$  pour  $g$  négatif, nous allons de nouveau d'abord étudier ce problème sur l'exemple d'une intégrale simple.

### 8.7.1 L'intégrale simple quartique

Nous considérons l'intégrale

$$I(g) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x^2/2+gx^4/4)} dx \quad (8.65)$$

qui compte le nombre de diagrammes de Feynman contribuant à la fonction de partition. Pour  $g$  positif et petit, l'intégrale est dominée par le col à l'origine et donc

$$I(g) = 1 + O(g). \quad (8.66)$$

La fonction  $I(g)$  est analytique dans un plan coupé. Pour prolonger analytiquement l'intégrale pour  $g < 0$ , il faut faire une rotation du contour d'intégration  $C$  en même temps que l'on change la phase du nombre complexe  $g$  :

$$C : \text{Arg } x = -\frac{1}{4}\text{Arg } g \pmod{\pi},$$

de sorte que  $\text{Re}(gx^4)$  reste positif. En conséquence, on obtient deux expressions différentes  $I_{\pm}(g)$ , complexes conjuguées, suivant le sens de la rotation dans le plan :

$$\begin{aligned} \text{pour } g = -|g| + i0 : \quad I_+(g) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{C_+} e^{-(x^2/2+gx^4/4)} dx \\ \text{avec } C_+ : \quad \text{Arg } x &= -\frac{\pi}{4} \pmod{\pi}, \end{aligned} \quad (8.67)$$

$$\begin{aligned} \text{pour } g = -|g| - i0 : \quad I_-(g) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{C_-} e^{-(x^2/2+gx^4/4)} dx \\ \text{avec } C_- : \quad \text{Arg } x &= \frac{\pi}{4} \pmod{\pi}. \end{aligned} \quad (8.68)$$

Pour  $g \rightarrow 0_-$ , les deux intégrales sont encore dominées par le col à l'origine puisque la contribution des autres cols :

$$x + gx^3 = 0 \Rightarrow x^2 = -1/g, \quad (8.69)$$

est d'ordre

$$e^{-(x^2/2+gx^4/4)} \sim e^{1/4g} \ll 1. \quad (8.70)$$

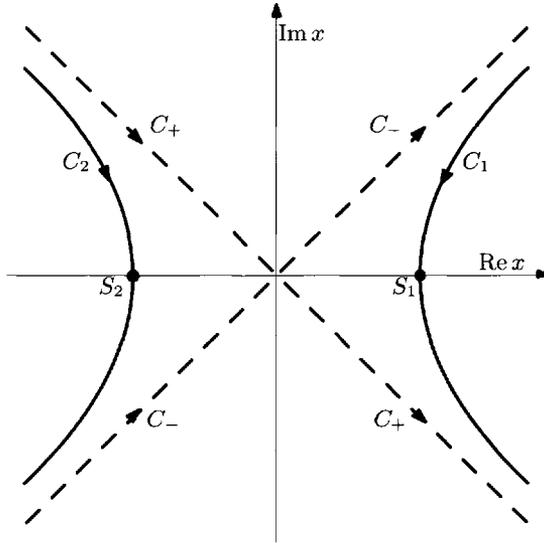


FIG. 8.3 – Les contours d’intégration  $C_+$ ,  $C_-$ ,  $C_1$  et  $C_2$ .

Par contre, la discontinuité de  $I(g)$  à travers la coupure est donnée par la différence entre les deux intégrales :

$$I_+(g) - I_-(g) = 2i \operatorname{Im} I(g) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{C_+ - C_-} e^{-(x^2/2 + gx^4/4)} dx. \quad (8.71)$$

Elle correspond au contour  $C_+ - C_-$  qui, comme la figure 8.3 le montre, peut être déformé dans la somme de contours  $C_1$  et  $C_2$  qui passent à travers les cols non triviaux  $S_1$  et  $S_2$  :  $x = \pm 1/\sqrt{-g}$ . Ceci signifie que les contributions du col à l’origine se sont compensées et que l’intégrale est maintenant dominée par ces cols :

$$\operatorname{Im} I(g) \sim 2^{-1/2} e^{1/4g}. \quad (8.72)$$

Donc pour  $g$  négatif et petit, la partie réelle de l’intégrale est donnée par la théorie des perturbations, alors que la partie imaginaire, qui est exponentiellement petite, est donnée par la contribution des cols non triviaux.

Nous allons de nouveau généraliser cette stratégie à l’intégrale de chemin (8.62).

### 8.7.2 Intégrale de chemin

Inspiré par l’exemple précédent, nous faisons une rotation du contour dans l’espace fonctionnel  $q(t)$  tout en changeant la phase de  $g$  positif à  $g$  négatif :

$$q(t) \mapsto q(t) e^{-i\theta},$$

où  $\theta$  est indépendant du temps. Si nous retournons à la définition de l'intégrale de chemin comme limite d'intégrales en temps discrets (cf. chapitre 2), nous comprenons que c'est une procédure raisonnable.

Il y a toutefois une différence importante avec le cas de l'intégrale simple : le contour doit rester dans le domaine pour lequel  $\text{Re} [\dot{q}^2(t)] > 0$ , parce que le terme cinétique  $\int \dot{q}^2(t) dt$ , comme nous l'avons souligné en section 2.2, sélectionne les chemins suffisamment réguliers et assure l'existence d'une limite continue de l'intégrale de chemin discrète.

Pour  $g$  négatif, nous pouvons alors intégrer le long du contour

$$\text{Arg } q(t) = -\theta, \quad \frac{1}{8}\pi < \theta < \frac{1}{4}\pi, \quad (8.73)$$

qui satisfait les deux conditions

$$\text{Re} [gq^4(t)] > 0, \quad \text{Re} [\dot{q}^2(t)] > 0. \quad (8.74)$$

Pour  $g \rightarrow 0$ , les deux intégrales de chemin correspondant aux deux prolongements analytiques sont ici aussi dominées par le col à l'origine

$$q(t) = 0,$$

mais si nous calculons la différence entre les deux intégrales, ces contributions se compensent.

La contribution des autres cols correspondant à des constantes :

$$q^2(t) = -1/g,$$

est d'ordre  $e^{\beta/4g}$  et donc négligeable pour  $\beta \rightarrow \infty$ .

Nous devons alors chercher des cols non triviaux, qui sont des solutions de l'équation du mouvement euclidienne pour  $g < 0$  :

$$-\ddot{q}(t) + q(t) + gq^3(t) = 0 \quad (8.75)$$

avec

$$q(-\beta/2) = q(\beta/2). \quad (8.76)$$

Nous devons chercher des solutions de type *instanton* qui ont une action qui reste finie quand  $\beta \rightarrow +\infty$ .

### 8.7.3 Instantons

Les solutions des équations (8.75, 8.76) s'interprètent, du point de vue de la mécanique classique, comme des mouvements périodiques dans le potentiel

$$-V(q) = -\frac{1}{2}q^2 - \frac{1}{4}gq^4. \quad (8.77)$$

Il est clair qu'il existe des solutions à l'équation du mouvement qui correspondent à des oscillations autour des minima de  $-V$ ,  $q = \pm\sqrt{-1/g}$ . Intégrant une fois l'équation (8.75), nous trouvons

$$\frac{1}{2}\dot{q}^2 - \frac{1}{2}q^2 - \frac{1}{4}gq^4 = \epsilon$$

avec  $\epsilon < 0$ . Appelant  $q_-$  et  $q_+$  les points avec  $q > 0$  où la vitesse  $\dot{q}$  s'annule, nous trouvons pour la période d'une telle solution

$$\beta = 2 \int_{q_-}^{q_+} \frac{dq}{\sqrt{q^2 + \frac{1}{2}gq^4 + 2\epsilon}}.$$

$\beta$  ne peut tendre vers l'infini que si la constante  $\epsilon$  et donc  $q_-$  tendent vers zéro. La trajectoire classique s'approche alors de plus en plus de l'origine. Dans la limite  $\beta$  infini, la solution classique devient

$$q_c(t) = \pm \left(-\frac{2}{g}\right)^{1/2} \frac{1}{\cosh(t - t_0)}. \quad (8.78)$$

La valeur correspondante de l'action classique est

$$\mathcal{S}(q_c) = -\frac{4}{3g} + O(e^{-\beta}/g). \quad (8.79)$$

Puisque l'action euclidienne est invariante par translation du temps, la solution classique dépend d'un paramètre arbitraire  $t_0$ , qui pour  $\beta$  fini, varie dans un intervalle de longueur  $\beta$ . Ainsi nous trouvons deux familles de cols dégénérés à un paramètre.

*Contribution à l'ordre dominant.* L'opérateur dérivée seconde de l'action est donné par

$$M(t_1, t_2) = \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta q_c(t_1) \delta q_c(t_2)} = \left[ -\left(\frac{d}{dt_1}\right)^2 + 1 + 3gq_c^2(t_1) \right] \delta(t_1 - t_2). \quad (8.80)$$

Nous savons qu'il a un mode zéro correspondant au vecteur propre  $\dot{q}_c$ . En effet, nous vérifions explicitement que la fonction  $\dot{q}_c(t)$  est bien de carré sommable.

Prenant en compte les deux familles de cols, le mode zéro et rassemblant tous les facteurs, nous obtenons

$$\text{Im tr } e^{-\beta H} \sim \frac{2}{2i} [\det' M M_0^{-1}]^{-1/2} J \frac{\beta}{\sqrt{2\pi}} e^{-\beta/2} e^{4/3g}. \quad (8.81)$$

Il se trouve enfin qu'il est facile de calculer les valeurs propres de  $M$  analytiquement parce que  $M$  est de nouveau l'hamiltonien d'un potentiel exactement soluble du type Bargmann-Wigner. Le déterminant se déduit de l'expression générale (8.34). On obtient alors

$$\text{Im } E_0(g) = \frac{4}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{4/3g}}{\sqrt{-g}} [1 + O(g)], \quad g \rightarrow 0_-. \quad (8.82)$$

## Exercices

### Exercice 8.1.

On considère l'intégrale

$$Z(g) = \int d^2q \exp \left[ -\frac{1}{2g} \mathbf{q}^2 (\mathbf{q}^2 - 1)^2 \right],$$

où  $\mathbf{q}$  est un vecteur à 2 composantes  $q_1, q_2$ . Calculer cette intégrale pour  $g \rightarrow 0_+$  par la méthode du col.

*Solution.* Il y a plusieurs cols à la même hauteur :  $\mathbf{q} = 0$  et le cercle  $|\mathbf{q}| = 1$ . Par contre, le cercle de cols  $|\mathbf{q}| = 1/3$  correspond à des minima locaux et donc ne contribue pas. Le col  $\mathbf{q} = 0$  relève de la méthode du col ordinaire et donne  $2\pi g$ . Pour le cercle  $|\mathbf{q}| = 1$ , il faut passer en coordonnées polaires et on trouve  $\pi\sqrt{2\pi g}$ , ce qui donne donc la contribution dominante pour  $g \rightarrow 0$ .

### Exercice 8.2.

Calculer la partie imaginaire de l'énergie du pseudo fondamental de l'hamiltonien

$$H = -\frac{1}{2} (d/dq)^2 + \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{2}gq^{2N}$$

pour  $g$  négatif. On sera de nouveau amené à utiliser le résultat (8.34).

*Solution.* Quelques éléments de la solution sont :

(i) La solution classique

$$|q_c|^{N-1}(t) = \frac{1}{\sqrt{-g}} \frac{1}{\cosh[(N-1)(t-t_0)]}.$$

(ii) L'action classique

$$\mathcal{S}_c = A(N)/(-g)^{1/(N-1)},$$

$$A(N) = \frac{\sqrt{\pi}\Gamma(N/(N-1))}{2\Gamma((3N-1)/2(N-1))} = 4^{1/(N-1)} \frac{\Gamma^2(N/(N-1))}{\Gamma(2N/(N-1))}.$$

(iii) L'opérateur dérivée seconde de l'action au col

$$M = -d_t^2 + 1 - \frac{N(2N-1)}{\cosh^2[(N-1)t]}.$$

Les déterminants sont alors donnés par l'équation (8.34) avec

$$\lambda = N/(N-1), \quad z = \sqrt{1+\epsilon}/(N-1).$$

On en déduit

$$\det(M + \epsilon) (M_0 + \epsilon)^{-1} \sim -2^{-(N+1)/(N-1)} A(N)\epsilon.$$

(iv) L'opérateur  $M$  a une valeur propre nulle associée aux translations dans le temps. Le jacobien  $J$  provenant de l'introduction du temps comme coordonnée collective est donné par

$$J^2 = \int dt \dot{q}^2(t) = A/(-g)^{1/(N-1)}.$$

Utilisant l'équation (8.81) et rassemblant tous les facteurs, on obtient la partie imaginaire de l'énergie du pseudo fondamental métastable

$$\text{Im } E(g) = C(-g)^{-\beta} \exp \left[ -A(N)/(-g)^{1/(N-1)} \right] \quad (8.83)$$

avec

$$\beta = 1/[2(N-1)], \quad C = \frac{2^{1/(N-1)}}{\sqrt{\pi}}.$$

*Exercice 8.3.*

*Équation de diffusion classique dite de Fokker-Planck.*

Un certain nombre de processus stochastiques, tels que la marche au hasard, la diffusion thermique..., peuvent être décrit par une équation du type (cf. section 5.5)

$$\frac{\partial P(q, t)}{\partial t} = \frac{\Omega}{2} \frac{\partial}{\partial q} \left( \frac{\partial P}{\partial q} + \frac{1}{\Omega} \frac{\partial E}{\partial q} P \right),$$

où  $P(q, t)$  peut être considéré comme une densité de probabilité et  $\Omega > 0$  est une constante de diffusion. La forme de l'équation entraîne la conservation des probabilités

$$\int dq P(q, t) = 1.$$

On vérifie de plus que cette équation a une solution stationnaire

$$P_0(q, t) = \exp(-E(q)/\Omega),$$

qui, si elle est *normalisable*, est proportionnelle à la distribution limite pour  $t \rightarrow +\infty$ .

Ci-dessous, on identifiera le processus stochastique avec la diffusion d'une particule sur un axe  $q \in (-\infty, +\infty)$ . En section 5.5, il a été démontré que la probabilité pour une particule qui se trouve au point  $x_0$  au temps  $t = 0$  de se trouver au point  $x$  au temps  $\tau > 0$ , que nous noterons plus explicitement  $P(x, \tau; x_0, 0)$ , est donnée par l'intégrale de chemin

$$P(x, \tau; x_0, 0) = \int [dq] \exp[-\mathcal{S}(q)/\Omega]$$

avec

$$\mathcal{S}(q) = \frac{1}{2} \int_0^\tau dt \left[ \left( \dot{q} + \frac{1}{2} E'(q(t)) \right)^2 - \frac{1}{2} \Omega E''(q(t)) \right]$$

et les conditions aux limites

$$q(0) = x_0, \quad q(\tau) = x.$$

1. On considère maintenant la fonction

$$E(q) = q^2 - \frac{2}{3}q^3. \quad (8.84)$$

Montrer que dans la limite  $\Omega \rightarrow 0$  (faible diffusivité), l'intégrale de chemin a la forme d'une intégrale avec potentiel à minima dégénérés. Calculer pour les deux puits l'énergie du fondamental dans l'approximation gaussienne. Notons que dans la limite  $\Omega \rightarrow 0$ , on peut négliger la contribution d'ordre  $\Omega$  dans l'action pour trouver les minima ou les cols.

2. Pour la même fonction  $E(q)$ , toujours pour  $\Omega \rightarrow 0$  et pour  $\tau \rightarrow +\infty$ , on remarque que les équations de col sont de type mouvement dans un potentiel avec minima dégénérés. De telles équations admettent des solutions de type instantons. Quelle est ici leur interprétation ?

*Solutions.*

1. Développant le carré dans l'action, on vérifie qu'un terme s'intègre exactement et donc

$$\mathcal{S}(q) = \frac{1}{2}E(x) - \frac{1}{2}E(x_0) + \frac{1}{2} \int_0^\tau dt [\dot{q}^2 + q^2(1-q)^2 - \frac{1}{2}\Omega(1-2q)].$$

Dans la limite  $\Omega \rightarrow 0$ , les deux puits correspondant à  $q = 0$  et  $q = 1$  sont dégénérés. À l'ordre gaussien, l'énergie  $\epsilon$  du fondamental de l'oscillateur harmonique est dans les deux cas  $\epsilon = \frac{1}{2}$ . Cependant, la valeur classique du terme de dérivée seconde contribue au même ordre de sorte que

$$\begin{cases} \epsilon = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \text{ pour } q = 0, \\ \epsilon = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \text{ pour } q = 1. \end{cases}$$

Donc, au-delà de l'approximation classique, les minima ne sont plus dégénérés, et le développement de l'énergie du fondamental est donné par le développement perturbatif à  $q = 0$ . C'est tout à fait raisonnable si l'on souvient du problème initial : une particule a du mal à sortir par diffusion du minimum du potentiel  $E(q)$  à  $q = 0$ , mais pas à quitter le maximum à  $q = 1$ .

2. Pour  $\Omega \rightarrow 0$  et  $\tau \rightarrow \infty$ , les instantons qui minimisent l'action satisfont

$$\dot{q} \pm \frac{1}{2}E'(q) = 0.$$

Dans le cas particulier, les solutions sont

$$q_c(t) = \frac{1}{1 + e^{\pm(t-t_0)}}.$$

La valeur de l'action classique est

$$\mathcal{S}(q_c) = \frac{1}{6}(1 \mp 1).$$

Le résultat nul correspond à la solution de la particule qui quitte  $q = 1$  à  $t = -\infty$  et atteint  $q = 0$  à  $t = +\infty$ , processus qui a clairement une probabilité finie même pour  $\Omega \rightarrow 0$ . La valeur positive correspond à la particule qui quitte  $q = 0$  à  $t = -\infty$  et atteint  $q = 1$  à  $t = +\infty$ . Elle est mathématiquement de type effet tunnel et caractérise la probabilité d'échapper au puits  $q = 0$ . Pour  $\Omega \rightarrow 0$ , elle est d'ordre  $e^{-1/3\Omega}$ .



# Chapitre 9

## Évolution quantique et matrice de diffusion

IL N'EST PAS QUESTION DANS CE CHAPITRE de rappeler en détail la théorie de la diffusion en mécanique quantique, et en particulier le calcul des observables physiques tels que les sections efficaces. Le lecteur est donc renvoyé aux exposés classiques de mécanique quantique. Notre but ici est de montrer comment les problèmes de diffusion se posent dans le cadre de l'intégrale de chemin.

En mécanique quantique, les états d'un système isolé évoluent sous l'action d'un opérateur unitaire, comme conséquence de la conservation des probabilités et donc des normes des vecteurs de l'espace de Hilbert. Nous notons  $U(t'', t')$  l'opérateur correspondant à l'évolution entre les temps  $t'$  et  $t''$  :

$$U(t'', t')U^\dagger(t'', t') = \mathbf{1}, \quad U(t', t') = \mathbf{1}.$$

Par ailleurs, l'évolution quantique d'un système isolé est supposée markovienne de sorte que l'opérateur d'évolution satisfait à la loi de groupe

$$U(t_3, t_2)U(t_2, t_1) = U(t_3, t_1).$$

Si  $U(t, t')$  est dérivable, il satisfait à l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t}(t, t') = H(t)U(t, t'), \quad (9.1)$$

où  $H(t)$  est un opérateur hermitien, l'hamiltonien.

Dans le cas où  $H$  est indépendant du temps, l'opérateur d'évolution s'écrit  $U(t'', t') = e^{-iH(t''-t')/\hbar}$ . Il appartient à une représentation du groupe abélien des translations dans le temps dont  $H/\hbar$  est le générateur.

À partir de l'opérateur d'évolution, on définit une matrice de diffusion ou matrice  $S$  qui décrit comment, asymptotiquement dans le temps, l'évolution dans un potentiel diffère de l'évolution libre. Nous décrivons ici comment la

matrice  $S$  peut être calculée à partir de l'intégrale de chemin et comment l'intégrale de chemin permet de retrouver simplement les approximations semi-classiques.

## 9.1 Évolution de la particule libre et matrice $S$

En mécanique quantique, même la particule libre subit une évolution non-triviale ; en général, le paquet d'onde s'étale. Quand on décrit des processus de diffusion, on cherche donc à caractériser les déviations asymptotiques à temps infini par rapport à l'évolution libre. Ceci conduit à définir une matrice de diffusion ou matrice  $S$ .

### 9.1.1 L'évolution de la particule libre

Dans le cas de la particule libre, l'hamiltonien se réduit à la partie cinétique :

$$H_0 = \mathbf{p}^2/2m.$$

Les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution  $U_0 = e^{-iH_0(t''-t')}$  se calculent facilement. Ils peuvent, par exemple, être obtenus par prolongement de l'expression (2.9). Ils peuvent aussi être déduit de la représentation de Fourier qui se calcule directement. En dimension  $d$

$$\langle \mathbf{q}'' | U_0(t'', t') | \mathbf{q}' \rangle = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d p \exp \frac{i}{\hbar} [\mathbf{p} \cdot (\mathbf{q}'' - \mathbf{q}') - \mathbf{p}^2(t'' - t')/2m] \quad (9.2a)$$

$$= \left( \frac{m}{2i\pi\hbar(t'' - t')} \right)^{d/2} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \frac{m(\mathbf{q}'' - \mathbf{q}')^2}{2(t'' - t')} \right]. \quad (9.2b)$$

En particulier, cette évolution est responsable de l'étalement du paquet d'onde. Pour mettre en évidence ce phénomène, nous définissons la fonction d'onde au temps initial  $t = 0$  par sa transformée de Fourier  $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$  (sa représentation dans la base des impulsions), dont nous supposons le support concentré autour d'une valeur  $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0$ . Au temps  $t$ , nous trouvons

$$\psi(\mathbf{q}, t) = \langle \mathbf{q} | e^{-iH_0 t/\hbar} | \psi \rangle = \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \tilde{\psi}(\mathbf{p}) \exp \left[ i \left( \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} - t \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right) / \hbar \right]. \quad (9.3)$$

Quand  $t \rightarrow \infty$ , la phase dans l'intégrale (9.3) varie rapidement et donc l'intégrale est dominée par les points où la phase est stationnaire :

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left( \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} - t \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right) = 0 \implies \mathbf{q} = t \frac{\mathbf{p}}{m}. \quad (9.4)$$

L'intégrale (9.3) est donc équivalente à

$$\psi(\mathbf{q}, t) \underset{|t| \rightarrow \infty}{\sim} \tilde{\psi}(\mathbf{p}) \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \left( \frac{m\hbar}{|t|} \right)^{d/2} \exp\left( \frac{i\pi}{4} \operatorname{sgn} t + it \frac{\mathbf{p}^2}{2m\hbar} \right), \quad (9.5)$$

avec

$$\mathbf{p} = \frac{m}{t} \mathbf{q}.$$

Comme la fonction initiale avait son support concentré autour de  $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0$ , la fonction d'onde  $\psi(\mathbf{q}, t)$  a son support concentré autour de  $\mathbf{q} = t\mathbf{p}_0/m$ , c'est-à-dire autour de la trajectoire classique. Mais en même temps le facteur  $|t|^{-d/2}$  montre que le paquet d'onde s'étale. Cet étalement ne disparaît que dans la limite où la fonction d'onde est une onde plane  $e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{q}}/\hbar$ , mais cette limite est singulière car cette fonction d'onde n'est pas normalisable. C'est dans cette limite qu'il est commode de discuter la diffusion quantique, mais dans les cas où l'on rencontre des expressions mal définies, il faut revenir à la diffusion de paquets d'onde normalisables.

### 9.1.2 Particule dans un potentiel et matrice $S$

On considère maintenant une particule dans un potentiel (toujours dans  $\mathbb{R}^d$ ), avec comme hamiltonien

$$H = \mathbf{p}^2/2m + V(\mathbf{q}, t).$$

On suppose que le potentiel admet des situations de diffusion classique, ce qui implique en particulier que le potentiel  $V(\mathbf{q}(t), t)$  s'annule suffisamment vite sur la trajectoire classique pour  $|t| \rightarrow \infty$ , pour qu'asymptotiquement la trajectoire soit celle du mouvement libre, correspondant à l'hamiltonien

$$H_0 = \mathbf{p}^2/2m.$$

La matrice de diffusion ou matrice  $S$  est obtenue en comparant l'évolution quantique, aux temps asymptotiques  $t \rightarrow \pm\infty$ , à l'évolution en l'absence de potentiel. Plus précisément, la matrice  $S$  peut être définie comme la limite de l'opérateur d'évolution dans la représentation d'interaction (cf. équation (9.49)) :

$$S = \lim_{\substack{t' \rightarrow -\infty \\ t'' \rightarrow +\infty}} e^{iH_0 t''/\hbar} U(t'', t') e^{-iH_0 t'/\hbar}. \quad (9.6)$$

La raison pour laquelle il a fallu multiplier l'opérateur d'évolution à droite et à gauche par l'opérateur libre se comprend aisément. Même en l'absence de potentiel diffuseur, l'opérateur  $e^{-iH_0(t''-t')}$  dépend du temps et n'a pas de limite bien que, s'il agit sur les fonctions propres de l'opérateur impulsion, il ne fait que changer leur phase, comme on l'a vu plus haut. Le facteur de droite correspond à une évolution libre inverse du temps  $t'$  au temps 0, tandis que le facteur de gauche fait une évolution libre inverse du temps 0 au temps  $t''$ . Dans

ces conditions, en l'absence de potentiel diffuseur, la matrice  $S$  est l'identité. De plus, on peut montrer que si le potentiel décroît assez vite pour  $|t| \rightarrow \infty$  la limite existe et la matrice  $S$  peut être définie.

Notons que dans la base où l'opérateur d'impulsion est diagonal, la relation (9.6) entre la matrice  $S$  et l'opérateur d'évolution prend la forme

$$\langle \mathbf{p}'' | S | \mathbf{p}' \rangle = \lim_{\substack{t' \rightarrow -\infty \\ t'' \rightarrow +\infty}} e^{iE''t''/\hbar} \langle \mathbf{p}'' | U(t'', t') | \mathbf{p}' \rangle e^{-iE't'/\hbar}, \quad (9.7)$$

où

$$E' = E(\mathbf{p}'), \quad E'' = E(\mathbf{p}''), \quad E(\mathbf{p}) \equiv \mathbf{p}^2/2m. \quad (9.8)$$

Cependant, la limite doit être comprise mathématiquement au sens des distributions (on devrait utiliser des fonctions test, en fait des paquets d'onde).

Nous rappelons enfin que les éléments de la matrice  $S$  dans cette base sont en général paramétrés en termes de la matrice de diffusion  $T$  :

$$S = 1 - iT, \Rightarrow \langle \mathbf{p}'' | S | \mathbf{p}' \rangle = (2\pi\hbar)^d \delta^{(d)}(\mathbf{p}'' - \mathbf{p}') - i \langle \mathbf{p}'' | T | \mathbf{p}' \rangle. \quad (9.9)$$

Dans le cas d'un potentiel indépendant du temps, l'énergie est conservée et on peut écrire

$$\langle \mathbf{p}'' | T | \mathbf{p}' \rangle = -2\pi\delta(E'' - E')T(\mathbf{p}'', \mathbf{p}'). \quad (9.10)$$

Dans l'équation (9.9), le terme proportionnel à la fonction  $\delta(p'' - p')$  correspond à la partie non diffusée, et n'est pas observée dans la plupart des situations physiques. La matrice  $T$  suffit donc à décrire le processus de diffusion. Notons, cependant, que la situation  $d = 1$  est singulière de ce point de vue puisque la conservation de l'énergie implique alors la conservation de l'impulsion au signe près.

Les sections efficaces différentielles sont proportionnelles à  $|T(\mathbf{p}'', \mathbf{p}')|^2$ , le facteur de proportionnalité étant de nature cinématique.

*Intégrale de chemin.* Pour calculer les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution dans le cas, par exemple, d'un hamiltonien de la forme

$$H = p^2/2m + V(q, t),$$

on peut procéder par prolongement analytique, remplaçant dans les expressions du chapitre 2 toutes les variables de temps  $t$  par  $te^{i\varphi}$  (sauf dans le potentiel) et faisant une rotation dans le plan complexe  $t$  de  $\varphi = 0$  à  $\varphi = \pi/2$  dans la direction positive.

La solution de l'équation (9.1) en termes des éléments de matrice dans la base des positions peut s'écrire

$$\langle q'' | U(t'', t') | q' \rangle = \int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''} [dq(t)] \exp[i\mathcal{A}(q)/\hbar]. \quad (9.11)$$

La fonction  $\mathcal{A}(q)$  est maintenant l'action classique usuelle, intégrale du lagrangien :

$$\mathcal{A}(q) = \int_{t'}^{t''} dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(q, t) \right]. \quad (9.12)$$

L'expression (9.11) relie de manière remarquable les mécaniques classique et quantique. En mécanique quantique, tous les chemins contribuent à l'évolution mais ils sont pondérés par un poids complexe  $e^{i\mathcal{A}/\hbar}$ . Les contributions les plus grandes à l'intégrale de chemin sont celles qui sont dans un voisinage des chemins qui rendent l'action stationnaire, c'est-à-dire proches des chemins classiques. En particulier si la valeur de l'action classique pour les chemins classiques est grande comparée à  $\hbar$ , les régions de l'espace de phase proches des chemins classiques dominent l'intégrale de chemin.

## 9.2 Développement perturbatif de la matrice $S$

Nous montrons d'abord comment calculer l'opérateur d'évolution sous forme d'un développement en puissances du potentiel à partir de l'intégrale de chemin. Le développement perturbatif de la matrice  $S$  s'en déduit.

Le formalisme d'intégrale de chemin organise alors le développement perturbatif de la même façon que le formalisme des opérateurs qui est rappelé en section 9.7. Pour des raisons de simplicité, nous supposons que le potentiel est indépendant du temps.

### 9.2.1 Développement perturbatif

Nous considérons donc l'hamiltonien

$$H = p^2/2m + V(x). \quad (9.13)$$

Les actions classiques correspondant à l'hamiltonien libre  $H_0$  et à  $H$  sont, respectivement,

$$\mathcal{A}_0(x) = \int_{t'}^{t''} \frac{1}{2} m \dot{x}^2(t) dt, \quad \mathcal{A}(x) = \int_{t'}^{t''} \left[ \frac{1}{2} m \dot{x}^2(t) - V(x(t)) \right] dt. \quad (9.14)$$

L'intégrale de chemin (9.11), développée en puissances de  $V$ , prend alors la forme (posant pour commodité  $\hbar = 1$ )

$$\langle x'' | U(t'', t') | x' \rangle = \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} [dx(t)] \exp [i\mathcal{A}(x)] = \sum_{\ell=0} \langle x'' | U^{(\ell)}(t'', t') | x' \rangle$$

avec

$$\langle x'' | U^{(\ell)}(t'', t') | x' \rangle = \frac{(-i)^\ell}{\ell!} \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} [dx(t)] e^{i\mathcal{A}_0(x)} \left[ \int_{t'}^{t''} V(x(t)) dt \right]^\ell. \quad (9.15)$$

Les potentiels qui ont des états de diffusion doivent tendre vers zéro à grandes distances, ce qui exclut les potentiels polynomiaux que nous avons considérés jusqu'à présent. Par contre, il est raisonnable de supposer que le potentiel a une transformée de Fourier :

$$V(x) = (2\pi)^{-d} \int d^d k \tilde{V}(k) e^{ikx}. \quad (9.16)$$

Introduisant alors cette représentation de Fourier dans l'intégrale de chemin, nous réduisons la théorie des perturbations au calcul d'intégrales gaussiennes. Le  $\ell$ ème terme devient en effet

$$\begin{aligned} \langle x'' | U^{(\ell)}(t'', t') | x' \rangle &= \frac{(-i)^\ell}{\ell!} \int_{t'}^{t''} \prod_j d\tau_j \int \prod_{j=1}^{\ell} \tilde{V}(k_j) \frac{d^d k_j}{(2\pi)^d} \\ &\times \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} [dx(t)] \exp i \left[ \int_{t'}^{t''} \frac{1}{2} m \dot{x}^2(t) dt + \sum_j k_j x(\tau_j) \right]. \end{aligned} \quad (9.17)$$

L'intégrand dans l'expression (9.17) est symétrique dans les temps  $\tau_1, \dots, \tau_\ell$ . Nous ordonnons les temps  $t'' \geq \tau_\ell \geq \tau_{\ell-1} \dots \geq \tau_1 \geq t'$  et supprimons en même temps le facteur  $1/\ell!$ .

L'intégrale sur le chemin  $x(t)$  est gaussienne. À une normalisation près, le résultat est obtenu en remplaçant  $x(t)$  par la solution de l'équation du mouvement classique

$$-m\ddot{x} + \sum_j k_j \delta(t - \tau_j) = 0 \Rightarrow \dot{x}(\tau_{j+}) - \dot{x}(\tau_{j-}) = k_j/m.$$

L'intégrale de chemin donne ainsi une interprétation physique aux termes du développement perturbatif : un chemin contribuant au  $\ell$ ème ordre est une succession de segments de droite, où aux temps  $\tau_1, \dots, \tau_\ell$ , l'impulsion change par des quantités  $k_1, \dots, k_\ell$ . Enfin, les contributions correspondantes doivent être moyennées sur tous les temps et toutes les impulsions pondérées par les facteurs  $\tilde{V}(k)$ .

Pour obtenir l'opérateur dans la base où l'impulsion est diagonale, il faut encore transformer de Fourier par rapport à  $x'$  et  $x''$ . Nous appelons  $p'$  et  $p''$  les impulsions correspondantes.

*Remarque.* La dépendance en  $x''$  est donnée par l'évolution libre entre  $\tau_\ell$  et  $t''$ . La transformée de Fourier implique donc l'intégrale gaussienne

$$\int dx'' e^{-ip''x'' + im(x'' - x(\tau_\ell))^2 / 2(t'' - \tau_\ell)}.$$

Le résultat de l'intégration est obtenu (à la normalisation près) en remplaçant  $x''$  par le minimum de l'argument de l'exponentielle :

$$x'' = x(\tau_\ell) + p''(t'' - \tau_\ell)/m.$$

Nous voyons alors que cela revient pour  $t'' \rightarrow +\infty$  à calculer l'intégrale de chemin avec des conditions aux limites de diffusion classique. De plus, le résultat complet de l'intégration est

$$e^{-ip''x(\tau_\ell)} e^{-ip''^2(t''-\tau_\ell)/2m},$$

faisant apparaître le facteur  $e^{-ip''^2 t''/2m}$  qui compense dans la matrice  $S$  le facteur provenant du mouvement libre.

Le même argument s'applique à  $x'$ , pour lequel l'intégrale est

$$\int dx' e^{ip'x' + im(x(\tau_1) - x')^2/2(\tau_1 - t')} \propto e^{ip'x(\tau_1)} e^{-ip'^2(\tau_1 - t')/2m}$$

et donc

$$x' = x(\tau_1) + (t' - \tau_1)p'/m.$$

### 9.2.2 Calcul explicite

Le terme d'ordre zéro en  $V$  donne  $(2\pi)^d \delta(p'' - p')$ . Calculons explicitement le premier ordre. Nous pouvons écrire l'opérateur d'évolution comme le produit de deux évolutions libres de  $t'$  à  $\tau$  et de  $\tau$  à  $t''$ , en introduisant la représentation

$$e^{ik_1 x(\tau_1)} = \int d^d x_1 \delta(x_1 - x(\tau_1)) e^{ik_1 x_1}.$$

Transformant alors de Fourier par rapport à  $x'$  et  $x''$ , nous trouvons

$$\begin{aligned} \langle p'' | U^{(1)}(t'', t') | p' \rangle &= -i \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \tilde{V}(k) \int_{t'}^{t''} d\tau \int d^d x e^{-ip''^2(t''-\tau)/2m} \\ &\quad \times \langle p'' | x \rangle e^{ikx} \langle x | p' \rangle e^{-ip'^2(\tau-t')/2m}. \end{aligned} \tag{9.18}$$

L'intégration sur la variable  $x$  donne  $(2\pi)^d \delta(k + p' - p'')$ . Après suppression des facteurs du mouvement libre, nous trouvons alors la contribution du premier ordre à la matrice  $S$  :

$$\langle p'' | S^{(1)} | p' \rangle = \lim_{\substack{t' \rightarrow -\infty \\ t'' \rightarrow +\infty}} -i \tilde{V}(p'' - p') \int_{t'}^{t''} d\tau e^{i\tau(p''^2 - p'^2)/2m}.$$

Il est clair que l'intégrale n'a de limite qu'au sens des distributions :

$$\lim_{\substack{t' \rightarrow -\infty \\ t'' \rightarrow +\infty}} \int_{t'}^{t''} d\tau e^{i\tau s} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\tau s} = 2\pi \delta(s).$$

Nous obtenons alors une fonction  $\delta$  de conservation d'énergie :

$$\langle p'' | S^{(1)} | p' \rangle = -i2\pi \delta(E'' - E') \tilde{V}(p'' - p'), \quad E' = p'^2/2m, \quad E'' = p''^2/2m. \tag{9.19}$$

*Termes d'ordre supérieur.* Nous divisons maintenant l'intervalle  $[t', t'']$  en autant de sous-intervalles. Nous utilisons la représentation

$$\exp[ik_j x(\tau_j)] = \int d^d x_j \delta(x_j - x(\tau_j)) \exp(ik_j x_j).$$

Dans chaque sous-intervalle, la propagation est libre. Nous écrivons les éléments de matrice de l'évolution libre comme une transformée de Fourier (équation (9.2a)). Nous transformons de Fourier par rapport à  $x'$  et  $x''$ . Nous trouvons alors

$$\begin{aligned} \langle p'' | U^{(\ell)}(t'', t') | p' \rangle &= (-i)^\ell \int \prod_{j=1}^{\ell} d\tau_j \tilde{V}(k_j) \frac{d^d k_j}{(2\pi)^d} d^d x_j \prod_{j=2}^{\ell} \frac{d^d p_j}{(2\pi)^d} \\ &\times \exp \left[ \sum_{j=1}^{\ell+1} -ip_j^2(\tau_j - \tau_{j-1})/2m + ip_j(x_j - x_{j-1}) + ik_j x_j \right] \end{aligned}$$

avec les conventions

$$\tau_0 = t', \quad \tau_{\ell+1} = t'', \quad p_{\ell+1} = p'', \quad p_1 = p', \quad x_0 = x_{\ell+1} = 0.$$

Les intégrales sur les variables  $x_j$  donnent des fonctions  $\delta$  qui fixent les impulsions  $k_j = p_{j+1} - p_j$ . Après factorisation des facteurs du mouvement libre aux deux extrémités, on peut prendre les limites  $t'' \rightarrow +\infty$ ,  $t' \rightarrow -\infty$ . On obtient

$$\begin{aligned} \langle p'' | S^{(\ell)} | p' \rangle &= (-i)^\ell \int \prod_{j=1}^{\ell} d\tau_j \prod_{j=2}^{\ell} \frac{d^d p_j}{(2\pi)^d} e^{ip''^2 \tau_\ell / 2m} \tilde{V}(p'' - p_\ell) e^{ip_\ell^2 (\tau_{\ell-1} - \tau_\ell) / 2m} \\ &\dots \times e^{ip_1^2 (\tau_1 - \tau_2) / 2m} \tilde{V}(p_2 - p') e^{-ip'^2 \tau_1 / 2m}. \end{aligned} \quad (9.20)$$

Il reste à intégrer sur les variables  $\tau_j$ . Il est important de se souvenir que ces variables sont ordonnées. On pose

$$\tau_{j+1} = \tau_j + u_j, \quad u_j \geq 0.$$

L'intégrale restante sur  $\tau_1$ , qui est conséquence de l'invariance par translation dans le temps, donne  $2\pi\delta(E'' - E')$ , ce qui exprime la conservation de l'énergie. Les intégrales sur les variables  $u_j$  sur le demi-axe positif donnent (au sens des distributions)

$$\int_0^{+\infty} du_j e^{i(E'' - E(p_j))u_j} = \frac{i}{E'' - E(p_j) + i0}, \quad E(p) \equiv p^2/2m,$$

c'est-à-dire une distribution où le terme  $i0$  indique comment éviter le pôle à  $p_j^2 = p''^2$ . Le résultat final est donc

$$\langle p'' | S^{(\ell)} | p' \rangle = -2i\pi\delta(E'' - E') \int \tilde{V}(p'' - p_\ell) \prod_j \frac{d^d p_j}{(2\pi)^d} \frac{\tilde{V}(p_j - p_{j-1})}{E'' + i0 - E(p_j)}.$$

*Équation de Lippman-Schwinger.* On observe que la série des perturbations est une série géométrique dont la somme est solution d'une équation intégrale, dite équation de Lippman-Schwinger. En terme de l'opérateur  $T(E)$ , où  $E$  est complexe, solution de

$$T(E) = V - VG_0(E)T(E), \quad \text{avec} \quad G_0(E) = (H_0 - E)^{-1},$$

la quantité  $T(p'', p')$  qui apparaît dans l'équation (9.10) est alors donnée par

$$T(p'', p') = \langle p'' | T(E + i0) | p' \rangle \quad \text{pour} \quad E = p'^2/2m = p''^2/2m.$$

### 9.2.3 Autre méthode

Pour illustrer les méthodes de calcul d'intégrale de chemin, nous donnons une autre version du calcul. Nous cherchons la limite de l'expression

$$\begin{aligned} \langle p'' | S^{(\ell)}(t'', t') | p' \rangle &= (-i)^\ell e^{iE''t'' - iE't'} \int d^d x'' d^d x' e^{-ip''x'' + ip'x'} \int_{t'}^{t''} \prod_j d\tau_j \\ &\times \int \prod_{j=1}^\ell \tilde{V}(k_j) \frac{d^d k_j}{(2\pi)^d} \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} [dx(t)] \exp i \left[ \int_{t'}^{t''} \frac{1}{2} m \dot{x}^2(t) dt + \sum_j k_j x(\tau_j) \right]. \end{aligned} \quad (9.21)$$

Nous faisons une translation  $x(t) \mapsto x(t) + x'$  de sorte que  $x(t') = 0$ ,  $x(t'') = x'' - x'$ . Nous imposons ensuite la condition  $x(t'') = x'' - x'$  par une fonction  $\delta$  :

$$\delta(x(t'') - x'' + x) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d \lambda e^{i\lambda(x'' - x' - x(t''))}. \quad (9.22)$$

Après ces transformations, l'intégrale de chemin porte sur tous les chemins satisfaisant  $x(t') = 0$  et sans contrainte sur  $x(t'')$ . La dépendance en  $x'$  et  $x''$  est maintenant explicite et les intégrales peuvent être calculées :

$$\begin{aligned} \int d^d x' d^d x'' e^{i(p'x' - p''x'' + \sum_j k_j x' + \lambda(x'' - x'))} \\ = (2\pi)^{2d} \delta(\lambda - p'') \delta(p'' - p' - \sum k_j). \end{aligned} \quad (9.23)$$

Nous faisons alors le changement de variables  $k_j \mapsto p_{j+1}$  :

$$k_j = p_{j+1} - p_j, \quad p_1 = p'.$$

Le jacobien est égal à un. La deuxième fonction  $\delta$  dans (9.23) implique alors

$$p_{\ell+1} = p''.$$

Notons

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{\ell} k_j x(\tau_j) &= \sum_{j=1}^{\ell} (p_{j+1} - p_j) x(\tau_j) \\ &= - \sum_{j=1}^{\ell} p_j (x(\tau_j) - x(\tau_{j-1})) + p'' x(\tau_{\ell}) - p' x(\tau_0). \end{aligned} \quad (9.24)$$

Le choix  $\tau_0 = t'$  implique  $x(\tau_0) = 0$ .

Nous exprimons alors toute la dépendance en  $x(t)$  en fonction de sa dérivée  $\dot{x}(t)$ . Par exemple

$$x(\tau_j) - x(\tau_{j-1}) = \int_{t'}^{t''} \theta_j(t) \dot{x}(t) dt,$$

où  $\theta_j(t)$  est la fonction caractéristique de l'intervalle  $(\tau_{j-1}, \tau_j)$  : elle vaut 1 dans l'intervalle  $(\tau_{j-1}, \tau_j)$  et 0 en dehors.

Le coefficient de  $p''$  vient de la contribution dans (9.22) ( $\lambda = p''$ ) et dans (9.24) :

$$p'' (x(\tau_{\ell}) - x(t'')) = -p'' \int_{t'}^{t''} \theta_{\ell+1}(t) \dot{x}(t) dt, \quad \tau_{\ell+1} \equiv t''.$$

L'intégrale de chemin devient alors

$$\int_{x(t')=0} [dx(t)] \exp i \left[ \int_{t'}^{t''} dt \left( \frac{1}{2} m \dot{x}^2(t) - b(t) \dot{x}(t) \right) \right]$$

avec

$$b(t) = \sum_{j=1}^{\ell+1} p_j \theta_j(t).$$

Nous faisons un changement de variables  $x(t) \mapsto r(t)$  :

$$\dot{x}(t) = b(t)/m + \dot{r}(t), \quad x(t') = r(t') = 0.$$

Nous voyons que  $p_j$  est l'impulsion dans l'intervalle  $(\tau_{j-1}, \tau_j)$ . L'intégrale sur  $r(t)$  correspond à un mouvement libre. Elle est donnée par l'expression (9.2b) avec  $q' = 0$  et en intégrant sur  $q''$ . Elle vaut 1.

Il nous reste à calculer le terme explicite issu du changement de variables

$$-\frac{1}{2m} \int_{t'}^{t''} b^2(t) dt = -\frac{1}{2m} \sum_{j=1}^{\ell+1} (\tau_j - \tau_{j-1}) p_j^2,$$

où nous avons utilisé la propriété  $\theta_j(t) \theta_k(t) = \delta_{jk} \theta_j(t)$ . Tenant alors compte des facteurs du mouvement libre, on retrouve l'expression (9.20).

### 9.3 Matrice $S$ et formalisme holomorphe

Nous nous plaçons maintenant dans le cadre du formalisme holomorphe du chapitre 6. Ce formalisme, toutefois, est surtout utile si les états asymptotiques sont des états propres de l'oscillateur harmonique, une situation que l'on rencontre dans le cas de systèmes de bosons tels que ceux envisagés en section 6.6 et, comme conséquence, en théorie quantique des champs (relativiste ou non-relativiste).

Réécrivons d'abord l'expression (6.50) et l'intégrale de chemin dans le cas de l'évolution en temps réel. L'intégrale de chemin donnant l'opérateur d'évolution est formellement obtenue par la rotation  $t \mapsto it$ . Alors

$$U(z'', \bar{z}'; t'', t') = \int \left[ \frac{d\bar{z}(t) dz(t)}{2i\pi} \right] \exp [i\mathcal{A}(z(t), \bar{z}(t))],$$

$$\mathcal{A}(z(t), \bar{z}(t)) = -iz(t')\bar{z}(t') + \int_{t'}^{t''} dt [-i\bar{z}(t)\dot{z}(t) - h(z(t), \bar{z}(t))],$$

avec les conditions aux limites  $z(t'') = z''$ ,  $\bar{z}(t') = \bar{z}'$ .

*Matrice  $S$ .* De l'opérateur d'évolution on déduit la matrice  $S$ . Définissant la matrice  $S$  par l'expression (9.6), où  $H_0$  est l'hamiltonien (6.15), nous trouvons

$$S(z, \bar{z}) = \lim_{\substack{t' \rightarrow -\infty \\ t'' \rightarrow +\infty}} \int \frac{dz'' d\bar{z}''}{2i\pi} \frac{dz' d\bar{z}'}{2i\pi} e^{-z''\bar{z}''} e^{-z'\bar{z}'} e^{i\omega t''/2} \exp(z\bar{z}'' e^{i\omega t''}) \\ \times U(z'', \bar{z}'; t'', t') e^{-i\omega t'/2} \exp(z'\bar{z} e^{-i\omega t'}).$$

Utilisant l'équation (6.19), ou intégrant directement, nous en déduisons

$$S(z, \bar{z}) = \lim_{\substack{t' \rightarrow -\infty \\ t'' \rightarrow +\infty}} e^{i\omega t''/2} U(z e^{i\omega t''}, \bar{z} e^{-i\omega t''}; t'', t') e^{-i\omega t'/2}. \quad (9.25)$$

Comme dans le cas de l'intégrale sur les chemins dans l'espace réel, les configurations dans l'intégrale de chemin holomorphe qui contribuent à la matrice  $S$  sont, pour des temps grands, asymptotes aux solutions de l'équation du mouvement classique. Pour l'oscillateur harmonique  $H_0$ , cela signifie

$$z(t'') \underset{t'' \rightarrow +\infty}{\sim} z e^{i\omega t''}, \quad \bar{z}(t') \underset{t' \rightarrow -\infty}{\sim} \bar{z} e^{-i\omega t'}.$$

Une application quantique simple est l'évaluation des probabilités des transitions entre états propres de l'oscillateur harmonique induites par une perturbation dépendante du temps qui s'annule aux temps  $\pm\infty$ . Dans l'exemple de l'hamiltonien (6.34) où nous supposons que  $b(t), \bar{b}(t)$  s'annulent à  $t \rightarrow \pm\infty$ , l'expression (9.25) conduit à

$$S(z, \bar{z}) = \exp \left[ z\bar{z} + i \int_{-\infty}^{+\infty} dt (\bar{b}(t) e^{i\omega t} z + \bar{z} e^{-i\omega t} b(t)) \right. \\ \left. - \int_{-\infty}^{+\infty} dt d\tau \bar{b}(t) \theta(\tau - t) e^{-i\omega(\tau - t)} b(\tau) \right]. \quad (9.26)$$

Les coefficients du développement de  $S(z, \bar{z})$  en puissances de  $z$  et  $\bar{z}$  donnent les éléments de matrice  $S_{mn}$  des transitions entre les états propres correspondants de l'oscillateur harmonique, dues à une force dépendante du temps couplée linéairement aux position et impulsion :

$$S(z, \bar{z}) = \sum_{m,n} S_{mn} \frac{z^m}{\sqrt{m!}} \frac{\bar{z}^n}{\sqrt{n!}}.$$

## 9.4 Matrice $S$ dans la limite semi-classique

Nous montrons maintenant que la représentation de l'opérateur d'évolution par intégrale de chemin (équation (9.11)) conduit à une représentation des éléments de la matrice  $S$  qui est particulièrement bien adaptée à l'étude de la limite semi-classique. Calculons les éléments de la matrice  $S$  entre deux paquets d'onde :

$$\begin{aligned} \langle \psi_2 | S | \psi_1 \rangle &= \lim_{\substack{t' \rightarrow -\infty \\ t'' \rightarrow +\infty}} \int dq' dq'' \langle \psi_2 | e^{iH_0 t'' / \hbar} | \mathbf{q}'' \rangle \langle \mathbf{q}'' | U(t'', t') | \mathbf{q}' \rangle \\ &\times \langle \mathbf{q}' | e^{-iH_0 t' / \hbar} | \psi_1 \rangle. \end{aligned} \quad (9.27)$$

Introduisant deux fonctions d'onde  $\tilde{\psi}_1(\mathbf{p})$  et  $\tilde{\psi}_2(\mathbf{p})$ , dans la base des impulsions, associées aux vecteurs  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$ , nous pouvons définir :

$$\psi_1(\mathbf{q}, t) = \langle q | e^{-iH_0 t / \hbar} | \psi_1 \rangle = \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \tilde{\psi}_1(\mathbf{p}) \exp \left[ i \left( \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} - t \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right) / \hbar \right], \quad (9.28)$$

et une expression similaire pour  $\psi_2$ .

Nous avons montré que quand  $t \rightarrow \infty$  l'intégrale est dominée par  $\mathbf{p} = m\mathbf{q}/t$  (équations (9.3 à 9.5). Nous changeons alors de variables dans l'intégrale (9.27), posant

$$\mathbf{q}' = \frac{t'}{m} \mathbf{p}', \quad \mathbf{q}'' = \frac{t''}{m} \mathbf{p}'', \quad (9.29)$$

et obtenons

$$\begin{aligned} \langle \psi_2 | S | \psi_1 \rangle &\propto \lim_{\substack{t' \rightarrow -\infty \\ t'' \rightarrow +\infty}} \int dp' dp'' \tilde{\psi}_2^*(\mathbf{p}'') \tilde{\psi}_1(\mathbf{p}') \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( t'' \frac{\mathbf{p}''^2}{2m} - t' \frac{\mathbf{p}'^2}{2m} \right) \right] \\ &\times \langle t'' \mathbf{p}'' / m | U(t'', t') | t' \mathbf{p}' / m \rangle. \end{aligned} \quad (9.30)$$

Dans cette équation, nous remplaçons maintenant l'opérateur d'évolution par son expression en terme d'intégrale de chemin (9.11). Nous trouvons

$$\langle t'' \mathbf{p}'' / m | U(t'', t') | t' \mathbf{p}' / m \rangle = \int_{q(t')=t' \mathbf{p}' / m}^{q(t'')=t'' \mathbf{p}'' / m} [dq(t)] \exp(i\mathcal{A}(q)/\hbar).$$

Nous en concluons que la matrice  $S$  est obtenue en calculant l'intégrale de chemin avec des conditions aux limites de diffusion classique, c'est-à-dire en sommant sur tous les chemins asymptotes à temps long au mouvement libre. En particulier, si nous savons comment résoudre les équations du mouvement classique avec de telles conditions aux limites, nous pouvons calculer l'opérateur d'évolution et donc la matrice  $S$  pour  $\hbar$  petit. Ceci conduit aux approximations semi-classiques de la matrice  $S$ . Deux calculs dans cet esprit sont présentés dans ce chapitre, un calcul semi-classique dans le cas unidimensionnel et l'approximation eïkonale. Notons, cependant, que l'exemple unidimensionnel est, du point de vue de la diffusion, assez singulier en ce sens qu'un obstacle ne peut pas être contourné.

## 9.5 Approximation semi-classique : une dimension

Nous considérons l'hamiltonien ( $m = 1$ )

$$H = \frac{1}{2}p^2 + V(x).$$

Nous supposons le potentiel  $V$  analytique, décroissant suffisamment vite à grande distance pour que la matrice  $S$  existe. Nous déduisons les éléments de matrice  $S$  du calcul par intégrale de chemin de l'opérateur d'évolution. Comme nous l'avons déjà noté, dans la limite  $\hbar \rightarrow 0$  l'intégrale de chemin est dominée par les chemins classiques qui rendent l'action et donc l'intégrand stationnaire. Nous cherchons donc d'abord les trajectoires classiques.

### 9.5.1 Diffusion vers l'avant

Nous considérons une situation dans laquelle la diffusion classique vers l'avant est possible. Ceci implique que l'énergie du processus de diffusion est plus grande que la valeur maximale du potentiel. Nous résolvons alors l'équation du mouvement classique. Après une intégration, nous trouvons

$$\frac{1}{2}\dot{x}^2(\tau) + V(x) = \frac{1}{2}\kappa^2$$

avec les conditions aux limites

$$x(\tau') = x', \quad x(\tau'') = x''.$$

Cette équation s'intègre en

$$\tau = \pm \int^x \frac{dy}{\sqrt{\kappa^2 - 2V(y)}}.$$

Nous posons  $X = x'' - x'$ ,  $T = \tau'' - \tau'$ . Nous avons remarqué dans le calcul perturbatif que les chemins pertinents sont ceux qui satisfont aux conditions

aux limites de la diffusion classique. Une analyse non perturbative le confirme. Ceci signifie ici que  $X/T = k$  reste fini quand  $\tau' \rightarrow -\infty$ ,  $\tau'' \rightarrow \infty$ . Dans ce régime, la condition

$$T = \int_{x'}^{x''} \frac{dx}{\sqrt{\kappa^2 - 2V(x)}} \quad (9.31)$$

entraîne

$$\kappa = k + \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left( \frac{k}{\sqrt{k^2 - 2V(x)}} - 1 \right) + O(T^{-2}).$$

L'action de la trajectoire est alors

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= \frac{1}{2}\kappa^2 T - 2 \int V(x) d\tau = \frac{1}{2}\kappa^2 T - 2 \int_{x'}^{x''} \frac{V(x) dx}{\sqrt{\kappa^2 - 2V(x)}} + O(T^{-1}) \\ &= \frac{1}{2}k^2 T + \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left( \sqrt{k^2 - 2V(x)} - k \right) + O(T^{-1}). \end{aligned}$$

Nous transformons maintenant de Fourier par rapport à  $x'$  et  $x''$ . Comme le résultat ne dépend que de  $x'' - x'$ , nous obtenons un facteur  $\delta(k'' - k')$  qui exprime la conservation de l'énergie. En effet, dans ces conditions cinématiques particulières, la conservation de l'énergie  $k''^2 = k'^2$  entraîne la conservation de l'impulsion. Dans la limite  $\hbar \rightarrow 0$ , l'intégrale restante sur  $X$  peut être estimée par la méthode du col. À l'ordre dominant pour  $T \rightarrow \infty$ , nous n'avons besoin de prendre en compte que les termes d'ordre  $T$  dans l'équation du col. Nous trouvons

$$X = k'T \Rightarrow k' = k.$$

Nous observons que les termes proportionnels à  $T$  compensent les facteurs provenant du mouvement libre dans l'expression (9.7) de la matrice  $S$ . Nous en déduisons l'expression semi-classique

$$\ln S_+(k) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left( \sqrt{k^2 - 2V(x)} - k \right). \quad (9.32)$$

Le résultat est une pure phase,  $|S_+(k)| = 1$ ,  $S_+(k) = e^{2i\delta_+(k)}$ . La diffusion n'entraîne qu'un déphasage dans cette limite semi-classique, puisqu'il n'y a pas de réflexion.

### 9.5.2 Diffusion vers l'arrière

Nous supposons maintenant au contraire que l'énergie est plus petite que la valeur maximale du potentiel de sorte que, classiquement, il y a réflexion totale. Nous supposons aussi que la particule diffusée vient de  $-\infty$ . Alors, un calcul similaire au cas précédent nous donne l'action de la trajectoire classique

$$\mathcal{A} = \frac{1}{2T} (x' + x'' - 2x_0)^2 + 2 \int_{-\infty}^{x_0} dx \left( \sqrt{k^2 - 2V(x)} - k \right) + O(T^{-1}),$$

où  $x_0$  est le point de réflexion défini par  $k^2 = 2V(x_0)$ , et  $k = (2x_0 - x' - x'')/T$ .

Puisque le résultat ne dépend que de la combinaison  $x' + x''$ , nous trouvons après transformation de Fourier un facteur  $\delta(k'' + k')$  qui exprime la conservation de l'énergie. L'intégrale restante sur  $X = x' + x''$ , calculée par la méthode du col, donne

$$2x_0 - X = k'T, \quad k' = k,$$

et donc

$$\ln S_-(k) = \frac{2i}{\hbar} \int_{-\infty}^{x_0} dx \left( \sqrt{k^2 - 2V(x)} - k \right) + \frac{2ikx_0}{\hbar}.$$

Ici encore, puisqu'il y a classiquement réflexion totale,  $S_-(k)$  est une pure phase.

### 9.5.3 La région interdite

Il semblerait que seules les situations de diffusion classiquement permises soient accessibles au calcul semi-classique par cette méthode, alors que nous savons qu'il existe une diffusion à travers une barrière de potentiel par effet tunnel quantique. Toutefois, nous observons que nous obtenons des résultats non triviaux si nous prolongeons analytiquement les expressions obtenues dans la région interdite. L'ambiguïté de signe dans le prolongement analytique est fixée par la condition que  $|S_{\pm}| < 1$ .

Prenons le cas de la diffusion vers l'avant. Si  $k^2/2$  est inférieur à la valeur maximale de  $V$ ,  $i \ln S_+$  aura une partie réelle correspondant à une trajectoire réelle et une partie imaginaire correspondant à la trajectoire dans la région classiquement interdite. Supposons, par exemple, que  $[x_-, x_+]$  soit l'intervalle dans lequel  $V(x) \geq k^2/2$ . Alors l'expression (9.32) devient

$$\begin{aligned} \ln S_+(k) = & \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{x_-} dx \left( \sqrt{k^2 - 2V(x)} - k \right) + \frac{i}{\hbar} \int_{x_+}^{+\infty} dx \left( \sqrt{k^2 - 2V(x)} - k \right) \\ & - \frac{ik(x_+ - x_-)}{\hbar} - \frac{1}{\hbar} \int_{x_-}^{x_+} dx \sqrt{2V(x) - k^2}. \end{aligned}$$

Nous pouvons alors nous demander si ce résultat formel est raisonnable. Nous notons que l'amplitude obtenue est tout à fait analogue à ce que nous aurions obtenu par un calcul BKW de la fonction d'onde. De plus, la forme de l'effet tunnel est cohérente avec les résultats obtenus au chapitre 8. Par ailleurs, le résultat est physiquement raisonnable puisque nous retrouvons un effet d'onde évanescence comme attendu. Enfin, on peut se demander comment un résultat non nul est compatible avec l'unitarité de la matrice  $S$  puisque  $S_-$  est de module unité. Mais nous remarquons que  $S_+$  se comporte comme  $e^{-\text{const.}/\hbar}$  et donne donc une contribution à la relation d'unitarité invisible à tous les ordres du développement en puissances de  $\hbar$ .

*Effet tunnel et propagation en temps imaginaire.* Revenant aux équations du mouvement classique, nous observons que la traversée de barrière correspond à un temps imaginaire dans l'intégrale (9.31). De plus, la partie imaginaire de l'action, qui décrit l'effet tunnel lui-même, c'est-à-dire la probabilité de traversée de barrière, est entièrement déterminée par la propagation en temps imaginaire. Nous trouvons donc une nouvelle application de l'intégrale de chemin en temps imaginaire, que nous avons introduite pour d'autres raisons : elle permet de traiter les problèmes d'effet tunnel. En particulier, elle peut être utilisée pour calculer le temps de vie d'états métastables qui se désintègrent par effet tunnel comme nous l'avons montré au chapitre 8.

## 9.6 Approximation eïkonale

De la représentation de la matrice  $S$  par intégrale de chemin, il est facile de déduire une approximation pour l'amplitude de diffusion bien connue, valable à haute énergie et petit transfert d'impulsion : l'approximation eïkonale. Du point de vue de l'intégrale de chemin, cela correspond à une situation où le terme cinétique est grand par rapport au terme de potentiel, une situation assez semblable à celle envisagée en section 3.2.1.

### 9.6.1 Approximation eïkonale

En l'absence de potentiel, l'opérateur d'évolution est donné par une intégrale de chemin gaussienne que nous pouvons calculer comme d'habitude en résolvant d'abord l'équation du mouvement classique. La solution qui satisfait aux conditions aux limites de la représentation (9.11) et qui correspond à l'hamiltonien libre

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \text{ avec } \mathbf{p} \in \mathbb{R}^d$$

est

$$\mathbf{q}(t) = \mathbf{q}' + (\mathbf{q}'' - \mathbf{q}') \frac{t - t'}{t'' - t'}. \quad (9.33)$$

Translatant les variables d'intégration  $\mathbf{q}(t)$  par la solution classique (9.33), nous nous ramenons alors à une intégrale de normalisation que nous pouvons déterminer en la comparant au résultat exact ( $\hbar = 1$ )

$$\langle \mathbf{q}'' | U(t'', t') | \mathbf{q}' \rangle = \left( \frac{m}{2i\pi(t'' - t')} \right)^{d/2} \exp \left[ i \frac{m}{2} \frac{(\mathbf{q}'' - \mathbf{q}')^2}{(t'' - t')} \right]. \quad (9.34)$$

L'approximation eïkonale correspond au régime d'impulsion

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p} - \mathbf{k}/2, \quad \mathbf{p}'' = \mathbf{p} + \mathbf{k}/2, \quad \mathbf{p}^2 \rightarrow \infty, \quad \mathbf{p}^2 \gg \mathbf{k}^2.$$

Dans ces conditions, la partie cinétique de l'action domine le potentiel. Nous calculons alors l'intégrale de chemin comme dans le cas libre, développant les

chemins autour des trajectoires classiques (des lignes droites) du mouvement libre (9.33). Le calcul de l'opérateur d'évolution à l'ordre dominant est simple. Posant  $\mathbf{q}'' - \mathbf{q}' = \mathbf{s}$ ,  $(\mathbf{q}'' + \mathbf{q}')/2 = \mathbf{x}$ , nous obtenons

$$\langle \mathbf{p} + \mathbf{k}/2 | U(t'', t') | \mathbf{p} - \mathbf{k}/2 \rangle \sim \int ds dx \exp[-i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{s} + \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + i\mathcal{A}(\mathbf{s}, \mathbf{x})], \quad (9.35)$$

où l'action classique est maintenant

$$\mathcal{A}(\mathbf{s}, \mathbf{x}) = \frac{im}{2} \frac{\mathbf{s}^2}{t'' - t'} - i \int_{t'}^{t''} dt V \left( \mathbf{x} - \frac{\mathbf{s}}{2} + \frac{t - t'}{t'' - t'} \mathbf{s} \right). \quad (9.36)$$

La normalisation dans l'équation (9.35) est déterminée par comparaison au résultat (9.34) du mouvement libre.

Prenant la limite des grands temps et négligeant la contribution du potentiel, nous trouvons que l'intégrale sur  $\mathbf{s}$  est dominée par le col

$$\mathbf{s} = (t'' - t') \mathbf{p} / m. \quad (9.37)$$

Après la substitution (9.37) et les changements de variables  $t - (t' + t'')/2 \mapsto t$ , et donc  $|t| \leq (t'' - t')/2$ , l'argument du potentiel devient  $\mathbf{x} + t\mathbf{p}/m$ . Nous supposons que le potentiel décroît assez vite pour que l'intégrale dans (9.36) ait une limite à grand temps  $t'' - t' \rightarrow \infty$ . La contribution du potentiel à l'action prend alors la forme

$$-i \int_{-\infty}^{+\infty} dt V(\mathbf{x} + t\mathbf{p}/m).$$

Une fois cette limite prise, nous pouvons faire une translation arbitraire sur la variable d'intégration  $t$ . Nous pouvons donc translater le vecteur  $\mathbf{x}$ , dans l'argument du potentiel  $V$ , par un vecteur arbitraire proportionnel à  $\mathbf{p}$ . Nous choisissons ce vecteur de telle sorte que  $V$  ne dépende que de la composante  $\mathbf{b}$  de  $\mathbf{x}$  orthogonale à  $\mathbf{p}$  :

$$\mathbf{b} = \mathbf{x} - \mathbf{p} (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p} / \mathbf{p}^2). \quad (9.38)$$

L'intégrale sur la composante de  $\mathbf{x}$  le long de  $\mathbf{p}$  peut alors être effectuée et implique  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{k} = 0$ . Dans les conditions de l'approximation eïkonale, cette équation exprime la conservation de l'énergie.

Nous obtenons alors

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} + \mathbf{k}/2 | U(t'', t') | \mathbf{p} - \mathbf{k}/2 \rangle &\simeq \delta(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}) \mathcal{N}(\mathbf{p}) \int d^{d-1}b e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}} \\ &\times \exp \left[ -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt V \left( \frac{\mathbf{p}t}{m} + \mathbf{b} \right) \right] \end{aligned} \quad (9.39)$$

avec

$$\mathcal{N}(\mathbf{p}) \sim \exp \left[ i(t'' - t') \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right]. \quad (9.40)$$

L'équation (9.39) donne, après transformation de Fourier, les éléments de matrice de l'opérateur de diffusion  $T$  dans la base des impulsions (défini par l'équation (9.9)) :

$$\langle \mathbf{p} + \mathbf{k}/2 | T | \mathbf{p} - \mathbf{k}/2 \rangle \simeq \frac{i |\mathbf{p}|}{m} \int \frac{d^{d-1}b}{(2\pi)^d} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}} \times \left\{ \exp \left[ -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt V \left( \frac{\mathbf{p}t}{m} + \mathbf{b} \right) \right] - 1 \right\}. \quad (9.41)$$

Cette expression peut être réécrite en introduisant la transformée de Fourier du potentiel

$$V(\mathbf{q}) = \int d^d s e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{s}} \tilde{V}(\mathbf{s}).$$

On en déduit

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt V \left( \frac{\mathbf{p}t}{m} + \mathbf{b} \right) = \int d^d s \tilde{V}(\mathbf{s}) \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\mathbf{p}t/m + \mathbf{b})\cdot\mathbf{s}}.$$

L'intégrale sur le temps peut maintenant être effectuée et réduit l'intégrale sur  $\mathbf{s}$  à une intégrale sur les composantes de  $\mathbf{s}$  orthogonales à  $\mathbf{p}$  :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt V \left( \frac{\mathbf{p}t}{m} + \mathbf{b} \right) = 2\pi \frac{m}{|\mathbf{p}|} \int d^d s \delta(\mathbf{s} \cdot \hat{\mathbf{p}}) e^{i\mathbf{b}\cdot\mathbf{s}} \tilde{V}(\mathbf{s}).$$

Cette expression fait apparaître la transformée de Fourier de  $\tilde{V}$  mais dans l'espace aux  $d - 1$  dimensions orthogonales à  $\mathbf{p}$ .

Notons finalement que si nous développons ce résultat au premier ordre en  $V$  nous trouvons

$$\langle \mathbf{p} + \mathbf{k}/2 | T | \mathbf{p} - \mathbf{k}/2 \rangle = \tilde{V}(\mathbf{k}),$$

c'est-à-dire le terme de Born exact (*cf.* section 9.2).

## 9.6.2 Application au potentiel de Coulomb

Appliquons l'approximation eikonale à l'évaluation de l'amplitude de diffusion pour un potentiel en  $1/q$  du type potentiel de Coulomb. Dans ce cas, l'intégrale sur le potentiel n'a pas de limite à temps infini parce que le potentiel décroît trop lentement. Il est nécessaire d'intégrer sur un intervalle de temps fini. Nous paramétrons le potentiel sous la forme

$$V(\mathbf{q}) = \frac{\alpha}{|\mathbf{q}|}. \quad (9.42)$$

Alors

$$\int_{(t'-t'')/2}^{(t''-t')/2} dt V \left( \frac{\mathbf{p}t}{m} + \mathbf{x} \right) \simeq \frac{2\alpha m}{p} \ln((t'' - t')p/m\mathbf{b}). \quad (9.43)$$

L'apparition de cette phase infinie a le sens suivant : comme le potentiel de Coulomb décroît trop lentement à grande distance, la trajectoire classique tend trop lentement vers un mouvement libre qui, avec notre définition de la matrice  $S$ , a été pris comme mouvement de référence. Dans un potentiel de Coulomb, seules les sections efficaces sont bien définies, et non les amplitudes.

Factorisant la phase infinie, nous pouvons achever le calcul de l'amplitude de diffusion. Intégrant sur le vecteur  $\mathbf{b}$ , nous obtenons

$$T(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2, \mathbf{p} - \mathbf{k}/2) \simeq \frac{i\pi^{(d-1)/2}}{(2\pi)^d} \frac{p}{m} \exp \left[ -i \frac{2\alpha m}{p} \ln((t'' - t')p/mb) \right] \times \frac{\Gamma \left[ \frac{1}{2}(d-1) - \theta \right]}{\Gamma(\theta)} \left( \frac{\mathbf{k}^2}{4} \right)^{[\theta + (1-d)/2]} \quad (9.44)$$

avec

$$\theta = -i\alpha m/p. \quad (9.45)$$

À trois dimensions, l'expression (9.44) coïncide avec le résultat exact. Elle contient aussi, pour  $\alpha < 0$ , les énergies  $E_n$  des états liés du potentiel de Coulomb, qui sont données par les pôles de l'amplitude de diffusion :

$$\theta = \frac{d-1}{2} + n \Rightarrow E_n = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = -\frac{2\alpha^2 m}{(d-1+2n)^2}. \quad (9.46)$$

On reconnaît le résultat exact.

Enfin, l'approximation eïkonale a une généralisation relativiste qui de nouveau donne des expressions remarquablement intéressantes (mais non exactes) pour l'énergie des états en électrodynamique quantique. Elle est obtenue dans ce cas par une sommation approximative des diagrammes de Feynman en échelles et échelles croisées.

## 9.7 Théorie des perturbations et opérateurs

Pour illustrer les différences avec la formulation d'intégrale de chemin, nous rappelons ici la base de la théorie des perturbations dans le formalisme des opérateurs en mécanique quantique.

Le calcul de la matrice  $S$  peut se déduire, par exemple, du développement de l'opérateur (cf. l'équation (9.6))

$$\Omega(t) = e^{iH_0 t} e^{-iHt}, \quad (9.47)$$

où  $H_0$  est l'hamiltonien non perturbé et

$$V = H - H_0$$

la perturbation.

L'opérateur  $\Omega(t)$  satisfait l'équation

$$\dot{\Omega}(t) = -iV_1(t)\Omega(t) \quad (9.48)$$

avec la condition aux limites

$$\Omega(0) = \mathbf{1}.$$

L'opérateur  $V_1(t)$  est la perturbation en représentation d'interaction :

$$V_1(t) = e^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t}. \quad (9.49)$$

Il est facile de vérifier que la solution de l'équation (9.48) peut être formellement développée sous la forme

$$\Omega(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int dt_1 dt_2 \dots dt_n V_1(t_n) V_1(t_{n-1}) \dots V_1(t_2) V_1(t_1), \quad (9.50)$$

le domaine d'intégration dans le membre de droite étant

$$0 \leq t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_n \leq t.$$

Si nous introduisons maintenant le produit chronologique défini en section 4.6, le produit des facteurs qui apparaît dans le membre de droite devient un produit symétrique dans les arguments de temps. Nous pouvons alors symétriser le domaine d'intégration à condition de diviser par un facteur de comptage  $n!$  :

$$\Omega(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{\substack{0 \leq t_i \leq t \\ 1 \leq i < n}} dt_1 dt_2 \dots dt_n T [V_1(t_1) V_1(t_2) \dots V_1(t_n)]. \quad (9.51)$$

Cette expression peut être formellement réécrite

$$\Omega(t) = T \left[ \exp \left( -i \int_0^t dt' V_1(t') \right) \right]. \quad (9.52)$$

Nous pouvons en particulier appliquer ces résultats à un hamiltonien  $H$  perturbé par un terme linéaire en  $q$ . Nous pouvons en parallèle écrire une intégrale de chemin correspondant à la fonction de partition. Comparant le développement de l'intégrale de chemin en puissances de la perturbation avec l'expression (9.51), nous retrouvons la relation entre fonctions de corrélation et T-produits établie en section 4.6 (équation (4.34)).

## Exercices

### Exercice 9.1.

*Calcul de la matrice  $S$  : le potentiel  $\delta(x)$ .* Sommer le développement perturbatif de la matrice  $S$  dans le cas du potentiel

$$V(x) = \lambda \delta(x),$$

où la constante  $\lambda$  paramètre le potentiel.

*Solution.* Ce potentiel a une représentation de Fourier

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int dp e^{ipx},$$

ce qui montre que  $\tilde{V}$  est une constante. L'expression (9.17) se simplifie alors beaucoup. En fait, dans ce cas la représentation de Fourier n'est guère utile ; l'intégrale sur  $k_j$  redonne le potentiel initial et implique  $x(\tau_j) = 0$ . Nous utilisons maintenant l'expression (9.2b) (pour  $\hbar = m = d = 1$ ) et trouvons

$$\begin{aligned} \langle x'' | U^{(\ell)}(t'', t') | x' \rangle &= (-i\lambda)^\ell \int_{t'}^{t''} \left( \prod_{j=1}^{\ell} d\tau_j \right) e^{ix''/2(t''-\tau_\ell)} e^{ix'/2(\tau_1-t')} \\ &\times \prod_{j=1}^{\ell+1} \frac{1}{\sqrt{2i\pi(\tau_j - \tau_{j-1})}}, \end{aligned}$$

où les temps  $\tau_j$  sont ordonnés et  $\tau_0 = t'$ ,  $\tau_{\ell+1} = t''$ . Nous transformons de Fourier

$$\begin{aligned} \langle p'' | U^{(\ell)}(t'', t') | p' \rangle &= (-i\lambda)^\ell \int_{t'}^{t''} \left( \prod_{j=1}^{\ell} d\tau_j \right) e^{-ip''/2(t''-\tau_\ell)/2} e^{ip'/2(t'-\tau_1)/2} \\ &\times \prod_{j=2}^{\ell} \frac{1}{\sqrt{2i\pi(\tau_j - \tau_{j-1})}}. \end{aligned}$$

Cela donne la contribution

$$\langle p'' | S^{(\ell)} | p' \rangle = (-i\lambda)^\ell \int \left( \prod_{j=1}^{\ell} d\tau_j \right) e^{ip''\tau_\ell/2 - ip'\tau_1/2} \prod_{j=2}^{\ell} \frac{1}{\sqrt{2i\pi(\tau_j - \tau_{j-1})}}$$

à la matrice  $S$ . Nous changeons alors de variables :

$$\tau_{j+1} = \tau_j + u_j, \quad u_j \geq 0.$$

L'intégrale résiduelle sur  $\tau_1$  donne la fonction  $\delta$  de conservation de l'énergie :

$$E(p') \equiv p'^2/2 = E(p'') \equiv p''^2/2.$$

Les intégrales sur les  $u_i$  ont toutes la forme

$$\int_0^\infty \frac{du}{\sqrt{2i\pi u}} e^{ip''^2 u/2} = \frac{1}{\sqrt{2E}}.$$

Donc

$$\langle p'' | S^{(\ell)} | p' \rangle = 2\pi\delta(E(p'') - E(p'))(-i\lambda)^\ell (2E)^{-(\ell-1)/2}.$$

Les contributions perturbatives forment une série géométrique qu'il est facile de sommer :

$$\langle p'' | S | p' \rangle = 2\pi\delta(p' - p'') - 2\pi \frac{i\lambda}{1 + i\lambda/\sqrt{2E}} \delta(E(p'') - E(p')).$$

À une dimension, la conservation de l'énergie implique  $p'' = \pm p'$ . En effet,

$$\delta(E(p'') - E(p')) = \frac{1}{\sqrt{2E}} [\delta(p'' - p') + \delta(p'' + p')],$$

les deux cas correspondant à la transmission et à la réflexion. Appelant  $S_{\pm}$  les éléments de matrice  $S$  correspondants, nous trouvons

$$S_+(E) = 1 - i \frac{\lambda/\sqrt{2E}}{1 + i\lambda/\sqrt{2E}}, \quad S_-(E) = -i \frac{\lambda/\sqrt{2E}}{1 + i\lambda/\sqrt{2E}}.$$

La conservation des probabilités est bien vérifiée puisque

$$|S_+|^2 + |S_-|^2 = 1.$$

### Exercice 9.2.

*Limite semi-classique.* Utiliser l'expression (9.30) pour obtenir une approximation semi-classique pour la matrice  $S$  du potentiel à une dimension  $V(q) = \lambda/\cosh^2 q$ . Comparer avec les résultats exacts (qui peuvent être trouvés par exemple dans Newton [21]) pour les éléments de la matrice  $S$ ,  $S_+$  et  $S_-$  qui correspondent à la diffusion et la réflexion, à l'énergie  $E = k^2/2$  :

$$S_+ = \frac{\Gamma(d + \alpha)\Gamma(\alpha + 1 - d)}{\Gamma(1 + \alpha)\Gamma(\alpha)}, \quad S_- = \frac{\sin \pi d \Gamma(d + \alpha)\Gamma(\alpha + 1 - d)}{\sin \pi \alpha \Gamma(1 + \alpha)\Gamma(\alpha)}$$

avec

$$d = \frac{1}{2}(1 - \sqrt{1 - 8\lambda}) \quad \alpha = -ik, \quad k > 0.$$

# Chapitre 10

## Intégrales de chemin dans l'espace des phases

Dans ce chapitre, nous allons étendre la construction de l'intégrale de chemin du chapitre 2 à des hamiltoniens qui sont des fonctions générales  $H(p, q)$  des variables d'espace de phase  $p, q$ . Nous obtiendrons une intégrale de chemin dans laquelle l'action prend sa forme hamiltonienne et l'intégration porte sur des trajectoires  $\{p(t), q(t)\}$  dans l'espace de phase. Notons que ce formalisme a de nombreuses similitudes avec le formalisme holomorphe du chapitre 6.

Nous examinerons de façon détaillée l'exemple important des hamiltoniens quadratiques dans les variables d'impulsion. Nous vérifierons d'abord que dans les cas plus simples examinés dans les chapitres 2 et 5, l'intégration explicite sur les moments conjugués  $p(t)$  redonne l'intégrale de chemin usuelle.

Des hamiltoniens plus généraux se rencontrent dans la quantification du mouvement sur des variétés riemanniennes. Nous illustrerons cette analyse par la quantification du mouvement libre sur la sphère (ou hypersphère)  $S_{N-1}$ .

Mais avant cela, quelques rappels de mécanique analytique classique sont utiles.

### 10.1 Quelques rappels de mécanique analytique classique

Dans toute cette section le temps est réel. Nous nous plaçons dans un cadre où les équations du mouvement classique peuvent se déduire d'un principe d'action. L'action est l'intégrale d'un lagrangien :

$$\mathcal{A}(q) = \int dt \mathcal{L}(q, \dot{q}; t), \quad (10.1)$$

où les variables  $q_i(t)$  caractérisent, par exemple, la position d'une particule au temps  $t$ . Les équations du mouvement classique montrent que l'action est stationnaire par rapport aux variations de la trajectoire  $q(t)$  :

$$\frac{\delta \mathcal{A}}{\delta q_i(t)} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i}. \quad (10.2)$$

### 10.1.1 Symétries. Lois de conservation

Aux symétries continues de l'action correspondent des quantités conservées dans le mouvement classique. La stratégie générale pour obtenir ces lois de conservation est de faire des transformations du groupe de symétrie qui dépendent du temps et d'exprimer la stationnarité de l'action.

Supposons, par exemple, que le lagrangien ait une symétrie de rotation, c'est-à-dire soit invariant par toute transformation

$$q_i(t) \mapsto \sum_j R_{ij} q_j(t),$$

où  $R$  est une matrice orthogonale  $R^T R = 1$ , de déterminant 1 (un élément du groupe  $SO(N)$  pour les rotations de l'espace à  $N$  dimensions) :

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}; t) = \mathcal{L}(Rq, R\dot{q}; t).$$

On exprime alors que si  $q_i(t)$  est une solution classique, l'action est stationnaire par rapport à toute variation de  $q_i(t)$  et donc, en particulier, par rapport à une variation qui a la forme d'une rotation infinitésimale dépendante du temps

$$R_{ij}(t) = \delta_{ij} + \tau_{ij}(t).$$

Puisque la matrice  $R_{ij}$  est orthogonale,  $\tau_{ij}$  est antisymétrique :  $\tau_{ji} = -\tau_{ij}$ . Les variations correspondantes de la trajectoire sont

$$\delta q_i(t) = \sum_j \tau_{ij}(t) q_j(t) \Rightarrow \delta \dot{q}_i(t) = \sum_j [\tau_{ij}(t) \dot{q}_j(t) + \dot{\tau}_{ij}(t) q_j(t)]. \quad (10.3)$$

Si  $\tau$  est indépendant du temps, la variation de l'action s'annule à cause de la symétrie. La variation de l'action au premier ordre en  $\tau$  ne provient donc que de la dérivée de  $\tau$ , c'est-à-dire de  $\dot{q}$  :

$$\delta \mathcal{A}(q) = \int dt \sum_{ij} \dot{\tau}_{ij}(t) q_j(t) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i(t)}.$$

Annuler la variation de l'action, c'est écrire que la dérivée du coefficient de  $\dot{\tau}$  s'annule, et donc que le coefficient de  $\dot{\tau}$  est constant. Comme la matrice  $\tau$  est antisymétrique, seule la partie antisymétrique de son coefficient en  $ij$  doit s'annuler. Nous définissons

$$L_{ij} = q_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} - q_j \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}. \quad (10.4)$$

Alors

$$\dot{L}_{ij} = 0.$$

À la symétrie par rotation sont associées des constantes du mouvement  $L_{ij}$  en correspondance biunivoque avec les générateurs du groupe des rotations.

En dimension 3, la représentation antisymétrique du groupe  $SO(3)$  est isomorphe à la représentation vectorielle. Les constantes du mouvement correspondent au vecteur moment cinétique

$$L_i = \frac{1}{2} \sum_{jk} \epsilon_{ijk} L_{jk},$$

où  $\epsilon_{ijk}$  est le symbole complètement antisymétrique avec  $\epsilon_{123} = 1$ , ou en notation vectorielle :

$$\mathbf{L} = \mathbf{q} \times \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{q}}.$$

### 10.1.2 Invariance par translation dans le temps. Formalisme hamiltonien

Un autre exemple (un peu singulier) est fourni par les lagrangiens ne dépendant pas *explicitement* du temps. Si  $q_c(t)$  est une trajectoire classique, calculons l'action correspondant à  $q_c(t + \epsilon(t))$ , c'est-à-dire résultant d'un changement de paramétrisation du temps. Si nous développons alors pour  $\epsilon(t)$  petit, le premier ordre en  $\epsilon$  s'annule à cause des équations du mouvement. Notons d'abord

$$d_t q_c(t + \epsilon(t)) = (1 + \dot{\epsilon}) \dot{q}_c(t + \epsilon(t)).$$

Faisons ensuite dans l'action le changement de variable

$$t' = t + \epsilon(t) \Rightarrow dt' = (1 + \dot{\epsilon}) dt.$$

Après ce changement, les variations de l'action viennent de la dérivée, de la mesure et de la dépendance explicite de  $\mathcal{L}$  dans la variable de temps :

$$\delta \mathcal{A} = \int dt \left[ \dot{\epsilon} \left( \dot{q} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} - \mathcal{L} \right) - \epsilon \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \right].$$

Nous intégrons alors par parties et annulons le coefficient de  $\epsilon(t)$  :

$$\frac{d}{dt} \left( \dot{q} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} - \mathcal{L} \right) = - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}.$$

Nous en déduisons que si un système est invariant par translation dans le temps, ce qui implique que  $\partial\mathcal{L}/\partial t$  s'annule, la quantité

$$H = \dot{q} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}} - \mathcal{L}$$

est une constante du mouvement, dans laquelle on reconnaît l'énergie.

Plus généralement, il est utile d'introduire cette quantité  $H$  et de l'exprimer en fonction de

$$p(t) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}} \quad (10.5)$$

appelé moment conjugué à  $\dot{q}$ . On obtient ainsi l'hamiltonien

$$H(p, q; t) = p(t)\dot{q}(t) - \mathcal{L}(\dot{q}, q; t), \quad (10.6)$$

qui, comme conséquence de l'équation (10.5), est la transformée de Legendre du lagrangien. L'équation (10.5) exprime que le membre de droite de l'équation (10.6) est stationnaire par rapport à  $\dot{q}$ , à  $p, q$  fixés. La transformation de Legendre est involutive :  $\mathcal{L}$  et  $\dot{q}$  jouent un rôle symétrique à  $H$  et  $p$ . En effet, en variant l'équation par rapport à  $p$  (à  $q$  fixé),  $\dot{q}$  étant considéré comme une fonction de  $p$  par (10.5), on trouve

$$\dot{q}(t) = \frac{\partial H}{\partial p},$$

ce qui est la première équation du mouvement dans le formalisme hamiltonien. Par ailleurs, à cause de ces conditions de stationnarité, la dérivée de  $H + \mathcal{L}$  par rapport à n'importe quelle variable qui ne participe pas à la transformation de Legendre s'annule. En particulier,

$$\frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q} = 0.$$

Combinant cette équation avec l'équation du mouvement (10.2), on obtient la deuxième équation du mouvement dans le formalisme hamiltonien. On trouve donc

$$\dot{q}(t) = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p}(t) = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad (10.7)$$

des équations que l'on peut appeler aussi équations du mouvement dans l'espace de phase  $(p, q)$ . Ces équations s'obtiennent aussi à partir d'un principe d'action, en exprimant que l'action

$$\mathcal{A}(p, q) = \int dt [p(t)\dot{q}(t) - H(p(t), q(t); t)] \quad (10.8)$$

est stationnaire à la fois par rapport aux variations de  $p(t)$  et de  $q(t)$ .

Sous cette forme, la conservation de l'énergie quand  $H$  ne dépend pas explicitement du temps est immédiate.

Par ailleurs le terme

$$\int dt p(t)\dot{q}(t) = \oint pdq \tag{10.9}$$

ne dépend que de la trajectoire dans l'espace de phase mais pas de la vitesse sur la trajectoire. En fait, il est égal à l'aire comprise entre la trajectoire et l'axe  $p = 0$  (à plusieurs variables à la somme des aires). On peut l'antisymétriser en  $p$  et  $q$ . Dans la terminologie mathématique, il est l'intégrale d'une 2-forme, la forme symplectique  $\omega = \sum_i dp_i \wedge dq_i$ . Ce point de vue est particulièrement utile quand l'espace de phase a une topologie non triviale (comme dans la quantification du spin).

Les quantités conservées (10.4) associées à une symétrie de rotation (dans l'espace à  $N$  dimensions le groupe  $SO(N)$ ) prennent alors la forme

$$L_{ij} = q_i p_j - p_i q_j. \tag{10.10}$$

### 10.1.3 Transformations canoniques

Les transformations canoniques sont les transformations de l'espace de phase  $\{q_i, p_i\} \mapsto \{Q_i, P_i\}$  qui laissent la forme symplectique invariante. Elles ont une structure de groupe. Un ensemble de transformations triviales correspond à ajouter à  $p_i$  un gradient  $\partial_i F(q)$ . Cette transformation est induite par l'ajout au lagrangien d'un terme de dérivée totale par rapport au temps. Il est facile ensuite de caractériser les transformations infinitésimales qui n'ont pas cette forme. On trouve

$$Q_i = q_i + \varepsilon \frac{\partial T(p, q)}{\partial p_i} \quad P_i = p_i - \varepsilon \frac{\partial T(p, q)}{\partial q_i}, \tag{10.11}$$

où  $T(p, q)$  est arbitraire. On reconnaît les équations du mouvement si  $T$  est l'hamiltonien. Donc l'ensemble des transformations canoniques est associé à l'ensemble des hamiltoniens : l'application qui associe la position dans l'espace de phase au temps  $t$  à la position au temps initial est une transformation canonique.

On en déduit la forme intégrée de ces transformations. On se donne une fonction génératrice  $\mathcal{S}(q, Q)$  (l'action classique de la trajectoire qui relie  $q$  à  $Q$ ) et on pose

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial q_i} \quad P_i = -\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial Q_i}. \tag{10.12}$$

On vérifie directement l'invariance de la forme en faisant le changement en deux étapes  $\{q_i, p_i\} \mapsto \{q_i, Q_i\}$  puis  $\{q_i, Q_i\} \mapsto \{Q_i, P_i\}$ . Par la même méthode on vérifie que ce changement laisse aussi invariante la mesure de Liouville  $\prod_i dq_i dp_i$ . Ceci justifie en particulier la cohérence du choix de la mesure thermique

$$dpdq e^{-\beta H(p, q)}$$

en mécanique statistique classique.

### 10.1.4 Crochets de Poisson

Il est commode d'introduire les crochets de Poisson, limite semi-classique des commutateurs de la mécanique quantique

$$\{A(p, q), B(p, q)\} = \sum_i \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i}. \quad (10.13)$$

Plus précisément, si  $A(\hat{p}, \hat{q}), B(\hat{p}, \hat{q})$  sont deux opérateurs hermitiens

$$\{A(p, q), B(p, q)\} = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{i\hbar} [A(\hat{p}, \hat{q}), B(\hat{p}, \hat{q})] \Big|_{\hat{p} \rightarrow p, \hat{q} \rightarrow q}.$$

Avec cette définition,  $\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$  et une transformation canonique infinitésimale (10.11) agissant sur toute fonction de  $A$  de  $p, q$  s'écrivent

$$A(P, Q) = A(p, q) + \varepsilon \{A, T\}. \quad (10.14)$$

Comme les transformations canoniques forment un groupe, les crochets de Poisson induisent une structure d'algèbre de Lie. Cela signifie qu'ils satisfont à la propriété cyclique

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0. \quad (10.15)$$

En particulier, la dérivée par rapport au temps de toute fonction de  $p, q$  devient

$$d_t F(p, q) = \{F, H\}. \quad (10.16)$$

On en déduit l'invariance canonique des crochets de Poisson  $\{q_i(t), p_j(t)\}$ .

Par ailleurs les quantités conservées forment une algèbre de Lie. En effet on vérifie que si  $A(p, q)$  et  $B(p, q)$  sont deux constantes du mouvement

$$\{A, H\} = \{B, H\} = 0, \Rightarrow \{\{A, B\}, H\} = 0,$$

et donc  $\{A, B\}$  l'est aussi. En particulier, l'algèbre de Lie correspondant à une symétrie continue de l'action est représentée en termes de crochets de Poisson.

Par exemple,  $\mathbf{L}^2$ , le carré du moment cinétique (10.10),

$$\mathbf{L}^2 = \frac{1}{2} \sum_{ij} L_{ij}^2 = \mathbf{p}^2 \mathbf{q}^2 - (\mathbf{p} \cdot \mathbf{q})^2, \quad (10.17)$$

commute, au sens des crochets de Poisson avec tous les générateurs  $L_{ij}$  et correspond au Casimir du groupe.

## 10.2 Intégrale de chemin dans l'espace de phase

Si nous connaissons l'hamiltonien quantique explicitement et s'il contient au plus des termes quadratiques en  $p$ , nous pouvons généraliser la stratégie de

la section 2.2 et calculer l'opérateur statistique quantique, pour des intervalles de temps infinitésimaux, en résolvant l'équation de Schrödinger. Toutefois, le problème a souvent une formulation différente : nous ne connaissons que l'hamiltonien classique et nous voulons le quantifier. Bien entendu la solution de ce problème n'est pas unique puisque l'hamiltonien quantique dépend de l'ordre des opérateurs. Dans les exemples pratiques, la situation est un peu moins mauvaise car on cherche un hamiltonien quantique qui respecte les symétries de l'hamiltonien classique.

### 10.2.1 Intégrale de chemin

Nous considérons donc un hamiltonien quantique *local* général obtenu par une règle de quantification à ce point non spécifiée à partir d'un hamiltonien classique  $H(p, q, t)$ . Par une suite d'arguments heuristiques un peu naïfs, nous allons construire une représentation sous forme d'intégrale de chemin de l'opérateur statistique quantique solution de

$$\hbar \frac{\partial U}{\partial t}(t, t') = -H(t)U(t, t'), \quad U(t', t') = \mathbf{1}.$$

Nous partons de nouveau de l'expression (2.6) en termes d'éléments de matrice dans la base où l'opérateur position  $\hat{q}$  est diagonal :

$$\langle q'' | U(t'', t') | q' \rangle = \int \prod_{k=1}^{n-1} dq_k \prod_{k=1}^n \langle q_k | U(t_k, t_{k-1}) | q_{k-1} \rangle \quad (10.18)$$

avec les conventions

$$\begin{cases} t_k = t' + k\varepsilon, & t'' = t' + n\varepsilon, \\ q_0 = q', & q_n = q''. \end{cases}$$

Dans la limite  $n \rightarrow \infty$ ,  $\varepsilon \rightarrow 0$ , nous ramenons ainsi le calcul des éléments de matrice de l'opérateur  $U(t'', t')$  à l'évaluation des éléments de matrice  $\langle q | U(t + \varepsilon, t) | q' \rangle$  dans la limite des intervalles de temps infinitésimaux. Au premier ordre en  $\varepsilon$ , nous pouvons exprimer l'opérateur  $U(t, t - \varepsilon)$  en terme du hamiltonien :

$$U(t, t - \varepsilon) = \exp \left[ -\varepsilon \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t - \varepsilon/2) / \hbar \right] + O(\varepsilon^2), \quad (10.19)$$

où  $\hat{H}$  est un hamiltonien quantique qui a  $H$  comme limite classique.

Nous exprimons alors cette équation en termes d'éléments de matrice dans la base où l'opérateur de position est diagonal. Puisque l'hamiltonien  $\hat{H}$  est local, l'opérateur du membre de droite de l'équation (10.19) n'a pour  $\varepsilon \rightarrow 0$  d'éléments de matrice notables que pour  $|q - q'| \ll 1$ . Il est alors raisonnable de remplacer  $\hat{q}$  par une valeur moyenne  $\bar{q}$  qui tend vers la valeur  $q$  dans la limite  $q = q'$ . Dans cette approximation,  $\hat{H}$  ne reste fonction que du seul opérateur  $\hat{p}$

et le problème de l'ordre des opérateurs disparaît. Les éléments de matrice de l'opérateur  $U(t, t - \varepsilon)$  sont obtenus par transformation de Fourier :

$$\langle q | U(t, t - \varepsilon) | q' \rangle \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \left[ ip(q - q') - \varepsilon \hat{H}(p, \bar{q}, t - \varepsilon/2) \right] \right\}. \quad (10.20)$$

Si l'hamiltonien quantique est hermitien, et si l'on néglige sa dépendance dans le temps, alors  $U$  est également hermitien. Cette dernière condition n'est satisfaite dans l'estimation (10.20) que si  $\bar{q}$  est une fonction symétrique de  $q, q'$ .

Le problème de quantification se réduit maintenant au problème suivant : la connaissance du seul hamiltonien classique  $H$  ne détermine pas la valeur de  $\bar{q}$  pour  $q' \neq q$ , mais ne donne que  $\hat{H}(\hat{p}, \bar{q} = q)$  à  $\hbar = 0$ . Un choix de quantification est donc nécessaire. Notons que les équations

$$\bar{q}(q, q) = q, \quad \bar{q}(q, q') = \bar{q}(q', q)$$

ont pour conséquence

$$\bar{q}(q, q') = \frac{1}{2}(q + q') + O((q - q')^2). \quad (10.21)$$

La prescription dite de Wigner, qui a la propriété minimale d'associer à un hamiltonien classique réel un hamiltonien quantique hermitien correspond à prendre  $\hat{H} \equiv H$  et  $\bar{q} = \frac{1}{2}(q + q')$ .

Ce n'est que dans le cas particulier des hamiltoniens de la forme  $p^2 + V(q)$  que le résultat final est indépendant de ce choix de quantification, comme nous l'avons vu en section 2.2. En théorie quantique des champs, la situation est en un sens plus favorable, puisque pour des hamiltoniens locaux les commutateurs des opérateurs conjugués sont divergents et doivent être éliminés par renormalisation. La régularisation dimensionnelle est particulièrement utile dans ce contexte.

L'équation (10.18) prend alors la forme

$$\langle q'' | U(t'', t') | q' \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^n \frac{dp_k dq_k}{2\pi\hbar} \delta(q_n - q'') \exp[-\mathcal{S}_\varepsilon(p, q) / \hbar], \quad (10.22)$$

où  $\mathcal{S}_\varepsilon(p, q)$  est donné par

$$\mathcal{S}_\varepsilon = \sum_{k=1}^n \left[ -ip_k(q_k - q_{k-1}) + \varepsilon H(p_k, \bar{q}(q_k, q_{k-1}), \frac{1}{2}(t_k + t_{k-1})) \right]. \quad (10.23)$$

Introduisant une trajectoire dans l'espace de phase  $\{p(t), q(t)\}$  qui interpole entre les temps discrets :

$$p(t_k) = p_k, \quad q(t_k) = q_k,$$

nous pouvons prendre la limite formelle du temps continu  $\varepsilon \rightarrow 0$ ,  $n \rightarrow \infty$ . Dans cette limite  $\bar{q}(q_k, q_{k-1}) = q_k = q(t_k)$ . Nous obtenons alors l'intégrale de chemin dans l'espace de phase

$$\langle q'' | U(t'', t') | q' \rangle = \int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''} [dp(t)dq(t)] \exp[-\mathcal{S}(p, q)/\hbar] \quad (10.24)$$

qui s'exprime en terme de l'action classique en temps euclidien ou imaginaire, écrite dans le formalisme hamiltonien,

$$\mathcal{S}(p, q) = \int_{t'}^{t''} dt [-ip(t)\dot{q}(t) + H(p(t), q(t), t)]. \quad (10.25)$$

Notons que dans cette limite formelle, toute trace du choix de quantification a disparu.

## 10.2.2 Discussion

L'expression (10.24) est très esthétique puisqu'elle ne fait intervenir que l'action classique et la mesure invariante de Liouville sur l'espace de phase. Elle est en particulier formellement invariante par les transformations canoniques (10.12) définies en section 10.1.

Remarquons que bien que nous ayons calculé l'opérateur euclidien la mesure n'est pas réelle. La partie imaginaire provient de la forme symplectique dont nous avons vu qu'elle ne dépend que de la trajectoire et non de la façon dont elle est parcourue. Cette contribution est donc la même que le temps soit réel ou imaginaire.

Remarquons aussi que si l'espace de phase est compact (cas de la quantification des variables de spin), l'intégrale de la forme symplectique est définie modulo l'aire totale, et ceci implique des propriétés de quantification : l'aire totale doit être un multiple de  $2\pi\hbar$  pour que l'intégrale de chemin soit bien définie.

*L'espace d'intégration.* Quand on essaie de préciser l'espace des trajectoires qui contribuent à l'intégrale de chemin (10.24), on rencontre une première difficulté. Le terme qui connecte les différents temps dans l'expression (10.23) est maintenant  $ip_k(q_k - q_{k-1})$ . Il engendre des oscillations dans l'intégrale (10.22) qui supprime les trajectoires qui ne sont pas assez régulières. L'échelle typique de la différence  $(q_k - q_{k-1})$  pour des trajectoires qui contribuent est donnée par les valeurs typiques de  $p_k$ . Par exemple si, comme dans la section 2.2 l'hamiltonien est quadratique en  $p$ , les valeurs typiques de  $p_k$  dans l'intégrale (10.22) sont d'ordre  $1/\sqrt{\varepsilon}$  et on trouve que  $(q_k - q_{k-1})$  est d'ordre  $\sqrt{\varepsilon}$ , un résultat cohérent avec l'analyse de la section 2.2. De même, si nous réécrivons l'expression (10.23) pour transformer le terme  $ip_k(q_k - q_{k-1})$  en  $iq_k(p_k - p_{k-1})$  (« intégration par parties »), nous trouvons les conditions de régularité imposées à la fonction  $p(t)$ . Elles se déduisent des valeurs typiques de  $q_k$  dans

l'intégrale (10.22). Considérant de nouveau l'exemple d'un hamiltonien de la forme  $p^2 + V(q)$ , nous voyons que si par exemple  $V(q)$  croît comme  $q^{2N}$  pour  $|q| \rightarrow \infty$ , les valeurs typiques de  $q_k$  sont telles que  $\varepsilon q^{2N}$  est d'ordre 1, et donc la différence  $(p_k - p_{k-1})$  doit être d'ordre  $\varepsilon^{1/2N}$ . Pour un hamiltonien général la discussion devient évidemment assez compliquée.

*Remarque.* L'invariance canonique apparente ne peut être réelle que pour une classe très restreinte de transformations. En effet, on peut montrer que dans le cas unidimensionnel, un hamiltonien  $H$  à un seul degré de liberté peut toujours être ramené par une transformation canonique à un hamiltonien libre

$$p\dot{q} - H \longmapsto P\dot{Q} - \frac{1}{2m}P^2.$$

On pourrait en conclure alors un peu naïvement que l'approximation semi-classique est exacte. Il est facile de produire des exemples contraires. La forme discrète (10.23) montre l'origine de la difficulté. Une variable  $p_k$  est associée à une paire  $(q_k, q_{k-1})$ , et la forme discrète n'est pas invariante.

L'intégrale de chemin dans l'espace de phase est donc plus difficile à manipuler que l'intégrale dans l'espace des positions, définie précédemment, et a trouvé peu d'applications pratiques jusqu'à présent. Pour chaque exemple non standard il est nécessaire de retourner à la forme discrète (10.22) et de faire une analyse séparée.

De nouveau, l'extension à un nombre quelconque de degrés de liberté est immédiate. Exprimée en termes de l'action classique et de la mesure de Liouville, l'intégrale de chemin donnant l'opérateur statistique a la même forme que dans l'équation (10.24).

### 10.2.3 Évolution quantique

Dans le cas de l'évolution quantique, ce qui correspond à l'opérateur  $e^{-itH/\hbar}$  quand l'hamiltonien est indépendant du temps, la représentation (10.24) est remplacée par

$$\langle q'' | U(t'', t') | q' \rangle = \int [dp(t)dq(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}(p, q)\right). \quad (10.26)$$

L'action euclidienne  $\mathcal{S}$  dans l'intégrale de chemin est remplacée par  $\mathcal{A}(p, q)$ , l'action classique (10.8) du formalisme hamiltonien :

$$\mathcal{A}(p, q) = \int_{t'}^{t''} [p(t)\dot{q}(t) - H(p, q, t)] dt. \quad (10.27)$$

Même dans cette situation générale l'évolution quantique est obtenue en sommant sur tous les chemins pondérés par le poids complexe  $e^{i\mathcal{A}/\hbar}$ . C'est pourquoi les chemins proches des extrema de l'action, qui sont les chemins classiques, donnent encore les contributions principales à l'intégrale de chemin.

### 10.3 Lagrangiens quadratiques dans les vitesses

Nous avons expliqué les difficultés auxquelles on se heurte quand on essaie de définir une intégrale de chemin dans l'espace de phase. Pour montrer que l'expression (10.25) a toutefois, au moins une valeur heuristique, examinons le cas d'un hamiltonien général quadratique dans les impulsions.

#### 10.3.1 Vérifications

Vérifions d'abord que dans le cas des hamiltoniens de la forme

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q),$$

nous retrouvons le résultat (2.22) à partir de l'expression (10.24) en intégrant sur  $p(t)$ .

L'action classique est

$$\mathcal{S}(p, q) = \int_{t'}^{t''} dt \left[ -ip\dot{q} + \frac{p^2}{2m} + V(q) \right]. \quad (10.28)$$

Dans l'expression (10.24), l'intégrale sur les variables d'impulsion  $p$  est gaussienne. Suivant la stratégie expliquée dans le chapitre 2, nous changeons de variables :

$$p(t) = im\dot{q}(t) + r(t). \quad (10.29)$$

L'action devient

$$\mathcal{S}(q) = \int_{t'}^{t''} dt \left[ \frac{1}{2m} r^2(t) + \frac{1}{2} m\dot{q}^2 + V(q) \right]. \quad (10.30)$$

L'intégrale de chemin se factorise donc dans une intégrale sur  $r(t)$  :

$$\mathcal{N}(t', t'') = \int [dr(t)] \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \frac{r^2(t)}{2m} dt \right], \quad (10.31)$$

qui ne dépend plus du potentiel  $V(q)$  et ne donne qu'une normalisation  $\mathcal{N}$  fonction de  $t'$  et  $t''$ , et une intégrale sur  $q(t)$  :

$$\langle q'' | U(t'', t') | q' \rangle = \mathcal{N} \int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''} [dq(t)] \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \left( \frac{1}{2} m\dot{q}^2 + V(q) \right) \right]. \quad (10.32)$$

Le facteur de normalisation peut être calculé à partir de l'expression (10.22) :

$$\mathcal{N} = \left( \frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon} \right)^{n/2}. \quad (10.33)$$

Nous avons donc vérifié explicitement que l'expression (10.24) est cohérente avec l'expression (2.22).

*Champ magnétique.* Considérons maintenant un système couplé à un champ magnétique. L'hamiltonien peut s'écrire (équation (5.10))

$$H = \frac{1}{2m} [\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{q})]^2 + V(\mathbf{q}). \quad (10.34)$$

Pour éliminer le terme linéaire en  $\mathbf{p}$  dans l'action, nous changeons maintenant de variables, posant

$$\mathbf{p}(t) = im\dot{\mathbf{q}}(t) - e\mathbf{A}(\mathbf{q}(t)) + \mathbf{r}(t). \quad (10.35)$$

Après intégration sur  $\mathbf{r}(t)$ , nous obtenons une intégrale sur le chemin  $\mathbf{q}(t)$  avec l'action

$$\mathcal{S}(\mathbf{q}) = \int_{t'}^{t''} dt \left[ \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{q}}^2 + ie\mathbf{A}(\mathbf{q}) \cdot \dot{\mathbf{q}} - V(\mathbf{q}) \right],$$

où nous reconnaissons l'action classique euclidienne (5.12).

### 10.3.2 Lagrangien quadratique général

Dans le cas général, la forme quadratique dans les moments conjugués  $p$  du hamiltonien dépend des positions. Comme les problèmes nouveaux sont liés à la partie quadratique, nous nous limitons à des hamiltoniens purement quadratiques.

*Notation.* Dans cette partie, dans un souci de compacité, nous utilisons la notation des sommations implicites : on somme sur toute paire d'indices répétés haut-bas. Ainsi

$$x^\alpha y_\alpha \equiv \sum_\alpha x^\alpha y_\alpha.$$

L'hamiltonien quadratique dans les impulsions le plus général peut être obtenu à partir d'un lagrangien général quadratique dans les vitesses. En fait, dans tous les problèmes de quantification de ce type que l'on rencontre usuellement, la donnée initiale est le lagrangien classique.

Nous partons donc du lagrangien en temps réel

$$\mathcal{L}(\dot{q}, q) = \frac{1}{2}\dot{q}^\alpha g_{\alpha\beta}(q)\dot{q}^\beta, \quad (10.36)$$

où  $g_{\alpha\beta}(q)$  est une matrice positive.

Nous utiliserons aussi la notation traditionnelle  $g^{\alpha\beta}$  pour la matrice inverse de  $g_{\alpha\beta}$  :

$$g_{\alpha\gamma}(q)g^{\gamma\beta}(q) = \delta_\alpha^\beta,$$

où  $\delta_\alpha^\beta$  est le  $\delta$  de Kronecker, parce que les exemples les plus intéressants correspondent à la mécanique quantique sur des variétés riemanniennes. Le tenseur  $g_{\alpha\beta}(q)$  est alors le tenseur métrique.

L'hamiltonien classique correspondant est obtenu par transformation de Legendre. Le moment conjugué est

$$p_\alpha = \frac{\partial \mathcal{L}(\dot{q}, q)}{\partial \dot{q}^\alpha} = g_{\alpha\beta}(q)\dot{q}^\beta.$$

Nous obtenons alors l'hamiltonien

$$H(p, q) = p_\alpha \dot{q}^\alpha - \mathcal{L}(\dot{q}, q) = \frac{1}{2} p_\alpha g^{\alpha\beta}(q) p_\beta. \quad (10.37)$$

De nouveau l'intégration sur  $p(t)$  est gaussienne et peut être effectuée. Toutefois une difficulté surgit avec l'évaluation du déterminant résultant de l'intégration gaussienne et nous intégrons donc sur  $p(t)$  d'abord la forme discrète (10.20). L'expression (10.20) pour l'hamiltonien (10.37) s'écrit

$$\langle \mathbf{q} | U(t, t - \varepsilon) | \mathbf{q}' \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{\varepsilon}{\hbar} \left[ \frac{i}{\varepsilon} (q - q')^\alpha p_\alpha - \frac{1}{2} p_\alpha g^{\alpha\beta}(\bar{\mathbf{q}}) p_\beta \right] \right\}. \quad (10.38)$$

L'intégration sur  $p_\alpha$  donne

$$\langle \mathbf{q} | U(t, t - \varepsilon) | \mathbf{q}' \rangle = [2\pi\hbar\varepsilon \det \mathbf{g}(\bar{\mathbf{q}})]^{1/2} \exp [-\mathcal{S}(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; \varepsilon)/\hbar]$$

avec

$$\frac{\mathcal{S}}{\varepsilon} = \frac{1}{2} \frac{(q - q')^\alpha}{\varepsilon} g_{\alpha\beta}(\bar{\mathbf{q}}) \frac{(q - q')^\beta}{\varepsilon}, \quad (10.39)$$

et où  $\mathbf{g}$  dénote la matrice d'éléments  $g_{\alpha\beta}$ .

Retournant à l'expression (10.22) et prenant la limite continue formelle, nous vérifions que l'argument de l'exponentielle devient à nouveau l'action euclidienne  $\mathcal{S}$ , intégrale du lagrangien classique (10.36) où le temps est maintenant imaginaire :

$$\mathcal{S}(\mathbf{q}) = \int_{t'}^{t''} dt \frac{1}{2} \dot{q}^\alpha g_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \dot{q}^\beta. \quad (10.40)$$

Ce n'est pas surprenant puisque, pour intégrer sur les moments  $p_\alpha$ , on résout d'abord l'équation du mouvement classique pour  $p_\alpha$ .

Toutefois, à la différence des deux exemples précédents, l'intégration a engendré une normalisation  $\mathcal{N}(\mathbf{q})$  qui a une dépendance non triviale en  $q(t)$  :

$$\langle \mathbf{q}'' | U(t''t') | \mathbf{q}' \rangle = \int [dq(t)] \mathcal{N}(\mathbf{q}) \exp [-\mathcal{S}(\mathbf{q})/\hbar] \quad (10.41)$$

avec

$$\mathcal{N}(\mathbf{q}) \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} (2\pi\hbar\varepsilon)^{-n/2} \prod_{i=1}^n [\det \mathbf{g}(\bar{\mathbf{q}})]^{1/2}. \quad (10.42)$$

Nous trouvons donc une correction quantique (elle n'a pas de facteur  $1/\hbar$ ) infinie à l'action classique de la forme

$$\mathcal{N}(\mathbf{q}) \propto \exp \left[ \frac{1}{2\varepsilon} \int_{t'}^{t''} \ln \det \mathbf{g}[\mathbf{q}(t)] dt \right], \quad (10.43)$$

ou de façon équivalente utilisant l'identité,  $\ln \det \mathbf{g} = \text{tr} \ln \mathbf{g}$ ,

$$\mathcal{N}(\mathbf{q}) \propto \exp \left[ \frac{1}{2\varepsilon} \int_{t'}^{t''} \text{tr} \ln \mathbf{g}[\mathbf{q}(t)] dt \right]. \quad (10.44)$$

Un calcul formel, partant de l'expression (10.24), donne un résultat similaire avec  $1/\varepsilon$  remplacé par  $\delta(0)$  ( $\delta$  étant la fonction  $\delta$  de Dirac). La difficulté que nous rencontrons ici est directement liée au problème de l'ordre des opérateurs en mécanique quantique. Dans un développement de l'intégrale de chemin en puissances de  $\hbar$  (développement semi-classique), les contributions (corrections quantiques) venant de l'action classique seule sont divergentes à partir de l'ordre  $\hbar$ . Ces divergences sont compensées par les contributions venant de la mesure (10.44). Toutefois, dans le formalisme continu la compensation est formelle et la partie finie restante ambiguë. Il est nécessaire de revenir à la forme discrète (10.22), qui reflète un choix de quantification, pour la calculer. Une autre façon directe de comprendre cette ambiguïté est de remarquer que, puisque dans l'expression (10.42) la différence  $|q - q'|$  est génériquement d'ordre  $\sqrt{\varepsilon}$ , un changement de quantification qui affecte  $\bar{q}$  à l'ordre  $(q - q')^2$  (équation (10.21)) modifie  $\bar{q}$  par une quantité d'ordre  $\varepsilon$ . Dans ces conditions,  $\mathbf{g}(\bar{q})$  ainsi que  $\text{tr} \ln \mathbf{g}$  varient également par une quantité d'ordre  $\varepsilon$ . La modification de  $\mathcal{N}(q)$  engendre alors une correction quantique *finie* (d'ordre  $\hbar$ ) à l'action classique, typique de la commutation des opérateurs d'impulsion et position.

Une fois de plus, nous trouvons une relation entre ordre des opérateurs quantiques et ambiguïtés de la limite continue. Dans la situation générique (c'est-à-dire en l'absence de symétries), les différentes limites continues diffèrent ici par un potentiel arbitraire, c'est-à-dire par un nombre infini de paramètres.

*Remarque.* Dans le cas où  $g_{\alpha\beta}$  est le tenseur métrique sur une variété riemannienne, le facteur (10.42) reconstruit formellement la mesure covariante sur la variété. Montrons en effet l'invariance de forme de l'intégrale de chemin par changement de coordonnées dans l'espace des positions. Posons

$$q^\alpha = f^\alpha(q'), \quad T_{\beta}^{\alpha}(q') = \frac{\partial f^\alpha}{\partial q'^{\beta}}, \quad \det T \neq 0.$$

Alors

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \dot{q}'^\alpha g'_{\alpha\beta}(q') \dot{q}'^\beta$$

avec

$$g'_{\alpha\beta}(q') = T_{\alpha}^{\gamma} T_{\beta}^{\delta} g_{\gamma\delta}(q).$$

En même temps, la mesure fonctionnelle est multipliée par le jacobien du changement de variable :

$$dq = \det T dq'.$$

Nous notons alors

$$\sqrt{\det \mathbf{g}} \det T = \sqrt{\det \mathbf{g}'}$$

Avec ces définitions la forme de l'intégrale de chemin est restée invariante.

## 10.4 Mouvement libre sur la sphère ou rotateur rigide

Pour illustrer la discussion de l'hamiltonien général quadratique dans les impulsions, nous quantifions maintenant le mouvement libre sur la sphère, ce qui équivaut à quantifier un rotateur rigide avec symétrie  $O(N)$  (ce modèle est aussi le modèle  $\sigma$  non-linéaire  $O(N)$  à une dimension). L'exemple  $N = 2$  a déjà été traité en section 5.6.

Le lagrangien quadratique dans les vitesses, décrivant le mouvement libre sur la sphère  $S_{N-1}$ , et donc invariant par rotation, a nécessairement la forme

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} R^2 \int dt \dot{\mathbf{r}}^2(t),$$

où  $R$  est une constante, et  $\mathbf{r}$  un vecteur de longueur unité :

$$\mathbf{r}^2(t) = 1. \quad (10.45)$$

### 10.4.1 Hamiltonien

Pour passer à l'hamiltonien, il faut soit imposer la contrainte (10.45) par un paramètre de Lagrange, soit paramétrer la sphère en termes de variables indépendantes  $q^\alpha$ . Dans ce dernier cas, l'hamiltonien prend la forme

$$H = \frac{1}{2} g^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) p_\alpha p_\beta, \quad (10.46)$$

où  $g_{\alpha\beta}(\mathbf{q})$  est l'inverse du tenseur métrique sur la sphère.

D'après la discussion de la section 10.3, les éléments de matrice de  $e^{-\beta H}$  sont alors donnés par l'intégrale de chemin

$$\langle \mathbf{q}'' | e^{-\beta H} | \mathbf{q}' \rangle = \int \left[ \sqrt{g(\mathbf{q}(t))} d\mathbf{q}(t) \right] \exp \left[ -\frac{1}{2} \int_0^\beta dt g_{\alpha\beta}(\mathbf{q}(t)) \dot{q}^\alpha \dot{q}^\beta \right], \quad (10.47)$$

où  $g(\mathbf{q})$  est le déterminant de la matrice  $g_{\alpha\beta}$ , engendrant la mesure invariante sur la sphère.

Pour paramétrer la sphère, nous pouvons, par exemple, choisir les  $N - 1$  premières composantes  $q^\alpha$  du vecteur  $\mathbf{r}$  comme paramètres. Cette paramétrisation est évidemment singulière, comme toute autre paramétrisation globale de la sphère pour  $N > 2$  (il faut au moins deux cartes). Localement

$$\mathbf{r} \equiv (\mathbf{q}, \sqrt{1 - \mathbf{q}^2}).$$

On en déduit

$$\dot{\mathbf{r}}^2 = \dot{\mathbf{q}}^2 + \left( d_t \sqrt{1 - \mathbf{q}^2} \right)^2 = \dot{\mathbf{q}}^2 + (\mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{q}})^2 / (1 - \mathbf{q}^2).$$

La métrique  $g_{\alpha\beta}$  sur la sphère dans cette paramétrisation s'écrit

$$g_{\alpha\beta}(q)/R^2 = \delta_{\alpha\beta} + \frac{q_\alpha q_\beta}{1 - \mathbf{q}^2}. \quad (10.48)$$

L'hamiltonien est caractérisé par la matrice inverse  $g^{\alpha\beta}$  :

$$R^2 g^{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} - q_\alpha q_\beta,$$

et donc

$$H = \frac{1}{2R^2} [\mathbf{p}^2 - (\mathbf{p} \cdot \mathbf{q})^2].$$

Sous cette forme, il est possible de reconnaître le carré du moment cinétique (10.17) car le carré du vecteur position  $\mathbf{r}$  est 1, et une composante de  $\mathbf{r}$  est contrainte et n'a pas de moment conjugué. En effet, les variations de  $q_\alpha$  dans une rotation infinitésimale (10.3) prennent la forme

$$\delta q_\alpha = \sum_{\beta} \tau_{\alpha\beta} q_\beta + \tau_{\alpha N} \sqrt{1 - \mathbf{q}^2}.$$

Les quantités conservées (10.4, 10.10) sont alors

$$L_{\alpha\beta} = q_\alpha p_\beta - q_\beta p_\alpha, \quad L_{\alpha N} = \sqrt{1 - \mathbf{q}^2} p_\alpha.$$

On en déduit

$$\mathbf{L}^2 = \sum_{\alpha < \beta} L_{\alpha\beta}^2 + \sum_{\alpha} L_{\alpha N}^2 = \mathbf{p}^2 - (\mathbf{p} \cdot \mathbf{q})^2,$$

En conséquence, l'hamiltonien correspondant à la quantification du mouvement libre sur la sphère  $S_{N-1}$  prend la forme

$$H = \frac{1}{2R^2} \mathbf{L}^2, \quad (10.49)$$

où le vecteur  $\mathbf{L}$  est l'opérateur moment cinétique qui représente l'ensemble des  $N(N-1)/2$  générateurs de l'algèbre de Lie du groupe  $SO(N)$  agissant sur l'espace de Hilbert.

L'hamiltonien quantique du rotateur rigide  $O(N)$  peut aussi être obtenu en partant de l'hamiltonien libre dans  $\mathbb{R}^N$ , en passant en variables radiale et angulaires, et en figeant la variable radiale.

### 10.4.2 Le spectre du rotateur rigide : intégrale de chemin

*Intégrale de chemin.* Pour écrire l'intégrale de chemin, nous avons encore besoin du déterminant du tenseur métrique (10.48) :

$$\det \mathbf{g} = R^{2N} / (1 - \mathbf{q}^2).$$

On note alors que la mesure d'intégration dans l'intégrale de chemin peut se réécrire en introduisant le vecteur initial  $\mathbf{r}$ . En effet

$$\frac{d^{N-1}q}{\sqrt{1 - \mathbf{q}^2}} = d^N r \delta(1 - \mathbf{r}^2).$$

Sous cette forme, l'invariance formelle par rotation de l'intégrale de chemin est explicite. Nous pouvons alors réécrire l'intégrale de chemin (10.47) en termes d'un vecteur  $\mathbf{r}$  de  $\mathbb{R}^N$  de longueur unité 1 :

$$\langle \mathbf{r}'' | e^{-\beta H} | \mathbf{r}' \rangle = \int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}'}^{\mathbf{r}(\beta)=\mathbf{r}''} [\mathbf{dr}(t) \delta(1 - \mathbf{r}^2(t))] \exp \left[ -\frac{1}{2} R^2 \int_0^\beta dt \dot{\mathbf{r}}^2(t) \right]. \tag{10.50}$$

*Le spectre : calcul semi-classique.* Nous présentons maintenant une application de ce formalisme et un exemple supplémentaire de calcul semi-classique.

Nous considérons l'hamiltonien (10.49) pour  $R = 1$  :

$$H = \frac{1}{2} \mathbf{L}^2, \tag{10.51}$$

où le vecteur  $\mathbf{L}$  est le moment cinétique. L'intégrale de chemin (10.50) devient alors

$$\langle \mathbf{r}'' | e^{-\beta H} | \mathbf{r}' \rangle = \int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}'}^{\mathbf{r}(\beta)=\mathbf{r}''} [\mathbf{dr}(t) \delta(1 - \mathbf{r}^2(t))] \exp \left[ -\frac{1}{2} \int_0^\beta dt \dot{\mathbf{r}}^2(t) \right]. \tag{10.52}$$

Appelons  $\theta$  l'angle entre  $\mathbf{r}'$  et  $\mathbf{r}''$  :

$$\cos \theta = \mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}'', \quad 0 \leq \theta \leq \pi. \tag{10.53}$$

Nous introduisons maintenant la matrice  $\mathbf{R}(t)$  qui agit sur  $\mathbf{r}(t)$  et applique par une rotation dans le plan  $(\mathbf{r}', \mathbf{r}'')$   $\mathbf{r}'$  sur  $\mathbf{r}''$  en un temps  $\beta$ . Sa restriction au plan  $(\mathbf{r}', \mathbf{r}'')$  a le forme

$$\begin{bmatrix} \cos(\theta t/\beta) & \sin(\theta t/\beta) \\ -\sin(\theta t/\beta) & \cos(\theta t/\beta) \end{bmatrix}. \tag{10.54}$$

Elle est l'identité dans le sous-espace orthogonal au plan  $(\mathbf{r}', \mathbf{r}'')$ .

Nous changeons alors de variables, posant

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{R}(t) \rho(t). \tag{10.55}$$

Appelons  $u$  et  $v$  les deux composantes de  $\rho$  dans le plan  $(\mathbf{r}', \mathbf{r}'')$ ,  $u$  étant la composante le long de  $\mathbf{r}'$ , et  $\rho_T$  la composante dans le sous-espace orthogonal. Avec cette notation, nous trouvons

$$\langle \mathbf{r}'' | e^{-\beta H} | \mathbf{r}' \rangle = \int_{\rho(0)=\mathbf{r}'}^{\rho(\beta)=\mathbf{r}''} [d\rho(t) \delta(1 - \rho^2(t))] \exp[-\mathcal{S}(\rho)] \quad (10.56)$$

avec

$$\mathcal{S}(\rho) = \frac{1}{2} \int_0^\beta dt \left( \dot{\rho}_T^2 + \dot{u}^2 + \dot{v}^2 + \frac{\theta^2}{\beta^2} (u^2 + v^2) + 2 \frac{\theta}{\beta} (\dot{v}u - \dot{u}v) \right). \quad (10.57)$$

Nous utilisons alors

$$u^2 + v^2 + \rho_T^2 = 1, \quad (10.58)$$

pour réécrire l'action

$$\mathcal{S}(\rho) = \frac{1}{2} \frac{\theta^2}{\beta} + \frac{1}{2} \int_0^\beta dt \left( \dot{\rho}_T^2 - \frac{\theta^2}{\beta^2} \rho_T^2 + \dot{u}^2 + \dot{v}^2 + 2 \frac{\theta}{\beta} (\dot{v}u - \dot{u}v) \right). \quad (10.59)$$

À la différence du cas abélien où le calcul était exact, nous ne pouvons faire ici qu'un développement pour  $\beta$  petit (haute température). Ceci correspond à la limite semi-classique BKW, qui est valable dans la limite des grands nombres quantiques. Nous négligeons donc les contributions exponentiellement petites en  $\beta^{-1}$ . À l'ordre dominant, seules les petites fluctuations autour de la solution classique sont importantes. Nous éliminons donc la variable  $u$  de l'action (10.59) en utilisant l'équation (10.58) :

$$u = (1 - v^2 - \rho_T^2)^{1/2}, \quad (10.60)$$

et développons l'action en puissances de  $\rho_T$  et  $v$ . Le résultat à l'ordre dominant est donné par l'approximation gaussienne et ne dépend que des termes quadratiques. En particulier, le terme linéaire en  $\theta$  dans (10.59) ne contribue pas à cet ordre, l'intégrale sur  $v(t)$  est donc indépendante de  $\theta$  et ne contribue qu'à la normalisation. La fin du calcul est similaire à celle de la section 2.4, qui conduit au résultat (2.33). Les composantes de  $\rho_T$  deviennent des variables indépendantes et l'intégrale sur  $\rho_T$  est la  $(N-2)$ ième puissance de l'intégrale sur une composante. Puisque chaque composante satisfait les conditions aux limites

$$\rho_i(0) = \rho_i(\beta) = 0,$$

nous pouvons utiliser le résultat (2.37) de l'oscillateur harmonique pour  $q' = q'' = 0$ ,  $\hbar = m = 1$  et  $\omega = i\theta/\beta$  et donc

$$\langle \mathbf{r}'' | e^{-\beta H} | \mathbf{r}' \rangle \sim K(\beta) \left( \frac{\theta}{2\pi\beta \sin \theta} \right)^{(N-2)/2} e^{-\theta^2/2\beta} \quad (10.61)$$

où la constante de normalisation  $K(\beta)$  est indépendante de  $\theta$  :

$$K(\beta) = (2\pi\beta)^{-1/2}.$$

Pour extraire les valeurs propres de  $H$ , nous projetons cette expression sur les polynômes orthogonaux  $P_l^N(\cos\theta)$  associés au groupe  $SO(N)$  :

$$\int_0^\pi d\theta (\sin\theta)^{N-2} P_l^N(\cos\theta) P_{l'}^N(\cos\theta) = \delta_{ll'}. \quad (10.62)$$

Ils sont proportionnels aux polynômes de Gegenbauer  $C_l^{(N-2)/2}$ . Pour  $\beta \rightarrow 0$ , nous n'avons besoin que des deux premiers termes du développement des polynômes  $P_l^N$  à  $\theta = 0$  :

$$P_l^N(\cos\theta) = P_l^N(1) \left( 1 - \frac{l(l+N-2)}{2(N-1)} \theta^2 + O(\theta^4) \right). \quad (10.63)$$

Si nous supposons qu'à chaque valeur de  $l$  ne correspond qu'une valeur propre  $E_l$  de  $H$ , avec la dégénérescence

$$\delta_l(N) = \frac{\Gamma(l+N-2)\Gamma(N+2l-2)}{\Gamma(N-1)\Gamma(l+1)},$$

nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} e^{-\beta E_l} &\sim \frac{1}{\delta_l(N)} \frac{1}{(2\pi\beta)^{(N-2)/2}} \int_0^\pi d\theta P_l^N(\cos\theta) (\theta \sin\theta)^{(N-2)/2} e^{-\theta^2/(2\beta)} \\ &= e^{-\beta E_0} \left( 1 - \frac{1}{2} l(l+N-2)\beta + O(\beta^2) \right) \end{aligned} \quad (10.64)$$

et donc

$$E_l = E_0 + \frac{1}{2} l(l+N-2) + O(\beta). \quad (10.65)$$

Puisque  $E_l$  est indépendant de  $\beta$ , nous déduisons de ce calcul le résultat exact, à une constante additive  $E_0$  près. Les corrections d'ordre au moins  $\beta$  s'annulent nécessairement.

Un commentaire s'impose maintenant au sujet de ce résultat : nous avons expliqué en section 10.3 que l'intégrale de chemin (10.47, 10.52) est mal définie parce que la mesure donne formellement des contributions divergentes. Nous avons affirmé que ces divergences étaient compensées par des divergences de la théorie des perturbations. En conséquence, les expressions résultantes sont ambiguës et ces ambiguïtés reflètent le problème de l'ordre des opérateurs dans la quantification de l'hamiltonien classique. Cependant, nous obtenons ici un résultat bien défini. La raison en est qu'à chaque étape du calcul nous avons imposé la symétrie par le groupe  $SO(N)$ . Ceci choisit implicitement parmi toutes les discrétisations possibles de l'intégrale de chemin une sous-classe qui correspond aux quantifications respectant la symétrie. L'étude générale du modèle  $\sigma$  non-linéaire montre qu'un tel hamiltonien est entièrement déterminé à une constante additive près. Les ambiguïtés de la quantification sont donc entièrement contenues dans  $E_0$ .

## Exercice

Un hamiltonien quartique en  $p$ . Pour illustrer les résultats obtenus dans ce chapitre on considère un hamiltonien quantique de degré 4 en  $p$  :

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}(\hat{p}^2 + \omega^2 \hat{q}^2) + \frac{1}{4}\lambda(\hat{p}^2 + \omega^2 \hat{q}^2)^2,$$

avec  $\lambda > 0$ .

Le spectre s'obtient immédiatement à partir du spectre de l'oscillateur harmonique :

$$E_k = -\omega \left(k + \frac{1}{2}\right) + \lambda \omega^2 \left(k + \frac{1}{2}\right)^2.$$

Calculer la fonction de partition par l'intégrale de chemin de l'espace des phases. En déduire le spectre.

*Solution.* La fonction de partition pour cet hamiltonien est

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int [dpdq] \exp \int_0^\beta dt [ip(t)\dot{q}(t) - H(p(t), q(t))], \quad (10.66)$$

où les chemins sont des chemins périodiques.

Nous allons faire le changement de variables  $p, q \mapsto \rho, \theta$  :

$$p(t) = \sqrt{\rho(t)} \cos \theta(t), \quad q(t) = \sqrt{\rho(t)} \sin \theta(t)/\omega.$$

La mesure de Liouville devient

$$dpdq = d\rho d\theta/2\omega.$$

Après une intégration par parties,

$$\int p\dot{q}dt = \frac{1}{2\omega} \int \rho\dot{\theta}dt,$$

l'action peut s'écrire

$$\mathcal{S}(\rho, \theta) = \int dt \left[ -i\rho\dot{\theta}/2\omega - \frac{1}{2}\rho + \frac{1}{4}\lambda\rho^2 \right].$$

L'intégrale sur  $\rho$  est gaussienne mais nous avons la contrainte  $\rho \geq 0$ . Cependant dans la limite  $\lambda \rightarrow 0$ , le col domine l'intégrale à des corrections d'ordre  $e^{-1/4\lambda}$  près. Négligeant ces corrections nous pouvons intégrer sur  $\rho$  et trouvons une action pour la variable angulaire  $\theta$  :

$$\mathcal{S}(\theta) = -\frac{1}{4\lambda} \int dt \left( 1 + i\dot{\theta}/\omega \right)^2.$$

Nous pouvons alors adapter la méthode du modèle  $O(2)$  (section 5.6). Nous sommions sur les contributions des trajectoires périodiques qui décrivent le cercle  $n$  fois :

$$\mathcal{Z}(\beta) \propto \sum_n \exp \left[ \frac{\beta}{4\lambda} (1 + 2ni\pi/\omega\beta)^2 \right].$$

Nous utilisons ensuite

$$\sum_n e^{-an^2 + in\varphi} = \sqrt{\pi/a} \sum_l e^{(\varphi - 2\pi l)^2 / 4a}.$$

Nous en déduisons le spectre

$$E_l = \lambda\omega^2 l^2 - l\omega.$$

Comparant au résultat exact nous trouvons que  $k + \frac{1}{2}$  a été remplacé par  $l$ . Par ailleurs, ce résultat n'est valable que  $E_l \ll 0$ , c'est-à-dire pour  $l$  autour du minimum  $l \sim 1/2\omega\lambda$  où  $E_l$  est d'ordre  $-1/\lambda$ .

Nous notons donc que ce résultat n'est correct qu'à un demi-entier près, en particulier pour  $l$  ou  $k$  grand. Ceci n'est pas surprenant parce que les termes d'ordre  $k$  dépendent du choix de l'ordre des opérateurs.



# Appendice A

## Rappels minimaux de mécanique quantique

UNE DIFFÉRENCE FONDAMENTALE entre la mécanique quantique et la mécanique classique est le principe de superposition : les états physiques sont associés à des vecteurs d'un espace vectoriel complexe, et les prédictions physiques sont liées à des valeurs moyennes d'opérateurs dans ces états.

### A.1 Espace de Hilbert et opérateurs

*Espace de Hilbert.* Une construction possible de la mécanique quantique utilise le concept d'espace de Hilbert complexe que nous rappelons brièvement.

On considère l'espace vectoriel des suites complexes  $\{\varphi_n\}$  muni d'un produit scalaire, généralisation du produit scalaire des vecteurs complexes de  $\mathbb{C}^N$ . Le produit scalaire  $(\varphi, \psi)$  de deux suites  $\{\varphi_n\}$  et  $\{\psi_n\}$  est donc

$$(\varphi, \psi) = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n^* \psi_n,$$

où  $\varphi^*$  dénote le complexe conjugué de  $\varphi$ .

Ce produit scalaire définit une norme, et l'espace de Hilbert est l'espace vectoriel complexe  $\mathcal{H}$  des vecteurs de norme finie

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\varphi_n|^2 < \infty.$$

Dans cet espace vectoriel on peut introduire une base de vecteurs  $v^{(N)}$ ,  $N \in \mathbb{N}$  définie par les suites

$$v_N^{(N)} = 1, \quad v_n^{(N)} = 0 \quad \forall n \neq N.$$

Tout élément  $\psi$  de  $\mathcal{H}$  peut donc se réécrire

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n v^{(n)}.$$

On peut interpréter ces vecteurs, par exemple, comme les vecteurs propres normalisés de l'oscillateur harmonique quantique (*cf.* section 6.2).

*Notation : bras et kets.* Dirac a introduit une notation commode : les vecteurs de l'espace de Hilbert sont notés  $|\psi\rangle$ , les vecteurs complexes conjugués  $\langle\psi|$  et le produit scalaire

$$(\varphi, \psi) \equiv \langle\varphi|\psi\rangle = (\langle\psi|\varphi\rangle)^*.$$

Notons, par simplicité,  $|n\rangle$  le vecteur  $v^{(n)}$  de la base. Le vecteur complexe conjugué  $\langle n|$  correspond ici à la même suite. La propriété que la base est orthonormée, s'exprime alors par l'équation

$$\langle n|m\rangle = \delta_{mn}.$$

*Opérateurs.* Sur les vecteurs de l'espace de Hilbert agissent des opérateurs, qui sont des applications linéaires internes. La représentation d'un opérateur  $O$  agissant sur une suite  $\varphi = \{\varphi_n\}$  généralise l'action des matrices sur un vecteur :

$$(O\varphi)_m = \sum_n O_{mn} \varphi_n.$$

Dans la représentation des bras et kets, l'action d'un opérateur  $O$  sur un vecteur  $|\psi\rangle$  se note  $O|\psi\rangle$ .

Le conjugué hermitique  $O^\dagger$  est représenté par les éléments  $O_{nm}^*$ . On vérifie alors

$$\langle\varphi|O^\dagger|\psi\rangle = (\langle\psi|O|\varphi\rangle)^*.$$

*Interprétation physique.* En mécanique quantique, l'état d'un système est caractérisé par un vecteur de l'espace de Hilbert. Si  $|\psi\rangle$  est un vecteur de norme unité :

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n|^2 = 1,$$

les quantités  $|\psi_n|^2$  ont une interprétation probabiliste : la probabilité de trouver, dans une mesure, le système quantique dans l'état  $n$ .

De façon générale, pour toute observable physique et pour un système quantique dans un état donné  $\psi$ , la mécanique quantique ne prédit que la moyenne des valeurs mesurées.

Quantiquement, une observable physique est associée à un opérateur hermitien,

$$O = O^\dagger,$$

et la valeur moyenne des mesures est égale à la valeur moyenne  $\langle \psi | O | \psi \rangle$  de l'opérateur dans l'état  $\psi$  normalisé. L'hermiticité de l'opérateur assure que la valeur moyenne est réelle.

Plus précisément, un opérateur hermitien est diagonalisable, a des valeurs propres réelles et des vecteurs propres orthogonaux. Supposons, par simplicité, son spectre discret et notons  $|\varphi_N\rangle$  les vecteurs propres et  $O_N$  les valeurs propres correspondantes. L'opérateur peut alors s'écrire

$$O = \sum_{N=1}^{\infty} O_N |\varphi_N\rangle \langle \varphi_N|.$$

Pour l'état correspondant au vecteur  $|\psi\rangle$  normalisé à  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ , les quantités  $|\langle \varphi_N | \psi \rangle|^2$  ont de nouveau une interprétation probabiliste : la probabilité de trouver la valeur  $O_N$  dans une mesure de l'observable associée à  $O$  pour un système quantique dans l'état  $\psi$ . Pour un opérateur  $O$  et un état  $\psi$ , la quantité

$$\langle \psi | O | \psi \rangle, \quad (\text{A.1})$$

est donc la valeur moyenne des mesures de l'observable associée à  $O$  dans l'état  $\psi$ . Les opérateurs doivent être bornés pour que les valeurs moyennes soient finies pour tout vecteur de l'espace de Hilbert.

Notons, enfin, qu'un vecteur de l'espace de Hilbert peut être multiplié par un nombre complexe de module 1 sans que ceci n'affecte aucune mesure. Un état quantique n'est donc pas vraiment associé à un vecteur de l'espace de Hilbert, mais seulement à un vecteur à une phase près.

## A.2 Évolution quantique, symétries et matrice densité

*Évolution quantique.* L'évolution quantique des états est déterminée par l'action d'un opérateur d'évolution. Le vecteur d'état au temps  $t''$  se déduit du vecteur au temps  $t'$  par

$$|\psi(t'')\rangle = U(t'', t') |\psi(t')\rangle \quad \text{et donc} \quad U(t', t') = \mathbf{1}.$$

Comme la norme des vecteurs a une interprétation probabiliste, elle doit être conservée au cours du temps : la probabilité totale doit rester égale à 1 dans l'évolution. La transformation  $U(t'', t')$  doit donc conserver la norme et par suite les produits scalaires des vecteurs, et donc être unitaire :

$$U(t'', t') U^\dagger(t'', t') = \mathbf{1}.$$

Par ailleurs, l'évolution d'un système quantique isolé est supposée markovienne, ce qui se traduit par la loi de composition

$$U(t_3, t_2) U(t_2, t_1) = U(t_3, t_1).$$

Si l'opérateur  $U(t, t')$  est dérivable, il satisfait à l'équation

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t}(t, t') = \hat{H}(t)U(t, t'), \quad (\text{A.2})$$

où l'opérateur hermitien  $\hat{H}(t)$  est l'hamiltonien. La constante de Planck  $\hbar$  apparaît ici pour des raisons dimensionnelles.

Dans le cas où  $\hat{H}$  est indépendant du temps,  $U(t'', t') = e^{-i\hat{H}(t''-t')/\hbar}$  et les opérateurs d'évolution appartiennent à une représentation du groupe des translations dans le temps dont  $\hat{H}/\hbar$  est le générateur. De plus, la valeur moyenne de  $\hat{H}$  dans tout état est indépendante du temps, propriété qui correspond, en mécanique quantique, à la conservation de l'énergie.

Notons que si l'opérateur d'évolution est borné, ce n'est pas nécessairement le cas de l'hamiltonien, qui n'est défini, en général, que dans un sous-espace dense de l'espace de Hilbert. L'équation (A.2) n'a donc de sens que dans le sous-espace des états d'énergie finie.

Après une mesure, le vecteur  $|\psi\rangle$  est projeté sur le vecteur propre correspondant à la valeur propre trouvée de l'opérateur associé, une opération appelée réduction du paquet d'onde. Cette évolution n'est pas unitaire parce que le système n'est plus isolé : la réduction du paquet d'onde résulte de l'interaction entre l'appareil de mesure macroscopique (qui correspond à un nombre essentiellement infini de degrés de liberté) et le système mesuré.

*Représentation de Heisenberg.* Comme fonction du temps, la valeur moyenne d'un opérateur  $O$  peut donc s'écrire

$$\langle \psi(t) | O | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) O U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle.$$

Introduisant la représentation de Heisenberg de l'opérateur  $O$ ,

$$O(t) = U^\dagger(t, t_0) O U(t, t_0),$$

on peut transférer l'évolution dans le temps des états aux opérateurs

$$\langle \psi(t) | O | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | O(t) | \psi(t_0) \rangle.$$

L'opérateur  $O(t)$  satisfait alors à une équation d'évolution

$$i\hbar \frac{\partial O}{\partial t} = [O(t), U^\dagger(t, t_0) \hat{H}(t) U(t, t_0)].$$

*Groupes de symétries.* À cause de la condition de préservation de la norme, les groupes de symétrie sont représentés dans l'espace de Hilbert par des groupes d'opérateurs unitaires (ou anti-unitaires, c'est-à-dire unitaire suivi d'une conjugaison complexe).

Un système physique a une symétrie si  $S$ , l'opérateur correspondant, commute avec l'hamiltonien :

$$[S, \hat{H}] = 0.$$

Dans le cas de groupes continus, cela conduit, comme en mécanique classique, à des quantités conservées dans le temps : ce sont ici les valeurs moyennes des générateurs (choisis hermitiens) du groupe.

*Matrice densité.* Pour les besoins de la mécanique statistique, il est encore nécessaire d'introduire la notion de matrice densité. Si l'on n'a d'un système quantique qu'une connaissance partielle, l'état de l'espace de Hilbert est remplacé par un mélange statistique qui peut être représenté par une matrice densité  $\rho$ , hermitienne et positive, et de trace unité pour que la probabilité totale soit 1 :

$$\rho = \rho^\dagger, \quad \rho > 0, \quad \text{tr } \rho = 1.$$

Ces conditions se comprennent simplement si l'on diagonalise la matrice densité qui s'écrit alors

$$\rho = \sum_n \rho_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|,$$

$\{|\psi_n\rangle\}$  étant les vecteurs propres et  $\{\rho_n\}$  les valeurs propres correspondantes. Les  $\rho_n$  doivent alors être interprétés comme les probabilités statistiques (et non quantiques) d'être dans l'état  $n$ . Ils sont donc positifs et se somment à 1.

La valeur moyenne d'une observable associée à l'opérateur  $O$  devient alors

$$\langle O \rangle = \text{tr } \rho O.$$

L'expression (A.1) correspond à la situation certaine où toutes les valeurs propres de  $\rho$  sont nulles sauf une — on parle alors d'état pur — et  $\rho$  est un projecteur :  $\rho^2 = \rho$ .

L'évolution temporelle de la matrice densité se déduit de celles des vecteurs d'état. On trouve donc

$$\rho(t) = U(t, 0)\rho(0)U^\dagger(t, 0) \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\hat{H}(t), \rho(t)].$$

Dans le cas d'un système à l'équilibre thermique à la température  $k_B T = 1/\beta$  ( $k_B$  est la constante de Boltzmann qui est prise égale à 1 dans le texte), la matrice densité doit commuter avec l'hamiltonien. Des arguments heuristiques conduisent à la conclusion

$$\rho = e^{-\beta \hat{H}} / \mathcal{Z}(\beta), \quad \mathcal{Z}(\beta) = \text{tr } e^{-\beta \hat{H}}.$$

*Algèbre d'opérateurs.* Dans le cas d'un état pur, la matrice densité est invariante par la multiplication de la fonction d'onde par une phase et donc la relation entre état physique et matrice densité est biunivoque. Cette remarque conduit naturellement à un formalisme de la mécanique quantique basé entièrement sur une algèbre d'opérateurs bornés avec conjugaison hermitienne et une opération de trace. Une telle description de la mécanique quantique est formellement plus satisfaisante, mais peu intuitive.

### A.3 Position et impulsion. Équation de Schrödinger

*Opérateurs position et impulsion.* Deux opérateurs hermitiens jouent un rôle important : l'opérateur position  $\hat{\mathbf{q}}$  et l'opérateur moment conjugué  $\hat{\mathbf{p}}$ , qui dans les cas les simples est l'opérateur impulsion (cf. section 5.1 pour plus de détails), dont les valeurs moyennes dans un état caractérise alors les position et impulsion moyennes, respectivement. Ces opérateurs ne commutent pas :

$$[\hat{q}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}.$$

Les observables usuelles peuvent s'exprimer en termes de ces deux opérateurs (pour des particules sans spin ou autre nombre quantique, ce que nous allons supposer ci-dessous).

De nouveau, ces opérateurs non bornés ne sont pas définis dans tout l'espace de Hilbert et, de façon plus soignée, on peut définir d'abord les groupes unitaires dont ils sont les générateurs : les opérateurs  $T(\mathbf{a}) = e^{i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{a}/\hbar}$ , et  $V(\mathbf{k}) = e^{-i\hat{\mathbf{q}}\cdot\mathbf{k}/\hbar}$ , où  $\mathbf{a}$  et  $\mathbf{k}$  sont deux vecteurs constants, représentent les groupes abéliens des translations et des changements d'impulsion, respectivement.

Les relations de commutation deviennent

$$T(\mathbf{a})V(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{k}/\hbar} V(\mathbf{k})T(\mathbf{a}).$$

Il est alors commode d'introduire les vecteurs propres de ces opérateurs. Cependant, ils n'appartiennent pas à l'espace de Hilbert. Ainsi, les vecteurs propres de  $V(\mathbf{k})$  correspondent à des états localisés dans l'espace, qui sont des limites singulières de vecteurs de l'espace de Hilbert : un état strictement localisé au point  $\mathbf{q}_0$  dans  $\mathbb{R}^d$  peut être obtenu comme

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(\pi\varepsilon)^{d/2}} e^{-(\mathbf{q}-\mathbf{q}_0)^2/\varepsilon} = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0),$$

qui est une distribution  $\delta$  de Dirac dont la norme est infinie. Néanmoins, ces vecteurs forment une base orthogonale,

$$\int d^d q \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1) = \delta(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0),$$

et complète puisque

$$\int d^d q_0 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0) \delta(\mathbf{q}' - \mathbf{q}_0) = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}').$$

Si nous notons  $\delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0) \mapsto |\mathbf{q}_0\rangle$  un vecteur de la base, ces relations prennent la forme

$$\langle \mathbf{q}_0 | \mathbf{q}_1 \rangle = \delta(\mathbf{q}_0 - \mathbf{q}_1), \quad \int d^d q_0 |\mathbf{q}_0\rangle \langle \mathbf{q}_0| = \mathbf{1}.$$

Dans cette base l'opérateur position, générateur des changements d'impulsion, est diagonal :

$$\hat{\mathbf{q}}|\mathbf{q}_0\rangle = \mathbf{q}_0|\mathbf{q}_0\rangle,$$

Tout vecteur  $|\psi\rangle$  de l'espace de Hilbert peut se décomposer sur la base :

$$\psi(\mathbf{q}) = \langle \mathbf{q}|\psi\rangle,$$

et la fonction  $\psi(\mathbf{q})$ , l'ensemble des composantes, est appelée fonction d'onde. Les fonctions d'onde correspondant aux vecteurs de l'espace de Hilbert, forment un espace de Hilbert de fonctions de carré sommable, en effet

$$\int d^d q |\psi(\mathbf{q})|^2 = \int d^d q \langle \psi|\mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{q}|\psi\rangle = \langle \psi|\psi\rangle < \infty.$$

Le produit scalaire de deux vecteurs  $|\psi\rangle$  et  $|\varphi\rangle$  s'écrit alors

$$\langle \psi|\varphi\rangle = \int d^d q \psi^*(\mathbf{q})\varphi(\mathbf{q}).$$

L'action de l'opérateur position prend la forme

$$\langle \mathbf{q}|\hat{\mathbf{q}}|\psi\rangle = \mathbf{q}\langle \mathbf{q}|\psi\rangle = \mathbf{q}\psi(\mathbf{q}).$$

L'opérateur position agit sur les fonctions d'onde par multiplication.

Agissant sur des fonctions d'onde, l'opérateur impulsion est représenté par

$$\langle \mathbf{q}|\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\nabla_{\mathbf{q}}\psi(\mathbf{q}),$$

puisque les opérateurs multiplication par  $\mathbf{q}$  et dérivée satisfont

$$[q_\alpha, \partial/\partial q_\beta] = -\delta_{\alpha\beta}.$$

Enfin, une autre base généralisée est fournie par les ondes planes

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{q}/\hbar},$$

qui sont les vecteurs propres de l'opérateur impulsion :

$$\frac{\hbar}{i}\nabla_{\mathbf{q}}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) = \mathbf{p}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}),$$

et correspondent aux états invariants par translation. Elles forment aussi une base orthogonale complète

$$\int d^d q e^{-i\mathbf{p}_0\cdot\mathbf{q}/\hbar} e^{i\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{q}/\hbar} = (2\pi\hbar)^d \delta(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_1),$$

$$\int d^d p e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{q}/\hbar} e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{q}/\hbar} = (2\pi\hbar)^d \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}').$$

Les représentations des vecteurs dans les deux bases sont reliées par une transformation de Fourier. Définissant, de façon abstraite, les vecteurs propres de  $\hat{\mathbf{p}}$  :

$$\hat{\mathbf{p}}|\widetilde{\mathbf{p}}\rangle = \mathbf{p}|\widetilde{\mathbf{p}}\rangle,$$

et donc

$$e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{q}/\hbar} = \langle \mathbf{q} | \widetilde{\mathbf{p}} \rangle,$$

on trouve

$$\int d^d q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{p}/\hbar} |\mathbf{q}\rangle = |\widetilde{\mathbf{p}}\rangle.$$

Définissant alors

$$\langle \widetilde{\mathbf{p}} | \psi \rangle = \tilde{\psi}(\mathbf{p}),$$

on obtient

$$\psi(\mathbf{q}) = \langle \mathbf{q} | \psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int d^d p e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{p}/\hbar} \tilde{\psi}(\mathbf{p}).$$

*Particule libre.* L'hamiltonien  $\hat{H}_0$  de la particule libre est un hamiltonien invariant par translation

$$[\hat{H}_0, T(\mathbf{a})] = 0 \Rightarrow [\hat{H}_0, \hat{\mathbf{p}}] = 0.$$

L'impulsion est alors une quantité conservée et l'hamiltonien s'exprime donc en fonction des générateurs  $\hat{\mathbf{p}}$ . Pour un système invariant par rotation,  $\hat{H}_0$  est une fonction de  $\hat{\mathbf{p}}^2$  et à petite impulsion il peut donc s'écrire

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2,$$

où  $m$  est la masse de la particule.

*Particule de masse infinie.* L'hamiltonien de la particule de masse infinie est invariant par changement d'impulsion :

$$[\hat{H}_I, V(\mathbf{k})] = 0 \Rightarrow [\hat{H}_I, \hat{\mathbf{q}}] = 0.$$

La position de la particule est une quantité conservée et l'hamiltonien  $\hat{H}_I$  est une fonction de l'opérateur position

$$\hat{H}_I = V(\hat{\mathbf{q}}),$$

où  $V$  est appelé potentiel.

*Équation de Schrödinger.* Toute une classe d'hamiltoniens peut s'écrire comme une somme de ces deux termes :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + V(\hat{\mathbf{q}}).$$

L'évolution temporelle de la fonction d'onde se déduit alors d'une équation aux dérivées partielles

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{q}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{q}}^2 \psi(\mathbf{q}, t) + V(\mathbf{q}) \psi(\mathbf{q}, t),$$

appelée équation de Schrödinger.

# 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  $\delta$ ), 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  $\delta$  de Dirac  
 grassmannienne, 188  
 formalisme holomorphe, 140  
 fonction d'onde, 291  
 fonction  $\Gamma$ , 14  
 fonction génératrice, 2, 11  
 fonction grassmannienne analytique, 187  
 fonction  $\psi$ , 74  
 fonction saut, 148  
 fonction saut  $\theta$ , 73, 120

fonction signe  $\epsilon$ , 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

intégrale gaussienne, 3  
 complexe, 137  
 matrice complexe, 22  
 intégrales de chemin gaussiennes, 41  
 interaction de proches voisins, 90  
 invariance de jauge, 113, 114  
 invariance par translation, 213

**K**

Källén-Lehmann (représentation de),  
 103

**L**

limite continue, 97  
 limite thermodynamique, 91, 93, 98  
 Lippman-Schwinger (équation de), 249  
 localité, 34  
 loi du demi-cercle de Wigner, 207  
 longueur de corrélation, 94, 96  
 longueur d'onde thermique, 160

**M**

marche au hasard, 123  
 matrice de transfert, 91  
 matrice densité, 32, 289  
 matrice  $S$ , 243  
 approximation semi-classique, 252  
 développement perturbatif, 245  
 formalisme holomorphe, 251  
 matrices aléatoires, 204  
 méthode du col, 12, 213  
 mode zéro, 215, 227  
 modèle gaussien, 95  
 modèle sur réseau, 90  
 moment cinétique : groupe  $O(2)$ , 126  
 mouvement brownien, 38, 123

**O**

opérateur  
 de translation, 290  
 d'évolution, 287  
 nombre de particules, 155  
 statistique, 32

d'annihilation et de création  
 (fermions), 191, 197  
 de création et annihilation, 140  
 oscillateur anharmonique quartique,  
 231  
 oscillateur harmonique, 43, 140, 142,  
 205, 251  
 perturbé, 55  
 fonction de partition, 50

**P**

particule libre, 292  
 pfaffien, 185  
 polynômes de Hermite, 205  
 potentiel  
 chimique, 156, 199  
 de Bargmann-Wigner, 221  
 processus markoviens, 32  
 produit chronologique, 105  
 propagateur, 47  
 formalisme holomorphe, 147  
 puits carré (spectre), 64

**Q**

quantification et intégrale de chemin,  
 115  
 quantification (ambiguïtés), 125

**R**

réduction du paquet d'onde, 288  
 représentation de Heisenberg, 288  
 résolvante, 71  
 Ricatti (équation de), 76  
 rotateur rigide (symétrie  $O(2)$ ), 126  
 réduction dimensionnelle, 99

**S**

Schrödinger : équation de, 36, 75  
 Schwinger-Dyson (équation de), 100  
 seconde quantification, 153  
 semi-classique (approximation), 158  
 séries divergentes, 224

## spectre

- calcul perturbatif, 68
  - développement en puissances de  $\hbar$ , 69
  - développement semi-classique, 70
- supertrace, 180
- symétrie  $O(N)$
- limite  $N \rightarrow \infty$ , 78
  - méthode du col, 79, 81
  - potentiel quartique, 77

**T**

## théorème

- de la limite centrale, 124
- de Wick complexe, 139
- de Wick (fermions), 183, 186
- du viriel, 226

## théorie

- des champs non-relativiste, 163, 201
  - des perturbations, 7, 21, 56, 100
- topologie du cercle, 128
- transformation de Fourier (convention), 35
- transformations de jauge, 112

**U**

- universalité, 97

**W**

- Wick (théorème de), 6, 50