

UNIVERSITE SAAD DAHLAB DE BLIDA

Faculté des Sciences

Département de Physique

THESE DE DOCTORAT

en Physique

Option: Physique Théorique

SUR LES PROCEDURES DE RESOMMATION, CONNEXION ET GENERATION DES POTENTIELS QUANTIQUES MULTIDIMENSIONNELS

Par :

Sid-Ahmed YAHIAOUI

devant le jury composé de :

S. Boukraa	Professeur, U. de Blida	Président
F. Mékidèche-Chafa	Professeur, U.S.T.H.B., Alger	Examinatrice
L. Chetouani	Professeur, U. M., Constantine	Examineur
A. Chouchaoui	Professeur, U.S.T.H.B., Alger	Examineur
M. Bentaiba	Professeur, U. de Blida	Rapporteur

Blida, juin 2009.

الملخص

اعتنى الفيزيائيون في السنوات الأولى لنشأت الميكانيك الكمومي بإيجاد حلول صحيحة لمعادلات الموجة، كمعادلات شرودينغر و ديراك، لمجموعة من الكمونات الكمومية و هذا باستعمال العديد من الطرق و الوسائل.

من بين هذه الطرق، نجد على سبيل المثال طريقة التكاملات المسلكية لفانيمان، الطريقة التحليلية، نظرية التناظر الفائق للميكانيك الكمومي، و كذلك نظرية الزمر المتراسة و الغير المتراسة للي. لكل طريقة خاصيتها الرياضياتية، غير أن كل الطرق المذكورة أعلاه تتفق على حلّ واحد فهي اذا مترابطة.

ففي هذا المضمون، ارتقينا لاستعمال مجموعة من الوسائل الرياضياتية من بينها طريقة إعادة الجمع، طريقة الربط و الطريقة التوليدية لدراسة بعض الكمونات الكمومية ذات ابعاد مختلفة. قُسمت هذه الأطروحة إلى ثلاث أجزاء، وهي مشكّلة على النحو التالي :

في الجزء الأول، استعملنا الطريقة التقريبية التراجعية في التكاملات المسلكية لإيجاد قيم الطاقة لكمون تركيبي متعدد الأبعاد لقيم صغيرة لثابت الترابط. إعادة جمع هذه القيم سمحت لنا بإيجاد قيم الطاقة لكمون التركيبي في حالة القيم الكبيرة لثابت الترابط. في كلتا الحالتين، قيم الطاقة وجدت موجبة و صحيحة.

في الجزء الثاني، قمنا بربط معادلة شرودينغر للكمون العام لبوشلر- تيلر بمعادلة شرودينغر للكمون العام لمورس. وجد أن كلتا المعادلتين مرتبطتين بتحويل فورييه، والكمونيين العامان مترابطان عن طريق تحويل هنكل.

الجزء الأخير يخص الطريقة التوليدية لكمونات الكمومية. بالفعل، قمنا بتوليد الكمون العام لنواتازون باستعمال تحويلات متماثلة الزوايا، و التي سمحت لنا بالانتقال من نصف المجال الأيمن الى داخل دائرة ذات نصف القطر الأحادي.

RESUME

Les physiciens se sont toujours intéressés aux problèmes relatifs des potentiels quantiques afin de déterminer leurs propriétés, et les équations d'onde (Schrödinger, Dirac, ...) ont été résolues par un grand nombre de méthodes et d'approches.

Parmi ces méthodes, on cite : l'approche par les intégrales de chemin, la méthode de factorisation, la supersymétrie de la mécanique quantique, et la puissante théorie des groupes de Lie compacts et non compacts, etc. Bien qu'elles aient, d'un point de vue mathématique, des aspects différents pour traiter des potentiels, ces méthodes ne sont pas complètement différentes.

Dans ce sens, nous nous sommes intéressés dans cette thèse aux procédures de resommation, connexion et génération des potentiels quantiques multidimensionnels. Cette thèse a été divisée en trois grandes parties, dont voici l'arrangement :

Dans la première partie, nous avons utilisé différentes méthodes afin de déduire le spectre d'énergie de l'état fondamental aux faibles couplages ($g \rightarrow 0$) pour des potentiels complexes multidimensionnels à anharmonicité cubique et invariants sous la transformation discrète PT , et développer la procédure de resommation sur les potentiels effectifs associés pour calculer le spectre d'énergie aux forts couplages ($g \rightarrow \infty$).

La seconde partie a été consacrée à la connexion des potentiels généralisés de Morse et de Pöschl-Teller par l'intermédiaire de l'équation de Schrödinger. La réalisation différentielle des opérateurs de la chaîne du groupe $U(2) \supset SU(2)$ sur un plan et sur une sphère nous a conduit aux équations de Schrödinger correspondantes aux potentiels généralisés de Morse et de Pöschl-Teller, respectivement, donnant ainsi la possibilité de lier et d'unifier les deux potentiels à travers des transformations globales.

Quant à la troisième partie, elle concerne la génération des potentiels hypergéométriques de Natanzon associés aux masses effectives dépendantes de la position et dépourvus des paramètres d'ambiguïté en utilisant les représentations conformes. L'intérêt particulier porté aux représentations conformes est dû essentiellement au fait qu'il est possible d'exécuter une représentation conforme du demi-plan de droite sur l'intérieur d'un cercle de rayon unité.

ABSTRACT

Exactly solvable quantum mechanical potentials have attracted much attention since the early days of quantum mechanics, and eigenfunction equations (Schrödinger, Dirac, ...) have been solved for a large number of potentials by using a variety of methods and approaches.

The solutions have been given by employing the path-integral approach, the factorization method, Supersymmetry quantum mechanics, as well as the powerful machinery of Lie group-theory. Although the methods mentioned above have different mathematical aspects, they are not independent from each other.

In this sense, we are interested to the different procedures of resummation, connection and generation for different quantum potentials in D -dimension ($D = 1, 2, 3$). This thesis is split into three parts, where the arrangement is as follows.

In the first part, we discuss the method for the recursion calculation of the effective potentials. It is applied successfully in the case of weak-coupling limit ($g \rightarrow 0$) to multidimensional (here, $D = 2, 3$) complex cubic potentials. In strong-coupling limit ($g \rightarrow \infty$), the result of weak-coupling limit is resumed by employing the variational perturbation theory (VPT). It is found that the rate of convergence for VPT results approaches those expected.

The second part is devoted to a systematic and unified treatment to connect, via Schrödinger equation, the generalized Morse and Pöschl-Teller potentials generated by supersymmetry quantum mechanics. Our aim is to construct mathematically the Schrödinger equation for generalized Pöschl-Teller potential starting off with the Schrödinger equation for generalized Morse. It is found that both equations are related through the Fourier transforms, while their class-of-potentials are linked with the Hankel transforms.

However, the third part concerns a new manner for deriving the exact potentials by making use of conformal mappings for generating the Natanzon potentials. To be more explicit, the variable z will be regarded as the radius of the unit circle along real-axis. This provides us an useful conformal mappings of the right-domain onto the interior of the unit circle.

REMERCIEMENTS

J'aimerais exprimer toute mon admiration pour Mr. Mustapha BENTAIBA, Professeur à l'université Saad DAHLAB de Blida (U.S.D.B.), directeur du Laboratoire de Physique Théorique et Interaction Rayonnement-Matière (LPThIRM) et directeur de thèse. Il a dirigé mon travail de thèse avec compétence, efficacité et dans une très grande chaleur humaine. Je pense avoir reçu son message concernant sa vision sur la recherche scientifique et j'espère l'honorer dans le futur.

Je tiens à exprimer mes remerciements à Mr. Salah BOUKRAA, Professeur à U.S.D.B., pour l'honneur qu'il me fait en acceptant la présidence du jury.

Je remercie tout particulièrement Mme. Fazia MÉKIDÈCHE-CHAFA, Professeur à U.S.T.H.B. (Alger), d'abord d'avoir bien voulu faire partie du jury et aussi d'avoir acceptée d'examiner ce travail.

Je tiens à remercier vivement Mr. Ahmed CHOUCHAOUI, Professeur à U.S.T.H.B. (Alger) d'avoir accepté de faire partie du jury et de son intérêt pour ce travail.

Je ne saurais exprimer toute ma joie de la présence dans le jury de Mr. Lyazid CHETOUANI, Professeur à l'Université MENTOURI de Constantine. Je suis honoré de sa présence et d'avoir collaboré avec lui dans l'un des articles scientifiques.

J'adresse mes plus vifs remerciements à toute l'équipe du Laboratoire de Physique Théorique et Interactions Rayonnement-Matière pour leurs conseils et leurs encouragements en particulier aux messieurs Toufik DOUMAZ et Hocine ZERGUINI, ainsi que tous ceux que je n'ai pas cités.

Mes plus grands remerciements vont aux membres de ma famille. À mes parents, j'aimerais les remercier de m'avoir aidé pour aller vers l'avant, mais leur amour ne s'embrasse ni ne s'acquiesce de remerciements. À ma sœur Kahina et frères Karim, Amine, Rafik et Mehdi pour leurs constant soutient. À mes oncles et tantes ainsi qu'à toute ma famille, qu'ils trouvent ici toute ma reconnaissance et ma gratitude.

Je ne saurais bien sûr oublier de très nombreux ami(e)s, ainsi qu'à tous mes étudiant(e)s de licence de Chimie et Physique (promotion 2006), pour avoir été toujours à mes côtés pour m'encourager.

TABLE DES MATIÈRES

RÉSUMÉ

REMERCIEMENTS

TABLE DES MATIÈRES

LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX

INTRODUCTION

INTRODUCTION A LA PREMIERE PARTIE

1. ACTION ET POTENTIEL EFFECTIFS DANS LE FORMALISME DES INTEGRALES DE CHEMINS	17
1.1. Intégrales de chemins	17
1.1.1 Propagateur de la fonction d'onde	17
1.1.2 La conjecture de Feynman	18
1.1.3 Intégrales de chemins via la mécanique statistique	20
1.2. Action et potentiel effectifs	22
1.2.1 L'action effective	22
1.2.2 Le potentiel effectif	24
1.2.3 L'action effective pour les intégrales ordinaires	25
1.2.4 La méthode standard par les intégrales ordinaires	27
1.2.5 La méthode standard par les intégrales de chemins	29
1.2.6 Évaluation du potentiel effectif	32
1.3. Les potentiels PT-symétriques: Applications	35
1.3.1 Exemple: Oscillateur anharmonique complexe	36
1.3.2 La théorie des perturbations: Diagrammes de Feynman	38
1.3.3 La méthode de Bender-Wu: Relations de récurrence	39
2. RESOMMATION DES POTENTIELS EFFECTIFS AUX FORTS COUPLAGES	43
2.1. La limite des forts couplages	43
2.2. Potentiel complexe à anharmonicité cubique	45
2.2.1 La resommation de l'énergie de l'état fondamental	46
2.2.2 Resommation du potentiel effectif	47
3. POTENTIEL EFFECTIF ET RESOMMATION DES POTENTIELS COMPLEXES MULTIDIMENSIONNELS	50
3.1. Les méthodes perturbatives	50

3.1.1	La méthode des diagrammes de Feynman	50
3.1.2	Les relations de récurrence de Bender–Wu	52
3.2.	Procédure de resommation	55
3.3.	Potentiels effectifs complexes à D -dimensions	57
3.3.1	Limite des faibles couplages: L'énergie de l'état fondamental	58
3.3.2	Limite des forts couplages: Resommation des potentiels effectifs	60
INTRODUCTION A LA DEUXIEME PARTIE		63
4.	SUPERSYMETRIE ET MECANIQUE QUANTIQUE	65
4.1.	Les oscillateurs harmoniques supersymétriques	65
4.2.	La supersymétrie de la mécanique quantique	69
4.3.	Formulation Hamiltonienne de la supersymétrie	71
5.	GROUPE ET ALGEBRES DE LIE	75
5.1.	Généralités sur les groupes des transformations linéaires	75
5.2.	Structure des groupes de Lie	76
5.2.1	Groupes de Lie compacts et non-compacts	77
5.2.2	Construction des opérateurs de Casimir	78
5.2.3	Invariance par rapport à un groupe de symétrie	78
5.3.	Algèbres $su(2)$ et $su(1, 1)$ de Lie	79
5.3.1	La réalisation $su(2)$	80
5.3.2	La réalisation $su(1, 1)$	82
6.	CONNEXION DES POTENTIELS GENERALISES DE MORSE ET PÖSCHL-TELLER	85
6.1.	Potentiels généralisés de Morse et de Pöschl–Teller	85
6.1.1	Potentiels généralisés de Morse	86
6.1.2	Potentiels généralisés de Pöschl–Teller	89
6.2.	Connexion des potentiels de Morse et de Pöschl-Teller	92
6.2.1	La relation entre les spectres d'énergie	95
6.2.2	La relation entre les fonctions d'onde	96
INTRODUCTION A LA TROISIEME PARTIE		98
7.	ÉQUATION DE SCHRÖDINGER ET POTENTIELS EFFECTIFS	100
7.1.	Considérations théoriques	100
7.2.	Les transformations ponctuelles canoniques	101
7.2.1	La méthode inversée	102
7.2.2	La méthode directe	103
7.3.	Traitement algébrique: Le groupe $so(2, 1)$	105
8.	CLASSE DES POTENTIELS DE NATANZON ET POLYNOMES ORTHOGONAUX	108
8.1.	Le groupe $su(1,1)$ et les potentiels solubles	108
8.2.	Potentiels de Natanzon et polynômes orthogonaux	110
8.2.1	Polynômes de Laguerre généralisés $L_n^{(\alpha)}(y)$	110
8.2.2	Polynômes d'Hermite $H_n(y)$	114
8.2.3	Polynômes de Jacobin $P_n^{(\alpha, \beta)}(y)$	115

9. ALGEBRE $SU(1, 1)$ ET GENERATION DES POTENTIELS DE NATANZON	119
9.1. Construction du potentiel effectif	119
9.2. Algèbre des spectres générés quadratiques: Potentiels de Natanzon	123
9.3. Génération du potentiel de Ginocchio	126
9.3.1 Les formes hyperbolique et polynomiale du potentiel de Ginocchio	126
9.3.2 Le spectre d'énergie du potentiel de Ginocchio	127
CONCLUSION	129
A. CONNEXION DES POTENTIELS GENERALISES DE MORSE ET DE PÖSCHL–TELLER	132
B. REPRESENTATIONS CONFORMES	135
REFERENCES	138

LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX

Figure 1.1	Les trajectoires possibles entre les états initial et final.	19
Figure 1.2	La rotation de Wick dans l'espace des temps imaginaires.	21
Figure 4.1	L'action des supercharges Q et $Q^\dagger$ sur les états propres.	71
Figure 4.2	L'action des opérateurs de création et d'annihilation sur les fonctions d'ondes.	73
Figure 4.3	La brisure spontanée de la supersymétrie	74
Figure 8.1	La connexion entre les potentiels aux formes invariantes	118
Figure B.1	Représentation conforme des familles orthogonales	137
Tableau 2.1	Les deux premiers ordres en $\hbar$ du potentiel effectif	47
Tableau 3.1	Les coefficients du spectre d'énergie du potentiel à 2-dimensions	55
Tableau 3.2	Les coefficients du spectre d'énergie du potentiel à 3-dimensions	55
Tableau 8.1	Les formes finales des potentiels	111
Tableau 8.2	Les formes finales des spectres d'énergie et des fonctions d'ondes	112
Tableau 8.3	Les formes explicites des générateurs $J_\pm$	113
Tableau 8.4	Les formes explicites des opérateurs $A^\dagger$ et A	115

INTRODUCTION

Plusieurs méthodes et approches se sont avérées depuis quelques années extrêmement utiles en physique théorique dans le but de générer et d'étudier les potentiels quantiques. L'intérêt majeur de ces méthodes consiste à déterminer, avec une approche simple et élégante à la fois, des propriétés physiques des systèmes quantiques associées via leurs spectres d'énergie et fonctions d'onde, sans avoir recours à résoudre l'équation aux valeurs propres (l'équation de Schrödinger, l'équation de Dirac, etc.). Les intégrales de chemins (*Path-integrals*) [1, 2, 3, 4], la méthode de factorisation [5], la supersymétrie de la mécanique quantique [6, 7, 8], ainsi que la théorie des groupes par l'approche des algèbres de Lie compactes et non-compactes [9, 10, 11] sont parmi ces méthodes. Bien qu'elles aient, d'un point de vue mathématique, des aspects différents pour traiter des potentiels exactement solubles, ces méthodes ne sont pas complètement indépendantes l'une de l'autre. Elles sont équivalentes dans le sens qu'elles constituent des formalismes adéquats pour la dérivation des algèbres dynamiques, donnant ainsi les mêmes spectres d'énergie de l'état fondamental.

Le formalisme des intégrales de chemins est une formulation de la mécanique quantique construite autour des concepts de Noyau (*Kernel*) et Propagateur [12, 13]. Ces derniers sont considérés, par les communautés physiciennes et mathématiciennes du monde, comme des outils essentiels et puissants aussi bien au niveau conceptuel qu'au niveau des calculs. Ce formalisme est considéré comme intuitif, puisqu'il permet la réintroduction de la notion de la trajectoire. Dans ce formalisme, les opérateurs bosoniques et fermioniques de la seconde quantification sont évités au profit de produits infinis des intégrales, ce qui nous mène à une formulation des équations intégrales. Cependant, ce formalisme a rencontré énormément de difficultés dans l'étude des systèmes quantiques (hormis la particule libre et l'oscillateur harmonique) conduisant à la reparamétrisation des chemins [14] pour un calcul analytique. Malgré ce progrès, le calcul analytique exact du propagateur n'est pas tout à fait au point nécessitant la mise en œuvre des méthodes d'approximations pour approcher le résultat exact avec une bonne précision [15, 16, 17, 18, 19, 20].

La théorie des perturbations est l'une de ces approximations [21, 22], utilisée généralement pour des potentiels à caractère non triviaux. Elle est fondée sur un développement d'une quantité physique arbitraire, e.g. l'énergie de l'état fondamental, en séries entières en fonction de la constante de couplage. Aux premiers ordres du calcul, les résultats obtenus aux faibles couplages semblent convergés vers des résultats exacts, alors que la divergence devient importante une fois que le développement est conduit aux ordres plus élevés [23, 24, 25, 26]. Il est donc nécessaire de trouver des techniques pour contourner la divergence des séries perturbatives, incluant aussi les forts couplages [27, 28, 29]. À cet égard, différentes techniques de resommation ont été développées. Souvent, ces méthodes sont accompagnées d'un paramètre artificiel, et qui sera révoqué des équations en lui attribuant une valeur spécifique ou en performant une limite [30, 31, 32]. Ces

approches, efficaces aussi bien aux faibles qu'aux forts couplages, permettent de convertir des séries divergentes aux faibles couplages en séries convergentes aux forts couplages.

La Supersymétrie de la théorie des champs, la symétrie capable de décrire des transformations entre bosons et fermions, a été un sujet de recherche intensif ces trois dernières décennies [33]. Cependant, si la supersymétrie existe dans la nature, elle doit-être manifestement brisée à cause du fait qu'il n'y ait aucune indication expérimentale montrant la dégénérescence des supermultiplets boson-fermion. C'est dans ce contexte que la supersymétrie de la mécanique quantique (SUSY-QM) a été introduite [34]; cette dernière est considérée comme étant la réalisation simple de l'algèbre dynamique de la supersymétrie de la théorie des champs impliquant un élément central appelé Hamiltonien H et des opérateurs "non centraux" Q et $Q^\dagger$ appelés supercharges ou générateurs. SUSY-QM a été reconnue depuis comme la reformulation de la méthode de la factorisation de Schrödinger [35]. Elle est essentiellement fondée sur la version généralisée des opérateurs de création $A^\dagger$ et d'annihilation A , liés aux supercharges $Q^\dagger$ et Q , donnant ainsi deux Hamiltoniens iso-spectraux ayant le même spectre d'énergie excepté pour l'état fondamental. Ces opérateurs sont souvent appelés les opérateurs bosoniques et fermioniques du système supersymétrique [36].

Tous les potentiels exactement solubles peuvent être exprimés dans la formulation de la SUSY-QM une fois que les fonctions d'onde de l'état fondamental sont connues. Bien qu'elle permette de déduire des potentiels déjà connus, la SUSY-QM génère aussi des "nouveaux" potentiels exactement solubles, baptisés *superpartenaires*. La construction des partenaires supersymétriques des potentiels solubles et connus est une option caractéristique à la SUSY-QM, sans compter qu'elle permette de résoudre divers problèmes concernant des potentiels d'une manière unifiée et systématique.

La théorie des groupes nous permet d'utiliser des techniques algébriques puissantes et efficaces, particulièrement lors de la détermination des expressions analytiques des spectres d'énergie [37]. L'un des aspects fondamentaux de la théorie des groupes de Lie est la construction des Hamiltoniens (i.e. potentiels) des systèmes quantiques à partir des opérateurs *invariants de Casimir* liés à la structure algébrique du groupe en question. Cette procédure de construction est principalement fondée sur deux opérations successives [37]:

1. La première opération, appelée l'*approche algébrique*, est considérée comme la manière commode pour construire l'algèbre des spectres générés (*spectrum generating algebra*) du système et ceci par l'introduction, sous forme de générateurs, d'un ensemble d'opérateurs de création et d'annihilation.
2. La seconde opération, appelée l'*approche potentiel* est liée à la première en attribuant aux opérateurs de création et d'annihilation une forme différentielle multidimensionnelles.

Plusieurs problèmes en physiques sont caractérisés, d'une part, par une partie discrète et finie du spectre (états liés) et, d'autre part, par une partie continue (états de diffusion). Les représentations algébriques qui caractérisent ces états sont décrites par des représentations unitaires de certains groupes. Les algèbres associées permettent de générer

les spectres d'énergie [9, 10, 11].

Des techniques algébriques ont été utilisées récemment pour décrire la partie discrète du spectre. L'approche algébrique du spectre discret et fini consiste à écrire le Hamiltonien, H (et d'autres opérateurs), en termes de générateurs de l'algèbre g associée au groupe G , et de résoudre l'équation aux valeurs propres $H\psi = E\psi$ dans la base obtenue par les représentations irréductibles du groupe G . Cependant, quand le Hamiltonien H s'écrit uniquement en termes des opérateurs invariants de Casimir d'une chaîne de groupes $G \supset G' \supset \dots$, une symétrie dynamique surgit et l'équation aux valeurs propres peut-être résolue exactement, donnant lieu aux expressions des spectres d'énergie [9, 37]. Les techniques algébriques utilisées, fondées sur les approches algébrique et potentiel des structures du groupe, se sont montrées très utiles dans la description des états liés de certain potentiels et classe de potentiels généralisées déduits sous la SUSY-QM. Par conséquent, cette algèbre apparaît, d'une part, comme une algèbre des spectres générés et, d'autre part, comme une construction identifiée à une algèbre des potentiels. Cette relative et simple construction mathématique nous conduit à une interprétation physique: *les représentations irréductibles du groupe des potentiels G sont constituées d'états propres et ont le même spectre d'énergie* [38].

L'objet principal de cette thèse concerne tout particulièrement les procédures de **resommation** [39], de **connexion** [40] et de **génération** [41] des potentiels quantiques ainsi que la déduction de leurs spectres d'énergie en utilisant les méthodes citées plus haut. Les expressions des spectres d'énergie sont déduites soit analytiquement ou numériquement.

Cette thèse comporte trois grandes parties.

La première partie est consacrée à la procédure de resommation [39] des potentiels complexes cubiques multidimensionnels non hermétiques, couplés aux oscillateurs harmoniques et invariants sous la transformation discrète PT [42, 43, 44, 45, 46, 47, 48] dans le cadre du formalisme des intégrales de chemins via la physique statistique quantique [49, 50, 51]. Nous déduisons les coefficients d'énergie aux faibles couplages pour l'état fondamental en utilisant la technique des diagrammes de Feynman ainsi que les relations de récurrence de Bender-Wu [52]. Nous constatons, d'une part, que les deux sont en accord avec ceux obtenus par la méthode perturbative standard, à savoir, la méthode de Rayleigh-Schrödinger [21, 22], et d'autre part que le spectre d'énergie est entièrement réel et positif. Nous procédons par la suite à la resommation aux forts couplages en termes de la constante de couplage g des séries d'énergie déduites aux faibles couplages en appliquant le paramètre de resommation de Kleinert [27, 28, 29]. Cependant, aux forts couplages, la série d'énergie diverge; le taux de convergence est moins satisfaisant [39]. Pour éliminer cette divergence, nous introduisons le potentiel effectif, défini dans le cas d'un courant externe nul comme étant la transformation de Legendre de l'énergie libre aux basses températures, permettant de retrouver les résultats des faibles couplages. Afin de restaurer le taux de convergence aux forts couplages, nous procédons à la resommation du potentiel effectif en terme de $\hbar$ au lieu de g . En effet, elle consiste à transformer des séries perturbatives divergentes aux faibles couplages ($g \rightarrow 0$) en séries non perturbatives

convergentes aux forts couplages ($g \rightarrow \infty$). Il s'avère que les coefficients de la série d'énergie aux forts couplages obtenus au second ordre approchent ceux attendus avec un écart très petit comparé au premier ordre [39].

La seconde partie est consacrée à la connexion [40] des potentiels de Morse [53] et de Pöschl-Teller [54] généralisés, déduits par la supersymétrie de la mécanique quantique, dans le cadre de la représentation de la théorie des groupes de Lie compacts $SU(2)$. La réalisation différentielle des opérateurs de la chaîne du groupe $U(2) \supset SU(2)$ sur un plan et sur une sphère [37] nous a conduit à établir les équations de Schrödinger correspondantes aux potentiels généralisés de Morse et de Pöschl-Teller [55], respectivement, donnant ainsi la possibilité de lier et d'unifier les deux potentiels par des transformations globales [40]. Nous démontrons qu'il est possible de construire mathématiquement l'équation de Schrödinger généralisée pour le potentiel de Pöschl-Teller à partir de celle du potentiel de Morse, établissant ainsi une connexion causale et fondamentale entre les deux équations via la transformée de Fourier [56]. Quant aux potentiels généralisés, nous démontrons qu'ils sont liés à travers la transformée de Hankel (connue aussi sous l'appellation d'intégrale de Fourier-Bessel) [57]. Par conséquent, l'algèbre associée au groupe $SU(2)$ forme une algèbre dynamique [37, 58, 59] et fournit, par la même occasion, une relation liant les deux spectres d'énergie. En effet, nous démontrons que le spectre de Pöschl-Teller est lié au spectre de Morse par un décalage de celui-ci d'une valeur constante [40].

Quant à la dernière partie de cette thèse, elle est consacrée à la génération [41] des potentiels hypergéométriques de Natanzon [60, 61], dotés de masses dépendantes de la position [62, 63, 64, 65, 66, 67], i.e. $m \equiv m(x)$, dans la représentation de la théorie des groupes de Lie non-compacts $U(1,1) \supset SU(1,1)$ par le biais des transformations conformes [68]. Les potentiels quantiques exactement solubles et associés aux masses dépendantes de la position ont suscité, ces dernières années, l'attention des physiciens, et l'équation de Schrödinger correspondante a été résolue pour un grand nombre de potentiels en utilisant une variété de méthodes [69, 70, 71, 72]. L'introduction du concept de l'algèbre des potentiels par Alhassid et al. [37] a permis d'établir une connexion triviale entre les représentations irréductibles unitaires discrètes et continues du groupe $SU(1,1)$ avec les états d'énergie liés et diffusés d'une large classe de potentiels quantiques à une dimension.

Ici, nous avons combiné l'algèbre des potentiels aux problèmes physiques liés aux masses effectives afin de générer les potentiels hypergéométriques de Natanzon dépourvus de tous les paramètres d'ambiguïté [41]. Pour cela, nous avons attribué aux générateurs du groupe $SU(1,1)$ des formes différentielles afin de déduire des équations différentielles du second ordre. L'opérateur différentiel du second ordre apparent dans l'équation différentielle est exprimé en termes de l'opérateur invariant de Casimir de l'algèbre $su(1,1)$. Nous avons appliqué des transformations similaires aux générateurs du groupe qui permettent de construire l'équation de Schrödinger pour une large variété de potentiels effectifs exactement solubles. Afin de générer les potentiels hypergéométriques de Natanzon à partir des potentiels effectifs, nous avons utilisé des représentations conformes de quelques fonctions analytiques et usuelles [41, 68]. L'intérêt particulier porté aux

transformations conformes est dû essentiellement au fait que la variable z , telle qu'elle est définie dans les potentiels de Natanzon, varie dans le domaine $[0,1]$; ce dernier sera considéré comme étant un cercle de rayon unité le long de l'axe des réels. Ceci fournit une manière systématique d'en déduire les transformations conformes utiles du domaine D du plan- ξ vers l'intérieur d'un cercle de rayon unité $D_z = [0,1]$ du plan- z [41].

Pour finir, une conclusion générale et des perspectives concluent cette thèse.

L'annexe I, qui contient les annexes A et B, suit le corps de cette thèse; elle n'a d'autre prétention que de fournir aux lecteurs des compléments mathématiques, sous forme de démonstrations, concernant respectivement la connexion par la transformée de Hankel des potentiels généralisés de Morse et de Pöschl-Teller [40] ainsi que la déduction des représentations conformes permettant de générer les potentiels hypergéométriques de Natanzon [41].

Ce travail a donné lieu à 4 publications internationales.

INTRODUCTION DE LA PREMIÈRE PARTIE

Il est connu aujourd'hui que les trois formulations différentes mais équivalentes de la mécanique quantique sont associées aux trois disciplines mathématiques, c'est-à-dire l'analyse, l'algèbre et la géométrie. En effet, la première formulation (*formalisme de Schrödinger*), fondée sur l'analyse mathématique, explicite la relation entre l'espace physique abstrait de Hilbert et l'espace réel basé sur les fonctions d'onde [21, 22], la seconde formulation (*formalisme d'Heisenberg-Dirac*), reposant sur des structures algébriques, suppose que les états physiques du précédent formalisme ont tous été recensés et qu'il ne reste qu'à indiquer lequel de ces états est occupé ou vide [22].

Quant à la troisième formulation (*formalisme de Feynman*), elle se fonde sur la géométrie [1]. Cette manière de *géométriser* le principe de superposition quantique est d'importance capitale, puisqu'elle nous permet de visualiser la construction et la destruction des interférences qui résultent des différentes trajectoires (chemins) possibles [1, 2, 3, 4]. Ces idées ont été élaborées grâce aux travaux antérieurs dus à P. A. M. Dirac [13], jusqu'à ce que R. P. Feynman les réunissent à travers son concept du noyau (*Kernel*) de l'équation de Schrödinger dans sa fameuse représentation des *intégrales de chemins* [12].

Ce formalisme est construit autour d'une *conjecture* dite de Feynman [1, 12]; elle annonce *qu'il convient d'attribuer une phase à chaque trajectoire, la valeur de cette phase est dictée par la mécanique classique ainsi qu'une amplitude, pour aller du point $x(t)$ au point $x'(t')$, donnée par $\exp\left[\frac{i}{\hbar}S\right]$, où S est l'action classique définie par $S = \int L(x, \dot{x}; t) dt$ et $L(x, \dot{x}; t)$ est le Lagrangien du système. Il est clair que le formalisme des intégrales de chemins adopte le point de vue de Schrödinger, incluant l'évolution de la fonction d'onde dans le propagateur même.*

Cependant, le calcul analytique exact du propagateur n'est pas tout à fait au point, d'où la nécessité de mettre en œuvre des méthodes d'approximations permettant ainsi de se rapprocher du résultat exact avec une bonne précision [15, 16, 17, 18, 19, 20].

L'une des approches les plus prometteuses est la théorie des *perturbations variationnelles pour matrices de densité* établie par H. Kleinert [25]. Elle est fondée essentiellement sur un développement en série perturbative du spectre d'énergie aux faibles couplages [23, 24, 25, 26]. Aux forts couplages, la série perturbative en énergie diverge nécessitant ainsi l'utilisation des procédures dites de *resommations*. Elles consistent à transformer des séries perturbatives divergentes aux faibles couplages en séries non perturbatives convergentes aux forts couplages [27, 28, 29, 39].

L'intérêt grandissant porté ces dernières années aux potentiels complexes multidimensionnels prouve bien que nous avons affaire à un champ de recherche dynamique et très prometteur [42, 43, 44, 45, 46, 47]. Il a été démontré, via plusieurs approches, que leur spectre d'énergie reste entièrement réel et positif, malgré leur caractère

complexe [23, 24, 47]. Ces potentiels sont connus par la propriété d'être des systèmes physiques non triviaux, ceci à tendance de compliquer le calcul analytique du propagateur ainsi que les spectres d'énergie correspondants.

L'objectif principal de cette partie est double [39]: d'une part nous calculons le spectre d'énergie de l'état fondamental aux faibles couplages à une classe de potentiels complexes multidimensionnels et PT-symétrique en utilisant les diagrammes de Feynman ainsi que les relations de récurrence de Bender-Wu [52]. L'introduction du paramètre de Kleinert permet de resommer les séries d'énergie trouvées précédemment aux forts couplages. D'autre part, nous améliorons "le taux" de convergence du calcul des spectres d'énergie obtenus en resommant une nouvelle fois par rapport au potentiel effectif, associé au potentiel ordinaire, défini comme étant la transformation de Legendre de l'énergie libre aux basses températures.

Cette partie comporte trois chapitres, dont on trouvera dans le premier une brève introduction aux intégrales de chemins [2] ainsi que l'extension du formalisme à la physique statistique quantique [49, 50, 51]. Le reste du chapitre est essentiellement consacré au calcul du potentiel effectif basé sur le concept de l'action effective [29] et aux méthodes d'approximations (diagrammes de Feynman et relations de récurrence de Bender-Wu) dans le but de déduire la série d'énergie aux faibles couplages du potentiel complexe unidimensionnel et d'anharmonicité cubique. Quant au second chapitre, il sera question de la procédure de resommation aux forts couplages des séries d'énergie déduites précédemment dont nous prouverons son efficacité: (i) en déduisant les expressions des spectres d'énergie aux faibles couplages, (ii) en améliorant la convergence de la théorie aux forts couplages.

Dans le dernier chapitre, il sera question de la traduction de l'article:«**S.-A. Yahiaoui, O. Cherroud, M. Bentaiba, J. Math. Phys. 48 (2007) 113503-513**» [39]. Nous généraliserons le potentiel complexe d'anharmonicité cubique au cas multidimensionnels (pour $D = 2,3$). Nous calculerons les séries d'énergie correspondantes aux faibles couplages de l'état fondamental en utilisant les diagrammes de Feynman ainsi que les relations de récurrence de Bender-Wu. Afin de déduire l'énergie aux forts couplages, nous utiliserons la procédure de resommation d'abord en puissances de la constante de couplage g , puis en puissances de $\hbar$ dans le but d'améliorer le taux de convergence.

CHAPITRE 1

ACTION ET POTENTIEL EFFECTIFS DANS LE FORMALISME DES INTEGRALES DE CHEMINS

Les résultats de la dynamique quantique permettent de donner une description différente de la mécanique quantique et de faire introduire la notion plus générale des intégrales de chemins. Ce formalisme, introduit par R. P. Feynman [12], est considéré comme une autre méthode de quantification. Il annonce que l'amplitude peut contenir un facteur de phase, d'où celle-ci est dictée par la mécanique classique, dont on pourrait penser qu'il est inobservable et donc arbitraire. Étant donné que l'amplitude de la fonction d'onde est la somme de toutes les amplitudes résultantes des chemins possibles [1, 2, 3, 4], on obtient un résultat analogue au principe de Huyghens de l'optique ondulatoire.

Ainsi, un processus quantique pourra donc être décrit comme une expérience d'optique dans l'espace des configurations, tandis que la phase est liée à certaines propriétés des intégrales de chemins dans l'espace des configurations.

1.1. Intégrales de chemins

1.1.1. Propagateur de la fonction d'onde

L'espace des configurations est l'espace des variables classiques permettant de décrire l'état instantané du système. La fonction d'onde est la projection sur l'espace des configurations choisi par un observateur. Le système quantique sera décrit dans la représentation de Schrödinger, tandis que l'observateur sera lui décrit dans la représentation de Heisenberg menu d'un ket $|x\rangle$ fixe, mais des opérateurs liés à l'observateur, dépendant du temps.

Plaçons-nous dans la représentation de Schrödinger, la fonction d'onde à l'instant initial t_0 est $\psi_a(x_0, t_0) = \langle x_0, t_0 | a \rangle$ et à l'instant t la fonction d'onde devient $\psi_a(x, t) = \langle x, t | a \rangle$. La fonction d'onde du système est donc solution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps [21, 22]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_a(x, t) = H(t) \psi_a(x, t). \quad (1.1)$$

Il existe un opérateur appelé *fonction de Green* propageant la fonction d'onde de (x_0, t_0) en (x, t) et nous noterons $G(x, t; x_0, t_0)$ ce propagateur [22]:

$$G(x, t; x_0, t_0) = \langle x, t | a \rangle \langle a | x_0, t_0 \rangle$$

$$= \psi_a(x, t) \psi_a^*(x_0, t_0). \quad (1.2)$$

Déterminons la fonction d'onde en (x, t) en projetant $\psi_a(x, t)$ de l'état quantique sur l'observateur $\psi_a | x_0, t_0 \rangle$:

$$\begin{aligned} \psi_a(x, t) &= \int \langle x, t | x_0, t_0 \rangle dx_0 \langle x_0, t_0 | a \rangle \\ &= \int G(x, t; x_0, t_0) \psi_a(x_0, t_0) dx_0. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Dans un système conservatif, l'intégration de l'équation (1.1) donne l'évolution au point x :

$$\psi_a(x, t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} H(t - t_0)\right] \psi_a(x_0, t_0). \quad (1.4)$$

Le propagateur (1.2) de la fonction d'onde s'écrit ensuite:

$$\begin{aligned} G(x, t; x_0, t_0) &= \langle x, t; x_0, t_0 \rangle \\ &= \langle x | \exp\left[\frac{i}{\hbar} H(t - t_0)\right] | x_0 \rangle \end{aligned} \quad (1.5)$$

Il est essentiel de connaître le propagateur $G(x, t; x, t)$ et un état initial $\psi_a(x_0, t_0)$ pour déterminer la fonction d'onde *observée* correspondant à un état quantique $|a\rangle$ du système physique. C'est ce que se propose de calculer la méthode des intégrales de chemins.

1.1.2. La conjecture de Feynman

La forme du propagateur (1.2) montre qu'il est possible d'inclure autant d'états intermédiaires:

$$\begin{aligned} G(x', t'; x, t) &= \int \langle x', t' | x'', t'' \rangle dx'' \langle x'', t'' | x, t \rangle \\ &= \int G(x', t'; x'', t'') G(x'', t''; x, t) dx''. \end{aligned} \quad (1.6)$$

On peut décomposer un laps de temps fini $(t' - t)$ en n parties ε et écrire le propagateur correspondant:

$$\begin{aligned} \langle x', t'; x, t \rangle &= \int \langle x', t' | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle dx_{n-1} \langle x_{n-1}, t_{n-1} | x_{n-2}, t_{n-2} \rangle dx_{n-2} \\ &\quad \cdots dx_1 \langle x_1, t_1 | x, t \rangle, \end{aligned} \quad (1.7)$$

et le seul propagateur à connaître est celui qui fait passer d'un point (x_i, t_i) au point infiniment voisin (x_{i+1}, t_{i+1}) . En posant $\varepsilon = t_{i+1} - t_i$, il vient donc [2]:

$$\langle x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i \rangle = \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} [p_i(x_{i+1} - x_i) - \varepsilon H(p_i, \frac{x_i + x_{i+1}}{2})]\right\}. \quad (1.8)$$

Les intégrales de chemins conduisant au propagateur d'une fonction d'onde sont donc obtenues par discrétisation du système quantique tel qu'il est illustré sur la Figure 1.1

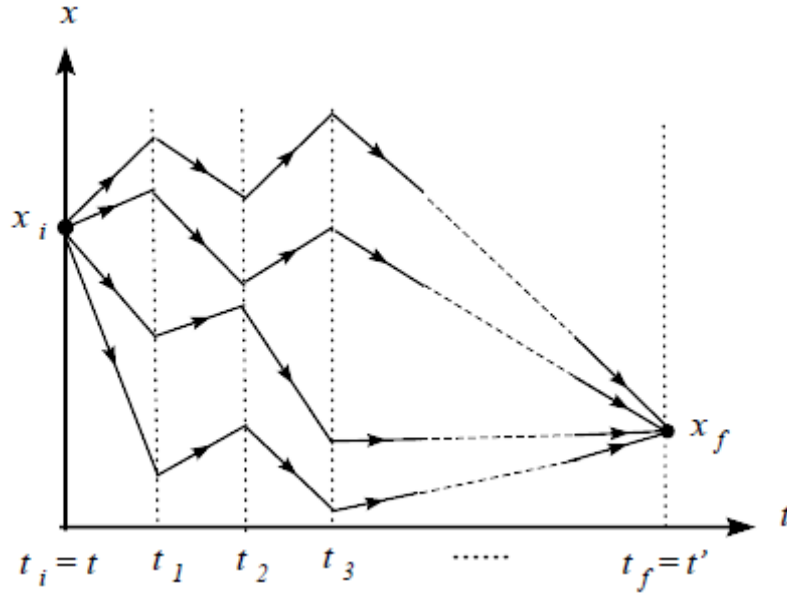


Figure 1.1 : Les trajectoires possibles entre les états initial et final.

Cela signifie que les chemins continus sont remplacés par des chemins rectilignes infinitésimaux. En portant (1.8) dans (1.7), on obtient le propagateur pour une particule soumise à une interaction $V(x)$; c'est-à-dire en discrétisant l'intégrale puis en faisant tendre ε vers zéro et en sommant sur tous les intervalles infinitésimaux, i.e. en intégrant sur la variable t :

$$\begin{aligned}
 G(x', t'; x, t) &= \int \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \frac{dp_2}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_{n-1}}{2\pi\hbar} \int dx_1 dx_2 \dots dx_n \\
 &\quad \times \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \sum_i [p_i(x_{i+1} - x_i) - \varepsilon H(p_i, \frac{x_i + x_{i+1}}{2})] \right\} \\
 &\equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^{n-1} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \int \prod_{i=1}^n dx_i \\
 &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^n [p_i(x_{i+1} - x_i) - \varepsilon H(p_i, \frac{x_i + x_{i+1}}{2})] \right\}. \quad (1.9)
 \end{aligned}$$

En explicitant le terme cinétique $\frac{p_i^2}{2m}$ et le terme potentiel $V(\frac{x_{i+1} + x_i}{2})$ du Hamiltonien, l'intégration sur dp_i conduit à l'expression du propagateur d'une particule libre. Le terme restant correspond au Lagrangien classique discrétisé et le remplacement de la somme discrète par une intégrale sur le temps t fait ensuite apparaître l'action Hamiltonienne classique $S[x(t)]$.

En introduisant l'élément différentiel formel [1, 2, 3, 4]:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^n \frac{dx_i}{A_i} = Dx, \quad (1.10)$$

où A_i se réfère au propagateur d'une particule libre, le propagateur (1.9) devient:

$$G(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int_{(x_i, t_i)}^{(x_f, t_f)} Dx(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int dt \mathcal{L}_{cl}(x, \dot{x})\right]. \quad (1.11)$$

On reconnaît dans l'intégrale (1.11) le Lagrangien de la mécanique classique. La conjecture de Feynman *consiste donc à faire introduire dans l'intégrale le Lagrangien et à identifier le coefficient de normalisation A_i au coefficient du propagateur d'une particule libre.*

1.1.3. Intégrales de chemins via la mécanique statistique

Selon la mécanique statistique [49, 50], la probabilité de trouver dans un ensemble de systèmes identiques un état propre de l'Hamiltonien avec une énergie E , dont la température est T , est proportionnelle à $\exp[-\beta E]$, où $\beta = \frac{1}{k_B T}$ est l'inverse de la température absolue, k_B est la constante de Boltzmann.

Par définition, la moyenne statistique d'une observable $\hat{O}$ est prise en calculant, au sens quantique, la moyenne arithmétique des valeurs moyennes de $\hat{O}$ dans les différents états propres:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | \hat{O} | n \rangle e^{-\beta E_n}, \quad (1.12)$$

où E_n est l'énergie propre de l'état $|n\rangle$ et $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$ est appelée fonction de partition du système.

L'autre grandeur physique jouant un rôle important en mécanique statistique est l'opérateur densité, ρ , puisque il permet de calculer toutes les valeurs moyennes sans tenir compte des états $|n\rangle$ dont on est parti. Il est défini par:

$$\begin{aligned} \rho &\equiv e^{-\beta \mathcal{H}} \\ &= \sum_n |n\rangle \langle n| e^{-\beta E_n}. \end{aligned} \quad (1.13)$$

La moyenne statistique d'une observable $\hat{O}$ décrite en (1.12) peut-être exprimée en fonction de l'opérateur densité ρ et la fonction de partition Z comme suit [2, 51]:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \text{tr}(\hat{\rho} \hat{O}). \quad (1.14)$$

Par ailleurs, il a été observé que le propagateur dans la représentation de Schrödinger s'adapte au noyau de l'opérateur densité par la substitution: $T \rightarrow -i\tau$ avec $\tau = \hbar\beta$, et qui

nous fait passer de l'opérateur d'évolution à l'opérateur densité. Cette substitution, appelée *rotation de Wick* [2] et illustrée sur la figure Fig. 1.2, est vue comme le moyen théorique pour exploiter la similitude ainsi que le lien avec le formalisme des intégrales de chemins.

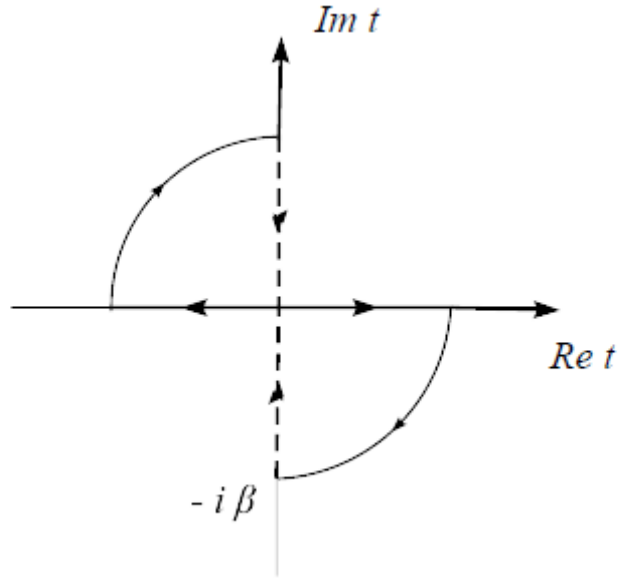


Figure 1.2 : La rotation de Wick dans l'espace des temps imaginaires.

En effet, l'application de la rotation de Wick nous permet d'écrire l'expression du propagateur (1.5) sous la forme:

$$\begin{aligned} G(x', -i\hbar\beta; x, 0) &= \langle x' | e^{-\beta H} \sum_n | n \rangle \langle n | x \rangle \\ &= \sum_n e^{-\beta \mathcal{E}_n} \langle n | x \rangle \langle x' | n \rangle, \end{aligned} \quad (1.15)$$

En posant $x = x'$ et en intégrant sur l'espace des configurations, on obtient, conformément à la relation de fermeture, l'identité:

$$\begin{aligned} \int dx G(x, -i\hbar\beta; x, 0) &= \int dx \sum_n e^{-\beta \mathcal{E}_n} \langle n | x \rangle \langle x | n \rangle \\ &= \sum_n e^{-\beta \mathcal{E}_n} \langle n | \int dx | x \rangle \langle x | n \rangle \\ &\equiv \sum_n e^{-\beta \mathcal{E}_n} \langle n | n \rangle \end{aligned} \quad (1.16)$$

On conclut que l'évolution du propagateur dans des temps imaginaires et négatifs est analogue au noyau de l'opérateur densité. Il est possible de réécrire la fonction de partition en termes d'intégrales de chemins. L'action sera donnée par [2]:

$$\mathbf{S} = i \int d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V[x(\tau)] \right] \equiv i \mathbf{S}_{Euc}, \quad (1.17)$$

où S_{Euc} est appelée l'action euclidienne du fait que l'espace-temps possède une métrique euclidienne, et par conséquent le noyau de l'opérateur densité devient:

$$\rho(x) = \int Dx(\tau) \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S_{Euc}\right] \quad (1.18)$$

La fonction de partition Z est exprimée au moyen de l'opérateur ρ par:

$$Z = \int dx \rho(x, x) \quad (1.19)$$

L'intégrale (1.18) est appelée l'intégrale de chemin euclidien, il est obtenu de l'action ordinaire de Minkowski en changeant le signe du terme de l'énergie potentielle.

1.2. Action et potentiel effectifs

L'approche suivie ici est entièrement consacrée au calcul du potentiel effectif par la représentation de l'action effective au moyen des intégrales de chemins [29]. Rappelons, que selon (1.19), la fonction de partition Z est exprimée dans l'intervalle des temps imaginaires par:

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx^i \int_{x(0)}^{x(\hbar\beta)} Dx \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S(x)\right] \equiv \oint Dx \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S(x)\right]. \quad (1.20)$$

Pour cela, la meilleure approche de connaître les propriétés dynamiques d'un système quantique est de le soumettre à une perturbation externe afin que l'influence de cette dernière sur les amplitudes de transition peut-être évaluée. La perturbation est décrite par une source classique, connue aussi sous l'appellation *courant externe* et notée $j(\tau)$, et qui peut-être vue comme un champ de force macroscopique externe. Cependant, l'introduction du terme $j(\tau)x(\tau)$ dans le Lagrangien du système permet de faire apparaître le courant externe $j(\tau)$ dans l'équation du mouvement comme un terme inhomogène.

1.2.1. L'action effective

En présence d'un courant externe, $j(\tau)$, l'action est donnée par [2, 29] :

$$S[x, j] = S[x] - \int_0^{\hbar\beta} d\tau j(\tau)x(\tau). \quad (1.21)$$

Nous considérons la fonction génératrice suivante :

$$Z[j] = \oint Dx \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S[x, j]\right], \quad (1.22)$$

où l'intégration est effectuée sur tous les chemins périodiques $x(0) = x(\hbar\beta)$. Pour $j(\tau) = 0$, la fonction génératrice de l'équation (1.22) est identique à celle donnée par (1.20), et est réduite à $Z[j]|_{j=0} \equiv Z$. Ainsi, l'énergie libre est dépendante du courant externe $F[j] = -\frac{1}{\beta} \ln Z[j]$ [49].

La valeur moyenne du chemin $x(\tau)$ est donnée par :

$$X[j](\tau) \equiv \langle x(\tau) \rangle [j] = \frac{1}{Z[j]} \oint \mathcal{D}x \, x(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S[x, j] \right], \quad (1.23)$$

et elle est proportionnelle à la première dérivée de l'énergie libre par rapport au courant $j(\tau)$:

$$\frac{\delta F[j(\tau)]}{\delta j(\tau)} = -\frac{1}{\hbar\beta} X(\tau). \quad (1.24)$$

Cette identité est obtenue en remplaçant le chemin $x(\tau)$ dans le membre de droite de l'équation (1.23) par la première dérivée par rapport au courant externe multiplié par la constante réduite de Planck $\hbar$; c'est-à-dire $x(\tau) \rightarrow \hbar \frac{\delta}{\delta j(\tau)}$.

Les équations (1.21) et (1.24) servent à définir la transformation de Legendre correspondante à l'énergie libre $F[j(\tau)]$ [2, 29] :

$$\Gamma[j(\tau)] = \hbar\beta F[j(\tau)] + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \, j[X](\tau) X(\tau), \quad (1.25)$$

où $\Gamma[j(\tau)]$ est appelée l'action effective.

La dérivée première de l'action effective par rapport à $X(\tau)$ est :

$$\frac{\delta \Gamma[X(\tau)]}{\delta X(\tau)} = \hbar\beta \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \frac{\delta F[j[X]]}{\delta j[X](\tau')} \frac{\delta j[X](\tau')}{\delta X(\tau')} + \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \frac{\delta j[X](\tau')}{\delta X(\tau')} X(\tau') + j[X](\tau'). \quad (1.26)$$

De (1.24), il devient possible de lier le courant externe à l'expression de l'action effective :

$$\frac{\delta \Gamma[X(\tau)]}{\delta X(\tau)} = j[X](\tau), \quad (1.27)$$

où dans le cas d'un courant nul ; i.e. $j \equiv 0$, la valeur moyenne du chemin est donnée par $X_e(\tau) = X[j]|_{j=0}(\tau)$.

L'énergie libre, obtenue après *minimisation* de l'action effective $\frac{\delta \Gamma[X]}{\delta X(\tau)}|_{X=X_e} = 0$, est exprimée en termes de l'action effective par :

$$F[0] = \frac{1}{\hbar\beta} \Gamma[X_e]. \quad (1.28)$$

Du fait que le courant externe $j(\tau)$ est indépendant de τ , le potentiel effectif permet de déterminer l'énergie libre $F[0]$. Le calcul du potentiel effectif constitue une approche basée sur le concept de l'action effective [29].

1.2.2. Le potentiel effectif

Nous supposons que le courant externe $j(\tau)$ est indépendant du temps imaginaire τ , i.e. $j(\tau) \equiv j$. L'action et la fonction génératrice données, respectivement, par (1.21) et (1.22) seront exprimées par:

$$S[x, j] = S[x] - j \int_0^{\hbar\beta} d\tau x(\tau), \quad (1.29)$$

$$Z[j] = \oint \mathcal{D}x \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S[x](j)\right]. \quad (1.30)$$

La dérivée première de $F[j]$ s'écrit sous la forme:

$$\frac{\partial F[j]}{\partial j} = -\frac{1}{\hbar\beta Z(j)} \oint \mathcal{D}x \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S[x](j)\right] \int_0^{\hbar\beta} d\tau x(\tau) \equiv -X. \quad (1.31)$$

Le chemin moyen (1.23) est indépendant du temps imaginaire τ , et du fait que les intégrales dans (1.31) sont interchangeable, il est donc évident que les intégrales dans les temps imaginaires donnent le facteur $\hbar\beta$. L'équation intégrale (1.31) mène aux transformations de Legendre de $F[j]$ par une quantité donnée par:

$$V_{eff}(X) = F[j(X)] + X j(X). \quad (1.32)$$

Cette dernière est appelée *potentiel effectif* [29]. En comparant (1.32) à l'expression (1.25), en omettant le facteur "correcteur" $\hbar\beta$, on aboutit à l'expression liant l'action effective à celle du potentiel effectif:

$$V_{eff}(X) = \frac{1}{\hbar\beta} \Gamma(X) \big|_{X(\tau) \equiv X}. \quad (1.33)$$

En effectuant la dérivée première sur (1.32) par rapport à X et en tenant compte de (1.31), on déduit l'expression du courant externe; i.e:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_{eff}(X)}{\partial X} &= \left(\frac{\partial F[j(X)]}{\partial j(X)} + X \right) \frac{\partial j(X)}{\partial X} + j(X) \\ &= j(X). \end{aligned} \quad (1.34)$$

L'énergie libre F , dans le cas d'un courant nul $j=0$, est déterminée par la minimisation du potentiel effectif par rapport à X_e selon (1.34), et on obtient de (1.32):

$$F \equiv V_{eff}(X_e), \quad (1.35)$$

où X_e détermine la condition de minimisation $\frac{\partial V_{eff}(X)}{\partial X} \big|_{x=X_e} = 0$.

L'énergie libre F est l'énergie de l'état fondamental aux basses températures $T \rightarrow 0$ (ou $\beta \rightarrow \infty$); cette dernière étant, donc, la limite du potentiel effectif aux basses

températures:

$$\mathcal{E}_0 = \lim_{T \rightarrow 0} V_{eff}(X_e). \quad (1.36)$$

1.2.3. L'action effective pour les intégrales ordinaires

L'action effective est étudiée ici en utilisant une intégrale ordinaire, i.e. pour une action (potentiel) arbitraire. Soit $S(x)$ une fonction arbitraire vérifiant la définition suivante :

$$Z(j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S(x, j)\right]. \quad (1.37)$$

Deux cas particulièrement intéressants à étudier se présentent à nous. Le premier cas concerne un courant externe j et une position x indépendants de τ , alors (1.21) devient :

$$S[x, j] = S[x] - \hbar\beta jx, \quad (1.38)$$

quant au second cas, il concerne un courant j arbitraire et une position x constante notée x_{cl} . La dérivée de $S[x, j]$ par rapport à x est donc nulle, impliquant :

$$\left. \frac{\partial S(x)}{\partial x} \right|_{x=x_{cl}} = \hbar\beta j. \quad (1.39)$$

En utilisant le développement en séries de Taylor de la fonction $S[x, j]$ au voisinage de la trajectoire classique x_{cl} appliquée à l'identité (1.38), on obtient la série :

$$S[x, j] = S[x_{cl}] + \frac{1}{2} S''[x_{cl}](\delta x)^2 + \frac{1}{6} S'''[x_{cl}](\delta x)^3 + \frac{1}{24} S^{(4)}[x_{cl}](\delta x)^4 + O(\delta x)^5, \quad (1.40)$$

où $\delta x = x - x_{cl}$ est la déviation du x_{cl} .

En insérant (1.40) dans (1.37), nous obtenons la fonction de partition (ou fonction génératrice) :

$$\begin{aligned} Z(j) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S(x_{cl}, j)\right] \int_{-\infty}^{\infty} d(\delta x) \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S''(x_{cl}) \delta x^2\right] \\ &\quad \times \left[1 - \frac{1}{6\hbar} S'''(x_{cl}) \delta x^3 - \frac{1}{24\hbar} S^{(4)}(x_{cl}) \delta x^4 + \frac{1}{72\hbar^2} [S'''(x_{cl})]^2 \delta x^6 + \dots\right], \end{aligned} \quad (1.41)$$

et en substituant l'identité [73]¹ :

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \exp\left[-\frac{\lambda}{2\hbar} x^2\right] = \frac{(n-1)!! \hbar^{n/2}}{\lambda^{(n+1)/2}}, \quad [\lambda > 0], \quad (1.42)$$

dans la fonction génératrice (1.41), on trouve [29] :

¹Voir la formule 3.461.2

$$Z(j) = \exp\left(-\frac{1}{\hbar}S(x_{cl}, j)\right)\left[\frac{1}{\sqrt{S''(x_{cl})}} - \frac{\hbar}{8} \frac{S^{(4)}(x_{cl})}{\sqrt{[S''(x_{cl})]^5}} + \frac{5\hbar}{24} \frac{[S'''(x_{cl})]^2}{\sqrt{[S''(x_{cl})]^7}} + O(\hbar^2)\right]. \quad (1.43)$$

En utilisant le développement de Taylor de la fonction $\ln(1-x)$, la fonction génératrice est transformée en :

$$Z(j) = \exp\left[-\frac{1}{\hbar}S(x_{cl}, j) - \frac{1}{2}\ln S''(x_{cl}) + \hbar\left(\frac{5}{24} \frac{[S'''(x_{cl})]^2}{[S''(x_{cl})]^3} - \frac{1}{8} \frac{S^{(4)}(x_{cl})}{[S''(x_{cl})]^2}\right) + O(\hbar^2)\right], \quad (1.44)$$

alors que l'expression de l'énergie libre, donnée par la relation $F[j] = -\frac{1}{\beta} \ln Z[j]$, est exprimée par :

$$F(j) = \frac{1}{\hbar\beta}S(x_{cl}, j) + \frac{1}{2\beta}\ln S''(x_{cl}) - \frac{\hbar}{\beta}\left(\frac{5}{24} \frac{[S'''(x_{cl})]^2}{[S''(x_{cl})]^3} - \frac{1}{8} \frac{S^{(4)}(x_{cl})}{[S''(x_{cl})]^2}\right) + O(\hbar^3). \quad (1.45)$$

Selon l'identité (1.39), on déduit que $S''(x_{cl}) = \hbar\beta \frac{\partial j}{\partial x_{cl}}$. En utilisant cette dernière ainsi que les résultats (1.31) et (1.45), nous déduisons l'expression de Taylor pour le chemin moyen :

$$X = x_{cl} - \frac{\hbar}{2} \frac{S'''(x_{cl})}{[S''(x_{cl})]^2} + \hbar^2 \left(\frac{2}{3} \frac{S'''(x_{cl})S^{(4)}(x_{cl})}{[S''(x_{cl})]^4} - \frac{5}{8} \frac{[S'''(x_{cl})]^3}{[S''(x_{cl})]^5} - \frac{1}{8} \frac{S^{(5)}(x_{cl})}{[S''(x_{cl})]^3} \right) + O(\hbar^3), \quad (1.46)$$

où en effectuant une transposition des termes, nous obtenons :

$$\begin{aligned} x_{cl} = X + \frac{\hbar}{2} \frac{S'''[X + \hbar S'''(X)/2[S''(X)]^2]}{\{S''[X + \hbar S'''(X)/2[S''(X)]^2]\}^2} \\ + \hbar^2 \left(-\frac{2}{3} \frac{S'''(X)S^{(4)}(X)}{[S''(X)]^4} + \frac{5}{8} \frac{[S'''(X)]^3}{[S''(X)]^5} + \frac{1}{8} \frac{S^{(5)}(X)}{[S''(X)]^3} \right) + O(\hbar^3). \end{aligned} \quad (1.47)$$

Par ailleurs, le développement de Taylor en puissances de $\hbar$ du dénominateur dans (1.47) au second ordre est donné par :

$$S''\left[X + \frac{\hbar}{2} \frac{S'''(X)}{[S''(X)]^2}\right] = S''(X) + \frac{\hbar}{2} \left(\frac{S'''(X)}{S''(X)} \right)^2 + O(\hbar^2), \quad (1.48)$$

où un développement au voisinage du zéro de la fonction $\frac{1}{(1+x)^2}$ est utilisé afin d'identifier la correction au second ordre de x_{cl} donnée par :

$$x_{cl} \equiv X + \hbar X_1 + \hbar^2 X_2 + O(\hbar^3). \quad (1.49)$$

En identifiant (1.49) à (1.47), on obtient les coefficients correcteurs au premier et au second ordre :

$$X_1 = \frac{1}{2} \frac{S'''(X)}{[S''(X)]^2}; \quad X_2 = -\frac{5}{12} \frac{S'''(X)S^{(4)}(X)}{[S''(X)]^4} + \frac{1}{8} \frac{[S'''(X)]^3}{[S''(X)]^5} + \frac{1}{8} \frac{S^{(5)}(X)}{[S''(X)]^3}. \quad (1.50)$$

L'énergie libre $F(j)$ est liée à l'action effective $\Gamma(X)$ par :

$$\Gamma(X) = \hbar\beta(F(X) + jX), \quad (1.51)$$

et en insérant (1.49) dans (1.45), nous déduisons que l'expression de la fonction $\Gamma(X)$ en puissance de $\hbar$ est une fonction de $S(X)$ et de ses dérivées :

$$\Gamma(X) = S(X) + \frac{\hbar}{2} \ln S''(X) + \hbar^2 \left(-\frac{1}{12} \frac{[S'''(X)]^2}{[S''(X)]^3} + \frac{1}{8} \frac{S^{(4)}(X)}{[S''(X)]^2} \right) + O(\hbar^3). \quad (1.52)$$

À la limite classique, $\hbar \rightarrow 0$, l'expression de l'action effective est réduite à celle de l'action ordinaire [29], i.e. :

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \Gamma(X) = S(X). \quad (1.53)$$

1.2.4. La méthode standard par les intégrales ordinaires

Nous nous intéressons ici à la méthode dite *standard*, (*back-ground method*), pour déterminer l'action effective à partir d'un développement en boucles (*loops*) des diagrammes de Feynman. Cette méthode a été introduite et élaborée par R. Jackiw dans le cadre de la théorie quantique des champs relativistes [74]. Elle permet de lier l'action effective d'interaction aux diagrammes de Feynman d'une particule irréductible (non tronquée) [2, 29].

Nous illustrons cette technique dans les intégrales ordinaires développées précédemment en considérant l'intégrale (1.37) sans courant externe. Le développement en séries de Taylor de la fonction $S(x)$ au voisinage du point d'origine, noté X , est donné par :

$$S(X+x) = S(X) + S'(X)\delta x + \frac{1}{2} S''(X)\delta x^2 + S^{(int)}(\delta x) \quad (1.54)$$

où $S^{(int)}(\delta x)$ est dite l'*action d'interaction*, elle est exprimée par la série :

$$S^{(int)}(\delta x) = \frac{1}{6} S'''(X)\delta x^3 + \frac{1}{24} S^{(4)}(X)\delta x^4 + \dots, \quad (1.55)$$

où l'écart est défini par $\delta x = x - X$.

En tenant compte des expressions (1.52) et (1.54), on déduit que l'action $S(X)$ correspond à l'ordre zéro pour l'action effective. Le premier ordre $S'(X)\delta x$ étant nul en l'identifiant à (1.52). Cependant, le second ordre $S''(X)\delta x^2/2$ conduit à l'expression de $\hbar \ln S''(X)/2$. Les termes d'interaction (1.55) génèrent les diagrammes de Feynman, ces derniers sont déterminés par les règles de Feynman suivants [29],

- Chaque ligne correspond à l'inverse de $S''(X)$:

$$\text{---} \equiv \frac{\hbar}{S''(X)}.$$

- Chaque vertex (sommet) ayant $n \geq 3$ lignes sortantes est représenté par la dérivée $n^{\text{ème}}$ de $S(X)$, i.e. :

$$\begin{array}{c} 2 \\ | \\ 1 \text{---} \bullet \text{---} 3 \\ | \\ n \end{array} \equiv -\frac{1}{\hbar} S^{(n)}(X).$$

Ainsi, l'action effective s'écrit :

$$\Gamma(X) = S(X) + \frac{\hbar}{2} \ln S''(X) + \Gamma^{(int)}(X), \quad (1.56)$$

où $\Gamma^{(int)}(X)$ est composée de tous les diagrammes de Feynman d'une particule irréductible compatibles avec les règles ci-dessus. Un diagramme est nommé *diagramme du vide* s'il ne possède aucune ligne (*propagateur*) ne finissant pas par un vertex. Il est appelé *particule irréductible* s'il ne mène pas à deux diagrammes distincts en coupant un propagateur d'un diagramme. L'action effective d'interaction $\Gamma^{(int)}(X)$ peut-être développée en puissance de $\hbar$ sous la forme :

$$\Gamma^{(int)}(X) = -\hbar \sum_{l=2}^{\infty} \Gamma^{(l)}(X), \quad (1.57)$$

où, dans sa représentation par les diagrammes de Feynman, $\Gamma^{(l)}(X)$ représente une particule irréductible ayant un nombre de boucles (*loops*) égal à l . Le nombre de boucles est lié au nombre de vertex par :

$$l = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N n_i - (N-1), \quad (1.58)$$

tel que N est le nombre de vertex, et n_i est le degré des vertex, i.e. le nombre des lignes sortantes du vertex [29]. Comme conséquence des règles de Feynman, la contribution des l -boucles à l'action d'interaction $\Gamma^{(int)}(X)$ est de l'ordre $\hbar \times \hbar^{n-1} = \hbar^n$. Les diagrammes d'ordre 2 et 3 sont donnés par :

$$\Gamma^{(2)}(X) = \frac{1}{8} \text{---} \bigcirc \text{---} + \frac{1}{12} \text{---} \bigcirc \text{---} \quad (1.59)$$

$$\begin{aligned} \Gamma^{(3)}(X) = & \frac{1}{8} \text{---} \bigcirc \text{---} + \frac{1}{12} \text{---} \bigcirc \text{---} + \frac{1}{48} \text{---} \bigcirc \text{---} + \frac{1}{16} \text{---} \bigcirc \text{---} \\ & + \frac{1}{8} \text{---} \bigcirc \text{---} + \frac{1}{8} \text{---} \bigcirc \text{---} + \frac{1}{24} \text{---} \bigcirc \text{---} + \frac{1}{16} \text{---} \bigcirc \text{---} \end{aligned} \quad (1.60)$$

En appliquant les règles de Feynman sur (1.59) et (1.60), on obtient l'expression analytique de l'action d'interaction :

$$\begin{aligned} \Gamma^{(int)}(X) = & \hbar^2 \left[\frac{1}{8} \frac{S^{(4)}(X)}{[S''(X)]^2} - \frac{1}{12} \frac{[S'''(X)]^2}{[S''(X)]^3} \right] + \hbar^3 \left[\frac{1}{8} \frac{S^{(6)}(X)}{[S''(X)]^3} - \frac{1}{12} \frac{S'''(X)S^{(5)}(X)}{[S''(X)]^4} \right. \\ & \left. - \frac{1}{12} \frac{[S^{(4)}(X)]^2}{[S''(X)]^2} + \frac{1}{4} \frac{[S'''(X)]^2 S^{(4)}(X)}{[S''(X)]^5} - \frac{5}{48} \frac{[S'''(X)]^4}{[S''(X)]^6} \right] + O(\hbar^4), \end{aligned} \quad (1.61)$$

Le terme en $\hbar^2$ correspond au précédent résultat établi en (1.52).

1.2.5. La méthode standard par les intégrales de chemins

L'extension de la méthode standard dans le cadre du formalisme des intégrales de chemins est possible; ce traitement est réalisable en l'appliquant sur la fonction de partition (1.37). Le développement en séries de Taylor de la fonction $S[X(\tau)]$, au voisinage de $X(\tau)$ et autour d'un écart δx , est exprimé, au quatrième ordre, par:

$$\begin{aligned} S[X + \delta x] = & S[X] + \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \frac{\delta S[X]}{\delta X(\tau_1)} \delta x(\tau_1) \\ & + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \frac{\delta^2 S[X]}{\delta X(\tau_1) \delta X(\tau_2)} \delta x(\tau_1) \delta x(\tau_2) \\ & + \frac{1}{6} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \frac{\delta^3 S[X]}{\delta X(\tau_1) \delta X(\tau_2) \delta X(\tau_3)} \delta x(\tau_1) \delta x(\tau_2) \delta x(\tau_3) \\ & + \frac{1}{24} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_4 \\ & \times \frac{\delta^4 S[X]}{\delta X(\tau_1) \delta X(\tau_2) \delta X(\tau_3) \delta X(\tau_4)} \delta x(\tau_1) \delta x(\tau_2) \delta x(\tau_3) \delta x(\tau_4) + \dots \end{aligned} \quad (1.62)$$

Par analogie à la procédure décrite précédemment, le premier ordre est nul car il vérifie les équations de Lagrange. Les autres termes dont l'ordre est supérieur à deux en δx contribuent à l'interaction $S^{(int)}[\delta x]$. Quant au second ordre, il définit la fonction de Green inversée:

$$G^{-1}(\tau_1, \tau_2) = \frac{\delta^2 S[X]}{\delta X(\tau_1) \delta X(\tau_2)}. \quad (1.63)$$

La fonction de partition (1.37) peut-être écrite sous la forme:

$$\begin{aligned} Z = & \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} S[X]\right\} \\ & \times \oint \mathcal{D}\delta x \exp\left\{-\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 G^{-1}(\tau_1, \tau_2) \delta x(\tau_1) \delta x(\tau_2) - \frac{1}{\hbar} S^{(int)}(\delta x)\right\}. \end{aligned} \quad (1.64)$$

Afin de déterminer la contribution du premier terme de la fonction de partition, nous utilisons l'identité (1.42) pour $n=0$. Pour un système à D -dimensions, l'intégrale Gaussienne (1.42) peut-être généralisée en [75]:

$$\frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int_{-\infty}^{\infty} d^D x \exp\left\{-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T A \mathbf{x}\right\} = \frac{1}{\sqrt{A}}; \quad [A = A^\dagger, \det(A) > 0] \quad (1.65)$$

où $\mathbf{x}$ et A sont, respectivement, un vecteur et une matrice à D -dimensions.

En appliquant (1.65) sur (1.64), on obtient:

$$\oint D\delta x \exp\left\{-\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 G^{-1}(\tau_1, \tau_2) \delta x(\tau_1) \delta x(\tau_2)\right\} = \frac{1}{\sqrt{\det(G^{-1})}}. \quad (1.66)$$

La fonction de Green est définie comme étant le produit de ses valeurs propres λ_k par l'intégrale:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 G^{-1}(\tau_1, \tau_2) \delta x_k(\tau_2) = M \lambda_k \delta x_k(\tau_1), \quad (1.67)$$

où $\delta x_k(\tau)$ est périodique, i.e. $\delta x_k(0) = \delta x_k(\hbar\beta)$.

Le membre de droite de (1.66) peut-être exprimé par la relation:

$$\frac{1}{\sqrt{\det(G^{-1})}} = \exp\left[-\frac{1}{2} \text{tr} \ln G^{-1}\right], \quad (1.68)$$

où

$$\text{tr} \ln G^{-1} = \sum_k \ln \lambda_k. \quad (1.69)$$

La méthode standard permet dans le cas d'un courant externe nul, en tenant compte de (1.25), d'obtenir l'expression de la fonction de partition en termes de l'action effective:

$$Z[X] = \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \Gamma[X]\right\}, \quad (1.70)$$

en négligeant les termes d'interaction $S^{(int)}[\delta x] = 0$.

Ainsi, l'action effective est approximée, au premier ordre, à:

$$\Gamma^{(0)}[X] + \Gamma^{(1)}[X] = S[X] + \frac{\hbar}{2} \text{tr} \ln G^{-1}, \quad (1.71)$$

et l'action effective complète est réduite à l'expression [29]:

$$\Gamma[X] = S[X] + \frac{\hbar}{2} \text{tr} \ln G^{-1} + \Gamma^{(int)}[X]. \quad (1.72)$$

Le terme d'ordre zéro, $S[X]$, est désigné sous le nom *niveau arbre (tree-level)*. L'action d'interaction $\Gamma^{(int)}[X]$ caractérise les diagrammes de Feynman. Les règles de Feynman respectives sont données maintenant par [29] :

- Toutes les lignes sortantes des sommets (vertex) sont dénombrées arbitrairement.
- La connexion entre la $i^{\text{ème}}$ et la $j^{\text{ème}}$ ligne correspond au propagateur $G(\tau_i, \tau_j)$:

$$\textcolor{blue}{i} \text{ --- } \textcolor{red}{j} = G(\tau_i, \tau_j), \quad (1.73)$$

où le propagateur $G(\tau_i, \tau_j)$ est définie selon l'identité:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau_i G^{-1}(\tau_k, \tau_i) G(\tau_i, \tau_j) \equiv \hbar \delta(\tau_k - \tau_j). \quad (1.74)$$

- Le résultat du produit des propagateurs est multiplié par les dérivées fonctionnelles de $S[X]$ et intégré. Un vertex d'ordre n , avec $n \geq 3$ et les lignes sortantes $i, j, k, \dots, m$, désigne la $n^{\text{ème}}$ dérivée fonctionnelle de $S[X]$ par rapport à $X(\tau_i), X(\tau_j), X(\tau_k), \dots, X(\tau_m)$ et conduit à l'intégrale:

$$\textcolor{blue}{i} \text{ --- } \textcolor{red}{j} \text{ --- } \textcolor{blue}{k} \text{ --- } \textcolor{red}{m} \rightarrow -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_i \int_0^{\hbar\beta} d\tau_j \int_0^{\hbar\beta} d\tau_k \dots \int_0^{\hbar\beta} d\tau_m \frac{\delta^n S[X]}{\delta X(\tau_i) \delta X(\tau_j) \delta X(\tau_k) \dots \delta X(\tau_m)}. \quad (1.75)$$

$S^{(int)}[X]$ est composée de tous les diagrammes de Feynman d'une particule irréductible:

$$\Gamma^{(int)}[X] = -\hbar \sum_{l=2}^{\infty} \Gamma^{(l)}(X), \quad (1.76)$$

où $l \geq 2$ désigne le nombre de boucles. En appliquant les règles de Feynman (1.73)-(1.75) sur (1.59) et (1.60), l'action d'interaction est exprimée par:

$$\begin{aligned} \Gamma^{(int)}[X] = & -\hbar \left\{ -\frac{1}{8\hbar} \int_{1234} G_{12} G_{34} \frac{\delta^4 S[X]}{\delta X_1 \delta X_2 \delta X_3 \delta X_4} \right. \\ & + \frac{1}{12\hbar^2} \int_{12\dots6} G_{12} G_{34} G_{56} \frac{\delta^3 S[X]}{\delta X_1 \delta X_3 \delta X_5} \frac{\delta^3 S[X]}{\delta X_2 \delta X_4 \delta X_6} \\ & - \frac{1}{8\hbar} \int_{12\dots6} G_{12} G_{34} G_{56} \frac{\delta^6 S[X]}{\delta X_1 \delta X_2 \delta X_3 \delta X_4 \delta X_5 \delta X_6} \\ & + \frac{1}{12\hbar^2} \int_{12\dots8} G_{12} G_{34} G_{56} G_{78} \frac{\delta^5 S[X]}{\delta X_1 \delta X_3 \delta X_5 \delta X_7 \delta X_8} \frac{\delta^3 S[X]}{\delta X_2 \delta X_4 \delta X_6} \\ & + \frac{1}{48\hbar^2} \int_{12\dots8} G_{12} G_{34} G_{56} G_{78} \frac{\delta^4 S[X]}{\delta X_1 \delta X_3 \delta X_5 \delta X_7} \frac{\delta^4 S[X]}{\delta X_2 \delta X_4 \delta X_6 \delta X_8} \\ & + \frac{1}{16\hbar^2} \int_{12\dots8} G_{12} G_{34} G_{56} G_{78} \frac{\delta^4 S[X]}{\delta X_1 \delta X_2 \delta X_3 \delta X_5} \frac{\delta^4 S[X]}{\delta X_4 \delta X_6 \delta X_7 \delta X_8} \\ & \left. - \frac{1}{8\hbar^3} \int_{12\dots\bar{0}} G_{12} G_{34} G_{56} G_{78} G_{9\bar{0}} \frac{\delta^3 S[X]}{\delta X_1 \delta X_6 \delta X_7} \frac{\delta^3 S[X]}{\delta X_4 \delta X_5 \delta X_{\bar{0}}} \frac{\delta^4 S[X]}{\delta X_2 \delta X_3 \delta X_8 \delta X_9} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{8\hbar^3} \int_{12\dots\bar{0}} G_{12} G_{34} G_{56} G_{78} G_{9\bar{0}} \frac{\delta^3 \mathbf{S}[X]}{\delta X_1 \delta X_7 \delta X_9} \frac{\delta^3 \mathbf{S}[X]}{\delta X_4 \delta X_8 \delta X_{\bar{0}}} \frac{\delta^4 \mathbf{S}[X]}{\delta X_2 \delta X_3 \delta X_5 \delta X_6} \\
& + \frac{1}{24\hbar^4} \int_{12\dots\bar{2}} G_{12} G_{34} G_{56} G_{78} G_{9\bar{0}} G_{\bar{1}\bar{2}} \frac{\delta^3 \mathbf{S}[X]}{\delta X_1 \delta X_8 \delta X_9} \frac{\delta^3 \mathbf{S}[X]}{\delta X_2 \delta X_3 \delta X_{\bar{1}}} \\
& \quad \times \frac{\delta^3 \mathbf{S}[X]}{\delta X_4 \delta X_5 \delta X_{\bar{0}}} \frac{\delta^3 \mathbf{S}[X]}{\delta X_6 \delta X_7 \delta X_{\bar{2}}} \\
& + \frac{1}{16\hbar^4} \int_{12\dots\bar{2}} G_{12} G_{34} G_{56} G_{78} G_{9\bar{0}} G_{\bar{1}\bar{2}} \frac{\delta^3 \mathbf{S}[X]}{\delta X_1 \delta X_8 \delta X_9} \frac{\delta^3 \mathbf{S}[X]}{\delta X_2 \delta X_3 \delta X_{\bar{1}}} \\
& \quad \times \frac{\delta^3 \mathbf{S}[X]}{\delta X_4 \delta X_5 \delta X_{\bar{2}}} \frac{\delta^3 \mathbf{S}[X]}{\delta X_6 \delta X_7 \delta X_{\bar{0}}} + \dots\}, \tag{1.77}
\end{aligned}$$

où, pour alléger l'écriture, nous avons adopté l'abréviation suivante:

$$\int_{123\dots n} \equiv \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \dots \int_0^{\hbar\beta} d\tau_n. \tag{1.78}$$

Nous avons désigné les chiffres supérieurs à 9 par une "barre", par exemple: $\bar{0} = 10, \bar{1} = 11, \bar{2} = 12, \dots$. Le propagateur et le champ standard sont désignés, respectivement, par $G_{ij} = G(\tau_i, \tau_j)$ et $X_i = X(\tau_i)$.

1.2.6. Évaluation du potentiel effectif

Nous démontrons ici comment le potentiel effectif peut-être déduit et calculé à partir d'un potentiel arbitraire en utilisant la méthode standard. À cet effet, et en tenant compte de (1.33), il est plus simple d'évaluer l'action effective (1.72) et (1.77) pour un *champ standard constant* $X(\tau) \equiv X$.

Pour un potentiel $V(x)$, l'action dans les temps imaginaires est donnée par (1.17). Sa première dérivée fonctionnelle s'écrit :

$$\frac{\delta \mathbf{S}[X]}{\delta X(\tau_1)} = -M \ddot{X}(\tau_1) + V'(x)|_{x=X(\tau_1)}. \tag{1.79}$$

La dérivée seconde de l'action, selon (1.63), est :

$$G^{-1}(\tau_1, \tau_2) = [-M \frac{d^2}{d\tau_1^2} + V''(x)|_{x=X(\tau_2)}] \delta(\tau_1 - \tau_2). \tag{1.80}$$

Pour $n \geq 3$, la dérivée $n^{\text{ème}}$ de l'action $\mathbf{S}[x]$ est :

$$\frac{\delta \mathbf{S}^{(n)}[X]}{\delta X(\tau_1) \delta X(\tau_2) \dots \delta X(\tau_n)} = \delta(\tau_1 - \tau_2) \delta(\tau_2 - \tau_3) \dots \delta(\tau_{n-1} - \tau_n) V^{(n)}(x)|_{x=X_n}. \tag{1.81}$$

En substituant l'identité du propagateur définie par (1.74) dans (1.80), on obtient une

équation différentielle ordinaire du second ordre pour le propagateur en présence d'une fonction de Green standard et constante $G_X(\tau, \tau_2)$:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau [-M \frac{d^2}{d\tau^2} + V''(x)] \delta(\tau_1 - \tau) G_X(\tau, \tau_2) = \hbar \delta(\tau_1 - \tau_2). \quad (1.82)$$

Cette équation peut être identifiée au problème associé à l'oscillateur harmonique en introduisant la fréquence d'essai :

$$\Omega = \sqrt{\frac{V''(X)}{M}}, \quad (1.83)$$

et qui permet d'exprimer la fonction de Green pour un potentiel arbitraire par [25, 29] :

$$G_\Omega(\tau_1, \tau_2) = \frac{\hbar}{2M\Omega} \frac{\cosh(\Omega |\tau_1 - \tau_2| - \hbar\beta \Omega/2)}{\sinh(\hbar\beta \Omega/2)}. \quad (1.84)$$

À la limite des basses températures, $T \rightarrow 0$, (1.84) devient :

$$\lim_{T \rightarrow 0} G_\Omega(\tau_1, \tau_2) = \frac{\hbar}{2M\Omega} \exp[-\Omega |\tau_1 - \tau_2|]. \quad (1.85)$$

Comme dans (1.76) pour la partie d'interaction de l'action effective, le potentiel effectif d'interaction est développé sous la forme :

$$V_{eff}^{(int)}(X) = -\hbar \sum_{l=2}^{\infty} V_{eff}^{(l)}(X), \quad (1.86)$$

où, par similitude à l'expression (1.33), chaque boucle de $V_{eff}^{(l)}(X)$ est obtenue en évaluant l'ordre de la boucle correspondante à l'action effective dans le cas d'un champ standard et constant X :

$$V_{eff}^{(l)}(X) = \frac{1}{\hbar\beta} \Gamma^{(l)}[X] |_{X(\tau) \equiv X}. \quad (1.87)$$

Pour déterminer la partie interactive du potentiel effectif pour une température arbitraire jusqu'au 3-boucles, les intégrales (1.77) sont évaluées dans un champ standard constant et les propagateurs G_{ij} sont spécifiés par (1.85). En tenant en considération (1.76), (1.86) et (1.87), l'évaluation de l'intégrale par rapport au produit des fonctions delta de Dirac (1.81) donne :

$$\begin{aligned} V_{eff}^{(int)}(X) = & \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{V^{(4)}(X)}{8\hbar} \int_1 G_{11}^2 - \frac{[V'''(X)]^2}{12\hbar^2} \int_{12} G_{12}^3 + \frac{V^{(6)}(X)}{8\hbar} \int_1 G_{11}^3 \right. \\ & - \frac{V'''(X)V^{(5)}(X)}{12\hbar^2} \int_{12} G_{11}G_{12}^3 - \frac{[V^{(4)}(X)]^2}{48\hbar^2} \int_{12} G_{12}^4 - \frac{[V^{(4)}(X)]^2}{16\hbar^2} \int_{12} G_{11}G_{22}G_{12}^4 \\ & \left. + \frac{[V'''(X)]^2 V^{(4)}(X)}{8\hbar^3} \int_{123} (G_{13}G_{12}^2G_{23}^3 + G_{12}G_{22}G_{23}G_{13}^2) \right\} \end{aligned}$$

$$-\frac{[V'''(X)]^4}{\hbar^4} \int_{1234} \left(\frac{G_{12}G_{13}G_{14}G_{23}G_{24}G_{34}}{24} + \frac{G_{13}G_{24}G_{12}^2G_{34}^2}{16} + \dots \right), \quad (1.88)$$

où nous avons utilisé les mêmes abréviations que dans (1.77). La formule (1.88) peut aussi être déduite en définissant les « nouvelles » règles de Feynman, appliquées uniquement dans le cas d'un champ standard constant, données par [29] :

- Les sommets (*vertices*) d'un diagramme sont dénombrés arbitrairement.
- La connexion entre le $i^{\text{ème}}$ et le $j^{\text{ème}}$ sommet correspond au propagateur :

$$i \bullet \text{---} \bullet j \equiv G_{\Omega}(\tau_i, \tau_j), \quad (1.89)$$

où le propagateur $G_{\Omega}(\tau_i, \tau_j)$ est définie à des températures arbitraires par (1.84) et à la température limite nulle ($T \rightarrow 0$), permettant de calculer l'énergie fondamentale, par (1.85).

- Le produit des propagateurs est évalué. i étant un vertex d'ordre n , avec $n \geq 3$; ceci nous conduit à l'intégrale :

$$1 \text{---} \overset{2}{\underset{n}{\bullet}} \text{---} 3 \rightarrow -\frac{V^{(n)}(X)}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_i. \quad (1.90)$$

Afin de déterminer l'expression analytique du potentiel effectif (1.88) à des températures arbitraires, il est nécessaire d'évaluer les intégrales correspondantes à 2-boucles. Les deux premières intégrales de (1.88) sont évaluées grâce aux règles de Feynman conduisant au résultat :

$$V_{\text{eff}}^{(2)}(X) = -\frac{\hbar}{8} \frac{V^{(4)}(X)}{(2M\Omega)^2} \frac{1}{\tanh^2(\hbar\beta\Omega/2)} + \frac{1}{12\beta} \frac{[V'''(X)]^2}{(2M\Omega)^3} \frac{1}{\sinh^3(\hbar\beta\Omega/2)} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \cosh^3(\omega|\tau_1 - \tau_2| - \frac{\hbar\beta}{2}). \quad (1.91)$$

L'intégrale double en (1.91) est évaluée donnant le résultat :

$$V_{\text{eff}}^{(2)}(X) = -\frac{\hbar}{8} \frac{V^{(4)}(X)}{(2M\Omega)^2} \frac{1}{\tanh^2(\hbar\beta\Omega/2)} + \frac{\hbar}{6} \frac{[V'''(X)]^2}{\Omega(2M\Omega)^3} \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{\sinh^3(\hbar\beta\Omega/2)} \right], \quad (1.92)$$

où, aux basses températures, (1.92) se simplifie en :

$$\lim_{T \rightarrow 0} V_{\text{eff}}^{(2)}(X) = V(X) + \frac{\hbar\Omega}{2} + \frac{\hbar^2}{8} \frac{V^{(4)}(X)}{(2M\Omega)^2} - \frac{\hbar^2}{18} \frac{[V^{(4)}(X)]^2}{8\Omega(2M\Omega)^3} + \mathcal{O}(\hbar^3). \quad (1.93)$$

Le résultat précédent est étendu au troisième ordre en évaluant les diagrammes de Feynman à des températures zéro. Ainsi, les huit autres intégrales dans (1.88) sont calculées en tenant compte du propagateur (1.85) donnant :

$$\begin{aligned}
\lim_{T \rightarrow 0} V_{eff}^{(3)}(X) = & -\frac{\hbar^2}{8} \frac{V^{(6)}(X)}{(2M\Omega)^3} + \frac{\hbar}{12\beta} \frac{V'''(X)V^{(5)}(X)}{(2M\omega)^4} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \exp(-3\Omega|\tau_1 - \tau_2|) \\
& + \frac{\hbar}{\beta} \frac{[V^{(4)}(X)]^2}{(2M\omega)^4} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \left[\frac{1}{48} \exp(-4\Omega|\tau_1 - \tau_2|) + \frac{1}{16} \exp(-2\Omega|\tau_1 - \tau_2|) \right] \\
& - \frac{\hbar}{8\beta} \frac{V^{(4)}(X)[V'''(X)]^2}{(2M\omega)^5} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \left[\exp(-2\Omega|\tau_1 - \tau_2| - \Omega|\tau_1 - \tau_3| - 2\Omega|\tau_2 - \tau_3|) \right. \\
& \quad \left. + \exp(-\Omega|\tau_1 - \tau_2| - 2\Omega|\tau_1 - \tau_3| - \Omega|\tau_2 - \tau_3|) \right] \\
& + \frac{\hbar}{\beta} \frac{[V'''(X)]^4}{(2M\omega)^6} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_4 \\
& \quad \left[\frac{1}{16} \exp(-\Omega|\tau_1 - \tau_2| - 2\Omega|\tau_1 - \tau_4| - 2\Omega|\tau_2 - \tau_3| - \Omega|\tau_3 - \tau_4|) \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{24} \exp(-2\Omega|\tau_1 - \tau_2| - \Omega|\tau_1 - \tau_3| - \Omega|\tau_1 - \tau_4| - \Omega|\tau_2 - \tau_3| - \Omega|\tau_2 - \tau_4| - \Omega|\tau_3 - \tau_4|) \right].
\end{aligned} \tag{1.94}$$

À cause du caractère causale de la fonction de Green dans (1.84), les intégrales multiples dans (1.94) sont calculées en décomposant l'intégrale double en deux parties ($2 = 2!$), l'intégrale triple en six parties ($6 = 3!$) et enfin l'intégrale quadruple en 24 ($= 4!$). Après un long calcul, le potentiel effectif à 3-boucles est exprimé sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}
\lim_{T \rightarrow 0} V_{eff}^{(3)}(X) = & -\frac{\hbar^2}{8} \frac{V^{(6)}(X)}{(2M\Omega)^3} + \frac{\hbar^2}{18} \frac{V'''(X)V^{(5)}(X)}{\Omega(2M\Omega)^4} + \frac{7\hbar^2}{96} \frac{[V^{(4)}(X)]^2}{\Omega(2M\Omega)^4} \\
& - \frac{13\hbar^2}{72} \frac{V^{(4)}(X)[V'''(X)]^2}{\Omega^2(2M\Omega)^5} + \frac{17\hbar^2}{216} \frac{[V'''(X)]^4}{\Omega^3(2M\Omega)^6}.
\end{aligned} \tag{1.95}$$

En combinant les équations (1.93) et (1.95) en tenant compte de (1.86), on obtient l'expression du potentiel effectif au troisième ordre en $\hbar$, pour un potentiel arbitraire $V(x)$, aux basses températures :

$$\begin{aligned}
\lim_{T \rightarrow 0} V_{eff}(X) = & V(X) + \hbar \frac{\Omega}{2} + \hbar^2 \left[\frac{1}{8} \frac{V^{(4)}(X)}{(2M\Omega)^2} - \frac{1}{18} \frac{[V'''(X)]^2}{8\Omega(2M\Omega)^3} \right] + \hbar^3 \left[\frac{1}{8} \frac{V^{(6)}(X)}{(2M\Omega)^3} \right. \\
& - \frac{1}{18} \frac{V'''(X)V^{(5)}(X)}{\Omega(2M\Omega)^4} - \frac{7}{96} \frac{[V^{(4)}(X)]^2}{\Omega(2M\Omega)^4} + \frac{13}{72} \frac{V^{(4)}(X)[V'''(X)]^2}{\Omega^2(2M\Omega)^5} \\
& \left. - \frac{17}{216} \frac{[V'''(X)]^4}{\Omega^3(2M\Omega)^6} \right] + O(\hbar^4).
\end{aligned} \tag{1.96}$$

1.3. Les potentiels PT-symétriques: Applications

L'opérateur Hamiltonien H joue un rôle fondamental en mécanique quantique; il spécifie d'une part le spectre des niveaux d'énergie, d'autre part, l'évolution du système étudié. Pour assurer la réalité du premier et unitarité du second, la mécanique quantique s'est construite autour de l'axiome selon lequel H est *hermétique*. Cependant, il existe des Hamiltoniens non hermétiques [42, 43, 44, 45, 46, 47] et dont le spectre est entièrement réel [23, 24]. Ces Hamiltoniens vérifient la condition d'être invariants sous les transformations combinées de *réflexion* P et *renversement du temps* T , c'est-à-dire qu'ils commutent avec le produit discret PT , définis par leurs actions sur les opérateurs positions et impulsions par:

$$\begin{aligned} P: x &\rightarrow -x, & p &\rightarrow -p, \\ T: x &\rightarrow x, & p &\rightarrow p, & i &\rightarrow -i, \end{aligned}$$

où les opérateurs x et p sont réels. Ici, la relation de commutation $[x, p] = i$, ($\hbar = 1$), est invariante sous PT , vérifiant ainsi l'invariance de l'algèbre d'Heisenberg-Weyl.

La symétrie PT a ouvert la voie à de nombreux travaux de recherches sur le sujet. Initiée principalement par les travaux de Bender et Boettcher [42] qui ont étudié des Hamiltoniens de la forme $H = p^2 + x^2(ix)^\lambda$ (λ est réel). Ils ont montré que le spectre est réel et positif pour $\lambda > 0$, et qu'une transition de phase survient en $\lambda \leq 0$, aussi bien au niveau classique que quantique, suivi d'une *brisure spontanée de la symétrie* PT du système quantique. Ce cas correspond à un basculement du spectre de H dans le domaine complexe. La tentative de construire une théorie quantique viable à partir de tels Hamiltoniens se heurte à la non positivité du produit scalaire défini de PT . Cependant, il a été démontré que pour un système dont la symétrie PT est non brisée, il suffit de lui correspondre une symétrie du Hamiltonien décrite par l'opérateur C , analogue à la conjugaison de charge dans la théorie quantique des champs. Celui-ci permet de construire, via le produit CPT [47], un nouveau produit scalaire défini positif pour lequel les normes des états sont positives et l'évolution temporelle est unitaire. De tels Hamiltoniens apparaissent en biologie des populations [76] et en physique des supraconducteurs [77]. Ils présentent également un grand intérêt dans le domaine de la théorie quantique des champs à symétries brisées [78]. Dans cette première partie, ces potentiels feront l'objet d'étude et d'application.

1.3.1. Exemple : Oscillateur anharmonique complexe

Considérons le potentiel de l'oscillateur anharmonique complexe unidimensionnel avec une anharmonicité cubique et invariant sous la transformation PT [24, 27, 29] :

$$V(x) = \frac{M}{2} \omega^2 x^2 + igx^3, \quad (1.97)$$

où g est une constante de couplage.

Ce potentiel a la propriété d'être un système physique non trivial, ceci complique le calcul analytique du spectre d'énergie, d'où l'utilité d'appliquer la méthode standard. Pour cela, il suffit de remplacer les dérivées des potentiels arbitraires des paragraphes

précédents par leurs valeurs correspondantes au potentiel (1.97). Rappelons que le propagateur $G_\Omega(\tau_1, \tau_2)$ du potentiel de l'oscillateur anharmonique pour des températures arbitraires est donné par (1.84), et à des températures zéro par (1.85). En appliquant (1.83) sur le potentiel (1.97), la fréquence d'essai Ω est exprimée par :

$$\Omega = \omega \sqrt{1 + \frac{6igX}{M\omega^2}}. \quad (1.98)$$

En appliquant sur (1.97) les identités (1.84) et (1.85), nous obtenons le potentiel effectif dépendant de la température au second ordre en $\hbar$:

$$V_{eff}(X) = \frac{M}{2} \omega^2 X^2 + igX^3 + \frac{1}{\beta} \ln(2 \sinh \frac{\hbar\beta\Omega}{2}) - \frac{\hbar^2}{6\Omega} \frac{(6ig)^2}{(2M\Omega)^2} \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{\sinh^2(\hbar\beta\Omega/2)} \right]. \quad (1.99)$$

Selon l'identité (1.35), il est possible d'obtenir l'énergie libre en évaluant (1.99) pour un chemin moyen X minimisant le potentiel effectif. Puisque nous avons affaire à des corrections du second ordre en $\hbar$, le chemin moyen peut-être développé sous la forme [29] :

$$X = i(X_0^{(N)} + \hbar X_1^{(N)} + \hbar^2 X_2^{(N)}) + O(\hbar^3), \quad (1.100)$$

Insérons cette identité dans la première dérivée de (1.99), développons cette dernière en puissances de $\hbar$, et égalons l'expression obtenue à zéro conduit à un système de trois équations, chaque équation correspond à un ordre en $\hbar$. Ce système peut être résolu donnant les expressions de $X_i^{(N)}|_{N=1}$, (où $i = 0, 1, 2$) :

$$X_0^{(1)} = 0, \quad X_1^{(1)} = -\frac{3}{2} \frac{g}{M^2 \omega^3}, \quad X_2^{(1)} = \frac{33}{2} \frac{g^3}{M^5 \omega^8}. \quad (1.101)$$

Étendre le calcul précédent au troisième ordre en utilisant (1.96) est tout à fait réalisable. En effet, à cause du fait que toutes les dérivées du potentiel anharmonique d'ordre 4 et plus s'annulent, les termes contenant $V^{(5)}(X)$ et $V^{(6)}(X)$ dans (1.96) ne contribuent pas au calcul. Ainsi, le potentiel effectif correspondant au potentiel (1.97) à des basses températures au troisième ordre en $\hbar$ s'écrit :

$$\lim_{T \rightarrow 0} V_{eff}(X) = \frac{M}{2} \omega^2 X^2 + igX^3 + \frac{\hbar\beta}{2} + \frac{\hbar^2}{18\Omega} \frac{(6g)^2}{(2M\Omega)^3} - \frac{17\hbar^3}{216\Omega^3} \frac{(6g)^4}{(2M\Omega)^6} + O(\hbar^4). \quad (1.102)$$

En insérant (1.101) dans (1.102), en tenant compte de (1.100), et en effectuant un développement jusqu'au troisième ordre en $\hbar$, on obtient l'expression de l'énergie :

$$\mathcal{E}_0 = \hbar \frac{\omega}{2} + \hbar^2 \frac{11}{8} \frac{g^2}{M^3 \omega^4} - \hbar^3 \frac{465}{32} \frac{g^4}{M^6 \omega^9} + O(\hbar^4). \quad (1.103)$$

Nous verrons par la suite que le résultat (1.103) peut être déduit en appliquant d'autres méthodes perturbatives. Le dernier chapitre de cette première partie sera consacré au calcul des états fondamentaux d'énergie aux potentiels anharmoniques multidimensionnels.

1.3.2. La théorie des perturbations : Diagrammes de Feynman

La fonction de partition du potentiel (1.97) :

$$Z = \oint Dx \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2(\tau) + \frac{M}{2} \omega^2 x^2(\tau) + Ig x^3(\tau) \right] \right\} \quad (1.104)$$

peut-être calculée par la méthode des perturbations grâce à un développement en termes de la constante de couplage g . La première étape consiste à séparer la partie harmonique de la partie anharmonique de Z , et le développement de la fonction exponentielle conduit à [2] :

$$Z = \oint Dx \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2(\tau) + \frac{M}{2} \omega^2 x^2(\tau) \right] \right\} \\ \times \left[1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 [Ig x^3(\tau_1)] + \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 [Ig x^3(\tau_1)][Ig x^3(\tau_2)] + \dots \right], \quad (1.105)$$

L'utilisation du produit de convolution :

$$\langle \blacksquare \rangle_\omega = \frac{1}{Z_\omega} \oint Dx(\blacksquare) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2(\tau) + \frac{M}{2} \omega^2 x^2(\tau) \right] \right\}, \quad (1.106)$$

où Z_ω est la fonction de partition de la particule libre, permet d'exprimer la fonction de partition (1.105) par [2, 29] :

$$Z = Z_\omega \left[1 - \frac{g^2}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \langle x^3(\tau_1) x^3(\tau_2) \rangle_\omega + O(g^4) \right]. \quad (1.107)$$

Le produit de convolution d'un nombre paire de chemins est transformé en appliquant les règles de Wick [2] ; i.e.

- Le produit de convolution d'un produit de deux chemins correspond au propagateur :

$$G_\omega(\tau_1, \tau_2) = \langle x(\tau_1) x(\tau_2) \rangle_\omega. \quad (1.108)$$

Le produit de convolution d'un produit de n -chemins est défini par la somme des $(n-1)$ -produits des propagateurs et des $(n-2)$ -produits de convolution :

$$\langle x_1, x_2, x_3, \dots, x_n \rangle_\omega = G_\omega(\tau_1, \tau_2) \langle x_3, x_4, \dots, x_n \rangle_\omega + G_\omega(\tau_1, \tau_3) \langle x_2, x_4, \dots, x_n \rangle_\omega \\ + \dots + G_\omega(\tau_1, \tau_n) \langle x_2, x_3, \dots, x_{n-1} \rangle_\omega. \quad (1.109)$$

où $x_i \equiv x(\tau_i)$, avec $i = 1, 2, \dots, n$. En appliquant les règles de Wick (1.108) et (1.109), le produit de convolution donné en (1.107) devient :

$$\langle x^3(\tau_1) x^3(\tau_2) \rangle_\omega = 9G_\omega(\tau_1, \tau_1)G_\omega(\tau_1, \tau_2)G_\omega(\tau_2, \tau_2) + 6G_\omega^3(\tau_1, \tau_2). \quad (1.110)$$

En insérant (1.110) dans (1.107), on déduit l'expression de l'énergie libre :

$$\mathcal{E}_0 = \frac{\hbar\omega}{2} + g^2 \frac{11}{8} \frac{\hbar^2}{M^3\omega^4} - g^4 \frac{465}{32} \frac{\hbar^3}{M^6\omega^9} + \mathcal{O}(g^6). \quad (1.117)$$

La relation (1.117) est identique à (1.103), à la différence que la première a été déduite par un développement en g tandis que la seconde en $\hbar$. Cette différence est due au fait que l'expression (1.117) est fondée sur les *diagrammes du vide connectés et non tronqués* (voir (1.115)) alors que (1.103) est fondé sur des *diagrammes connectés et tronqués* ou (*diagramme de vide d'une particule irréductible*) (voir (1.59) et (1.60)).

1.3.3. La méthode de Bender-Wu : Relations de récurrence

Des méthodes de récurrence ont été introduites afin de déduire la série des diagrammes de Feynman en énergie sans avoir, explicitement, à évaluer aucun diagramme. Cette méthode, approximative, a été introduite et développée par C. M. Bender et T. T. Wu [52] dans le but de résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans les années 1969-1973.

Dans un développement perturbatif, la fonction d'onde de l'état fondamental d'un oscillateur est donnée par :

$$\psi(x) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{M\omega}{2\hbar}x^2\right)[1 + \phi(x)], \quad (1.118)$$

où, en termes des cumulants, (1.118) peut être écrite sous l'hypothèse :

$$\psi(x) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{M\omega}{2\hbar}x^2 + \phi(x)\right]. \quad (1.119)$$

La correction de la fonction d'onde $\phi(x)$ n'est pas bien déterminée, nécessitant un développement en puissances de la constante de couplage g :

$$\phi(x) = \sum_{k=1}^{\infty} g^k \phi_k(x). \quad (1.120)$$

Pour un potentiel anharmonique complexe, d'anharmonicité cubique,

$$V(x) = \frac{M}{2} \omega^2 x^2 + igx^3, \quad (1.121)$$

l'équation de Schrödinger indépendante du temps est :

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \psi''(x) + \left[\frac{M}{2} \omega^2 x^2 + igx^3\right] \psi(x) = E \psi(x). \quad (1.122)$$

En insérant la fonction d'onde (1.119) dans l'équation de Schrödinger (1.122), on obtient une équation différentielle ordinaire en termes de la correction $\phi(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \phi''(x) + \hbar\omega\phi'(x) - \frac{\hbar^2}{2M} [\phi'(x)]^2 + igx^3 = \varepsilon, \quad (1.123)$$

où ε dénote la correction perturbative de l'énergie à l'état fondamental. Elle est donnée

par :

$$\begin{aligned}\mathcal{E} &= \frac{\hbar\omega}{2} + \varepsilon \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} g^k \varepsilon_k.\end{aligned}\quad (1.124)$$

En substituant (1.120) dans (1.123) et en identifiant les termes égaux en puissances de g , on déduit une équation différentielle ordinaire en fonction de $\phi_k(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \phi_k''(x) + \hbar\omega x \phi_k'(x) - \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{l=1}^{k-1} \phi_{k-l}'(x) \phi_l'(x) + i x^3 \delta_{k,l} = \varepsilon_k, \quad (1.125)$$

où $\delta_{k,l}$ est le symbole de Kronecker. Résoudre l'équation différentielle (1.125) revient à supposer que la fonction $\phi_k(x)$ est un polynôme vérifiant l'identité suivante :

$$\phi_k(x) = \sum_{m=1}^{k+2} c_m^{(k)} x^m, \quad (1.126)$$

où $c_m^{(k)}$ sont des coefficients, réels et/ou imaginaires, à déterminer. Ici, les coefficients constants $c_0^{(k)}$ ont été omis alors qu'ils peuvent être déterminés, uniquement, une fois que la fonction d'onde $\psi(x)$ est normalisée. En insérant (1.126) dans (1.125), on trouve aux deux premiers ordres :

- Pour $k = 1$:

$$c_1^{(1)} = -\frac{i}{M\omega^2}, \quad c_2^{(1)} = 0, \quad c_3^{(1)} = -\frac{i}{3\hbar\omega}, \quad \varepsilon_1 = 0. \quad (1.127)$$

- Pour $k = 2$:

$$c_1^{(2)} = 0, \quad c_2^{(2)} = -\frac{7}{8M^2\omega^4}, \quad c_3^{(2)} = 0, \quad c_4^{(2)} = -\frac{i}{8M\hbar\omega^3}, \quad \varepsilon_2 = \frac{11\hbar^2}{8M^3\omega^4}. \quad (1.128)$$

Pour le cas général $k \geq 3$, il est utile d'écrire (1.126) sous la forme :

$$\phi_k(x) = \sum_{m=1}^{\infty} c_m^{(k)} x^m, \quad \text{avec } c_m^{(k)} \equiv 0 \text{ pour } m > k+2, \quad (1.129)$$

permettant d'appliquer la *règle du produit de Cauchy* sur le produit des dérivées dans (1.125). Les solutions récursives pour $\phi_k(x)$ et ε_k sont, respectivement [29] :

$$c_m^{(k)} = \frac{(m+2)(m+1)\hbar}{2mM\omega} c_{m+2}^{(k)} + \frac{\hbar}{2mM\omega} \sum_{l=1}^{k-1} \sum_{n=1}^{m+1} n(m+2-n) c_n^{(l)} c_{m+2-n}^{(k-l)}, \quad (1.130)$$

$$\varepsilon_k = -\frac{\hbar^2}{M} c_2^{(k)} - \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{l=1}^{k-1} c_1^{(l)} c_1^{(k-l)}. \quad (1.131)$$

L'application de (1.130) et (1.131) conduit à la détermination des coefficients et la

correction d'énergie au troisième et au quatrième ordre :

- Pour $k = 3$:

$$c_1^{(3)} = \frac{5i}{M^4 \omega^7}, \quad c_2^{(3)} = 0, \quad c_3^{(3)} = \frac{13i}{12M^3 \omega^6}, \quad c_4^{(3)} = 0, \quad c_5^{(3)} = \frac{i}{10M^2 \hbar \omega^5}, \quad \varepsilon_3 = 0. \quad (1.132)$$

- Pour $k = 4$:

$$c_1^{(4)} = 0, \quad c_2^{(4)} = \frac{305\hbar}{32M^5 \omega^9}, \quad c_3^{(4)} = 0, \quad c_4^{(4)} = \frac{99}{64M^4 \omega^8},$$

$$c_5^{(4)} = 0, \quad c_6^{(4)} = \frac{5}{48M^3 \hbar \omega^7}, \quad \varepsilon_4 = -\frac{465\hbar^3}{32M^6 \omega^9}. \quad (1.133)$$

En substituant (1.127), (1.128), (1.132) et (1.133) dans (1.124) et en comparant avec (1.117) et (1.104), nous constatons que le résultat obtenu par les méthodes de récurrence de Bender-Wu est en effet identique à celui obtenu par les diagrammes de Feynman et par la méthode standard pour le potentiel effectif.

CHAPITRE 2

RESOMMATION DES POTENTIELS EFFECTIFS AUX FORTS COUPLAGES

Une grande partie des systèmes physiques n'acceptent pas un traitement exacte puisque les équations fondamentales ne peuvent pas être résolues analytiquement. La méthode approximative et viable généralement appliquée dans ce cas est la théorie des perturbations [2, 17, 21, 22]. Cette méthode est basée sur le fait qu'une quantité physique Q , par exemple l'énergie de l'état fondamental d'une particule soumise à un potentiel arbitraire, est connue pour une certaine valeur g_0 de la constante de couplage g .

Une approximation de la quantité physique Q comme une fonction de la constante de couplage g est alors obtenue en développant Q en puissances de g à l'ordre N :

$$Q_N(g) = \sum_{n=0}^N a_n g^n. \quad (2.1)$$

Obtenir des résultats satisfaisants pour toutes les valeurs de la constante de couplage, y compris aux cas des forts couplages ($g \rightarrow \infty$), nécessite une resommation des séries d'énergie [20, 26, 27, 28, 29]. Les approximants de *Padé* [30, 31, 32], déduits d'un rapport de deux séries entières, constituent une méthode « directe » pour de telles resommations. En mécanique quantique, nous avons affaire, souvent, à la méthode variationnelle [15, 16, 17, 18, 19]. Par exemple, la méthode dite *développement en δ* , permet de resommer les séries perturbatives divergentes. Cette méthode consiste à introduire artificiellement le terme de l'oscillateur harmonique dans le potentiel et optimiser par rapport à la fréquence d'essai Ω de l'oscillateur artificiel. Cette technique est appelée *la théorie des perturbations variationnelles* [25]. Elle permet l'évaluation des séries divergentes de la forme (2.1) pour toutes les valeurs de la constante de couplage g , incluant les forts couplages, et conduit à un développement aux forts couplages ayant une forme générique :

$$Q(g) = g^{p/q} \sum_{m=0}^M b_m g^{-2m/q}, \quad (2.2)$$

où p et q sont des paramètres réels et qui caractérisent le comportement aux forts couplages. Dû à des raisons dimensionnelles, p et q sont des nombres entiers.

2.1. La limite des forts couplages

Bien que la théorie des perturbations variationnelles est employée pour accroître la précision des approximations obtenues en évaluant des séries aux faibles couplages, son but principal consiste à resommer ces séries aux forts couplages.

À cet effet, nous considérons la série perturbative (2.1) pour une quantité physique Q arbitraire. En introduisant un paramètre d'échelle κ , la série (2.1) peut-être écrite:

$$Q_N(g) = \kappa^p \sum_{n=0}^N a_n \left(\frac{g}{\kappa^q} \right)^n \Big|_{\kappa=1}. \quad (2.3)$$

Les paramètres p et q déterminent, en effet, le comportement aux forts couplages de Q comme il a été indiqué dans (2.2). En substituant le paramètre de resommation de Kleinert [2]:

$$\kappa = K \sqrt{1 + gr}, \quad \text{avec } r = \frac{\kappa^2 - K^2}{gK^2}, \quad (2.4)$$

dans (2.3), le paramètre variationnel K est introduit dans la série perturbative:

$$Q_N(g) = \sum_{n=0}^N a_n g^n K^{p-nq} (1 + gr)^{(p-nq)/2} \Big|_{\kappa=1}. \quad (2.5)$$

La série de Taylor du terme $(1 + gr)^s$ avec $s \equiv (p - nq)/2$ s'écrit sous la forme:

$$(1 + gr)^s \Big|_{\kappa=1} = \sum_{k=0}^{N-n} \binom{s}{k} \left(\frac{1}{K^2} - 1 \right)^k + O(g^{N-n+1}), \quad (2.6)$$

où le coefficient binomial généralisé est donné par:

$$\binom{s}{k} \equiv \frac{\Gamma(s+1)}{\Gamma(k+1)\Gamma(s-k+1)}, \quad (2.7)$$

où $\Gamma(s+1) = s\Gamma(s)$ est la fonction gamma d'Euler [57]. La série (2.6) est tronquée à l'ordre $k = N - n$ puisque la fonction $Q_N(g)$ est connue uniquement à l'ordre g^N . Comme conséquence de cette troncation, la fonction $Q_N(g)$ dépend aussi du paramètre variationnel K :

$$Q_N(g, K) = \sum_{n=0}^N a_n g^n K^{p-nq} \sum_{k=0}^{N-n} \binom{(p-nq)/2}{k} \left(\frac{1}{K^2} - 1 \right)^k. \quad (2.8)$$

Puisque la dépendance du paramètre K est essentiellement due à la troncation, on s'attend à ce que le meilleur moyen d'approximer la quantité physique $Q(g)$ est de minimiser l'influence du paramètre variationnel K . Pour cela, il suffit de chercher les extrémums locaux; c'est-à-dire, on détermine K en appliquant la différentielle:

$$\frac{\partial Q_N(g, K)}{\partial K} \Big|_{K=K^{(N)}(g)} = 0. \quad (2.9)$$

De toutes les solutions de (2.9), on tient compte uniquement des solutions acceptables physiquement, c'est-à-dire réelles et positives. Selon la condition (2.9), il a été démontré que le paramètre variationnel $K^{(N)}$ a un comportement aux forts couplages de la forme [26]:

$$\mathbf{K}^{(N)}(g) = g^{1/q} (\mathbf{K}_0^{(N)} + \mathbf{K}_1^{(N)} g^{-2/q} + \mathbf{K}_2^{(N)} g^{-4/q} + \dots). \quad (2.10)$$

Le paramètre variationnel $\mathbf{K}$ est donc indépendant de N et seulement les coefficients $\mathbf{K}_m^{(N)}$, où $m = 0, 1, 2, \dots$, dépendent de N . La substitution de (2.10) dans (2.8) conduit au comportement aux forts couplages de l'approximation $\mathbf{Q}_N(g, \mathbf{K})$ pour la quantité $\mathbf{Q}$:

$$\mathbf{Q}_N(g, \mathbf{K}^{(N)}(g)) = g^{p/q} [b_0^{(N)}(\mathbf{K}_0^{(N)}) + b_1^{(N)}(\mathbf{K}_0^{(N)}, \mathbf{K}_1^{(N)}) g^{-2/q} + b_2^{(N)}(\mathbf{K}_0^{(N)}, \mathbf{K}_1^{(N)}, \mathbf{K}_2^{(N)}) g^{-4/q} + \dots], \quad (2.11)$$

où $b_m^{(N)}$ sont des coefficients qui permettent de déterminer le comportement aux forts couplages. Les fractions p/q et $2/q$ caractérisent, respectivement, la puissance de la constante de couplage g et le paramètre d'échelle. Le coefficient $b_0^{(N)}$, souvent appelé *principal*, est donné par:

$$b_0^{(N)}(\mathbf{K}_0^{(N)}) = \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^{N-n} \binom{(p-nq)/2}{k} (-1)^k a_n(\mathbf{K}_0^{(N)})^{p-nq}. \quad (2.12)$$

Le coefficient principal (2.12) peut-être réduit à [29]:

$$b_0^{(N)}(\mathbf{K}_0^{(N)}) = \sum_{n=0}^N (-1)^{N-n} \binom{(p-nq)/2}{N-n} a_n(\mathbf{K}_0^{(N)})^{p-nq}, \quad (2.13)$$

une fois que la somme interne dans (2.12) est introduite sous l'identité [73]²:

$$\sum_{n=0}^m (-1)^k \binom{\alpha}{k} = (-1)^m \binom{\alpha-1}{m} \quad (2.14)$$

2.2. Potentiel complexe à anharmonicité cubique

L'équation de Schrödinger pour un potentiel complexe anharmonique (1.97), prise dans les unités naturelles ($\hbar = M = 1$), est donnée par:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + [\frac{1}{2} \omega^2 x^2 + i g x^3] \psi(x) = \mathbf{E} \psi(x). \quad (2.15)$$

La substitution $x \rightarrow \alpha^{-1/5} x$, où $\alpha = g^2$, transforme l'équation (2.15) à:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + [\frac{1}{2} g^{-4/5} \omega^2 x^2 + i x^3] \psi(x) = g^{-2/5} \mathbf{E} \psi(x). \quad (2.16)$$

Nous développons la fonction d'onde ainsi que la série du spectre d'énergie en puissances de la constante de couplage, respectivement:

$$\psi(x) = \psi_0(x) + g^{-4/5} \psi_1(x) + g^{-8/5} \psi_2(x) + \dots, \quad (2.17)$$

²Voir la formule 0.151.4

$$E = g^{2/5} b_0 + g^{-2/5} b_1 + g^{-6/5} b_2 + \dots, \quad (2.18)$$

où b_α , avec $\alpha = 1, 2, \dots$, sont les coefficients de correction de l'énergie aux forts couplages. La substitution des expressions (2.17) et (2.18) dans (2.16) permet d'établir la relation liant le coefficient b_0 et la valeur de l'énergie à l'état fondamental aux forts couplages. La valeur numérique a été calculée par C. M. Bender [42] et valant:

$$b_0 = 0.76285177 \dots \quad (2.19)$$

2.2.1. La resommation de l'énergie de l'état fondamental

La resommation de l'énergie de l'état fondamental aux forts couplages en termes de la constante de couplage g passe impérativement par la connaissance de l'expression de l'énergie aux faibles couplages, cette dernière à pour expression (1.117) :

$$\mathcal{E} = \omega \left(\frac{\hbar}{2} + \alpha \frac{11}{8} \frac{\hbar^2}{M^3 \omega^6} - \alpha^2 \frac{465}{32} \frac{\hbar^3}{M^6 \omega^{10}} + \dots \right), \quad (2.20)$$

où nous avons remplacé g^2 par α .

En comparant (2.20) à (2.3) et en identifiant la fréquence d'oscillation ω au paramètre d'échelle κ , on obtient $p = 1$ et $q = 5$. Ainsi, et selon (2.11), le comportement aux forts couplages de l'énergie fondamentale du potentiel anharmonique est de la forme :

$$\mathcal{E}^{(N)} = \alpha^{1/5} (b_0^{(N)} + b_1^{(N)} \alpha^{-2/5} + b_2^{(N)} \alpha^{-4/5} + \dots). \quad (2.21)$$

Le premier ordre aux faibles couplages est donné par les deux premiers termes de (2.20) et l'application du paramètre de Kleinert :

$$\omega \rightarrow \Omega \sqrt{1 + \alpha r}, \quad \text{avec } r = \frac{\omega^2 - \Omega^2}{\alpha \Omega^2}, \quad (2.22)$$

permet de retrouver une nouvelle expression de l'énergie en fonction de la fréquence d'essai Ω :

$$\mathcal{E}^{(1)} = \frac{\hbar \Omega}{2} + \frac{\hbar \omega^2}{4 \Omega} + \alpha \frac{11}{8} \frac{\hbar^2}{M^3 \Omega^4}. \quad (2.23)$$

En minimisant $E^{(1)}(\Omega)$ par rapport au paramètre variationnel Ω et en égalant l'expression obtenue à zéro, on obtient l'équation :

$$(\Omega^{(1)})^5 - \omega^2 (\Omega^{(1)})^3 - \alpha \frac{22 \hbar}{M^3} = 0. \quad (2.24)$$

En identifiant $\Omega^{(1)}$ aux forts couplages à celle (2.21), avec $N = 1$,

$$\Omega^{(1)} = \alpha^{1/5} (\Omega_0^{(1)} + \Omega_1^{(1)} \alpha^{-2/5} + \Omega_2^{(1)} \alpha^{-4/5} + \dots), \quad (2.25)$$

et en substituant cette dernière dans (2.24), on déduit les corrections $\Omega_i^{(1)}$:

$$\Omega_0^{(1)} = \sqrt[5]{\frac{22\hbar}{M^3}}, \quad \Omega_1^{(1)} = \frac{\omega^2}{5} \sqrt[5]{\frac{M^3}{22\hbar}}, \quad \Omega_2^{(1)} = \frac{\omega^4 M}{25} \sqrt[5]{\frac{M^4}{10648\hbar^3}}, \quad \dots \quad (2.26)$$

En insérant (2.26) dans (2.24), nous obtenons le comportement de l'énergie aux forts couplages et dont les coefficients correspondants sont donnés par [29] :

$$b_0^{(1)} = \frac{5\hbar}{16} \sqrt[5]{\frac{22\hbar}{M^3}}, \quad b_1^{(1)} = 4\hbar\omega^2 \sqrt[5]{\frac{M^3}{22\hbar}}, \quad b_2^{(1)} = -\frac{\hbar\omega^4}{100} \sqrt[5]{\frac{M^4}{22\hbar}}, \quad \dots \quad (2.27)$$

Cependant, en comparant b_0 obtenu en (2.19) et $b_0^{(1)}$ déduit dans (2.27), il s'avère que le taux de convergence de l'énergie à l'état fondamental est moins satisfaisant. En effet, l'erreur relative correspondant, en unités naturelles ($\hbar = \omega = M = 1$), est de l'ordre :

$$\frac{|b_0^{(1)} - b_0|}{b_0} \approx 24\%, \quad (2.28)$$

et par conséquent, elle est importante et non négligeable. Il est donc nécessaire de procéder à une nouvelle resommation pour améliorer le résultat de $b_0^{(1)}$.

2.2.2. Resommation du potentiel effectif

La convergence du calcul effectué précédemment peut-être améliorée via l'introduction d'un nouveau paramètre variationnel. Ceci peut-être réalisé en combinant deux approches variationnelles: *la théorie des perturbations variationnelles* et *le potentiel effectif* [2, 29]. Le meilleur moyen pour calculer le potentiel effectif est la méthode standard des champs, permettant d'évaluer les diagrammes de Feynman à une particule irréductible; i.e. tronquée et connectée. Puisque les intégrales multiples impliquées dans les temps imaginaires sont non triviales à calculer, alors uniquement les premiers ordres sont accessibles avec la méthode standard. La nouvelle resommation consiste à convertir le développement en puissances de g en un développement en puissances de $\hbar$, correspondant ainsi au formalisme de la méthode standard.

Le tableau 2.1 montre les deux premiers ordres en $\hbar$ du potentiel effectif,

$$V_{eff}(X) = \sum_{l=0}^{\infty} \hbar^l V^{(l)}(X), \quad (2.29)$$

où le paramètre variationnel (ou fréquence d'essai) Ω est donnée par (1.98):

$$\Omega = \omega \sqrt{1 + \frac{6igX}{M\omega^2}}. \quad (2.30)$$

Tableau 2.1 : Les deux premiers ordres en $\hbar$ du potentiel effectif.

l (boucles)	0	1	2
---------------	---	---	---

$V^{(l)}(X)$	$\frac{M}{2}\omega^2 X^2 + igX^3$	$\frac{\omega}{2}\sqrt{1 + \frac{6igX}{M\omega^2}}$	$\frac{g^2}{4M(M\omega^2 + 6igX)^2}$
--------------	-----------------------------------	---	--------------------------------------

En substituant le paramètre de Kleinert donné par (2.22) en termes de $\hbar$ au lieu de g et en tenant compte des potentiels $V^{(l)}(X)$ pour $l=0,1$ consignés sur Tableau 1.2, on obtient le potentiel effectif au premier ordre (1-boucle) :

$$V_{eff}^{(1)}(X, \Omega) = \frac{M}{2}\omega^2 X^2 + igX^3 + \frac{\hbar}{2}\sqrt{\Omega^2 + \frac{6igX}{M}}. \quad (2.31)$$

Afin d'obtenir une approximation de l'énergie à l'état fondamental, nous minimisons l'identité (2.31) par rapport aux paramètres variationnels Ω et X :

$$\left. \frac{\partial V_{eff}^{(1)}(X, \Omega)}{\partial \Omega} \right|_{X=X^{(1)}, \Omega=\Omega^{(1)}} = 0, \quad (2.32)$$

et

$$\left. \frac{\partial V_{eff}^{(1)}(X, \Omega)}{\partial X} \right|_{X=X^{(1)}, \Omega=\Omega^{(1)}} = 0. \quad (2.33)$$

La résolution du système d'équations (2.32) et (2.33) conduit aux solutions :

$$\Omega^{(1)} = 0, \quad X^{(1)} + \frac{M\omega^2}{3ig} + \frac{\hbar}{2\sqrt{6igM}(X^{(1)})^{3/2}} = 0. \quad (2.34)$$

L'équation dans (2.34) nous permet de déterminer le comportement aux forts couplages de X :

$$X^{(1)} = -ig^{-1/5} (X_0^{(1)} + X_1^{(1)}g^{-4/5} + X_2^{(1)}g^{-8/5} + \dots), \quad (2.35)$$

où les coefficients s'écrivent :

$$X_0^{(1)} = \sqrt[5]{\frac{\hbar^2}{24M}}, \quad X_1^{(1)} = -\frac{2}{15}M\omega^2, \quad X_2^{(1)} = \frac{M^2\omega^4}{75}\sqrt[5]{\frac{24M}{\hbar^2}}, \quad \dots \quad (2.36)$$

Insérons (2.36), (2.34) dans (2.31), on obtient les coefficients de l'énergie à l'état fondamental aux forts couplages :

$$b_0^{(1)} = \frac{5\hbar}{2}\sqrt[5]{\frac{\hbar}{432M^3}}, \quad b_1^{(1)} = -\frac{M\omega^2}{4}\sqrt[5]{\frac{\omega^4}{18M^2}}, \quad b_2^{(1)} = \frac{M^2\omega^4}{15}\sqrt[5]{\frac{\hbar^2}{24M}}, \quad \dots \quad (2.37)$$

L'erreur relative calculée sur la première correction de l'énergie aux forts couplages par rapport à celle déduite par Bender (2.19) est en très bon accord relativement à celle obtenue en (2.28) ; en effet l'erreur est de l'ordre de 3% [27, 29].

Ainsi, on déduit que l'introduction du second paramètre variationnel Ω a mené à une

amélioration significative du premier ordre. Au second ordre, après avoir substitué le paramètre de Kleinert, le potentiel effectif devient :

$$V_{eff}^{(2)}(X, \Omega) = \frac{M}{2} \omega^2 X^2 + igX^3 + \hbar \frac{M(\omega^2 + \Omega^2) + 12igX}{4M\sqrt{\Omega^2 + 6igX/M}} + \hbar^2 \frac{g^2}{4M(M\Omega^2 + 6igX)^2}. \quad (2.38)$$

En procédant aux mêmes étapes qu'au premier ordre, on obtient le coefficient de la première correction de l'énergie à l'état fondamental aux forts couplages :

$$b_0^{(2)} = 0.764570478. \quad (2.39)$$

À deux boucles, le résultat numérique $b_0^{(2)}$ est en très bon accord avec celui obtenu par Bender. L'erreur relative est de l'ordre de 0.06%. Il est important de signaler la réalité ainsi que la positivité des coefficients correcteurs $b_0^{(n)}$, avec $n = 1, 2, \dots$, pour cette classe de potentiel.

CHAPITRE 3

POTENTIEL EFFECTIF ET RESOMMATION DES POTENTIELS COMPLEXES MULTIDIMENSIONNELS³

Nous généralisons le potentiel complexe d'anharmonicité cubique (1.97) au cas multidimensionnel, i.e. $D = 2, 3$ [23, 39] :

$$V(x, y) = \frac{M}{2} \omega^2 (x^2 + y^2) + igxy^2, \quad (3.1)$$

$$V(x, y, z) = \frac{M}{2} \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) + igxyz. \quad (3.2)$$

3.1. Les méthodes perturbatives

Les diagrammes de Feynman et les méthodes de récurrence de Bender-Wu font parties des méthodes perturbatives fréquemment utilisées dans le but de déduire les expressions des séries d'énergie aux faibles couplages de l'état fondamental.

3.1.1. La méthode des diagrammes de Feynman

Les fonctions de partition (ou *fonctions génératrices*) correspondantes aux potentiels (3.1) et (3.2),

$$\begin{aligned} Z_{2D} = & \oint Dx \oint Dy \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} (\dot{x}^2(\tau) + \dot{y}^2(\tau)) \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{M}{2} \omega^2 (x^2(\tau) + y^2(\tau)) + igx(\tau)y^2(\tau) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

et

$$\begin{aligned} Z_{3D} = & \oint Dx \oint Dy \oint Dz \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} (\dot{x}^2(\tau) + \dot{y}^2(\tau) + \dot{z}^2(\tau)) \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{M}{2} \omega^2 (x^2(\tau) + y^2(\tau) + z^2(\tau)) + igx(\tau)y(\tau)z(\tau) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

sont évaluées par un traitement perturbatif via un développement en puissance de la constante de couplage g . Les parties harmoniques sont séparées des parties anharmoniques, conduisant aux expressions [39]:

$$Z_{2D} = \oint Dx \oint Dy \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} (\dot{x}^2(\tau) + \dot{y}^2(\tau)) + \frac{M}{2} \omega^2 (x^2(\tau) + y^2(\tau)) \right] \right\}$$

³Ce chapitre est entièrement consacré à la traduction de l'article [39].

$$\times [1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 [igx(\tau_1)y^2(\tau_1)] + \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 [igx(\tau_1)y^2(\tau_1)][igx(\tau_2)y^2(\tau_2)] + \dots], \quad (3.5)$$

et

$$\begin{aligned} Z_{3D} = & \oint Dx \oint Dy \oint Dz \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} (\dot{x}^2(\tau) + \dot{y}^2(\tau) + \dot{z}^2(\tau)) \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{M}{2} \omega^2 (x^2(\tau) + y^2(\tau) + z^2(\tau)) \right] \right\} \left[1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 [igx(\tau_1)y(\tau_1)z(\tau_1)] \right. \\ & \left. + \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 [igx(\tau_1)y(\tau_1)z(\tau_1)][igx(\tau_2)y(\tau_2)z(\tau_2)] + \dots \right]. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Dans le cas multidimensionnel, les produits de convolution sont généralisés selon l'identité:

$$\langle \bullet \rangle_{\omega} = \frac{1}{\prod_{d=1}^D Z_{x_d}^{(\omega)}} \oint \dots \oint \prod_{d=1}^D dx_d(\bullet) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{d=1}^D \left[\frac{M}{2} \dot{x}_d^2(\tau) + \frac{M}{2} \omega^2 x_d^2(\tau) \right] \right\}, \quad (3.7)$$

où $d=1,2$ à $2D$ et $d=1,2,3$ à $3D$. Au second ordre, (3.6) et (3.7) conduisent aux expressions des fonctions de partition:

$$Z_{2D} = Z_x^{(\omega)} Z_y^{(\omega)} \left[1 - \frac{g^2}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \langle x(\tau_1)y^2(\tau_1)x(\tau_2)y^2(\tau_2) \rangle_{\omega} + O(g^4) \right], \quad (3.8)$$

et

$$Z_{3D} = Z_x^{(\omega)} Z_y^{(\omega)} Z_z^{(\omega)} \left[1 - \frac{g^2}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \langle x(\tau_1)y(\tau_1)z(\tau_1)x(\tau_2)y(\tau_2)z(\tau_2) \rangle_{\omega} + O(g^4) \right], \quad (3.9)$$

où $Z_{x_d}^{(\omega)}$ représentent les fonctions de partition de l'oscillateur harmonique exprimées par:

$$Z_x^{(\omega)} = Z_y^{(\omega)} = Z_z^{(\omega)} = \frac{1}{2 \sinh(\hbar\beta\omega/2)}. \quad (3.10)$$

L'évaluation des expressions (3.8) et (3.9) est liée au calcul des produits de convolution en appliquant les règles de Wick (1.108) et (1.109). Le propagateur exprimé dans (1.108) est généralisé, au cas multidimensionnel, pour:

$$G_{\omega}(\tau_1, \tau_2) = \begin{cases} \langle x_a(\tau_1)x_b(\tau_2) \rangle_{\omega} \neq 0 & \text{si } a = b \\ \langle x_a(\tau_1)x_b(\tau_2) \rangle_{\omega} = 0 & \text{si } a \neq b \end{cases} \quad (3.11)$$

Les produits de convolution dans (3.8) et (3.9) sont alors exprimés à l'aide de (3.11) par [39]:

$$\begin{aligned}\langle x(\tau_1)y^2(\tau_1)x(\tau_2)y^2(\tau_2) \rangle_\omega &= G_\omega(\tau_1, \tau_1)G_\omega(\tau_1, \tau_2)G_\omega(\tau_2, \tau_2) + 2G_\omega^2(\tau_1, \tau_2), \\ \langle x(\tau_1)y(\tau_1)z(\tau_1)x(\tau_2)y(\tau_2)z(\tau_2) \rangle_\omega &= G_\omega^3(\tau_1, \tau_2).\end{aligned}\quad (3.12)$$

En insérant (3.12) dans (3.8) et (3.9), on déduit les expressions de l'énergie libre au quatrième ordre en puissances de la constante de couplage g :

$$F_{2D} = -2k_B T \ln Z_\omega \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned}&+ k_B T \left\{ \frac{g^2}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 [G_\omega(\tau_1, \tau_1)G_\omega(\tau_1, \tau_2)G_\omega(\tau_2, \tau_2) + 2G_\omega^2(\tau_1, \tau_2)] \right\}, \\ F_{3D} &= -3k_B T \ln Z_\omega + k_B T \left\{ \frac{g^2}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 [G_\omega^3(\tau_1, \tau_2)] \right\}.\end{aligned}\quad (3.14)$$

En appliquant les règles de Feynman (1.112) et (1.113) sur (3.13) et (3.14), nous déduisons les séries perturbatives de l'énergie de l'état fondamental aux basses températures, ($T \rightarrow 0$), au quatrième ordre en termes des diagrammes de Feynman [39]:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_{2D}^{(0)} &= \hbar\omega - \lim_{t \rightarrow 0} k_B T \left[\frac{1}{72} \text{diagram}_1 + \frac{1}{36} \text{diagram}_2 + \frac{1}{324} \text{diagram}_3 + \frac{5}{1296} \text{diagram}_4 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{648} \text{diagram}_5 + \frac{1}{1296} \text{diagram}_6 \right] + O(g^4).\end{aligned}\quad (3.15)$$

$$\mathcal{E}_{3D}^{(0)} = \frac{3}{2} \hbar\omega - \lim_{t \rightarrow 0} k_B T \left[\frac{1}{72} \text{diagram}_7 + \frac{1}{1728} \text{diagram}_8 + \frac{1}{5184} \text{diagram}_9 \right] + O(g^4). \quad (3.16)$$

tandis que l'utilisation de l'identité (1.84) les convertit en termes d'expression analytique:

$$\mathcal{E}_{2D}^{(0)} = \hbar\omega + g^2 \frac{5}{24} \frac{\hbar^2}{M^3 \omega^4} - g^4 \frac{223}{864} \frac{\hbar^3}{M^6 \omega^9} + O(g^6), \quad (3.17)$$

$$\mathcal{E}_{3D}^{(0)} = \frac{3}{2} \hbar\omega + g^2 \frac{1}{24} \frac{\hbar^2}{M^3 \omega^4} - g^4 \frac{7}{576} \frac{\hbar^3}{M^6 \omega^9} + O(g^6), \quad (3.18)$$

et qui concordent avec les résultats obtenus en [23].

3.1.2. Les relations de récurrence de Bender-Wu

Nous établissons ici les coefficients perturbatifs de l'énergie à l'état fondamental pour les potentiels (3.1) et (3.2) par l'intermédiaire des relations de récurrence de Bender-Wu. Ces dernières sont obtenues à partir des équations de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{2D}^2 \psi(x, y) + \left[\frac{M}{2} \omega^2 (x^2 + y^2) + igxy^2 \right] \psi(x, y) = E_2 \psi(x, y), \quad (3.19)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{3D}^2\psi(x,y,z)+[\frac{M}{2}\omega^2(x^2+y^2+z^2)+igxyz]\psi(x,y,z)=E_3\psi(x,y,z). \quad (3.20)$$

Les fonctions d'onde de l'état fondamental sont données par:

$$\psi(\mathbf{x}_d)=N_0^{(d)}\exp[-\frac{M\omega}{2\hbar}|\mathbf{x}_d|^2+\phi(\mathbf{x}_d)], \quad (3.21)$$

où $\mathbf{x}_2 \equiv (x, y)$ et $\mathbf{x}_3 \equiv (x, y, z)$, avec $d = 2, 3$. $N_0^{(d)}$ sont des constantes de normalisations.

Les fonctions d'onde $\phi(\mathbf{x}_d)$ ainsi que les énergies E_d sont exprimées en termes de séries perturbatives, en puissances de la constante de couplage g , par:

$$\phi(\mathbf{x}_d)=\sum_{k=1}^{\infty}g^k\phi_k(\mathbf{x}_d), \quad (3.22)$$

et

$$\mathcal{E}_d=\frac{d}{2}\hbar\omega+\sum_{k=1}^{\infty}g^k\mathcal{E}_k^{(d)}. \quad (3.23)$$

En insérant (3.21) dans (3.19) et (3.20), en tenant compte (3.22) et (3.23), on déduit des équations différentielles ordinaires régissant les fonctions d'onde $\phi_k(\mathbf{x}_d)$ dans le système des unités naturelles ($\hbar = \omega = M = 1$) :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_k^{(2)} = & -\frac{1}{2}\nabla_{2D}^2\phi_k(\mathbf{x}_2)+x\frac{\partial\phi_k(\mathbf{x}_2)}{\partial x}+y\frac{\partial\phi_k(\mathbf{x}_2)}{\partial y}+igxy^2\delta_{k,1} \\ & -\frac{1}{2}[\sum_{l=1}^{k-1}\frac{\partial\phi_{k-l}(\mathbf{x}_2)}{\partial x}\frac{\partial\phi_l(\mathbf{x}_2)}{\partial x}+\frac{\partial\phi_{k-l}(\mathbf{x}_2)}{\partial y}\frac{\partial\phi_l(\mathbf{x}_2)}{\partial y}], \end{aligned} \quad (3.24)$$

et

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_k^{(3)} = & -\frac{1}{2}\nabla_{3D}^2\phi_k(\mathbf{x}_3)+x\frac{\partial\phi_k(\mathbf{x}_3)}{\partial x}+y\frac{\partial\phi_k(\mathbf{x}_3)}{\partial y}+z\frac{\partial\phi_k(\mathbf{x}_3)}{\partial z}+igxyz\delta_{k,1} \\ & -\frac{1}{2}[\sum_{l=1}^{k-1}\frac{\partial\phi_{k-l}(\mathbf{x}_3)}{\partial x}\frac{\partial\phi_l(\mathbf{x}_3)}{\partial x}+\frac{\partial\phi_{k-l}(\mathbf{x}_3)}{\partial y}\frac{\partial\phi_l(\mathbf{x}_3)}{\partial y}+\frac{\partial\phi_{k-l}(\mathbf{x}_3)}{\partial z}\frac{\partial\phi_l(\mathbf{x}_3)}{\partial z}]. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Pour résoudre les équations différentielles (3.24) et (3.25), il suffit d'écrire les fonctions d'onde $\phi_k(\mathbf{x}_d)$ sous formes polynomiales, vérifiant, respectivement, les identités suivantes [23]:

$$\phi_k(x,y)=\sum_{j=0}^k\sum_{m=0}^ka_{j,m}^{(k)}x^jy^{2m}, \quad (3.26)$$

$$\phi_k(x,y,z)=\sum_{j=0}^k\sum_{m=0}^k\sum_{n=0}^ka_{j,m,n}^{(k)}x^jy^mz^n, \quad (3.27)$$

où $a_{j,m}^{(k)}$ et $a_{j,m,n}^{(k)}$ sont des coefficients non-symétriques réels et/ou complexes à déterminer.

En insérant (3.26) et (3.27), respectivement, dans (3.24) et (3.25), on déduit les valeurs des coefficients $a_{j,m}^{(k)}$ et $a_{j,m,n}^{(k)}$ au second ordre du calcul; c'est-à-dire, à deux boucles:

- 2D

$$k = 1 : \quad a_{1,1}^{(1)} = a_{1,0}^{(1)} = -\frac{i}{3}, \quad a_{0,1}^{(1)} = 0. \quad (3.28)$$

$$k = 2 : \quad a_{1,0}^{(2)} = a_{1,1}^{(2)} = a_{1,2}^{(2)} = a_{2,2}^{(2)} = 0, \\ a_{2,0}^{(2)} = -\frac{1}{36}, \quad a_{2,1}^{(2)} = -\frac{1}{18}, \quad a_{0,2}^{(2)} = -\frac{1}{72}, \quad a_{0,1}^{(2)} = -\frac{1}{8}. \quad (3.29)$$

- 3D

$$k = 1 : \quad a_{1,1,1}^{(1)} = -\frac{i}{3}, \\ a_{1,0,0}^{(1)} = a_{1,0,1}^{(1)} = a_{1,1,0}^{(1)} = a_{0,1,1}^{(1)} = a_{0,0,1}^{(1)} = a_{0,1,0}^{(1)} = 0. \quad (3.30)$$

$$k = 2 : \quad a_{2,2,0}^{(2)} = a_{2,0,2}^{(2)} = a_{2,0,0}^{(2)} = a_{0,2,2}^{(2)} = a_{0,2,0}^{(2)} = a_{0,0,2}^{(2)} = -\frac{1}{72}. \quad (3.31)$$

Pour $k \geq 3$, les relations de récurrence des coefficients $a_{j,m}^{(k)}$ et $a_{j,m,n}^{(k)}$ et ceux d'énergie $\varepsilon_k^{(d)}$ sont données par [23]:

- 2D

$$a_{j,m}^{(k)} = \frac{1}{2(j+m)} [a_{j-1,m-1}^{(k-1)} - 2 \sum_{k'=1}^k (a_{2,0}^{(k')} + 2a_{0,2}^{(k')}) a_{j,m}^{(k-k')} + (j+1)(j+2) a_{j+2,m}^{(k)} \\ + (m+1)(m+2) a_{j,m+2}^{(k)}]. \quad (3.32)$$

$$\varepsilon_k^{(2)} = \frac{(-1)^{k+1}}{2} (a_{2,0}^{(2k)} + a_{0,2}^{(2k)}). \quad (3.33)$$

- 3D

$$a_{j,m,n}^{(k)} = \frac{1}{2(j+m+n)} [a_{j-1,m-1,n-1}^{(k-1)} - 2 \sum_{k'=1}^k (a_{2,0,0}^{(k')} + a_{0,2,0}^{(k')} + a_{0,0,2}^{(k')}) a_{j,m,n}^{(k-k')} \\ + (j+1)(j+2) a_{j+2,m,n}^{(k)} + (m+1)(m+2) a_{j,m+2,n}^{(k)} \\ + (n+1)(n+2) a_{j,m,n+2}^{(k)}]. \quad (3.34)$$

$$\varepsilon_k^{(3)} = \frac{(-1)^{k+1}}{2} (a_{2,0,0}^{(2k)} + a_{0,2,0}^{(2k)} + a_{0,0,2}^{(2k)}). \quad (3.35)$$

Les valeurs des coefficients du spectre d'énergie de l'état fondamental aux faibles couplages sont consignés dans les tableaux Tableau 1.3 et Tableau 2.3 ci-dessous. Nous

avons utilisé le langage formel MATHEMATICA, version 4.2, afin d'évaluer ces coefficients. Il est intéressant de signaler la concordance entre les coefficients déduits et ceux obtenus en (3.17-18) par la méthode des diagrammes de Feynman à l'ordre 4.

Tableau 3.1 : Les coefficients du spectre d'énergie du potentiel à 2-dimensions.

k	1	2	3	4	5
ε_k	0	$\frac{5}{24}$	0	$-\frac{223}{864}$	0
k	6	7	8	9	10
ε_k	$\frac{116407}{155520}$	0	$-\frac{346266143}{111974400}$	0	$\frac{2360833242959}{141087744000}$

Tableau 3.2 : Les coefficients du spectre d'énergie du potentiel à 3-dimensions.

k	1	2	3	4	5
ε_k	0	$\frac{1}{24}$	0	$-\frac{7}{576}$	0
k	6	7	8	9	10
ε_k	$\frac{5069}{622080}$	0	$-\frac{2441189}{289598400}$	0	$\frac{8034211571}{752476968000}$

3.2. Procédure de resommation

La procédure de resommation est une technique mathématique permettant de transformer des séries perturbatives divergentes aux faibles couplages en séries non perturbatives convergentes aux forts couplages. Nous nous intéressons, ici, à la resommation des séries d'énergie déduites par la méthode des diagrammes de Feynman et les relations de récurrence de Bender-Wu (3.17) et (3.18). Le traitement aux forts couplages s'effectue par la substitution:

$$\mathbf{x}_d \rightarrow g^{-1/5} \mathbf{x}_d, \quad (3.36)$$

où $\mathbf{x}_d \equiv (x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$.

L'équation de Schrödinger correspondante aux deux potentiels complexes multidimensionnels, tenant compte de (3.36), se réduisent aux expressions:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{2D}^2 \psi(x, y) + \left[\frac{M\omega^2}{2} g^{-4/5} (x^2 + y^2) + ixy^2 \right] \psi(x, y) = g^{-2/5} E_2 \psi(x, y), \quad (3.37)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{3D}^2\psi(x,y,z)+[\frac{M\omega^2}{2}g^{-4/5}(x^2+y^2+z^2)+ixyz]\psi(x,y,z)=g^{-2/5}E_3\psi(x,y,z). \quad (3.38)$$

Les fonctions d'onde et les spectres d'énergie sont développés en puissances de la constante de couplage g . Ils sont donnés, respectivement, par:

$$\psi(\mathbf{x}_d)=\psi_0(\mathbf{x}_d)+g^{-4/5}\psi_1(\mathbf{x}_d)+g^{-8/5}\psi_2(\mathbf{x}_d)+\dots, \quad (3.39)$$

$$\mathcal{E}_d=g^{2/5}b_0^{(N)}+g^{-2/5}b_1^{(N)}+g^{-6/5}b_2^{(N)}+\dots \quad (3.40)$$

Avant de resommer des séries d'énergie de l'état fondamental aux forts couplages, il est impératif de connaître leurs expressions aux faibles couplages. Nous traiterons, ici, la resommation des séries (3.17) et (3.18) qu'au second ordre en puissances de g ; c'est-à-dire à 2-vertex. En substituant g^2 par $\tilde{g}$ dans (3.17) et (3.18), on obtient:

$$\mathcal{E}_2^{(0)}=\omega[\hbar+\frac{5}{24}\frac{\tilde{g}\hbar^2}{M^3\omega^5}]+\mathcal{O}(g^4), \quad (3.41)$$

$$\mathcal{E}_3^{(0)}=\omega[\frac{3\hbar}{2}+\frac{1}{24}\frac{\tilde{g}\hbar^2}{M^3\omega^5}]+\mathcal{O}(g^4). \quad (3.42)$$

En introduisant le paramètre de resommation de Kleinert:

$$\omega\rightarrow\Omega\sqrt{1+\tilde{g}r}, \quad \text{avec } r=\frac{\omega^2-\Omega^2}{\tilde{g}\Omega^2}, \quad (3.43)$$

sur (3.17) et (3.18), nous obtenons les expressions des énergies au premier ordre en $\tilde{g}$, dépendant du paramètre variationnel Ω :

$$\mathcal{E}_2^{(1)}(\tilde{g},\Omega)=\frac{\hbar\Omega}{2}+\frac{\hbar\omega^2}{2\Omega}+\tilde{g}\frac{5}{24}\frac{\hbar^2}{\Omega^4}+\mathcal{O}(\tilde{g}^2), \quad (3.44)$$

$$\mathcal{E}_3^{(1)}(\tilde{g},\Omega)=\frac{3\hbar\Omega}{2}+\frac{3\hbar\omega^2}{4\Omega}+\tilde{g}\frac{1}{24}\frac{\hbar^2}{\Omega^4}+\mathcal{O}(\tilde{g}^2), \quad (3.45)$$

où nous avons posé $M=1$. En minimisant les énergies $\mathcal{E}_2^{(1)}(\tilde{g},\Omega)$ et $\mathcal{E}_3^{(1)}(\tilde{g},\Omega)$ par rapport à Ω , on déduit les équations correspondantes, respectivement, aux équations (3.44) et (3.45) en fonction de Ω , noté $\Omega^{(1)}$:

$$\frac{\hbar}{2}-\frac{\hbar\omega^2}{2[\Omega^{(1)}]^2}-\tilde{g}\frac{5\hbar^2}{6[\Omega^{(1)}]^5}=0, \quad (3.46)$$

$$\frac{3\hbar}{4}-\frac{\hbar\omega^2}{4[\Omega^{(1)}]^2}-\tilde{g}\frac{\hbar^2}{6[\Omega^{(1)}]^5}=0. \quad (3.47)$$

Résoudre chacune des équations en termes du paramètre variationnel $\Omega^{(1)}$ revient à considérer son comportement aux forts couplages:

$$\Omega^{(1)}=\tilde{g}^{1/5}(\Omega_0^{(1)}+\Omega_1^{(1)}\tilde{g}^{-2/5}+\Omega_2^{(1)}\tilde{g}^{-4/5}+\dots), \quad (3.48)$$

et en insérant cette dernière dans (3.46) et (3.47), on obtient les coefficients:

- $2D$

$$\Omega_0^{(1)} = \sqrt[5]{\frac{5\hbar}{3}}, \quad \Omega_1^{(1)} = \frac{\omega^2}{5} \sqrt[5]{\frac{3}{5\hbar}}, \quad \Omega_2^{(1)} = \frac{\omega^4}{25} \sqrt[5]{\frac{27}{125\hbar^3}}. \quad (3.49)$$

- $3D$

$$\Omega_0^{(1)} = \sqrt[5]{\frac{2\hbar}{9}}, \quad \Omega_1^{(1)} = \frac{\omega^2}{5} \sqrt[5]{\frac{9}{2\hbar}}, \quad \Omega_2^{(1)} = \frac{3\omega^4}{25} \sqrt[5]{\frac{3}{8\hbar^3}}. \quad (3.50)$$

En substituant (3.40) dans (3.41) et (3.42), en tenant compte des identités (3.48--50), et en comparant les termes en puissances de g , nous déduisons les coefficients correcteurs $b_i^{(1)}$ où $i = 0, 1, 2$ correspondants, au premier ordre, aux énergies de l'état fondamental $E_{2,3}^{(1)}$ aux forts couplages [39]:

-

$2D$

$$b_0^{(1)} = \frac{5}{8} \sqrt[5]{\frac{5\hbar^6}{3}}, \quad b_1^{(1)} = \frac{\omega^2}{2} \sqrt[5]{\frac{3\hbar^4}{5}}, \quad b_2^{(1)} = \frac{\omega^4}{20} \sqrt[5]{\frac{3\hbar^2}{5}}. \quad (3.51)$$

-

$3D$

$$b_0^{(1)} = \frac{5}{8} \sqrt[5]{\frac{27\hbar^6}{16}}, \quad b_1^{(1)} = \frac{3\omega^2}{4} \sqrt[5]{\frac{9\hbar^4}{2}}, \quad b_2^{(1)} = -\frac{9\omega^4}{40} \sqrt[5]{\frac{3\hbar^2}{8}}. \quad (3.52)$$

Cependant, les valeurs numériques des énergies obtenues aux forts couplages s'avèrent être inférieures à celles déduites aux faibles couplages. En effet, aux faibles couplages, les énergies de l'état fondamental sont de l'ordre de $\mathcal{E}_2^{(0)} \approx 1$ et $\mathcal{E}_3^{(0)} \approx 1.5^4$, alors que celles calculées aux forts couplages correspondantes à la première correction $b_0^{(1)}$ sont, respectivement, $b_{0,2}^{(1)} \approx 0.69222$ et $b_{0,3}^{(1)} \approx 0.69395$. Ainsi, on peut conclure que la convergence de la théorie des perturbations variationnelles aux forts couplages est peu satisfaisante. Théoriquement, aux forts couplages, nous nous attendions à ce que les coefficients $b_{0,d}^{(1)}$ soient supérieurs à ceux calculés aux faibles couplages. Cette observation nous incite à procéder à une nouvelle resommation des potentiels; c'est ce que nous nous forcerons de démontrer dans la section 3.3.

3.3. Potentiels effectifs complexes à D-dimensions

Pour un potentiel arbitraire mutlidimensionnel, le potentiel effectif correspondant est déduit du concept de l'action effective dépendante du chemin moyen $\mathbf{X}_d \equiv (X, Y, Z, \dots)$ dans la cas particulier d'un courant externe constant et nul. Il est identique, par la transformation de Legendre, à l'énergie libre. Aux basses températures, le potentiel effectif se réduit à l'énergie de l'état fondamental. Aux faibles couplages, le développement du potentiel effectif en puissances de $\hbar$ est donné, pour des potentiels multidimensionnels et à

⁴Voir les expressions analytiques des énergies (3.17) et (3.18).

l -boucles, par :

$$\begin{aligned} V_{eff}(\mathbf{X}_d) &= \sum_{l=0}^{\infty} \hbar^l V^{(l)}(\mathbf{X}_d) \\ &= V(\mathbf{X}_d) + \frac{\hbar}{2} \sum_d \text{tr} \ln G_{\mathbf{X}_d}^{-1} + V^{(int)}(\mathbf{X}_d), \end{aligned} \quad (3.53)$$

où les fonctions $\frac{\hbar}{2} \sum_d \text{tr} \ln G_{\mathbf{X}_d}^{-1}$ contribuent à l'énergie de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique multidimensionnel aux différents chemins moyens $\mathbf{X}_d$. Dans le cas multidimensionnel, ces fonctions sont liées aux fréquences d'essai partielles $\tilde{\omega}_d$ par :

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2} \text{tr} \ln G_{\mathbf{X}_d}^{-1} &\equiv \frac{\hbar \tilde{\omega}_d}{2} \\ &= \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\partial^2 V(\mathbf{X}_d)}{\partial \mathbf{X}_d^2}}, \end{aligned} \quad (3.54)$$

où la fréquence totale $\tilde{\omega}_d$ est la norme des fréquences partielles, c'est-à-dire $\tilde{\omega}_{\mathbf{X}_d}$. $V^{(int)}(\mathbf{X}_d)$, dit *potentiel d'interaction*, contient tous les diagrammes de Feynman à une particule irréductible.

3.3.1 Limite des faibles couplages: L'énergie de l'état fondamental

Les spectres d'énergie de l'état fondamental aux faibles couplages des potentiels complexes à (2,3)-dimensions peuvent être obtenus par leurs potentiels effectifs respectifs en substituant (3.54) dans (3.53). Les calculs sont effectués jusqu'au troisième ordre aux basses températures.

Les fréquences totales des potentiels (3.1) et (3.2) sont données par:

$$\tilde{\omega}_2 = \sqrt{2\omega^2 + 2igX}, \quad \tilde{\omega}_3 = \sqrt{3}\omega. \quad (3.55)$$

Les potentiels effectifs $V^{(int)}(\mathbf{X}_d)$, avec $d = 2, 3$, sont donnés par les diagrammes:

$$V^{(int)}(X_2) = - \lim_{T \rightarrow 0} k_B T \left[\frac{1}{36} \text{diagram}_1 + \frac{5}{1296} \text{diagram}_2 + \frac{1}{648} \text{diagram}_3 \right] + O(\hbar^4). \quad (3.56)$$

$$V^{(int)}(X_3) = - \lim_{T \rightarrow 0} k_B T \left[\frac{1}{72} \text{diagram}_1 + \frac{1}{1728} \text{diagram}_2 + \frac{1}{5184} \text{diagram}_3 \right] + O(\hbar^4). \quad (3.57)$$

Ces diagrammes à une particule irréductible ont été déduits à partir des règles de Feynman (1.112). À la différence que, et pour des raisons théoriques, nous représentons chaque vertex multidimensionnel à 3--propagateurs par:

$$\text{diagram}_4 \rightarrow -\frac{D}{\hbar} \sum_{d=i}^D \sum_{d=j}^D \sum_{d=k}^D \frac{\partial}{\partial X_i} \frac{\partial}{\partial X_j} \frac{\partial}{\partial X_k} V(\mathbf{X}_d). \quad (3.58)$$

En insérant (3.55-57) dans (3.53) et en tenant compte des règles de Feynman (3.58), les expressions des potentiels effectifs aux basses températures sont exprimées par:

$$\lim_{T \rightarrow 0} V_{\text{eff}}(X, Y) = \frac{\omega^2}{2}(X^2 + Y^2) + igXY^2 + \frac{\hbar[\omega + \sqrt{\omega^2 + 2igX}]}{2} + \frac{\hbar^2 g^2}{3(2\omega^2 + 2igX)^2} - \left[\frac{2}{3} \frac{1}{648} + \frac{22}{27} \frac{5}{1296} \right] \frac{324\sqrt{2}\hbar^3 g^4}{(2\omega^2 + 2igX)^{9/2}} + O(\hbar^4), \quad (3.59)$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} V_{\text{eff}}(X, Y, Z) = \frac{\omega^2}{2}(X^2 + Y^2 + Z^2) + igXYZ + \frac{3\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar^2 g^2}{24\omega^4} - \left[\frac{2}{3} \frac{1}{5184} + \frac{22}{27} \frac{1}{1728} \right] \frac{81\hbar^3 g^4}{4\omega^9} + O(\hbar^4). \quad (3.60)$$

Le chemin moyen $\mathbf{X}_d$ dans le cas des potentiels complexes est exprimé par:

$$\mathbf{X}_d = i \sum_{d=1}^D \sum_{n=0}^N \hbar^n X_{dn} \xrightarrow{\text{au second ordre}} i(X_{d0} + \hbar X_{d1} + \hbar^2 X_{d2}), \quad (3.61)$$

où $d = 1, 2, \dots, D$ spécifie la dimension du potentiel, tandis que $n = 0, 1, 2, \dots, N$ se réfère aux différents ordres du calcul.

En insérant l'identité (3.61) dans (3.59) et (3.60) et en minimisant par rapport aux paramètres $\mathbf{X}_d$, on retrouve un système d'équations en fonctions de X_{d0} , X_{d1} et X_{d2} dont les solutions physiques acceptables sont:

- $2D$

$$X_{10} \equiv X_0 = 0, \quad X_{11} \equiv X_1 = -\frac{g}{2\omega^3}, \quad X_{12} \equiv X_2 = \frac{5g^3}{12\omega^8}, \\ X_{20} \equiv Y_0 = 0, \quad X_{21} \equiv Y_1 = 0, \quad X_{22} \equiv X_2 = 0. \quad (3.62)$$

- $3D$

$$X_{dn} \equiv 0, \quad \text{pour tout : } d = 1, 2, 3 \text{ et } n = 0, 1, 2. \quad (3.63)$$

En insérant (3.62) et (3.63) dans les potentiels effectifs (3.59) et (3.60), on déduit les expressions analytiques des énergies de l'état fondamental aux basses températures:

$$\mathcal{E}_2^{(0)} = \hbar\omega + \hbar^2 \frac{5}{24} \frac{g^2}{\omega^4} - \hbar^3 \frac{223}{864} \frac{g^4}{\omega^9} + O(\hbar^4), \quad (3.64)$$

$$\mathcal{E}_3^{(0)} = \frac{3}{2} \hbar\omega + \hbar^2 \frac{1}{24} \frac{g^2}{\omega^4} - \hbar^3 \frac{7}{576} \frac{g^4}{\omega^9} + O(\hbar^4). \quad (3.65)$$

Les séries d'énergie de l'état fondamental (3.64) et (3.65) sont en accord avec celles déduites en (3.17) et (3.18), et donc avec [23], à la différence près que les deux premières ont été obtenues via le concept du potentiel effectif fondé sur un développement en puissances de $\hbar$ tandis que les deux dernières sont développées en puissances de la constante de couplage g , obtenues par la théorie des perturbations.

3.3.2. Limite des forts couplages: Resommation des potentiels effectifs

L'introduction du concept du potentiel effectif par l'intermédiaire de l'action effective nous a permis d'évaluer l'état fondamental de l'énergie aux faibles couplages, montrant ainsi la puissance et l'ingéniosité des deux concepts. Il est donc intéressant de s'attaquer au problème de l'énergie de l'état fondamental des potentiels complexes multidimensionnels aux forts couplages, en combinant le potentiel effectif à la théorie des perturbations variationnelles, en vue d'améliorer les résultats (3.51) et (3.52). Pour cela, l'introduction du paramètre variationnel Ω , et qui de plus des paramètres des chemins moyens $\mathbf{X}_d$, permettent de traiter la convergence des coefficients $b_0^{(1)}$ aux forts couplages. La procédure de resommation est traitée ici uniquement pour $l = 2$ -boucles, due au fait que les calculs deviennent encombrants aux ordres plus élevés.

Le paramètre de Kleinert est exprimé en termes de $\hbar$ au lieu de la constante de couplage g ,

$$\omega \rightarrow \Omega \sqrt{1 + \hbar r}, \quad \text{avec } r = \frac{\omega^2 - \Omega^2}{\hbar \Omega^2}. \quad (3.66)$$

Le comportement aux forts couplages du chemin moyen est donné au second ordre de correction par l'expression:

$$\mathbf{X}_d = -ig^{-1/5} (X_{d0} + g^{-4/5} X_{d1} + g^{-8/5} X_{d2} + \dots), \quad (3.67)$$

et le paramètre variationnel Ω est identique à la fréquence d'essai totale (3.55); i.e.

$$\Omega_2 = \sqrt{2\omega^2 + 2igX}, \quad \Omega_3 = \sqrt{3}\omega. \quad (3.68)$$

3.a Resommation du potentiel bidimensionnel :

a. Premier ordre :

En insérant le paramètre de Kleinert (3.66) dans l'expression du potentiel effectif (3.59) au premier ordre en $\hbar$, on obtient:

$$V_{2,eff}^{(1)}(X, Y) = \frac{\omega^2}{2} (X^2 + Y^2) + igXY^2 + \hbar \left[\frac{\Omega + \sqrt{\Omega^2 + 2igX}}{2} \right]. \quad (3.69)$$

Nous optimisons (3.69) par rapport aux paramètres Ω et $\mathbf{X}_d$ en tenant compte des expressions de $\Omega_n^{(1)}$, avec $n = 0, 1, 2$, déduites en (3.49). En procédant aux mêmes étapes suivies dans la section 3.2, les solutions des coefficients X_{dn} du chemin moyen sont données par:

$$X_0 = 0.417288\hbar^{6/5}, \quad X_1 = -0.245405\omega^2, \quad X_2 = 0.063624\hbar^{-6/5},$$

$$Y_n = \sqrt{2}X_n, \quad (3.70)$$

où $n = 0, 1, 2$. En réinsérant (3.70) dans (3.67), et aussi dans (3.69), on déduit le coefficient

$b_{0,2}^{(1)}$ de l'énergie à l'état fondamental aux forts couplages:

$$b_{0,2}^{(1)} \approx 1.1263168\hbar^{6/5}. \quad (3.71)$$

b. Second ordre :

Au second ordre, le potentiel effectif devient:

$$V_{2,eff}^{(2)}(X, Y) = \frac{\omega^2}{2}(X^2 + Y^2) + igXY^2 + \frac{\hbar}{4} \left[\frac{\omega^2}{\Omega^2} + \Omega \frac{\omega^2 + \Omega^2 + 4igX}{\sqrt{\Omega^2 + 2igX}} \right] + \frac{g^2 \hbar^2}{12(\Omega^2 + igX)^2}. \quad (3.72)$$

En suivant les mêmes étapes qu'au premier ordre, l'énergie de l'état fondamental aux forts couplages calculée au second ordre est:

$$b_{0,2}^{(2)} \approx 1.13595605\hbar^{6/5}. \quad (3.73)$$

3.b Resommation du potentiel tridimensionnel :

a. Premier ordre :

Au premier ordre, le potentiel effectif correspondant au potentiel tridimensionnel est donné par:

$$V_{3,eff}^{(1)}(X, Y, Z) = \frac{\omega^2}{2}(X^2 + Y^2 + Z^2) + igXYZ + \frac{3\hbar\Omega}{2}. \quad (3.74)$$

Cependant, la minimisation du potentiel effectif (3.74) par rapport à Ω donne une valeur constante non nulle; i.e. $(= 3\hbar/2)$, nécessitant ainsi un traitement spécial au cas tridimensionnel. Pour éliminer cette ambiguïté, nous proposons de substituer le paramètre variationnel Ω par:

$$\Omega \rightarrow \sqrt{\Omega^2 + 2ig\lambda X}, \quad (3.75)$$

où $\lambda \ll 1$. En insérant (3.75) dans le potentiel effectif (3.74) et en performant le développement en puissances de $\hbar$, puis en termes de λ au voisinage de zéro, on obtient:

$$\begin{aligned} X_0 &= \frac{1}{\lambda} \sqrt[5]{\frac{\hbar^2}{648}}, & X_1 &= \frac{\omega^2}{5\lambda}, & X_2 &= \frac{\omega^2(20 + \sqrt[5]{648}\omega^2)}{100\lambda} \hbar^{-6/5}, \\ Y_0 &= 0, & Y_1 &= \omega^2, & Y_2 &= \hbar^{-6/5}, \\ Z_0 &= -\frac{1}{\lambda} \sqrt[5]{\frac{\hbar^2}{648}}, & Z_1 &= \frac{\omega^2}{5\lambda}, & Z_2 &= -\frac{3\omega^4}{50\lambda} \sqrt[5]{\frac{81}{5}} \hbar^{-6/5}. \end{aligned} \quad (3.76)$$

En réinjectant les expressions (3.75) et (3.76) dans (3.74), en tenant en considération (3.67), nous obtenons le coefficient de l'énergie de l'état fondamental aux forts couplages calculé au premier ordre:

$$b_{0,3}^{(1)} = \frac{3^{3/5}}{2^{3/10}} \hbar^{6/5} \approx 1.570231 \hbar^{6/5}. \quad (3.77)$$

b. Second ordre :

Au second ordre, le potentiel effectif associé au potentiel tridimensionnel est donné par:

$$V_{3,eff}^{(2)}(X, Y, Z) = \frac{\omega^2}{2}(X^2 + Y^2 + Z^2) + igXYZ + \frac{3\hbar(\omega^2 + \Omega^2)}{4\Omega} + \frac{\hbar^2}{24\Omega^4}. \quad (3.78)$$

Ici, l'optimisation des dérivées partiales premières du potentiel effectif par rapport aux paramètres variationnels ont un sens et, par conséquence, peuvent être nulles. Il n'est donc pas nécessaire d'utiliser la substitution (3.75) dans le potentiel effectif (3.78). En procédant de la même manière qu'au premier ordre, l'énergie de l'état fondamental au second ordre est:

$$b_{0,3}^{(2)} = \frac{3^{3/5}}{2^{3/10}} \frac{\sqrt{1 + \sqrt{230}}}{4} \hbar^{6/5} \approx 1.578344 \hbar^{6/5}. \quad (3.79)$$

Dans les deux cas étudiés, nous constatons que les nouvelles valeurs des coefficients associés à l'énergie de l'état fondamental (3.73) et (3.79) sont en bon accord avec celles prévues théoriquement. L'écart vis-à-vis du premier ordre; c'est-à-dire:

$$\left| \frac{b_{0,d}^{(2)} - b_{0,d}^{(1)}}{b_{0,d}^{(1)}} \right| \quad (3.80)$$

est de l'ordre de 0.8% et 0.5% pour les potentiels à (2,3)-dimensions, respectivement. Il est évident de constater, comme dans le cas unidimensionnel, que les coefficients correcteurs $b_{0,d}^{(2)}$ des énergies aux états fondamentaux déduits en (3.73) et (3.79) sont entièrement réels et positifs.

INTRODUCTION DE LA DEUXIEME PARTIE

Depuis longtemps, les physiciens ont cherché à unifier les interactions de la nature; i.e. les interactions fortes, électro-faibles et gravitationnelles, en vain. Plusieurs tentatives ambitieuses ont été conduites ces trente dernières années, et il s'est avéré que les théories dites *supersymétriques* (SUSY) sont les modèles adéquats pour une approche unificatrice [33]. La supersymétrie a une structure algébrique par nature, dans le sens qu'elle est définie en termes d'une *algèbre graduée de Lie* basée sur la combinaison des relations de commutation et anti-commutation [9, 10, 11], reliant les degrés de liberté bosoniques aux fermioniques, et vice versa. Parmi les prédictions théoriques de la supersymétrie est l'existence de particules dites *superpartenaires*. En dépit de son élégance, aucune évidence expérimentale n'a prouvée l'existence de ces particules, suggérant l'hypothèse que la supersymétrie doit-être *spontanément brisée*.

Depuis, plusieurs schémas ont été inventés pour résoudre le problème de la brisure spontanée de la supersymétrie. C'est précisément dans le contexte de cette problématique que la supersymétrie a été étudiée pour la première fois dans le cas de la *supersymétrie de la mécanique quantique* (SUSY-QM) [34], cette dernière est considérée comme étant la réalisation simple de l'algèbre de la supersymétrie impliquant un élément central appelé Hamiltonien H et des opérateurs "non centraux" Q et $Q^\dagger$ appelés supercharges ou *générateurs* [36].

La réalisation algébrique de la supersymétrie de la mécanique quantique permet de déduire les expressions des spectres d'énergie relatives aux différentes classes de potentiels. Elle est aperçue comme une généralisation de la méthode de factorisation de Schrödinger [35] et de Infeld-Hull [5], fondée sur les opérateurs de création et d'annihilation générant deux Hamiltoniens iso-spectraux l'un à l'autre; c'est-à-dire, des Hamiltoniens ayant le même spectre d'énergie excepté pour l'état fondamental afin d'éviter la brisure spontanée de la supersymétrie. Elle permet aussi de ranger les potentiels dans des familles selon qu'ils acceptent des solutions analytiquement exactes (ES), quasi-exactes (QES) [79] ou même conditionnées (CES) [80].

Moins compliquées, aussi bien qu'au niveau conceptuel qu'au niveau formulation mathématique, mais autant puissantes et élégantes que les théories supersymétriques, les *symétries* font l'objet depuis des siècles d'observations et d'études. Elles apparaissent sous forme de régularités dans des structures de plus au moins complexes, dans des propriétés des systèmes physiques ainsi que sous forme d'invariances dans des équations. En termes modernes, les symétries d'un objet donné forment un *groupe*. La notion abstraite du groupe n'a émergé que vers le milieu du dix-neuvième siècle, depuis la théorie des groupes a pris une extension énorme, et ses applications à la mécanique quantique et à la physique des particules élémentaires se sont développées tout au long du vingtième siècle en classant

des potentiels quantiques et des particules élémentaires dans des familles. Son lien avec la physique est réalisé grâce à la notion de la *représentation des groupes* [9, 10, 11, 75].

Par ailleurs, l'un des aspects fondamentaux de la théorie des groupes de Lie est la construction des Hamiltoniens à partir des opérateurs invariants de Casimir liés à la structure du groupe. Cette procédure de construction passe par deux opérations successives [37], la première appelée l'*approche algébrique*, consiste à faire introduire, sous forme de générateurs, un ensemble d'opérateurs de création et d'annihilation, tandis que la seconde opération, appelée l'*approche potentiel*, consiste à leur donner une forme différentielle multidimensionnelle. Les algèbres associées au groupe sont employées pour générer les spectres d'énergie.

Souvent, les groupes utilisés sont compacts de sorte que leurs représentations unitaires peuvent reproduire des spectres finis et discrets. Cependant, plusieurs potentiels ont des spectres discrets (états liés) et continus (états de diffusion), représentés par des groupes compacts G et non-compacts G^* , respectivement. On dit que *le groupe G est analytiquement prolongée dans $\mathbb{C}$ sur le groupe non-compact G^** [10, 11, 37].

La présente partie traitera la connexion des équations de Schrödinger correspondantes aux potentiels de Morse et de Pöschl-Teller généralisés, déduits par la supersymétrie de la mécanique quantique, dans le cadre de la représentation de la théorie des groupes de Lie compacts $U(2) = SU(2)$. Le potentiel de Morse [53] est souvent rencontré en physique moléculaire ainsi qu'en physico-chimie, tandis que le potentiel de Pöschl-Teller [54] est appliqué dans divers domaines de la physique tels que la solution de l'équation de Korteweg-de Vries pour le modèle des solitons [81] ainsi qu'à la limite non-relativiste de l'équation de Sine-Gordon [82]. Sous l'algèbre associée au groupe $SU(2)$, le potentiel de Morse peut-être réalisé sur un espace à deux dimension tandis que le potentiel de Pöschl-Teller est réalisable sur une sphère.

Cette seconde partie est organisée comme suit. Le chapitre 4 sera consacré à la supersymétrie de la mécanique quantique, où nous commencerons par exposer une introduction sommaire sur les oscillateurs harmoniques supersymétriques, puis nous parlerons de la supersymétrie de la mécanique quantique d'une façon générale ainsi que de sa formulation Hamiltonienne [6, 7, 8]. Au chapitre 5, on rappelle quelques généralités sur les groupes aux transformations linéaires, puis nous aborderons les groupes et les algèbres de Lie compacts et non-compacts en étudiant les représentations des groupes de Lie $SU(2)$ et $SU(1,1)$ [9, 10, 11].

Quant au chapitre 6, il sera question de la traduction de l'article «**S.-A. Yahiaoui, S. Hattou, M. Bentaiba, Ann. Phys. 322 (2007) 2733-2744**» [40]. Nous démontrons qu'il est possible de construire mathématiquement l'équation de Schrödinger généralisée pour le potentiel de Pöschl-Teller à partir de celle de Morse par intermédiaire de la *transformée de Fourier*. Quant aux potentiels généralisés, nous démontrons qu'ils sont liés à travers la *transformée de Hankel* (connue aussi sous le nom *Intégral de Fourier-Bessel*). Par conséquent, l'algèbre associée au groupe $SU(2)$ forme une *algèbre dynamique* et fournit, par la même occasion, une relation liant les deux spectres d'énergie.

CHAPITRE 4

SUPERSYMETRIE ET MECANIQUE QUANTIQUE

Les deux dernières décennies ont vues l'émergence de la supersymétrie de la mécanique quantique comme un outil indispensable dans plusieurs branches de la physique théorique. En particulier, en mécanique quantique, elle s'est avérée être d'un grand secours dans la classification des potentiels, la déduction du spectre d'énergie analytiquement ainsi que sa dégénérescence. Ici, la dégénérescence est interprétée à l'aide de la fonction d'onde de l'état fondamental d'un potentiel déduite du formalisme Hamiltonien.

4.1 Les oscillateurs harmoniques supersymétriques

La méthode de la factorisation a été utilisée, dans sa forme la plus classique, pour construire une classe de potentiels à une dimension ayant le spectre d'un oscillateur, mais qui diffèrent du potentiel de l'oscillateur harmonique de masse m et de fréquence ω [5, 35] :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (4.1)$$

La méthode consiste à introduire des opérateurs de création $b^\dagger$ et d'annihilation b agissant sur un état du vide $|0\rangle$ des états bosoniques propres $|n\rangle$, (on pose : $\hbar = 1$) [36] :

$$b = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} \left(\frac{d}{dx} + m\omega x \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-x^2/2} \frac{d}{dx} e^{x^2/2}, \quad (4.2)$$

$$b^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} \left(-\frac{d}{dx} + m\omega x \right) = -\frac{1}{\sqrt{2}} e^{x^2/2} \frac{d}{dx} e^{-x^2/2}, \quad (4.3)$$

et l'Hamiltonien bosonique est exprimé par :

$$H_B = \omega(b^\dagger b + \mathbb{I}_G \frac{1}{2}), \quad (4.4)$$

où $\mathbb{I}_G$ est l'élément unitaire pour matrice du groupe G .

Les opérateurs bosoniques vérifient les relations de commutation :

$$[b, b] = [b^\dagger, b^\dagger] = 0,$$

$$[b, b^\dagger] = \mathbb{I}_G, \quad (4.5)$$

$$[H_B, b^\dagger] = \omega b^\dagger.$$

Il est possible de construire les états excités à n bosons à partir de l'état vide (ou

fundamental) de bosons $|0\rangle$. En effet, dans la seconde quantification, l'opérateur b (resp. $b^\dagger$) fait passer de la valeur propre n de $\mathbf{N}_B$, à la valeur propre $(n-1)$ (resp. $(n+1)$) correspondant au vecteur propre $|n-1\rangle$ (resp. $|n+1\rangle$) :

$$b|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \text{et} \quad b^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad (4.6)$$

où l'opérateur $\mathbf{N}_B = b^\dagger b$ (dans cet ordre) représente le nombre de *bosons* (ou *quanta*). Les états propres de $\mathbf{H}_B$ sont définis par :

$$\mathbf{H}_B = \omega(\mathbf{N}_B + 1/2), \quad \text{et} \quad \mathbf{H}_B|n\rangle = \mathcal{E}_n|n\rangle, \quad (4.7)$$

avec les états et valeurs propres

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(b^\dagger)^n|0\rangle, \quad \text{et} \quad \mathcal{E}_n = \omega(n + 1/2). \quad (4.8)$$

Considérons maintenant l'oscillateur harmonique menu des états de spin $|\frac{1}{2}, \sigma\rangle$, où σ sont les matrices de Pauli [6]

$$\sigma_+ = \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y), \quad \sigma_- \equiv \sigma_+^\dagger = \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y), \quad \sigma_0 = \sigma_z, \quad (4.9)$$

vérifiant les équations propres suivantes :

$$\begin{aligned} \sigma_+|1/2, 1/2\rangle &= 0, & \sigma_+|1/2, -1/2\rangle &= |1/2, 1/2\rangle, \\ \sigma_-|1/2, 1/2\rangle &= |1/2, -1/2\rangle, & \sigma_-|1/2, -1/2\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (4.10)$$

La représentation la plus simple des opérateurs de Pauli peut-être obtenue dans l'espace des matrices 2×2 :

$$\begin{aligned} |1/2, -1/2\rangle &\equiv |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & |1/2, 1/2\rangle &\equiv |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ f^\dagger &\equiv \sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, & f &\equiv \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

En seconde quantification, l'état $|1/2, -1/2\rangle$ devient un état du vide de fermions, tandis que l'état $|1/2, 1/2\rangle$ devient un état occupé par un fermion. Le principe d'exclusion de Pauli caractéristique des systèmes fermioniques est alors traduit par $f^2 = (f^\dagger)^2 = 0$.

Si on attribue l'énergie $-1/2\omega$ à l'état $|1/2, -1/2\rangle$, c'est-à-dire à l'état du vide de fermion, alors l'Hamiltonien de fermions peut s'écrire sous la forme :

$$\mathbf{H}_F = \omega(f^\dagger f - \frac{1}{2}), \quad \text{et} \quad \mathbf{H}_F|0\rangle = -\frac{\omega}{2}|0\rangle, \quad (4.12)$$

où les relations de commutation (4.5) des opérateurs bosoniques sont retranscrits en termes d'opérateurs fermioniques :

$$\{f, f\} = \{f^\dagger, f^\dagger\} = 0, \quad \{f, f^\dagger\} = \mathbb{I}_c. \quad (4.13)$$

L'introduction du commutateur gradué $[\dots, \dots]$ [6, 7, 8] permet de condenser les règles (4.5) et (4.13), sauf si les deux opérateurs concernés sont des opérateurs fermioniques. Si $O = (b, f)$, on obtient :

$$[O, O^\dagger] = \mathbb{I}_c, \quad [O, O] = [O^\dagger, O^\dagger] = 0, \quad (4.14)$$

tandis que les opérateurs b et f commutent entre eux. Les états occupés ou vides de fermions sont définis à partir du vide $|0\rangle$:

$$\begin{aligned} f|0\rangle &= 0, & f^\dagger|0\rangle &= |1\rangle, \\ f|1\rangle &= |0\rangle, & f^\dagger|1\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (4.15)$$

En sommant les Hamiltoniens H_B et H_F , nous décrivons une particule de masse m et de spin $\frac{1}{2}$ dans un puits harmonique. L'énergie du vide bosonique compense celle du vide fermionique, et l'énergie de l'état fondamental de l'état propre $|0,0\rangle = |0\rangle \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ du Hamiltonien total est :

$$H \equiv H_B + H_F = \omega(b^\dagger b + f^\dagger f). \quad (4.16)$$

Ainsi, un état propre de H est le produit tensoriel des états $|n\rangle$ de bosons et des états $|m\rangle$ de fermions :

$$|n, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (b^\dagger)^n (f^\dagger)^m |0,0\rangle, \quad \text{avec } n = 0, 1, 2, \dots \text{ et } m = 0, 1. \quad (4.17)$$

En ajoutant et retranchant le terme $b^\dagger b f^\dagger f$ dans H , et en tenant compte des relations de commutation et d'anti-commutation associées au fait que les opérateurs b et f commutent entre eux, conduisent à une forme différente du Hamiltonien [6] :

$$H = \omega(bf^\dagger fb^\dagger + fb^\dagger bf^\dagger). \quad (4.18)$$

En utilisant les représentations matricielles, introduisons les opérateurs de supercharges Q et $Q^\dagger$ en termes des opérateurs fermioniques :

$$Q \equiv bf^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & b \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^\dagger \equiv fb^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ b^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

donnant la forme d'un anti-commutateur à l'Hamiltonien total H :

$$H \equiv \omega\{Q, Q^\dagger\} = \omega \begin{pmatrix} bb^\dagger & 0 \\ 0 & b^\dagger b \end{pmatrix}. \quad (4.20)$$

Les représentations matricielles des opérateurs H , Q et $Q^\dagger$ conduisent aux relations de commutation [6, 7, 8] :

$$[H, Q] = [H, Q^\dagger] = 0, \quad (4.21)$$

cela montre bien que $|n, m\rangle$ est un état propre de H correspondant à la valeur propre non nulle de l'énergie. Nous constatons aussi que $Q|n, m\rangle$ et $Q^\dagger|n, m\rangle$ sont également états propres de H correspondant à la même valeur propre d'énergie :

$$\begin{aligned} H|n, m\rangle &= \mathcal{E}|n, m\rangle, \\ HQ|n, m\rangle &= QH|n, m\rangle = \mathcal{E}(Q|n, m\rangle), \\ HQ^\dagger|n, m\rangle &= Q^\dagger H|n, m\rangle = \mathcal{E}(Q^\dagger|n, m\rangle), \end{aligned} \quad (4.22)$$

pour $\mathcal{E} \neq 0$.

Les supercharges Q et $Q^\dagger$ génèrent donc une symétrie nouvelle : *la supersymétrie*. Ils font passer d'un état bosonique à un état fermionique et vice versa, puisque :

$$\begin{aligned} Q|n, 0\rangle &= \sqrt{\omega n}|n-1, 1\rangle, \\ Q^\dagger|n, 1\rangle &= \sqrt{\omega(n+1)}|n+1, 0\rangle. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Dans un langage plus approprié : *l'opérateur Q fait passer de l'état d'énergie E_n de l'oscillateur de composante de spin $|1/2, -1/2\rangle$ au même état d'énergie mais de composante de spin $|1/2, 1/2\rangle$. Les états d'énergie $\mathcal{E}_n$ de l'oscillateur harmonique constituent un doublet.*

L'espace de Hilbert H , dans lequel est défini l'opérateur H , peut-être séparé en deux sous espaces complémentaires, H_B et H_F , et dans lequel agissent des opérateurs N_0 et N_1 tels que :

$$N_0 + N_1 = \mathbf{I}_G, \quad N_0 - N_1 = K \quad (4.24)$$

où K est appelé l'opérateur de Klein ou *opérateur d'involution*. Cependant, une représentation matricielle 2×2 des opérateurs N_0 , N_1 et K est possible :

$$N_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad N_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad K = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.25)$$

À partir de ces représentations, examinons les propriétés suivantes :

- i. L'opérateur K vérifie la condition $K^2 = \mathbf{I}_G$; il a pour valeurs propres ± 1 .
- ii. L'opérateur N_0 représente le nombre de fermions, car une fois appliqué aux états fermioniques (4.11), il restitue les équations aux valeurs propres $N_0|0\rangle = 0$ et $N_0|1\rangle = |1\rangle$, tandis que le nombre des bosons n'est pas représenté par l'opérateur N_1 .
- iii. Un opérateur de type $F = \begin{pmatrix} 0 & f_1 \\ f_2 & 0 \end{pmatrix}$ est dit fermionique s'il anti-commute avec K .

- iv. Un opérateur de type $B = \begin{pmatrix} b_1 & 0 \\ 0 & b_2 \end{pmatrix}$ est dit bosonique s'il commute avec K .
- v. L'opérateur K commute avec H , tandis qu'il anti-commute avec Q et $Q^\dagger$.
- vi. La définition (4.19) conduit aux relations :

$$\begin{aligned} [Q, b^\dagger] &= f^\dagger, & [Q, b] &= 0, \\ \{Q, f\} &= b, & \{Q, f^\dagger\} &= 0. \end{aligned} \quad (4.26)$$

- vii. De la propriété (v), il en découle que l'Hamiltonien H commute avec les supercharges Q , $Q^\dagger$ et l'opérateur d'involution K . Ainsi, le triplet d'opérateurs $(H, Q, Q^\dagger, K)$ forme un système supersymétrique.

4.2. La supersymétrie de la mécanique quantique

Les opérateurs H , Q ($Q^\dagger$) et K constituent un système supersymétrique s'ils vérifient les conditions :

$$H = Q^2, \quad K^2 = \mathbb{I}_G, \quad \{K, Q\} = 0 \quad (4.27)$$

Soit $|\phi\rangle$ un ket propre de H correspondant à la valeur propre $\mathcal{E}$. Selon (4.22), le ket $Q|\phi\rangle$ est aussi un ket propre pour la même valeur propre, et par conséquent, les valeurs propres de H sont dégénérées. On peut donc décomposer l'espace de Hilbert H en parties paire et impaire, en posant :

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle &= \frac{1}{2}(\mathbb{I}_G + K)|\Phi\rangle + \frac{1}{2}(\mathbb{I}_G - K)|\Phi\rangle \\ &= |\phi_B\rangle + |\phi_F\rangle \\ &= K_B |\phi\rangle + K_F |\phi\rangle. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Le vecteur $|\phi_B\rangle = K_B |\phi\rangle$ du sous-espace H_B de H est différent de zéro pour la valeur propre 1 de K ; le vecteur $|\phi_F\rangle = K_F |\phi\rangle$ du sous-espace H_F de H est différent de zéro pour la valeur propre -1 de K . Appliqué à l'état $|\phi\rangle = \begin{pmatrix} \phi_F \\ \phi_B \end{pmatrix}$, on obtient :

$$\begin{aligned} |\phi_B\rangle &= K_B |\phi\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_B \end{pmatrix}, \\ |\phi_F\rangle &= K_F |\phi\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \phi_F \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.29)$$

où $|\phi_B\rangle$ et $|\phi_F\rangle$ sont, respectivement, la partie bosonique et fermionique de $|\phi\rangle$.

Par définition, l'opérateur Q anti-commute avec K . C'est donc un opérateur

impair de la forme $Q = \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ A & 0 \end{pmatrix}$.

Appliqué à un état propre $|\phi\rangle = \begin{pmatrix} \phi_F \\ \phi_B \end{pmatrix}$ de H correspondant à la valeur propre E , il le transforme en $Q|\phi\rangle$ état propre de H à la même valeur propre :

$$Q|\phi\rangle = \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_F \\ \phi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^\dagger \phi_B \\ A \phi_F \end{pmatrix}. \quad (4.30)$$

L'état fermionique ϕ_F a été transformé en un état bosonique $A^\dagger \phi_B$, l'état bosonique ϕ_B a été transformé en un état fermionique $A \phi_F$. On dit que $A^\dagger \phi_B$ est le superpartenaire de ϕ_F et $A \phi_F$ est le superpartenaire de ϕ_B .

Pour n'importe quel état propre $|\phi\rangle$ de H représenté par la matrice $\begin{pmatrix} A^\dagger A & 0 \\ 0 & A A^\dagger \end{pmatrix}$ a un superpartenaire $Q|\phi\rangle$, pour une valeur propre de l'énergie différente de zéro. À un état $|1\rangle$ correspond le superpartenaire $Q|1\rangle$, ils ont la même énergie mais leur spin est différent de $\frac{1}{2}$.

Ainsi, tous les états se transformant les uns en les autres par l'action de l'opérateur de supersymétrie Q , forment un multiplet supersymétrique ou *supermultiplet*, dont tous les éléments ont la même masse au repos mais ils se distinguent par un nouveau nombre quantique appelé : *R-charge* [33].

L'algèbre de la supersymétrie :

La supersymétrie de la mécanique quantique contient N opérateurs de supercharges Q_i , l'Hamiltonien supersymétrique est donc caractérisé par l'algèbre $\mathfrak{s}(N)$ associée au groupe symétrique $S(N)$ [6, 7] :

$$\{Q_i, Q_j\} = 2\delta_{ij}H_{SS}, \quad [Q_i, H_{SS}] = [Q_i^\dagger, H_{SS}] = 0, \quad (4.31)$$

où $i, j = 1, 2, \dots, N$.

Cependant, les résultats les plus importants de la supersymétrie de la mécanique quantique ont été réalisés sous l'algèbre $\mathfrak{s}(2)$, où les supercharges Q_1 et Q_2 sont exprimées en termes de la réalisation (4.19) par [36] :

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_1 + iQ_2), \quad Q^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_1 - iQ_2). \quad (4.32)$$

Cette algèbre peut-être réalisée en considérant la représentation matricielle, pour les supercharges Q et $Q^\dagger$ ainsi que le Hamiltonien supersymétrique H_{SS} , suivante :

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.33)$$

$$H_{SS} = \begin{pmatrix} A^\dagger A & 0 \\ 0 & AA^\dagger \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix}, \quad (4.34)$$

où $H_\pm$ sont des Hamiltoniens superpartenaires.

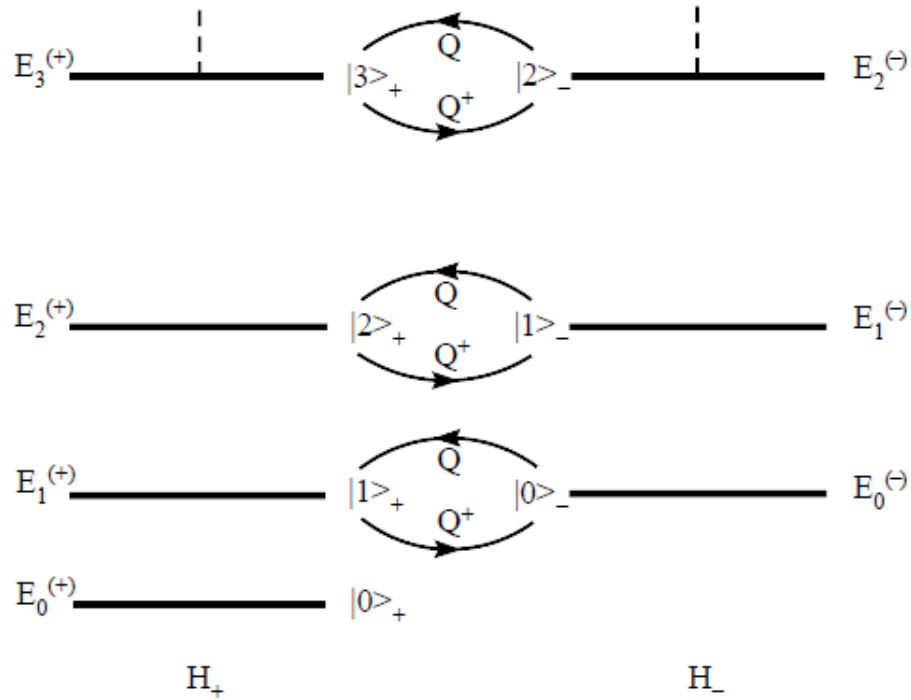


Figure 4.1 : L'action des supercharges Q et $Q^\dagger$ sur les états propres.

L'Hamiltonien (4.34) peut-être interprété comme étant une composition de deux Hamiltoniens scalaires H_+ et H_- agissant, respectivement, dans les « secteurs » bosoniques et fermioniques. Ces secteurs sont reliés par les relations (4.29) et (4.30) où ϕ_B contient les états propres de l'Hamiltonien H_+ tandis que ϕ_F contient les états propres de l'Hamiltonien H_- . La figure 4.1 illustre le spectre supersymétrique du Hamiltonien H_{SS} ainsi que les liens entre les supercharges.

4.3. Formulation Hamiltonienne de la supersymétrie

La connexion entre la fonction d'onde de l'état fondamental et le potentiel est souvent utilisée pour déduire le spectre d'énergie correspondant au potentiel analytiquement. Habituellement, la connaissance exacte de la fonction d'onde de l'état fondamental (ou même des états liés) ne signifie à aucun cas que le potentiel est connu (à une constante additive près).

Choisissons, pour l'instant, l'énergie de l'état fondamental nulle, alors l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde de l'état fondamental $\psi_0(x)$ obéit à [6]:

$$H_1 \psi_0(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_0(x) + V_1(x) \psi_0(x) = 0, \quad (4.35)$$

et qui mène à l'expression du potentiel:

$$V_1(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)}. \quad (4.36)$$

Ceci permet une reconstruction globale du potentiel $V_1(x)$ en connaissant sa fonction d'onde de l'état fondamental. Une fois réalisé, il est facile de factoriser le Hamiltonien. Pour cela, le modèle de Witten [34] de la supersymétrie de la mécanique quantique est considéré comme le modèle le plus simple qui permet une telle factorisation. Il se compose d'une paire d'Hamiltoniens:

$$H_{\pm} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\pm}(x), \quad (4.37)$$

agissant dans l'espace de Hilbert H des fonctions aux carrés sommables de l'espace des configurations M . Par la suite, nous identifions l'indice "1" approprié au potentiel $V(x)$ dans (4.35) et (4.36) au signe "+" de (4.37).

Il est tout à fait possible de factoriser les Hamiltoniens $H_+ = A^\dagger A$ et $H_- = A A^\dagger$ suivant l'hypothèse [6, 7, 8, 36]:

$$A = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W(x), \quad A^\dagger = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W(x), \quad (4.38)$$

où la fonction $W(x): M \rightarrow \mathbb{R}$ se réfère au *superpotentiel* dans la nomenclature de la supersymétrie. Il est lié aux potentiels superpartenaires par:

$$V_{\pm}(x) = W^2(x) \mp \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dW(x)}{dx}. \quad (4.39)$$

Les équations (4.39) sont les équations différentielles ordinaires de Ricatti. La solution du superpotentiel $W(x)$ en termes de la fonction d'onde de l'état fondamental est:

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} \equiv -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} \ln \psi_0(x), \quad (4.40)$$

où la solution (4.40) est obtenue en identifiant $H_+ \psi_0(x) = 0$; i.e. $A \psi_0(x) = 0$.

En intégrant (4.40), on obtient l'expression de la fonction d'onde de l'état fondamental $\psi_0(x)$ en fonction du superpotentiel $W(x)$:

$$\psi_0(x) = N_0 \exp\left[-\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int dx' W(x')\right] \in H, \quad (4.41)$$

où N_0 est la constante de normalisation.

Les valeurs propres d'énergie et les fonctions d'onde de H_+ et H_- sont liées. Pour $n > 0$, l'équation de Schrödinger associée au Hamiltonien H_+ ,

$$H_+ \psi_n^{(+)} = A^\dagger A \psi_n^{(+)} = \mathcal{E}_n^{(+)} \psi_n^{(+)}, \quad (4.42)$$

implique

$$H_- (A \psi_n^{(+)}) = A A^\dagger A \psi_n^{(+)} = \mathcal{E}_n^{(+)} (A \psi_n^{(+)}). \quad (4.43)$$

Pareillement, l'équation de Schrödinger associée au Hamiltonien H_-

$$H_- \psi_n^{(-)} = A A^\dagger \psi_n^{(-)} = \mathcal{E}_n^{(-)} \psi_n^{(-)}, \quad (4.44)$$

implique

$$H_+ (A^\dagger \psi_n^{(-)}) = A^\dagger A A^\dagger \psi_n^{(-)} = \mathcal{E}_n^{(-)} (A^\dagger \psi_n^{(-)}). \quad (4.45)$$

Des équations (4.42-45) et en tenant compte du fait que $E_0^{(+)} = 0$, il devient évident que les valeurs et les fonctions propres des deux Hamiltoniens H_+ et H_- sont reliées par [6, 7, 8]:

$$\mathcal{E}_n^{(-)} = \mathcal{E}_{n+1}^{(+)}, \quad (4.46)$$

$$\psi_n^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_{n+1}^{(+)}}} A \psi_{n+1}^{(+)}(x), \quad (4.47)$$

$$\psi_{n+1}^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_n^{(-)}}} A^\dagger \psi_n^{(-)}(x), \quad (4.48)$$

où $n = 0, 1, 2, \dots$. La Figure 4.2 ci-dessous illustre bien le spectre supersymétrique du Hamiltonien H correspondant aux trois dernières équations.

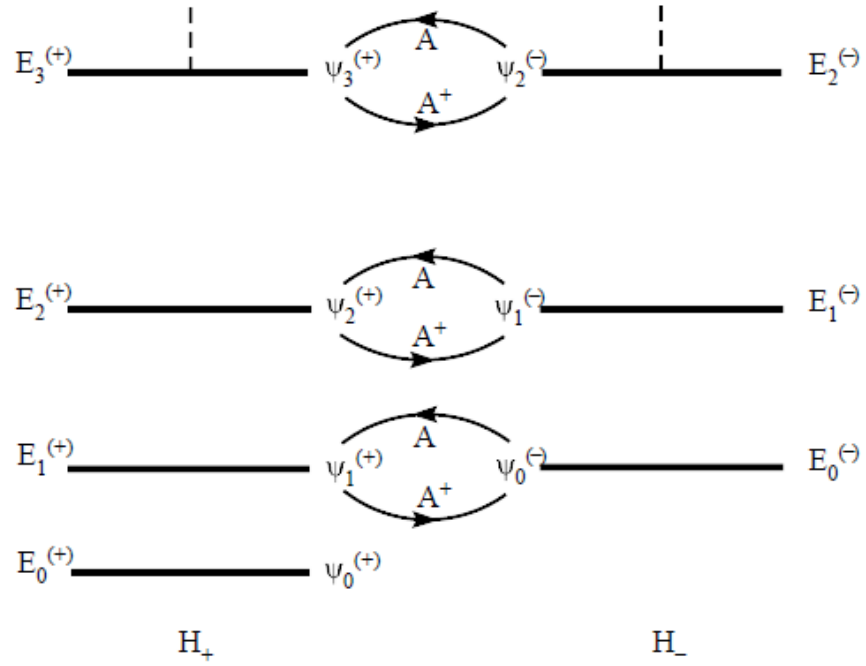


Figure 4.2 : L'action des opérateurs de création et d'annihilation sur les fonctions d'onde.

À partir des identités (4.46-48), examinons quelques propriétés qui découlent de la supersymétrie de la mécanique quantique [6, 8]:

- i. Si $\psi_{n+1}^{(+)}$ ($\psi_n^{(-)}$) de H_+ (H_-) sont normalisées, alors les fonctions d'onde $\psi_n^{(-)}$ ($\psi_{n+1}^{(+)}$) des équations (4.47-48) sont aussi normalisées.
- ii. L'opérateur $A(A^\dagger)$ ne permet pas uniquement de convertir H_+ (H_-) en H_- (H_+) avec la même énergie, mais aussi il permet de détruire (créer) des fonctions d'onde.
- iii. Il est évident que la connaissance des propriétés spectrales, par exemple de H_+ , nous conduit immédiatement à celles associées au Hamiltonien superpartenaire H_- en utilisant l'opérateur A , et vice versa.
- iv. Les équations (4.38) permettent de construire une hiérarchie d'opérateurs (*Ladder operators*) pour H_- en connaissant celle de H_+ .
- v. Si H_+ et H_- n'ont pas d'états propres normalisables avec une énergie fondamentale nulle, les spectres d'énergie de H_+ et H_- deviennent identiques. Ce cas correspond à la brisure spontanée de la supersymétrie [34] et est représenté sur la Figure 4.3.

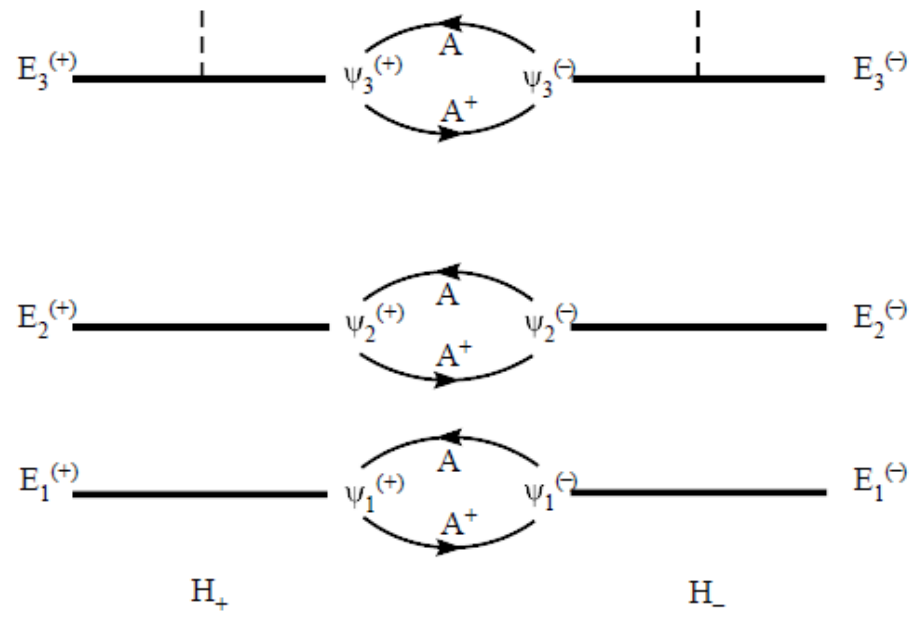


Figure 4.3 : La brisure spontanée de la supersymétrie.

CHAPITRE 5

GROUPES ET ALGEBRES DE LIE

Les symétries sont bien décrites, dans le langage mathématique moderne, par la théorie des groupes. Il est donc intéressant d'examiner la relation existante en mécanique quantique entre les grandeurs physiques conservées (impulsion, moment cinétique, énergie, ...) et les groupes qui leurs sont associés. Ces connaissances permettront de comprendre les propriétés des transformations subies par un système physique, et de traiter les problèmes physiques en vue de les appliquer dans le cadre des groupes de Lie compacts et non-compacts.

5.1. Généralités sur les groupes des transformations linéaires

En physique théorique, la notion de représentation d'un groupe est fondamentale. Il s'agit d'étudier les différentes manières de faire agir des groupes sur des espaces vectoriels par des *transformations linéaires* [9, 10, 11].

Considérons l'ensemble de toutes les transformations unitaires dans un espace à n dimension. Toutes ces transformations ont un déterminant non nul de sorte que chaque transformation unitaire de type $U\mathbf{x}$, entièrement caractérisée par la matrice U et d'un vecteur $\mathbf{x}$, correspond une *transformation inverse* définie par $U^{-1}\mathbf{x}$ qui est également unitaire [9]. De plus, si $U_1\mathbf{x}$ et $U_2\mathbf{x}$ sont deux transformations unitaires, leur produit $U_2U_1\mathbf{x}$ est également une transformation unitaire. Toutes ces transformations s'expriment en disant que l'ensemble des transformations unitaires *forme un groupe*.

Si E est un espace vectoriel sur $\mathbb{C}$, on désigne par $GL(E)$ le groupe des *isomorphismes* $\mathbb{C}$ -linéaires de E . Par définition, une *représentation* d'un groupe G est la donnée d'un espace vectoriel E , et d'un morphisme de groupe $\rho: G \rightarrow GL(E)$.

En général, l'ensemble de certaines transformations linéaires dont le déterminant n'est pas nul forme un groupe si les conditions suivantes sont vérifiées [9]:

1. S
 i une certaine transformation appartient à l'ensemble, la transformation inverse appartient également à l'ensemble; i.e. $\rho(g^{-1}) = (\rho(g))^{-1}$, pour tout $g \in G$.
2. L
 e produit de deux transformations, appartenant à l'ensemble, appartient également à l'ensemble; i.e. $\rho(gg') = \rho(g)\rho(g')$, avec $g' \in G$.

3.

C

omme le produit de toute transformation par son inverse est la transformation identique, on peut affirmer que tout groupe contient une transformation identique; i.e. $\rho(\mathbf{1}_G) = \text{id}_E$, où $\mathbf{1}_G$ est l'élément neutre.

Une telle représentation est désignée par (E, ρ) , ou simplement ρ . En général, la transformation linéaire est entièrement définie par sa matrice, on peut donc parler de *groupe de transformations linéaires* ou de *groupe des matrices*.

5.2. Structure des groupes de Lie

Les groupes de Lie sont des groupes munis d'une structure de variété différentiable définie sur $E \equiv \mathbb{R}^n$. Cela signifie qu'ils sont des groupes continus dont les éléments (ou opérateurs) $\hat{U}(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n)$, dépendant eux-mêmes de n paramètres, sont indéfiniment différentiables. Ces paramètres ϕ_μ représentent les coordonnées des points dans un espace appelé une *variété*. Il est intéressant de choisir les paramètres tels que nous ayons $\hat{U}(0, 0, \dots, 0) = \mathbf{1}_G$.

On peut représenter les opérateurs du groupe sous la forme [10]:

$$\hat{U}(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n) = \exp[-i \sum_{\mu=1}^n \phi_\mu \hat{J}_\mu] \rightarrow \hat{U}(\phi) = \exp[-i \phi \cdot \hat{J}], \quad (5.1)$$

où $\hat{J}_\mu$ sont appelés des *générateurs*.

Nous reconnaissons immédiatement que les opérateurs fondamentaux $\hat{J}_\mu$ peuvent être obtenus par différenciation à partir des éléments $\hat{U}(\phi)$:

$$-i \hat{J}_\mu \hat{U}(\phi) |_{\phi=0} \equiv -i \hat{J}_\mu = \frac{\partial \hat{U}(\phi)}{\partial \phi_\mu} |_{\phi=0}. \quad (5.2)$$

De fait, on obtient pour la transformation infinitésimale au voisinage de l'identité:

$$\hat{U}(\delta \phi_\mu) = \hat{U}(0) + \frac{\partial \hat{U}(\phi)}{\partial \phi_\mu} \Big|_{\phi=0} \delta \phi_\mu = \mathbf{1}_G - i \hat{J}_\mu \delta \phi_\mu \quad (5.3)$$

Les générateurs $\hat{J}_\mu$ sont au nombre des paramètres du groupe et forment la base d'une algèbre de commutateurs fermée appelée *algèbre de Lie* [9]:

$$[\hat{J}_k, \hat{J}_m] \equiv \hat{J}_k \hat{J}_m - \hat{J}_m \hat{J}_k = C_{kmj} \hat{J}_j, \quad (5.4)$$

où les constantes C_{kmj} sont dites: *constantes de structure*. Elles sont anti-symétriques par rapport aux deux premiers indices; i.e. $C_{kmj} = -C_{mkj}$.

Par définition, une algèbre de Lie est un espace vectoriel de dimension fini ou infini, muni d'une opération bilinéaire et anti-symétrique, $[\dots, \dots]$, vérifiant l'identité [9]:

$$[[\hat{J}_k, \hat{J}_m], \hat{J}_j] + [[\hat{J}_m, \hat{J}_j], \hat{J}_k] + [[\hat{J}_j, \hat{J}_k], \hat{J}_m] = 0, \quad (5.5)$$

comme on peut facilement s'en assurer en insérant la définition (5.4). L'identité (5.5) est appelée l'*identité de Jacobi* et l'opération bilinéaire [...] est appelée le *crochet de Lie*.

5.2.1. Groupes de Lie compacts et non-compacts

Un groupe de Lie est habituellement appelé *compact* si ses paramètres prennent des valeurs continues dans des domaines compacts (fermés et bornés). Sinon, on parlera de groupe *non-compact*. L'algèbre de Lie correspondante est appelée compacte et non-compacte, respectivement.

Pour expliciter la définition des groupes de Lie compacts et non-compacts, nous utiliserons les groupes $SU(n)$ et $SU(p, q)$, respectivement, avec $p + q = n$, qui conviennent parfaitement pour notre besoin par la suite⁵ [10, 11].

Groupes et algèbres de Lie compacts $SU(n)$

Les groupes $SU(n)$ sont les matrices $n \times n$ de déterminant 1. Pour un opérateur $\hat{U} \in SU(n)$, nous avons la condition d'unitarité $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$.

Considérons alors l'action de l'opérateur $\hat{U}$ sur un vecteur de dimension n , $\mathbf{V} = (v_1, v_2, \dots, v_n)^T$, avec des composantes complexes $v_i (i = 1, 2, \dots, n)$. Nous obtenons un nouveau vecteur $\mathbf{V}' = \hat{U}\mathbf{V}$ et :

$$\|\mathbf{V}'\|^2 = \mathbf{V}'^\dagger \mathbf{V}' = \mathbf{V}^\dagger \hat{U}^\dagger \hat{U} \mathbf{V} = \mathbf{V}^\dagger \mathbf{V} = \|\mathbf{V}\|^2. \quad (5.6)$$

Ainsi, toutes les matrices de $SU(n)$ transforment les vecteurs complexes de dimension n de telle manière à conserver leur norme. Cette norme étant définie par :

$$\begin{aligned} \|\mathbf{V}'\| &= \sqrt{|v_1|^2 + |v_2|^2 + \dots + |v_n|^2} \\ &= \sqrt{\mathbf{V}^\dagger \hat{g} \mathbf{V}}, \end{aligned} \quad (5.7)$$

où $\hat{g}$ est le tenseur métrique. Nous avons une telle norme si le tenseur métrique est tout simplement la matrice unité de dimension n , c'est-à-dire $\hat{g} = \mathbf{I}_n$.

Groupes et algèbres de Lie non-compacts $SU(p, q)$

Comme généralisation des groupes de Lie compacts $SU(n)$, on peut envisager les groupes de Lie non—compacts $SU(p, q)$ qui transforment les vecteurs complexes de dimension $n = p + q$ de telle façon qu'une autre norme soit conservée, la norme définie par :

⁵Les groupes $SU(2)$ et $SU(1, 1)$ seront traités aux chapitres 6 et 9, respectivement.

$$\begin{aligned}\|\mathbf{V}^*\| &= \sqrt{|v_1|^2 + |v_2|^2 + \dots + |v_p|^2 - |v_{p+1}|^2 - |v_{p+2}|^2 - \dots - |v_n|^2} \\ &= \sqrt{\mathbf{V}^\dagger \hat{\mathbf{g}} \mathbf{V}}\end{aligned}\quad (5.8)$$

où $q = (p+1, p+2, \dots, n)$. Cette norme correspond au tenseur métrique :

$$\hat{\mathbf{g}} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_G & 0 \\ 0 & -\mathbf{I}_G \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$

On remarque que $\hat{U} \in \text{SU}(p, q)$ a un déterminant 1.

5.2.2. Construction des opérateurs de Casimir :

Un opérateur de *Casimir* est un opérateur qui commute avec tous les générateurs du groupe en question. Dans la théorie des harmoniques sphériques [21], les opérateurs du moment angulaire orbital $\mathbf{L}^2 (= \mathbf{J}^2)$ sont liés aux générateurs $\hat{J}_i$, avec $(i = x, y, z)$, du groupe des rotations de Lie $\text{SO}(3)$ [75]. L'opérateur $\mathbf{J}^2$ n'est pas un générateur, mais a la propriété particulière de commuter avec tous les générateurs. Cela fait de lui un opérateur de Casimir du groupe ou *opérateur invariant* [9, 10, 11, 75].

En général, il n'existe aucune méthode viable qui nous permet de construire les opérateurs de Casimir pour des groupes semi-simples quelconques. C'est uniquement dans le cas des groupes $\text{SU}(n)$ que les opérateurs de Casimir ont été construits sous formes polynomiales des générateurs :

$$\mathbf{C}_\lambda = \sum_i \sum_j c_{ij}^\lambda \dots (\hat{J}_i \hat{J}_j) \dots, \quad (\lambda \text{ facteur}) \quad (5.10)$$

où les c_{ij}^λ sont des fonctions bien définies des constantes de structure. Pour le groupe compact $\text{SU}(2)$, l'opérateur de Casimir est : $\mathbf{C}_2 = \hat{J}_0^2 + (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+)/2$, tandis que pour $\text{SU}(1,1)$, c'est l'opérateur $\overline{\mathbf{C}}_2 = \hat{J}_0^2 - (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+)/2$.

5.2.3. Invariance par rapport à un groupe de symétrie :

Soit $\hat{U}(\phi)$ les opérateurs d'un groupe de symétrie. L'invariance du système par rapport au groupe $\hat{U}(\phi)$ signifie que l'état initial $\psi(\mathbf{r}, t)$ qui satisfait l'équation de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (5.11)$$

et également l'état généré par la transformation de symétrie $\psi'(\mathbf{r}, t) = \hat{U}(\phi) \psi(\mathbf{r}, t)$ satisfait à la même équation de Schrödinger avec le même Hamiltonien $\mathbf{H}$, et donc :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H} \psi'(\mathbf{r}, t). \quad (5.12)$$

Pour examiner les conséquences de cette transformation, multiplions (5.11) par

l'opérateur du groupe $\hat{U}(\phi)$. Comme les paramètres du groupe ϕ sont en particulier indépendants du temps et en insérant l'identité $\mathbb{I}_c = \hat{U}^{-1}(\phi)\hat{U}(\phi)$ dans le membre de droite de l'équation, on obtient :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(\mathbf{r}, t) = \hat{U}(\phi) H \hat{U}^{-1}(\phi) \psi'(\mathbf{r}, t), \quad (5.13)$$

et l'identification avec (5.12) conduit à :

$$H = \hat{U}(\phi) H \hat{U}^{-1}(\phi) \quad \text{ou} \quad [H, \hat{U}(\phi)] = \hat{U}(\phi) H - H \hat{U}(\phi) \equiv 0. \quad (5.14)$$

Par conséquence, l'invariance du système par rapport au groupe $\hat{U}(\phi)$ nécessite que l'Hamiltonien H commute avec tous les opérateurs du groupe $\hat{U}(\phi)$, et donc qu'il commute avec tous les générateurs $\hat{J}_i$ du groupe.

On voit immédiatement que pour un état propre du Hamiltonien, par exemple ψ_0 , $H\psi_0 = \mathcal{E}_0\psi_0$, l'équation (5.12) implique :

$$\hat{U}(\phi) H \psi_0 = \hat{U}(\phi) \mathcal{E}_0 \psi_0 = \mathcal{E}_0 (\hat{U}(\phi) \psi_0), \quad (5.15)$$

c'est-à-dire que tous les états $\hat{U}(\phi)\psi_0$ du multiplet sont vecteurs propres du Hamiltonien avec la même valeur propre $\mathcal{E}_0$. En d'autres termes, *le Hamiltonien est dégénéré pour chaque multiplet du groupe de symétrie*. Ceci vaut également pour les valeurs propres des l -opérateurs de Casimir C_λ du groupe qui commutent avec H . En effet, on peut comprendre ceci la façon suivante : *les générateurs $\hat{J}_i$ du groupe de symétrie $\hat{U}(\phi)$ commutent avec H et les opérateurs invariants de Casimir $C_\lambda(\hat{J}_1, \hat{J}_2, \dots, \hat{J}_l)$ commutent avec $\hat{J}_i$, et donc :*

$$[C_\lambda(\hat{J}_1, \dots, \hat{J}_i, \dots, \hat{J}_l), \hat{J}_i] = 0, \quad \text{entraîne} \quad [C_\lambda(\hat{J}_1, \dots, \hat{J}_i, \dots, \hat{J}_l), \hat{U}(\phi)] = 0, \quad (5.16)$$

où tous les l -opérateurs invariants de Casimir commutent entre eux et bien sûr avec le Hamiltonien. Ainsi, *lorsqu'un système physique est invariant par rapport à un groupe de symétrie donné, les l -opérateurs invariants de Casimir de ce groupe représentent des grandeurs physiques conservées, et par conséquent fondamentales, par lesquelles le système physique sera désigné*⁶ [10, 11, 75].

5.3. Algèbres $\mathfrak{su}(2)$ et $\mathfrak{su}(1,1)$ de Lie :

Les groupes de symétrie sont utilisés pour décrire les états liés et les états de diffusion des Hamiltoniens (i.e. potentiels). Ces groupes sont caractérisés par des générateurs, et qui eux mêmes sont représentés par des opérateurs bosoniques et fermioniques correspondant à une certaine réalisation algébrique [37]. La méthode la plus

⁶On reconnaît ici le théorème de Noether.

simple souvent utilisée pour construire une telle algèbre consiste à introduire des produits bilinéaires d'opérateurs bosoniques de création et d'annihilation dans l'expression du Hamiltonien. Le nombre d'opérateurs bosoniques, n , est lié à la dimension de l'espace d par $n = d + 1$.

Pour des systèmes physiques à une dimension ($d = 1$), nous devons introduire deux opérateurs bosoniques a et b , et qui obéissent aux relations de commutation usuelles:

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= [b, b^\dagger] = 1, \\ [a, b^\dagger] &= [b, a^\dagger] = [a, b] = 0. \end{aligned} \quad (5.17)$$

5.3.1. La réalisation su(2) :

L'approche algébrique

Les quatre produits bilinéaires $a^\dagger a$, $a^\dagger b$, $b^\dagger a$ et $b^\dagger b$ génèrent le groupe unitaire bidimensionnel $U(2)$. Il est possible de regrouper ces quatre générateurs en une famille en introduisant le groupe $U(2) \supset SU(2)$:

$$\hat{J}_+ = a^\dagger b, \quad \hat{J}_- = b^\dagger a, \quad \hat{J}_0 = \frac{1}{2}(a^\dagger a - b^\dagger b). \quad (5.18)$$

On peut facilement remarquer que les générateurs $(\hat{J}_0, \hat{J}_\pm)$ vérifient les relations de commutation :

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hat{J}_0, \quad [\hat{J}_0, \hat{J}_\pm] = \pm\hat{J}_\pm, \quad (5.19)$$

ou encore sous une forme plus condensée : $\hat{J}_i = A^\dagger \frac{\sigma_i}{2} A$, ($i = x, y, z$). Ici, $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$ et

σ_i sont les trois matrices de Pauli. $A = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ est un spineur dans la représentation de Schwinger du groupe $SU(2)$.

Les opérateurs $\hat{J}_+$ et $\hat{J}_-$ peuvent être interprétés respectivement comme des opérateurs de *montée* et de *descente*, puisqu'ils augmentent ou diminuent le nombre quantique magnétique d'une unité. L'opérateur $\hat{J}_0$ est appelé *poids* car il fournit à l'algèbre le poids m . Cette séparation en termes d'opérateurs de montée, de descente et de poids se révèle très utile pour définir une base adaptée et pour la construction des éléments de matrices.

En générale, un quatrième générateur vient compléter la structure algébrique du groupe, il s'agit de l'opérateur invariant de Casimir du groupe $U(2) \supset SU(2)$ donné par $N = a^\dagger a + b^\dagger b$, où il représente le nombre bosonique total. Il commute avec tous les générateurs du groupe.

L'opérateur invariant de Casimir associé au groupe compact $SU(2)$ est lié à N par :

$$\begin{aligned}
C_2 &= \frac{1}{4}N(N+2) \\
&= \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_0^2 - \hat{J}_0,
\end{aligned} \tag{5.20}$$

et ses valeurs propres sont données en termes du nombre quantique j par $\langle C_2 \rangle = j(j+1)$.

Les opérateurs C_2 et $\hat{J}_0$ forment la base de la représentation irréductible de l'algèbre $\mathfrak{su}(2)$ et les représentations irréductibles D_j du groupe $SU(2)$ peuvent être caractérisées par l'opérateur du nombre bosonique du groupe $U(2)$, $N = 2j$. Dès lors, la réalisation (5.18) mène à une représentation irréductible unitaire dégénérée $(2j+1)$ -fois pour $j = 0, 1/2, 1, \dots$

En tenant compte de la base $|j, m\rangle (m = j, j-1, \dots, -j+1, -j)$, alors l'action des générateurs sur la base est :

$$\begin{aligned}
\hat{J}_0 |j, m\rangle &= m |j, m\rangle, \\
\hat{J}_\pm |j, m\rangle &= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle, \\
C_2 |j, m\rangle &= j(j+1) |j, m\rangle.
\end{aligned} \tag{5.21}$$

L'approche potentiel

L'approche algébrique peut-être liée à l'équation de Schrödinger associée à un potentiel arbitraire en attribuant des formes différentielles convenables aux différents opérateurs bosoniques constituant l'algèbre. Ce lien ouvre la voie à un traitement algébrique pour une large classe de potentiels.

La connexion entre l'algèbre bosonique « abstraite » et l'approche potentiel est réalisée dans un espace harmonique bidimensionnel selon la réalisation suivante :

$$\begin{aligned}
a &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{\partial}{\partial x} \right), \\
a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{\partial}{\partial x} \right), \\
b &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y + \frac{\partial}{\partial y} \right), \\
b^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{\partial}{\partial y} \right),
\end{aligned} \tag{5.22}$$

où $\frac{\partial}{\partial x_i} = ip_{x_i}$, (on pose : $\hbar = 1$). Ici, les opérateurs différentiels (5.22) correspondent à un opérateur A étant défini par :

$$[A\psi](\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | A | \psi \rangle, \quad \psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle, \tag{5.23}$$

où $\mathbf{x} = (x, y)$ dans la représentation des coordonnées $\{x\}$. En termes des variables x et y ,

les deux opérateurs N et $\hat{J}_0$ deviennent :

$$\begin{aligned} N &= \frac{1}{2}(x^2 + y^2 - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - 2), \\ \hat{J}_0 &= -\frac{i}{2}(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}). \end{aligned} \quad (5.24)$$

En introduisant les transformations ponctuelles $x = r \cos \varphi$ et $y = r \sin \varphi$, où $0 \leq r < \infty$ et $0 \leq \varphi < 2\pi$, les opérateurs exprimés en (5.24) deviennent :

$$\begin{aligned} N &= \frac{1}{2}(-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + r^2) - 1, \\ \hat{J}_0 &= -\frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \end{aligned} \quad (5.25)$$

5.3.2. La réalisation $\text{su}(1,1)$:

L'approche algébrique

Contrairement à l'algèbre compacte $\text{su}(2)$ qui permet de construire les états liés (*discrets*) d'un système physique, l'algèbre non-compacte $\text{su}(1,1)$ permet de déterminer les états de diffusion (*continus*). Elle est, par conséquent, une extension analytique de $\text{su}(2)$ sur $\mathbb{C}$.

Le meilleur moyen de prolonger analytiquement l'algèbre $\text{su}(2)$ serait par la comlexification des générateurs (5.18):

$$\begin{aligned} \hat{J}_x &\rightarrow \hat{K}_x = i\hat{J}_x, \\ \hat{J}_y &\rightarrow \hat{K}_y = i\hat{J}_y, \\ \hat{J}_z &\rightarrow \hat{K}_z = \hat{J}_z. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Cependant, ce prolongement est caractérisé par la non-herméticité des opérateurs $\hat{K}_x$ et $\hat{K}_y$, et donc ne correspondent pas à des observables physiques. En utilisant le même ensemble d'opérateurs bosoniques que dans (5.18), l'algèbre $\text{su}(1,1)$ permet de les regrouper en une famille telle que:

$$\hat{K}_+ = a^\dagger b^\dagger, \quad \hat{K}_- = ab, \quad \hat{K}_0 = \frac{1}{2}(a^\dagger a + b^\dagger b + 1). \quad (5.27)$$

Ces trois opérateurs génèrent l'algèbre non-compacte $\text{su}(1,1)$:

$$[\hat{K}_+, \hat{K}_-] = -2\hat{K}_0, \quad [\hat{K}_0, \hat{K}_\pm] = \pm \hat{K}_\pm. \quad (5.28)$$

Cette manière d'exprimer les opérateurs permet de restaurer la notion de l'herméticité. En effet, il est facile de vérifier que $\hat{K}_+^\dagger = \hat{K}_-$ et $\hat{K}_0^\dagger = \hat{K}_0$ et par conséquent,

les opérateurs $\hat{K}_x$, $\hat{K}_y$ et $\hat{K}_z$ sont tous hermétiques explicitement. Les expressions (5.28) peuvent être généralisées en $\hat{K}_i = B^\dagger \frac{\lambda_i}{2} B$, avec $i = (x, y, z)$, où $B = \begin{pmatrix} a \\ b^\dagger \end{pmatrix}$ est un spineur dans la représentation de Schwinger. λ_1 et λ_2 sont les matrices de Pauli σ_1 et σ_2 , respectivement, tandis que λ_3 est la matrice unitaire 2×2 .

Il est intéressant de regrouper les deux représentations en une seule; c'est-à-dire en:

$$\hat{J}_i(\varepsilon) = A^\dagger(\varepsilon) \frac{\lambda_i(\varepsilon)}{2} A(\varepsilon), \quad i = x, y, z, \quad (5.29)$$

où $\varepsilon = 1$ et $\varepsilon = -1$ sont associées avec les groupes $SU(2)$ et $SU(1,1)$, respectivement, et

$$\begin{aligned} A(\varepsilon) &= \begin{pmatrix} a \\ \frac{1+\varepsilon}{2}b + \frac{1-\varepsilon}{2}b^\dagger \end{pmatrix}, \\ \lambda_1(\varepsilon) &= \sigma_1, \\ \lambda_2(\varepsilon) &= \sigma_2, \\ \lambda_3(\varepsilon) &= \left(\frac{1-\varepsilon}{2}\right)\mathbb{I}_G + \left(\frac{1+\varepsilon}{2}\right)\sigma_3. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Pour compléter l'algèbre $\mathfrak{u}(1,1) \supset \mathfrak{su}(1,1)$, on aura besoin d'un quatrième opérateur. Il s'agit, par analogie avec le cas compact, de l'opérateur invariant de Casimir donné par $M = a^\dagger a - b^\dagger b$. Pour l'algèbre $\mathfrak{su}(1,1)$, l'opérateur de Casimir est lié à M par:

$$\begin{aligned} C_{1,1} &= \frac{1}{4}(M+1)(M-1) \\ &= -\hat{K}_+ \hat{K}_- + \hat{K}_0^2 - \hat{K}_0. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Ainsi, si $\langle C_{1,1} \rangle = k(1-k)$, alors on trouve que $\langle M \rangle = 1 - 2k$. Par conséquent, l'action des opérateurs (5.27) sur la base $|k, n\rangle$, avec $n = 0, 1, 2, \dots$, conduit à une représentation irréductible unitaire infinie, souvent appelée la *représentation positive* D_k^+ , et qui correspond à tous les $k = 1/2, 1, 3/2, \dots$:

$$\begin{aligned} \hat{K}_0 |k, n\rangle &= (k+n) |k, n\rangle, \\ \hat{K}_+ |k, n\rangle &= \sqrt{(2k+n)(n+1)} |k, n+1\rangle, \\ \hat{K}_- |k, n\rangle &= \sqrt{n(2k+n-1)} |k, n-1\rangle, \\ C_{1,1} |k, n\rangle &= k(1-k) |k, n\rangle. \end{aligned} \quad (5.32)$$

L'approche potentiel

De la même manière que les représentations $\mathfrak{su}(2)$ sont liées à l'équation de Schrödinger correspondante aux solutions des états liés, les représentations $\mathfrak{su}(1,1)$ sont liées aux solutions des états diffusés pour un potentiel arbitraire.

Pour démontrer cette proposition explicitement, utilisons les transformations (5.22) et écrivons les opérateurs M et $\hat{K}_0$ en termes des variables x et y , on obtient:

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{2} [x^2 - y^2 - (\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2})], \\ \hat{K}_0 &= \frac{i}{2} (x \frac{\partial}{\partial y} + y \frac{\partial}{\partial x}). \end{aligned} \tag{5.33}$$

À l'instar des transformations ponctuelles trigonométriques, nous introduisons des transformations hyperboliques telles que $x = r \cosh \varphi$ et $y = r \sinh \varphi$, avec $0 \leq r < \infty$ et $0 \leq \varphi < \infty$. En termes des nouvelles variables, les opérateurs M et $\hat{K}_0$ deviennent:

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{2} (-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + r^2), \\ \hat{K}_0 &= \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \end{aligned} \tag{5.34}$$

CHAPITRE 6

CONNEXION DES POTENTIELS GENERALISES DE MORSE ET PÖSCHL-TELLER⁷

Les représentations unitaires des groupes permettent de déduire les états liés et les états de diffusion de certains potentiels [9, 37]. Ainsi, la structure du groupe $SU(2)$ correspond au problème des états liés tandis que le problème des états de diffusion sont obtenus par un prolongement analytique de $SU(2)$ vers $SU(1,1)$ [10, 11]. Il a été démontré que les potentiels de Morse [53] et de Pöschl--Teller [54] peuvent être construits, respectivement, sur un plan bidimensionnel de l'oscillateur harmonique et sur une sphère par l'algèbre $su(2)$. La connexion entre les potentiels de Morse et de Pöschl-Teller a été établie par Y. Alhassid et al. [37]. Ce dernier nous ouvre la voie de prolonger cette connexion dans la cadre des potentiels généralisés déduits par la supersymétrie de la mécanique quantique, en vue d'établir la connexion entre eux via l'équation de Schrödinger par un traitement algébrique du groupe $SU(2)$. Nous démontrons que les équations de Schrödinger sont liées par la transformation de Fourier alors que les potentiels généralisés sont connectés par la transformée de Hankel [40].

Nous commencerons ce chapitre par déduire les potentiels généralisés de Morse et de Pöschl-Teller en utilisant la supersymétrie de la mécanique quantique. Puis, partant de l'équation de Schrödinger du potentiel généralisé de Morse, on déduit celle correspondante au potentiel généralisé de Pöschl-Teller ainsi que le lien entre leurs spectres d'énergie.

6.1. Potentiels généralisés de Morse et de Pöschl-Teller

Nous commençons ici par rappeler quelques concepts utilisés en supersymétrie de la mécanique quantique ainsi que des propriétés algébriques du groupe $SU(2)$ du chapitre 5, notamment les identités (5.25), qui nous permettent de générer les équations de Schrödinger correspondantes aux potentiels de Morse et de Pöschl-Teller.

Les supercharges Q et $Q^\dagger$ sont définies par :

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.1)$$

et le Hamiltonien supersymétrique s'écrit comme suit :

⁷Ce chapitre est entièrement consacré à la traduction de l'article [40]

$$H_{ss} = \begin{pmatrix} A^\dagger A & 0 \\ 0 & AA^\dagger \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix}, \quad (6.2)$$

où H_+ et H_- sont des Hamiltoniens superpartenaires. À l'exception de l'énergie de l'état fondamental, les spectres de H_+ et H_- sont identiques.

L'opérateur invariant de Casimir N et l'opérateur hermitique $\hat{J}_0$ associés au groupe $U(2) \supset SU(2)$ sont donnés par :

$$\begin{aligned} N &= \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + r^2 \right) - 1, \\ \hat{J}_0 &= -\frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

6.1.1. Potentiels généralisés de Morse

L'action de (6.3) sur la fonction d'onde $\psi(r, \varphi) = R(r)e^{2\sqrt{E_M}\varphi}$, en tenant en considération la transformation $r^2 = 2\lambda e^{-\rho}$, conduit à l'équation de Schrödinger d'une particule soumise au potentiel unidimensionnel de Morse [40, 55] :

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} + \lambda^2 (e^{-2\rho} - 2e^{-\rho}) \right] R(\rho) = E_M R(\rho). \quad (6.4)$$

Le potentiel de Morse est défini par [53] :

$$V_M(x) = \lambda^2 (e^{-2\rho} - 2e^{-\rho}), \quad (6.5)$$

où la constante λ est un paramètre caractérisant le potentiel de Morse.

Le déplacement du potentiel d'une quantité $(\lambda - \frac{1}{2})^2$ permet de décaler l'énergie de l'état fondamental à zéro, i.e. $\mathcal{E}_{+,0}^{(M)} = 0$:

$$\begin{aligned} \lambda^2 (e^{-2\rho} - 2e^{-\rho}) &\rightarrow \lambda^2 (e^{-2\rho} - 2e^{-\rho}) + (\lambda - \frac{1}{2})^2 \\ &= \lambda^2 (1 - e^{-\rho})^2 - \lambda + \frac{1}{4}. \end{aligned} \quad (6.6)$$

En définissant la factorisation [40, 55],

$$\begin{aligned} A &= \frac{d}{d\rho} + \lambda(1 - e^{-\rho}) - \frac{1}{2}, \\ A^\dagger &= -\frac{d}{d\rho} + \lambda(1 - e^{-\rho}) - \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (6.7)$$

permet d'écrire le Hamiltonien correspondant au potentiel de Morse (6.6) sous la forme :

$$H_+ \equiv A^\dagger A = -\frac{d^2}{d\rho^2} + \lambda^2(1 - e^{-\rho})^2 - \lambda + \frac{1}{4}. \quad (6.8)$$

Évidemment, les deux opérateurs A et $A^\dagger$ ne sont pas des opérateurs de création et d'annihilation habituels. Cependant, ils vérifient la relation de commutation suivante :

$$[A^\dagger, A] = -2\lambda e^{-\rho}, \quad (6.9)$$

et qui nous permet de définir le Hamiltonien supersymétrique H_- partenaire du Hamiltonien supersymétrique H_+ par :

$$\begin{aligned} H_- &\equiv AA^\dagger \\ &= A^\dagger A + 2\lambda e^{-\rho} \\ &= -\frac{d^2}{d\rho^2} + \lambda^2(1 - e^{-\rho})^2 - \lambda + \frac{1}{4} + 2\lambda e^{-\rho}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Désignons par $\psi_n^{(+)}$ la fonction d'onde propre du Hamiltonien H_+ . Substituons ce dernier par son expression opératoire et multipliant l'équation propre à gauche par A , on obtient :

$$A(A^\dagger A)\psi_n^{(+)} = \mathcal{E}_n A\psi_n^{(+)}. \quad (6.11)$$

La parenthèse dans (6.11) peut-être considérée à gauche, nous conduisant à la définition (6.10) du Hamiltonien H_- :

$$(AA^\dagger)A\psi_n^{(+)} \equiv H_- A\psi_n^{(+)} = \mathcal{E}_n A\psi_n^{(+)}. \quad (6.12)$$

Par conséquent, en désignant par $\psi_n^{(-)} = A\psi_n^{(+)}$ la fonction d'onde propre du Hamiltonien H_- , l'équation (6.12) est l'équation propre du Hamiltonien H_- . Ainsi, il devient évident que les deux Hamiltoniens superpartenaires ont le même spectre d'énergie.

Afin de générer la classe de potentiels généralisée de Morse, nous considérons le nouvel Hamiltonien $\tilde{H}_+ = B^\dagger B$ où les opérateurs $B^\dagger$ et B sont donnés par la nouvelle factorisation :

$$\begin{aligned} B &= \frac{d}{d\rho} + F_M(\rho), \\ B^\dagger &= -\frac{d}{d\rho} + F_M(\rho), \end{aligned} \quad (6.13)$$

où $F_M(\rho)$ est une fonction à déterminer.

Nous imposons au Hamiltonien (6.10) la condition $H_- = BB^\dagger$. Nous obtenons :

$$BB^\dagger = \left(\frac{d}{d\rho} + F_M(\rho)\right)\left(-\frac{d}{d\rho} + F_M(\rho)\right),$$

$$= -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{d}{d\rho} F_M(\rho) + F_M^2(\rho). \quad (6.14)$$

L'équation (6.14) est une équation différentielle ordinaire de Ricatti,

$$\frac{d}{d\rho} F_M(\rho) + F_M^2(\rho) = \lambda^2 (1 - e^{-\rho})^2 + 2\lambda e^{-\rho} - \lambda + \frac{1}{4}, \quad (6.15)$$

et dont la solution particulière est $f(\rho) = \lambda(1 - e^{-\rho}) - 1/2$. La solution générale de la fonction $F_M(\rho)$ est [40, 55] :

$$F_M(\rho) = \lambda(1 - e^{-\rho}) - \frac{1}{2} + \frac{\exp[-(2\lambda - 1)\rho - 2\lambda e^{-\rho}]}{\gamma + \int_0^\rho d\rho' \exp[-(2\lambda - 1)\rho' - 2\lambda e^{-\rho'}]}, \quad (6.16)$$

où γ est une constante d'intégration choisie positive pour éviter des singularités.

En tenant compte de (6.13), la relation de commutation entre les opérateurs B et $B^\dagger$ conduit à exprimer le nouvel Hamiltonien $\tilde{H}_+$ en termes de son superpartenaire H_- sous la forme :

$$\begin{aligned} \tilde{H}_+ &= BB^\dagger + [B^\dagger, B], \\ &= H_- - 2 \frac{d}{d\rho} F_M(\rho). \end{aligned} \quad (6.17)$$

En insérant l'expression analytique de H_- et en différenciant la fonction $F_M(\rho)$, nous obtenons, finalement, l'expression de $\tilde{H}_+$:

$$\tilde{H}_+ = -\frac{d^2}{d\rho^2} + \lambda^2 (1 - e^{-\rho})^2 - \lambda + \frac{1}{4} - 2 \frac{d}{d\rho} \frac{\exp[-(2\lambda - 1)\rho - 2\lambda e^{-\rho}]}{\gamma + \int_0^\rho d\rho' \exp[-(2\lambda - 1)\rho' - 2\lambda e^{-\rho'}]}, \quad (6.18)$$

où le potentiel correspondant (6.18) est appelé le *potentiel généralisé* (ou *classe de potentiels de Morse*).

Selon la supersymétrie, les Hamiltoniens supersymétriques $\tilde{H}_+$ et H_- ont le même spectre d'énergie à l'exception de l'état fondamental. Les fonctions d'onde $\Psi_n^{(+)}$ de $\tilde{H}_+$ sont reliées aux fonctions d'onde $\psi_n^{(-)}$ de H_- et aux fonctions d'onde $\psi_n^{(+)}$ du Hamiltonien de Morse d'origine H_+ par :

$$\Psi_n^{(+)} = B^\dagger \psi_n^{(-)} = B^\dagger A \psi_n^{(+)} \quad (6.19)$$

À l'état fondamental, la fonction d'onde $\Psi_0^{(+)}$ est donnée par l'équation différentielle $B\Psi_0^{(+)} \equiv 0$, et dont la solution est :

$$\Psi_0^{(+)}(\rho) = N_0 \exp\left\{-\left(\lambda - \frac{1}{2}\right)\rho \exp\left[\lambda e^{-\rho} - \int_0^\rho d\rho' q_{\lambda,\gamma}^{(M)}(\rho')\right]\right\}, \quad (6.20)$$

où

$$q_{\lambda,\gamma}^{(M)}(\rho) = \frac{\exp[-(2\lambda - 1)\rho - 2\lambda e^{-\rho}]}{\gamma + \int_0^\rho d\rho' \exp[-(2\lambda - 1)\rho' - 2\lambda e^{-\rho'}]}. \quad (6.21)$$

L'équation de Schrödinger du potentiel généralisé de Morse est :

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} + \lambda^2(1 - e^{-\rho})^2 - \lambda + \frac{1}{4} - 2\frac{d}{d\rho} q_{\lambda,\gamma}^{(M)}(\rho)\right]R(\rho) = \mathcal{E}_M R(\rho). \quad (6.22)$$

Le changement de variable $\rho = \ln \frac{2\lambda}{r^2}$ et l'introduction du paramètre $a = \lambda - \frac{1}{2}$ conduisent l'équation (6.22) à s'exprimer par [40] :

$$\left[-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{d}{dr} + r^2 + \frac{4(a^2 - \mathcal{E}_M)}{r^2} + \frac{4}{r} \frac{d}{dr} q_{a,\gamma}^{(M)}(r)\right]R(r) = (4a + 2)R(r), \quad (6.23)$$

où

$$q_{a,\gamma}^{(M)}(r) = \frac{\left(\frac{r^2}{2a+1}\right)^{2a} e^{-r^2}}{\gamma + \int_0^{-\ln r^2/(2a+1)} dr' \left(\frac{-2}{r'}\right) \left(\frac{r'^2}{2a+1}\right)^{2a} e^{-r'^2}}. \quad (6.24)$$

6.1.2. Potentiels généralisés de Pöschl-Teller

La réalisation de l'algèbre $SU(2)$ sur la sphère nous mène à la construction de l'équation de Schrödinger correspondant au potentiel de Pöschl-Teller. Cette dernière est obtenue une fois que les transformations

$$\begin{aligned} \hat{J}_\pm &= e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{d}{d\theta} + i \cot \varphi \frac{d}{d\varphi}\right), \\ \hat{J}_0 &= -i \frac{d}{d\varphi}, \\ N &= -\left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d}{d\theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\theta^2}\right). \end{aligned} \quad (6.25)$$

sont réalisées. La substitution $\cos \theta = \tanh \rho$ avec $-\infty < \rho < \infty$ conduit l'équation d'état $N\xi(\theta, \varphi) = \mu(\mu+1)\xi(\theta, \varphi)$, où $\xi(\theta, \varphi) = U(\theta)e^{\sqrt{\mathcal{E}_{PT}}\varphi}$, à l'équation de Schrödinger unidimensionnelle correspondante au potentiel de Pöschl-Teller :

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\mu(\mu+1)}{\cosh^2 \rho}\right]U(\rho) = \mathcal{E}_{PT} U(\rho). \quad (6.26)$$

Nous allons suivre les mêmes étapes du calcul que précédemment pour déterminer les potentiels généralisés de Pöschl-Teller, dont la forme usuelle est donnée par [54] :

$$V_{PT}(\rho) = -\frac{\mu(\mu+1)}{\cosh^2 \rho}. \quad (6.27)$$

où μ est une constante caractérisant le potentiel.

En attribuant des opérateurs de création et d'annihilation A et $A^\dagger$ au Hamiltonien d'origine H_+ , il est donc possible de factoriser ce dernier, en tenant compte de (6.27) :

$$\begin{aligned} A &= \frac{d}{d\rho} + \mu \tanh \rho, \\ A^\dagger &= -\frac{d}{d\rho} + \mu \tanh \rho, \end{aligned} \quad (6.28)$$

conduisant à l'expression du Hamiltonien d'origine [40] :

$$H_+ = -\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\mu(\mu+1)}{\cosh^2(\rho)} + \mu^2, \quad (6.29)$$

où le terme μ^2 exprime le déplacement du spectre d'énergie.

Les relations de commutation entre les opérateurs A et $A^\dagger$ permettent, comme dans le cas du potentiel de Morse, d'exprimer le Hamiltonien superpartenaire H_- de H_+ par :

$$\begin{aligned} H_- &\equiv AA^\dagger \\ &= A^\dagger A - [A^\dagger, A] \\ &= -\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\mu(\mu+1)}{\cosh^2 \rho} + \mu^2 + \frac{2\mu}{\cosh^2 \rho}. \end{aligned} \quad (6.30)$$

Les deux Hamiltoniens H_+ de H_- sont iso-spectraux ; c'est-à-dire ils ont le même spectre d'énergie. Leurs fonctions d'onde respectives $\phi_n^{(+)}$ et $\phi_n^{(-)}$ sont liées par l'identité $\phi_n^{(-)} = A\phi_n^{(+)}$.

Le nouvel Hamiltonien $\tilde{H}_+ = B^\dagger B$ est factorisé en termes de ces opérateurs comme suit :

$$\begin{aligned} B &= \frac{d}{d\rho} + F_{PT}(\rho), \\ B^\dagger &= -\frac{d}{d\rho} + F_{PT}(\rho), \end{aligned} \quad (6.31)$$

où $F_{PT}(\rho)$ est une fonction à déterminer. Nous imposons à l'Hamiltonien H_- d'être le superpartenaire de $\tilde{H}_+$, et de s'exprimer en termes des opérateurs $B^\dagger$ et B par $H_- = BB^\dagger$. En substituant les opérateurs (6.31) dans l'expression de H_- , en tenant compte de

l'expression analytique (6.30), on obtient l'équation différentielle de Ricatti :

$$\frac{d}{d\rho} F_{PT}(\rho) + F_{PT}^2(\rho) = -\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\mu(\mu+1)}{\cosh^2 \rho} + \mu^2, \quad (6.32)$$

dont la solution générale est donnée par [40] :

$$F_{PT}(\rho) = \mu \tanh \rho + \frac{\cosh^{-2\mu} \rho}{\gamma' + \int_0^\rho d\rho' \cosh^{-2\mu} \rho'}, \quad (6.33)$$

où γ' est une constante d'intégration définie positive.

Le nouvel Hamiltonien $\tilde{H}_+$ est défini, en termes des opérateurs B et $B^\dagger$, selon le produit :

$$\begin{aligned} \tilde{H}_+ &= B^\dagger B \\ &= BB^\dagger + [B^\dagger, B], \end{aligned} \quad (6.34)$$

et qui conduit à l'expression analytique suivante :

$$\tilde{H}_+ = -\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\mu(\mu+1)}{\cosh^2 \rho} + \mu^2 - 2 \frac{d}{d\rho} \frac{\cosh^{-2\mu} \rho}{\gamma' + \int_0^\rho d\rho' \cosh^{-2\mu} \rho'}. \quad (6.35)$$

Le potentiel correspondant à (6.35) est appelé le potentiel généralisé de Pöschl-Teller. Les Hamiltoniens supersymétriques $\tilde{H}_+$ et H_- ont le même spectre d'énergie, à l'exception de l'état fondamental. Les fonctions d'onde $\Xi_n^{(+)}$ de $\tilde{H}_+$ sont reliées aux fonctions d'onde $\xi_n^{(-)}$ de H_- et aux fonctions d'onde $\xi_n^{(+)}$ du Hamiltonien de Pöschl-Teller d'origine H_+ par :

$$\Xi_n^{(+)} = B^\dagger \xi_n^{(-)} = B^\dagger A \xi_n^{(+)}. \quad (6.36)$$

De (6.35), l'équation de Schrödinger du potentiel de Pöschl-Teller s'écrit :

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\mu(\mu+1)}{\cosh^2(\rho)} + \mu^2 - 2 \frac{d}{d\rho} \frac{\cosh^{-2\mu} \rho}{\gamma' + \int_0^\rho d\rho' \cosh^{-2\mu} \rho'} \right] U(\rho) = \mathcal{E}_{PT} U(\rho). \quad (6.37)$$

L'introduction des transformations ponctuelles [40] :

$$\zeta = \sinh \rho, \quad \sigma = \cot^{-1} \zeta, \quad t = \tan \frac{\sigma}{2}, \quad (6.38)$$

permettent de transformer (6.37) en :

$$\left[-t \frac{d}{dt} t \frac{d}{dt} - 4\mu(\mu+1) \frac{t^2}{(1+t^2)^2} + \mu^2 + 2t \frac{d}{dt} q_{\mu,\gamma'}^{(PT)}(t)\right]U(t) = \mathcal{E}_{PT}U(t), \quad (6.39)$$

avec

$$q_{\mu,\gamma'}^{(PT)}(t) = \frac{\left(\frac{2t}{1+t^2}\right)^{2\mu}}{\gamma' + \int_0^{-\ln t} dt' \left(\frac{-2}{1+t'^2}\right) \left(\frac{2t'}{1+t'^2}\right)^{2\mu-1}}. \quad (6.40)$$

En divisant toute l'équation (6.39) par t^2 , et en transposant le terme d'énergie en membre de gauche et le second terme du membre de gauche à droite, on déduit l'équation de Schrödinger [40] :

$$\left[-\frac{1}{t} \frac{d}{dt} t \frac{d}{dt} - \frac{\mathcal{E}_{PT} - \mu^2}{t^2} + \frac{2}{t} \frac{d}{dt} q_{\mu,\gamma'}^{(PT)}(t)\right]U(t) = \frac{4\mu(\mu+1)}{(1+t^2)^2}U(t). \quad (6.41)$$

Puisque les potentiels de Morse et de Pöschl-Teller semblent être liés à la même représentation du groupe $SU(2)$, nous conjecturons, par conséquent, l'existence d'une transformation plus large que les transformations ponctuelles canoniques qui permet de lier les équations de Schrödinger respectives, ainsi que les potentiels généralisés et leurs spectres d'énergie. C'est ce que nous allons démontrer dans la section 6.2.

6.2. Connexion des potentiels de Morse et de Pöschl-Teller

Un traitement systématique et unifié relatif aux deux potentiels généralisés est présenté dans cette section, où partant de l'équation de Schrödinger correspondante au potentiel généralisé de Morse (car il représente le cas le plus simple), nous construisons mathématiquement l'équation de Schrödinger associée au potentiel généralisé de Pöschl-Teller [40].

Rappelons que les états liés dépendent de la variable φ , étant trigonométrique. Par conséquent, les solutions de l'équation de Schrödinger associée au potentiel de Morse, à savoir $\psi(r, \varphi)$, doivent être périodiques en φ de période 2π

$$\psi(r, \varphi) = e^{2im\varphi}R(r), \quad (6.42)$$

où m est un entier dépendant de l'énergie et $R(r)$ est la solution radiale.

En évaluant la seconde dérivée de $\psi(r, \varphi)$ par rapport à φ , et en identifiant le résultat avec (6.23), on obtient:

$$\frac{d^2}{d\varphi^2} \equiv -4m^2 = -4(a^2 - \mathcal{E}_M), \quad (6.43)$$

et qui permet de re-exprimer l'équation de Schrödinger (6.23) par:

$$\left[-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{d}{dr} + r^2 - \frac{1}{r^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{4}{r} \frac{d}{dr} q_{a,\gamma}^{(M)}(r)\right] \psi(r, \varphi) = (4a + 2) \psi(r, \varphi). \quad (6.44)$$

Introduisons le changement de variable vectoriel bidimensionnel $\mathbf{t} \equiv (t_x, t_y)$ à travers les transformations [37]:

$$t_x = t \cos \Phi, \quad t_y = t \sin \Phi, \quad (6.45)$$

$$t = \frac{r^2}{2}, \quad \Phi = 2\varphi. \quad (6.46)$$

En performant les dérivées première et seconde par rapport à r et φ , en tenant compte des transformations (6.45) et (6.46), l'équation de Schrödinger (6.44) devient, en termes de t et Φ :

$$t \left[-\frac{1}{t} \frac{d}{dt} t \frac{d}{dt} - \frac{1}{t^2} \frac{d^2}{d\Phi^2} + \frac{2}{t} \frac{d}{dt} q_{a,\gamma}^{(M)}(t) + 1 \right] \psi(t, \Phi) = (2a + 1) \psi(t, \Phi), \quad (6.47)$$

avec

$$q_{\mu,\gamma}^{(M)}(t) = \frac{\left(\frac{t}{a+1/2}\right)^{2a} e^{-2t}}{\gamma + \int_0^{-\ln 2t/(2a+1)} dt' \left(\frac{2}{t'}\right) \left(\frac{t'}{a+1/2}\right)^{2a} e^{-2t'}}. \quad (6.48)$$

Parallèlement au vecteur $\mathbf{t}$, son conjugué canonique bidimensionnel est désigné par le vecteur $\boldsymbol{\tau} \equiv -i\nabla_{\mathbf{t}}$, où $\hbar = 1$. Le couple $(\mathbf{t}, \boldsymbol{\tau})$ vérifient les relations de commutation de Hylleraas [83]:

$$[t, \mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\tau}] = it, \quad (6.49)$$

$$[t, \tau^2] = (2i\mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\tau} - 1) \frac{1}{t}. \quad (6.50)$$

En appliquant la réalisation (6.49) et (6.50) sur l'équation (6.47), on obtient [40]:

$$t(1 + \tau^2) \psi(t, \Phi) = (2a + 1) \psi(t, \Phi), \quad (6.51)$$

avec

$$\tau^2 = -\frac{1}{t} \frac{d}{dt} t \frac{d}{dt} - \frac{1}{t^2} \frac{d^2}{d\Phi^2} + \frac{2}{t} \frac{d}{dt} q_{a,\gamma}^{(M)}(t). \quad (6.52)$$

Élevons au carré l'expression (6.51); ceci revient à multiplier cette dernière à gauche par l'opérateur $t(1 + \tau^2)$, i.e.

$$\begin{aligned} t(1 + \tau^2) t(1 + \tau^2) \psi(t, \Phi) &= (2a + 1) t(1 + \tau^2) \psi(t, \Phi) \\ &= (2a + 1)^2 \psi(t, \Phi), \end{aligned} \quad (6.53)$$

et en tenant compte de (6.50), le membre de droite de (6.53) devient:

$$\begin{aligned}
t(1+\tau^2)t(1+\tau^2)\psi(t,\Phi) &\equiv (t^2+t\tau^2)t(1+\tau^2)\psi(t,\Phi) \\
&= [t^2(1+\tau^2)-2it\boldsymbol{\tau}\cdot\mathbf{t}\frac{1}{t}+1](1+\tau^2)\psi(t,\Phi)
\end{aligned} \tag{6.54}$$

et en utilisant (6.49), on obtient:

$$[t^2(1+\tau^2)-2i\boldsymbol{\tau}\cdot\mathbf{t}+3](1+\tau^2)\psi(t,\Phi) = (2a+1)^2\psi(t,\Phi). \tag{6.55}$$

Introduisons maintenant les transformations canoniques qui consistent à échanger les coordonnées en moments d'impulsion à travers [37]:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{t}' \\ \boldsymbol{\tau}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{t} \\ \boldsymbol{\tau} \end{pmatrix}. \tag{6.56}$$

Il est évident que les transformations (6.56) ont les propriétés scalaires $t'^2 = \tau^2$, $\tau'^2 = t^2$ et $\mathbf{t}'\cdot\boldsymbol{\tau}' = -\boldsymbol{\tau}\cdot\mathbf{t}$. Ces transformations permettent de décrire les transformées de Fourier bidimensionnelles.

En termes de ces dernières, l'équation (6.55) devient:

$$[\tau'^2(1+t'^2)+2i\mathbf{t}'\cdot\boldsymbol{\tau}'+3](1+t'^2)\Psi(t',\Phi') = (2a+1)^2\Psi(t',\Phi'), \tag{6.57}$$

où, par conséquent, la fonction d'onde $\Psi(t',\Phi')$ est la transformée de Fourier de $\psi(t,\Phi)$. La transformée de Fourier de (6.52) est donnée par:

$$\tau'^2 \equiv -\frac{1}{t'}\frac{d}{dt'}t'\frac{d}{dt'} - \frac{1}{t'^2}\frac{d^2}{d\Phi'^2} + \frac{2}{t'}\frac{d}{dt'}Q_{a,\gamma}^{(M)}(t'), \tag{6.58}$$

où, comme il a été établi pour les fonctions d'onde, la fonction $\frac{1}{t'}\frac{d}{dt'}Q_{a,\gamma}^{(M)}(t')$ est la transformée de Fourier de la fonction $\frac{1}{t}\frac{d}{dt}q_{a,\gamma}^{(M)}(t)$.

Il est important de signaler ici que la transformée de Fourier n'est vérifiée que si la fraction $\frac{1}{t}$ fait partie intégrante de la fonction $\frac{1}{t}\frac{d}{dt}q_{a,\gamma}^{(M)}(t)$. Nous démontrons cette propriété intrinsèque de la fonction dans l'appendice A [40].

En insérant (6.58) ainsi que la définition du produit scalaire $\mathbf{t}'\cdot\boldsymbol{\tau}' = -it'\frac{d}{d\tau'}$ dans (6.57), on obtient:

$$[(-\frac{1}{t'}\frac{d}{dt'}t'\frac{d}{dt'} - \frac{1}{t'^2}\frac{d^2}{d\Phi'^2} + \frac{2}{t'}\frac{d}{dt'}Q_{a,\gamma}^{(M)}(t'))(1+t'^2) + 2t'\frac{d}{dt'} + 3](1+t'^2)\Psi(t',\Phi') = (2a+1)^2\Psi(t',\Phi'). \tag{6.59}$$

En introduisant la fonction d'onde $\xi(t',\Phi')$, de la sous-section 6.1.2, selon:

$$\xi(t',\Phi') = (1+t'^2)^{3/2}\Psi(t',\Phi'), \tag{6.60}$$

on déduit de (6.59), après dérivation et un long calcul, l'expression:

$$\left[-\frac{1}{t'} \frac{d}{dt'} t' \frac{d}{dt'} - \frac{1}{t'^2} \frac{d^2}{d\Phi'^2} + \frac{2}{t'} \frac{d}{dt'} Q_{a,\gamma}^{(M)}(t') \right] \xi(t', \Phi') = \frac{4a(a+1)}{(1+t'^2)^2} \xi(t', \Phi'). \quad (6.61)$$

Afin d'identifier l'équation (6.61) comme étant l'équation de Schrödinger correspondante au potentiel généralisé de Pöschl-Teller, nous introduisons la fonction d'onde $\xi(t', \Phi') = U(t') e^{im\Phi'}$. Il est intéressant de réexprimer le second terme du membre de gauche de (6.61) en termes d'un opérateur différentiel du second ordre, en différenciant $\xi(t', \Phi')$ par rapport à Φ' , donnant:

$$\frac{d^2}{d\Phi'^2} = \mathcal{E}_M - a^2, \quad (6.62)$$

et qui finalement conduit (6.61) à être exprimée par [40]:

$$\left[-\frac{1}{t'} \frac{d}{dt'} t' \frac{d}{dt'} - \frac{\mathcal{E}_M - a^2}{t'^2} + \frac{2}{t'} \frac{d}{dt'} Q_{a,\gamma}^{(M)}(t') \right] U(t') = \frac{4a(a+1)}{(1+t'^2)^2} U(t'). \quad (6.63)$$

Puisque l'équation de Schrödinger déduite en (6.63) a la même forme que celle déduite précédemment en (6.41), et du fait que non seulement la fonction d'onde $U(t')$ mais aussi la fonction $\frac{1}{t'} \frac{d}{dt'} Q_{a,\gamma}^{(M)}(t')$ sont concernées par la transformée de Fourier, suggère que les fonctions caractérisant les potentiels généralisés sont liées par:

$$\begin{aligned} F\left\{ \frac{1}{t} \frac{d}{dt} q_{a,\gamma}^{(M)}(t) \right\} &= \frac{1}{t'} \frac{d}{dt'} Q_{a,\gamma}^{(M)}(t') \\ &\equiv \frac{1}{t'} \frac{d}{dt'} q_{\mu,\gamma'}^{(PT)}(t'), \end{aligned} \quad (6.64)$$

où l'opérateur F désigne la transformée de Fourier. Il devient maintenant évident que les équations de Schrödinger correspondantes aux deux potentiels généralisés sont connectées à travers la transformée de Fourier, tandis que les potentiels généralisés, comme nous allons le démontrer dans l'annexe A, sont liés par la transformée de Hankel [40] (ou l'intégrale de Fourier-Bessel) connue comme l'une des formes sous laquelle la transformée de Fourier peut-être écrite.

6.2.1. La relation entre les spectres d'énergie :

Grâce aux résultats obtenus ci-dessus, il est possible d'établir la relation liant les spectres d'énergie entre eux. L'identification, terme à terme, des expressions (6.41) et (6.63) est vue comme le moyen sûr de déduire cette relation.

D'une part, en comparant les seconds termes des équations, en tenant compte du paramètre $a = \lambda - \frac{1}{2}$, on obtient :

$$\mathcal{E}_{PT} = \mathcal{E}_M + \mu^2 - \lambda^2 + \lambda - \frac{1}{4}. \quad (6.65)$$

D'autre part, en comparant les membres de droite des équations,

$$a(a+1) \equiv \lambda^2 - \frac{1}{4} = \mu(\mu+1), \quad \text{ou encore} \quad \mu^2 - \lambda^2 = -(\mu + \frac{1}{4}), \quad (6.66)$$

et en l'insérant dans (6.65), on obtient :

$$\mathcal{E}_{PT} = \mathcal{E}_M + \lambda - \mu - \frac{1}{2}. \quad (6.67)$$

On constate que le spectre d'énergie de Pöschl-Teller est décalé par rapport à celui de Morse par un facteur constant $\lambda - \mu - \frac{1}{2}$.

6.2.2. La relation entre les fonctions d'onde :

La transformée de Fourier de la fonction d'onde associée au potentiel généralisé de Morse $\psi(t_x, t_y)$ est donnée par:

$$\begin{aligned} \Psi(t_u, t_v) &\equiv \mathcal{F}\{\psi(t_x, t_y)\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_x \int_{-\infty}^{\infty} dt_y \psi(t_x, t_y) \exp[-i(t_u t_x + t_v t_y)]. \end{aligned} \quad (6.68)$$

En introduisant les transformations (6.45), l'équation intégrale (6.68) devient:

$$\Psi(t', \Phi') = \int_0^{2\pi} d\Phi \int_0^{\infty} t dt \psi(t, \Phi) \exp[-itt' \cos(\Phi - \Phi')], \quad (6.69)$$

et en termes de la fonction d'onde de Pöschl-Teller, en tenant compte de (6.60),

$$\xi(t', \Phi') = (1 + t'^2)^{3/2} \int_0^{2\pi} d\Phi \int_0^{\infty} t dt \psi(t, \Phi) \exp[-itt' \cos(\Phi - \Phi')]. \quad (6.70)$$

La meilleure approche pour calculer l'intégrale en Φ consiste à utiliser la représentation intégrale des fonctions cylindriques de Bessel [56, 57]:

$$J_m(x) = \frac{1}{2i\pi} \oint dz z^{-1-m} \exp\left[\frac{x}{2}\left(z - \frac{1}{z}\right)\right] \quad (6.71)$$

où le contour est défini comme étant un cercle de rayon unité; i.e. $z = e^{i\Phi}$. En utilisant la définition du contour dans (6.71), et en substituant $x = tt'$ et $\Phi \rightarrow \Phi - \Phi' - \frac{\pi}{2}$, on obtient:

$$J_m(tt') = \frac{i^m}{2\pi} e^{im\Phi'} \int_0^{2\pi} d\Phi \exp[-itt' \cos(\Phi - \Phi') - im\Phi], \quad (6.72)$$

et en tenant compte de la substitution $m \rightarrow -m$ et de l'identité $J_{-m}(x) = (-1)^m J_m(x)$, on trouve:

$$\int_0^{2\pi} d\Phi \exp[-itt' \cos(\Phi - \Phi') + im\Phi] = 2\pi (-i)^m e^{im\Phi'} J_m(tt'). \quad (6.73)$$

En insérant le résultat (6.73) dans (6.70), en tenant en considérations les fonctions d'onde $\xi(t', \Phi') = e^{im\Phi'} U(t')$ et $\psi(t, \Phi) = e^{im\Phi} R(t)$, on trouve:

$$U(t') = 2\pi(-i)^m (1+t'^2)^{3/2} \int_0^\infty t dt R(t) J_m(tt'). \quad (6.74)$$

L'équation intégrale (6.74) est la relation liant les deux fonctions d'onde radiales, elle sera utilisée dans l'appendice A afin de déduire le lien entre les potentiels généralisés de Morse et de Pöschl-Teller.

INTRODUCTION DE LA TROISIEME PARTIE

Un cas particulièrement intéressant apparaît lorsque nous essayons de reformuler l'équation de Schrödinger dans le contexte d'une particule soumise à un potentiel arbitraire et dotée d'une masse dépendante de la position [62]. L'étude des systèmes physiques avec des masses effectives dépendantes de la position a été le sujet de nombreux travaux scientifiques ces dernières années [62, 63, 64, 65, 66]. Indépendamment d'être un sujet intéressant lui-même, une telle équation a trouvée une large application dans les sciences des matériaux et en physique de la matière condensée, non seulement dans la description du mouvement des électrons dans des semi-conducteurs à puits quantique [62, 63], mais aussi on la trouve dans l'étude des puits et liquides quantiques, les propriétés du ^3He , les impuretés dans les cristaux [67], etc.

Cependant, la théorie a été depuis longtemps confrontée à un dilemme, celui du problème d'ordonnancement (*ordering problem*). En effet, puisque la masse, dépendante de la position, et l'opérateur d'impulsion ne commutent pas dans les problèmes relatifs aux masses variables, la question concernant la forme correcte que peut prendre l'opérateur de l'énergie cinétique dans le Hamiltonien généralisé est d'une importance capitale [63, 64, 65]. Ce problème existe depuis de longue date en mécanique quantique et il est considéré aujourd'hui comme une ambiguïté.

Bien que le traitement de l'équation de Schrödinger avec masses effectives soit difficile, plusieurs méthodes ont été élaborées pour éviter cette ambiguïté. D'une part, en proposant des modèles théoriques dans l'unique but est de construire une équation de Schrödinger pour masses effectives dépourvue d'ambiguïté [63], d'autre part, des modèles ont été introduits pour établir la relation entre la solution exacte de l'équation de Schrödinger avec masse effective et l'ambiguïté d'ordonnancement [64, 65].

Les transformations ponctuelles canoniques est l'une de ces méthodes qui consiste à faire introduire une transformation qui permet de passer de l'équation de Schrödinger avec masse effective (appelé *problème cible*) à une équation de Schrödinger conventionnelle avec masse constante (appelé *problème référence*) dans le but d'obtenir le spectre et la fonction d'onde du système d'origine (problème cible) [66].

Dans un contexte différent, le traitement algébrique par les groupes dynamiques permet de trouver une large classe de potentiels définis par Natanzon [60, 61] pour lesquels des solutions analytiques aux problèmes des états liés peuvent être obtenues.

Une conception différente de l'algèbre des spectres générés (*spectrum-generating algebra*), bien que pas totalement indépendantes des autres concepts, a été introduite pour décrire des systèmes physiques [10, 11]. Dans sa nouvelle version, les générateurs de l'algèbre des potentiels générés peuvent être utilisés pour remplacer les variables

canoniques dans l'équation de Schrödinger [37, 38, 58, 59, 69, 70, 71, 72] de telle manière que les états liés du spectre d'énergie sont connectés aux valeurs propres du générateur compact du groupe $SO(2,1)$, i.e. $\hat{J}_0$. Cette méthode est fondée sur une réalisation infinitésimale des générateurs $\hat{J}_\mu$ ($\mu = 0, +, -$) du groupe $SO(2,1)$ en termes des opérateurs différentiels ainsi que la connaissance de la représentation unitaire du groupe. Elle a permis de générer les solutions analytiques de l'équation de Schrödinger à toute la classe hypergéométrique dégénérée de Natanzon comptant 3 potentiels⁸, ainsi que les solutions analytiques de la classe hypergéométrique de Natanzon comptant 9 potentiels⁹ [38, 60, 61].

Cette dernière partie est organisée comme suit. Le chapitre 7 est consacré aux considérations théoriques portées aux Hamiltoniens ayant une masse dépendante de la position [62, 63, 64]. La méthode des transformations ponctuelles canoniques et l'approche algébrique sont présentées pour résoudre l'équation de Schrödinger pour masse effective dépendante de la position [66, 70]. Dans le chapitre 8, les classes de potentiels hypergéométriques et hypergéométriques dégénérés de Natanzon sont générées par l'algèbre $su(1,1)$, et leur lien avec les polynômes orthogonaux est discuté [38].

Quant au dernier chapitre, il sera question de la traduction de l'article «**S.-A. Yahiaoui, M. Bentaiba, Int. J. Theo. Phys. 48 (2009) 315-322**» [41]. En combinant l'expression du Hamiltonien effectif de von Roos avec la réalisation différentielle des générateurs du groupe $U(1,1) \supset SU(1,1)$, nous déduisons l'expression du potentiel effectif. En exploitant l'idée des représentations conformes et en construisant la transformation du demi-plan droit sur un cercle de rayon unité, nous conduits à générer l'expression des potentiels hypergéométriques de Natanzon dotés d'une masse dépendante de la position. Par un choix convenables des paramètres, nous déduisons le potentiel de Ginocchio aussi bien dans sa forme hyperbolique que dans sa forme polynomiale, ainsi que son spectre d'énergie [61].

⁸On compte les potentiels de l'Oscillateur harmonique, Coulomb et Morse

⁹On compte les potentiels hyperboliques de Scarf, Pöschl-Teller, Pöschl-Teller généralisé et leurs versions trigonométriques, ainsi que les potentiels d'Eckart, Hulthén et Rosen-Morse

CHAPITRE 7

ÉQUATION DE SCHRÖDINGER ET POTENTIELS EFFECTIFS

Un intérêt particulier est porté ces dernières années aux problèmes relatifs à la masse effective et exactement solubles en mécanique quantique. Ceci concerne naturellement le fait que la description de ces systèmes physiques est très compliquée. Cependant, dans quelques cas, de tels systèmes peuvent être modifiés au moyen d'un opérateur Hamiltonien simple qui conduit aux problèmes usuels de la mécanique quantique.

Comme les propriétés spectrales de l'équation de Schrödinger pour masse constante sont bien connues, on peut aisément obtenir un potentiel correspondant à l'équation de Schrödinger pour une masse effective avec un spectre identique.

7.1. Considérations théoriques

L'approche de la théorie des bandes d'énergie avec masse effective pour le problème du puits quantique exige que la fonction d'onde ψ satisfait l'équation de Schrödinger:

$$H\psi = \mathcal{E}\psi, \quad (7.1)$$

où la masse est définie comme étant un produit des masses effectives constante et dépendante de la position; i.e. $M(\hat{x}) = m_0 m(\hat{x})$ et E est l'énergie (valeur propre) de l'opérateur Hamiltonien H . Ce dernier est la somme de l'opérateur de l'énergie cinétique $T(\hat{p}, \hat{x})$ et l'opérateur de l'énergie potentielle $V(\hat{x})$, i.e. $H = T(\hat{p}, \hat{x}) + V(\hat{x})$.

L'opérateur de l'énergie cinétique est composé de quatre éléments: $1/\sqrt{m(\hat{x})}$, $1/\sqrt{m(\hat{x})}$, $\hat{p}$, et $\hat{p}$ [63, 64, 65], où $\hat{x}$ et $\hat{p}$ sont les opérateurs de position et d'impulsion, respectivement, et $m_0 = 1$. Puisque les opérateurs $1/\sqrt{m(\hat{x})}$ et $\hat{p}$ ne commutent pas, alors il existe différentes permutations possibles de présenter l'opérateur de l'énergie cinétique.

Tous les Hamiltoniens à masse effective de la théorie des bandes sont des cas particuliers du Hamiltonien général introduit par A. De Souza Dutra et C. A. S. Almeida [64] afin d'adapter la possibilité d'inclure le cas d'ordonnement de Weyl:

$$H_{SD-A} = \frac{1}{4(a+1)} [a(m^{-1}p^2 + p^2m^{-1}) + m^\alpha \hat{p}m^\beta \hat{p}m^\gamma + m^\gamma \hat{p}m^\beta \hat{p}m^\alpha] + V(x), \quad (7.2)$$

où les paramètres α , β et γ sont régis par la contrainte $\alpha + \beta + \gamma = -1$ et a est un paramètre réel.

En appliquant le principe de correspondance de la mécanique ondulatoire; i.e.

$\hat{p} \rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx}$ et $\hat{x} \rightarrow x$, l'équation de Schrödinger effective (7.1), avec la contrainte en termes de β ; i.e. $\beta = -(\alpha + \gamma + 1)$, peut-être écrite sous une forme différentielle:

$$-\frac{\hbar^2}{2m(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{\hbar^2}{2} \frac{m'(x)}{m(x)} \frac{d\psi(x)}{dx} + V_{eff}(x)\psi(x) = \mathcal{E}\psi(x), \quad (7.3)$$

où le potentiel $V_{eff}(x)$ désigne l'énergie potentielle effective d'où la forme algébrique dépend du potentiel utilisé:

$$V_{eff}(x) = V(x) + U_{a,\alpha\gamma}(x) \\ = V(x) - \frac{\hbar^2}{4m^3(a+1)} [(\alpha + \gamma - a)m(x)m''(x) + 2(a - \alpha\gamma - \alpha - \gamma)m'^2(x)], \quad (7.4)$$

où le prime ' de la dérivé de la masse $m(x)$ par rapport à la variable x . Il devient clair que le potentiel effectif est la somme des deux potentiels; à savoir, le potentiel $V(x)$ appelé *profil* et le potentiel $U_{a,\alpha\gamma}(x)$ appelé *modifié*. Ce dernier est la conséquence de la dépendance spatiale de la masse effective.

Il est à noter que tous les paramètres d'ambiguïté sont contenus dans le terme $U_{a,\alpha\gamma}(x)$, et ils peuvent être éliminés en imposant quelques contraintes, à savoir [64]

$$\alpha + \gamma - a = 0, \quad \gamma - \alpha - \gamma = 0, \quad (7.5)$$

qui conduisent à deux solutions équivalentes: (i) $\alpha = 0$ et $a = \gamma$, (ii) $a = \alpha$ et $\gamma = 0$. Dans ces deux cas, l'équation de Schrödinger effective ne dépend pas de l'ambiguïté, cependant elle contient le terme de la première dérivée en x .

Dans le cas particulier $a = 0$, le Hamiltonien de De Souza Dutra-Almeida se réduit au Hamiltonien de von Roos [63],

$$H_{vR} = \frac{1}{4} [m^\alpha(x) \hat{p} m^\beta(x) \hat{p} m^\gamma(x) + m^\gamma(x) \hat{p} m^\beta(x) \hat{p} m^\alpha(x)] + V(x), \quad (7.6)$$

où le potentiel effectif associé est donné par:

$$V_{eff}(x) = V(x) + U_{\alpha\gamma}(x) |_{a=0} \\ = V(x) - \frac{\hbar^2}{4m^3} [(\alpha + \gamma)m(x)m''(x) - 2(\alpha\gamma + \alpha + \gamma)m'^2(x)]. \quad (7.7)$$

Dans les sections suivantes nous présentons deux méthodes théoriques différentes pour résoudre l'équation (7.3) exactement, qui nous mènent à définir des potentiels analytiquement solubles pour les systèmes quantiques.

7.2. Les transformations ponctuelles canoniques :

Chaque classe de potentiels transporte en elle une représentation dynamique d'un groupe, ceci revient à dire que tous les potentiels de la classe peuvent être transformés l'un à l'autre par des transformations ponctuelles canoniques. Dès lors, résoudre le problème

pour un potentiel rangé dans une classe permet d'obtenir les solutions de tous les autres potentiels de la même classe. Ces transformations maintiennent la forme fonctionnelle du problème; en d'autres termes, elles préservent la forme de l'équation d'onde invariante. La méthode des transformations ponctuelles canoniques peut-être abordée de deux manières équivalentes que nous baptiserons: *directe* et *inversée*. Par commodité avec la section 7.1, nous commencerons par exposer la méthode inversée, pour revenir ensuite à la méthode directe.

7.2.1. La méthode inversée :

Cette méthode permet d'aborder le problème de la masse effective d'un point de vue fondamental sans venir à employer une forme particulière du potentiel effectif de l'équation (7.4) et (7.7), et arriver à déduire un résultat consistant pour les systèmes exactement solubles avec masse dépendante de la position. Elle permet de lier des systèmes physiques avec masse effective dépendante de la position à ceux ayant une masse effective constante.

Comme le but est de résoudre l'équation (7.3) pour obtenir le spectre d'énergie total et les fonctions d'onde des potentiels, il est donc nécessaire de transformer (7.3) en une forme plus simple. En appliquant les transformations,

$$x = f(z), \quad \psi(x) = \nu(z)\phi(z), \quad m(x) \equiv m[f(z)] = \tilde{m}(z), \quad (7.8)$$

sur (7.3), on obtient:

$$-\frac{\hbar^2}{2\tilde{m}}\left[\frac{d^2\phi}{dz^2} + \left(\frac{2\nu'}{\nu} - \frac{f''}{f'} - \frac{\tilde{m}'}{\tilde{m}}\right)\frac{d\phi}{dz} - \left(\frac{\nu'}{\nu}\left(\frac{f''}{f'} + \frac{\tilde{m}'}{\tilde{m}}\right) - \frac{\nu''}{\nu}\right)\phi\right] + f'^2[V_{eff}[f(z)] - \mathcal{E}]\phi = 0. \quad (7.9)$$

L'introduction des définitions sur les fonctions:

$$\nu(z) = C\sqrt{f'(z)\tilde{m}(z)}, \quad f'(z) = \sqrt{\frac{m_0}{\tilde{m}(z)}}, \quad (7.10)$$

où m_0 est la masse effective constante, permet de réduire (7.9) à une équation de Schrödinger à masse constante:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2\phi(z)}{dz^2} + \left[\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{5}{16}\frac{\tilde{m}'^2(z)}{\tilde{m}^2(z)} - \frac{1}{4}\frac{\tilde{m}''(z)}{\tilde{m}(z)}\right) + V_{eff}[f(z)]\right]\phi(z) = \mathcal{E}\phi(z). \quad (7.11)$$

Les équations (7.3) et (7.10) ont un spectre identique. Comme la fonction d'onde $\psi(z) \in L^2$, i.e. $\langle\psi(z)|\psi(z)\rangle = 1$ et en posant $C = 1/\sqrt{m_0}$, on déduit que la fonction d'onde $\phi(z) \in L^2$, i.e. $\langle\phi(z)|\phi(z)\rangle = 1$.

Pour simplifier d'avantage nos calculs, nous identifions la première équation de (7.10) à une équation différentielle ordinaire de type $f'^2(z) = m_0/m(z)$, dont la solution est donnée par:

$$z \equiv f^{-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{m_0}} \int \sqrt{m(x')} dx', \quad (7.12)$$

qui définit à travers une forme implicite la transformation $f(z)$ et, par conséquent, elle permet de déterminer $\tilde{m}(z)$ ainsi que l'expression du potentiel effectif $V_{eff}(x)$.

En tenant compte de:

$$\tilde{m}'(z) \equiv \frac{d\tilde{m}(z)}{dz} = \frac{dx}{dz} \frac{d\tilde{m}(z)}{dx} = f'(x)m'(x) = \sqrt{\frac{m_0}{m(x)}} \frac{dm(x)}{dx}, \quad (7.13)$$

l'équation (7.11) est réduite à la forme:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\phi(z)}{dz^2} + \left[\frac{\hbar^2}{32m^3(x)} (7m'^2(x) - 4m(x)m''(x)) + V_{eff}(x) \right]_{|x=z} \phi(z) = \mathcal{E}\phi(z). \quad (7.14)$$

Il est important de signaler que le changement de variable (7.12) peut ne pas être inversé ou pas facilement réversible¹⁰. Mais cela ne pose pas vraiment un problème en ce qui concerne la solvabilité de l'équation (7.3), ceci revient au fait que la variable z est définie *explicitement* en termes de la variable x .

Ainsi, écrire le potentiel effectif sous la forme:

$$V_{eff}(x) = V(x) - V_m(x), \quad (7.15)$$

où $V(x) \equiv V_{ES}(x)$ est le potentiel exactement soluble et $V_m(x)$ est la partie du potentiel effectif dépendante du terme de masse,

$$V_m(x) = \frac{\hbar^2}{32m^3(x)} [7m'^2(x) - 4m(x)m''(x)], \quad (7.16)$$

permet de déduire le spectre d'énergie du système (7.3) analytiquement. La fonction d'onde correspondante peut-être obtenue en utilisant (7.8).

7.2.2. La méthode directe :

L'approche directe consiste à appliquer les transformations ponctuelles canoniques à l'équation de Schrödinger à masse effective constante pour des potentiels dont les solutions exactes sont bien établies (problème référence), et de déduire les solutions exactes appropriées aux potentiels effectifs avec masse dépendante de la position (problème cible). Ainsi, le problème référence agit, dans la même classe, comme un *générateur* des solutions exactes.

Pour un potentiel unidimensionnel $V(y)$, l'équation de Schrödinger indépendante du temps à masse constante s'écrit:

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dy^2} + V(y) \right) \psi(y) = \mathcal{E} \psi(y), \quad (7.17)$$

où nous avons posé $\hbar = M = 1$. En invoquant la transformation $y \rightarrow x$ à travers la

¹⁰Nous rencontrerons dans le chapitre 9 cette propriété lors de la génération des potentiels dits de Ginocchio, où la variable z est définie implicitement en x

fonction $y = f(x)$, et en réécrivant la fonction d'onde sous la forme:

$$\psi(y) = g(x)\phi(x), \quad (7.18)$$

on déduit une équation de Schrödinger transformée en:

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - \left(\frac{g'}{g} - \frac{f''}{2f}\right)\frac{d}{dx} - \frac{1}{2}\left(\frac{g''}{g} - \frac{f''}{f'}\frac{g'}{g}\right) + f'^2 V[f(x)]\right]\phi(x) = f'^2 \mathcal{E}\phi(x). \quad (7.19)$$

À la différence de (7.9), l'équation (7.19) ne contient pas les termes des dérivées de la masse. En adoptant, dans l'expression du Hamiltonien, un ordonnancement de type de Weyl (souvent appelé *symétrique*) donné par (7.6) entre l'impulsion et la masse, on obtient l'équation effective de Schrödinger:

$$-\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{M(x)}\frac{d\phi(x)}{dx}\right] + V_{eff}(x)\phi(x) = \tilde{\mathcal{E}}\phi(x), \quad (7.20)$$

où $M(x) = m_0 m(x)$. En posant $m_0 = 1$, on déduit l'équation (7.3) et l'identification terme à terme avec (7.19) nous conduit aux expressions:

$$g(x) = \sqrt{\frac{f'(x)}{m(x)}}, \quad (7.21)$$

$$V_{eff}(x) - \tilde{\mathcal{E}} = \frac{f'^2(x)}{m(x)}(V[f(x)] - \mathcal{E}) - \frac{1}{2m(x)}\left(\frac{g''(x)}{g(x)} - \frac{f''(x)}{f'(x)}\frac{g'(x)}{g(x)}\right). \quad (7.22)$$

De (7.22), la contrainte $f'(x) = \sqrt{m(x)}$ pour déterminer l'allure de la fonction $f(x)$ à partir de $m(x)$ est considérée comme le meilleur choix convenable en vue de séparer les termes constants des fonctions. En la substituant dans (7.21) et (7.22), on obtient le potentiel cible:

$$V_{eff}(x) = V[f(x)] + \frac{1}{8m(x)}\left[\frac{m''(x)}{m(x)} - \frac{7}{4}\left(\frac{m'(x)}{m(x)}\right)^2\right], \quad (7.23)$$

où le dernier terme est identique à celui obtenu en (7.16). En désignant le spectre d'énergie des états liés et les fonctions d'onde du potentiel référence $V(y)$ par $\mathcal{E}_n$ et $\psi_n(y)$, le spectre d'énergie $\tilde{\mathcal{E}}_n$ et les fonctions d'onde $\phi_n(x)$ du potentiel cible (7.23) sont donnés par:

$$\tilde{\mathcal{E}}_n = \mathcal{E}_n, \quad (7.24)$$

$$\phi_n(x) \equiv \frac{1}{g(x)}\psi_n(y) = m^{1/4}(x)\psi_n[f(x)]. \quad (7.25)$$

En attribuant à la masse effective $m(x)$ une expression analytique et en connaissant le potentiel référence exactement soluble $V(y)$, nous pouvons obtenir la transformation $f(x)$ et construire le potentiel cible $V_{eff}(x)$ où l'équation effective de Schrödinger peut-être résolue exactement.

7.3. Traitement algébrique : le groupe $SO(2,1)$

L'équation de Schrödinger effective avec masse dépendante de la position a été également étudiée par les groupes de Lie, particulièrement, les groupes non-compacts $SO(n, m)$. Dans le but d'avoir un exemple simple et précis à disposition, nous considérons l'algèbre $so(2,1)$ ¹¹ [70].

Pour le Hamiltonien H , nous adoptons le modèle de von Roos (7.16) car il permet d'établir l'hermiticité. Il est facile de démontrer que si nous posons $M(x) = m_0 m(x)$, alors l'opérateur de l'énergie cinétique (7.6) [63]:

$$\begin{aligned}\hat{T} &= m^\alpha(x) \hat{p} m^\beta(x) \hat{p} m^\gamma(x) + m^\gamma(x) \hat{p} m^\beta(x) \hat{p} m^\alpha(x) \\ &= 2 \frac{d}{dx} \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} - (\beta+1) \frac{m''(x)}{m^2(x)} + 2[\alpha(\alpha+\beta+1) + \beta+1] \frac{m'^2(x)}{m^3(x)},\end{aligned}\quad (7.26)$$

ajuste les paramètres d'ambiguïté dans l'expression d'un potentiel effectif dépendant uniquement de $m(x)$ et de ses dérivées (on pose: $\hbar = 2m_0 = 1$)

$$V_{eff}(x) = V(x) + \frac{\beta+1}{2} \frac{m''(x)}{m^2(x)} - [\alpha(\alpha+\beta+1) + \beta+1] \frac{m'^2(x)}{m^3(x)}.\quad (7.27)$$

L'algèbre de Lie $so(2,1)$ est caractérisée par trois générateurs vérifiant les relations de commutation:

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_y] = -i\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hat{J}_y, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_x] = i\hat{J}_z,\quad (7.28)$$

où leurs formes différentielles sont données par:

$$\begin{aligned}\hat{J}_x &= -i(y \frac{d}{dz} + z \frac{d}{dy}), \\ \hat{J}_y &= i(x \frac{d}{dz} + z \frac{d}{dx}), \\ \hat{J}_z &= -i(x \frac{d}{dy} + y \frac{d}{dx}).\end{aligned}\quad (7.29)$$

Dans la représentation $(+,-,0)$, les générateurs (7.29) sont représentés par les opérateurs $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$ et $\hat{J}_0 \equiv \hat{J}_z$ et vérifient les relations de commutation [59, 69, 70]:

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = -2\hat{J}_0, \quad [\hat{J}_0, \hat{J}_\pm] = \pm\hat{J}_\pm,\quad (7.30)$$

Les relations de commutation sont identiques à celles déduites en (5.28) pour l'algèbre $su(1,1)$. Ceci est d'ailleurs évident puisque les deux algèbres sont isomorphes. En faisant agir les coordonnées hyperboliques polaires (r, ρ, ϕ) :

¹¹ L'algèbre $so(2,1)$ est isomorphe aux algèbres $su(1,1)$ et $sl(2, \mathbb{R})$.

$$\begin{aligned}
x &= r \cosh \rho \cos \phi, \\
y &= r \cosh \rho \sin \phi, \\
z &= r \sinh \rho,
\end{aligned} \tag{7.31}$$

où $r \geq 0$, $-\infty < \rho < \infty$ et $0 \leq \phi < 2\pi$, sur les générateurs $\hat{J}_{\pm}$ et $\hat{J}_0$, on obtient:

$$\begin{aligned}
\hat{J}_0 &= -i \frac{\partial}{\partial \phi}, \\
\hat{J}_{\pm} &= e^{\pm i\phi} \left(\mp \frac{\partial}{\partial \rho} - i \tanh \rho \frac{\partial}{\partial \phi} \right).
\end{aligned} \tag{7.32}$$

Dans le cas de masse effective dépendante de la position, les expressions des générateurs (7.32) sont généralisées sous la forme (on pose: $\rho \equiv x$) [70]:

$$\begin{aligned}
\hat{J}_0 &= -i \frac{\partial}{\partial \phi}, \\
\hat{J}_{\pm} &= e^{\pm i\phi} \left[\pm \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \frac{\partial}{\partial x} + F(x) \left(i \frac{\partial}{\partial \phi} \mp \frac{1}{2} \right) + G(x) \right],
\end{aligned} \tag{7.33}$$

où $F(x)$ et $G(x)$ sont des fonctions réelles vérifiant les équations différentielles ordinaires:

$$F'(x) = \sqrt{m(x)}(1 - F^2(x)), \quad G'(x) = -\sqrt{m(x)}F(x)G(x). \tag{7.34}$$

Comme dans le cas des représentations unitaires de $\text{SU}(1,1)$, on peut choisir les états correspondants comme états propres de l'opérateur de Casimir $\mathbf{C}$ et $\hat{J}_0$:

$$\mathbf{C} |k, \mu\rangle = k(k-1) |k, \mu\rangle, \quad \hat{J}_0 |k, \mu\rangle = \mu |k, \mu\rangle, \tag{7.35}$$

où $\langle x | k, \mu \rangle = \xi_{k,\mu}(x) e^{i\mu\phi}$ sont les bases appropriées à la représentation irréductible du groupe $\text{SO}(2,1)$ de type D_k^+ avec $\mu = k, k+1, k+2, \dots$. Le groupe $\text{SO}(2,1)$ est de rang 1 et n'a donc qu'un seul opérateur de Casimir $\mathbf{C} = \hat{J}_0^2 \mp \hat{J}_{\pm} \hat{J}_{\mp}$. Une fois développée en termes des expressions (7.33), l'équation propre de l'opérateur de Casimir de (7.35) devient:

$$\left[-\frac{1}{\sqrt{m(x)}} \frac{d}{dx} \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \frac{d}{dx} + V_{\mu}(x) \right] \xi_{k,\mu}(x) = -\left(k - \frac{1}{2}\right)^2 \xi_{k,\mu}(x), \tag{7.36}$$

dans lequel $V_{\mu}(x)$ décrit la classe des potentiels à un paramètre, μ :

$$V_{\mu}(x) = \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \left[\left(\frac{1}{4} - \mu^2 \right) F'(x) + 2\mu G'(x) \right] + G^2(x). \tag{7.37}$$

Il est évident que les fonctions $\xi_{k,\mu}(x)$ de (7.36) sont les fonctions d'onde des différents Hamiltoniens générés de (7.37) avec le même niveau d'énergie. L'équation (7.36) a une correspondance directe et biunivoque avec l'équation de Schrödinger effective

générée par le Hamiltonien de von Roos (7.20)($\equiv$ (7.3)) si nous transformons $\xi_{k,\mu}(x) \rightarrow m^{-1/4}(x)\psi_{k,\mu}(x)$, on obtient [70]:

$$\left[-\frac{d}{dx} \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} + \frac{m''(x)}{4m^2(x)} - \frac{7m'^2(x)}{16m^3(x)} + V_\mu(x)\right]\psi_{k,\mu}(x) = -\left(k - \frac{1}{2}\right)^2 \psi_{k,\mu}(x), \quad (7.38)$$

et qui conduit, en l'identifiant à (7.20), à:

$$V_{eff}(x) = \frac{m''(x)}{4m^2(x)} - \frac{7m'^2(x)}{16m^3(x)} + V_\mu(x), \quad (7.39)$$

$$\mathcal{E}_k = -\left(k - \frac{1}{2}\right)^2, \quad (7.40)$$

où l'expression du potentiel $V(x)$ est donnée, en utilisant (7.27), par:

$$V(x) = [\alpha(\alpha + \beta + 1) + \beta + \frac{9}{16}] \frac{m'^2(x)}{m^3(x)} - \frac{2\beta + 1}{4} \frac{m''(x)}{m^2(x)} + V_\mu(x). \quad (7.41)$$

L'ensemble des équations (7.38-41) constituent l'extension de la réalisation de l'algèbre $\mathfrak{so}(2,1)$ au cas de problème associé aux masses effectives dépendantes de la position. En particulier, l'équation (7.41) stipule que pour un potentiel donné $V(x)$ placé dans l'environnement approprié à la masse, l'algèbre des potentiels $\mathfrak{so}(2,1)$ permet de le construire à travers l'expression de $V_\mu(x)$ et possède aussi les mêmes spectres d'énergie (7.40). En effet, on constate que dans le cas d'une masse constante, $V(x)$ est réduit à $V_\mu(x)$.

CHAPITRE 8

CLASSE DES POTENTIELS DE NATANZON ET POLYNOMES ORTHOGONAUX

Plusieurs potentiels exactement solubles connus en mécanique quantique se sont avérés avoir la propriété dite potentiels aux formes invariantes (*shape-invariant potential*), un concept inspiré de la supersymétrie de la mécanique quantique [84]. En effet, les potentiels aux formes invariantes sont identiquement les mêmes que ceux déduits par la factorisation. Plusieurs tentatives ont été testées afin de trouver et classer tous les potentiels aux formes invariantes, et les résultats ont suggéré qu'hormis les 12 potentiels déjà connus¹², il n'y ait eu aucun autre qui peut-être déduit [38]. Ces études ont permis de clarifier le lien entre les formes invariantes et le concept de solvabilité, et d'identifier les potentiels aux formes invariantes comme une sous-classe spéciale des potentiels générales de Natanzon et de Natanzon dégénérés [60]. Ces potentiels dépendent de six paramètres et leurs solutions sont des fonctions hypergéométriques et hypergéométriques dégénérées, respectivement.

Nous utilisons ici la réalisation différentielle de l'algèbre $\mathfrak{su}(1,1)$, inspirée de l'approche potentiel du groupe [37], pour générer une large classe de potentiels exactement solubles [38]. À l'origine, cette procédure a été utilisée pour générer uniquement les potentiels connus, mais il a été démontré que tous les potentiels de Natanzon et de Natanzon dégénérés peuvent aussi être générés.

8.1. Le groupe $SU(1,1)$ et les potentiels solubles

À l'instar du chapitre précédent, nous utiliserons la représentation unitaire du groupe $SU(1,1)$ au lieu de $SO(2,1)$ ¹³.

Les générateurs du groupe de Lie non-compact $SU(1,1)$ obéissent aux relations de commutation (7.30):

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = -2\hat{J}_0, \quad [\hat{J}_0, \hat{J}_\pm] = \pm\hat{J}_\pm, \quad (8.1)$$

et l'opérateur invariant de Casimir C_2 est donné selon [38]:

¹²Voir la liste des potentiels cités dans *note de page*, pp. 88

¹³Rappelons que les deux algèbres sont isomorphes; i.e. $\mathfrak{su}(1,1); \mathfrak{so}(2,1)$

$$C_2 = \hat{J}_0^2 - \hat{J}_+ \hat{J}_-. \quad (8.2)$$

Les états propres de C_2 et $\hat{J}_0$ avec les valeurs propres $j(j+1)$ et m , respectivement, forment une base pour la représentation irréductible du groupe $SU(1,1)$, notée:

$$\langle x | j, m \rangle \equiv \Psi_{j,m}(x) = e^{im\phi} \psi_{j,m}(x) \quad (8.3)$$

Les générateurs sont développés en termes d'opérateurs différentiels linéaires, et le Hamiltonien est relié à l'opérateur invariant de Casimir par [10, 11, 38]:

$$H = -C_2 - \frac{1}{4}. \quad (8.4)$$

Les états liés de ces Hamiltoniens appartiennent à la représentation irréductible unitaire et discrète D_j^+ , avec $m = -j, -j+1, -j+2, \dots$

En utilisant la réalisation différentielle de Sukumar sur les générateurs [72]:

$$\hat{J}_0 = -i \frac{\partial}{\partial \phi}, \quad \hat{J}_{\pm} = e^{\pm i\phi} (\pm h(x) \frac{\partial}{\partial x} \pm g(x) + f(x) \hat{J}_0 + c(x)), \quad (8.5)$$

où $h(x), f(x), g(x)$ et $c(x)$ sont des fonctions réelles, on démontre que les relations de commutation (8.1) conduisent aux équations différentielles suivantes [38, 59, 71, 72]:

$$f^2(x) - h(x) \frac{df(x)}{dx} = 1, \quad h(x) \frac{dc(x)}{dx} - c(x) f(x) = 0. \quad (8.6)$$

En termes de cette réalisation, l'opérateur invariant de Casimir (8.2) devient:

$$C_2 = h^2(x) \frac{d^2}{dx^2} + h(x) \left(\frac{dh(x)}{dx} + 2g(x) - f(x) \right) \frac{d}{dx} - (f(x)g(x) - g^2(x) - h(x) \frac{dg(x)}{dx} + c^2(x)) - 2c(x)f(x)\hat{J}_0 + (1 - f^2(x))\hat{J}_0^2. \quad (8.7)$$

Il est important de signaler ici que l'algèbre $\mathfrak{su}(1,1)$ est invariante sous l'effet des transformations dites *similaires* des générateurs $\hat{J}_{\pm}$, $\hat{J}_0$ et de la base $|j, m\rangle$ [58]. En particulier, la fonction $y \equiv y(x)$ transforme $h(x)$ et la base des états en:

$$\begin{aligned} h(x) &\rightarrow \tilde{h}(y) = h[x(y)] \frac{dy}{dx} \equiv h[x(y)]u(y), \\ \Psi_{j,m}(x) &\rightarrow \tilde{\Psi}_{j,m}(y) = \tilde{\Psi}_{j,m}[x(y)]. \end{aligned} \quad (8.8)$$

Ayant construit les générateurs du groupe $SU(1,1)$ et l'opérateur invariant de Casimir C_2 , introduisons l'opérateur "nul" défini par:

$$X \equiv C_2 - j(j+1). \quad (8.9)$$

En substituant l'action du générateur $\hat{J}_0$ sur la fonction d'onde (8.3), i.e. $\langle \hat{J}_0 \rangle = m$,

l'opérateur nul peut-être transformé à l'équation de Schrödinger en passant par deux étapes successives:

1. Introduire la fonction $x \equiv x(y)$.
2. Sélectionner la transformation similaire qui permet d'éliminer le terme différentiel linéaire dans (8.7). Cela peut se réaliser par un choix approprié de la fonction $g(x)$.

Ces deux étapes sont appliquées dans le but de déduire des potentiels aux formes invariantes par un traitement algébrique et de discuter le rôle important de l'algèbre $\mathfrak{su}(1,1)$ dans la détermination de l'équation de Schrödinger. Par conséquent, cela exige la liaison des fonctions d'onde aux polynômes orthogonaux.

8.2. Potentiels de Natanzon et polynômes orthogonaux

L'entrelacement entre les deux approches algébriques, à savoir la théorie des groupes et la théorie des fonctions spéciales, est vue comme le moyen sûr pour décrire correctement la structure des potentiels aux formes invariantes. Pour cela, et en partant d'une réalisation différentielle spécifique de l'opérateur de Casimir pour l'algèbre $\mathfrak{su}(1,1)$, il est tout à fait possible de déduire une équation différentielle du second ordre pour des polynômes orthogonaux correspondante au potentiel $V(x)$.

8.2.1 Polynômes de Laguerre généralisés $L_n^{(\alpha)}(y)$

L'équation différentielle des polynômes généralisés de Laguerre peut-être obtenue de (8.7) avec le choix suivant des opérateurs $\hat{J}_{\pm}$ et des fonctions d'onde:

$$\hat{J}_{\pm} = e^{\pm i\phi} \left(\pm y \frac{\partial}{\partial y} \pm \frac{1}{2}(\alpha + 1 - y) + \hat{J}_0 - \frac{y}{2} \right), \quad (8.10)$$

$$\Psi_{j,m}(x) = e^{im\phi} L_n^{(\alpha)}(y), \quad (8.11)$$

où j et m sont liés à α et n par $\alpha = -(2j + 1)$ et $m = -j + n$, avec $n = 0, 1, 2, \dots$

La classe LIII : La fonction appropriée dans la classe LIII¹⁴ est définie par $y(x) = b \exp(-ax)$ solution de l'équation différentielle $y'^2/y^2 = C$, où $a = \sqrt{C}$. En effectuant les transformations similaires de la deuxième étape pour retrouver l'équation de Schrödinger, on déduit le potentiel de Morse. Le potentiel, le spectre d'énergie et les fonctions d'onde (non-normalisées) sont consignés dans les tableaux Tab. 8.1 et Tab. 8.2 respectivement. Par ailleurs, les générateurs $\hat{J}_{+}$, $\hat{J}_{-}$ lient les états propres entre eux par $\hat{J}_{+}\psi_{n,m} \rightarrow \psi_{n+1,m+1}$ et $\hat{J}_{-}\psi_{n,m} \rightarrow \psi_{n-1,m-1}$ et opérateurs $A^{\dagger}$, A par $A^{\dagger}\psi_{n-1,m-1} \rightarrow \psi_{n,m}$ et

¹⁴Dans se qui va suivre, les lettres L, H et P seront associées, respectivement, aux polynômes de Laguerre, d'Hermite et de Jacobi

$A\psi_{n,m} \rightarrow \psi_{n-1,m-1}$. Ainsi, les générateurs ont les mêmes effets que les opérateurs sur les fonctions d'onde, et par conséquent l'algèbre $\text{su}(1,1)$ est effectivement l'algèbre associée au potentiel de Morse. La seule différence entre les deux ensembles d'opérateurs consiste dans la valeur propre m due essentiellement à la présence des facteurs de phase $e^{\pm i\phi}$ et $e^{im\phi}$ dans la construction algébrique.

Tableau 8.1 : Les formes finales des potentiels.

Classe	$y(x)$	C	$V(x)$
<i>LIII</i>	$b \exp[-ax]$	a^2	$\frac{Cb^2}{4} \exp(-2ax) - Cb \exp(-ax)$
<i>LI</i>	$\frac{1}{2} \omega x^2$	2ω	$\frac{\omega^2}{4} x^2 + \frac{l(l+1)}{x^2}$
<i>HI</i>	$\sqrt{\frac{\omega}{2}} x$	$\frac{\omega}{2}$	$\frac{\omega}{4} x^2$
<i>PI</i>			$-C \frac{b^2 - (m - \frac{1}{2})(m + \frac{1}{2}) + 2ibmy(x)}{1 - y^2}$
	$i \sinh ax$	$-a^2$	$a^2 \frac{b^2 - (m - \frac{1}{2})(m + \frac{1}{2}) - 2bm \sinh ax}{\cosh^2 ax}$
	$\cosh ax$	$-a^2$	$a^2 \frac{b^2 - (m - \frac{1}{2})(m + \frac{1}{2}) + 2ibm \cosh ax}{\sinh^2 ax}$
	$\cos ax$	a^2	$-a^2 \frac{b^2 - (m - \frac{1}{2})(m + \frac{1}{2}) + 2ibm \cos ax}{\sin^2 ax}$
	$\cos 2ax$	$4a^2$	$a^2 \frac{(ib + m - \frac{1}{2})(ib + m + \frac{1}{2})}{\cos^2 ax} + a^2 \frac{(-ib + m - \frac{1}{2})(-ib + m + \frac{1}{2})}{\sin^2 ax}$
	$\cosh 2ax$	$-4a^2$	$-a^2 \frac{(ib + m - \frac{1}{2})(ib + m + \frac{1}{2})}{\cosh^2 ax} + a^2 \frac{(-ib + m - \frac{1}{2})(-ib + m + \frac{1}{2})}{\sinh^2 ax}$
<i>PII</i>			$-Cj(j+1)[1 - y^2(x)]$
	$\tanh ax$	a^2	$-a^2 \frac{j(j+1)}{\cosh^2 ax}$

	$-i \cot ax$	$-a^2$	$a^2 \frac{j(j+1)}{\sinh^2 ax}$
--	--------------	--------	---------------------------------

La classe LI : Un traitement similaire pour la classe LI permet de retrouver le potentiel de l'oscillateur harmonique à trois dimensions où la fonction appropriée définie par $y(x) = 1/2 \omega x^2$ est solution de l'équation différentielle $y'^2/y = C$ (ici $C = 2\omega$ et $\alpha = l + 1/2$). Contrairement au potentiel de Morse, les ensembles d'opérateurs sont essentiellement différents. Les opérateurs $A^\dagger$ et A lient les états propres entre eux par $A^\dagger \psi_{n-1,l+1} \rightarrow \psi_{n,l}$ et $A \psi_{n,l+1} \rightarrow \psi_{n-1,l+1}$ tandis que les générateurs $\hat{J}_+$ et $\hat{J}_-$ laissent invariants les moments angulaires, c'est-à-dire $\hat{J}_+ \psi_{n,l} \rightarrow \psi_{n+1,l}$ et $\hat{J}_- \psi_{n,l} \rightarrow \psi_{n-1,l}$. Ces opérations décalent l'énergie d'une valeur 2ω , et par conséquent l'algèbre $\mathfrak{su}(1,1)$ ne peut pas être l'algèbre potentiel associée à l'oscillateur harmonique à trois dimensions.

Tableau 8.2: Les formes finales des spectres d'énergie et des fonctions d'onde.

Classe	$y(x)$	$\mathcal{E}_n$	$\psi_n(x)$
<i>LIII</i>	$b \exp[-ax]$	$-a^2(m-n-\frac{1}{2})^2$	$\exp[-(m-n-\frac{1}{2})ax] \exp[-\frac{b}{2}e^{-ax}]$ $\times L_n^{(2m-2n-1)}(b \exp(-ax))$
<i>LI</i>	$\frac{1}{2} \omega x^2$	$(2n+l+\frac{3}{2})\omega$	$\exp(-\frac{\omega}{4}x^2) x^{l+1} L_n^{(l+1/2)}(\omega x^2/2)$
<i>HI</i>	$\sqrt{\frac{\omega}{2}}x$	$\omega(n+\frac{1}{2})$	$\exp(-\frac{\omega}{4}x^2) H_c(\sqrt{\frac{\omega}{2}}x)$
<i>PI</i>		$C(m-n-\frac{1}{2})^2$	$[\frac{1-y(x)}{1+y(x)}]^{ib/2} (1-y(x))^{-(m-\frac{1}{2})/2}$ $\times P_n^{(ib-m, -ib-m)}[y(x)]$
	$i \sinh ax$	$-a^2(m-n-\frac{1}{2})^2$	$[\cosh ax]^{-(m-\frac{1}{2})} \exp[b \tan^{-1}(\sinh ax)]$ $\times P_n^{(ib-m, -ib-m)}[i \sinh ax]$
	$\cosh ax$	$-a^2(m-n-\frac{1}{2})^2$	$[\frac{1-\cosh ax}{1+\cosh ax}]^{ib/2} [\sinh ax]^{-(m-\frac{1}{2})}$ $\times P_n^{(ib-m, -ib-m)}[i \cosh ax]$

	$\cos ax$	$a^2(m-n-\frac{1}{2})^2$	$[\frac{1-\cos ax}{1+\cos ax}]^{ib/2} [\sin ax]^{-(m-\frac{1}{2})}$ $\times P_n^{(ib-m, -ib-m)} [i \cos ax]$
	$\cos 2ax$	$4a^2(m-n-\frac{1}{2})^2$	$[\sin ax]^{ib-m+\frac{1}{2}} [\cos ax]^{-ib-m+\frac{1}{2}}$ $\times P_n^{(ib-m, -ib-m)} [i \cos 2ax]$
	$\cosh 2ax$	$-4a^2(m-n-\frac{1}{2})^2$	$[\sinh ax]^{ib-m+\frac{1}{2}} [\cosh ax]^{-ib-m+\frac{1}{2}}$ $\times P_n^{(ib-m, -ib-m)} [i \cosh 2ax]$
PII		$-C(j-n)^2$	$[1-y^2(x)]^{-\frac{1}{2}(n-j)} P_n^{(j-n, j-n)}(y(x))$
	$\tanh ax$	$-a^2(j-n)^2$	$[\cosh ax]^{n-j} P_n^{(n-j, n-j)}(\tanh ax)$
	$-i \cot ax$	$a^2(j-n)^2$	$[\sin ax]^{n-j} P_n^{(n-j, n-j)}(-i \cot ax)$

Tableau 8.3 : Les formes explicites des générateurs $\hat{J}_{\pm}$.

Classe	$y(x)$	$\hat{J}_{\pm}$
$LIII$	$b \exp[-ax]$	$\frac{1}{a} e^{\pm i\phi} [\pm \frac{\partial}{\partial x} - a(J_0 \pm \frac{1}{2}) + \frac{ab}{2} e^{-ax}]$
LI	$\frac{1}{2} \omega x^2$	$e^{\pm i\phi} (\pm \frac{x}{2} \frac{\partial}{\partial x} + J_0 \pm \frac{1}{4} - \frac{\omega}{4} x^2)$
HI	$\sqrt{\frac{\omega}{2}} x$	$e^{\pm i\phi} (\pm \frac{x}{2} \frac{\partial}{\partial x} + J_0 \pm \frac{1}{4} - \frac{\omega}{4} x^2)$
PI		$\frac{1}{\sqrt{C}} e^{\pm i\phi} [\pm \frac{\partial}{\partial x} + \sqrt{\frac{C}{1-y^2(x)}} ((J_0 \pm \frac{1}{2})y(x) - ib)]$
	$i \sinh ax$	$\frac{1}{a} e^{\pm i\phi} [\pm \frac{\partial}{\partial x} - a \tanh ax (J_0 \pm \frac{1}{2}) + \frac{ab}{\cosh ax}]$
	$\cosh ax$	$-\frac{1}{a} e^{\pm i\phi} [\pm \frac{\partial}{\partial x} - a \coth ax (J_0 \pm \frac{1}{2}) + i \frac{ab}{\sinh ax}]$
	$\cos ax$	$-\frac{i}{a} e^{\pm i\phi} [\pm \frac{\partial}{\partial x} - a \cot ax (J_0 \pm \frac{1}{2}) + i \frac{ab}{\cos ax}]$

	$\cos 2ax$	$-\frac{i}{2a}e^{\pm i\phi}[\pm \frac{\partial}{\partial x} - a \cot ax(J_0 \pm \frac{1}{2} - ib) + a \tan ax(J_0 \pm \frac{1}{2} + ib)]$
	$\cosh 2ax$	$-\frac{1}{2a}e^{\pm i\phi}[\pm \frac{\partial}{\partial x} - a \coth ax(J_0 \pm \frac{1}{2} - ib) - a \tanh ax(J_0 \pm \frac{1}{2} + ib)]$
PII		$\frac{i}{\sqrt{C}\sqrt{1-y^2(x)}}e^{\pm i\phi}[\pm \frac{\partial}{\partial x} + \sqrt{C}y(x)J_0]$
	$\tanh ax$	$\frac{i}{a}\cosh axe^{\pm i\phi}[\pm \frac{\partial}{\partial x} + a \tanh axJ_0]$
	$-i \cot ax$	$-\frac{1}{a}\sin axe^{\pm i\phi}[\pm \frac{\partial}{\partial x} + a \cot axJ_0]$

8.2.2 Polynômes d'Hermite $H_n(y)$:

L'équation différentielle des polynômes d'Hermite est déduite par le choix suivant des générateurs:

$$\hat{J}_{\pm} = e^{\pm i\phi}[\pm \frac{y}{2} \frac{\partial}{\partial y} \pm (\frac{1}{4} - \frac{y^2}{2}) + \hat{J}_0 - \frac{y^2}{2}], \quad (8.12)$$

avec les conditions $(j + \frac{1}{4})(j + \frac{3}{4}) = 0$ et $2n = 4(m - \frac{1}{4})$. De ces dernières, il suit que j est soit $-\frac{1}{4}$ ou $-\frac{3}{4}$. Dû au fait que $m = -j + p$, alors $n = 2p$ et $n = 2p + 1$, respectivement.

La classe HI : Appliquée à la classe HI, la procédure standard permet de générer le potentiel harmonique à une dimension avec $y(x) = \sqrt{\frac{\omega}{2}}x$ est solution de l'équation différentielle $y'^2 = C$ avec $C = \frac{\omega}{2}$ (voir Tab 8.1). Les deux ensembles d'opérateurs sont évidemment différents, et ils ont des effets différents sur les fonctions d'onde. Les générateurs $\hat{J}_{+}$ et $\hat{J}_{-}$ changent n par deux unités, i.e. $\hat{J}_{+}\psi_{n,l} \rightarrow \psi_{n+2,l}$ et $\hat{J}_{-}\psi_{n,l} \rightarrow \psi_{n-2,l}$, tandis que les opérateurs $A^{\dagger}$ et A transforment les états propres en $A^{\dagger}\psi_{n-1} \rightarrow \psi_n$ et $A\psi_n \rightarrow \psi_{n-1}$, ce qui signifie naturellement que les générateurs $\hat{J}_{\pm}$ et $\hat{J}_0$ forment l'algèbre

des spectres générés de la représentation irréductible $SU(1,1)$. Les fonctions d'onde de l'oscillateur paires ($n = 2p$) et impaires ($n = 2p + 1$) appartiennent à des représentations irréductibles de dimension infinies notées $D_{-\frac{1}{4}}^+$ et $D_{-\frac{3}{4}}^+$, respectivement.

Tableau 8.4: Les formes explicites des opérateurs $A^\dagger$ et A .

Classe	$y(x)$	$A^\dagger, A$
<i>LIII</i>	$b \exp[-ax]$	$\mp \frac{d}{dx} + a(m - \frac{1}{2}) - \frac{ab}{2} \exp(-ax)$
<i>LI</i>	$\frac{1}{2} \omega x^2$	$\mp \frac{d}{dx} - \frac{l+1}{x} + \frac{\omega}{2} x$
<i>HI</i>	$\sqrt{x}$	$\mp \frac{d}{dx} + \frac{\omega}{2} x$
<i>PI</i>		$\mp \frac{d}{dx} - \sqrt{\frac{C}{1-y^2(x)}} [(m - \frac{1}{2})y(x) - ib]$
	$i \sinh ax$	$\mp \frac{d}{dx} + a(m - \frac{1}{2}) \tanh ax - \frac{ab}{\cosh ax}$
	$\cosh ax$	$\mp \frac{d}{dx} + a(m - \frac{1}{2}) \coth ax - \frac{iab}{\sinh ax}$
	$\cos ax$	$\mp \frac{d}{dx} + a(m - \frac{1}{2}) \cot ax - \frac{iab}{\cos ax}$
	$\cos 2ax$	$\mp \frac{d}{dx} + a(m - \frac{1}{2} - ib) \cot ax - a(m - \frac{1}{2} + ib) \tan ax$
	$\cosh 2ax$	$\mp \frac{d}{dx} + a(m - \frac{1}{2} - ib) \coth ax + a(m - \frac{1}{2} + ib) \tanh ax$
<i>PII</i>		$\mp \frac{d}{dx} + \sqrt{C} (jy(x) - i \frac{bm}{j})$
	$\tanh ax$	$\mp \frac{d}{dx} + a(j \tanh ax - i \frac{bm}{j})$
	$-i \cot ax$	$\mp \frac{d}{dx} + a(j \cot ax + \frac{bm}{j})$

8.2.3. Polynômes de Jacobi $P_n^{(\alpha, \beta)}(y)$ [38]

L'équation différentielle des polynômes de Jacobi peut-être obtenue de (8.7) en substituant les fonctions $h(x), g(x), f(x)$ et $c(x)$ par:

$$\begin{aligned} h(y) &= i\sqrt{1-y^2}, & g(y) &= i\frac{my-ib}{\sqrt{1-y^2}}, \\ f(y) &= i\frac{y}{\sqrt{1-y^2}}, & c(y) &= \frac{b}{\sqrt{1-y^2}}, \end{aligned} \quad (8.13)$$

et les fonctions d'onde:

$$\Psi_{j,m}(y) = e^{im\phi} P_n^{(\alpha,\beta)}(y), \quad (8.14)$$

où $\alpha = ib - m$, $\beta = -ib - m$ et $m = -j + n$, avec $n = 0, 1, 2, \dots$

Cependant, comme la fonction $g(x)$ dépend explicitement de m , les fonctions (8.13) ne peuvent pas être utilisées pour construire une algèbre $\text{su}(1,1)$ similaire à celle de (8.5). Néanmoins, les transformations similaires (8.8) permettent de restaurer l'algèbre $\text{su}(1,1)$ en éliminant la dépendance en m dans les générateurs.

La classe PI : Les cinq potentiels aux formes invariantes de la classe PI sont générés de la solution de l'équation différentielle $y'^2/(1-y^2) = C$. Les générateurs $\hat{J}_{\pm}$ et les opérateurs supersymétriques $A^{\dagger}$ et A sont consignés, respectivement, dans les tableaux Tab. 8.3 et Tab. 8.4 dans leurs formes générales et pour les cinq potentiels. Les générateurs $\hat{J}_{\pm}$ ont les mêmes effets sur les fonctions d'onde que les opérateurs de la supersymétrie $A^{\dagger}$ et A , à un facteur de phase près. En effet, le premier couple agit sur les fonctions d'onde comme $\hat{J}_{+}\psi_{n,m}(b) \rightarrow \psi_{n+1,m+1}(b)$ et $\hat{J}_{-}\psi_{n,m}(b) \rightarrow \psi_{n-1,m-1}(b)$, alors que le second couple transforment les états propres en $A^{\dagger}\psi_{n-1,m-1}(b) \rightarrow \psi_{n,m}(b)$ et $A\psi_{n,m}(b) \rightarrow \psi_{n-1,m-1}(b)$. Le paramètre $b(= \frac{\alpha - \beta}{2i})$ maintient ses valeurs initiales.

Le premier des cinq potentiels de la classe PI est le potentiel de Scarf hyperbolique (ou Scarf II), quant au dernier potentiel est le potentiel de Pöschl-Teller hyperbolique. Le troisième et le quatrième potentiel sont les versions trigonométriques du second et du dernier potentiel, respectivement. Le second potentiel de cette classe est le potentiel de Pöschl-Teller généralisé.

La classe PII : Quand nous appliquons la procédure à la classe PII définie par l'équation différentielle $y'^2/(1-y^2)^2 = C$, on déduit que les générateurs du groupe $\text{SU}(1,1)$ s'écrivent:

$$\hat{J}_{\pm} = \frac{i}{\sqrt{C(1-y^2(x))}} e^{\pm i\phi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial x} + \sqrt{C} y(x) \hat{J}_0 - \sqrt{C} ib \right]. \quad (8.15)$$

Le paramètre b dépend de la valeur propre m , et ceci détruit l'algèbre $\mathfrak{su}(1,1)$. Ce cas peut-être évité si nous limitons ce traitement au cas particulier $b=0$. Nous avons consignés le potentiel, le spectre d'énergie et les fonctions d'onde dans les tableaux Tab. 8.1 et Tab. 8.2 avec la solution générale de $y(x)$ non spécifiée de (8.15).

Les deux potentiels sont des cas particuliers des potentiels de la classe PI. Les générateurs $\hat{J}_{\pm}$ laissent invariants les potentiels et changent n d'une unité, i.e. $\hat{J}_+ \psi_{n,j} \rightarrow \psi_{n+1,j}$ et $\hat{J}_- \psi_{n,j} \rightarrow \psi_{n-1,j}$, nous concluons donc qu'ils forment, avec $\hat{J}_0$, l'algèbre des spectres générés. Quant aux opérateurs supersymétriques, leur action sur les fonctions d'onde sont données par $A^\dagger \psi_{n-1,j-1} \rightarrow \psi_{n,j}$ et $A \psi_{n,j} \rightarrow \psi_{n-1,j-1}$. Ici, nous avons affaire à deux potentiels différents: l'un avec un nombre fini d'états liés et l'autre un nombre infini d'états liés. Cette dualité se manifeste dans la nature même de l'algèbre des spectres générés: *dû au nombre complexe i , c'est une algèbre compacte $\mathfrak{su}(2)$ pour le premier potentiel et une algèbre non-compacte $\mathfrak{su}(1,1)$ pour le second potentiel.*

La classe LII : Ce cas, non répertorié dans les tableaux, est similaire à la classe PII. L'application de la fonction $y(x) = ax$, solution de l'équation différentielle $y'^2 = C$ avec $a = \sqrt{C}$, et la transformation similaire correspondante permettent de déduire les générateurs:

$$\hat{J}_{\pm} = e^{\pm i\phi} \left(\pm x \frac{\partial}{\partial x} + \hat{J}_0 - \frac{a}{2} x \right). \quad (8.16)$$

De la procédure standard, en principe, résulte le potentiel de Coulomb. Cependant, la substitution $a = \frac{e^2}{m}$, où e est la charge électrique, introduit une dépendance en m pour la transformation similaire causant la destruction de l'algèbre $\mathfrak{su}(1,1)$ comme nous l'avons vu dans la classe PII. En d'autres termes, le problème peut-être formulé uniquement pour chaque valeur de m ; dès lors les générateurs (8.16) (qui dépendent explicitement de m à travers le paramètre a) ne peuvent pas lier les états propres avec les différents nombres quantiques principaux $m = n + l + 1$. Puisque ces remarque contredisent les idées sur lesquelles la construction algébrique est fondée, nous concluons que l'algèbre $\mathfrak{su}(1,1)$ n'est pas l'algèbre convenable au problème de Coulomb. Cependant, l'algèbre $\mathfrak{su}(1,1)$ peut-être construite pour le potentiel radial de Coulomb en apportant des modifications sur les générateurs.

Le diagramme de la Figure 1.3 montre la manière dont les potentiels aux formes invariantes du Tableau 1.3 sont connectés. Les potentiels se trouvant *sur et en dehors* de l'hexagonal sont caractérisés par des fonctions d'onde de types *hypergéométriques* tandis que ceux sur le triangle interne possèdent des fonctions d'onde de types *hypergéométriques dégénérées*¹⁵.

¹⁵ Les chiffres romains I et II se réfèrent aux cas trigonométrique et hyperbolique, respectivement.

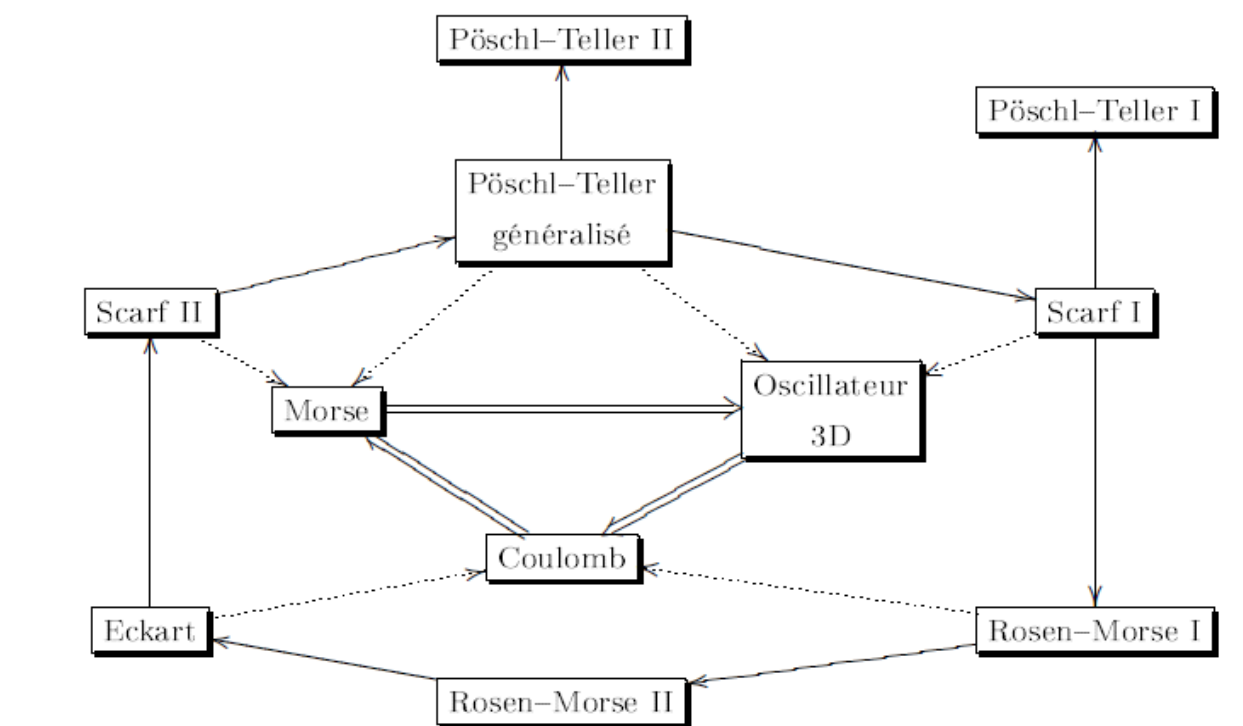


Figure 8.1 : La connexion entre les potentiels aux formes invariantes.

CHAPITRE 9

ALGÈBRE $\mathfrak{su}(1,1)$ ET GÉNÉRATION DES POTENTIELS DE NATANZON

La résolution exacte de l'équation de Schrödinger a été discutée en employant plusieurs méthodes et techniques. Malgré que les idées fondamentales de ces méthodes aient des origines différentes, leurs applications sont plutôt similaires. L'approche algébrique de la théorie des groupes est l'une de ces méthodes. À l'origine, cette approche a été utilisée pour déduire les classes de potentiels de Natanzon, ainsi que leurs sous-classes en appliquant le concept d'algèbre des potentiels.

Dans ce chapitre, nous présentons une nouvelle manière de déduire les potentiels de Natanzon. En effet, en exploitant les représentations conformes de quelques fonctions usuelles, l'expression générale du potentiel effectif déduit sous l'algèbre $\mathfrak{su}(1,1)$ est transformée au potentiel générale hypergéométrique de Natanzon dépourvu de tous les paramètres d'ambiguïté causés par le problème d'ordonnement.

9.1. Construction du potentiel effectif

L'algèbre de Lie non-compacte $\mathfrak{su}(1,1)$ obéit aux relations de commutation [37, 41, 71, 72]:

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = -2\hat{J}_0, \quad [\hat{J}_0, \hat{J}_\pm] = \pm\hat{J}_\pm, \quad (9.1)$$

où $\hat{J}_\pm = \hat{J}_\mp^\dagger$. Le générateur $\hat{J}_0$ est un opérateur compact, signifiant qu'il possède un spectre discret et infini. Le groupe $SU(1,1)$ est de rang 1, et par conséquent, l'unique opérateur invariant de Casimir C_2 associé à l'algèbre $\mathfrak{su}(1,1)$ est donné par:

$$C_2 = \hat{J}_0^2 \mp \hat{J}_0 - \hat{J}_\pm \hat{J}_\mp. \quad (9.2)$$

Les états propres de C_2 et $\hat{J}_0$, avec les valeurs propres $\langle C_2 \rangle \equiv c = j(j+1)$ et $\langle \hat{J}_0 \rangle \equiv j_0$ ¹⁶, respectivement, forment une base pour la représentation irréductible du groupe $SU(1,1)$, notée:

$$\langle x | j, j_0 \rangle \equiv \Psi_{j, j_0}(x) = e^{im\phi} \psi_{j, j_0}(x). \quad (3.3)$$

Cette relative et simple construction mathématique peut-être utilisée afin de déduire

¹⁶Nous avons utilisé ici j_0 au lieu de m afin d'éviter la confusion avec la masse $m(x)$.

des résultats physiques. L'introduction du concept d'algèbre des potentiels par Alhassid et al. [37] a permis d'établir une connexion triviale entre les représentations irréductibles unitaires discrètes et continues du groupe $SU(1,1)$ avec les états d'énergie liés et diffusés d'une large classe de Hamiltoniens quantiques à une dimension.

Les états liés de ces Hamiltoniens appartiennent à la représentation irréductible unitaire et discrète D_j^+ , avec $m = -j, -j+1, -j+2, \dots$. Les valeurs permises de j_0 sont liées à j par l'identité [69]:

$$j_0 = n + \frac{1}{2} + \sqrt{c + \frac{1}{4}}, \quad (9.4)$$

où $n = 0, 1, 2, \dots$

La réalisation différentielle des générateurs $\hat{J}_\pm$ et $\hat{J}_0$ est donnée par:

$$\begin{aligned} \hat{J}_0 &= -i \frac{\partial}{\partial \phi}, \\ \hat{J}_\pm &= e^{\pm i\phi} \left(\pm h(x) \frac{\partial}{\partial x} \pm g(x) + f(x) \hat{J}_0 + k(x) \right), \end{aligned} \quad (9.5)$$

où la substitution des équations données en (9.5) dans les relations de commutation (9.1) permet de déduire l'allure des fonctions $h(x)$, $f(x)$ et $k(x)$ à travers des équations différentielles:

$$f^2(x) - h(x) \frac{df(x)}{dx} = 1, \quad (9.6)$$

$$h(x) \frac{dk(x)}{dx} - f(x)k(x) = 0. \quad (9.7)$$

L'introduction de la transformation similaire [41]:

$$h(x) \rightarrow \xi(x) = h(x) \frac{d\xi(x)}{dx}, \quad (9.8)$$

où $\xi(x)$ est une fonction réelle, permet de résoudre les équations différentielles (9.6) et (9.7) et dont les solutions sont données en termes de la fonction $\xi(x)$ par [41]:

$$f(x) = \frac{1 + a\xi^2(x)}{1 - a\xi^2(x)}, \quad k(x) = \frac{\delta\xi(x)}{1 - a\xi^2(x)}, \quad (9.9)$$

où a et δ sont des constantes d'intégration.

En insérant (9.9) dans l'expression de l'opérateur de Casimir (9.2) en tenant compte de (9.5), nous obtenons [41]:

$$C_2 = \frac{\xi^2(x)}{\xi'^2(x)} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\xi(x)}{\xi'(x)} \left[2g(x) - \frac{\xi(x)\xi''(x)}{\xi'^2(x)} - \frac{2\xi^2(x)}{1 - \xi^2(x)} \right] \frac{d}{dx}$$

$$+ \frac{\xi(x)}{\xi'(x)} g'(x) + g^2(x) - \frac{1 + \xi^2(x)}{1 - \xi^2(x)} g(x) - \xi(x) \frac{(\delta + 2j_0 \xi(x))(2j_0 + \delta \xi(x))}{(1 - \xi^2(x))^2}, \quad (9.10)$$

où le prime ' désigne la dérivé par rapport à x . L'équation (9,10) correspond au choix approprié du paramètre $a = 1$.

D'autre part, la forme générique du Hamiltonien de von Roos pour une masse dépendante de la position $M(x) = m_0 m(x)$, où $m(x)$ est sans dimension, s'écrit sous la forme:

$$H_{vR}^{(7.6)} = \frac{1}{4} [m^\eta(x) \hat{p} m^\varepsilon(x) \hat{p} m^\rho(x) + m^\rho(x) \hat{p} m^\varepsilon(x) \hat{p} m^\eta(x)] + V(x), \quad (9.11)$$

où nous avons posé $m_0 = 1$ et la contrainte sur les paramètres η , ε et ρ vérifient la condition $\eta + \varepsilon + \rho = -1$ afin de retrouver la cas classique. Ici, $\hat{p} (\equiv -i\hbar \frac{d}{dx})$ étant l'impulsion. Dans la base des unités naturelles ($\hbar = c = 1$), le Hamiltonien H_{vR} devient:

$$H_{vR} = -\frac{1}{2m(x)} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)} \frac{d}{dx} + (1 + \varepsilon) \frac{m''(x)}{4m^2(x)} - [\eta(\eta + \varepsilon + 1) + \varepsilon + 1] \frac{m'^2(x)}{2m^3(x)} + V(x). \quad (9.12)$$

En introduisant les fonctions d'onde [41, 71]:

$$\Psi_\lambda(x) = 2\lambda m(x) \frac{\xi^2(x)}{\xi'^2(x)} \psi(x), \quad (9.13)$$

où $\lambda \in \mathbb{R}$, le Hamiltonien (9.12) devient, après un long calcul:

$$H_{vR} = -\lambda \frac{\xi^2(x)}{\xi'^2(x)} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{\lambda \xi(x)}{\xi'(x)} \left[4 + \frac{m'(x) \xi(x)}{m(x) \xi'(x)} - \frac{4 \xi(x) \xi''(x)}{\xi'^2(x)} \right] \frac{d}{dx} + \frac{2 \lambda \xi(x)}{\xi'^2(x)} [3 \xi''(x) + \frac{\xi(x) \xi'''(x)}{\xi'(x)} - \frac{3 \xi(x) \xi''^2(x)}{\xi'^2(x)}] + \frac{\lambda m'(x) \xi^2(x)}{m(x) \xi'^2(x)} \left[\frac{2(\xi(x) \xi'''(x) - \xi'^2(x))}{\xi(x) \xi'(x)} + (\varepsilon - 1) \frac{m''(x)}{2m'(x)} - (1 + \eta)(\eta + \varepsilon) \frac{m'(x)}{m(x)} \right] - 2\lambda + 2\lambda m(x) \frac{\xi^2(x)}{\xi'^2(x)} V(x). \quad (9.14)$$

L'équation de Schrödinger peut-être résolue une fois égalée à l'équation propre de l'opérateur invariant de Casimir (9.10) suivant l'identité [69]:

$$(H_{vR} - \mathcal{E}) \Psi_\lambda(x) \equiv \Lambda(x) (C_2 - c) \Psi_\lambda(x) = 0, \quad (9.15)$$

où $\Lambda(x)$ est une certaine fonction à déterminer. En identifiant les deux membres de l'équation (9.15) en termes des dérivées nulle, première et seconde, on déduit les expressions des fonctions $\Lambda(x)$ et $g(x)$:

$$\Lambda(x) = -\lambda = \text{const.} \quad (9.16)$$

$$g(x) = \frac{2 - \xi^2(x)}{1 - \xi^2(x)} - \frac{3}{2} \frac{\xi(x)\xi''(x)}{\xi'^2(x)} + \frac{1}{2} \frac{m'(x)\xi(x)}{m(x)\xi'(x)}. \quad (9.17)$$

En insérant les expressions de $g(x)$, $g'(x)$ et $g^2(x)$, calculées à partir de (9.17), dans (9.15), en tenant en considération les équations (9.10) et (9.14), on finit par déduire l'expression du potentiel effectif donnée par [41]:

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(x) - \mathcal{E} = & \frac{2\delta j_0 + (\delta^2 + 4j_0^2 - 1 + 2\delta j_0 \xi(x))\xi(x)}{2m(x)\xi(x)(1 - \xi^2(x))^2} \xi'^2(x) + \frac{c}{2m(x)} \frac{\xi'^2(x)}{\xi^2(x)} \\ & + \frac{3}{8m(x)} \frac{\xi''^2(x)}{\xi'^2(x)} - \frac{1}{4m(x)} \frac{\xi'''(x)}{\xi'(x)} + V_m^{(\eta, \varepsilon)}(x), \end{aligned} \quad (9.18)$$

où le potentiel $V_m^{(\eta, \varepsilon)}(x)$ dépend exclusivement de la masse et est exprimé par:

$$V_m^{(\eta, \varepsilon)}(x) = [(1 + 2\eta)^2 + 4\varepsilon(1 + \eta)] \frac{m'^2(x)}{8m^3(x)} - \frac{\varepsilon}{4} \frac{m''(x)}{m^2(x)}. \quad (9.19)$$

Afin de générer le potentiel hypergéométrique de Natanzon ainsi que les différentes étapes du calcul, il est nécessaire d'effectuer une transformation de fonction $\xi(x) \rightarrow z(x)$ par l'intermédiaire de la fonction auxiliaire $\gamma(x)$ définie par $\xi(x) = \exp[2i\gamma(x)]$ avec $\gamma(x) = \arctan \sqrt{z(x)}$. Dès lors, le lien entre $\xi(x)$ et $z(x)$ est donné par¹⁷ [41, 68]:

$$\xi(x) \equiv \frac{1 + i\sqrt{z(x)}}{1 - i\sqrt{z(x)}}, \quad (9.20)$$

où la fonction variable $z(x)$ varie dans l'intervalle $[0, 1]$ [60].

Dans l'annexe B, nous donnons le sens mathématique de la transformation (9.20). Nous démontrons [41] qu'il s'agit d'une représentation conforme du plan- $\xi \in \mathbb{D}$ sur l'intérieur d'un cercle de rayon unité du plan- $z \in \mathbb{D}_* = [0, 1]$. En terme de la fonction $z(x)$, la fonction $h(x)$ vérifie l'équation différentielle:

$$\frac{dx}{h(x)} = \frac{i}{(1 - i\sqrt{z(x)})^2} \frac{dz(x)}{\sqrt{z(x)}}, \quad (9.21)$$

tandis que les fonctions $f(x)$, $k(x)$ et $g(x)$ prennent les formes:

¹⁷En effet, il est facile de vérifier que:

$$\ln \xi(x) = 2i\gamma(x) = 2i \arctan \sqrt{z(x)} = \ln \frac{1 + i\sqrt{z(x)}}{1 - i\sqrt{z(x)}}$$

$$f(x) = \frac{i}{2} \frac{1 - z(x)}{\sqrt{z(x)}}, \quad (9.22)$$

$$k(x) = \frac{i\delta}{4} \frac{1 + z(x)}{\sqrt{z(x)}}, \quad (9.23)$$

$$g(x) = -\frac{i}{2} \frac{1 + 5z(x)}{\sqrt{z(x)}} + \frac{3i}{2} \frac{\sqrt{z(x)}(1 + z(x))z''(x)}{z'^2(x)} - \frac{i}{2} \frac{\sqrt{z(x)}(1 + z(x))m'(x)}{m(x)z'(x)}. \quad (9.24)$$

Cependant, la fonction $\xi(x)$ telle qu'elle est définie par la transformation similaire (9.8) est réelle; ainsi, la substitution $z(x) \rightarrow -z(x)$ est vue comme le moyen sûr de restaurer la réalité de $\xi(x)$, i.e. $\xi(x) \in \mathbb{R}$ [41]. En remplaçant (9.20) dans (9.18), en tenant compte de la substitution citée plus haut, on obtient:

$$\begin{aligned} E - V_{\text{eff}}(x) = & \frac{(\delta - 2j_0 - 2)(\delta - 2j_0 + 2)z(x) - (\delta + 2j_0 + 2)(\delta + 2j_0 - 2)}{32m(x)z^2(x)(1 - z(x))} z'^2(x) \\ & - \frac{c}{2m(x)} \frac{z'^2(x)}{z(x)(1 - z(x))^2} - \frac{3}{8m(x)} \frac{z''^2(x)}{z'^2(x)} + \frac{1}{4m(x)} \frac{z'''(x)}{z'(x)} - V_m^{(\eta, \varepsilon)}(x). \end{aligned} \quad (3.25)$$

9.2. Algèbre des spectres générés quadratiques: Potentiels de Natanzon

La méthode quadratique des générateurs couvre tous les cas dans laquelle l'équation de Schrödinger peut se réduire à une équation hypergéométrique non dégénérée, à savoir, tous les potentiels de Natanzon hypergéométriques peuvent être abordés [69]. À cause de la symétrie des coefficients du dénominateur du premier terme de (9.25), nous introduisons deux couples de paramètres, (t, r) et (p, q) , liés dans l'ordre et dépendent des anciens paramètres δ et j_0 par [41]:

$$p \equiv t - 1 = \left(\frac{\delta - 2j_0}{2}\right)^2 - 1, \quad q + 1 \equiv r - 1 = \left(\frac{\delta + 2j_0}{2}\right)^2 - 1. \quad (9.26)$$

En insérant (9.26) dans l'équation (9.25), cette dernière devient:

$$\begin{aligned} \mathcal{E} - V_{\text{eff}}(x) = & \frac{pz(x) - q - 1}{4z^2(x)(1 - z(x))} \frac{z'^2(x)}{2m(x)} - \frac{c}{z(x)(1 - z(x))^2} \frac{z'^2(x)}{2m(x)} - \frac{3}{8m(x)} \frac{z''^2(x)}{z'^2(x)} \\ & + \frac{1}{4m(x)} \frac{z'''(x)}{z'(x)} - V_m^{(\eta, \varepsilon)}(x). \end{aligned} \quad (9.27)$$

Admettons que la fonction $z(x)$ est liée à une certaine fonction génératrice, notée, $S(x)$ donnée par [41]:

$$S[z(x)] \equiv \frac{z'^2(x)}{2m(x)}. \quad (9.28)$$

Cependant, si l'expression (9.27) donne un potentiel $V(x)$ indépendant de l'énergie $\mathcal{E}$, alors nous imposons aux fonctions $z(x)$ et $S[z(x)]$ d'être indépendants de $\mathcal{E}$. En d'autres termes, nous supposons que le terme d'énergie peut-être présent dans le membre droite de (9.27) uniquement à travers les coefficients p , q et c [41]. Puisque l'énergie dépend explicitement de n par le biais de (9.4), il est évident qu'il est de même pour les coefficients p_n , q_n et c_n mais nous continuons à éviter l'indice n afin ne pas encombrer d'avantage les expressions.

En effectuant la différentielle totale de (9.27) par rapport à E , on obtient:

$$1 = \frac{S(x)}{4z(x)(1-z(x))} \frac{dp}{d\mathcal{E}} - \frac{S(x)}{4z^2(x)(1-z(x))} \frac{dq}{d\mathcal{E}} - \frac{S(x)}{z(x)(1-z(x))^2} \frac{dc}{d\mathcal{E}}, \quad (9.29)$$

ou encore en termes de la fonction génératrice:

$$S(x) = \frac{4z^2(x)}{\frac{z(x)}{1-z(x)} \frac{dp}{d\mathcal{E}} - \frac{1}{1-z(x)} \frac{dq}{d\mathcal{E}} - \frac{4z(x)}{(1-z(x))^2} \frac{dc}{d\mathcal{E}}}. \quad (9.30)$$

Cependant, prétendre que les coefficients p , q et c sont linéaires par rapport à l'énergie $\mathcal{E}$ implique l'introduction de deux nouveaux ensembles de paramètres considérés comme des constantes d'intégration, à savoir [41]:

$$\begin{aligned} p(\mathcal{E}) &= -p_0\mathcal{E} + a_p, \\ q(\mathcal{E}) &= -q_0\mathcal{E} + a_q, \\ c(\mathcal{E}) &= -c_0\mathcal{E} + a_c, \end{aligned} \quad (9.31)$$

où p_0 , q_0 , c_0 , a_p , a_q et a_c sont six paramètres réels. Les trois premiers paramètres gouvernent complètement le comportement de la fonction génératrice $S(x)$ (i.e. $z(x)$), tandis que les trois derniers déterminent l'allure du spectre d'énergie.

La substitution des dérivées des paramètres différentiels dans (9.30) permet d'exprimer la fonction génératrice $S(x)$ à travers l'équation différentielle en $z(x)$:

$$S(x) \equiv \frac{z'^2(x)}{2m(x)} = \frac{4z^2(x)(1-z(x))^2}{R[z(x)]}, \quad (9.32)$$

où $R[z(x)]$ est un polynôme de second ordre en $z(x)$:

$$R[z(x)] = p_0 z^2(x) + (4c_0 - p_0 - q_0)z(x) + q_0. \quad (9.33)$$

En insérant (9.28) et (9.31) dans (9.27), on obtient l'expression du potentiel effectif en termes de la fonction génératrice $S(x)$ [41]:

$$V_{eff}(x) = \frac{a_p z^2(x) - (a_p + a_q - 4a_c + 1)z(x) + a_q + 1}{R(x)}$$

$$+ \frac{5}{32m(x)} \frac{S'^2(x)}{S^2(x)} - \frac{1}{8m(x)} \frac{S''(x)}{S(x)} + \frac{m'(x)}{16m^2(x)} \frac{S'(x)}{S(x)} + U_m^{(\eta, \varepsilon)}(x), \quad (9.34)$$

où

$$\begin{aligned} U_m^{(\eta, \varepsilon)}(x) &\equiv V_m^{(\eta, \varepsilon)}(x) + \frac{5}{32} \frac{m'^2(x)}{m^3(x)} - \frac{1}{8} \frac{m''(x)}{m^2(x)} \\ &= \left[\frac{4(1+2\eta)^2 + 16\varepsilon(1+\eta) + 5}{32} \right] \frac{m'^2(x)}{m^3(x)} - \frac{2\varepsilon+1}{8} \frac{m''(x)}{m^2(x)}. \end{aligned} \quad (9.35)$$

Connaissans l'expression (9.32), les dérivées première et seconde de la fonction génératrice sont données, respectivement, par:

$$S' = \frac{4z(1-z)}{R^2} [2(1-2z)z'R - z(1-z)\frac{dR'}{dx}] = \frac{4z(1-z)}{R^2} Q, \quad (9.36)$$

$$S'' = [4z'(1-z) - 4zz'] \frac{Q}{R^2} + \frac{4z(1-z)}{R^4} [R^2 \frac{dQ}{dx} - 2RQ \frac{dR}{dx}]. \quad (9.37)$$

En exprimant les dérivées premières des fonctions $R(x)$ et $Q(x)$ en termes de $z(x)$; i.e. $R'_x = z'R'_z$ et $Q'_x = z'Q'_z$ et en les ajustant dans (9.34), on obtient après un long calcul l'expression du potentiel donné sous la forme [41]:

$$\begin{aligned} V(x) &= \frac{a_p z^2(x) - (a_p + a_q - 4a_c + 1)z(x) + a_q + 2}{R(x)} \\ &\quad + [p_0 + \frac{(4c_0 - q_0)(2z(x) - 1) + p_0}{z(x)(z(x) - 1)} - \frac{5}{4} \frac{\Delta}{R(x)}] \left[\frac{z(x)(z(x) - 1)}{R(x)} \right]^2, \end{aligned} \quad (9.38)$$

où $\Delta = (4c_0 - p_0 - q_0)^2 - 4p_0q_0$. Tous les paramètres d'ambiguïté, c'est-à-dire η et ε , sont contenus dans le terme du potentiel effectif de la masse (9.35) donné par:

$$U_m^{(\eta, \varepsilon)}(x) = V_{eff}(x) - V(x). \quad (9.39)$$

Nous reconnaissons dans (9.38) l'expression du potentiel hypergéométrique de Natanzon [60].

Des équations (9.4) et (9.26), on déduit les expressions suivantes:

$$\begin{aligned} \tau_n &= \sqrt{p+1} = \frac{\delta}{2} - j_0, \\ \nu_n &= \sqrt{q+2} = \frac{\delta}{2} + j_0, \\ \sigma_n &= \sqrt{4c+1} = 2j_0 - 2n - 1. \end{aligned} \quad (9.40)$$

Le spectre d'énergie des états liés du potentiel hypergéométrique de Natanzon peut-être déterminé de (9.40) [41, 69]:

$$\begin{aligned}
\nu_n - \tau_n - \sigma_n &= \sqrt{-q_0 E_n + a_q + 2} - \sqrt{-p_0 E_n + a_p + 1} - \sqrt{-4c_0 E_n + 4a_c + 1} \\
&= 2n + 1.
\end{aligned} \tag{9.41}$$

Il est important de signaler ici que les paramètres τ_n et ν_n sont des racines carrées et par conséquent le signe qu'elles prennent varie d'un potentiel à un autre. Cependant, le paramètre σ_n n'est pas concerné puisque il contribue à un carré parfait pour la valeur $c = j(j+1)$. Ainsi, l'identité (9.41) contient toute l'information sur le spectre d'énergie du potentiel hypergéométrique de Natanzon. Cependant, dû au fait que l'énergie $\mathcal{E}_n$ est contenue implicitement dans (9.41) rend le calcul analytique du spectre d'énergie total difficile. Uniquement un choix approprié des paramètres permet de déduire le spectre d'énergie de quelques potentiels. C'est ce que nous allons voir dans la section 9.3 en générant le potentiel de Ginocchio.

9.3. Génération du potentiel de Ginocchio

Le potentiels de Ginocchio [61] est, probablement, le membre le plus connu dans la classe des potentiels de Natanzon [60]. Il a la possibilité de se réduire au potentiel de Pöschl-Teller dans le cas unidimensionnel et au potentiel de Pöschl-Teller généralisé dans le cas radial [71]. Il est considéré comme l'exemple parfait des potentiels implicites; i.e. qu'il est défini en termes de la fonction génératrice $z(x)$ connue uniquement dans le cas implicite $x(z)$ (il est évident qu'une fois $x(z)$ connue, $z(x)$ peut-être déterminée exactement).

9.3.1. Les formes hyperbolique et polynomiale du potentiel de Ginocchio :

En posant le choix approprié pour les six paramètres:

$$\begin{aligned}
p_0 &= \frac{1-\gamma^2}{\gamma^4}, & q_0 &= 0, & c_0 &= \frac{1}{4\gamma^4}, \\
a_p &= (j + \frac{1}{2})^2 - 1, & a_q &= -\frac{7}{4}, & a_c &= -\frac{1}{4},
\end{aligned} \tag{9.42}$$

où γ est réel, le polynôme $R(x)$ et la fonction génératrice $S(x)$ prennent les formes:

$$R(x) = \frac{1-\gamma^2}{\gamma^4} z^2(x) + \frac{1}{\gamma^2} z(x), \tag{9.43}$$

$$S(x) \equiv \frac{1}{2m(x)} \left(\frac{dz(x)}{dx} \right)^2 = \frac{4\gamma^4 z(x)(1-z(x))^2}{(1-\gamma^2)z(x) + \gamma^2}. \tag{9.44}$$

De (9.44), on déduit l'expression intégrale de la masse sans dimension analogue à celle déduite au chapitre 7, à savoir:

$$\mu(x) \stackrel{(7.12),(7.22)}{\equiv} \int dx' \sqrt{m(x')} = \frac{1}{2\gamma^2} \int \frac{ds(x)}{1-s(x)} \sqrt{2-\gamma^2 + \frac{\gamma^2}{s(x)}}, \tag{9.45}$$

où la fonction $\mu(x)$ est identique à $f(x)$ exprimée en (7.12) et (7.22). En définissant le

nouveau changement de variable $s(x) = \tanh^2 u(x)$, l'expression (9.45) devient:

$$\mu(x) = \frac{1}{\gamma^2} \int du(x) \frac{\sqrt{\gamma^2 + \sinh^2 u(x)}}{\cosh u(x)}, \quad (9.46)$$

et est la solution de l'équation différentielle:

$$\frac{dz(x)}{d\mu(x)} = \frac{\gamma^2 \cosh z(x)}{\sqrt{\gamma^2 + \sinh^2 z(x)}}, \quad (9.47)$$

où il est impossible de déduire la solution explicite de $z[\mu](x)$. La solution de (9.47) ne peut-être déterminée qu'implicitement, i.e. $\mu[z](x)$, sous la forme:

$$\mu(x) = \frac{1}{\gamma^2} \operatorname{arctanh} \left[\frac{\sinh z(x)}{\sqrt{\gamma^2 + \sinh^2 z(x)}} \right] + \frac{\sqrt{\gamma^2 - 1}}{\gamma^2} \operatorname{arctan} \left[\frac{\sqrt{\gamma^2 - 1} \sinh z(x)}{\sqrt{\gamma^2 + \sinh^2 z(x)}} \right]. \quad (9.48)$$

La fonction (9.48) est la fonction génératrice inversée du potentiel de Ginocchio en termes de la masse effective $\mu(x)$. En insérant les paramètres (9.42) dans l'expression (9.38) en tenant compte de (9.43) et de la transformation $s(x) = \tanh^2 u(x)$, on obtient, après un long calcul, l'expression du potentiel de Ginocchio dans sa forme hyperbolique:

$$V_h(x) = -\gamma^4 \frac{j(j+1) - \gamma^2 + 1}{\gamma^2 + \sinh^2 z(x)} - \frac{3}{4} \frac{\gamma^4 (3\gamma^2 - 1)(\gamma^2 - 1)}{(\gamma^2 + \sinh^2 z(x))^2} + \frac{5}{4} \frac{\gamma^6 (\gamma^2 - 1)^2}{(\gamma^2 + \sinh^2 z(x))^3}, \quad (9.49)$$

ainsi que dans sa forme polynomiale:

$$V_p(x) = [-\gamma^2 j(j+1) + \frac{1-\gamma^2}{4} \{2 - (7-\gamma^2)y^2(x) + 5(1-\gamma^2)y^4(x)\}](1-y^2(x)), \quad (9.50)$$

une fois que la transformation

$$y(x) = \frac{\sinh z(x)}{\sqrt{\gamma^2 + \sinh^2 z(x)}}, \quad (9.51)$$

est introduite dans (9.49), où la fonction variable est définie dans $-1 \leq y(x) \leq 1$.

9.3.2. Le spectre d'énergie du potentiel de Ginocchio :

Intéressons-nous maintenant à la déduction du spectre d'énergie du potentiel de Ginocchio. En insérant les paramètres (9.42) dans l'expression (9.41), on obtient:

$$2n+1 = \frac{1}{2} - \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{1-\gamma^2}{\gamma^4} \mathcal{E}_n} - \sqrt{-\frac{1}{\gamma^4} \mathcal{E}_n}, \quad (9.52)$$

où on voit bien que le signe négatif sous la seconde racine carré caractérise les spectres d'énergie des états liés. En élevant au carré deux fois et en transposant les termes, on tire l'expression de l'énergie $\mathcal{E}_n$:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_n = & \frac{1}{2}[-1 - 2j(j+1)\gamma^2 + 4n(2n+1)(\gamma^2 - 2) \\ & + (4n+1)\sqrt{(4n+1)^2 + 4\gamma^2(j-2n)(j+2n+1)}].\end{aligned}\quad (9.53)$$

En ajoutant et en soustrayant $\frac{1}{\gamma^2}$ dans (9.53), on réduit cette dernière à:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_n = & -\gamma^2(j + \frac{1}{2})^2 + (\gamma^2 - 2)(2n + \frac{1}{2})^2 \\ & + 2(2n + \frac{1}{2})\sqrt{(1 - \gamma^2)(2n + \frac{1}{2})^2 + \gamma^2(j + \frac{1}{2})^2}.\end{aligned}\quad (9.54)$$

Cependant, en exprimant le terme $\gamma^2 - 2$ dans (9.54) par $-(1 - \gamma^2) - 1$ et après quelques manipulations algébriques, on finit par obtenir l'expression du spectre d'énergie correspondant au potentiel de Ginocchio:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_n = & -[\gamma^2(j + \frac{1}{2})^2 + (1 - \gamma^2)(2n + \frac{1}{2})^2 + (2n + \frac{1}{2})^2 \\ & - 2(2n + \frac{1}{2})\sqrt{(1 - \gamma^2)(2n + \frac{1}{2})^2 + \gamma^2(j + \frac{1}{2})^2}],\end{aligned}\quad (9.55)$$

et qui peut-être mis sous une forme plus compacte:

$$\mathcal{E}_n = -[\sqrt{(1 - \gamma^2)(2n + \frac{1}{2})^2 + \gamma^2(j + \frac{1}{2})^2} - (2n + \frac{1}{2})]^2, \quad (9.56)$$

où $n = 0, 1, 2, \dots, [j]$.¹⁸

¹⁸ $[j]$ désigne la partie entière de j .

CONCLUSION

Notre travail s'est articulé autour de trois grandes parties.

Dans la première partie (chapitre 3, [39]), nous avons utilisé différentes méthodes afin de déduire le spectre d'énergie de l'état fondamental aux faibles couplages ($g \rightarrow 0$) pour des potentiels complexes multidimensionnels à anharmonicité cubique et invariants sous la transformation discrète PT , et développer la procédure de resommation sur les potentiels effectifs associés pour calculer le spectre d'énergie aux forts couplages ($g \rightarrow \infty$).

En première approche, nous avons déduit les spectres d'énergie de l'état fondamental aux faibles couplages par un traitement perturbatif en utilisant la technique des diagrammes de Feynman et les méthodes de récurrence de Bender-Wu. Les résultats obtenus sont en parfaite accord avec ceux de la théorie des perturbations de Rayleigh-Schrödinger ainsi que la théorie des perturbations variationnelles pour matrice de densité. Aux forts couplages, les potentiels sont réduits à leurs termes complexes sans les parties harmoniques. La resommation des séries d'énergie obtenues aux faibles couplages semblent donner des résultats ne correspondant pas aux résultats attendus théoriquement et conduisent à une mauvaise estimation de l'énergie aux forts couplages. Ceci est dû à notre avis au rayon de convergence de la série; c'est-à-dire, la lente convergence de la série d'énergie obtenue après resommation.

Cependant, la combinaison de la théorie des perturbations variationnelles avec une autre approche variationnelle de la théorie des champs, à savoir le potentiel effectif, a permis d'améliorer le taux de convergence du résultat. En effet, le potentiel effectif est déduit d'un sous-ensemble des diagrammes de Feynman connectés, à savoir les diagrammes à une particule irréductible. Il conduit, d'une part, aux expressions des énergies de l'état fondamental aux faibles couplages, d'autre part, permet de déterminer les coefficients correcteurs $b_{0,n}^{(n)}$ des spectres d'énergie aux forts couplages et qui s'avèrent être en accord avec les résultats espérés théoriquement.

La seconde partie (chapitre 6, [40]) a été consacrée à la connexion des potentiels généralisés de Morse et de Pöschl-Teller par l'intermédiaire de l'équation de Schrödinger. La réalisation différentielle des opérateurs de la chaîne du groupe $U(2) \supset SU(2)$ sur un plan et sur une sphère nous a conduit aux équations de Schrödinger correspondantes aux potentiels généralisés de Morse et de Pöschl-Teller, respectivement, donnant ainsi la possibilité de lier et d'unifier les deux potentiels à travers des transformations globales.

En effet, les deux potentiels généralisés évoqués plus haut sont rangés dans deux grandes familles de potentiels généralisés de Natanzon; à savoir, les potentiels de Natanzon non-dégénérés et dégénérés, respectivement. Chaque potentiel de chaque famille peut-être transformé à un autre par une transformation ponctuelle canonique. Cela suggère que le

lien entre les potentiels généralisés rangés dans des familles différentes ne peut se faire que par le biais d'une transformation plus large que les transformations ponctuelles canoniques.

Afin de justifier nos remarques, nous avons combiné la supersymétrie de la mécanique quantique à la théorie des groupes afin de lier les potentiels généralisés de Morse et de Pöschl-Teller dans le cadre du formalisme de l'équation de Schrödinger. Nous avons construit l'équation de Schrödinger associée au potentiel généralisé de Pöschl-Teller partant de celle associée au potentiel généralisé de Morse. Il a été trouvé que les équations de Schrödinger sont liées par la transformée de Fourier. Nous avons aussi fourni une démonstration expliquant la correspondance causale et biunivoque existante entre les deux potentiels généralisés (cf. l'annexe A). Dans notre cas, cette correspondance signifie que la connaissance du premier potentiel généralisé contribue à la déduction du second, et inversement, à travers la transformée de Hankel. Ainsi, les spectres d'énergie des états liés des potentiels généralisés de Morse et de Pöschl-Teller sont liés à la même représentation algébrique $su(2)$, cette dernière joue le rôle d'une algèbre dynamique de la représentation unitaire du groupe $SU(2)$. Par conséquent, le spectre d'énergie des états liés du potentiel généralisé de Pöschl-Teller est décalé par rapport à celui de Morse par un facteur constant, trouvé égale à $\lambda - \mu - \frac{1}{2}$.

Quant à la troisième partie (chapitre 9, [41]), elle concerne la génération des potentiels hypergéométriques de Natanzon associés aux masses effectives dépendantes de la position et dépourvus des paramètres d'ambiguïté en utilisant les représentations conformes.

Nous avons attribué aux générateurs du groupe $SU(1,1)$ des structures différentielles afin de déduire des équations différentielles du second ordre exprimées en fonction de l'opérateur invariant de Casimir de l'algèbre $su(1,1)$. L'application des transformations similaires nous a permis de construire l'équation de Schrödinger pour une large variété de potentiels effectifs exactement solubles. Nous avons donné l'expression de passage entre les potentiels effectifs et les potentiels hypergéométriques de Natanzon tirant son origine des représentations conformes (cf. l'annexe B). L'intérêt particulier porté aux représentations conformes est dû essentiellement au fait que la variable z , telle qu'elle est définie dans les potentiels de Natanzon, varie dans l'intervalle $[0,1]$. Ceci nous a conduit à établir une connexion entre la variable $\xi \in \mathbb{D}$ déduite de la construction algébrique et $z \in D$, déduite de la représentation conforme. Pour être plus précis, il s'est avéré que les potentiels hypergéométriques de Natanzon peuvent être déduits sous la transformation (9.20), souvent appelée fonction homographique, spécifiée par des représentations conformes. Comme il est exposé dans la démonstration de l'annexe B, la variable z , de (9.20), désigne une transformation sous laquelle les points de l'axe des réels $\Im m \Omega = \text{const.}$, où $\xi = \exp[2i\Omega]$ ¹⁹, forment une correspondance biunivoque avec les points du contour $|z| \leq 1$. Par conséquent, l'expression (9.20) exécute une représentation conforme du demi-plan de droite sur l'intérieur d'un cercle de rayon unité.

Perspectives

¹⁹Pour discuter ces fonctions, cf. les expressions (B.1) et (B.2) de l'annexe B

Il est enfin très intéressant d'approcher une partie des problèmes traités dans cette thèse, ainsi que d'autres, par différentes voies et approches. À titre d'exemples:

1. *Aborder le problème de la connexion des potentiels généralisés de Morse et Pöschl-Teller dans la cadre du formalisme des intégrales de chemins.* En effet, comme ces dernières sont considérées comme des transformations intégrales, alors il sera intéressant d'établir le genre de transformation utilisée pour cette connexion.
2. *Dans un autre contexte, chercher à établir un lien entre les spectres d'énergie équidistants et non-équidistants de quelques potentiels par le concept de la dualité.* En utilisant le concept du potentiel aux formes invariantes [84], il sera intéressant de déduire un spectre d'énergie non-équidistant à partir d'un spectre d'énergie équidistant, et vice versa, via le concept de la *dualité*.
3. *Concernant des potentiels complexes, expliquer la complémentarité [85] entre la pseudo-hermiticité et la pseudo-hermiticité faible [86] par le biais des transformations ponctuelles canoniques (TPC).* Il sera intéressant d'établir une équivalence de type: "Complémentarité-TPC", afin de donner un sens mathématique à la complémentarité et d'étendre cette compréhension dans le cadre de la théorie des groupes de Lie.

Tous ces travaux sont actuellement en cours de développement et un des articles a été soumis pour publication.

APPENDICE A

CONNEXION DES POTENTIELS GENERALISES DE MORSE ET DE PÖSCHL-TELLER

Il est question dans cette annexe de la connexion des potentiels généralisés de Morse et de Pöschl-Teller. Nous complétons ici les détails mathématiques non abordés dans le chapitre 6 afin d'apporter une démonstration que les deux potentiels généralisés sont liés à travers le concept de la transformée de Hankel (Intégrale de Fourier-Bessel).

En comparant les équations (6.41) et (6.63), en tenant compte de la définition de la fonction d'onde (6.60), on obtient:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt'} Q_{a,\gamma}^{(M)}(t') \xi(t', \Phi') &= (1+t'^2)^{3/2} \frac{d}{dt'} Q_{a,\gamma}^{(M)}(t') \Psi(t', \Phi') \\ &= (1+t'^2)^{3/2} F \left\{ \frac{d}{dt} q_{\mu,\gamma'}^{(PT)}(t) \psi(t, \Phi) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

La transformée de Fourier d'une fonction à deux variables, par exemple t_x et t_y , introduites dans le chapitre 6, est donnée par:

$$\begin{aligned} \Psi(t_u, t_v) &\equiv F \{ \psi(t_x, t_y) \} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_x \int_{-\infty}^{\infty} dt_y \psi(t_x, t_y) \exp[-i(t_u t_x + t_v t_y)]. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

L'introduction de la transformation (6.45) permet de réécrire (A.2) sous la forme:

$$\begin{aligned} \Psi(t', \Phi') &= \int_0^{2\pi} d\Phi \int_0^{\infty} t dt \psi(t, \Phi) \exp[-itt'(\cos \Phi \cos \Phi' - \sin \Phi \sin \Phi')] \\ &= \int_0^{2\pi} d\Phi \int_0^{\infty} t dt \psi(t, \Phi) \exp[-itt' \cos(\Phi - \Phi')]. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Puisque les fonctions d'onde sont définies par $\psi(t, \Phi) = R(t)e^{im\Phi}$ et $\xi(t', \Phi') = U(t')e^{im'\Phi'}$, alors (A.1) devient:

$$\frac{d}{dt'} Q_{a,\gamma}^{(M)}(t') \xi(t', \Phi') = (1+t'^2)^{3/2} \int_0^{2\pi} d\Phi \int_0^{\infty} t dt R(t) \frac{dq_{\mu,\gamma'}^{(PT)}(t)}{dt} e^{-itt' \cos(\Phi - \Phi') + im\Phi}. \quad (\text{A.4})$$

Afin d'évaluer l'intégrale en Φ , nous utilisons la représentation intégrale des fonctions cylindriques du premier type de Bessel:

$$J_\nu(x) \stackrel{(6.71)}{=} \frac{1}{2\pi i} \oint dz z^{-1-\nu} \exp\left[\frac{x}{2}\left(z - \frac{1}{z}\right)\right]. \quad (\text{A.5})$$

Soit $z = e^{i\Phi}$ le paramètre d'intégration et le cercle de rayon unité étant le contour d'intégration. En remplaçant $\nu = m$ et $x = tt'$, la fonction cylindrique de Bessel (A.5) devient:

$$J_m(tt') = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi} d\Phi \exp[itt' \sin \Phi - im\Phi]. \quad (\text{A.6})$$

Afin de retrouver l'exposant de (A.4) avec le signe plus pour $im\Phi$, un nouveau changement de variable s'impose. D'une part, le changement $\Phi \rightarrow \Phi - \Phi' - \frac{\pi}{2}$ conduit à exprimer la fonction cylindrique de Bessel comme:

$$J_m(tt') = \frac{i^m}{2\pi} e^{im\Phi'} \int_0^{2\pi} d\Phi \exp[-itt' \cos(\Phi - \Phi') - im\Phi], \quad (\text{A.7})$$

d'autre part, en substituant $m \rightarrow -m$ tenant compte de la propriété de la fonction de Bessel $J_{-m}(x) = (-1)^m J_m$, on trouve:

$$\int_0^{2\pi} d\Phi \exp[-itt' \cos(\Phi - \Phi') + im\Phi] = 2\pi(-i)^m e^{im\Phi'} J_m(tt'). \quad (\text{A.8})$$

En insérant (A.8) dans (A.4), on déduit:

$$\frac{d}{dt'} Q_{a,\gamma}^{(M)}(t') \mathcal{U}(t') = 2\pi(-i)^m (1+t'^2)^{3/2} \int_0^\infty t dt \mathbf{R}(t) \frac{dq_{\mu,\gamma'}^{(PT)}(t)}{dt} J_m(tt'). \quad (\text{A.9})$$

Cette dernière nous a permis d'établir la relation entre les fonctions d'onde $\mathcal{U}(t')$ et $\mathbf{R}(t)$ donnée par:

$$\mathcal{U}(t') \stackrel{(6.74)}{=} 2\pi(-i)^m (1+t'^2)^{3/2} \int_0^\infty t dt \mathbf{R}(t) J_m(tt'). \quad (\text{A.10})$$

En insérant (A.10) dans (A.9), on obtient après simplification:

$$\frac{d}{dt'} Q_{a,\gamma}^{(M)}(t') \int_0^\infty t dt \mathbf{R}(t) J_m(tt') = \int_0^\infty t dt \mathbf{R}(t) \frac{dq_{\mu,\gamma'}^{(PT)}(t)}{dt} J_m(tt'). \quad (\text{A.11})$$

En intégrant les deux membres de (A.11) par rapport à t' et en interchangeant l'ordre d'intégration, nous obtenons:

$$\int_0^\infty t dt \mathbf{R}(t) \int_0^\infty t' dt' \frac{1}{t'} \frac{d}{dt'} Q_{a,\gamma}^{(M)}(t') J_m(tt') = \int_0^\infty t dt \mathbf{R}(t) \frac{dq_{\mu,\gamma'}^{(PT)}(t)}{dt} \int_0^\infty dt' J_m(tt')$$

$$= \int_0^{\infty} t dt \mathbf{R}(t) \frac{dq_{\mu, \gamma'}^{(PT)}(t)}{dt} \frac{1}{t}, \quad (\text{A.12})$$

où l'intégrale de la fonction de Bessel dépendant d'un paramètre p :

$$\int_0^{\infty} dx J_m(px) = \frac{1}{p}, \quad (\text{A.13})$$

a été utilisée dans (A.12). En identifiant les termes dans (A.12) et en utilisant la transformée de Hankel (ou l'*intégrale de Fourier-Bessel*), on obtient:

$$\begin{aligned} \frac{1}{t} \frac{d}{dt} q_{\mu, \gamma'}^{(PT)}(t) &= \int_0^{\infty} t' dt' \frac{1}{t'} \frac{dQ_{a, \gamma}^{(M)}(t')}{dt'} J_m(tt') \\ &= \mathbf{F} \left\{ \frac{1}{t'} \frac{dQ_{a, \gamma}^{(M)}(t')}{dt'} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

et qui représente le résultat (6.64).

ANNEXE B

REPRESENTATIONS CONFORMES

Cette annexe est principalement consacrée aux représentations conformes. Nous démontrons ici comment la transformation (9.20) peut-être déduite à partir de quelques fonctions élémentaires et analytiques dans le cadre des représentations conformes.

La notion de transformation conforme est l'une des plus importantes en mathématiques. Née des représentations physiques, elle a de nombreuses applications dans les différents domaines de la physique: elle permet de résoudre d'une manière concluante les problèmes pratiques d'hydrodynamique et d'aérodynamique, de la théorie de l'élasticité, des théories des champs électrostatique et magnétique, thermiques et d'autres.

Soit une fonction analytique $w = f(z)$ dans un domaine D . À chaque point $z \in D$ lui correspond un point $w \in D^*$ du plan complexe. Si la correspondance entre z et w est biunivoque, alors la correspondance est dite *conforme*. Par conséquent, on dit qu'il existe une transformation du domaine D sur le domaine D^* . Le point $w \in D^*$ est appelé l'image du point $z \in D$ et le point z est original du point w .

Soit un domaine D donné appartenant au plan- z , l'introduction de la transformation:

$$Z = 2iz, \quad (B.1)$$

où $Z = x_1 + iy_1$, permet d'abord d'effectuer une rotation d'un angle droit et dilate de deux fois notre domaine. Puis, nous introduisons la fonction exponentielle:

$$Z = \exp[z]. \quad (B.2)$$

Soit donné dans le plan des $z \in D$ la bande: $-\frac{\pi}{4} \leq \Re z \leq \frac{\pi}{4}$, qu'on demande de transformer conformément sur un cercle $|w| < 1$ avec une correspondance de trois points frontières $f(\pm \frac{\pi}{4}) = \pm 1$ et $f(i\infty) = i$ (ici $i\infty$ désigne le point à l'infini dans la direction de l'axe imaginaire du plan des z). Par conséquent, les transformations (B.1) et (B.2) transforment la bande $-\frac{\pi}{2} \leq \Im m z \leq \frac{\pi}{2}$, sur laquelle la fonction (B.1) transforme le domaine D , sur le demi-plan de droite $\Re Z > 0$ (En effet, comme $Z = e^{x_1} e^{iy_1}$, alors

$|Z| = e^{x_1}$ varie de 0 à ∞ et $\arg Z = y_1$ de $-\frac{\pi}{2}$ à $\frac{\pi}{2}$.

Il reste maintenant de transformer le demi-plan de droite sur le cercle de rayon unité de telle manière que les points $Z = i, -i, 0$ correspondants, respectivement, aux points $z = \frac{\pi}{4}, -\frac{\pi}{4}, i\infty$ aient pour images les points $w = 1, -1, i$. Ce problème peut-être résolu en liant les trois points initiaux z_α aux points trois finaux w_α , avec $(\alpha = 1, 2, 3)$, à travers les transformations homographiques:

$$\frac{w - w_1}{w - w_3} \frac{w_2 - w_3}{w_2 - w_1} = \frac{Z - z_1}{Z - z_3} \frac{z_2 - z_3}{z_2 - z_1}. \quad (\text{B.3})$$

En insérant les points initiaux et finaux dans (B.3), la transformation homographique (B.3) devient:

$$w = \frac{1}{i} \frac{Z - 1}{Z + 1}, \quad (\text{B.4})$$

et en substituant dans (B.4) les expressions de (B.1) et (B.2), on obtient la solution à notre problème:

$$w = \frac{1}{i} \frac{e^{2iz} - 1}{e^{2iz} + 1} \equiv \tan z, \quad (\text{B.5})$$

où $-1 \leq \Re w \leq 1$.

En inversant l'expression (B.4), nous obtenons la fonction homographique:

$$Z = \frac{1 + iw}{1 - iw}, \quad (\text{B.6})$$

et après avoir effectué la transformation $w \rightarrow v = \sqrt{w}$ (i.e. $\rho = \sqrt{r}$ et $2\varphi = \theta$), on finit par obtenir l'expression (9.20):

$$Z = \frac{1 + i\sqrt{w}}{1 - i\sqrt{w}}, \quad (\text{B.7})$$

avec les correspondances $Z \rightarrow \xi$ et $w \rightarrow z$ (ne pas confondre avec la variable z des expressions (B.1-3 et B.5)).

Maintenant nous avons deux points du plan- v correspondant à un seul point dans le plan- w . Afin d'éviter cette double correspondance, nous imposons à l'angle θ d'être compris dans l'intervalle $0 \leq \theta \leq 2\pi$, ce qui permet de transformer la fonction v d'une fonction à valeur double en une fonction à valeur simple. Cette transformation est mathématiquement réalisable à la simple condition de ne jamais croiser la ligne $\theta = 0$ dans le plan- w (le plan- z du chapitre 9). Une telle ligne de délimitation est connue sous le nom de *ligne de coupure*, et qui consiste à limiter l'argument de w conduisant à écrire $\Re w \in [0, 1]$. Par conséquent, le point $w = 0$ est un *point de branchement*, impliquant que

la fonction $v = \sqrt{w}$ n'est pas analytique au point $w = 0$.

Discussion

Par la transformation (B.1), la famille des droites verticales $\Re z = \text{const}$ a pour image la famille des droites horizontales que la transformation (B.2) transforme en une famille des rayons $\arg Z = \text{const}$, c'est-à-dire en une famille des "circonférences" passant par les points $Z = 0, \infty$. Par la transformation homographique (B.4), les images de ces points sont $w = i$ et $w = -i$, donc les rayons que nous avons considéré se transforment en une famille des circonférences qui passent par les points $w = \pm i$. La famille orthogonale des segments $\Im z = \text{const.}$ se transforme en une famille des circonférences qui ont $w = \pm i$ comme points symétriques (voir Figure B.1).

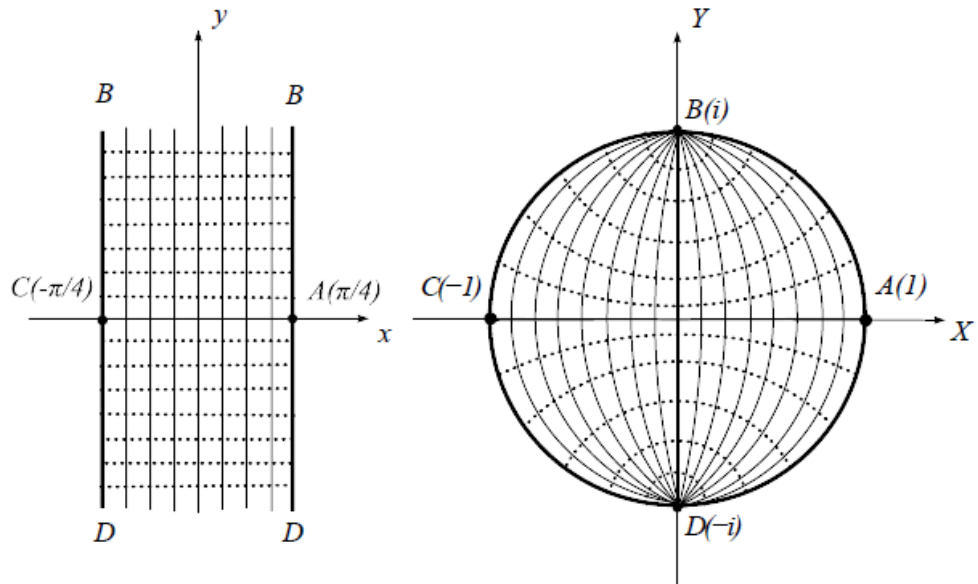


Figure B.1: Représentation conforme des familles orthogonales.

RÉFÉRENCES

1. R. P. Feynman, A. R. Hibbs, "Quantum Mechanics and Path Integral", McGraw-Hill, New York (1965).
2. H. Kleinert, "Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymers Physics and Financial Markets", 4th ed., World Scientific, Singapor (2006).
3. T. Kashiwa, Y. Ohnuki, M. Suzuki, "Path Integral Methods", Clarendon Press, Oxford (1997).
4. D. C. Khandekar, S. V. Lawande, B. V. Bhagwat, "Path Integral Methods and its Applications", World Scientific, Singapor (1993).
5. L. Infeld, T. E. Hull, Rev. Mod. Phys. **23** (1951) 21.
6. F. Cooper, A. Khare, U. Sukhatme, "Supersymmetry and Quantum Mechanics", Phys. Rep. **251** (1995) 276.
7. B. Bagchi, "Supersymmetry in Quantum and Classical Mechanics", Chapman & Hall, Florida (2000).
8. G. Junker, "Supersymmetric Methods in Quantum Mechanics and Statistical Physics", Springer, Berlin (1996).
9. F. Iachello, "Lie Algebras and Applications", Springer, Berlin (2006).
10. A. O. Barut, R. Raczka, "Theory of Group Representation and Applications", PWN, Warsaw (1977).
11. A. O. Barut, "Dynamical Group Generalized Symmetries in Quantum Mechanics", University of Canterbury, Chrischurch, NewZealand (1972).
12. R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys. **20** (1948) 367.
13. P. A. M. Dirac, P. Zeit. **3** (1933) 64.
14. I. M. Duru, H. Kleinert, Phys. Lett. B **84** (1979) 30.
15. R. P. Feynman, H. Kleinert, Phys. Rev. A **34** (1986) 5080.
16. H. Kleinet, Phys. Lett. A **173** (1993) 332.
17. R. P. Feynman, Phys. Rev. **97** (1955) 660.
18. R. Giachetti, V. Toghetti, Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 912.
19. R. Giachetti, V. Toghetti, R. Vaia, Phys. Rev. **B33** (1986) 7647.
20. H. Kleinert, W. Kürzinger, A. Pelster, J. Phys. A: Math. Gen. **31** (1998) 8307.

21. L. Landau, E. Lifchitz, "Mécanique Quantique, Théorie non-Relativiste", troisième éd., Mir, Moscou (1980).
22. C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, "Mécanique Quantique", Édition Hermann, Paris (1973).
23. M. Bentaiba, S.-A. Yahiaoui, L. Chetouani, Phys. Lett. A **331** (2004) 175.
24. M. Bentaiba, L. Chetouani, A. Mazouz, Phys. Lett. A **295** (2002) 13.
25. M. Bachmann, H. Kleinert, A. Pelster, Phys. Rev. A **60** (1999) 3429.
26. F. Weissbach, A. Pelster, B. Hamprecht, Phys. Rev. E **66** (2002) 036129.
27. S. F. Brandt, H. Kleinert, A. Pelster, J. Math. Phys. **46** (2005) 032101.
28. S. F. Brandt, A. Pelster, J. Math. Phys. **46** (2005) 112105.
29. S. F. Brandt, Diploma thesis, Fachbereich Physik, Freie Universität (2004).
30. G. Hardy, "Divergent Series", Oxford (1966).
31. C. M. Bender, S. A. Orszag, "Advanced Mathematical Methods for Scientists and engineers-Asymptotic Methods and Perturbation Theory", Springer-Verlag, New York (1990).
32. J. Dolla Dora, C. Crescenzo, "Padé Approximation and its Applications", ed. L. Wuytack, Springer, Belin (1979).
33. Y. A. Gel'fand, E. P. Licktmann, JETP Lett. **13** (1971) 323,
P. Ramond, Phys. Rev. D **3** (1971) 2415,
A. Neveu, J. Schwarz, Nucl. Phys. B **31** (1971) 86.
34. E. Witten, Nucl. Phys. B **188** (1981) 513,
F. Cooper, B. Freedman, Ann. Phys. **146** (1983) 262.
35. E. Schrödinger, Proc. Roy. Irish Acad. A **46** (1940) 9,
E. Schrödinger, Proc. Roy. Irish Acad. A **47** (1941) 53.
36. B. Mielnik, J. Math. Phys. **25** (1984) 3387.
37. Y. Alhassid, F. Gürsey, F. Iachello, Ann. Phys. **148** (1983) 346,
Y. Alhassid, F. Gürsey, F. Iachello, Phys. Rev. Lett. **50** (1983) 873,
Y. Alhassid, F. Gürsey, F. Iachello, Ann. Phys. **167** (1986) 181.
38. G. Lévai, J. Phys. A: Math. Gen. **27** (1994) 3809,
G. Lévai, F. Cannata, A. Ventura, J. Phys. A: Math. Gen. **35** (2002) 5041.
39. S.-A. Yahiaoui, O. Cherroud, M. Bentaiba, J. Math. Phys. **48** (2007) 113503.
40. S.-A. Yahiaoui, S. Hattou, M. Bentaiba, Ann. Phys. **322** (2007) 2733.
41. S.-A. Yahiaoui, M. Bentaiba, Int. J. Theo. Phys. **49** (2009) 315.

42. C. M. Bender, S. Boettcher, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 5243,
C. M. Bender, S. Boettcher, P. N. Meisinger, J. Math. Phys. **40** (1999) 2201.
43. C. M. Bender, D. C. Brody, H. F. Jones, Phys. Rev. Lett. **89** (2002) 270401,
C. M. Bender, D. C. Brody, H. F. Jones, Am. J. Phys. **71** (2003) 1095.
44. C. M. Bender, G. V. Dunne, J. Math. Phys. **40** (1999) 4616.
45. M. Znojil, Phys. Lett. A **285** (2001) 7.
46. K. S. Shin, Commun. Math. Phys. **229** (2002) 543.
47. C. M. Bender, P. N. Meisinger, Q. J. Wang, J. Phys. A: Math. Gen. **36** (2003) 1973,
C. M. Bender, G. V. Dunne, P. N. Meisinger, M. Simsek, Phys. Lett. A **281** (2001) 311.
48. M. Bentaiba, L. Chetouani, F. T. Hammann, Phys. Lett. A **189** (1994) 433,
M. Bentaiba, L. Chetouani, F. T. Hammann, Z. Naturforsch. A **47** (1992) 1013.
49. F. Reif, "Fundamentals of Statistical and Thermal Physics", McGraw-Hill, New York (1965).
50. L. Landau, E. Lifchitz, "Physique Statistique", deuxième éd., Mir, Moscou (1967).
51. A. Lagoutine, "Éléments de Statistique Quantique", OPU, Alger (1985).
52. C. M. Bender, T. T. Wu, Phys. Rev. **184** (1969) 1231,
C. M. Bender, T. T. Wu, Phys. Rev. Lett. **27** (1971) 461,
C. M. Bender, T. T. Wu, Phys. Rev. D **7** (1973) 1620.
53. P. M. Morse, Phys. Lett. **34** (1929) 57.
54. G. Pöschl, E. Teller, Z. Phys. **83** (1933) 143.
55. E. Drigo-Filho, J. Phys. A: Math. Gen. **21** (1988) L1025,
E. Drigo-Filho, preprint University of Sao Paulo, IFT (1988) 43.
56. V. Smirnov, "Cours de Mathématiques Supérieures III", deuxième éd., Mir, Moscou (1975).
57. G. Alfken, "Mathematical Methods for Physicists", Academic Press, New York (1970).
58. A. Arima, F. Iachello, Ann. Phys. **99** (1976) 253,
A. Arima, F. Iachello, Ann. Phys. **111** (1978) 201,
A. Arima, F. Iachello, Ann. Phys. **123** (1979) 468.
59. J. Wu, Y. Alhassid, J. Math. Phys. **31** (1990) 557,
J. Wu, Y. Alhassid, F. Gürsey, Ann. Phys. **196** (1989) 163.

60. G. A. Natanzon, Vestnik Leningrad Univ. **10** (1971) 22,
G. A. Natanzon, Teor. Mat. Fiz. **38** (1979) 146.
61. J. Ginocchio, Ann. Phys. **152** (1984) 203,
J. Ginocchio, Ann. Phys. **159** (1985) 467.
62. D. J. BenDaniel, C. B. Duke, Phys. Rev. **152** (1966) 683.
63. O. von Roos, Phys. Rev. B **27** (1983) 7547.
64. A. de Souza Dutra, C. A. S. Almeida, Phys. Lett. A **275** (2000) 25.
65. L. Dekar, L. Chetouani, F. T. Hammann, J. Phys. A: Math. Gen. **39** (1998) 2551,
L. Dekar, L. Chetouani, F. T. Hammann, Phys. Rev. A **59** (1999) 107.
66. A. D. Alhaidari, Phys. Rev. A **65** (2002) 042109; Phys. Rev. A **66** (2002) 189901,
B. Gönül, O. Özer, B. Gönül, F. Üzgün, Mod. Phys. Lett. A **17** (2002) 2453.
67. C. Weisbach, B. Vinter, "Quantum Semiconductor Heterostructures", Academic Press, New York (1993).
68. M. Lavrentiev, B. Chabat, "Méthodes de la Théorie des Fonctions d'une Variable Complexe", éditions Mir, Moscou (1972).
69. P. Cordero, S. Salomó, Found. Phys. **23** (1993) 675,
P. Cordero, S. Salomó, J. Phys. A: Math. Gen. **24** (1991) 5299.
70. B. Bagchi, P. Gorain, C. Quesne, R. Roychoudhury, Czech. J. Phys. **54** (2004) 1019.
71. R. Koç, M. Koka, J. Phys. A: Math. Gen. **36** (2003) 8105.
72. C. V. Sukumar, J. Phys. A: Math. Gen. **19** (1986) 2229.
73. I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, "Table of Integrals, Series, and Products", Academic Press, New York (1965).
74. R. Jackiw, Phys. Rev. D **9** (1974) 1686.
75. W. Greiner, J. Reinhardt, "Field Quantization", Springer-Verlag, Berlin (1996),
W. Greiner, B. Müller, "Mécanique Quantique, Symétries", Springer-Verlag, Berlin (1999).
76. D. R. Nelson, N. Shnerb, Phys. Rev. E **58** (1998) 1383.
77. N. Hatono, D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 570,
N. Hatono, D. R. Nelson, Phys. Rev. B **56** (1997) 8651.
78. T. J. Hollowood, Nucl. Phys. B **386** (1992) 166.
79. A. G. Ushveridze, "Quasi-Exactly Solvable Models in Quantum Mechanics", IOP, Bristol (1994).

- 80. A. de Sousa Dutra, Phys. Rev. A **47** (1993) **R2435**.
- 81. P. Lax, Commun. Pure Appl. Math. **27** (1968) 97.
- 82. A. B. Zamolodchikov, A. B. Zamolodchikov, Ann. Phys. **120** (1979) 253.
- 83. E. Hylleraas, Z. Phys. **47** (1932) 216.
- 84. L. E. Gendenshtein, JETP Lett. **38** (1983) 356.
- 85. B. Bagchi, C. Quesne, Phys. Lett. A **301** (2002) 173.
- 86. A. Mostafazadeh, J. Math. Phys. **43** (2002) 205,
A. Mostafazadeh, J. Math. Phys. **43** (2002) 2814,
A. Mostafazadeh, J. Math. Phys. **43** (2002) 3944.