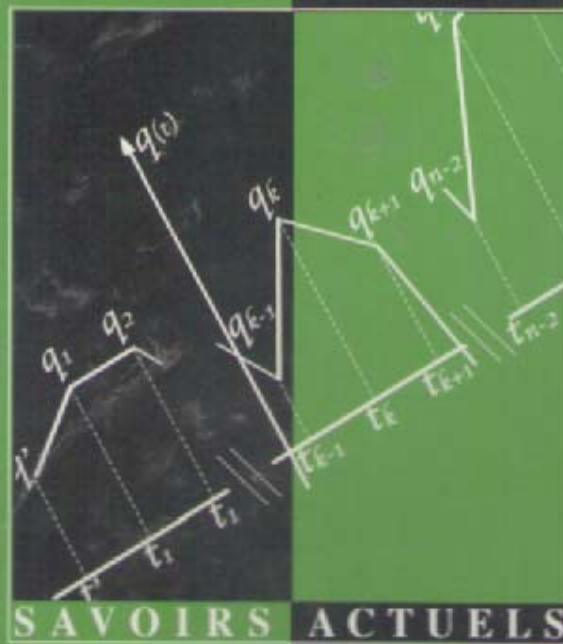


PHYSIQUE

Jean ZINN-JUSTIN

• Intégrale de chemin •  
en mécanique quantique :  
Introduction



SAVOIRS ACTUELS

CNRS EDITIONS

EDP  
SCIENCES

2-530-119-2

Jean Zinn-Justin

Intégrale de chemin  
en mécanique quantique :  
introduction



SAVOIRS ACTUELS

EDP Sciences/CNRS ÉDITIONS

# Table des matières

Introduction . . . . . xi

Bibliographie . . . . . xvii

## 1 Quelques préliminaires mathématiques . . . . . 1

1.1 Fonction génératrice . . . . . 2

1.2 Valeurs moyennes gaussiennes. Théorème de Wick . . . . . 2

1.2.1 Matrices réelles . . . . . 3

1.2.2 Intégrale gaussienne générale . . . . . 4

1.2.3 Valeurs moyennes gaussiennes et théorème de Wick . . . . . 5

1.3 Mesure gaussienne perturbée. Contributions connexes . . . . . 7

1.3.1 Mesure gaussienne perturbée . . . . . 7

1.3.2 Diagrammes de Feynman. Contributions connexes . . . . . 8

1.4 Valeurs moyennes. Fonction génératrice. Cumulants . . . . . 9

1.4.1 La fonction à deux points . . . . . 10

1.4.2 Fonctions génératrices. Cumulants . . . . . 11

1.5 Méthode du col . . . . . 12

1.5.1 Intégrale réelle . . . . . 12

1.5.2 Intégrale de contour complexe . . . . . 15

1.6 Méthode du col à plusieurs variables. Application aux fonctions génératrices . . . . . 17

1.6.1 Fonction génératrice et méthode du col . . . . . 18

1.7 Techniques algébriques fonctionnelles . . . . . 19

1.7.1 Fonctionnelle génératrice. Dérivée fonctionnelle . . . . . 19

1.7.2 Déterminants d'opérateurs . . . . . 20

1.8 Intégrale gaussienne : matrices complexes . . . . . 22

Exercices . . . . . 25

## 2 L'intégrale de chemin . . . . . 31

2.1 Processus markoviens locaux . . . . . 32

2.1.1 Évolution markovienne . . . . . 32

2.1.2 Éléments de matrice et localité . . . . . 33

2.1.3 Exemple : évolution libre ou mouvement brownien . . . . . 34

2.2	Solution de l'équation d'évolution aux temps courts . . . . .	36
2.3	Intégrale de chemin . . . . .	39
2.4	Évaluation explicite : intégrales de chemin gaussiennes . . . . .	41
2.4.1	Le mouvement libre . . . . .	41
2.4.2	L'oscillateur harmonique . . . . .	43
2.5	Fonction de partition. Fonctions de corrélation . . . . .	44
2.6	Calcul de l'intégrale de chemin gaussienne générale . . . . .	46
2.6.1	Intégrale de chemin gaussienne générale . . . . .	46
2.6.2	Fonctions de corrélation gaussiennes, théorème de Wick . . . . .	48
2.7	Oscillateur harmonique : la fonction de partition . . . . .	50
2.7.1	Calcul direct de la fonction de partition gaussienne . . . . .	51
2.7.2	Calcul avec temps continu . . . . .	53
2.8	Oscillateur harmonique perturbé . . . . .	54
2.9	Développement perturbatif en puissances de $\hbar$ . . . . .	56
2.10	Développement semi-classique . . . . .	57
2.11	Intégrale de chemin et principe variationnel . . . . .	61
	Exercices . . . . .	64
<b>3</b>	<b>Fonction de partition et spectre d'hamiltonien</b> . . . . .	<b>67</b>
3.1	Calcul perturbatif . . . . .	67
3.2	Développement semi-classique ou BKW . . . . .	70
3.2.1	Spectre et pôles de la résolvante . . . . .	71
3.2.2	Approximation semi-classique . . . . .	72
3.2.3	Exemples . . . . .	74
3.2.4	Approximation BKW et équation de Schrödinger . . . . .	75
3.3	Le potentiel quartique avec symétrie $O(N)$ pour $N \rightarrow \infty$ . . . . .	77
3.3.1	Une intégrale ordinaire pour $N \rightarrow \infty$ . . . . .	78
3.3.2	Intégrale de chemin . . . . .	80
3.3.3	Énergie du fondamental . . . . .	83
3.4	Hamiltonien : unicité du fondamental . . . . .	85
	Exercices . . . . .	86
<b>4</b>	<b>Mécaniques statistiques quantique et classique</b> . . . . .	<b>89</b>
4.1	Fonction de partition classique. Matrice de transfert . . . . .	90
4.2	Fonctions de corrélation . . . . .	92
4.2.1	Fonctions de corrélation et matrice de transfert . . . . .	92
4.2.2	Limite thermodynamique et comportement à grande distance . . . . .	93
4.3	Modèle classique à basse température : un exemple . . . . .	94
4.4	Limite continue et intégrale de chemin . . . . .	96
4.4.1	Limite continue . . . . .	96
4.4.2	Fonctions de corrélation et limite continue . . . . .	98
4.5	La fonction à deux points : calcul perturbatif, représentation spectrale . . . . .	100
4.5.1	Calcul perturbatif . . . . .	101

4.5.2	Représentation spectrale . . . . .	102
4.6	Formalisme d'opérateurs. Produits chronologiques . . . . .	104
	Exercices . . . . .	105
<b>5</b>	<b>Intégrales de chemin et quantification</b> . . . . .	<b>111</b>
5.1	Transformations de jauge . . . . .	111
5.2	Couplage au champ magnétique : invariance de jauge . . . . .	113
5.2.1	Invariance de jauge classique . . . . .	113
5.2.2	Invariance de jauge quantique . . . . .	115
5.2.3	Invariance de jauge et intégrale de chemin . . . . .	115
5.3	Quantification et intégrale de chemin . . . . .	116
5.3.1	Temps discrets et limite continue . . . . .	117
5.3.2	Ambiguïté et calcul perturbatif . . . . .	118
5.4	Champ magnétique : calcul direct . . . . .	120
5.5	Diffusion, marche au hasard, équation de Fokker-Planck . . . . .	122
5.5.1	Un exemple simple : marche au hasard ou mouvement brownien . . . . .	123
5.5.2	Équation de diffusion générale . . . . .	124
5.6	Le spectre du rotateur rigide avec symétrie $O(2)$ . . . . .	126
5.6.1	Intégrale de chemin . . . . .	127
5.6.2	Spectre de l'hamiltonien . . . . .	128
5.6.3	Autre paramétrisation . . . . .	130
	Exercices . . . . .	131
<b>6</b>	<b>Intégrale de chemin</b> . . . . .	<b>135</b>
6.1	Intégrales complexes et théorème de Wick . . . . .	136
6.1.1	Intégrales gaussiennes . . . . .	137
6.1.2	Intégrale gaussienne générale . . . . .	138
6.2	Représentation holomorphe . . . . .	139
6.2.1	Espace de Hilbert des fonctions analytiques . . . . .	139
6.2.2	Oscillateur harmonique et représentation holomorphe . . . . .	140
6.3	Noyaux d'opérateurs . . . . .	142
6.4	Intégrale de chemin : l'oscillateur harmonique . . . . .	145
6.4.1	Intégrale gaussienne générale . . . . .	146
6.4.2	Fonctions de corrélation gaussiennes . . . . .	147
6.4.3	Fonction de partition . . . . .	148
6.5	Intégrale de chemin : hamiltoniens généraux . . . . .	149
6.5.1	Intégrale de chemin . . . . .	149
6.5.2	Discussion . . . . .	151
6.5.3	Oscillateur harmonique : perturbation réelle . . . . .	152
6.6	Systèmes de bosons : seconde quantification . . . . .	153
6.6.1	États de bosons et hamiltonien . . . . .	153
6.6.2	Vecteurs d'état : fonction génératrice et hamiltonien . . . . .	154
6.7	Fonction de partition . . . . .	156
6.8	Condensation de Bose-Einstein . . . . .	157

6.8.1	Potentiel harmonique	158
6.8.2	Particules libres dans une boîte	159
6.9	Intégrale de chemin généralisée : gaz de Bose quantique	160
6.9.1	Hamiltonien dans l'espace de Fock	161
6.9.2	Intégrale fonctionnelle	162
	Exercices	163
<b>7</b>	<b>Intégrale de chemin : fermions</b>	<b>173</b>
7.1	Algèbres de Grassmann	173
7.2	Dérivations dans les algèbres de Grassmann	175
7.3	Intégration dans les algèbres de Grassmann	176
7.4	Changement de variables mixte : Berezinien et supertrace	178
7.5	Intégrales gaussiennes	180
7.5.1	Intégrales gaussiennes	180
7.5.2	Intégrales gaussiennes générales	182
7.5.3	Valeurs moyennes gaussiennes, théorème de Wick et perturbations	183
7.6	Intégrales gaussiennes réelles. Théorème de Wick	184
7.7	Espace de Hilbert de fermions et opérateurs	186
7.7.1	Fonctions grassmanniennes analytiques et produit scalaire	187
7.7.2	Noyaux d'opérateurs	188
7.8	Hamiltonien à un fermion	190
7.9	Intégrales de chemin	192
7.9.1	Intégrales de chemin gaussiennes	192
7.9.2	La fonction de partition	194
7.9.3	Généralisation	195
7.10	Fonction de partition de systèmes de fermions	197
7.10.1	États de fermions, Hamiltoniens	197
7.10.2	Fonction génératrice des vecteurs d'états	198
7.10.3	Fonction de partition : intégrale de chemin	200
7.11	Gaz de Fermi quantique	201
	Exercices	202
<b>8</b>	<b>Effet tunnel : approximation semi-classique</b>	<b>209</b>
8.1	Double puits quartique et instantons	210
8.1.1	Le double puits quartique	210
8.1.2	Instantons	212
8.2	Minima dégénérés : approximation semi-classique	213
8.2.1	Instantons	214
8.2.2	Intégration gaussienne et mode zéro	214
8.3	Coordonnées collectives et intégration gaussienne	216
8.3.1	Modes zéro dans des intégrales simples	216
8.3.2	Coordonnées collectives et intégrale de chemin	217
8.3.3	Intégration gaussienne	219

8.3.4	Application au double puits . . . . .	220
8.4	Instantons et états métastables . . . . .	222
8.4.1	Une intégrale simple . . . . .	223
8.4.2	Intégrale de chemin et méthode du col : instantons . . . . .	225
8.5	Coordonnées collectives : autre méthode . . . . .	228
8.6	Le jacobien . . . . .	229
8.7	Instantons : l'oscillateur anharmonique quartique . . . . .	231
8.7.1	L'intégrale simple quartique . . . . .	232
8.7.2	Intégrale de chemin . . . . .	233
8.7.3	Instantons . . . . .	234
	Exercices . . . . .	236
<b>9</b>	<b>Évolution quantique et matrice de diffusion</b> . . . . .	<b>241</b>
9.1	Évolution de la particule libre et matrice $S$ . . . . .	242
9.1.1	L'évolution de la particule libre . . . . .	242
9.1.2	Particule dans un potentiel et matrice $S$ . . . . .	243
9.2	Développement perturbatif de la matrice $S$ . . . . .	245
9.2.1	Développement perturbatif . . . . .	245
9.2.2	Calcul explicite . . . . .	247
9.2.3	Autre méthode . . . . .	249
9.3	Matrice $S$ et formalisme holomorphe . . . . .	251
9.4	Matrice $S$ dans la limite semi-classique . . . . .	252
9.5	Approximation semi-classique : une dimension . . . . .	253
9.5.1	Diffusion vers l'avant . . . . .	253
9.5.2	Diffusion vers l'arrière . . . . .	254
9.5.3	La région interdite . . . . .	255
9.6	Approximation eikonale . . . . .	256
9.6.1	Approximation eikonale . . . . .	256
9.6.2	Application au potentiel de Coulomb . . . . .	258
9.7	Théorie des perturbations et opérateurs . . . . .	259
	Exercices . . . . .	260
<b>10</b>	<b>Intégrales de chemin dans l'espace des phases</b> . . . . .	<b>263</b>
10.1	Quelques rappels de mécanique analytique classique . . . . .	263
10.1.1	Symétries. Lois de conservation . . . . .	264
10.1.2	Invariance par translation dans le temps. Formalisme hamiltonien . . . . .	265
10.1.3	Transformations canoniques . . . . .	267
10.1.4	Crochets de Poisson . . . . .	268
10.2	Intégrale de chemin dans l'espace de phase . . . . .	268
10.2.1	Intégrale de chemin . . . . .	269
10.2.2	Discussion . . . . .	271
10.2.3	Évolution quantique . . . . .	272
10.3	Lagrangiens quadratiques dans les vitesses . . . . .	273
10.3.1	Vérifications . . . . .	273

10.3.2	Lagrangien quadratique général . . . . .	274
10.4	Mouvement libre sur la sphère ou rotateur rigide . . . . .	277
10.4.1	Hamiltonien . . . . .	277
10.4.2	Le spectre du rotateur rigide : intégrale de chemin . . . . .	279
	Exercice . . . . .	282
<b>A</b>	<b>Rappels minimaux de mécanique quantique</b> . . . . .	<b>285</b>
A.1	Espace de Hilbert et opérateurs . . . . .	285
A.2	Évolution quantique, symétries et matrice densité . . . . .	287
A.3	Position et impulsion. Équation de Schrödinger . . . . .	290
	<b>Index</b> . . . . .	<b>293</b>





Jean ZINN-JUSTIN

## Intégrale de chemin en mécanique quantique : Introduction

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

L'intégrale de chemin est un outil puissant pour l'étude de la mécanique quantique, car elle met en correspondance de façon très explicite les mécaniques classique et quantique.

Ainsi l'intégrale de chemin permet-elle une compréhension intuitive et un calcul simple des effets semi-classiques tant du point de vue de la diffusion que des propriétés spectrales ou de l'effet tunnel.

La formulation de la mécanique quantique basée sur l'intégrale de chemin, si elle peut paraître plus compliquée du point de vue mathématique, puisqu'elle se substitue à un formalisme d'équations aux dérivées partielles, est bien adaptée à l'étude de systèmes à un nombre grand de degrés de liberté où un formalisme de type équation de Schrödinger est beaucoup moins utile. Beaucoup des sujets et méthodes de calcul présentés dans cet ouvrage ont donc été choisis parce qu'ils avaient une généralisation simple à la théorie quantique des champs ou à la mécanique statistique, même s'ils ne sont étudiés que dans le cadre de la mécanique quantique à un petit nombre de particules.

*Jean Zinn-Justin est chercheur en physique théorique au CEA/Saclay et professeur de mathématiques associé à l'université de Paris VII. Ses travaux portent sur différentes applications de la théorie quantique des champs, de la théorie des transitions de phase en physique statistique à la physique des interactions fondamentales. Il est l'auteur d'un livre de théorie quantique des champs Quantum Field Theory and Critical Phenomena:*

**SAVOIRS ACTUELS**

Collection dirigée par Michèle LEDUC

 CNRS EDITIONS

[www.cnrseditions.fr](http://www.cnrseditions.fr)

 EDP  
SCIENCES

[www.edpsciences.com](http://www.edpsciences.com)

Ces ouvrages, écrits par des chercheurs, reflètent des enseignements dispensés dans le cadre de la formation à la recherche. Ils s'adressent donc aux étudiants avancés, aux chercheurs désireux de perfectionner leurs connaissances ainsi qu'à tout lecteur passionné par la science contemporaine.



9 782868 836601

ISBN 2 86883 660 7  
ISBN 2 271 06164 4

© CNRS EDITIONS - EDP Sciences 2002