

2.4 Généralisation aux systèmes à plusieurs degrés de liberté

On a présenté en détail l'intégrale de chemin pour une particule en une dimension, c'est à dire pour un système à un degré de liberté classique. Pour des systèmes à plusieurs degrés de liberté l'intégrale de chemin se construit exactement de la même manière.

2.4.1 Particule en dimension $D > 1$

Par exemple pour la particule de masse m en D dimensions dans un potentiel $V(\vec{q})$, la position de la particule est donnée par le vecteur $\vec{q}(t) \in \mathbb{R}^D$. L'action classique est

$$S[\vec{q}] = \int_0^t ds \left(\frac{m}{2} (\dot{\vec{q}}(s))^2 - V(\vec{q}(s)) \right) \quad (2.4.1)$$

On répète facilement les étapes conduisant à représenter l'opérateur d'évolution comme une intégrale de chemin sur toutes les trajectoires possibles $\vec{q}(s)$ allant de la position initiale à la position finale (d'abord en discrétisant en temps $s_i = i\Delta t$, puis en prenant la limite continue $\Delta t \rightarrow 0$)

$$U(\vec{q}', \vec{q}; t) = \int_{\substack{\vec{q}(0)=\vec{q} \\ \vec{q}(t)=\vec{q}'}} \mathcal{D}[\vec{q}(s)] e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{q}]} \quad (2.4.2)$$

La mesure dans l'intégrale de chemin est maintenant

$$\mathcal{D}[\vec{q}(s)] = \prod_{i=1}^{N-1} d^D \vec{q}(s_i) \left[\frac{2i\pi \hbar \Delta t}{m} \right]^{-DN/2} \quad (2.4.3)$$

2.4.2 N Particules en interaction

C'est la même chose pour N particules, étiquetées par $a = 1, \dots, N$, qui peuvent être de masses m_a différentes, et qui sont en interaction, par exemple par un potentiel d'interaction à deux corps, tant que ce potentiel d'interaction $V(\vec{q}_a - \vec{q}_b)$ n'est pas trop singulier. La forme générale de l'action est

$$S[\{\vec{q}\}] = \int_0^t ds \left(\sum_a \frac{m_a}{2} (\dot{\vec{q}}_a(s))^2 - \sum_a V_a(\vec{q}_a(s)) - \sum_{a<b} V_{ab}(\vec{q}_a, \vec{q}_b) - \dots \right) \quad (2.4.4)$$

V_a, V_{ab} , etc. étant les potentiels à un corps, deux corps, etc.

On aura explicitement, les états de positions à N particules étant maintenant

$$|\{\vec{q}_a\}\rangle = \bigotimes_{a=1}^N |\vec{q}_a\rangle \quad (2.4.5)$$

une représentation en intégrale des chemins des N particules

$$U(\{\vec{q}'\}, \{\vec{q}\}; t) = \int_{\substack{\vec{q}_a(0)=\vec{q}_a \\ \vec{q}_a(t)=\vec{q}'_a}} \mathcal{D}[\{\vec{q}(s)\}] e^{\frac{i}{\hbar} S[\{\vec{q}\}]} \quad (2.4.6)$$

La mesure dans l'intégrale des chemins est maintenant

$$\mathcal{D}[\{\vec{q}(s)\}] = \prod_{a=1}^N \left[\prod_{i=1}^{N-1} d^D \vec{q}_a(s_i) \left[\frac{2i\pi \hbar \Delta t}{m_a} \right]^{-DN/2} \right] \quad (2.4.7)$$

Attention, le potentiel de Coulomb $V(\vec{r}) = 1/|\vec{r}|$ en 3 dimension est précisément un exemple de potentiel singulier où il faut faire très attention quand on utilise des techniques d'intégrales de chemin.

2.4.3 Hamiltonien dépendant du temps

Tout ce formalisme se généralise également facilement pour un Hamiltonien dépendant du temps, par exemple par un potentiel dépendant du temps $V(\vec{q}, t)$. Il faut faire attention, l'énergie n'est plus conservée, le Hamiltonien quantique est un opérateur dépendant du temps $H(t)$ et l'opérateur d'évolution dont on part n'est plus $e^{\frac{i}{\hbar}H}$ mais le produit ordonné en temps (au sens défini plus haut)

$$U(t) = T \left[\exp \left(\frac{1}{i\hbar} \int_0^t ds H(s) \right) \right] \quad (2.4.8)$$

$$= \sum_{K=0}^{\infty} (i\hbar)^{-K} \int \dots \int_{0 < s_1 < \dots < s_K < t} ds_1 \dots ds_K H(s_K) \dots H(s_1) \quad (2.4.9)$$

solution de l'équation d'évolution (équation de Schrödinger)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = H(t)U(t) \quad (2.4.10)$$

En effet, l'intégrale de chemin fabriquant automatiquement des produits ordonnés en temps, l'opérateur d'évolution s'écrit toujours

$$U(\vec{q}', \vec{q}; t) = \int_{\substack{\vec{q}(0)=\vec{q} \\ \vec{q}(t)=\vec{q}'}}^{\vec{q}(s)} \mathcal{D}[\vec{q}(s)] e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{q}]} \quad (2.4.11)$$

avec l'action dépendant explicitement du temps

$$S[\vec{q}] = \int_0^t ds \left(\frac{m}{2} (\dot{\vec{q}}(s))^2 - V(\vec{q}(s), s) \right) \quad (2.4.12)$$

2.4.4 Particule chargée dans un champ électro-magnétique

Le cas de la particule chargée dans un champ électromagnétique classique (stationnaire ou dépendant du temps) est un cas très important et intéressant, mais plus délicat.

2.5 Exemple : l'oscillateur harmonique

L'oscillateur harmonique est un cas simple où il est possible de calculer exactement des observables par les méthodes d'intégrale de chemin et de comparer aux résultats obtenus par la quantification canonique. En effet l'action classique est quadratique dans la variable de position $q(t)$, et les intégrales de chemins sont des intégrales Gaussiennes. Ce faisant nous allons déjà rencontrer des problèmes de divergences à haute fréquence et de régularisation.

Nous considérons donc un oscillateur (en une dimension) de masse m et de fréquence propre f , on note la pulsation $\omega = 2\pi f$. L'action classique et le Hamiltonien sont

$$S[q] = \int dt \frac{m}{2} (\dot{q}^2 - \omega^2 q^2) \quad , \quad H = \frac{p^2}{2m} + m\omega^2 q^2 \quad (2.5.1)$$

et l'action Euclidienne

$$S_E[q] = \int d\tau \frac{m}{2} (\dot{q}^2 + \omega^2 q^2) \quad (2.5.2)$$

L'idée est donc la suivante. Pour évaluer une intégrale de chemin

$$\int \mathcal{D}[q] \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[q] \right) \quad (2.5.3)$$

on développe l'action $S[q]$ autour d'une solution classique $q_c(t)$ en écrivant

$$S[q_c + \tilde{q}] = S[q_c] + \int dt \tilde{q}(t) \frac{\delta}{\delta q(t)} S[q_c] + \frac{1}{2} \iint dt dt' \tilde{q}(t) \tilde{q}(t') \frac{\delta^2}{\delta q(t) \delta q(t')} S[q_c] \quad (2.5.4)$$

$\delta/\delta q(t)$ désigne la dérivée fonctionnelle par rapport à q . Le développement s'arrête à cet ordre car l'action est quadratique.

Le terme d'ordre 1 en \tilde{q} s'annule par les équations du mouvement. On réécrit donc l'intégrale de chemin comme

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q_c]\right) \times \int \mathcal{D}[\tilde{q}] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \iint dt dt' \tilde{q}(t) \tilde{q}(t') \frac{\delta^2}{\delta q(t) \delta q(t')} S[q_c]\right) \quad (2.5.5)$$

et formellement l'intégrale Gaussienne sur les fluctuations \tilde{q} donne un déterminant

$$\left[\det \left(\frac{\delta^2 S}{\delta q \delta q} \right) \right]^{-1/2} \quad (2.5.6)$$

On reviendra de façon plus systématique sur ce type de calcul et sur leurs extension au cas d'une action générale plus loin (limite classique et développements semi-classiques).

2.5.1 L'oscillateur harmonique à temps Euclidien

Calculons d'abord l'intégrale de chemin à temps Euclidien. La trajectoire Euclidienne classique est la solution des équation du mouvement à temps Euclidien, avec conditions initiales et finales données

$$\ddot{q} = \omega q, \quad q(\tau_1) = q_1, \quad q(\tau_2) = q_2 \quad (2.5.7)$$

est

$$q_c(\tau) = \frac{1}{\sinh(\omega(\tau_2 - \tau_1))} (q_1 \sinh(\omega(\tau_2 - \tau)) + q_2 \sinh(\omega(\tau - \tau_1))) \quad (2.5.8)$$

Remarquer qu'il n'y a qu'une seule telle trajectoire.

L'action Euclidienne pour cette trajectoire classique est

$$S_E[q_c] = S_E^{cl}(q_2, q_1; \tau) = \frac{m\omega}{2} \frac{(q_1^2 + q_2^2) \cosh(\omega(\tau_2 - \tau_1)) - 2q_1 q_2}{\sinh(\omega(\tau_2 - \tau_1))} \quad (2.5.9)$$

L'intégrale de chemin est Gaussienne et peut s'écrire, développant les fluctuations autour de la solution classique $q = q_c + \delta q$

$$U_E(q_2, q_1; \tau_2 - \tau_1) = \int \mathcal{D}[q] e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[q]} = \left(\langle \langle \det \rangle \rangle \left[-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \omega^2 \right] \right)^{-1/2} e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[q_c]} \quad (2.5.10)$$

L'opérateur différentiel $S'' = -\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \omega^2$ est défini sur l'intervalle $\mathcal{I} = [\tau_1, \tau_2]$ avec conditions aux limites de Dirichlet (c'est à dire qu'il est défini sur l'espace $\mathcal{L}_{\text{Dir}}(\mathcal{I})$ des fonctions $\psi(\tau)$ qui s'annulent aux extrémités $\psi(\tau_1) = \psi(\tau_2) = 0$).

«det» est le déterminant de cet opérateur, mais ce déterminant n'est en fait pas bien défini, car le produit des valeurs propres est infini. En fait la normalisation du déterminant est fixée par la mesure (également singulière) dans l'intégrale de chemin. On peut l'obtenir facilement en remarquant que pour $\omega = 0$ on retrouve la particule libre, pour laquelle on connaît la normalisation de l'intégrale de chemin. On va donc écrire

$$\langle \langle \det \rangle \rangle \left[-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \right] = \frac{2\pi \hbar (\tau_2 - \tau_1)}{m} \quad (2.5.11)$$

et on décompose

$$\llbracket \det \rrbracket \left[-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \omega^2 \right] = \llbracket \det \rrbracket \left[-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \right] \times \det \left[1 - \omega^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \right)^{-1} \right] \quad (2.5.12)$$

Le deuxième déterminant dans le membre de droite de (2.5.12) est le déterminant d'un opérateur pseudo-différentiel. Il est bien défini. En effet les vecteurs propres ψ_k de cet opérateur sont les mêmes que ceux de $\frac{\partial}{\partial \tau}$, donc avec valeurs propres λ_k (on note $\tau = \tau_2 - \tau_1$)

$$\psi_k(\sigma) = \sin(\pi k \sigma / \tau), \quad \lambda_k = 1 + \left(\frac{\tau \omega}{\pi k} \right)^2, \quad k \in \mathbb{N}_+ \quad (2.5.13)$$

Ce déterminant est donc donné par un produit infini convergent, qui se calcule exactement

$$\det \left[1 - \omega^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \right)^{-1} \right] = \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 + \left(\frac{\tau \omega}{\pi k} \right)^2 \right) = \frac{\sinh(\omega \tau)}{\omega \tau} \quad (2.5.14)$$

On obtient donc finalement

$$U_E(q_2, q_1; \tau_2 - \tau_1) = \langle q_2, \tau_2 | q_1, \tau_1 \rangle = \sqrt{\frac{m \omega}{2\pi \hbar \sinh(\omega(\tau_2 - \tau_1))}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} S_E[q_c] \right) \quad (2.5.15)$$

On peut également discrétiser l'intégrale de chemin en N intervalles de temps $\Delta \tau = \tau/N$ et discrétiser l'action, auquel cas l'opérateur S_E'' devient une matrice de taille finie $(N-1) \times (N-1)$, calculer exactement le déterminant, puis prendre la limite $N \rightarrow \infty$.

Enfin, on peut vérifier explicitement que 2.5.15 satisfait l'équation de Schrödinger à temps Euclidien (équation de la chaleur), et se comporte à temps court $\tau \ll 1/\omega$ comme le propagateur de la particule libre, donc satisfait également la condition initiale $U_E(q_2, q_1; 0) = \delta(q_1 - q_2)$.

2.5.2 L'oscillateur harmonique à temps réel

Pour obtenir l'opérateur d'évolution en temps réel, il suffit de faire la rotation de Wick $\tau = it$, $\sinh(it) = i \sin(t)$ pour obtenir

$$U(q_2, q_1; t_2 - t_1) = \langle q_2, t_2 | q_1, t_1 \rangle = \sqrt{\frac{m \omega}{2i\pi \hbar \sin(\omega(t_2 - t_1))}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[q_c] \right) \quad (2.5.16)$$

avec l'action de la trajectoire classique (oscillations)

$$q_c(t) = q_1 \frac{\sin(\omega(t_2 - t))}{\sin(\omega(t_2 - t_1))} + q_2 \frac{\sin(\omega(t - t_1))}{\sin(\omega(t_2 - t_1))} \quad (2.5.17)$$

donnée par

$$S_c = \frac{m \omega}{2} \frac{(q_1^2 + q_2^2) \cos(\omega(t_2 - t_1)) - 2q_1 q_2}{\sin(\omega(t_2 - t_1))} \quad (2.5.18)$$

Enfin, on peut remarquer que le facteur $\sqrt{\frac{m \omega}{2i\pi \hbar \sin(\omega(t_2 - t_1))}}$ devant l'exponentielle de l'action classique dans 2.5.16 correspond à l'identité pour le déterminant fonctionnel (à temps réel).

$$\llbracket \det \rrbracket \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] = 2\pi \hbar \frac{\sin(\omega t)}{m \omega} = 2\pi \hbar \left[-\frac{\partial^2}{\partial q_1 \partial q_2} S_E^c(q_2, q_1; t) \right]^{-1} \quad (2.5.19)$$

Cette forme simple sera justifiée et généralisée plus tard. On remarque également que ce coefficient est indépendant des conditions initiales et finales q_1 et q_2 , mais qu'il dépend du temps t , et qu'il est singulier quand t est un multiple de la demi-période de l'oscillateur harmonique

$$t = n \frac{\pi}{\omega}, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (2.5.20)$$

Ceci s'explique par l'existence de points conjugués : toutes les trajectoires classiques partant d'un point q_1 au temps 0 aboutissent alors au même point $q_2 = (-1)^n q_1$ au temps t , comme on le discutera plus loin.

2.6 Observables et fonctions de corrélations

2.6.1 Opérateurs et intégrale de chemin

Il reste à comprendre comment s'expriment les observables dans le formalisme de l'intégrale de chemin, c'est à dire les éléments de matrice incluant des opérateurs. Nous cherchons donc à calculer les éléments de matrice incluant un opérateur $A(t)$, de la forme (en représentation de Heisenberg)

$$\langle q', t | A(t_1) | q, 0 \rangle \quad (2.6.1)$$

Pour cela il suffit d'utiliser la décomposition de A dans la base des états de position

$$A = \iint dq'_1 dq_1 \langle q'_1 | A | q_1 \rangle | q'_1 \rangle \langle q_1 | \quad (2.6.2)$$

pour obtenir

$$\langle q', t | A(t_1) | q, 0 \rangle = \iint dq'_1 dq_1 \langle q', t | q'_1, t_1 \rangle \langle q'_1, t_1 | A(t_1) | q_1, t_1 \rangle \langle q_1, t_1 | q, 0 \rangle \quad (2.6.3)$$

qui peut se représenter comme : l'intégrale de chemin de q à q_1 \times l'élément de matrice de A entre q_1 et q'_1 \times l'intégrale de chemin de q'_1 à q' . Ceci est représenté sur la figure 2.2.

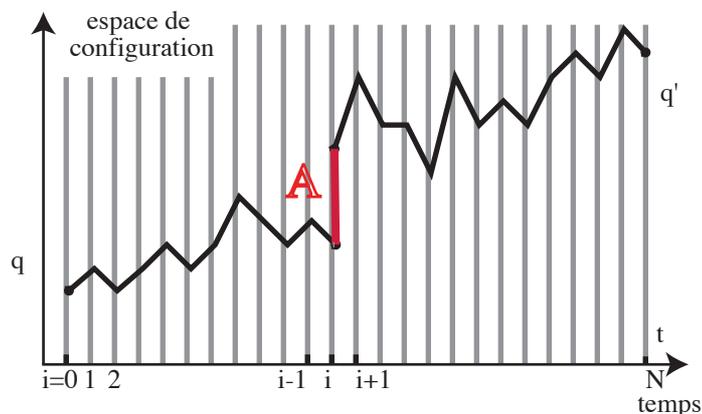


FIGURE 2.2 – Intégrale de chemin avec insertion d'un opérateur $A(t_i)$

2.6.2 Observable de position Q :

Pour l'observable de position Q à un instant donné c'est simple, puisque

$$\langle q'_1 | Q | q_1 \rangle = q_1 \delta(q'_1 - q_1) \quad (2.6.4)$$

On obtient une représentation en intégrale de chemin

$$\langle q', t | Q(t_1) | q, 0 \rangle = \int D[q] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[q] \right] q(t_1) \quad (2.6.5)$$

où on insère l'observable $q(t_1)$ dans l'intégrale. On a bien l'identification entre observable quantique et observable classique attendue par le principe de correspondance

$$\begin{array}{ccc} \text{opérateur (repr. de Heisenberg)} & & \text{observable dans l'intégrale de chemin} \\ Q(t) & \leftrightarrow & q(t) \end{array} \quad (2.6.6)$$

Les valeurs moyennes quantiques (éléments de matrices) de l'opérateur Q sont égales aux valeurs moyennes (au sens de la mesure) de l'observable classique q dans l'intégrale de chemin.

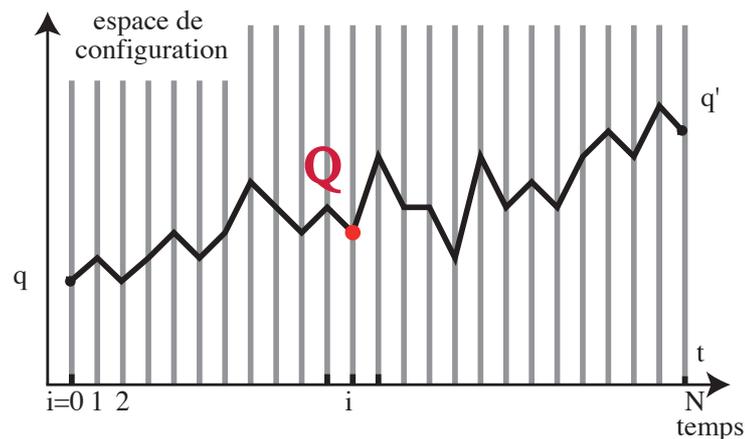


FIGURE 2.3 – Intégrale de chemin avec l'opérateur $Q(t)$

C'est la même chose si l'observable $F(t)$ est une fonction $f(Q)$ de l'opérateur position $Q(t)$ à un instant donné (typiquement un polynôme), puisque

$$\langle q'_1 | f(Q) | q_1 \rangle = f(q_1) \delta(q'_1 - q_1) \quad (2.6.7)$$

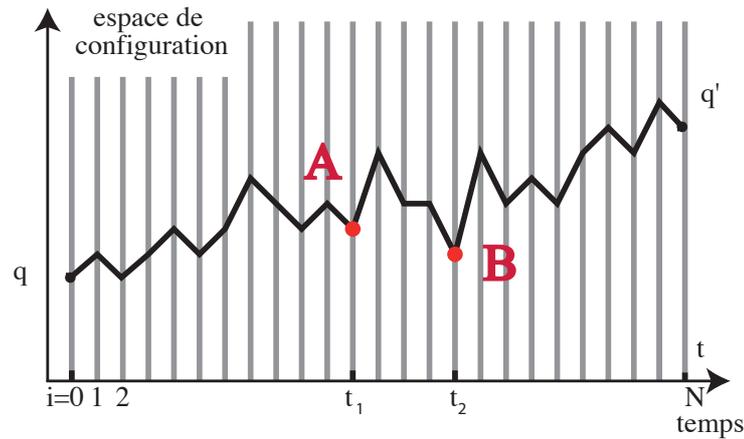
donc

$$f(Q)(t) \quad \leftrightarrow \quad f(q(t)) \quad (2.6.8)$$

2.6.3 Plusieurs observables et produits ordonnés en temps

A quoi correspond l'intégrale de chemin lorsque l'on insère maintenant deux telles observables $A(t) = A(q(t))$ et $B(t) = B(q(t))$ à deux temps différents t_1 et t_2 ?

$$\int D[q] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[q] \right] A(t_1) B(t_2) \quad (2.6.9)$$

FIGURE 2.4 – Intégrale de chemin avec deux opérateur $A(t_1)$ et $B(t_2)$

Il est simple de voir que si $t_1 < t_2$ on obtient $\langle q', t | B(t_2) A(t_1) | q, 0 \rangle$, alors que si $t_1 > t_2$ on obtient $\langle q', t | A(t_1) B(t_2) | q, 0 \rangle$ toujours en représentation de Heisenberg. On obtient donc l'élément de matrice du produit ordonné en temps des deux opérateurs

$$\langle q', t | T[Q(t_1) Q(t_2)] | q, 0 \rangle = \int D[q] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[q] \right] q(t_1) q(t_2) \quad (2.6.10)$$

où $T[\]$ est le produit ordonné en temps. L'intégrale de chemin ordonne en temps «automatiquement» les produits d'opérateurs. C'est normal, les trajectoires $q(t)$ sur lesquelles est effectuée l'intégrale de chemin sont déjà ordonnées dans le temps. On ne peut pas «mesurer» $q(t_2)$ avant $q(t_1)$ si $t_2 > t_1$. Ceci se généralise à des produits d'un nombre quelconque d'opérateurs.

2.6.4 Observable d'impulsion P

2.6.4.a - Définition de P

Les choses deviennent plus délicates pour l'observable d'impulsion P . En effet, l'intégrale de chemin est définie dans l'espace des positions, donc en référence à Q , et P ne commute pas avec Q . Les éléments de matrice de P sont

$$\langle q' | P | q \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'} \delta(q' - q) = - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \delta(q' - q) \quad (2.6.11)$$

Si on insère cet élément de matrice à un temps $t_i = i\epsilon$ dans l'intégrale de chemin discrétisée, le terme faisant intervenir les variables à t_i dans cette intégrale s'écrit

$$\int dq_i \int dq'_i U(q_{i+1}, q'_i; \epsilon) \langle q'_i | P | q_i \rangle U(q_i, q_{i-1}; \epsilon) \quad (2.6.12)$$

On peut intégrer par partie sur q_i (resp. sur q'_i) pour faire agir la dérivée par rapport à q_i dans $\langle q'_i | P | i \rangle$ sur le U à gauche (resp. à droite), et obtenir

$$\begin{aligned} & \int dq_i \int dq'_i U(q_{i+1}, q'_i; \epsilon) \delta(q'_i - q_i) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i} U(q_i, q_{i-1}; \epsilon) \\ &= \int dq_i U(q_{i+1}, q_i; \epsilon) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i} U(q_i, q_{i-1}; \epsilon) \end{aligned}$$

puis utiliser le comportement à temps court (c.a.d. $\epsilon \rightarrow 0$) de U pour obtenir

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i} U(q_i, q_{i-1}; \epsilon) = m \frac{q_i - q_{i-1}}{\epsilon} U(q_i, q_{i-1}; \epsilon) (1 + \mathcal{O}(\epsilon)) \quad (2.6.13)$$

On peut montrer facilement que ceci est en fait un cas particulier de la limite aux temps courts de l'élément de matrice

$$\langle q'; t' | P(t_1) | q; t \rangle \quad t < t_1 < t' \quad \text{quand} \quad t, t' \rightarrow t_1$$

qui est

$$\langle q'; t' | P(t_1) | q; t \rangle = m \frac{(q' - q)}{(t' - t)} \langle q'; t' | q; t \rangle [1 + \mathcal{O}(|t' - t|)] \quad (2.6.14)$$

Ceci implique qu'on peut identifier l'impulsion p dans l'intégrale de chemin discrétisée avec $m \bar{v}$, où \bar{v} est la vitesse moyenne dans l'intervalle de temps qui contient t . Autrement dit

$$\langle q', t | P(t_1) | q, 0 \rangle = \int D[q] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[q] \right] p_{\Delta}(t_1) \quad (2.6.15)$$

avec

$$p_{\Delta}(t) = m \frac{\Delta q}{\Delta t}(t) \quad , \quad \frac{\Delta q}{\Delta t}(t) = \frac{q(t_{i+1}) - q(t_i)}{t_{i+1} - t_i} \quad , \quad t_i < t < t_{i+1}$$

On a bien l'identification *impulsion = masse × vitesse* conforme au principe de correspondance et aux équations du mouvement

$$P(t) \quad \leftrightarrow \quad p_{\Delta}(t) = m \frac{\Delta q}{\Delta t}(t) \quad (2.6.16)$$

Mais il faut faire attention ! L'observable impulsion dans l'intégrale de chemin est associée à un intervalle de temps $[t, t + \Delta t]$, pas à un instant t donné dans la discrétisation.

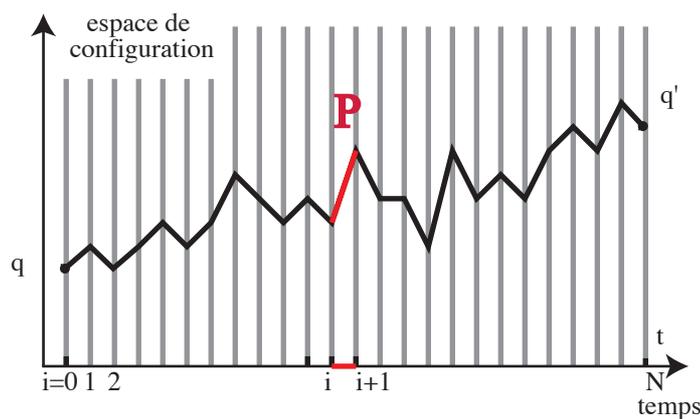


FIGURE 2.5 – Discrétisation de l'opérateur impulsion $P(t)$ dans l'intégrale de chemin

2.7 Intégrale de chemin pour un système quantique à température finie : temps Euclidien périodique

2.7.1 Intégrale de chemin à temps imaginaire périodique

Pour un système quantique à l'équilibre thermodynamique dans l'ensemble canonique à la température T , la fonction de partition est la trace de l'opérateur d'évolution à un temps imaginaire τ

$$Z(\beta) = \text{tr} [\exp(-\beta H)] = \text{tr}[U_E(\tau)] \quad , \quad \beta = \frac{1}{k_B T} = \frac{\tau}{\hbar} \quad (2.7.1)$$

En partant de la représentation de l'opérateur d'évolution euclidien comme une intégrale de chemin, prendre la trace correspond à intégrer sur les positions initiales et finales $q = q'$

$$\text{tr}[U_E(\tau)] = \int dq \langle q|U_E(\tau)|q\rangle = \int dq \int_{\substack{q(0)=q \\ q(\tau)=q}} \mathcal{D}[q] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S_E[q]\right] \quad (2.7.2)$$

La fonction de partition est donc donnée par l'intégrale de chemin Euclidiennes sur les *trajectoires périodiques (en temps imaginaire)* de période τ proportionnelle à l'inverse de la température

$$Z(\beta) = \int_{q(0)=q(\tau)} \mathcal{D}[q] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S_E[q]\right] \quad (2.7.3)$$

avec la relation fondamentale entre la période τ , la température T et la constante de Planck \hbar

$$\tau = \frac{\hbar}{k_B T} = \hbar\beta \quad (2.7.4)$$

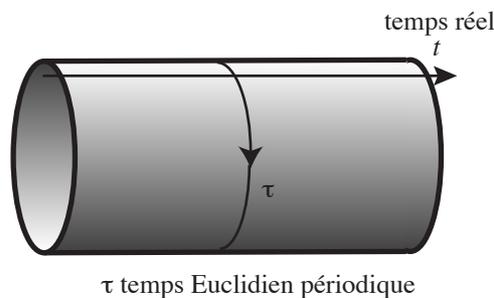


FIGURE 2.6 – Température finie $T \Leftrightarrow$ temps Euclidien périodique $\tau = \hbar/k_B T$

2.7.2 Observables et fonctions de corrélation à température finie

2.7.2.a - Valeur moyenne d'un opérateur

Considérons une observable (opérateur) \mathbf{A} . Pour simplifier on considérera un opérateur fonction de la position à un temps donné $\mathbf{A} = A(\mathbf{Q})$. La valeur moyenne de \mathbf{A} dans l'état de Gibbs à température T est définie par

$$\langle \mathbf{A}(t) \rangle_\beta = \langle \mathbf{A} \rangle_\beta = \frac{\text{tr}(\mathbf{A} e^{-\beta \mathbf{H}})}{\text{tr}(e^{-\beta \mathbf{H}})} \quad (2.7.5)$$

Il est donc donné par le rapport de deux intégrales de chemin à temps Euclidien périodique

$$\langle \mathbf{A} \rangle_\beta = \frac{\int_{q(0)=q(\tau)} \mathcal{D}[q] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S_E[q] \right] A[q(\tau_0)]}{\int_{q(0)=q(\tau)} \mathcal{D}[q] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S_E[q] \right]} \quad (2.7.6)$$

Le contour en temps Euclidien pour l'intégrale de chemin au numérateur est représenté sur la figure 2.7. L'intégrale de chemin au dénominateur est celle qui définit la fonction de partition. L'instant

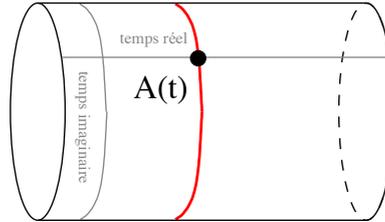


FIGURE 2.7 – Contour en temps complexe imaginaire (temps Euclidien) \mathcal{E} pour évaluer $\langle \mathbf{A}(t) \rangle_\beta$ à température finie

t auquel est attaché \mathbf{A} n'a pas d'importance, puisqu'un état de Gibbs est un état stationnaire.

2.7.2.b - Fonctions de corrélation à temps réel

Pour deux opérateurs $A(t_1)$ et $B(t_2)$ à temps **réels** différents $t_1 < t_2$, la valeur moyenne du produit (ordonné en temps) de ces deux opérateurs sur l'état de Gibbs (ou fonction de corrélation de ces deux observables) est définie comme

$$\langle T[B(t_2)A(t_1)] \rangle_\beta = \frac{1}{Z_\beta} \text{tr} \left(e^{-\beta H} B(t_2) A(t_1) \right) \quad t_1 < t_2 \quad (2.7.7)$$

Attention à l'ordre des opérateurs ! La trace au numérateur s'écrit en représentation de Schrödinger

$$\begin{aligned} \text{tr} \left[e^{-\beta H} B(t_2) A(t_1) \right] &= \text{tr} [U(-i\hbar\beta)U(-t_2)BU(t_2 - t_1)AU(t_1)] \\ &= \text{tr} [U_E(\tau)U(-t_2)BU(t_2 - t_1)AU(t_1)] \end{aligned} \quad (2.7.8)$$

Avec la période en temps Euclidien $\tau = \hbar\beta = \hbar/k_B T$ comme précédemment. On peut donc représenter cette trace comme une intégrale de chemin, mais où l'on combine des opérateurs d'évolution en temps réel et en temps imaginaire. Il faut en effet représenter :

1. la création d'un état initial $|\psi_0\rangle$ du système à $t = 0$
2. l'évolution à temps réel de $t = 0$ à $t = t_1$
3. l'application de l'opérateur A
4. l'évolution à temps réel de $t = t_1$ à $t = t_2$
5. l'application de l'opérateur B
6. l'évolution à rebours à temps réel de $t = t_2$ à $t = 0$ (pour revenir à l'état initial)
7. l'évolution à temps imaginaire (donc $t = -i\tau$, $\tau = \hbar\beta = \hbar/k_B T$) pour représenter la matrice $e^{-\beta H}$
8. la fermeture en projetant sur l'état initial $|\psi_0\rangle$

9. et enfin la somme sur tous les états initiaux pour représenter la trace.

On doit donc dans l'intégrale de chemin intégrer sur les chemins $q(t)$ avec t défini sur un contour complexe $0 \rightarrow t_1 \rightarrow t_2 \rightarrow 0 \rightarrow i\tau$, et in fine périodique de période $\tau = i\hbar\beta$. Un tel contour \mathcal{T} est représenté sur la figure 2.8.

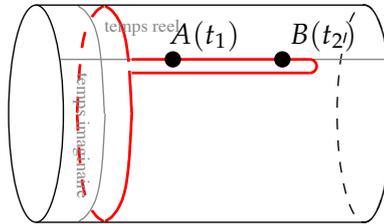


FIGURE 2.8 – Contour en temps complexe \mathcal{T} pour une fonction de corrélation de 2 opérateurs $\langle T[A(t_1)B(t_2)] \rangle_\beta$ à température finie et à temps réel (les opérateurs sont ordonnés en temps)

On a finalement la représentation

$$\langle T[B(t_2)A(t_1)] \rangle_\beta = \frac{\int_{\mathcal{T}} \mathcal{D}[q] e^{\frac{i}{\hbar}S[q]} A(t_1)B(t_2)}{\int_{\mathcal{E}} \mathcal{D}[q] e^{\frac{i}{\hbar}S[q]}} \quad (2.7.9)$$

Tout ceci se généralise sans difficulté aux fonctions de corrélations à $K > 2$ opérateurs du type $\langle T[A_1(t_1) \cdots A_k(t_k)] \rangle_\beta$.

2.7.2.c - Fonctions de corrélations à temps Euclidien

Cette fonction de corrélation à temps réel s'obtient en fait à partir de la fonction de corrélation à temps imaginaire (temps Euclidien), définie comme

$$\begin{aligned} \langle B(\tau_2)A(\tau_1) \rangle_\beta &= \frac{1}{Z_\beta} \text{tr} \left[e^{-\beta H} B(\tau_2)A(\tau_1) \right] \\ &= \frac{1}{Z_\beta} \text{tr} \left[e^{-(\tau-\tau_2)H/\hbar} B e^{-(\tau_2-\tau_1)H/\hbar} A e^{-\tau_1 H/\hbar} \right] \end{aligned} \quad (2.7.10)$$

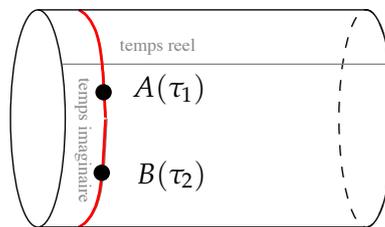


FIGURE 2.9 – Contour en temps complexe \mathcal{E} pour une fonction de corrélation de 2 opérateurs $\langle B(\tau_2)A(\tau_1) \rangle_\beta$ à temps Euclidien et température finie.

La trace au numérateur se représente par l'intégrale de chemin à temps Euclidien

$$\text{tr} \left[e^{-\beta H} B(\tau_2)A(\tau_1) \right] = \int_{\mathcal{E}} \mathcal{D}[q] e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[q]} A(\tau_1)B(\tau_2) \quad (2.7.11)$$

Cette intégrale de chemin correspond au contour en temps de la figure 2.9. Ceci se généralise sans difficulté aux fonctions de corrélations à $K > 2$ opérateurs du type $\langle A_1(\tau_1) \cdots A_k(\tau_k) \rangle_\beta$.

Cette fonction de corrélation 2.7.10 est donc une fonction $G_{AB}(\tau_2 - \tau_1; \beta)$ de $\tau_2 - \tau_1$, avec des propriétés d'analyticité un peu particulières sur laquelle je reviendrai. L'opérateur d'évolution $U(t)$ étant une fonction analytique du temps t dans le demi-plan complexe $\text{Im}(t) < 0$, on peut en fait déformer librement le contour en temps dans le plan complexe dans la définition de l'intégrale de chemin. L'important est que $\text{Im}(dt) \leq 0$ (le chemin en temps euclidien tourne toujours dans le même sens) pour que les opérateurs d'évolution $U(dt)$ pour chaque intervalle de temps dt sur le contour soient bien définis.

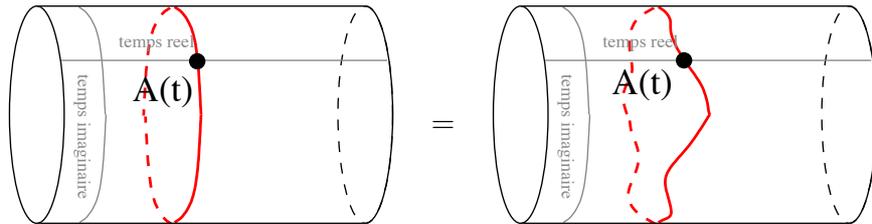


FIGURE 2.10 – L'intégrale de chemin ne dépend pas du contour en temps, pourvu que $\text{Im}(dt) \leq 0$.

On en déduit que l'on peut effectuer la rotation de Wick

$$\tau_1 \rightarrow it_1 \quad , \quad \tau_2 \rightarrow it_2 \quad (2.7.12)$$

pour passer de l'expression de la fonction de corrélation à temps Euclidien $\langle B(\tau_2)A(\tau_1) \rangle_\beta$ à la fonction de corrélation à temps réel $\langle T[B(t_2)A(t_1)] \rangle_\beta$

2.7.3 Limite de température nulle

2.7.3.a - Temps Euclidien

Prendre la limite de température nulle $T \rightarrow 0$ (donc $\beta \rightarrow \infty$) correspond à projeter sur le niveau fondamental $|0\rangle$ du Hamiltonien. Considérons le cas simple où H à un spectre discret $E_0 < E_1 < E_2 < \cdots$ et notons $|0\rangle, |1\rangle, \cdots$ les états propres correspondants tels que $H|n\rangle = E_n|n\rangle$. On a bien

$$\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \langle A(\tau_0) \rangle_\beta = \lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{\sum_n \langle n|A|n \rangle e^{-\beta E_n}}{\sum_n e^{-\beta E_n}} = \langle 0|A(\tau_0)|0 \rangle \quad (2.7.13)$$

On a un résultat similaire pour les fonctions de corrélations avec K opérateurs $A_i(\tau_i)$ (les temps Euclidien étant convenablement ordonnés $\tau_1 < \tau_2 < \cdots < \tau_K$)

$$\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \langle A_k(\tau_k) \cdots A_1(\tau_1) \rangle_\beta = \langle 0|A_k(\tau_k) \cdots A_1(\tau_1)|0 \rangle \quad (2.7.14)$$

La limite $T \rightarrow 0$ correspond donc pour l'intégrale de chemin à temps Euclidien à la limite où la période $\tau = \hbar/k_B T$ devient infinie. Dans cette limite le temps Euclidien peut être considéré comme une variable réelle variant entre $-\infty$ et $+\infty$. Les valeurs moyennes des observables sur l'état fondamental (on parle de valeurs moyennes dans le vide) sont donc obtenues par des intégrales de chemin à temps Euclidien $\tau \in \mathbb{R}$. Attention, ces intégrales de chemins sont normalisées par le facteur $1/Z_\beta$, de façon à toujours avoir $\langle 0|1|0 \rangle = \langle 0|0 \rangle = 1$.

2.7.3.b - Temps réel

Lorsque l'on effectue la rotation de Wick $\tau_i = it_i$ pour obtenir les fonctions de corrélations à temps réel, on obtient les valeurs moyennes dans le vide des produits ordonné en temps d'opérateurs de type $\langle 0|T[A_K(t_K) \cdots A_1(t_1)]|0\rangle$. $|0\rangle$ est le vide (l'état de plus basse énergie) du modèle dans la représentation de Heisenberg. Il faut se rappeler que le contour d'intégration en temps dans l'intégrale de chemin est du type représenté sur la figure 2.8. Si l'on se rappelle que l'on projette sur le fondamental et que l'on oublie la partie temps Euclidien, l'intégrale de chemin à temps réel correspond toujours à un double contour, représenté sur la fig. 2.11.

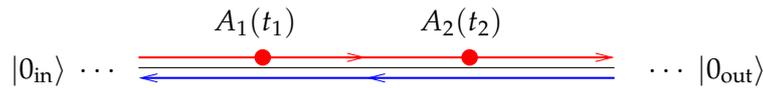


FIGURE 2.11 – Intégrales de chemin pour les fonctions de corrélations à temps réel

Ces deux contours correspondent à la représentation suivante. L'intégrale de chemin à temps réel permet de calculer des éléments de matrices d'opérateurs entre un état initial $|\psi_{\text{in}}\rangle$ à un temps initial t_{in} et un état final $|\psi_{\text{out}}\rangle$ à un temps final t_{out} . Dans notre cas les états initiaux et finaux sont tous les deux le fondamental, mais avec une phase

$$|0_{\text{in}}\rangle = |0; t_{\text{in}}\rangle = e^{i \frac{t_{\text{in}} E_0}{\hbar}} |0\rangle \quad \text{avec } t_{\text{in}} \rightarrow -\infty \quad (2.7.15)$$

$$|0_{\text{out}}\rangle = |0; t_{\text{out}}\rangle = e^{i \frac{t_{\text{out}} E_0}{\hbar}} |0\rangle \quad \text{avec } t_{\text{out}} \rightarrow +\infty \quad (2.7.16)$$

L'intégrale de chemin représenté avec la figure 2.11 correspond à écrire

$$\langle 0|T[A_1(t_1) \cdots A_K(t_K)]|0\rangle = \frac{\langle 0_{\text{out}}|T[A_1(t_1) \cdots A_K(t_K)]|0_{\text{in}}\rangle}{\langle 0_{\text{out}}|0_{\text{in}}\rangle} \quad (2.7.17)$$

le contour supérieur (rouge) représentant le numérateur et le contour inférieur (bleu) représentant le dénominateur. Dans notre cas (mécanique quantique non relativiste) tout ceci est élémentaire.

Pour les théories quantiques des champs (invariantes relativistes) ces valeurs moyennes dans le vide de produits d'opérateurs $\langle 0|T[A_1(x_1) \cdots A_K(x_K)]|0\rangle$, les A_i étant maintenant des opérateurs locaux dépendant d'un vecteur d'espace temps $x = (t, \vec{x})$, sont des objets fondamentaux. Nous les étudierons plus loin. Elles portent le nom de fonctions de Green.

2.8 Mécanique Quantique Euclidienne et Physique Statistique 1D

2.8.1 L'intégrale de chemin comme fonction de partition d'une chaîne d'oscillateurs classiques

2.8.1.a - Equivalence Système Quantique = Système statistique unidimensionnel

Revenons à l'intégrale de chemin Euclidienne qui permet de définir la fonction de partition Z_Q d'un système quantique à l'équilibre à température finie (état de Gibbs). Partant du système 1D d'une particule dans un potentiel cette intégrale de chemin est

$$Z_Q = \int \mathcal{D}[q(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[q(\tau)]} \quad S_E[q(\tau)] = \int d\tau \frac{m}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 + V(q(\tau)) \quad (2.8.1)$$

Si on discrétise l'action Euclidienne (comme fait précédemment) en

$$S_E[q] \rightarrow \sum_{i \in \mathbb{Z}} \left[\frac{m}{2} \frac{(q_{i+1} - q_i)^2}{\Delta\tau} + \Delta\tau V(q_i) \right] \quad , \quad q_i = q(\tau_i) \quad , \quad \tau_i = i\Delta\tau \quad (2.8.2)$$

où $\Delta\tau$ est le pas de temps, on peut réécrire cette intégrale de chemin comme la fonction de partition d'une chaîne unidimensionnelle d'oscillateurs classiques $S_i = q(\tau_i) \in \mathbb{R}$, autrement dit des spins classiques continus

$$S_i = q(\tau_i) \in \mathbb{R}$$

avec une distribution de probabilité locale pour les "spins" S_i de la forme

$$d\mu(S) = dS \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \mathfrak{E}_{loc.}(S)\right) \quad \mathfrak{E}_{loc.}(S) = \frac{m}{\Delta\tau} S^2 + \Delta\tau V(S) \quad (2.8.3)$$

et avec avec un couplage ferromagnétique entre plus proches voisins $\langle i, j \rangle$, $|i - j| = 1$, correspondant à une énergie de couplage \mathcal{E}_c pour la configuration microscopique de spin $\{S_i\}$

$$\mathcal{E}_c[S_i] = -J \sum_i S_i S_{i+1} \quad , \quad J = \frac{m}{\Delta\tau} \quad (2.8.4)$$

C'est à dire que la fonction de partition du système quantique Z_Q est aussi la fonction de partition Z_{stat} de la chaîne de spin classique à une température finie T_s .

2.8.1.b - Fluctuations quantiques versus fluctuations thermiques

Mais cette température T_s du système statistique classique (la chaîne de spin) n'est pas la température du système quantique. Le rôle de T_s est joué par la constante de Planck (pour simplifier on normalise $k_B = 1$ pour le système statistique)

$$T_s \simeq \hbar \quad (2.8.5)$$

C'est en fait naturel, car \hbar contrôle l'amplitude des fluctuations quantiques du système quantique de départ, tandis que T_s contrôle l'amplitude des fluctuations thermiques du système statistique équivalent.

2.8.1.c - Action Euclidienne versus énergie des états microscopiques

On a ainsi pour la fonction de partition

$$Z_q \simeq Z_{stat} = \prod_i d\mu(S_i) e^{-\frac{1}{T_s} \mathcal{E}_c[S]} = \int \prod_i dS_i e^{-\frac{1}{T_s} \mathcal{H}[S]} \quad (2.8.6)$$

avec l'énergie totale $\mathcal{H}[S]$ d'une configuration microscopique de la chaîne de spin (micro-état)

$$\mathcal{H}[S] = \sum_i \mathfrak{E}_{loc.}(S_i) + \mathcal{E}_c[S] = \sum_i \left(\frac{m}{2\Delta\tau} (S_{i+1} - S_i)^2 + \Delta\tau V(S_i) \right) \quad (2.8.7)$$

Cette énergie totale $\mathcal{H}[S]$ pour une configuration $\{S_i\}$ de la chaîne de spin n'est rien d'autre que l'action Euclidienne (discrétisée) pour la trajectoire Euclidienne correspondante $\{q(\tau_i)\}$ pour le système quantique de départ.

$$S_i \leftrightarrow q(\tau_i) \quad , \quad \mathcal{H}[S] \leftrightarrow S_E[q] \quad (2.8.8)$$

2.8.1.d - Exemple de l'oscillateur harmonique

Dans le cas de l'oscillateur Harmonique, où l'action Euclidienne est

$$S_E[q] = \int d\tau \frac{m}{2} (\dot{q}^2 + \omega^2 q^2) \quad (2.8.9)$$

le système statistique équivalent est une chaîne d'oscillateurs couplés linéairement (chaîne harmonique). L'énergie $\mathcal{H}[S]$ est

$$\mathcal{H}[S] = \sum_i \frac{\kappa_1}{2} S_i^2 + \frac{\kappa_2}{2} (S_{i+1} - S_i)^2 \quad (2.8.10)$$

avec les constantes

$$\kappa_1 = m\omega^2\Delta\tau \quad , \quad \kappa_2 = \frac{m}{\Delta\tau} \quad (2.8.11)$$

2.8.1.e - Exemple de l'oscillateur anharmonique

Si le potentiel $V(q)$ pour la système quantique initial est un potentiel quartique

$$V(q) = a q^2 + b q^4 \quad , \quad b > 0$$

le système statistique équivalent est une chaîne d'oscillateurs anharmoniques, toujours couplés linéairement.

Ce système est intéressant car dans le cas où le terme harmonique est négatif

$$a < 0$$

si bien que le potentiel $V(q)$ est un double puit avec deux minima équivalents en

$$q_{min} = \pm q_0 = \sqrt{\frac{a}{2b}}$$

la distribution $p(S)$ des spins est piquée en deux valeurs symétriques. Dans la limite $a \rightarrow -\infty$ et avec une normalisation adéquate ce système quantique devient équivalent à une chaîne de spins d'Ising.

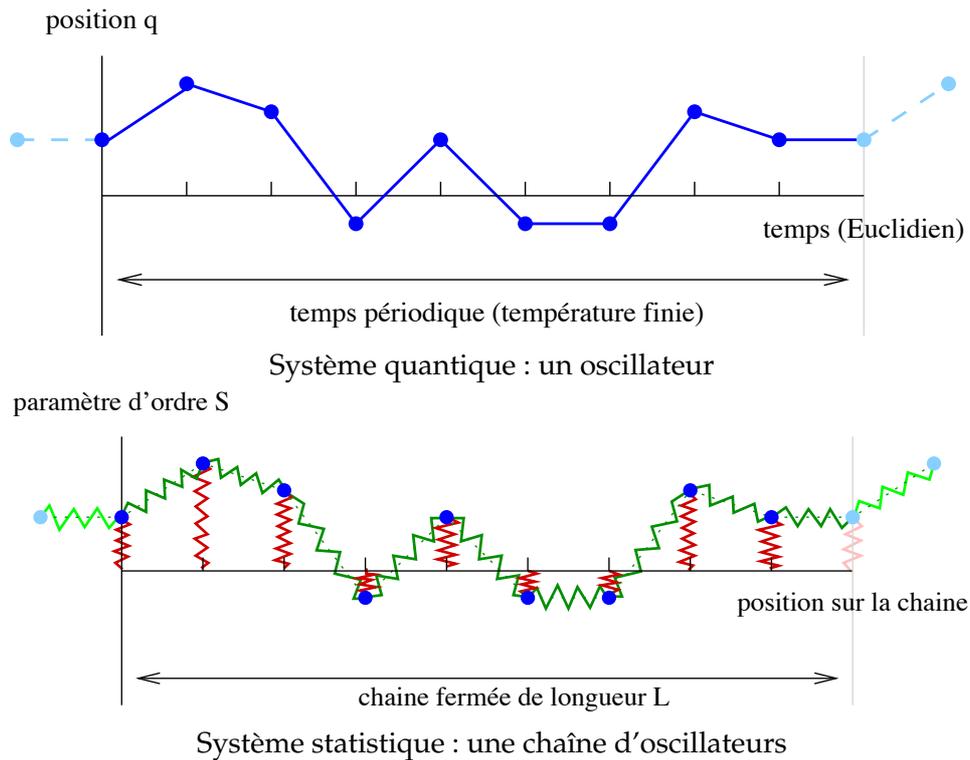


FIGURE 2.12 – Equivalence entre une intégrale de chemin à temps Euclidien périodique (particule quantique dans un potentiel et à température finie) et une chaîne classique d'oscillateurs couplés (en contact avec un thermostat)

2.8.1.f - Température quantique et taille du système statistique

Discutons maintenant le rôle de la température du système quantique dans cette équivalence. Si le système quantique de départ est à la température $T_Q = 1/\beta$ (je normalise les températures pour que $k_B = 1$ aussi pour le système quantique), les chemins $q(\tau)$ dans l'intégrale de chemin sont périodiques avec une période $\tau = \hbar\beta$

$$q(\sigma + \hbar\beta) = q(\sigma) \quad , \quad \tau = \hbar\beta = \frac{\hbar}{T_Q} \quad (2.8.12)$$

Alors le système statistique correspondant est une chaîne de spin de longueur finie N (en unité de mailles de la chaîne), avec des conditions aux limites périodiques

$$S_{i+N} = S_i \quad (2.8.13)$$

Si on attribue une longueur a élémentaire à la maille élémentaire de la chaîne, la longueur de la chaîne $L = aN$ est proportionnelle à l'inverse de la température T_Q , et est donnée par la relation fondamentale

$$N = \frac{\hbar}{\Delta\tau} \frac{1}{T_Q} \quad \text{i.e} \quad L = \frac{a}{\Delta\tau} \frac{T_S}{T_Q} \quad (2.8.14)$$

2.8.1.g - Généralisation à des systèmes quantiques à $d > 1$

Cette analogie s'étend sans difficulté à des systèmes quantiques plus généraux. Le cas le plus simple correspond à une particule quantique non relativiste en dimension $d > 1$. Dans ce cas la

position de la particule \vec{q} est un vecteur à d composante. Le paramètre d'ordre local du système statistique correspondant devient un spin vectoriel \vec{S} à d composantes

$$\vec{q}(\tau_i) \leftrightarrow \vec{S}_i \quad (2.8.15)$$

La chaîne de spin reste un système unidimensionnel, car c'est le temps Euclidien $\tau = it$ du système quantique qui devient la coordonnée d'espace du système statistique. C'est l'espace du paramètre d'ordre local \vec{S} qui acquiert plus de dimensions.

On a toujours une équivalence entre ces deux types de problèmes, et on peut considérer que via l'intégrale de chemin euclidienne un système quantique (non-relativiste) est toujours équivalent à la limite continue d'un système statistique en 1 dimension.

C'est seulement en considérant des théories quantiques relativistes (des théories quantiques des champs) que l'on pourra étendre ces méthodes à l'étude de systèmes statistiques étendus en dimensions $D > 1$.

Revenant au cas des systèmes quantiques non-relativistes et des systèmes statistiques unidimensionnels, nous allons voir maintenant que cette équivalence s'étend aux fonctions de corrélations. En particulier il existe une relation entre les longueurs de corrélations du système statistique et le spectre du système quantique correspondant.

2.8.2 Longueur de corrélation et «gap» en énergie

On considère toujours un système quantique à température finie $T_Q = 1/\beta$. On a normalisé les températures pour que

$$k_B = 1$$

H est le Hamiltonien du système quantique. On normalise les actions $S[q]$ des systèmes quantiques et les énergies $\mathcal{H}[S]$ de systèmes statistiques correspondant pour que

$$\hbar = T_S = 1$$

pour simplifier les notations.

Fonction de corrélation : Considérons la fonction de corrélation de deux opérateurs A et B à deux temps Euclidien $\tau_1 < \tau_2$. On note la "distance" entre les deux opérateurs τ_0

$$\tau_0 = \tau_2 - \tau_1 > 0 \quad (2.8.16)$$

La fonction de corrélation est donnée (par analogie avec le cas du temps réel) par

$$\begin{aligned} \langle B(\tau_2)A(\tau_1) \rangle_\beta &= \frac{1}{Z(\beta)} \text{tr} \left(e^{-\beta H} B(\tau_2) A(\tau_1) \right) \\ &= \frac{\text{tr} \left(e^{-(\beta-\tau_0)H} B e^{-\tau_0 H} A \right)}{\text{tr} \left(e^{-\beta H} \right)} \end{aligned}$$

Je suppose (pour simplifier) que H a un spectre discret $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$ avec des états propres $|n\rangle$, $n = 0, 1, 2, \dots$, au moins pour les états de basse énergie. Alors on peut diagonaliser H et on obtient

$$\langle B(\tau_2)A(\tau_1) \rangle_\beta = \frac{\sum_{n,m} \langle n|A|m\rangle \langle m|B|n\rangle e^{-(\beta-\tau_0)E_n - \tau_0 E_m}}{\sum_n e^{-\beta E_n}} \quad (2.8.17)$$

Limite de température nulle : Dans la limite de température nulle $T_q \rightarrow 0$, i.e. $\beta \rightarrow \infty$ on projette sur le fondamental $n = 0$.

$$\langle B(\tau_2)A(\tau_1) \rangle_0 = \sum_m \langle 0|A|m \rangle \langle m|B|0 \rangle e^{-\tau_0(E_m - E_0)} \quad (2.8.18)$$

Dans cette limite on a évidemment $\langle A(\tau_1) \rangle_{T=0} = \langle 0|A|0 \rangle$, idem pour B .

Fonction de corrélation connexe : La fonction de corrélation *connexe* est définie comme

$$\langle B(\tau_2)A(\tau_1) \rangle_0^{\text{conn.}} = \langle B(\tau_2)A(\tau_1) \rangle - \langle B(\tau_2) \rangle \langle A(\tau_1) \rangle \quad (2.8.19)$$

Elle correspond à la notion de cumulants (d'ordre 2) en statistique, qui décrit les corrélations (d'ordre 2) entre les fluctuations autour des valeurs moyennes

$$\langle AB \rangle^{\text{conn.}} = \langle (A - \bar{A})(B - \bar{B}) \rangle, \quad \bar{A} = \langle A \rangle, \quad \bar{B} = \langle B \rangle \quad (2.8.20)$$

On soustrait donc la contribution du fondamental $|0\rangle$ et on obtient une somme sur les états excités

$$\langle B(\tau_2)A(\tau_1) \rangle_0^{\text{conn.}} = \sum_{m \neq 0} \langle 0|A|m \rangle \langle m|B|0 \rangle e^{-\tau_0(E_m - E_0)} \quad (2.8.21)$$

Comportement à grand temps/distance, longueur de corrélation : Le comportement à grand temps Euclidien τ_0 est dominé par le premier état excité $n = 1$ (sauf si les éléments de matrices $\langle 0|A|m \rangle$ ou $\langle 0|B|m \rangle$ s'annulent)

$$\langle B(\tau_2)A(\tau_1) \rangle_0^{\text{conn.}} \propto e^{-\tau_0(E_1 - E_0)} \quad (2.8.22)$$

avec

$$\Delta E = E_1 - E_0 \quad \text{le gap en énergie du système} \quad (2.8.23)$$

Donc les fonctions de corrélations des opérateurs décroissent exponentiellement à grand temps Euclidien, avec un "temps de corrélation qui est l'inverse du gap en énergie $\tau_{\text{corr}} = 1/\Delta E$ (rappel : on a normalisé $\hbar = 1$).

Si maintenant on considère le cas traité au dessus, la particule dans un double puit $V(q)$, et le système statistique correspondant, une chaîne de spins classiques S_i , la fonction de corrélation de deux opérateurs $A = B = Q$ (l'opérateur position) est égale à la fonction de corrélation de deux spins $\langle S_i S_j \rangle$ du système statistique. On en déduit donc simplement que la longueur de corrélation ζ_{corr} du système statistique (chaîne de spin) est relié au gap en énergie du système quantique ΔE , par la relation simple

$$\zeta_{\text{corr.}} \propto \frac{1}{\Delta E} \quad (2.8.24)$$

2.8.3 Dictionnaire : mécanique statistique 1D – mécanique quantique

En résumé, on a le dictionnaire général entre un système statistique en 1 dimension (type chaîne de spin classique) à température T_S et un système quantique en temps Euclidien (donc à température finie T_Q), ici toujours avec la normalisation $k_B = 1$.

Système statistique 1 d		Système quantique	
coordonnée d'espace	x	$\tau = it$	temps Euclidien
maille élémentaire	Δx	$\Delta \tau$	discrétisation de τ
paramètre d'ordre local	\vec{S}	\vec{q}	position (d° de liberté)
état microscopique	$\vec{s}(x)$	$\vec{q}(\tau)$	trajectoire Euclidienne
température	T_S	\hbar	constante de Planck
taille du système (c.a.l. périodique)	L	$\beta = T_Q^{-1}$	inverse de la température
énergie d'une configuration	$\mathcal{H}[\vec{S}]$	$S_E[\vec{q}]$	action Euclidienne
matrice de transfert	\mathbf{T}	$U(\Delta\tau) = \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{\hbar}H\right)$	opérateur d'évolution
longueur de corrélation inverse	ξ^{-1}	$\Delta E = E_1 - E_0$	gap en énergie

Et on peut construire en général un système quantique (non-relativiste) en temps Euclidien comme limite continue d'un système statistique 1D.

Ceci se généralise en plus de 1 dimension. Une théorie des champs (Euclidienne) en D -dimensions peut être obtenue comme limite continue d'un système statistique sur un réseau en D -dimensions.

2.9 «Trajectoires quantiques» et processus stochastiques

Quelles sont les trajectoires qui «dominent» dans l'intégrale de chemin? Nous allons voir que ce sont des trajectoires $q(t)$ qui sont continues mais qui ne sont pas dérivables, c'est à dire dont les fluctuations de vitesse instantanée sont infinies. Pour cela nous revenons au cas de la particule sur une ligne ($D = 1$).

2.9.1 Intégrale de chemin Euclidienne et mouvement Brownien

La question est mieux posée mathématiquement pour l'intégrale de chemin Euclidienne, donc à temps imaginaire. En effet nous avons affaire à une mesure de probabilité sur des processus stochastique. Nous nous intéressons ici aux propriétés à temps court des trajectoires.

2.9.1.a - La particule libre à temps Euclidien comme processus stochastique

Comme on l'a vu, on peut considérer que le potentiel $V(q)$ est localement constant, donc nous revenons d'abord au cas de la particule libre

$$V(q) = V_0 = 0$$

L'intégrale de chemin Euclidienne est alors une intégrale sur la variable $q(\tau)$ (τ est le temps Euclidien), avec une mesure $d\mu[q]$ positive définie simplement par

$$d\mu[q] = \mathcal{D}[q] e^{-\frac{1}{2c} \int d\tau [\dot{q}(\tau)]^2} \quad c = \frac{\hbar}{m} \quad (2.9.1)$$

la mesure $\mathcal{D}[q]$ étant normalisée de façon à ce que $\int d\mu[q] 1 = 1$. Autrement dit, $d\mu[q]$ est une mesure de probabilité pour la variable aléatoire $q(\tau)$, qui définit un processus stochastique. Pour définir proprement ce processus stochastique, revenons à la discrétisation initiale du temps. Au lieu des $q_i = q(t_i)$, considérons comme variables indépendantes dans l'intégrale de chemin les incréments successifs de position, c'est à dire précisément les vitesses, que nous attachons aux intervalles de temps $[t_i, t_{i+1}]$ (que nous étiquetons par des $1/2$ entiers $i + \frac{1}{2}$).

$$q(t_{i+1}) = q(t_i) + \omega(t_{i+\frac{1}{2}}) \quad (2.9.2)$$

Les $\omega_{i+\frac{1}{2}} = \omega(t_{i+\frac{1}{2}})$ sont des variables aléatoires gaussiennes indépendantes distribuées suivant une loi normale standard d'espérance nulle et de variance proportionnelle à l'intervalle de temps

$$\overline{\omega(t_{i+\frac{1}{2}})} = 0 \quad , \quad \overline{\omega(t_{i+\frac{1}{2}})\omega(t_{j+\frac{1}{2}})} = \delta_{ij} \frac{\hbar}{m} \Delta t_{i+\frac{1}{2}} \quad , \quad \Delta t_{i+\frac{1}{2}} = t_{i+1} - t_i \quad (2.9.3)$$

2.9.1.b - Limite à temps continu

Il suffit de rescaler ces variables aléatoires en

$$\eta(t_{i+\frac{1}{2}}) = \frac{\omega(t_{i+\frac{1}{2}})}{\Delta t_{i+\frac{1}{2}}} \quad (2.9.4)$$

et de prendre la limite du temps continu $\Delta t \rightarrow 0$ pour réécrire 2.9.2 comme une équation différentielle stochastique

$$\frac{dq(t)}{dt} = \sigma \eta(t) \quad , \quad \sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{m}} \quad (2.9.5)$$

où $\eta(t)$ est un bruit blanc

$$\overline{\eta(t)} = 0 \quad , \quad \overline{\eta(t)\eta(t')} = \delta(t - t') \quad (2.9.6)$$

2.9.1.c - Mouvement Brownien et processus de Wiener

Ce processus stochastique est bien connu des mathématiciens et des physiciens. C'est le processus de Wiener qui définit le mouvement Brownien. Les valeurs moyennes des fonctionnelles de q , $F[q]$ (en notation mathématique l'espérance $\mathbb{E}[F[q]]$ de F)

$$\langle F[q] \rangle = \int d\mu[q] F[q] \quad (2.9.7)$$

sont assez facilement calculables, soit par des techniques d'intégrale fonctionnelles (la mesure $d\mu[q]$ étant Gaussienne), soit de façon équivalente par des méthodes probabilistes de calcul stochastique.

Attention, la définition précise de la dérivée d'un processus stochastique et le calcul des valeurs moyennes d'intégrales temporelles de fonctions de q est un peu délicate car la vitesse instantanée de q n'est pas bien définie (voir la section suivante). Ceci se traduit par l'apparition de termes nouveaux (dus aux fluctuations quantiques) dans certaines expressions. Ces problèmes sont connus et traités en physique quantique par les technique de développement à temps court (et plus généralement à courte distance) des produits d'opérateurs (Wilson). En mathématique et en théorie des processus stochastiques, ils sont traités par le calcul d'Itô.

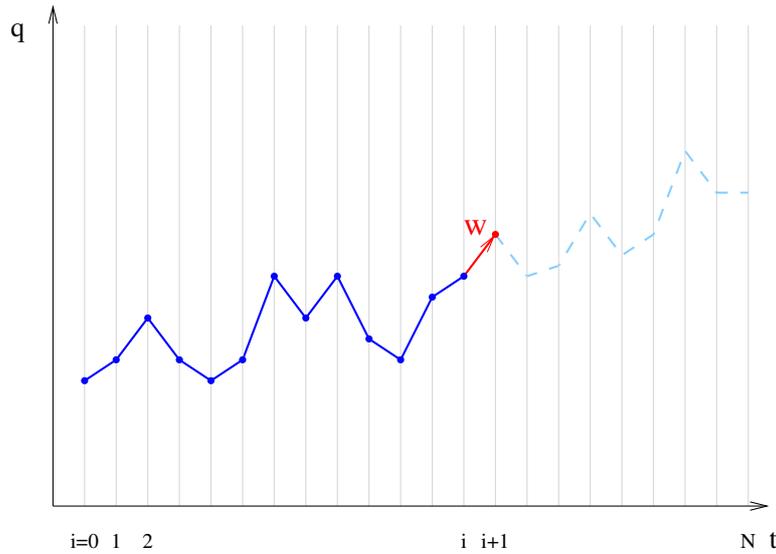


FIGURE 2.13 – L’intégrale de chemin à temps Euclidien comme processus stochastique

2.9.2 Trajectoires moyennes et fluctuations :

Non-dérivabilité des trajectoires typiques :

Calculons par exemple la valeur moyenne du carré de la vitesse moyenne de la particule mesurée sur un intervalle de temps $[\tau, \tau']$. On trouve (par exemple en remarquant que $\Delta q = q(\tau') - q(\tau)$ est une variable aléatoire Gaussienne avec une distribution donnée par l’opérateur d’évolution Euclidien $U_E(q(\tau), q(\tau'); \Delta\tau) \sim \exp(-c\Delta q^2/2\Delta\tau)$ avec $\Delta\tau = \tau' - \tau$, de par la définition même de l’intégrale de chemin Euclidienne)

$$\langle [q(\tau) - q(\tau')]^2 \rangle = c |\tau - \tau'| \quad , \quad c = \frac{\hbar}{m} \tag{2.9.8}$$

Et de façon plus générale, les moments d’ordre supérieurs se comportent comme

$$\langle [q(\tau) - q(\tau')]^{2k} \rangle \propto c^k |\tau - \tau'|^k \tag{2.9.9}$$

Donc les trajectoires $q(\tau)$ sont en probabilité des fonctions continues $q(\tau)$ dont les accroissements sont bornés comme

$$|q(\tau) - q(\tau')|^k < c_k |\tau - \tau'|^{\alpha k} \quad \text{quand} \quad \tau - \tau' \rightarrow 0 \tag{2.9.10}$$

avec ici

$$\alpha = \frac{1}{2} \tag{2.9.11}$$

De telles fonctions sont appelées des fonctions Hölder-continues avec un exposant α . Une fonction dérivable est évidemment Hölder $\alpha = 1$ mais les trajectoires typiques dans l’intégrale de chemin Euclidienne sont Hölder $\alpha = 1/2$, donc non dérivables. Les vitesses moyennes calculées pendant un intervalle de temps $\Delta\tau > 0$, $\bar{v} = \frac{\Delta q}{\Delta\tau}$ sont bien définies et finies en moyenne, mais ces moyennes divergent à temps court comme

$$v = \frac{\Delta q}{\Delta\tau} \sim \Delta\tau^{-1/2} \tag{2.9.12}$$

Trajectoire dominante et fluctuations :

Si on cherche à déterminer maintenant les trajectoires dominantes intervenant dans l'intégrale de chemin pour l'opérateur d'évolution entre les points q et q' pendant l'intervalle de temps $[\tau, \tau']$, la trajectoire la plus probable est celle qui minimise l'action Euclidienne pour la particule libre $S_E[q] \propto \int (\dot{q})^2$. C'est la trajectoire classique q_{cl} à vitesse constante

$$\dot{q}_{cl}(\sigma) = v_{cl} = \frac{q' - q}{\tau' - \tau} \quad (2.9.13)$$

Mais les trajectoires typiques (qui dominent dans l'intégrale de chemin) sont des trajectoires non-classiques proches de cette trajectoire classique, mais non-dérivables (voir figure).

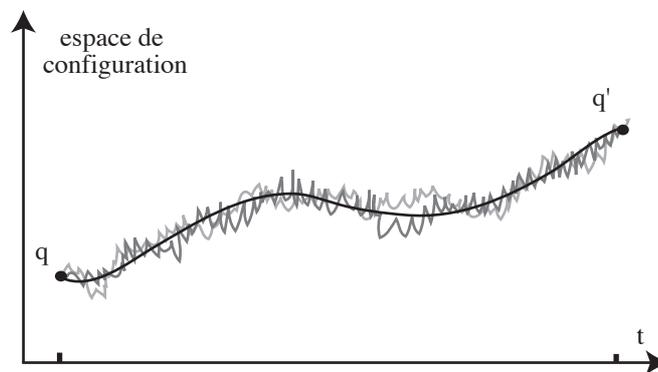


FIGURE 2.14 – Intégrale de chemin dans la limite continue : les trajectoires dominantes sont continues (et concentrées autour de la trajectoire classique dans la limite $\hbar \rightarrow 0$, mais ne sont pas dérivables.

2.9.3 Cas général et processus de diffusion/absorption

Cas général $V(q) \neq 0$: Dans le cas général d'un potentiel $V \neq 0$ la mesure d'intégration sur les chemins $q(\tau)$ est maintenant

$$d\mu_V[q] = d\mu[q] e^{-\frac{1}{\hbar} \int V(q)} \quad (2.9.14)$$

C'est toujours une mesure de probabilité sur la variable aléatoire $q(\tau)$, définie sur les processus de Wiener, mais qui ne correspond plus à un simple mouvement Brownien. Cela dit, les propriétés à temps court de ces nouveaux processus ne sont pas changées. Comme on va le discuter plus tard à propos de la limite semiclassique, les trajectoires typiques sont des trajectoires Hölder 1/2 proches de la trajectoire classique qui extrême l'action (ici l'action Euclidienne $S_E[q]$).

Relation avec les processus de diffusion Le mouvement Brownien est une description microscopique d'un processus de diffusion. Ceci peut se voir ici en remarquant que pour la particule libre, à temps Euclidien (c.a.d. en transformant $t \rightarrow -i\tau$), l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde $\psi(q, t)$ devient

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \psi(q, \tau) = \frac{1}{2m\hbar} \Delta_q \psi(q, \tau) \quad (2.9.15)$$

qui n'est rien d'autre que l'équation de la chaleur, c.a.d. l'équation de diffusion pour la densité de probabilité d'une particule classique dont l'évolution est donnée par le mouvement Brownien ! Attention ! ici (pour un temps Euclidien) ψ joue le rôle d'une *densité* de probabilité alors qu'en mécanique quantique (temps réel) la fonction d'onde ψ est une *amplitude* de probabilité.

Dans le cas général, l'équation de Schrödinger Euclidienne

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \psi(q, \tau) = \frac{1}{2m\hbar} \Delta_q \psi(q, \tau) + V(q) \psi(q, \tau) \quad (2.9.16)$$

décrit un processus de diffusion avec un terme supplémentaire d'absorption/création de matière (suivant le signe de $V(q)$). De façon générale, les intégrales de chemins sont un outil important pour étudier les processus stochastiques et les processus de diffusion (formule de Feynman-Kac).

2.9.4 Intégrale de chemin à temps réel

A temps réel la mesure sur les chemins $q(t)$ est (formellement)

$$d\mu[q] = \mathcal{D}[q] e^{\frac{i}{\hbar} S[q]} \quad (2.9.17)$$

Ce n'est plus une mesure de probabilité (réelle positive) mais une mesure complexe, qu'il faut voir plutôt comme une distribution (au sens mathématique) sur l'espace des chemins. On peut néanmoins voir que les facteurs de phase $\exp(iS/\hbar)$ se compensent entre trajectoires voisines $q(t)$ et $q(t) + \delta q(t)$, sauf pour des trajectoires «voisines» de la (ou des) trajectoire(s) classique(s) qui extrémise(nt) l'action $S[q]$ (voir plus loin la discussion de la limite semi-classique). Néanmoins là aussi, par le même type de calcul que dans le cas Euclidien, les trajectoires dominantes ne sont pas dérivables, mais sont de type Hölder-1/2. Nous ne discuterons pas à ce stade le nombre et la structure des trajectoires qui dominent l'intégrale de chemin.

Nous allons voir plus loin que ce caractère discontinu des fluctuations de vitesses dans l'intégrale de chemin est une caractéristique quantique très importante, puisque c'est par là qu'apparaît la non-commutativité des opérateurs P et Q dans l'intégrale de chemin.

3.4 Matrice de transfert

3.4.1 Matrice de transfert 1D

Les méthodes de matrice de transfert sont un outil important en physique statistique. Historiquement ce sont elles qui ont permis de résoudre le modèle d'Ising en une et deux dimensions. Elles sont à la base des méthodes exactes et des applications des systèmes intégrables et physique statistique. C'est sur elles que repose également l'équivalence entre problèmes de physique statistique et problèmes quantiques (matrice de transfert \simeq opérateur d'évolution). Enfin elles permettent des études numériques précises (méthodes de finite size scaling).

Je renvoie aux exercices de TD et au cours de physique statistique pour plus de détails.

Modèle d'Ising 1D : On considère le modèle d'Ising 1D sur une chaîne unidimensionnelle. Les sites i sont simplement étiquetés par des entiers $i \in \mathbb{Z}$, et dans la suite on considère une chaîne de longueur L avec des conditions aux limites périodiques $S_{i+L} = S_i$. Le Hamiltonien est donc

$$H[\mathbf{S}] = \sum_{i=1}^L -JS_i S_{i+1} - BS_i \quad (3.4.1)$$

et peut se réécrire comme une somme sur chaque lien de termes ne dépendant que des spins aux extrémités du lien.

$$H[\mathbf{S}] = \sum_i E(S_i, S_{i+1}) \quad , \quad E(S_i, S_{i+1}) = -JS_i S_{i+1} - B(S_i + S_{i+1})/2 \quad (3.4.2)$$

On définit la matrice de transfert $T_{(\ell)}$ pour le lien $(\ell) = (i, i+1)$ comme la matrice dont les lignes e et les colonnes f sont étiquetées respectivement par toutes les configurations "entrantes" possibles e_i des spins sur le site i , et les configurations "sortantes" f_{i+1} pour le site $i+1$ du lien ℓ . Dans notre cas c'est une matrice 2×2 car il y a deux états «in» e et 2 états "out" f

$$e \rightarrow \{S_i = +1, S_i = -1\} \quad , \quad f \rightarrow \{S_{i+1} = +1, S_{i+1} = -1\} \quad , \quad (3.4.3)$$

Les éléments de matrice T_{ef} de la matrice de transfert pour ce lien $\ell = (i, i+1)$ sont les poids de Boltzmann pour ce lien

$$T_{ef} = T(S_i, S_{i+1}) = \exp(-\beta E(S_i, S_{i+1})) \quad (3.4.4)$$

La matrice de transfert est explicitement pour la chaîne d'Ising

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_{++} & T_{+-} \\ T_{-+} & T_{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+B)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-B)} \end{pmatrix} \quad (3.4.5)$$

C'est une matrice réelle symétrique. C'est un choix naturel. On peut définir des matrices de transfert non-symétrique mais les calculs seront plus compliqués.

Le point crucial est que le poids de Boltzmann d'une configuration \mathbf{S} s'écrit comme un produit d'éléments de matrice \mathbf{T}

$$e^{-\beta H[\mathbf{S}]} = T_{a_1, a_2} T_{a_2, a_3} \cdots T_{a_{i-1}, a_i} T_{a_i, a_{i+1}} \cdots T_{a_L, a_1} \quad (3.4.6)$$

où chaque a_i correspond à l'état du site i ($a_i = \pm$ si $S_i = \pm 1$). La somme sur tous les microétats \mathbf{S} correspond à sommer sur tous les indices a_i répétés; donc à prendre la trace (à cause des c.a.l. périodiques $a_{L+1} = a_1$) d'un produit de N matrices de transfert. On a donc simplement pour la fonction de partition

$$Z = \text{tr}(\mathbf{T}^L) \quad (3.4.7)$$

De façon similaire, on peut calculer les fonctions de corrélations de spin en introduisant la matrice Σ dont les éléments de matrice sont $\Sigma_{ef} = (S_i)_e \delta_{ef}$. Ici cette matrice est la matrice diagonale

$$\Sigma = \text{diag}(S_i) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma_3$$

Les fonctions de corrélation à un point et à deux points sont données simplement par

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \text{tr}(\Sigma \mathbf{T}^L), \quad \langle S_i S_{i+n} \rangle = \frac{1}{Z} \text{tr}(\Sigma \mathbf{T}^n \Sigma \mathbf{T}^{L-n}) \quad (3.4.8)$$

On en déduit que la longueur de corrélation du modèle est donnée par le rapport des deux valeurs propres $\lambda_0 > \lambda_1$ de \mathbf{T} par

$$\xi = 1 / \log(\lambda_0 / \lambda_1) \quad (3.4.9)$$

Exercice : Calculer les 2 valeurs propres $\lambda_0 > \lambda_1 > 0$ de \mathbf{T} et leurs vecteurs propres associés. En déduire les valeurs de Z et des corrélateurs $\langle S \rangle$ et $\langle S_i S_j \rangle$ dans la limite thermodynamique de la chaîne de longueur infinie $L \rightarrow \infty$.

Généralisations : Pour un modèle de spin classique à q états en une dimension avec des interactions entre plus proches voisins $\langle i, i+1 \rangle$, montrer que la fonction de partition s'écrit toujours comme la trace d'une puissance de la matrice de transfert T , avec T une matrice $q \times q$. En déduire que la formule 3.4.9 se généralise, $\lambda_{0,1}$ étant les deux plus grandes valeurs propres de \mathbf{T}

$$\lambda_0 > \lambda_1 > \lambda_2 > \dots$$