

Chapitre 1

Rappels de mécanique classique et quantique

Ce chapitre est consacré à des rappels assez standards de mécanique classique et de mécanique quantique non relativiste, afin de fixer nos notations. Ces rappels sont donnés d'abord en considérant l'exemple de la particule dans un potentiel (système à un degré de liberté), qui sera utilisé pour introduire l'intégrale de chemin par la suite.

1.1 Mécanique classique

1.1.1 La particule dans un potentiel

Nous considérons une particule de masse m dans un champ de force dérivant d'un potentiel indépendant du temps. Le cas le plus simple est le cas unidimensionnel, où la particule est sur une ligne. La position de la particule à l'instant t est notée $q(t)$, le potentiel en q est $V(q)$. La vitesse à l'instant t est $\dot{q}(t) = \frac{dq}{dt}$. L'équation du mouvement est (équation de Newton)

$$m \ddot{q}(t) = -\frac{\partial}{\partial q} V(q) \quad (1.1.1)$$

1.1.2 Formulation Lagrangienne

Ces équations du mouvement dérivent du principe de moindre d'action (principe de Maupertuis). Pour déterminer les solutions classiques (trajectoires $q(t)$ avec positions initiales et finales déterminées) telles que $t_i \leq t \leq t_f$ et $q(t_i) = q_i$, $q(t_f) = q_f$, à toute trajectoire possible $t \rightarrow q(t)$ de la particule (trajectoire virtuelle) est associée l'action $S[q]$

$$S[q] = \int_{t_i}^{t_f} dt L(q(t), \dot{q}(t)) \quad , \quad L(q, \dot{q}) = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q) \quad (1.1.2)$$

où $L(q, \dot{q})$ est le Lagrangien (densité d'action). Une trajectoire classique $q_c(t)$, solution de l'équation du mouvement (1.1.1), est un extremum de l'action. La variation de l'action est nulle, à conditions initiales et finales fixées

$$q(t) = q_c(t) + \delta q(t) \quad , \quad \delta q(t_i) = \delta q(t_f) = 0 \quad \implies \quad S[q] = S[q_c] + \mathcal{O}(\delta q^2) \quad (1.1.3)$$

Les équations du mouvement s'écrivent donc sous forme variationnelle comme les équations de Lagrange

$$\frac{\delta S[q]}{\delta q(t)} = 0 \quad \iff \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}(t)} = \frac{\partial L(q, \dot{q})}{\partial q(t)} \quad (1.1.4)$$

$\frac{\delta}{\delta q(t)}$ est la dérivée fonctionnelle (voir l'appendice pour la définition précise).

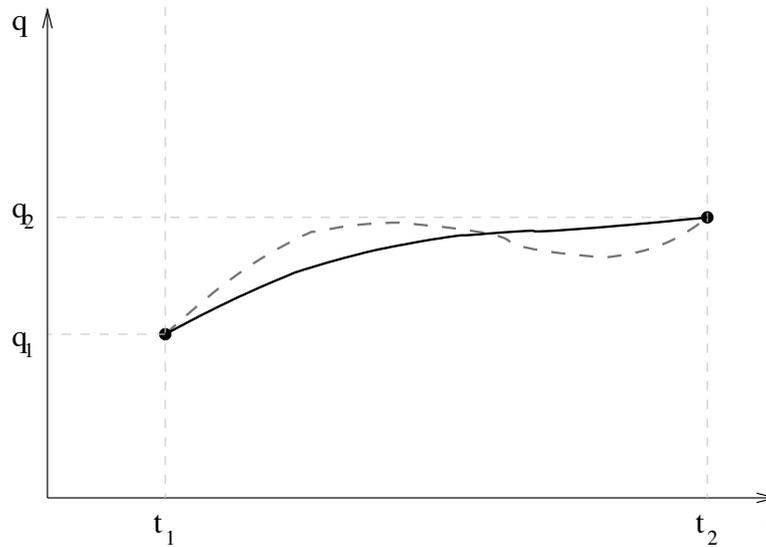


FIGURE 1.1 – Principe de moindre action : la trajectoire classique (trait plein) est celle qui extrême l'action $S[q]$, les conditions initiales et finales pour les positions étant fixées.

1.1.3 Formulation Hamiltonienne

1.1.3.a - Espace des phases et Hamiltonien :

Dans la formulation Hamiltonienne un état classique pour un système à n degrés de liberté est un point x dans l'espace des phases Ω , espace de dimension $2n$. Les équations d'évolution correspondent à un flot dans l'espace des phases. Pour notre système $n = 1$, les coordonnées dans l'espace des phases sont la position q et l'impulsion p de la particule. Le Hamiltonien est

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (1.1.5)$$

Les équations du mouvement sont les équations de Hamilton

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad , \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (1.1.6)$$

Elle découlent aussi d'un principe variationnel. Pour déterminer la solution classique telle que $q(t_1) = q_1$, $q(t_2) = q_2$, il s'agit de minimiser la fonctionnelle \mathcal{S}_H

$$\mathcal{S}_H[q, p] = \int_{t_1}^{t_2} dt [p(t)\dot{q}(t) - H(q(t), p(t))] \quad (1.1.7)$$

par rapport aux variations de $q(t)$ et de $p(t)$, $q(t)$ étant fixé en $t = t_1$ et t_2 , mais $p(t)$ étant libre en $t = t_1$ et t_2 . En effet, les dérivées fonctionnelles de \mathcal{S}_H sont

$$\frac{\delta \mathcal{S}_H}{\delta q(t)} = -\dot{p}(t) - \frac{\partial H}{\partial q}(q(t), p(t)) \quad , \quad \frac{\delta \mathcal{S}_H}{\delta p(t)} = \dot{q}(t) - \frac{\partial H}{\partial p}(q(t), p(t)) \quad (1.1.8)$$

Noter que le passage des variables $(q, \dot{q}) \rightarrow (q, p)$ et des fonctionnelles $S(q, \dot{q}) \rightarrow \mathcal{S}_H(q, p)$ correspond à une transformation de Legendre par rapport à la vitesse \dot{q} .

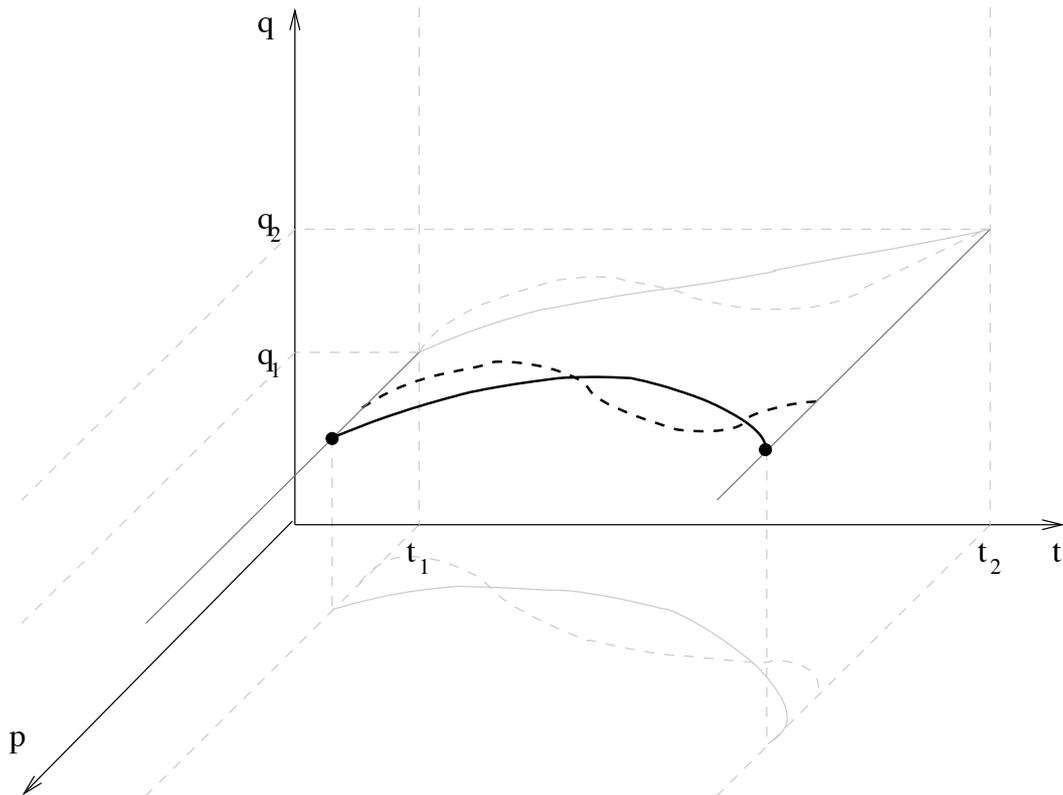


FIGURE 1.2 – Principe de moindre action dans l'espace des phases : la trajectoire classique (trait plein) est celle qui extrémise l'action $S_H[q, p]$. Les positions initiales et finales q sont fixées. Les impulsions initiales et finales p sont libres, et sont déterminées par le principe variationnel.

1.1.3.b - Crochets de Poisson, observables et équation de Liouville :

Variété symplectique : Revenons au cas général. L'espace des phases Ω est une variété de dimension $2n$, on note un système de coordonnées locales $\mathbf{x} = \{x^i\}$. Ω est muni d'une structure symplectique, c'est à dire d'une 2-forme extérieure $\omega = \frac{1}{2}\omega_{ij}(x)dx^i \wedge dx^j$, donc antisymétrique $\omega_{ij} = -\omega_{ji}$, fermée, donc telle que $d\omega = 0$, où d est la différentielle extérieure, et non dégénérée.

Pour la particule sur une ligne $n = 1$, $\Omega = \mathbb{R}^2$, $\mathbf{x} = (q, p)$, et la forme symplectique est simplement $\omega = dq \wedge dp$. Pour une particule en n dimensions $\Omega = \mathbb{R}^{2n}$, $\mathbf{x} = (q^i, p^i)$, et $\omega = \sum_i dq^i \wedge dp^i$. Le théorème de Darboux indique que localement dans l'espace des phases, il est toujours possible de trouver des systèmes de coordonnées où la forme symplectique prend cette forme simple, en particulier où le tenseur antisymétrique ω_{ij} est constant et est une somme directe de symboles de Kronecker ϵ_{ij} .

Les observable f sont simplement les fonctions réelles (suffisamment régulières) sur l'espace des phases. La valeur de f pour le système dans l'état \mathbf{x} étant $f(\mathbf{x})$. Les observables peuvent dépendre en plus explicitement du temps $f = f(\mathbf{x}, t)$.

Crochets de Poisson : Le crochet de Poisson de deux observables f et g est la fonction

$$\{f, g\}_\omega = \omega^{ij} \partial_i f \partial_j g \quad \text{avec} \quad \partial_i = \frac{\partial}{\partial x^i} \quad \text{et} \quad \omega^{ij} = \left(\omega^{-1} \right)_{ij} \quad (1.1.9)$$

Pour la particule sur une ligne

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q} \quad \text{et en particulier} \quad \{q, p\} = 1 \quad (1.1.10)$$

Le crochet de Poisson est antisymétrique. Le fait que $d\omega = 0$ implique qu'il satisfait l'identité de Jacobi.

$$\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0 \quad (1.1.11)$$

La donnée du crochet de Poisson est équivalente à la donnée de la forme symplectique car on a évidemment

$$\{x^i, x^j\} = \omega^{ij}(\mathbf{x}) \quad (1.1.12)$$

Flots Hamiltoniens : Considérons la dynamique $\mathbf{x} \xrightarrow{\phi_t} \mathbf{x}(t)$ engendrée par un Hamiltonien $H(\mathbf{x})$. Les coordonnées $x^i(t)$ et le Hamiltonien H sont des observables comme les autres, les coordonnées dépendant du temps. Les équations d'évolution (équations de Hamilton) prennent la forme générale

$$\frac{dx^i(t)}{dt} = \{x^i(t), H\}_\omega = \omega^{ij}(\mathbf{x}(t)) \partial_j H(\mathbf{x}(t)) \quad (1.1.13)$$

On dit que le flot ϕ_t (la famille des applications ϕ_t , avec $\phi_t(\mathbf{x}) = \mathbf{x}(t)$ de $\Omega \rightarrow \Omega$, dépendant d'un paramètre t , et formant un semi groupe car $\phi_{t'} \circ \phi_t = \phi_{t'+t}$) est le flot Hamiltonien engendré par le Hamiltonien H . De façon plus générale, considérons une observable f (indépendante du temps). Sous le flot Hamiltonien, la valeur de cette observable $f(\mathbf{x}(t))$ évolue comme

$$\frac{df(\mathbf{x}(t))}{dt} = \{f, H\}(\mathbf{x}(t)) \quad (1.1.14)$$

Mesure de Liouville : La mesure de Liouville définit l'élément de volume dans l'espace des phases

$$d\mu(\mathbf{x}) = \omega^n = \prod_i dx^i |\omega|^{1/2} \quad , \quad |\omega| = |\det(\omega_{ij})| \quad (1.1.15)$$

Elle a la propriété qu'elle est invariante sous les flots Hamiltoniens.

Fonctions de distribution En particulier, si on ne connaît l'état du système que de façon statistique, cet état est décrit par une distribution de probabilité dans l'espace des phases, à laquelle est associée la densité de probabilité $\rho(\mathbf{x})$ (fonction de distribution)

$$d\rho(\mathbf{x}) = d\mu(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}) \quad (1.1.16)$$

La valeur moyenne d'une observable f est

$$\langle f \rangle = \int_{\Omega} d\mu(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) \quad (1.1.17)$$

Equation de Liouville : Sous l'action du flot Hamiltonien, la fonction de distribution évolue avec le temps $\rho(\mathbf{x}) \xrightarrow{t} \rho(\mathbf{x}; t)$ selon l'équation de Liouville

$$\frac{d}{dt} \rho(\mathbf{x}; t) = \{H, \rho\}(\mathbf{x}; t) \quad (1.1.18)$$

si bien que la valeur moyenne de f au cours du temps est donnée par

$$\langle f \rangle(t) = \int_{\Omega} d\mu(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}(t)) = \int_{\Omega} d\mu(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}, t) f(\mathbf{x}) \quad (1.1.19)$$

Transformations canoniques : Les flots Hamiltonien sont des exemples de transformations canoniques. Une transformation canonique est une transformation $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{X}$ dans l'espace des phases (donc une application $\Omega \rightarrow \Omega$) qui préserve la structure symplectique.

$$\omega(\mathbf{x}) = \omega(\mathbf{X}) \quad (1.1.20)$$

Ceci veut dire que si on écrit la forme ω en terme de ses composantes dans les coordonnées $\mathbf{x} = (x^i)$ et $\mathbf{X} = (X^k)$ respectivement (en utilisant les formules de transformations des formes différentielles sous des changements de coordonnées, ici $x^i \rightarrow X^k$)

$$\omega = w_{ij}(\mathbf{x}) dx^i \wedge dx^j = \Omega_{kl}(\mathbf{X}) dX^k \wedge dX^l \quad \text{avec} \quad \Omega_{kl}(\mathbf{X}) = w_{ij}(\mathbf{x}) \frac{\partial x^i}{\partial X^k} \frac{\partial x^j}{\partial X^l} \quad (1.1.21)$$

les tenseurs antisymétriques ω_{ij} et Ω_{ij} sont égaux (en tant que fonctions des coordonnées sur l'espace des phases, ici $\mathbf{z} = (z^i)$)

$$\omega_{ij}(\mathbf{z}) = \Omega_{ij}(\mathbf{z}) \quad (1.1.22)$$

Les transformations canoniques sont aussi les transformations qui préservent les crochets de Poisson. Si on considère deux fonctions f et g et leurs transformées F et G sous la transformation canonique $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{X}$

$$f(\mathbf{x}) = F(\mathbf{X}) \quad , \quad g(\mathbf{x}) = G(\mathbf{X}) \quad (1.1.23)$$

on a

$$\{f, g\} = \{F, G\} \quad (1.1.24)$$

Suivre le flot Hamiltonien : De façon générale, considérons une observable f (indépendante du temps), et à partir d'elle l'observable dépendant du temps f_T

$$f_T(\mathbf{x}; t) = f(\mathbf{x}(t))|_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}} \quad (1.1.25)$$

Cette observable f_T décrit l'évolution en temps de l'observable f en fonction de l'état initial du système $\mathbf{x} : \mathbf{x}(0)$ à l'instant $t = 0$. Comme le flot Hamiltonien est une transformation canonique, on vérifie que l'évolution temporelle de cette observable f_T est donnée aussi par une équation similaire à 1.1.14, mais qui est maintenant une équation d'évolution à \mathbf{x} fixé

$$\frac{df_T}{dt} = \{f_T, H\} \quad \text{c.a.d.} \quad \frac{\partial f_T(\mathbf{x}; t)}{\partial t} = \{f_T, H\}(\mathbf{x}; t) \quad (1.1.26)$$

Pour $f = x^i$ (une des coordonnées dans l'espace des phases) on retrouve bien sûr les équations de Hamilton. Dans tous les cas on trouve bien que le Hamiltonien $H = H_T$ est indépendant du temps (si la dynamique est indépendante du temps). On note aussi que les fonctions de distributions n'évoluent pas avec le temps t .

$$\rho_T(\mathbf{x}; t) = \rho(\mathbf{x}(t); t) = \rho(\mathbf{x}) \quad (1.1.27)$$

Ceci correspond donc au passage d'une représentation de la dynamique par un flot dans l'espace des phases $\mathbf{x}(0) \xrightarrow{t} \mathbf{x}(t)$ tandis que les observables f ne dépendent pas du temps à une représentation de la dynamique où l'état du système est représenté par un point \mathbf{x} dans l'espace des phases et où ce sont les observables f_T qui évoluent avec le temps $f_T(\cdot, 0) \xrightarrow{t} f_T(\cdot, t)$. C'est l'analogie pour les flots Hamiltoniens du passage d'une description Eulerienne (le fluide bouge dans un système de coordonnées fixe) à une représentation Lagrangienne (le système de coordonnées bouge avec le fluide) en mécanique des fluides. Ces deux représentations sont aussi les analogues classiques des représentations de Schrödinger et de Heisenberg de la mécanique quantique.

1.2 Mécanique quantique

A ce stade nous rappelons juste la formulation standard de la mécanique quantique non relativiste. Les états quantiques sont représentés par des vecteurs d'un espace de Hilbert et les observables par des opérateurs. La quantification d'un système classique se fait à l'aide du principe de correspondance. Nous n'entrons ni dans sa justification ni dans les questions d'interprétation. Voir la section ?? pour une discussion plus approfondie du formalisme.

1.2.1 Quantification canonique

L'espace des phases de la mécanique classique Ω est remplacé en mécanique quantique par l'espace de Hilbert \mathcal{H} (complexe) des états quantiques. Les vecteurs de \mathcal{H} sont notés ψ ou $|\psi\rangle$ (les «kets» selon la dénomination de Dirac), et le produit scalaire de deux vecteurs ψ et ψ' dans \mathcal{H} est noté $\psi^* \cdot \psi'$ ou $\langle\psi|\psi'\rangle$ (les $\psi^* = \langle\psi|$ sont les «bras»). Les états quantiques purs sont représentés par les «rayons», donc les vecteurs de norme unité, tels que $\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = 1$, et modulo une phase arbitraire.

Les observables physiques A sont les opérateurs autoadjoints sur \mathcal{H} , (aussi appelés opérateurs hermitiques) tels que $A = A^*$. La conjugaison est définie par $\langle A^* \psi' | \psi \rangle = \langle \psi' | A \psi \rangle$ et est notée A^\dagger dans la littérature physique, et plutôt A^* dans la littérature mathématique. Ils forment une algèbre associative mais non commutative. La valeur moyenne de l'observable A mesurée sur l'état ψ est donné par le principe de Born

$$\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (1.2.1)$$

Ceci implique en particulier que les résultats possibles d'une mesure de A appartiennent au spectre de l'opérateur A .

Enfin, pour un système fermé, la dynamique est donnée par des transformations unitaires engendrées par un Hamiltonien H .

Nous ne discuterons ici ni en quoi consiste la préparation d'un état, ni ce qu'est un processus de mesure, ni dans quel état se trouve le système après cette mesure (le fameux «problème de la mesure»).

Par le principe de correspondance, aux observables classiques conjuguées de position et d'impulsion p et q on fait correspondre les opérateurs auto-adjoints P et Q ($P = P^\dagger$, $Q = Q^\dagger$) qui satisfont les relations de commutation canoniques

$$[Q, P] = i\hbar \quad (1.2.2)$$

Pour la particule dans un potentiel V le Hamiltonien est l'opérateur

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(Q) \quad (1.2.3)$$

et la dynamique étant dans ce cas invariante par renversement du temps l'opérateur H est réel.

La représentation des états et des observables étant invariante par des transformations unitaires globales, pouvant dépendre du temps (l'équivalent des transformations canoniques classiques), les états et la dynamique du système peuvent se représenter de plusieurs façon équivalentes. Nous utiliserons ici les deux principales.

1.2.2 Représentation de Schrödinger

C'est une des plus utilisée dans les calculs de mécanique quantique non relativiste et elle sera très utile pour la construction de l'intégrale de chemin.

Dans la représentation de Schrödinger les états ψ (les kets $|\psi\rangle$) évoluent avec le temps, et sont notés $\psi(t)$, les observables étant fixées. Cette évolution est donnée par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = H\psi \quad (1.2.4)$$

Les probabilités sont conservées puisque $H = H^\dagger$. La valeur moyenne d'une observable A dans un état ψ au temps t est donc

$$\langle A \rangle_{\psi(t)} = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \quad (1.2.5)$$

Opérateur d'évolution : L'opérateur d'évolution $U(t_f, t_i)$ entre les temps t_i et t_f est l'opérateur unitaire qui décrit la transition

$$\text{état à } t_i = \psi(t_i) \xrightarrow{U} \text{état à } t_f = \psi(t_f) \quad (1.2.6)$$

L'élément de matrice $\langle \psi' | U(t_f, t_i) | \psi \rangle$ est simplement l'amplitude de probabilité de passer de l'état ψ à l'état ψ' quand le système évolue de t_i à t_f . U obéit à l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt_f} U(t_f, t_i) = H(t_f) U(t_f, t_i) \quad ; \quad U(t_i, t_i) = \mathbf{1} \quad (1.2.7)$$

$\mathbf{1}$ est l'opérateur identité. Comme dans notre cas H est indépendant du temps, U ne dépend que de $t_f - t_i$ et est obtenu en exponentiant le Hamiltonien

$$U(t_f, t_i) = U(t_f - t_i) \quad , \quad U(t) = e^{\frac{t}{i\hbar} H} \quad (1.2.8)$$

Dans le cas général d'un Hamiltonien $H(t)$ dépendant du temps, l'opérateur d'évolution est défini par un produit ordonné en temps (voir plus loin sect.1.2.4)

$$U(t_f, t_i) = T \left[\exp \left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt H(t) \right) \right] \quad (1.2.9)$$

1.2.3 Représentation de Heisenberg

Cette représentation est la plus utile pour les théories quantiques relativistes des champs, et est en fait la seule vraiment cohérente mathématiquement dans ce cas. Elle est indispensable pour construire la relation entre systèmes critiques et théorie euclidienne des champs.

Dans la représentation de Heisenberg les états sont redéfinis en fonction du temps t par la transformation unitaire $U(-t)$ sur \mathcal{H} , où $U(t)$ est l'opérateur d'évolution pour le Hamiltonien H . On les note donc

$$|\psi; t\rangle = U(-t) |\psi\rangle \quad (1.2.10)$$

Dans cette représentation sous l'action du Hamiltonien H les états sont indépendants du temps

$$|\psi(t); t\rangle = U(-t) U(t) |\psi\rangle = |\psi\rangle \quad (1.2.11)$$

mais ce sont alors les observables A qui dépendent du temps et qui sont donc notées $A(t)$ et redéfinies par

$$A(t) = U(-t) A U(t) \quad (1.2.12)$$

La valeur moyenne d'une observable A sur un état ψ au temps t s'écrit

$$\langle \psi | A(t) | \psi \rangle = \langle A(t) \rangle_\psi \quad , \quad \psi = \psi(t=0) \quad (1.2.13)$$

et on a bien de façon générale équivalence entre les deux représentations (Heisenberg vs. Schrödinger)

$$\langle A \rangle_{\psi(t)} = \langle A(t) \rangle_\psi \quad (1.2.14)$$

Le Hamiltonien est indépendant de t , $H(t) = H$. L'équation d'évolution des opérateurs est

$$i\hbar \frac{d}{dt} A(t) = [A(t), H] \quad (1.2.15)$$

où $[\cdot, \cdot]$ est le commutateur. C'est la version quantique des équations de Liouville (évolution des observables classique).

Pour la particule dans un potentiel cette équation donne la version quantique des équations du mouvement

$$\frac{d}{dt} Q(t) = \frac{1}{m} P(t) \quad , \quad \frac{d}{dt} P(t) = -V'(Q(t)) \quad (1.2.16)$$

Dans la représentation de Heisenberg, on est amené souvent à calculer les éléments de matrices (amplitudes de probabilité) correspondant aux opérations mathématiques suivantes :

- on part d'un état initial ψ à l'instant t ,
- on le laisser évoluer jusqu'à l'instant t_1 ,
- on lui applique l'opérateur A (attention, ce n'est pas une mesure de A),
- on le laisser évoluer jusqu'à l'instant t' ,
- enfin on le projette sur l'état final ψ' à l'instant t' .

Cet élément de matrice s'écrit en représentation de Schrödinger

$$\langle \psi' | U(t' - t_1) A U(t_1 - t) | \psi \rangle \quad (1.2.17)$$

et en représentation de Heisenberg comme

$$\langle \psi'; t' | A(t_1) | \psi; t \rangle \quad (1.2.18)$$

Cette amplitude correspond à un processus causal si $t \leq t_1 \leq t'$. De la même façon on définit les éléments de matrice de produits d'opérateurs à temps différents comme

$$\langle \psi'; t' | A_1(t_1) A_2(t_2) \cdots | \psi; t \rangle \quad (1.2.19)$$

Mais il faut faire attention à l'ordre des différents opérateurs pour avoir un processus causal.

1.2.4 Produit ordonné en temps d'observables

Le produit ordonné en temps, ou «*T-produit*», de deux opérateurs $A_1(t_1)$ et $A_2(t_2)$ est défini en représentation de Heisenberg comme

$$T[A_2(t_2) A_1(t_1)] = \begin{cases} A_2(t_2) A_1(t_1) & \text{si } t_2 > t_1, \\ A_1(t_1) A_2(t_2) & \text{si } t_1 > t_2. \end{cases} \quad (1.2.20)$$

Les éléments de matrice de ce T-produit sont en représentation de Schrödinger

$$\begin{aligned} \langle \psi_f; t_f | T[A_1(t_1) A_2(t_2)] | \psi_i; t_i \rangle &= \langle \psi_f | U(t_f - t_2) A_2 U(t_2 - t_1) A_1 U(t_1 - t_i) | \psi_i \rangle & t_1 < t_2 \\ &= \langle \psi_f | U(t_f - t_1) A_1 U(t_1 - t_2) A_2 U(t_2 - t_i) | \psi_i \rangle & t_2 < t_1 \end{aligned} \quad (1.2.21)$$

Ceci se généralise facilement au produit ordonné de plus de 2 opérateurs. Attention ! Le produit de deux opérateurs n'est pas bien défini à temps coïncidants $t_1 = t_2$, si les opérateurs ne commutent pas.

Ces T-produits jouent un rôle essentiel dans la formulation des théories des champs et leurs relations avec des modèles statistiques. Leurs relations avec les différents «propagateurs» (causal, avancé, retardé) rencontrés en théorie des champs et physique statistique seront discutées plus loin.

1.2.5 Bases de q et p , fonctions d'onde

Pour le système d'une particule non relativiste, les états et les observables peuvent être décomposés dans les «bases» des états propres de position

$$|q\rangle \quad ; \quad Q|q\rangle = q|q\rangle \quad ; \quad \langle q'|q\rangle = \delta(q' - q) \quad (1.2.22)$$

et d'impulsion

$$|p\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int dq e^{\frac{i}{\hbar}pq} |q\rangle \quad ; \quad P|p\rangle = p|p\rangle \quad ; \quad \langle p'|p\rangle = \delta(p' - p) \quad (1.2.23)$$

Ils permettent une décomposition de l'unité sur \mathcal{H}

$$\mathbf{1} = \int dq |q\rangle\langle q| \quad , \quad \mathbf{1} = \int dp |p\rangle\langle p| \quad (1.2.24)$$

et la trace d'un opérateur s'écrit en terme des éléments diagonaux

$$\text{tr}(\mathbf{A}) = \int dq \langle q|\mathbf{A}|q\rangle = \int dp \langle p|\mathbf{A}|p\rangle \quad (1.2.25)$$

La fonction d'onde dans l'espace réel $\psi(q)$ et sa transformée de Fourier $\hat{\psi}(k)$ (dans l'espace réciproque) pour un état ψ sont

$$\langle q|\psi\rangle = \psi(q) \quad \Leftrightarrow \quad |\psi\rangle = \int dq \psi(q) |q\rangle \quad (1.2.26)$$

$$\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \hat{\psi}(p/\hbar) \quad \Leftrightarrow \quad |\psi\rangle = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \hat{\psi}(p/\hbar) |p\rangle \quad (1.2.27)$$

avec $\hat{\psi}(k) = \int dx e^{-ikx} \psi(x)$. Ceci correspond au choix de normalisations du Cohen-Diu-Laloë. Les observables Q et P se représentent bien, dans la base de position

$$Q = q \quad ; \quad P = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \quad (1.2.28)$$

et dans celle d'impulsion

$$P = p \quad ; \quad Q = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \quad (1.2.29)$$

1.2.6 P et H comme générateurs des translations dans l'espace et dans le temps

P et H sont les générateurs des opérations de translation dans l'espace et d'évolution dans le temps. Dans la représentation de Schrödinger (description en terme d'états) ceci correspond à

$$e^{q_0 \frac{P}{\hbar}} \psi(q, t) = \psi(q - q_0, t) = \text{état } \psi \text{ translaté de } q_0 \quad (1.2.30)$$

$$e^{t_0 \frac{H}{\hbar}} \psi(q, t) = \psi(q, t + t_0) = \text{état } \psi \text{ ayant évolué pendant le temps } t_0 \quad (1.2.31)$$

Dans la représentation de Heisenberg ceci correspond à

$$i\hbar \frac{d}{dt} A(t) = [A(t), H] \quad (1.2.32)$$

pour toute observable A (c'est l'équation de Schrödinger), et que pour une fonction de la position $f(q)$ régulière, si $f'(q) = \frac{df}{dq}(q)$, on a la relation entre opérateurs

$$i\hbar f'(Q(t)) = [f(Q(t)), P] \quad (1.2.33)$$

1.3 Mécanique statistique quantique

1.3.1 Etats statistiques et matrice densité

1.3.1.a - Etats statistiques

En général, on ne dispose que d'une information partielle sur un système physique et son état est décrit par un état statistique (état mixte) caractérisé par les valeurs moyennes (au sens statistique général, c'est à dire en répétant les opérations de préparation+mesure) de ses observables. Les états purs sont simplement les états dont il est possible d'extraire le maximum d'information par une série de mesures.

Un état statistique ω est caractérisé par l'ensemble des valeurs moyennes des observables \mathbf{A} sur cet état, que nous noterons

$$\langle \mathbf{A} \rangle_\omega = \text{valeur moyenne de } \mathbf{A} \text{ (mesurée sur l'état } \omega) \quad (1.3.1)$$

Mathématiquement un état ω est une forme linéaire symétrique positive normalisée sur les opérateurs \mathbf{A} , donc une application $\mathbf{A} \rightarrow \langle \mathbf{A} \rangle_\omega$ telle que

$$\langle a\mathbf{A} + b\mathbf{B} \rangle_\omega = a\langle \mathbf{A} \rangle_\omega + b\langle \mathbf{B} \rangle_\omega, \quad \langle \mathbf{A}^\dagger \rangle_\omega = \overline{\langle \mathbf{A} \rangle_\omega}, \quad \langle \mathbf{A}^\dagger \mathbf{A} \rangle_\omega \geq 0 \quad \text{et} \quad \langle \mathbf{1} \rangle_\omega = 1 \quad (1.3.2)$$

1.3.1.b - Matrice densité

Pour les systèmes à un nombre fini d'états, et dans certains cas simples de dimension infinie, un théorème classique énonce que tout état mixte est représenté par une matrice densité ρ_ω telle que

$$\langle \mathbf{A} \rangle_\omega = \text{tr}(\rho_\omega \mathbf{A}) \quad (1.3.3)$$

Pour un espace de Hilbert de dimension finie N , ρ_ω est une matrice $N \times N$, autoadjointe (Hermitienne), positive $\rho_\omega \geq 0$ (toutes ses valeurs propres sont ≥ 0) et de trace unité $\text{tr}(\rho_\omega) = 1$.

Une telle matrice est donc diagonalisable et peut s'écrire en terme de ses vecteurs propres $|n\rangle$ et de ses valeurs propres p_n

$$\rho_\omega = \sum_n p_n |n\rangle \langle n|, \quad 0 \leq p_n \leq 1, \quad \sum_n p_n = 1 \quad (1.3.4)$$

La valeur moyenne des observables \mathbf{A} dans l'état ω est donc donnée par

$$\langle \mathbf{A} \rangle_\omega = \sum_n p_n \langle n | \mathbf{A} | n \rangle \quad (1.3.5)$$

1.3.1.c - Interprétation

On peut donc imaginer l'état statistique (état mixte) ω comme un mélange statistique classique d'états purs $|n\rangle$, chacun tiré au hasard avec une probabilité p_n . Mais la notion de mélange statistique en mécanique quantique est plus subtile car un état mixte ne se représente pas de façon unique comme un mélange statistique classique d'états purs quelconques. Plus précisément, plusieurs façons de préparer un mélange statistique d'états quantiques (au sens classique, c'est à dire en tirant au hasard avec une certaine loi de probabilité des états quantiques) peuvent donner la même matrice densité, donc le même état statistique quantique. La différence entre ces modes de préparation est contenue dans les corrélations quantiques entre le système et les instruments de préparation, et est inaccessible par des mesures sur le système seul.

1.3.1.d - Entropie de von Neumann

L'entropie d'un état statistique est donnée par l'entropie de von Neumann

$$S(\omega) = -\text{tr}(\rho_\omega \log \rho_\omega) = -\sum_n p_n \log p_n \quad (1.3.6)$$

Un état pur ψ est un état mixte tel que tous les p_n soient nuls sauf un. La matrice densité correspondante est simplement le projecteur de rang un

$$\rho_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (1.3.7)$$

Son entropie est minimale, car $S = 0$. Réciproquement, l'état d'entropie maximale est l'état statistique où tous les états quantiques sont équiprobables.

$$\rho = \frac{1}{N} \mathbf{1} \quad , \quad S = \log N \quad , \quad N = \dim \mathcal{H} \quad (1.3.8)$$

1.3.1.e - Entropie pour les systèmes ouverts

Un autre contexte important où le concept de matrice densité entre en jeu est celui de système quantique ouvert, ou de sous-système d'un système quantique plus grand. Considérons un tel système \mathcal{S} décomposable en deux sous-systèmes distincts \mathcal{A} et \mathcal{B} . L'espace de Hilbert $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ des états du grand système est le produit tensoriel des espaces de Hilbert des deux sous-systèmes.

$$\mathcal{H}_\mathcal{S} = \mathcal{H}_\mathcal{A} \otimes \mathcal{H}_\mathcal{B} \quad (1.3.9)$$

Si le système total est dans un état $\rho_\mathcal{S}$, mais que l'on ne s'intéresse qu'au sous-système \mathcal{A} , (en particulier si on ne peut faire de mesures que sur \mathcal{A}), toute l'information sur \mathcal{A} , c'est à dire sur les résultats des mesures sur \mathcal{A} est contenue dans la matrice densité réduite $\rho_\mathcal{A}$ obtenue en faisant la trace partielle de la grande matrice densité $\rho_\mathcal{S}$ sur les indices relatifs au sous-système \mathcal{B} .

$$\rho_\mathcal{A} = \text{tr}_\mathcal{B} [\rho_\mathcal{S}] \quad (1.3.10)$$

En terme d'éléments de matrices, en notant

$$\{|a_i\rangle, i = 1, \dots, N_A\} \quad \text{base de } \mathcal{H}_\mathcal{A} \quad (1.3.11)$$

$$\{|b_k\rangle, k = 1, \dots, N_B\} \quad \text{base de } \mathcal{H}_\mathcal{B} \quad (1.3.12)$$

$$\{|a_i, b_k\rangle = |a_i\rangle \otimes |b_k\rangle, i = 1, \dots, N_A, k = 1, \dots, N_B\} \quad \text{base de } \mathcal{H}_\mathcal{S} \quad (1.3.13)$$

cette matrice densité s'écrit explicitement

$$\langle a_i | \rho_\mathcal{A} | a_j \rangle = \sum_k \langle a_i, b_k | \rho_\mathcal{S} | a_j, b_k \rangle \quad (1.3.14)$$

Même si l'état $\rho_\mathcal{S}$ originel est un état pur, mais intriqué entre \mathcal{A} et \mathcal{B} , la matrice réduite $\rho_\mathcal{A}$ est celle d'un état statistique mixte pour \mathcal{A} , car on n'a pas accès aux corrélations quantiques entre \mathcal{A} et \mathcal{B} . L'entropie de von Neumann $S_\mathcal{A}$ pour cet état est alors appelée entropie d'intrication entre \mathcal{A} et \mathcal{B} . Il n'est pas inutile de rappeler que c'est précisément dans ce contexte que le concept de matrice densité a été introduit à la fin des années 1920 par L. Landau et J. von Neumann.

Dans la littérature physique, le terme d'état quantique est généralement réservé aux états purs. Dans la littérature mathématique le terme d'état désigne les états statistiques généraux (pour d'assez bonnes raisons en fait...).

1.3.2 Système à température finie et états de Gibbs

Si le système quantique est en équilibre avec un thermostat à la température T , son état est un état mixte. La matrice densité correspondante est déterminée facilement. Si les $|n\rangle$ sont les états propres de H , d'énergie E_n , la probabilité p_n pour le système d'être dans l'état $|n\rangle$ est donnée par la distribution de Gibbs

$$p_n = \frac{1}{Z(\beta)} \exp(-\beta E_n) \quad ; \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad ; \quad Z(\beta) = \sum_n \exp(-\beta E_n) \quad (1.3.15)$$

La matrice densité est donc

$$\rho_\beta = \sum_n p_n |n\rangle\langle n| = \frac{1}{Z(\beta)} \exp(-\beta H) \quad (1.3.16)$$

et la fonction de partition $Z(\beta)$ donnée par

$$Z(\beta) = \text{tr} [\exp(-\beta H)] \quad (1.3.17)$$

La valeur moyenne d'une observable A dans l'état de température T est simplement

$$\langle A \rangle_\beta = \sum_n p_n \langle n|A|n\rangle = \frac{\text{tr} [\exp(-\beta H)A]}{\text{tr} [\exp(-\beta H)]} \quad (1.3.18)$$

Dans le cas des systèmes physiques avec un nombre infini de degré de libertés et où plusieurs états d'équilibre peuvent coexister, les états à température finie ne sont pas décrits par une matrice densité, mais par le formalisme plus général des états KMS (Kubo-Martin-Schwinger). Mais nous resterons dans le cas simple d'un spectre discret pour H , d'une matrice densité bien définie, et donc d'un unique état de Gibbs pour une température T .

1.3.3 Formalisme du temps imaginaire

Pour tout système physique le spectre (réel) du Hamiltonien est borné inférieurement, et la densité de niveau croît avec l'énergie. C'est le cas pour la particule dans un potentiel V s'il est borné inférieurement en $D = 1$ ($\rho(E) \sim E^{1/2}$).

L'opérateur d'évolution $U(t)$

$$U(t) = \exp\left(\frac{t}{i\hbar} H\right) \quad (1.3.19)$$

peut être défini pour des valeurs complexes de la variable t , pourvu que

$$\text{Im}(t) \leq 0 \quad (1.3.20)$$

Ceci se réalise facilement si le spectre de H est discret (si $V(q)$ est un puit de potentiel qui $\rightarrow +\infty$ quand $q \rightarrow \pm\infty$). On a alors

$$H = \sum_n E_n |n\rangle\langle n| \quad , \quad U(t) = \sum_n \exp\left(\frac{t}{i\hbar} E_n\right) |n\rangle\langle n| \quad (1.3.21)$$

Les $U(t)$ sont alors des opérateurs bornés de norme finie $\|U(t)\| < \infty$ dans le demi plan complexe inférieur en t . La norme d'un opérateur U est définie dans la théorie mathématique des opérateurs sur des espaces de Hilbert comme

$$\|U\|^2 = \sup_{\psi \in \mathcal{H}} \frac{\langle \psi | U^\dagger U | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (1.3.22)$$

De plus $U(t)$ ainsi défini (et en particulier ses éléments de matrice) est une fonction analytique de t dans le demi plan. L'opérateur d'évolution à temps réel ($\text{Im}(t) = 0$) est la valeur au bord de l'opérateur $U(t)$ dans ce demi plan $\text{Im}(t) < 0$. C'est seulement sur cet axe réel que l'opérateur d'évolution est un opérateur unitaire, donc préserve les probabilités. Le prolongement analytique de $U(t)$ au demi plan supérieur ($\text{Im}(t) > 0$) n'est pas bien défini en général au sens des opérateurs (même si pour certains éléments de matrice il est défini), car $U(t)$ n'est plus un opérateur borné.

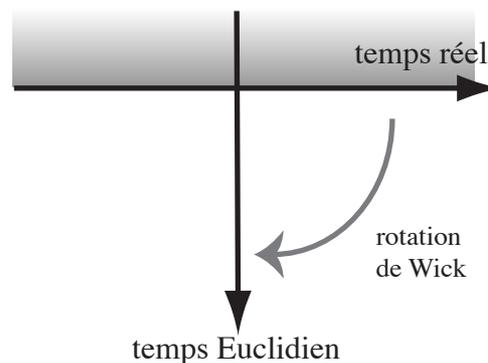


FIGURE 1.3 – Temps réel et temps imaginaire : rotation de Wick

Considérons maintenant le cas où t est imaginaire pur

$$t = -i\tau \quad , \quad \tau > 0 \quad \text{réel} \quad U(-i\tau) = \exp\left(-\frac{\tau}{\hbar}H\right) \quad (1.3.23)$$

L'opérateur d'évolution a la même forme que la matrice densité du système à l'équilibre thermodynamique à une température T

$$\rho_\beta = \frac{1}{Z(\beta)} U(-i\tau) \quad , \quad \beta = \frac{1}{k_B T} = \frac{\tau}{\hbar} = i \frac{t}{\hbar} \quad (1.3.24)$$

On a donc l'analogie mathématique importante

$\text{temps imaginaire} = \text{température finie}$

qui sera très utilisée par la suite. Cette astuce mathématique recouvre en fait des relations profondes entre le formalisme mathématique de la mécanique quantique et celui de la physique statistique. C'est un des fondements du développement de la théorie statistique des champs. Il va s'avérer assez commode et utile de définir des systèmes quantiques, et plus généralement des théories quantique des champs, à temps imaginaire, et d'étudier leurs propriétés. Nous verrons un peu plus tard que cette analogie implique que pour beaucoup de cas ce temps imaginaire doit être considéré comme périodique.

Le passage d'un temps réel (positif $t > 0$) à un temps imaginaire $t = -i\tau$, $\tau > 0$ correspond à une rotation d'angle $-\pi/2$ du temps dans le plan complexe. Cette opération est appelée en théorie quantique des champs «rotation de Wick» (voir figure), et τ est appelé «temps Euclidien» pour la raison suivante. Dans un espace-temps de Minkowski $\mathbb{R}^{1,d}$ de $d + 1$ dimension, dont les vecteurs sont $\mathbf{X} = (t, \vec{x})$, la rotation de Wick transforme la métrique de Minkowski en métrique Euclidienne sur \mathbb{R}^{d+1}

$$ds^2 = -dt^2 + d\vec{x}^2 \quad \rightarrow \quad ds^2 = d\tau^2 + d\vec{x}^2 \quad (1.3.25)$$

L'avantage de parler de temps Euclidien plutôt que de temps imaginaire permet d'éviter certaines confusions terminologiques. Un temps physique imaginaire correspond à un temps Euclidien réel, et réciproquement un temps Euclidien imaginaire correspond à un temps physique réel.

NB : Dans ces notes j'utiliserai toujours la convention suivante : la métrique de Minkowski sera de signature $(- + \dots +)$ et la métrique Euclidienne de signature $(+ + \dots +)$. C'est la convention des livres de Misner-Thorne-Wheeler et de Weinberg, entre autres, mais elle diffère de la convention $(+ - \dots -)$ utilisée dans beaucoup de cours de physique des hautes énergies (Bjorken-Drell, Peskin-Schroeder, etc.).

Chapitre 2

L'intégrale de chemin : introduction

2.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à la présentation de la quantification par intégrale de chemin sur l'exemple simple de la particule non relativiste dans un potentiel. Son application à des cas plus complexes (particule dans un champ électromagnétique), à des systèmes spécifiquement quantiques (bosons, fermions, spins), et pour des théories des champs (où elle se généralise aux intégrales fonctionnelles), sera traitée plus loin. Cette méthode de quantification a été proposée et développée par R. Feynman. Sa formalisation et sa relation avec les processus stochastiques a été approfondie notamment par V. Kac. Elle joue un rôle essentiel pour formuler les relations entre théories des champs et systèmes statistiques.

Le statut, les avantages et les inconvénients de l'intégrale de chemin seront discutés un peu plus loin. Mais insistons déjà sur le fait que l'intégrale de chemin n'est pas une théorie quantique différente de celle obtenue par les méthodes de quantification canonique, mais une représentation mathématique différente, et équivalente, de la même théorie quantique. Dans la plupart des cas elle est plus heuristique (et donc moins rigoureuse) que la formulation canonique, mais permet de dériver rapidement beaucoup de résultats, en particulier pour les calculs perturbatifs. Elle est aussi devenue une source d'inspiration importante pour les mathématiciens.

Je suis donc la présentation standard de l'intégrale de chemin, telle qu'on peut la trouver dans le livre (assez ancien mais toujours utile) de R. Feynman et A. Hibbs. Nous allons considérer le cas de la particule non relativiste, en commençant par le cas simple et idéalisé de la particule libre (bien que ce cas ne soit pas si simple que cela...). Nous verrons plus tard que des systèmes quantiques plus simples (au sens qu'ils ont moins de degrés de liberté) peuvent être traités par cette méthode, mais que l'intégrale de chemin est moins simple à formuler, en l'absence d'une image classique simple.

2.2 Intégrale de chemin pour la particule libre

2.2.1 Intégrale de chemin à temps réel

Considérons d'abord une particule libre de masse m en une dimension d'espace, et dans un potentiel constant V_0 . C'est donc une particule libre qui n'est soumise à aucune force extérieure.

$$V(q) = V_0 \quad (2.2.1)$$

Le Hamiltonien quantique est

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_0 \quad (2.2.2)$$

2.2.1.a - L'opérateur d'évolution

L'élément de matrice (dans la base des états de position) de l'opérateur d'évolution $U(t) = \exp\left(\frac{t}{i\hbar}H\right)$ sera noté dans toute la suite

$$\begin{aligned} U(q', q; t) &= \langle q' | U(t) | q \rangle && \text{représentation de Schrödinger} \\ &= \langle q' ; t | q ; 0 \rangle && \text{représentation de Heisenberg} \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

C'est l'amplitude de probabilité pour que la particule se propage de q à q' pendant le temps t . Cet élément de matrice est souvent appelé le propagateur, mais nous préférons réserver cette appellation à un autre objet en théorie quantique des champs.

$U(q', q; t)$ se calcule facilement pour la particule libre

$$U(q', q; t) = \left[\frac{2i\pi\hbar t}{m} \right]^{-1/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \frac{(q' - q)^2}{t} - tV_0 \right) \right] \quad (2.2.4)$$

Démonstration 1 : On utilise le fait que dans base des états d'impulsion le Hamiltonien H est diagonal pour écrire U comme

$$H = \int dp \left(\frac{p^2}{2m} + V_0 \right) |p\rangle\langle p| \Rightarrow \langle p' | U(t) | p \rangle = \delta(p' - p) \exp \left[\frac{t}{i\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} + V_0 \right) \right]$$

et par transformée de Fourier on obtient U dans la base des états de position

$$\langle q' | U(t) | q \rangle = \int \frac{dp'}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int \frac{dp}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{i(p'q' - pq)/\hbar} \langle p' | U(t) | p \rangle = \int \frac{dp}{2\pi} e^{ip(q' - q)/\hbar + \frac{t}{i\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} + V_0 \right)}$$

d'où le résultat 2.2.4

Démonstration 2 : On vérifie explicitement que U obéit à l'équation de Schrödinger pour la particule libre et que $\lim_{t \rightarrow 0} U(t) = 1$ (attention, le noyau de 1 est une distribution, donc il faut appliquer U à une fonction test pour le vérifier).

Notons que c'est le fait que l'opérateur d'évolution doit être bien défini pour $\text{Im}(t) < 0$ qui détermine dans (2.2.4) la phase

$$(i)^{-\frac{1}{2}} = e^{-i\frac{\pi}{4}}$$

Notons aussi le fait crucial que le terme dans l'exponentielle

$$\frac{m}{2} \frac{(q' - q)^2}{t} - tV_0 = \text{Action}[q \rightarrow q', t]$$

est égal à l'action de la trajectoire classique pour une particule de mass m qui va de q à q' en un temps t (donc à vitesse constante). Pour la particule libre l'opérateur d'évolution quantique est entièrement déterminé par la trajectoire classique correspondante et peut s'écrire formellement

$$U \propto e^{\frac{i}{\hbar} \text{Action}} \quad (2.2.5)$$

Ceci ne sera évidemment plus vrai pour la particule dans un potentiel.

2.2.1.b - L'intégrale de chemin : principe

L'idée de Feynman pour construire une intégrale de chemin est de décomposer l'intervalle de temps $[0, t]$ en N intervalles de temps $\Delta t = \epsilon = t/N$ et utiliser

$$U(t) = [U(t/N)]^N \quad (2.2.6)$$

et utilisant la décomposition de l'identité suivant la base des états de positions

$$\mathbf{1} = \int dq |q\rangle\langle q| \quad (2.2.7)$$

pour insérer des états intermédiaires $\{q_i, i = 1, N-1\}$ entre les $U(\epsilon)$ et écrire

$$U(q', q; t) = \int_{\substack{q_0 = q \\ q_N = q'}} \prod_{i=1}^{N-1} dq_i U(q_N, q_{N-1}; \epsilon) \cdots U(q_1, q_0; \epsilon) \quad \epsilon = t/N \quad (2.2.8)$$

$$= \left[\frac{2i\pi\hbar\epsilon}{m} \right]^{-\frac{N}{2}} \int_{\substack{q_0 = q \\ q_N = q'}} \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} \left(m \frac{(q_{i+1} - q_i)^2}{2\epsilon} - \epsilon V_0 \right) \right] \quad (2.2.9)$$

Maintenant considérons $q_\epsilon(t)$ la trajectoire continue et linéaire par morceau qui part de q pour arriver en q' en passant par chaque q_i au temps intermédiaire t_i , c'est à dire telle que

$$q_\epsilon(t_i) = q_i \quad \text{avec} \quad t_i = i\epsilon = \frac{i}{N}t \quad (2.2.10)$$

et telle que la vitesse $\dot{q}_\epsilon(t)$ soit constante entre les t_i

$$q_\epsilon(t) = q_i \frac{t_{i+1} - t}{t_{i+1} - t_i} + q_{i+1} \frac{t - t_i}{t_{i+1} - t_i} \quad \dot{q}_\epsilon(t) = \dot{q}_i = \frac{q_{i+1} - q_i}{\epsilon} \quad \text{si} \quad t_i < t < t_{i+1} \quad (2.2.11)$$

(voir la figure 2.1).

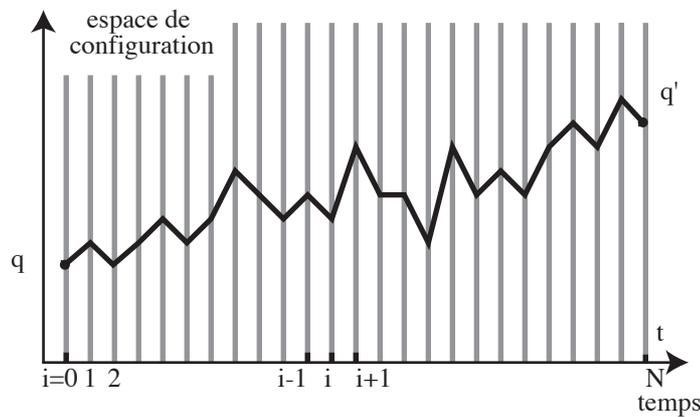


FIGURE 2.1 – Intégrale de chemin à temps discrétisé.

Il est facile de voir par le même argument que pour U que le terme dans l'exponentielle n'est rien d'autre que l'action classique $S[q_\epsilon]$ de cette trajectoire q_ϵ

$$\sum_{i=0}^{N-1} \left(m \frac{(q_{i+1} - q_i)^2}{2\epsilon} - \epsilon V_0 \right) = S[q_\epsilon] \quad (2.2.12)$$

Donc l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution peut s'écrire comme une intégrale sur les trajectoires linéaires par morceaux $q_\epsilon(s)$

$$U(q', q; t) = \int_{\substack{q_\epsilon(0)=q \\ q_\epsilon(t)=q'}} \mathcal{D}_\epsilon[q_\epsilon(s)] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[q_\epsilon] \right] \quad (2.2.13)$$

Ces trajectoires ne sont plus des trajectoires classiques, car les équations du mouvement ne sont pas satisfaites aux instants t_i où la vitesse est discontinue. La mesure sur les trajectoires est

$$\mathcal{D}_\epsilon[q_\epsilon(t)] = \prod_{t_i} dq(t_i) \left[\frac{2i\pi\hbar\epsilon}{m} \right]^{-N/2} \quad (2.2.14)$$

Notons deux choses :

- Pour la particule libre le résultat est exact et nous avons juste utilisé le fait que la convolution de Gaussiennes est une Gaussienne.
- Le résultat est indépendant du pas de temps ϵ , et valable pour n'importe quelle décomposition de l'intervalle $[0, t]$ en intervalles $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{N-1} < t_N = t$. Il faut dans la mesure faire intervenir les pas de temps $\epsilon_i = t_i - t_{i-1}$.

2.2.1.c - L'intégrale de chemin : limite continue

Il est donc possible de prendre la limite $\epsilon \rightarrow 0$ pour *définir formellement* l'intégrale sur les chemins continus $q(s)$ comme

$$\int_{\substack{q(0)=q \\ q(t)=q'}} \mathcal{D}[q(s)] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[q] \right] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\substack{q_\epsilon(0)=q \\ q_\epsilon(t)=q'}} \mathcal{D}_\epsilon[q_\epsilon(s)] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[q_\epsilon] \right] \quad (2.2.15)$$

Cette limite ne dépend pas des détails de la discrétisation en temps, et définit l'intégrale de chemin de Feynman. Les amplitudes de probabilités d'évolution dans l'espace des positions, donc l'opérateur d'évolution, s'écrivent comme une somme sur tous les chemins possibles pour la particule, avec un poids complexe donnée par une phase, égale à l'action de cette trajectoire. Cette intégrale de chemin est aussi appelée «somme sur les histoires» (non classiques) de la particule.

Nous allons revenir plus précisément un peu plus tard sur la nature de l'espace des chemins sur lequel cette intégrale est effectuée, de même que sur la nature des «fonctions intégrables» sur cet espace et leur relation avec les observables quantiques. Avant cela, nous allons définir l'intégrale de chemin (toujours pour la particule libre) à temps imaginaire.

2.2.2 Intégrale de chemin à temps imaginaire :

2.2.2.a - Opérateur d'évolution à temps Euclidien

Nous avons vu que l'opérateur d'évolution $U(t)$ est bien défini pour $\text{Im}(t) \leq 0$. Nous considérons un temps t purement imaginaire

$$\tau = it \quad ; \quad \tau > 0 \quad (2.2.16)$$

L'opérateur d'évolution U devient l'opérateur d'évolution "Euclidien" $U_E(\tau)$, défini comme

$$U(t) = U_E(\tau) = \exp \left[-\frac{\tau}{\hbar} H \right] \quad (2.2.17)$$

Pour la particule libre les élément de matrice de U_E sont une fonction Gaussienne réelle

$$U_E(q', q; \tau) = \langle q' | U_E(\tau) | q \rangle = \left[\frac{2\pi\hbar\tau}{m} \right]^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \frac{(q' - q)^2}{\tau} + \tau V_0 \right) \right] \quad (2.2.18)$$

2.2.2.b - Intégrale de chemin Euclidienne :

On peut répéter les calculs précédents et construire une représentation en terme d'intégrale de chemins Euclidienne $q(\sigma)$ (c'est à dire intégrale sur des chemins dépendant d'un temps Euclidien σ) pour les éléments de matrices de U_E , de la forme

$$U_E(q', q; \tau) = \int_{\substack{q(0)=q \\ q(\tau)=q'}} \mathcal{D}[q(\sigma)] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S_E[q] \right] \quad (2.2.19)$$

où $S_E[q]$ est l'action euclidienne de la trajectoire $q(\sigma)$, donnée par

$$S_E[q(\sigma)] = \int_0^\tau d\sigma \left(\frac{m}{2} \dot{q}(\sigma)^2 + V_0 \right) \quad ; \quad \dot{q}(\sigma) = \frac{dq}{d\sigma} \quad (2.2.20)$$

et la mesure $\mathcal{D}[q(\sigma)]$ est

$$\mathcal{D}[q(\sigma)] = \prod_i dq(\sigma_i) \left[\frac{2\pi\hbar\epsilon}{m} \right]^{-N/2} \quad (2.2.21)$$

Noter le changement de signe devant V_0 dans l'action, qui vient simplement du fait que lors de la rotation de Wick

$$dt \rightarrow -id\tau \quad \text{et} \quad \dot{q} \rightarrow i\dot{q} \quad (2.2.22)$$

A temps Euclidien (τ réel) la mesure sur les chemins $\mathcal{D}[q(\sigma)]$ et le facteur d'action $\exp(-S[q])$ sont réels et positifs. L'intégrale de chemin discrétisée est maintenant une intégrale absolument convergente. L'intégrale de chemin Euclidienne est en fait une intégrale sur une variable aléatoire dépendant du temps Euclidien, $q(\tau)$ avec une mesure de probabilité $d\mu[q] = \mathcal{D}[q] \exp(-\int \dot{q}^2/2\hbar)$, autrement dit c'est une intégrale stochastique. Dans notre cas, ce processus stochastique $q(\tau)$ n'est autre que le processus de Wiener, c'est à dire le mouvement Brownien en une dimension.

2.3 La particule dans un potentiel $V(q)$

Le résultat pour la particule libre est déjà physiquement intéressant mais mathématiquement assez simple (il s'agit juste d'écrire une Gaussienne comme un produit de convolution de Gaussiennes). Le résultat très important est que l'intégrale de chemin s'étend au cas général d'une particule dans un potentiel.

Considérons donc une particule de masse m dans un potentiel $V(q)$ (supposé «suffisamment régulier», en pratique continu et dérivable). Le Hamiltonien quantique est

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(Q) \quad (2.3.1)$$

2.3.1 Limite à temps court de l'opérateur d'évolution

Le principe de l'intégrale de chemin étant de découper le temps en petits intervalles, ce qui est important est de déterminer le comportement à *temps court* de l'opérateur d'évolution dans le cas général. Pour simplifier je fais d'abord les raisonnements pour les temps Euclidiens $\tau = it$.

Supposons que le comportement de l'opérateur d'évolution $U_E(\tau)$ quand $\tau \rightarrow 0$ prend la forme suivante (ansatz), qui généralise le résultat à V constant.

$$U_E(q', q; \tau) = \left[\frac{2\pi\hbar\tau}{m} \right]^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \frac{(q' - q)^2}{\tau} + \tau v(q', q) + \mathcal{O}(\tau^2) \right) \right] \quad (2.3.2)$$

avec $v(q', q)$ une fonction à déterminer. Pour celà, partons de l'équation de Schrödinger pour U_E

$$-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} U_E = H U_E$$

qui s'écrit explicitement

$$-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} U_E(q', q; \tau) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q'^2} + V(q') \right) U_E(q', q; \tau)$$

En notant le log de U

$$W(q', q; \tau) = -\hbar \log U_E(q', q; \tau)$$

ceci se réécrit

$$\frac{\partial}{\partial \tau} W_E = \frac{\hbar}{2m} \Delta_{q'} W_E - \frac{1}{2m} (\nabla_{q'} W_E)^2 + V(q')$$

Développant cette équation en série en t , elle est automatiquement satisfaite pour les termes d'ordre t^{-2} et t^{-1} , et le terme d'ordre t^0 donne l'équation pour $v(q', q)$

$$(q' - q) \frac{\partial}{\partial q'} v(q', q) + v(q', q) = V(q')$$

Cette équation linéaire du 1er ordre avec second membre admet comme solution particulière

$$v(q', q) = \frac{1}{q' - q} \int_q^{q'} d\tilde{q} V(\tilde{q}) = \bar{V}[q, q'] \quad (2.3.3)$$

où $\bar{V}[q, q']$ est la valeur moyenne de V sur l'intervalle $[q, q']$. C'est en fait la seule solution acceptable, car la solution générale de l'équation sans second membre est de la forme

$$\frac{1}{|q - q'|}$$

qui est divergente à points coïncidants $q = q'$, alors que l'on a bien pour la solution particulière le comportement attendu

$$\lim_{q' \rightarrow q} v(q', q) = V(q)$$

Comme pour la particule libre, on remarque que le terme dominant

$$\frac{m}{2} \frac{(q' - q)^2}{\tau} + \tau \bar{V}[q', q] = S_E[q(s)]$$

n'est rien d'autre que l'action Euclidienne S_E pour la trajectoire classique $\bar{q}(s)$ correspondant au mouvement uniforme à vitesse constante de q à q' en un temps τ

$$\bar{q}(s) = (1 - s/\tau) q + s/\tau q' \quad (2.3.4)$$

et donc que le comportement à temps court de l'opérateur d'évolution Euclidien est

$$U_E(q', q; \tau) = \left[\frac{2\pi\hbar\tau}{m} \right]^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S_E[\bar{q}(s)] + \mathcal{O}(\tau^2) \right] \quad \tau \rightarrow 0 \quad (2.3.5)$$

On peut refaire le même calcul pour les temps réels, ou simplement faire la rotation de Wick $\tau \rightarrow it$ dans le résultat à temps imaginaire, pour obtenir le comportement à temps court de l'opérateur d'évolution à temps réel

$$U(q', q; t) = \left[\frac{2i\pi\hbar t}{m} \right]^{-1/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[\bar{q}(s)] + \mathcal{O}(t^2) \right] \quad t \rightarrow 0 \quad (2.3.6)$$

On voit donc que l'identité $U = \exp(i/\hbar \times \text{Action})$ n'est plus valable dans le cas général, mais le redevient aux temps courts.

2.3.2 Intégrale de chemin pour la particule dans un potentiel

2.3.2.a - Intégrale de chemin à temps réel

Nous pouvons donc maintenant répéter les étapes conduisant à la représentation en intégrale de chemin de l'opérateur d'évolution. En décomposant l'intervalle de temps en $N = t/\epsilon$ petits intervalles on obtient une intégrale de chemin approchée

$$U(q', q; t) = \int_{\substack{q(0)=q \\ q(t)=q'}} \mathcal{D}[q_\epsilon] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[q_\epsilon(s)] \right] [1 + \mathcal{O}(\epsilon^2)]^N \quad (2.3.7)$$

où N est le nombre intervalles et $\epsilon = t/N$ le pas de temps. La mesure $\mathcal{D}[q_\epsilon]$ sur les chemins discrétisés (linéaires sur les intervalles) est la même que pour la particule libre, donnée par 2.2.14. Il suffit de remarquer que les termes $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ négligés dans la discrétisation sont d'ordre

$$[1 + \mathcal{O}(\epsilon^2)]^N = [1 + \mathcal{O}(\epsilon^2)]^{t/\epsilon} = 1 + \mathcal{O}(t\epsilon) \quad (2.3.8)$$

et sont donc *négligeables dans la limite des temps continus* $\epsilon \rightarrow 0$. La formule d'intégrale de chemin 2.3.7 devient donc *exacte* dans la limite continue. On obtient ainsi la forme générale de l'*intégrale de chemin de Feynman*

$$U(q', q; t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\substack{q(0)=q \\ q(t)=q'}} \mathcal{D}[q_\epsilon] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[q_\epsilon(s)] \right] \quad (2.3.9)$$

Usuellement l'intégrale de chemin est écrite schématiquement (en omettant la discrétisation et la limite continue)

$$U(q', q; t) = \int_{\substack{q(0)=q \\ q(t)=q'}} \mathcal{D}[q(s)] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[q(s)] \right] \quad (2.3.10)$$

Cette intégrale de chemin correspond bien dans le cas général à une somme sur les histoires

$$U = \sum_{\text{chemins}} e^{\frac{i}{\hbar} \times \text{Action}}$$

2.3.2.b - Intégrale de chemin à temps Euclidien

De façon similaire on obtient l'intégrale de chemin pour l'opérateur d'évolution à temps Euclidien comme somme sur les trajectoires $q(\sigma)$ en temps imaginaire

$$U_E(q', q; \tau) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\substack{q(0)=q \\ q(\tau)=q'}} \mathcal{D}_E[q_\epsilon(\sigma)] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S_E[q_\epsilon(\sigma)] \right] \quad (2.3.11)$$

Enfin, puisque dans l'intégrale de chemin dominant les $q(t)$ tels que

$$|q(t_i) - q(t_{i-1})|^2 \propto \frac{\hbar}{m} \epsilon$$

(voir plus bas) si V est régulier (continu et dérivable) on peut remplacer la moyenne sur les trajectoires par la moyenne sur les extrémités

$$\bar{V}(q_i, q_{i-1}) = \frac{V(q_i) + V(q_{i-1})}{2} + \mathcal{O}(|q_i - q_{i-1}|^2)$$

(formule de Taylor et al.) et il est justifié de remplacer dans l'intégrale de chemin

$$\epsilon \bar{V}(q_i, q_{i-1}) \quad \text{par} \quad \epsilon \frac{V(q_i) + V(q_{i-1})}{2}$$

ce qui simplifie les expressions des intégrales discrétisées.

2.3.3 Dérivation par la formule de Trotter-Kato

Dans le cas d'un potentiel V dépendant de q mais indépendant de t , l'intégrale de chemin peut être également dérivée de façon directe en utilisant la formule de Trotter-Kato, qui énonce que pour deux opérateurs A et B on a

$$e^{A+B} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{A/n} e^{B/n} \right)^n \quad (2.3.12)$$

Cette formule est une conséquence de la formule de Baker-Campbell-Hausdorff

$$e^{t(A+B)} = e^{tA} e^{tB} e^{\frac{t^2}{2}[B,A] + \dots} = e^{tA} e^{tB} (1 + \mathcal{O}(t^2)) \quad (2.3.13)$$

ou les \dots représentent une série infinie de commutateurs emboîtés formés avec des tA et des tB , donc une série en t^k avec $k > 2$. Prenant $t = 1/n$ et en élevant le tout à la puissance n on obtient

$$e^{A+B} = \left(e^{A/n} e^{B/n} (1 + \mathcal{O}(1/n^2)) \right)^n = \left(e^{A/n} e^{B/n} \right)^n (1 + \mathcal{O}(1/n)) \quad (2.3.14)$$

D'où le résultat (on ne précisera pas ici pour quelle classe d'opérateurs et quelle topologie la limite existe...).

Il suffit de prendre pour A et B les opérateurs

$$A = \frac{t}{i\hbar} \frac{P^2}{2m} \quad , \quad B = \frac{t}{i\hbar} V(Q) \quad , \quad n = \frac{t}{\Delta t} \quad (2.3.15)$$

et d'utiliser la décomposition de l'unité dans la base des états de position pour obtenir l'intégrale de chemin générale.