

Université de SAAD DAHLAB DE BLIDA

Faculté des Sciences
Département de Physique

MEMOIRE DE MAGISTER

Spécialité : physique théorique

La méthode de Kleinert et al.
aux cas des potentiels complexes à 3D

Par

CHERROUD OTHMANE

Devant le jury composé de

Mr : BOUKRAA Salah	professeur,	U.S .D. Blida	Président
Mr : CHOUCHAOUI Ahmed	professeur,	U.S.T.H.B Alger	Examineur
Mr : OUDIH Med Reda	Maitre de Conférence,	U.S.T.H.B Alger	Examineur
Mr : BENTAIBA Mustapha,	professeur,	U.S.D. Blida	Rapporteur

Blida, janvier 2007

Abstract

The purpose of the present thesis is to examine how in first approach the variational perturbation theory (VPT) can be applied to the generalized 2D and 3D-complex cubic potentials by resumming the weak coupling series of the ground-state energy. These series are derived using the Feynman diagrammatical expansion and recursion relations deduced from Bender-Wu method. The results obtained in weak-coupling limit seem to converge to the exact result in low orders, so that the divergence of that series becomes important when the expansion is driven to the higher-orders. Therefore, it is necessary to find means for treating the divergent perturbation series, including the strong-coupling limit. In the strong-coupling limit, the complex potentials 2D and 3D are reduced to the potentials without a harmonic term. It turns out that the rate of convergence is not satisfactory. Therefore, combining the effective potential to the VPT permits the improvement of the rate of convergence.

Résumé

L'objectif principal de ce travail est double : d'une part, déduire le spectre d'énergie de l'état fondamental relatif à une classe de potentiels complexes multidimensionnels PT -symétrique aux faibles couplages. En utilisant les diagrammes de Feynman ainsi que les relations de récurrence de Bender-Wu et à l'aide d'une technique mathématique dite de resommation, ceci nous mène à déduire les spectres d'énergie correspondant aux forts couplages. La procédure de resommation consiste à transformer des séries perturbatives divergentes aux faibles couplages en séries non perturbatives convergentes aux forts couplages. D'autre part, améliorer la convergence des spectres d'énergie obtenus par l'introduction du concept du potentiel effectif défini comme étant la transformation de Legendre de l'énergie libre aux basses températures.

ملخص

الهدف الرئيسي من هذا العمل هدف مزدوج:

الهدف الأول: إيجاد أطيف متسلسلات الطاقة للحالة الأساسية لزمرة هاملتونية مركبة (تخليية) متعددة الأبعاد ذات ثابت ترابط صغير (g) ومرتبطة بهزاز توافقي ، وذلك باستعمال بعض النماذج و النظريات التقريبية التالية: النظرية الاضطرابية لمنحنى الجزيئات لفايان وكذلك نظرية العلاقات التراجعية لبندريو، ونظرية المعالجة الاضطرابية لمتسلسلات الكومونات الفعالة لمنحنى الجزيئات المتعذر تبسيطها لفايان ، ومن خلال متسلسلات الطاقة ذات ثابت الترابط الصغير (g) يمكننا إيجاد النتيجة التقريبية للطاقة الأساسية في حالة ثابت ترابط كبير (g) وذلك باستعمال صياغات رياضية لتحويل كلاينرت للثابت (\hbar) من جهة و (g) من جهة أخرى لدراسة تقارب أطيف الطاقة و بتحويل متسلسلات الطاقة الاضطرابية للترابط الصغير (g) المتباعدة في حالة تعويضها بالترابط الكبير (g)، إلى مستوى طاقة أساسي (نتائج حقيقية موجبة).

الهدف الثاني: تحسين التقارب لمستويات الطاقة للترابط الكبير (g) المتحصل عليها من خلال المعالجة بالنظرية الاضطرابية للكومونات الفعالة بتحويل كلاينرت للثابت: (\hbar) بزيادة عدد الجزيئات- المتعذر تبسيطها- لمنحنى فايان، أفضل منها في حالة وجودها بالنظرية الاضطرابية لمنحنى الجزيئات لفايان بتحويل كلاينرت للثابت: (g)، ويبدو ذلك جليا مقارنة بالنتائج الرقمية لمستويات الطاقة الأساسية لبندر في البعد الأحادي وبمستويات الطاقة للهزات التوافقية ثنائية وثلاثية البعد .

REMERCIEMENT

Ce travail a été réalisé au Laboratoire de physique théorique et Interactions Rayonnement –Matière (LPTHIRM) du département de physique, faculté des Sciences de l'université Saad DAHLAB de Blida, sous la direction de monsieur Mustapha BENTAIBA, professeur, directeur du laboratoire et chef de département de physique, à qui j'exprime ma reconnaissance et ma gratitude. Il a dirigé mon travail avec compétence et efficacité. Je le remercie également pour les conseils qu'il m'a prodigués tout au long de mes années d'études en post-Graduation et pour avoir examiné en grand détail ce travail.

Je tiens à exprimer mes remerciements à monsieur BOUKRAA Salah professeur à l'université Saad DAHLAB et chef de département d'aéronautique, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant la présidence du jury de soutenance.

Je remercie tout particulièrement monsieur CHOUCHAOUI Ahmed, professeur à U.S.T.H.B Alger pour avoir voulu examiner ce travail et aussi pour l'intérêt particulier qu'il a porté au sujet traité.

Mes remerciements vont également à monsieur OUDIH Med Reda, Maître de conférences à l'U.S.T.H.B. (Alger), pour avoir accepté de participer au jury.

J'adresse mes plus vifs remerciements à toute l'équipe du Laboratoire de Physique Théorique et Interaction Rayonnement-Matière pour leurs conseils et leurs encouragements en particulier à mon collègue Sid Ahmed YAHIAOUI.

Je dédie ce travail

- A mes parents. J'aimerais les remercier, mais leur amour ne s'embarrasse ni ne s'acquitte de remerciements.
- A mes sœurs Kanza, Amina, Dahbia, Saliha, Fouzia, et mon frère Mohamed, à mes oncles ainsi qu'à toute ma famille. Qu'ils trouvent ici toute ma reconnaissance et ma gratitude.
- Je ne s'aurais bien sûr oublié de très nombreux amis (e).

TABLE DES MATIERES

RESUME	
REMERCIEMENTS	
TABLE DES MATIERES	
LISTE DES GRAPHIQUES ET TABLEAUX	
INTRODUCTION	7
1. INTEGRALES DE CHEMINS ET MECANIQUE QUANTIQUE <i>PT</i>	11
 SYMETRIQUE	
1.1. Introduction.	11
1.2. Intégrale de chemins en mécanique quantique.	11
1.2.1. Conjecture de Feynman.	13
1.3. Mécanique statistique et intégrales de chemins.	16
1.3.1. Mécanique statistique par les intégrales de chemins.	17
1.4. La mécanique quantique <i>PT</i> -symétrique.	19
1.4.1. Introduction.	19
1.4.2. Hamiltoniens non hermitiens <i>PT</i> -symétriques.	20
2. ACTION ET POTENTIEL EFFECTIF	24
2.1. Rotation de Wick.	24
2.2. L'action effective.	26
2.3. Potentiel effectif.	28
2.4. Exemple: Oscillateur Harmonique.	29
2.5. Exemple: Intégrale Ordinaire.	33
2.6. Méthode standard par les intégrales ordinaires.	37
2.7. Méthode standard par les intégrales de chemins.	39
2.8. Calcul du potentiel effectif.	43
2.9. Oscillateur anharmonique complexe.	46
2.10. La Théorie des perturbations : diagrammes de Feynman.	47
2.11. Méthode des perturbations de Bender-Wu: Relations de récurrences	49
2.11.1. Introduction.	49
2.11.2. L'énergie de l'état fondamental.	50

3. PROCEDURE DE RESOMMATION AUX FORTS COUPLAGES	52
3.1. Introduction.	52
3.2. Procédure de resommation du potentiel complexe unidimensionnel.	52
3.2.1. La resommation de l'énergie de l'état fondamental.	53
3.2.2. Resommation du potentiel effectif.	54
4. POTENTIEL EFFECTIF ET PROCEDURE DE RESOMMATION : CAS DES POTENTIELS MULTIDIMENSIONNELS AUX FAIBLES ET FORTS COUPLAGES	58
4.1. Introduction.	58
4.2. Théorie des perturbations: Diagrammes de Feynman.	59
4.3. Méthode perturbative de Bender-Wu: Relations de récurrences.	61
4.4. Procédure de resommation.	64
4.4.1. Resommation de l'énergie de l'état fondamental.	65
4.5. Potentiel effectif à D-dimensions.	67
4.5.1. Spectre d'énergie aux faibles couplages.	68
4.5.2. Resommation du potentiel effectif aux forts couplages	70
4.5.3. Résultats et discussions.	72
CONCLUSION.	74
ANNEXE A.	
REFERENCES.	

LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX

Figure 1.1	Les différentes trajectoires possibles entre les états initial et final.	13
Figure 1.2	La rotation de Wick dans l'espace des temps.	18
Figure 1.3	Le contour sur lequel est intégrée l'équation différentielle (1.37) dans le plan complexe, pour $ x \rightarrow \infty$, d'après [10, 17].	22
Figure 2.3	Niveaux d'énergie du hamiltonien (1.34) en fonction du paramètre réel λ , d'après [10].	23
Tableau 2.1	Les coefficients du spectre d'énergie pour le potentiel anharmonique (2.168).	51
Tableau 2.1	Les deux premiers ordres en \hbar correspondants respectivement aux nombres de boucles (loops).	55
Tableau 2.1	Les coefficients du spectre d'énergie du hamiltonien (4.1).	64
Tableau 2.1	Les coefficients du spectre d'énergie du hamiltonien (4.2).	64

INTRODUCTION

La mécanique classique a été incapable d'expliquer de nombreux phénomènes physiques comme l'effet photoélectrique, l'effet Compton, le rayonnement du corps noir, le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène, etc. Il a été donc nécessaire de formuler une nouvelle théorie pour expliquer ces phénomènes. Des formalismes mathématiques ont alors vu le jour, formulant la mécanique quantique.

La mécanique quantique a été formulée indépendamment par Schrödinger dans sa version ondulatoire et par Heisenberg dans sa version matricielle. Une autre formulation de la mécanique quantique a été introduite par Dirac [7] et édiflée par Feynman en 1948 [1-7] appelé formalisme des intégrales de chemins (ou Path-integral). Dans ce formalisme les opérateurs sont évités par l'utilisation de produits infinis d'intégrales, ce qui nous mène à une formulation d'équations intégrales plus faciles à traiter des phénomènes quantiques [4, 19,20].

Ce formalisme peut être considéré comme étant le lien entre la mécanique classique et la mécanique quantique. L'application du formalisme des intégrales de chemins aux problèmes de la particule libre et de l'oscillateur harmonique s'est faite avec succès. Cependant, ce formalisme a rencontré énormément de difficultés dans l'étude des autres problèmes nécessitant la reparamétrisation des chemins pour le calcul analytique via l'approche Path-Integral [2]. Malgré le progrès considérable réalisé par cette technique, plusieurs intégrales de chemins ne sont pas encore résolues exactement. Il faut donc mettre en œuvre des méthodes d'approximations permettant d'approcher le résultat exact avec une bonne précision.

L'objectif principal de ce travail est double: d'une part, nous calculons le spectre d'énergie de l'état fondamental d'une classe des potentiels complexes multidimensionnels PT -symétrique en utilisant les diagrammes de Feynman et les relations de récurrence de Bender-Wu [37], ainsi que le traitement

perturbatif du potentiel effectif traité en termes de diagrammes de Feynman d'une particule irréductible (non tronqués). Ces dernières conduisent par la procédure dite de resommation à la déduction des spectres d'énergie correspondants aux forts couplages. D'autre part, améliorer la convergence du calcul des spectres d'énergie obtenus par l'introduction du concept du potentiel effectif défini comme étant la transformation de Legendre de l'énergie libre aux basses températures.

L'intérêt grandissant, porté ces dernières années aux potentiels complexes prouve bien que nous avons à faire à un champ de recherche dynamique et très prometteur. Malgré leur caractère complexe, les spectres d'énergie restent entièrement réels et discrets [38]. Ces potentiels ont la propriété d'être des systèmes physiques non triviaux, ceci complique le calcul analytique du spectre d'énergie correspondant.

L'une des approches les plus prometteuse dans ce cas est la théorie des perturbations variationnelles pour matrices de densité établie par H. Kleinert et al. [3]. Elle est fondée essentiellement sur un développement perturbatif du spectre d'énergie en séries aux faibles couplages. Aux forts couplages, la série perturbative en énergie diverge. Pour éliminer cette divergence, il est utile d'accéder à des procédures dites de resommation. Elles consistent à transformer des séries perturbatives divergentes aux faibles couplages ($g \rightarrow 0$) en séries non perturbatives convergentes aux forts couplages ($g \rightarrow \infty$) grâce à l'introduction du paramètre de Kleinert [24-26, 38, 41, 42] qui permet alors de réécrire la constante de couplage dans le dénominateur des expressions des énergies.

Nous nous intéressons à l'étude et au calcul aux forts couplages, par la procédure de resommation, les spectres d'énergie correspondants aux potentiels complexes PT -symétrique du type:

$$V(x) = \frac{M\omega^2}{2}x^2 + igx^3, \quad (0.1)$$

$$V(x, y) = \frac{M\omega^2}{2}(x^2 + y^2) + igxy^2, \quad (0.2)$$

$$V(x, y, z) = \frac{M\omega^2}{2}(x^2 + y^2 + z^2) + igxyz. \quad (0.3)$$

Ces potentiels appartiennent à des classes de potentiels traités par la théorie quantique des champs (φ^3 -theory).

Ce mémoire comporte quatre chapitres, dont le premier est consacré aux intégrales de chemins et à la mécanique quantique PT -symétrique, nous soulignons l'importance de la fonction de phase dans la fonction d'onde et celle du propagateur explicité par Feynman [1-7] à partir des données classiques (Action Lagrangiennes) du système.

Le deuxième chapitre, portera sur le calcul du potentiel effectif basé sur le concept de l'action effective. Il est consacré à la détermination en premier lieu, des spectres d'énergie des potentiels complexes aux faibles couplages, par la théorie des perturbations traitées en termes des diagrammes de Feynman connectés, et en deuxième lieu par la méthode des récurrences de Bender-Wu. Nous déduisons alors, les spectres d'énergie des potentiels complexes et nous les comparons aux résultats calculés par les deux méthodes. Enfin, nous étudions aussi l'extension du formalisme à la physique statistique quantique [44,46].

Quant au troisième chapitre, il traite de la procédure de la resommation aux forts couplages des spectres d'énergie en termes de la constante de couplage g et de la notion du potentiel effectif. Nous prouvons son efficacité en :

- En déduisant les expressions des spectres d'énergie aux faibles couplages.
- Améliorant les résultats obtenus dans la section précédente en resommant la série d'énergie en terme de la constante (\hbar) des potentiels effectifs aux basses températures.

Dans le quatrième chapitre nous présentons la théorie des perturbations en termes des diagrammes de Feynman et le traitement perturbatif des potentiels (0.2) et (0.3). Ce développement est appliqué à une classe de potentiels complexes cubiques multidimensionnels, couplés aux oscillateurs harmoniques aux faibles couplages, ainsi qu'à la procédure de resommation du potentiel effectif aux forts couplages. Nous notons qu'il est impératif d'avoir les expressions de l'énergie aux faibles couplages dans le cas du traitement des potentiels multidimensionnels aux forts couplages.

Nous terminons ce mémoire par une conclusion générale résumant l'ensemble de nos résultats en relevant le bon accord des résultats obtenus par la méthode du potentiel effectif avec ceux trouvés par la théorie des perturbations

traités en termes des diagrammes de Feynman connectés, et la méthode des récurrences de Bender- Wu [29, 30].

CHAPITRE 1 INTEGRALES DE CHEMINS ET MECANIQUE QUANTIQUE *PT* SYMETRIQUE

1.1. Introduction

Un système quantique quelconque peut être décrit de deux façons différentes, mais souvent considérées comme complémentaires. La première méthode est la quantification canonique, dans laquelle les quantités classiques sont remplacées par des objets mathématiques appelés opérateurs qui agissent dans l'espace abstrait de Hilbert. L'autre méthode, qui sera détaillée dans ce chapitre, a été initiée par Paul A. M. Dirac [7] et développée par Richard. P. Feynman en 1948 et porte le nom d'*intégration fonctionnelle*.

[1-7]. Lorsqu'on applique cette dernière à un système composé d'une particule ou d'un nombre fini de particules, l'appellation d'*intégrale de chemins* sera plus appropriée. Cette méthode est intuitive, puisqu'elle permet la réintroduction de la notion de trajectoire.

1.2. Intégrale de chemins en mécanique quantique

Nous utiliserons la méthode d'intégration fonctionnelle à partir de la quantification canonique. L'hamiltonien d'une particule de masse M se déplaçant dans un potentiel $V(q)$ unidimensionnel et indépendant du temps est donné par :

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2M} + V(q), \quad (1.1)$$

Dans la représentation de Schrödinger, la fonction d'onde à l'instant initial est $\psi_a(q, t) \equiv \langle q, t | a \rangle$ et à l'instant t' la fonction d'onde devient $\psi_a(q', t') \equiv \langle q', t' | a \rangle$, l'état quantique $|a\rangle$ est unique et normalisé à l'unité

$$\langle a' | a \rangle = \delta(a' - a) \quad , \quad \int da |a\rangle \langle a| = 1. \quad (1.2)$$

L'opérateur d'évolution temporelle est donné par :

$$U(t) = \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right), \quad (1.3)$$

et ces éléments de matrice dans l'espace des configurations sont :

$$U(q', t'; q, t) = \langle q' | \exp\left(\frac{-iH(t' - t)}{\hbar}\right) | q \rangle. \quad (1.4)$$

Cet objet est appelé *propagateur*, il permet la propagation de la fonction d'onde de (q, t) en (q', t') et donne l'amplitude de probabilité pour que la particule soit observée au point q' au temps t' que nous noterons $K(q', t'; q, t)$.

Introduisons un temps intermédiaire t_1 tel que $t < t_1 < t'$,

$e^{-iH(t'-t)/\hbar} = e^{-iH(t'-t_1)/\hbar} e^{-iH t_1/\hbar}$, le propagateur devient

$$K(q', t'; q, t) = \langle q' | e^{-iH(t'-t_1)/\hbar} e^{-iH t_1/\hbar} | q \rangle, \quad (1.5)$$

et en insérant la relation de fermeture (1.2) écrite dans l'espace des configurations, on trouve :

$$\begin{aligned} K(q', t'; q, t) &= \langle q' | e^{-iH(t'-t_1)/\hbar} \int dq_1 | q_1 \rangle \langle q_1 | e^{-iH t_1/\hbar} | q \rangle \\ &= \int dq_1 K(q', t'; q_1, t_1) K(q_1, t_1; q, t). \end{aligned} \quad (1.6)$$

Cette expression n'est autre que la règle de combinaison des amplitudes en mécanique quantique qui annonce que *si un événement quantique se présente par différents chemins, alors les amplitudes correspondantes s'additionnent.*

En projetant $\psi_a(q', t')$ sur l'état initial $|q, t\rangle$, on obtient :

$$\begin{aligned} \psi_a(q', t') &= \int \langle q', t' | q, t \rangle dq \langle q, t | a \rangle \\ &= \int K(q', t'; q, t) \psi_a(q, t) dq. \end{aligned} \quad (1.7)$$

La connaissance du propagateur et de l'état initial est essentielle pour déterminer la fonction d'onde correspondante à un état quantique $|a\rangle$, c'est ce que la méthode des intégrales de chemins propose.

1.2.1. Conjecture de Feynman [6]

Décomposons le laps de temps fini $T = t' - t$ en N parties égales en posant $\varepsilon = t_{i+1} - t_i = \frac{T}{N}$, la forme du propagateur en (1.5) permet d'inclure autant d'états intermédiaires :

$$\begin{aligned}
 K(q', t'; q, t) &= \langle q' | (e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}})^N | q \rangle = \langle q' | e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} \dots e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} | q \rangle \\
 &= \langle q' | e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} \int dq_{N-1} | q_{N-1} \rangle \langle q_{N-1} | e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} \int dq_{N-2} | q_{N-2} \rangle \langle q_{N-2} | \dots \int dq_2 | q_2 \rangle \langle q_2 | \\
 &\quad \times e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} \int dq_1 | q_1 \rangle \langle q_1 | e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} | q \rangle \\
 &= \int dq_1 dq_2 \dots dq_{N-1} \langle q' | e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} | q_{N-1} \rangle \dots \langle q_2 | e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} | q_1 \rangle \langle q_1 | e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} | q \rangle \\
 &= \int dq_1 dq_2 \dots dq_{N-1} K_{q_N, q_{N-1}} K_{q_{N-1}, q_{N-2}} \dots K_{q_2, q_1} K_{q_1, q_0}, \tag{1.8}
 \end{aligned}$$

où nous avons posé : $q_0 = q$ et $q' = q_N$.

L'insertion des relations de fermeture entre les états initial et final génère toutes les trajectoires possibles, sur lesquelles on doit intégrer pour obtenir l'amplitude de transition ou le propagateur, comme il est illustré sur la figure 1.1.

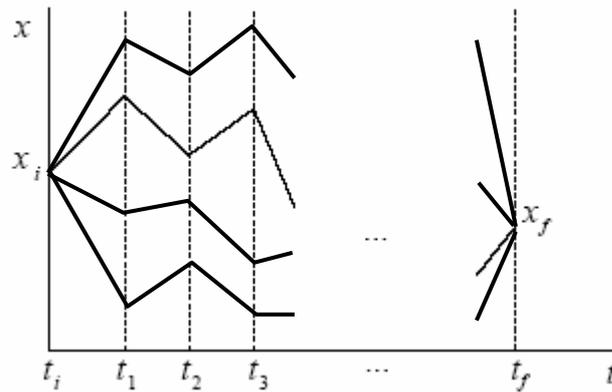


Figure 1.1 : Les différentes trajectoires possibles entre les états initial et final.

Hormis les limites quand $n \rightarrow \infty$ et $\varepsilon \rightarrow 0$, il est clair que l'amplitude de la fonction d'onde est la somme de toutes les amplitudes des trajectoires possibles

$$K(q', t'; q, t) = \sum_{\text{Traj}} K(q_{i+1}, t_{i+1}; q_i, t_i), \quad (1.9)$$

avec :

$$\sum_{\text{Traj}} \equiv \int dq_1 dq_2 \dots dq_{N-1} \quad \text{et} \quad K_{\text{Traj}} = K_{q_N, q_{N-1}} K_{q_{N-1}, q_{N-2}} \dots K_{q_2, q_1} K_{q_1, q_0}. \quad (1.10)$$

Intéressons-nous à la dernière relation (1.10). Commençons par calculer le propagateur K_{q_{i+1}, q_i} pour un temps infinitésimal : $\varepsilon = t_{i+1} - t_i$, les calculs étant faits au premier ordre en ε , le propagateur s'écrit :

$$K_{q_{i+1}, q_i} \equiv \langle q_{i+1} | e^{-\frac{iH\varepsilon}{\hbar}} | q_i \rangle \approx \langle q_{i+1} | q_i \rangle - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \langle q_{i+1} | H | q_i \rangle + o(\varepsilon^2). \quad (1.11)$$

Le premier terme représente la fonction delta de Dirac

$$\langle q_{i+1} | q_i \rangle = \delta(q_{i+1} - q_i) = \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{ip_i}{\hbar}(q_{i+1} - q_i)\right), \quad (1.12)$$

et en insérant la relation de fermeture dans le deuxième terme sous forme d'une intégrale sur les états propres des moments, nous obtenons :

$$\begin{aligned} -i\varepsilon \langle q_{i+1} | \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}) \right) \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} |p_i\rangle \langle p_i| q_i \rangle &= -i\varepsilon \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \left(\frac{p_i^2}{2m} + V(q_{i+1}) \right) \langle q_{i+1} | p_i \rangle \langle p_i | q_i \rangle \\ &= -i\varepsilon \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \left(\frac{p_i^2}{2m} + V(q_{i+1}) \right) \exp\left(\frac{ip_i}{\hbar}(q_{i+1} - q_i)\right). \end{aligned} \quad (1.13)$$

En introduisant la nouvelle variable $\bar{q}_i = \frac{1}{2}(q_{i+1} + q_i)$ dans la représentation du point milieu (*M.P.P*) « *Mid point prescription* » [3-5] et en combinant (1.11) à (1.13), nous obtenons :

$$\begin{aligned} K_{q_{i+1}, q_i} &= \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} e^{\frac{ip_i}{\hbar}(q_{i+1}-q_i)} \left[1 - i\varepsilon \left(\frac{p_i^2}{2m} + V(\bar{q}_{i+1}) \right) + o(\varepsilon^2) \right] \\ &\approx \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} e^{\frac{ip_i}{\hbar}(q_{i+1}-q_i)} \exp\left[-\frac{i\varepsilon H(p_i, \bar{q}_i)}{\hbar} \right]. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Ainsi, la seconde expression dans (1.10) devient :

$$K_{\text{Traj}} = \int \prod_{i=0}^{N-1} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} (p_i \dot{q}_i - H(p_i, \bar{q}_i)) \right]. \quad (1.15)$$

Dans l'espace des phases, le propagateur est donné par :

$$K = \int dq_1 dq_2 \dots dq_{N-1} K_{Traj} \\ = \int \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \int \prod_{i=0}^{N-1} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \exp \left[i\varepsilon \sum_{i=0}^{N-1} (p_i \dot{q}_i - H(p_i, \bar{q}_i)) \right]. \quad (1.16)$$

En explicitant le terme cinétique $\frac{p_i^2}{2m}$ et le terme potentiel $V(\bar{q}_i)$ du hamiltonien, l'intégration en dp_i conduit au propagateur d'une particule libre, donné par :

$$\int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \exp \left[i\varepsilon \left(p_i \dot{q}_i - \frac{p_i^2}{2m} \right) \right] = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}} e^{\frac{i m \varepsilon}{2\hbar} \dot{q}_i^2}, \quad (1.17)$$

et le terme restant correspond au Lagrangien classique discrétisé. La substitution de la somme discrète par une intégrale dans le temps t fait ensuite apparaître l'action $S[q(t)]$ dans l'espace des configurations :

$$K = \int \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \exp \left[-i\varepsilon \sum_{i=0}^{N-1} V(\bar{q}_i) \right] \prod_{i=0}^{N-1} \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}} e^{\frac{i m \varepsilon}{2\hbar} \dot{q}_i^2} \right) \\ = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon} \right)^{N/2} \int \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \exp \left[i\varepsilon \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{m \dot{q}_i^2}{2} - V(\bar{q}_i) \right) \right]. \quad (1.18)$$

Introduisons l'élément différentiel formel suivant :

$$\prod_{i=0}^N \frac{dq_i}{A_i} = Dq, \quad (1.19)$$

où A_i est un coefficient à déterminer, cela conduit à écrire le propagateur sous une forme plus compacte

$$K(q', t'; q, t) = \int_{(q,t)}^{(q',t')} Dq(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int dt L(q, \dot{q}) \right\} = \int_{(q,t)}^{(q',t')} Dq(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[q(t)] \right\}. \quad (1.20)$$

Chaque trajectoire allant de q à q' dans un temps $T = t' - t$ contribue à l'amplitude $K(q', t'; q, t)$ avec un poids égal à l'exponentielle complexe de son action.

On reconnaît dans l'intégrale le lagrangien de la mécanique classique, mais l'intégrale précédente $\int_{(q,t)}^{(q',t')}$ concerne des opérateurs agissant sur une fonction d'onde en (q,t) pour la transporter en (q',t') . La conjecture de Feynman [6] consiste à introduire dans l'intégrale, le lagrangien classique et d'identifier le coefficient A_i au coefficient du propagateur d'une particule libre (1.17).

Signalons enfin, que dans la base des fonctions propres de l'hamiltonien, le propagateur à une forme particulièrement simple

$$\begin{aligned} K(q',t';q,t) &= \langle q' | e^{-\frac{iH(t'-t)}{\hbar}} | q \rangle = \sum_n \langle q' | e^{-\frac{iH(t'-t)}{\hbar}} | n \rangle \langle n | q \rangle \\ &= \sum_n \psi_n(q') \psi_n^*(q) e^{-\frac{iE_n(t'-t)}{\hbar}}. \end{aligned} \quad (1.21)$$

On peut donc extraire les niveaux d'énergies E_n et les fonctions propres $\psi_n(q)$ de l'hamiltonien en connaissant exactement le propagateur et ceci à une phase arbitraire près.

1.3. Mécanique statistique et intégrales de chemins

La mécanique statistique s'intéresse aux propriétés moyennes d'un système prises sur un ensemble d'états. D'après Gibbs [18-20], l'ensemble canonique est formé d'un grand nombre de systèmes identiques au système considéré. Chacun d'eux est en contact avec un environnement dont la température est T , et est caractérisé par la distribution de Boltzmann : *La probabilité de trouver dans l'ensemble un état propre de l'hamiltonien avec l'énergie E est proportionnelle à $e^{-\beta E}$, où $\beta = 1/k_B T$ est l'inverse de la température absolue, k_B étant la constante de Boltzmann.*

Généralement on peut considérer que la température du système est bien déterminée mais que son énergie fluctue autour d'une moyenne statistique $\langle E \rangle$ du fait de l'échange constant d'énergie entre le système et l'environnement [18, 19]. 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

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | \hat{O} | n \rangle e^{-\beta E_n}, \quad (1.22)$$

où E_n est l'énergie propre de l'état $|n\rangle$ et

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}, \quad (1.23)$$

est appelée fonction de partition du système.

L'opérateur densité $\rho(q, q')$ joue un rôle important en mécanique statistique, il suffit simplement de le caractériser, puisqu'il permet le calcul de toutes les valeurs moyennes et que, une fois défini, on peut oublier les états $|n\rangle$ dont on est parti [8]. Il est défini en introduisant la relation de fermeture $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$

par :

$$\rho = e^{-\beta E} = \sum_n |n\rangle\langle n| e^{-\beta E_n}. \quad (1.24)$$

Son équation dynamique, analogue à l'équation de Liouville, permet de déterminer l'opérateur ρ à un instant t' s'il est connu à un instant antérieur t , elle est donnée par :

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]_-. \quad (1.25)$$

La moyenne statistique d'une observable \hat{O} peut s'exprimer en fonction de l'opérateur densité ρ et la fonction de partition Z comme suit :

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \langle \hat{\rho} \hat{O} \rangle. \quad (1.26)$$

1.3.1. Mécanique statistique par les intégrales de chemins

Le propagateur dans la représentation de Schrödinger s'adapte au noyau (*kernel*) de l'opérateur densité dans la même représentation par la substitution :

$T \rightarrow -i\tau$ ¹, avec $\tau = \hbar\beta$ et par conséquent, nous fait passer de l'opérateur d'évolution à l'opérateur densité [3, 20].

Cette substitution, appelée *rotation de Wick*, est schématisée ci-dessous sur la Figure 1.2. Il est clair que τ est une variable réelle, $\tau \in [0, \beta]$. L'utilisation de la rotation de Wick est vue comme le moyen théorique pour exploiter la similitude avec les intégrales de chemins.

Rappelons la définition du propagateur :

$$K(q', T; q, 0) = \langle q' | \exp\left[-\frac{iHT}{\hbar}\right] | q \rangle. \quad (1.27)$$

La rotation de Wick nous conduit à écrire le propagateur comme suit

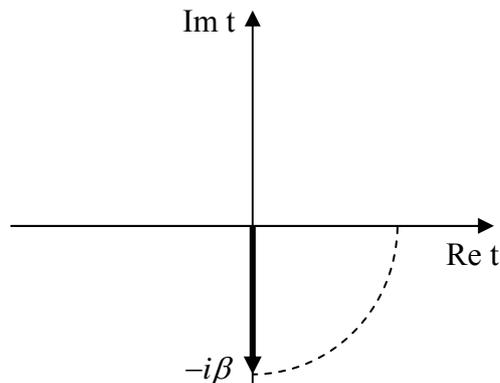
$$\begin{aligned} K(q', -i\hbar\beta; q, 0) &= \langle q' | e^{-\frac{iH(-i\hbar\beta)}{\hbar}} | q \rangle \\ &= \langle q' | e^{-\beta H} \sum_n | n \rangle \langle n | q \rangle \\ &= \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | q \rangle \langle q' | n \rangle. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Posons $q' = q$ et intégrons sur l'espace des configurations

$$\begin{aligned} \int dq K(q, -i\hbar\beta; q, 0) &= \int dq \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | q \rangle \langle q | n \rangle \\ &= \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \int dq | q \rangle \langle q | n \rangle \\ &= \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | n \rangle. \end{aligned} \quad (1.29)$$

On déduit que l'évaluation du propagateur dans *des temps imaginaires et négatifs* est équivalente au noyau de *l'opérateur densité*

$$K(q', -i\hbar\beta; q, 0) \equiv \rho(q', q) = \langle q' | e^{-\beta H} | q \rangle. \quad (1.30)$$



¹ T représente la différence entre les instants initial et final, à ne pas confondre avec la température.

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

Il est tout à fait possible de réécrire la fonction de partition en termes d'intégrales de chemins, l'action devient :

$$S = i \int d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 + V[q(\tau)] \right] = i S_{Euc}, \quad (1.31)$$

où S_{Euc} est appelée l'action euclidienne du fait que l'espace-temps, après la rotation de Wick, possède une métrique euclidienne.

Le noyau de l'opérateur densité devient par conséquent :

$$\begin{aligned} \rho(q) &= \int Dq(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} dt \left(\frac{m}{2} \dot{q}^2 - V[q(t)] \right) \right] \\ &= \int Dq(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 + V[q(\tau)] \right) \right] \\ &= \int Dq(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S_{Euc} [q(\tau)] \right]. \end{aligned} \quad (1.32)$$

La fonction de partition s'exprime donc par [3, 46] :

$$Z = \int dq \rho(q, q). \quad (1.33)$$

Ce résultat, souvent appelé *l'intégrale du chemin euclidien*, est défini en attribuant à chaque trajectoire une amplitude (un poids statistique) $e^{-\frac{S_{Euc}}{\hbar}}$; il est obtenu à partir de l'action ordinaire de Minkowski en changeant le signe du terme de l'énergie potentielle.

1.4. La mécanique quantique PT -symétrique

1.4.1. Introduction

En mécanique quantique, l'opérateur hamiltonien H joue un rôle fondamental; il spécifie d'une part le spectre des niveaux d'énergies, d'autre part, l'évolution temporelle du système étudié. Pour assurer la réalité du premier, ainsi

que l'unitarité de la seconde, la mécanique quantique s'est construite sur l'axiome selon lequel H , comme toute observable physique de la théorie, est hermitique. Cependant, il existe des classes d'hamiltoniens non hermitique, mais dont le spectre est entièrement réel. Ces hamiltoniens vérifient la condition d'être invariants sous les transformations combinées de réflexion et renversement du temps T , c'est-à-dire qu'ils commutent avec le produit PT . Cette condition a ouvert la voie à de nombreux travaux de recherche sur le sujet. Initiée principalement par Bender et Boettcher [9-11] qui ont étudié des Hamiltoniens de la forme : $H = p^2 + x^2(ix)^\lambda$ (λ est réel), ils ont montré que le spectre de ce type d'Hamiltoniens est réel et positif uniquement pour $\lambda \geq 0$, et qu'une transition de phase survient en $\lambda = 0$, aussi bien au niveau classique que quantique, au cours de laquelle le système passe d'une phase de symétrie PT non brisée ($\lambda \geq 0$) à la phase de symétrie PT spontanément brisée ($\lambda < 0$), correspondant à un basculement du spectre de H dans le domaine complexe [12-16]. La tentative de la construction d'une théorie quantique viable à partir de tels hamiltoniens se heurte à la *non positivité* du produit scalaire défini à partir de l'opérateur PT . Cependant, il apparaît que pour un système dont la symétrie PT est non brisée, il existe une symétrie du hamiltonien décrite par l'opérateur noté C [17], équivalent à la conjugaison de charge dans la théorie quantique des champs. Celui-ci permet de construire, via le produit CPT , un nouveau produit scalaire défini positif pour lequel les normes des états sont positives et l'évolution temporelle est unitaire. Un intense travail de recherche a mobilisé, ces dernières années, les physiciens, motivés par l'évidence et la pertinence phénoménologique des hamiltoniens PT symétriques. De tels hamiltoniens apparaissent en physique statistique, biologie des populations [21] et en physique de l'état solide [22]. Ils présentent également un grand intérêt dans le domaine de la théorie quantique des champs et des théories dites super symétriques [23].

1.4.2. Hamiltoniens non hermétique PT -symétriques

Nous nous bornerons dans un premier temps à l'étude des hamiltoniens construits comme déformations complexes de l'oscillateur harmonique :

$$H = p^2 + x^2(ix)^\lambda, (\lambda \text{ est réel}). \quad (1.34)$$

Cette famille d'hamiltoniens a été étudiée en détail par Bender et ses collaborateurs [24, 25]. Ces hamiltoniens ne sont pas hermitiens au sens conventionnel du terme, en revanche ils sont invariants sous la symétrie PT , c'est-à-dire qu'ils commutent avec le produit des opérateurs P (parité) et T (renversement du temps), définis par leurs actions sur les opérateurs position et impulsion :

$$\begin{aligned} P: \quad x &\rightarrow -x & , & & p &\rightarrow -p \\ T: \quad x &\rightarrow x & , & & p &\rightarrow -p & , & & i &\rightarrow -i. \end{aligned} \quad (1.35)$$

Si les opérateurs x et p sont réels, la relation de commutation $[x, p] = i$ est invariante simultanément sous la réflexion de parité et renversement du temps, vérifiant ainsi l'invariance de l'algèbre d'Heisenberg-Weyl. En terme de parties réelle et imaginaire des opérateurs x et p , $x = \text{Re } x + i \text{Im } x$ et $p = \text{Re } p + i \text{Im } p$, nous avons :

$$\begin{aligned} P: \quad \text{Re } x &\rightarrow -\text{Re } x & , & & \text{Im } x &\rightarrow -\text{Im } x \\ & \text{Re } p &\rightarrow -\text{Re } p & , & \text{Im } p &\rightarrow -\text{Im } p \\ T: \quad \text{Re } x &\rightarrow \text{Re } x & , & & \text{Im } x &\rightarrow -\text{Im } x \\ & \text{Re } p &\rightarrow -\text{Re } p & , & \text{Im } p &\rightarrow \text{Im } p. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Le spectre d'énergie de cette classe d'hamiltoniens est obtenu en résolvant l'équation aux valeurs propres associées :

$$-\psi'' + \left(x^2(ix)^\lambda - E\right)\psi = 0. \quad (1.37)$$

Cette équation doit être résolue, pour λ réel arbitraire, le long d'un contour infini \mathbf{C} dans le plan complexe, aux bornes duquel doivent être satisfaites les conditions aux limites suivantes : $\psi(x) \rightarrow 0$ *exponentiellement* lorsque $|x| \rightarrow \infty$. Ces bornes appartiennent à des régions appelées les bords de Stocks (*Stocks wedges*). Ces bords sont bornés par des lignes le long desquelles l'équation différentielle (1.37) oscille. Pour $\lambda > -1$, les bords gauches (L) et droite (R) sont localisés à des angles :

$$\theta_L = -\pi + \frac{\lambda \pi}{2(\lambda + 4)} \quad , \quad \theta_R = -\frac{\lambda \pi}{2(\lambda + 4)}, \quad (1.38)$$

et dont la différence est donnée par :

$$\Delta_\theta = \theta_L - \theta_R = -\frac{4\pi}{\lambda + 4}. \quad (1.39)$$

La figure 3.1 montre les coins dans le plan complexe contenant le contour sur lequel est intégrée l'équation différentielle (1.37) pour la valeur $\lambda = 2.2$.

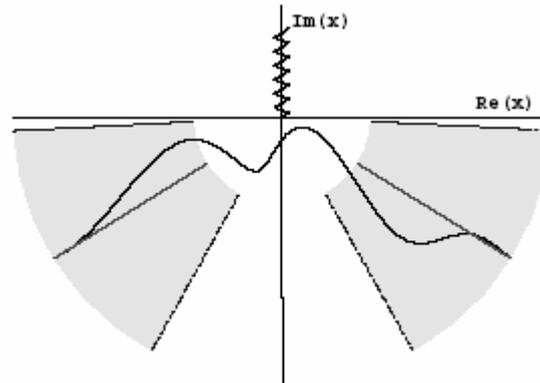


Figure 3.1 : Le contour sur lequel est intégrée l'équation différentielle (1.37) dans le plan complexe, pour $|x| \rightarrow \infty$, d'après [10, 17].

1.4.3. Niveaux d'énergie du hamiltonien (1.34).

La figure 3.2 ci dessous montre le spectre de l'hamiltonien (1.34) exhibant trois comportements différents, en fonction du paramètre λ :

- $\lambda \geq 0$: Le spectre est infini, discret, entièrement réel et positif, pour $\lambda = 0$ on retrouve les niveaux d'énergie équidistants de l'oscillateur harmonique (la ligne en pointillée à droite).
- $-1 < \lambda < 0$: Le spectre ne présente plus qu'un nombre fini de valeurs propres réelles positives, mais un nombre infini de paires de valeurs propres complexes. Lorsque λ décroît de 0 à -1 , les niveaux d'énergie passent deux par deux dans le domaine complexe en s'associant en paires de nombre complexes conjugués, en commençant par les niveaux les plus élevés. La seule valeur propre restante en dessous de $\lambda = -0.57793$ augmente lorsque λ décroît, pour finalement diverger lorsque $\lambda \rightarrow -1^+$ (la ligne en pointillée à gauche).
- $\lambda < -1$: Le spectre ne comporte plus de valeurs propres réelles.

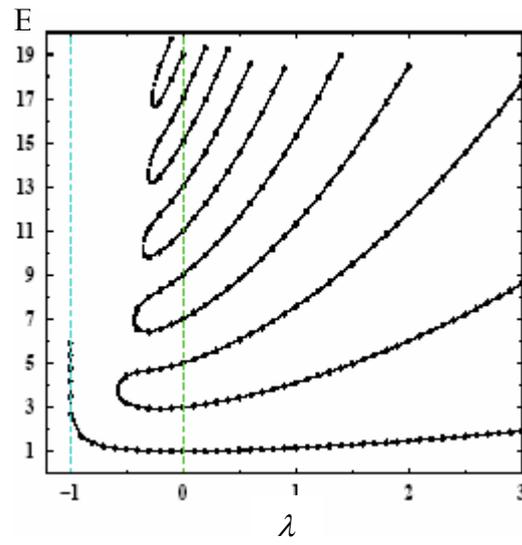


Figure 3.2 : Niveaux d'énergie du hamiltonien (1.34) en fonction du paramètre réel λ , d'après [10].

CHAPITRE 2 ACTION ET POTENTIEL EFFECTIFS

Ce chapitre est consacré à la représentation de l'action effective au moyen des intégrales de chemins, cette dernière permet de déduire les propriétés statistiques d'un système en physique statistique quantique [24, 31, 32].

2.1 Rotation de Wick :

Pour un hamiltonien \hat{H} indépendant du temps, l'opérateur d'évolution est donné par :

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \exp\left[\frac{-i\hat{H}(t_b - t_a)}{\hbar}\right], \quad (2.1)$$

et ses éléments de matrice dans les états des bases localisées sont donnés par:

$$\langle x_b t_b | x_a t_a \rangle = \langle x_b | \hat{U}(t_b, t_a) | x_a \rangle, \quad t_b > t_a. \quad (2.2)$$

Dans le formalisme des intégrales de chemins, les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution peuvent être obtenus en sommant sur tous les chemins possibles dans l'espace des configurations avec un facteur de phase contenant une action notée $A[x]$ [24]:

$$\langle x_b t_b | x_a t_a \rangle = \int_{x_a}^{x_b} Dx \exp\left\{\frac{i A[x]}{\hbar}\right\}. \quad (2.3)$$

Pour une particule de masse M , se déplaçant dans un potentiel unidimensionnel $V(x)$, l'action est donnée par:

$$A[x] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{M\dot{x}^2(\tau)}{2} - V(x(t)) \right]. \quad (2.4)$$

Un système physique dans un état d'équilibre thermique en mécanique statistique est décrit par l'opérateur de densité :

$$\hat{\rho}(\beta) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta \hat{H}), \quad (2.5)$$

où Z est appelée fonction de partition et est donnée par :

$$Z = \text{tr}(\exp(-\beta \hat{H})), \quad (2.6)$$

où $\beta = 1/k_B T$ est le facteur de Boltzmann. La fonction de partition permet la détermination de toutes les quantités thermodynamiques. L'espace des configurations ayant pour base locale $|x\rangle$, dans cette base, la fonction de partition est donnée par :

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x | \exp(-\beta \hat{H}) | x \rangle. \quad (2.7)$$

On remarque que les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution du temps $\langle x_b t_b | x_a t_a \rangle$ peuvent être liés à ceux de l'opérateur de densité (2.5) selon la substitution :

$$t_b - t_a \rightarrow -i\hbar\beta, \quad (2.8)$$

En posant les conditions aux limites :

$$t_a = 0, \quad t_b = -i\beta\hbar, \quad (2.9)$$

et en effectuant la rotation de Wick dans les temps imaginaires [33],

$$t \rightarrow -i\tau, \quad (2.10)$$

on obtient la formule donnant l'expression de la matrice densité :

$$\rho(x_b, x_a, \beta) = \frac{1}{Z} \langle x_b | \exp(-\beta \hat{H}) | x_a \rangle = \frac{1}{Z} \int_{x_a}^{x_b} D x \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2(-i\tau) + V(x(-i\tau)) \right]\right). \quad (2.11)$$

où $x_a = x(0)$ et $x_b = x(-i\hbar\beta)$.

En dérivant l'expression (2.10) par rapport au temps imaginaire τ , on obtient l'identité suivante :

$$\frac{d}{dt} = \frac{d\tau}{dt} \frac{d}{d\tau} = i \frac{d}{d\tau}, \quad (2.12)$$

où $\tau \in [0, \hbar\beta]$. De l'expression (2.3) et en utilisant (2.10), on obtient l'expression du propagateur dans le temps imaginaire donnée par :

$$\langle x_b \hbar\beta | x_a 0 \rangle = \int_{x(0)}^{x(\hbar\beta)} D x \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} A[x]\right\}, \quad (2.13)$$

où l'action du temps imaginaire est définie par :

$$A[x] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2(\tau) + V(x(\tau)) \right]. \quad (2.14)$$

La fonction de partition Z est exprimée dans l'intervalle du temps imaginaire par :

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{x(0)}^{x(\hbar\beta)} D x \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} A[x] \right\} = \oint D x \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} A[x] \right\}. \quad (2.15)$$

2.2. L'action effective :

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

$$A[x, j] = A[x] - \int_0^{\hbar\beta} d\tau j(\tau)x(\tau). \quad (2.16)$$

Nous considérons la fonction génératrice suivante :

$$Z[j] = \oint D x \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} A[x, j] \right\}, \quad (2.17)$$

où l'intégration est effectuée sur tous les chemins périodiques $x(0) = x(\hbar\beta)$.

Pour $j \equiv 0$, la fonction génératrice de l'équation (2.17) est celle donnée par (2.15) est réduite à:

$$Z[j] \Big|_{j=0} \equiv Z. \quad (2.18)$$

Ainsi, l'énergie libre $F = -\frac{1}{\beta} \ln Z$ est une fonction dépendante du courant externe $j(\tau)$:

$$F[j] = -\frac{1}{\beta} \ln Z[j]. \quad (2.19)$$

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

$$X(\tau) = X[j](\tau) = \langle x(\tau) \rangle [j] = \frac{1}{Z[j]} \oint D x x(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} A[x, j] \right]. \quad (2.20)$$

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

$$\frac{\delta F[j]}{\delta j(\tau)} = -\frac{1}{\hbar\beta} X(\tau). \quad (2.21)$$

Cette identité est obtenue en remplaçant le chemin $x(\tau)$ dans le membre de droite de l'équation (2.20), par la première dérivée par rapport au courant externe multiplié par la constante réduite de Planck \hbar :

$$x(\tau) \rightarrow \hbar \frac{\delta}{\delta j(\tau)}, \quad (2.22)$$

par l'inversion de (2.21), on déduit l'expression du courant externe en fonction du chemin moyen $X(\tau)$:

$$j(\tau) = j[X](\tau). \quad (2.23)$$

Les équations (2.16) et (2.21) servent à définir la transformation de Legendre correspondante à l'énergie libre $F[j(\tau)]$:

$$\Gamma[X(\tau)] = \hbar\beta F[j[X]] + \int_0^{\hbar\beta} d\tau j[X](\tau)X(\tau). \quad (2.24)$$

où la fonction $\Gamma[X(\tau)]$ s'appelle l'action effective,

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

$$\frac{\delta \Gamma[X]}{\delta X(\tau)} = \hbar\beta \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \frac{\delta F[j[X]]}{\delta j[X](\tau')} \frac{\delta j[X](\tau')}{\delta X(\tau')} + \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \frac{\delta j[X](\tau')}{\delta X(\tau')} X(\tau') + j[X](\tau'). \quad (2.25)$$

Ainsi, de l'équation (2.21), on obtient un courant externe:

$$\frac{\delta \Gamma[X(\tau)]}{\delta X(\tau)} = j[X](\tau). \quad (2.26)$$

Dans le cas d'un courant nul, $X(\tau)$ est donné par :

$$X_e(\tau) = X[j] \Big|_{j=0}(\tau). \quad (2.27)$$

D'après (2.26) et (2.27), la minimisation de l'action effective est donnée par:

$$\left. \frac{\delta \Gamma[X]}{\delta X(\tau)} \right|_{X(\tau)=X_e(\tau)} \equiv 0. \quad (2.28)$$

L'énergie libre obtenue par la minimisation de l'action effective, pour $[j \equiv 0]$, est donnée par:

$$F[0] = \frac{1}{\hbar\beta} \Gamma[X_e]. \quad (2.29)$$

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

2.3 Potentiel effectif:

On suppose que le courant externe $j(\tau)$ est indépendant du temps imaginaire τ , $j(\tau) = j$, l'action donnée par (2.16) sera exprimée par :

$$A[x](j) = A[x] - j \int_0^{\hbar\beta} d\tau x(\tau) = A[x, j] \Big|_{j(\tau)=j}. \quad (2.30)$$

Considérons la fonction génératrice suivante :

$$Z[j] = \oint D x \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} A[x](j) \right\} = Z[j] \Big|_{j(\tau)=j}. \quad (2.31)$$

Pour un courant nul, la fonction de partition (2.15) est donnée par :

$$Z[j] \Big|_{j=0} \equiv Z, \quad (2.32)$$

et l'énergie libre correspondante $F[j] \Big|_{j(\tau)=j}$ est :

$$F(j) = F[j] = -\frac{1}{\beta} \ln Z[j]. \quad (2.33)$$

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

$$\frac{\partial F(j)}{\partial j} = -\frac{1}{\hbar\beta Z(j)} \oint D x \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} A[x](j) \right\} \int_0^{\hbar\beta} d\tau x(\tau) = -X. \quad (2.34)$$

Le chemin moyen (2.20) est indépendant du temps imaginaire τ . Par ce que les intégrales dans l'équation (2.34) sont interchangeable, il est donc évident que les intégrales dans les temps imaginaires τ donnent le facteur $\hbar\beta$. Selon (2.23) :

$$j = j(X), \quad (2.35)$$

l'équation (2.34) mène aux transformations de Legendre de $F[j]$ par une quantité donnée par:

$$V_{eff}(X) = F(j(X)) + j(X)X. \quad (2.36)$$

Cette dernière est appelée potentiel effectif. En comparant (2.36) avec (2.24) et en omettant le facteur $\frac{1}{\hbar\beta}$, on aboutit à l'expression liant l'action effective à celle du potentiel effectif :

$$V_{eff}(X) = \frac{1}{\hbar\beta} \Gamma[X] \Big|_{x(\tau)=X}. \quad (2.37)$$

En effectuant la dérivée première sur (2.36) par rapport à X , on obtient l'expression du courant externe:

$$\frac{\partial V_{eff}(X)}{\partial X} = \frac{\partial F(j(X))}{\partial j(X)} \frac{\partial j(X)}{\partial X} + \frac{\partial j(X)}{\partial X} X + j(X) = j(X). \quad (2.38)$$

L'énergie libre F dans le cas d'un courant nul, $j \equiv 0$, est déterminée par la minimisation du potentiel effectif par rapport à X_e selon (2.38) :

$$F = V_{eff}(X_e), \quad (2.39)$$

où X_e est déterminé par la condition suivante :

$$\left. \frac{\partial V_{eff}(X)}{\partial X} \right|_{x=X_e} = 0. \quad (2.40)$$

L'énergie libre $F = E - TS$ est l'énergie de l'état fondamental aux basses températures $T \rightarrow 0$, cette dernière étant, donc, la limite du potentiel effectif aux basses températures:

$$E_0 = \lim_{T \rightarrow 0} V_{eff}(X_e). \quad (2.41)$$

2.4 Exemple : Oscillateur Harmonique

Nous considérons l'action du temps imaginaire d'un oscillateur harmonique :

$$A_\omega[x] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2(\tau) + \frac{M}{2} \omega^2 x^2(\tau) \right]. \quad (2.42)$$

où la fonction génératrice est donnée par :

$$Z_\omega[j] = \oint Dx \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} A_\omega[x, j]\right\}. \quad (2.43)$$

La quantité $A_\omega[x, j]$ est définie dans l'équation (2.16). En insérant (2.42) dans (2.43), on trouve :

$$Z_\omega[j] = \oint Dx \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \frac{1}{2} x(\tau_1) G_\omega^{-1}(\tau_1, \tau_2) x(\tau_2) - j(\tau_1) x(\tau_2) \right]\right\}, \quad (2.44)$$

où $G_\omega(\tau_1, \tau_2)$ est la fonction de Green, et son inverse est donnée par:

$$G_\omega^{-1}(\tau_1, \tau_2) = \frac{\delta^2 A_\omega[x]}{\delta x(\tau_1) \delta x(\tau_2)} = M \left(-\frac{d^2}{d\tau_1^2} + \omega^2 \right) \delta(\tau_1 - \tau_2). \quad (2.45)$$

L'intégrale du chemin (2.44) est intégrée sur des chemins finis et périodiques dans les temps imaginaire τ . Ainsi, les conditions aux limites sont données par :

$$x(0) = x(\hbar\beta) \quad \text{et} \quad \dot{x}(0) = \dot{x}(\hbar\beta). \quad (2.46)$$

Dans [13], la fonction génératrice (2.44) est donnée sous la forme :

$$Z_\omega[j] = Z_\omega \exp\left\{\frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 G_\omega(\tau_1, \tau_2) j(\tau_1) j(\tau_2)\right\}. \quad (2.47)$$

La fonction de partition Z_ω de l'oscillateur harmonique est :

$$Z_\omega = \frac{1}{2 \sinh(\hbar\beta\omega/2)}. \quad (2.48)$$

La relation liant le propagateur $G_\omega(\tau_1, \tau_2)$ à son inversé $G_\omega^{-1}(\tau_1, \tau_2)$ s'exprime par:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau G_\omega(\tau_1, \tau) G_\omega^{-1}(\tau, \tau_2) \equiv \hbar \delta(\tau_1 - \tau_2). \quad (2.49)$$

Le propagateur $G_\omega(\tau_1, \tau_2)$ est exprimé, explicitement, sous la forme [13] :

$$G_\omega(\tau_1, \tau_2) = \frac{\hbar}{2M\omega} \frac{\cosh(\omega|\tau_1 - \tau_2| - \hbar\beta/2)}{\sinh(\hbar\beta\omega/2)}. \quad (2.50)$$

Aux basses températures, $T \rightarrow 0$, la fonction de Green se réduit à :

$$\lim_{T \rightarrow 0} G(\tau_1, \tau_2) = \frac{\hbar}{2M\omega} \exp(-\omega|\tau_1 - \tau_2|). \quad (2.51)$$

Notons que le propagateur (2.50) est symétrique par rapport à deux arguments temporels:

$$G_\omega(\tau_1, \tau_2) = G_\omega(\tau_2, \tau_1). \quad (2.52)$$

En utilisant le résultat (2.33), l'énergie libre de l'oscillateur harmonique dans le cas d'un courant externe $j(\tau)$ est exprimée par:

$$F_\omega[j] = -\frac{1}{\beta} \ln Z_\omega - \frac{1}{2} \frac{1}{\hbar^2 \beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 G_\omega(\tau_1, \tau_2) j(\tau_1) j(\tau_2). \quad (2.53)$$

En décrivant (2.53) par rapport au courant externe $j(\tau)$, en tenant compte de l'identité (2.52), l'expression du chemin moyen est obtenue par identification avec (2.21), elle est exprimée par :

$$X_\omega[j](\tau) = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' G_\omega(\tau, \tau') j(\tau'). \quad (2.54)$$

À partir des identités (2.49) et (2.54), on obtient l'expression du courant $j(\tau)$ en fonction du chemin moyen $X_\omega(\tau)$:

$$j[X_\omega](\tau) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau' G_\omega^{-1}(\tau, \tau') X_\omega(\tau'). \quad (2.55)$$

L'action effective correspondante à l'oscillateur harmonique est déduite par l'utilisation des équation (2.53) et (2.55) ainsi, en tenant compte de (2.49), elle est donnée par :

$$\Gamma[X_\omega] = -\hbar \ln Z_\omega + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 X_\omega(\tau_1) G^{-1}(\tau_1, \tau_2) X_\omega(\tau_2). \quad (2.56)$$

En substituant la définition (2.45) dans (2.56), l'action effective est écrite sous la forme :

$$\Gamma[X_\omega] = -\hbar \ln Z_\omega + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[-\frac{M}{2} X_\omega(\tau) \frac{d^2}{d\tau^2} X_\omega(\tau) + \frac{M}{2} \omega^2 X_\omega^2(\tau) \right]. \quad (2.57)$$

En procédant par une intégration par partie du premier terme dans l'intégrale (2.57) en tenant compte de la périodicité des chemins moyens ainsi que de leurs dérivées premières :

$$X_\omega(0) = X_\omega(\hbar\beta) \quad \text{et} \quad \dot{X}_\omega(0) = \dot{X}_\omega(\hbar\beta), \quad (2.58)$$

l'action effective est exprimée par :

$$\Gamma_\omega[X_\omega] = -\hbar \ln Z_\omega + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{X}_\omega^2(\tau) + \frac{M}{2} \omega^2 X_\omega^2(\tau) \right]. \quad (2.59)$$

En extrémisant l'action effective par rapport à $X_\omega(\tau)$, l'équation du mouvement classique pour l'oscillateur harmonique dans les temps imaginaires est :

$$\begin{aligned} \left. \frac{\delta \Gamma_\omega[X_\omega]}{\delta X_\omega(\tau)} \right|_{X_\omega(\tau) = X_{\omega,e}(\tau)} &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \left[M \dot{X}_\omega(\tau') \frac{d}{d\tau'} \delta(\tau - \tau') + M \omega^2 X_\omega(\tau') \delta(\tau - \tau') \right] \Big|_{X_\omega(\tau) = X_{\omega,e}(\tau)} \\ &= M \left[-\ddot{X}_{\omega,e}(\tau) + \omega^2 X_{\omega,e}(\tau) \right] = 0. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Le potentiel effectif correspondant à l'oscillateur harmonique est obtenu via l'identité (2.37) :

$$V_{\text{eff}}(X_\omega) = \frac{M}{2} \omega^2 X_\omega^2 + \frac{1}{\beta} \ln[2 \sinh(\hbar\beta\omega/2)]. \quad (2.61)$$

Notons que ce dernier est la somme de deux termes ; le premier étant celui du potentiel harmonique classique, le second est l'énergie libre de l'oscillateur harmonique obtenue de (2.48) aux basses températures, ainsi, le potentiel effectif est exprimé par :

$$\lim_{T \rightarrow 0} V_{\text{eff}}(X_\omega) = \frac{M}{2} \omega^2 X_\omega^2 + \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (2.62)$$

Il est essentiel de remarquer que l'énergie libre est égale à l'énergie de l'état fondamental obtenu par la mécanique quantique (standard).

La fonction de partition de l'oscillateur harmonique est exprimée en utilisant l'expression (2.47), elle est donnée par :

$$Z_\omega(j) = \frac{1}{2 \sinh(\hbar\beta\omega/2)} \exp \left[\frac{j^2}{4M\hbar\omega \sinh(\hbar\beta\omega/2)} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \cosh(\omega|\tau_1 - \tau_2| - \hbar\beta\omega/2) \right]. \quad (2.63)$$

En utilisant l'expression (A.4), de l'annexe A, on obtient :

$$Z_{\omega}(j) = \frac{1}{2 \sinh(\hbar\beta\omega/2)} \exp\left(\frac{\beta}{2M\omega^2} j^2\right). \quad (2.64)$$

L'énergie libre est écrite sous la forme :

$$F_{\omega}(j) = \frac{1}{\beta} \ln[2 \sinh(\hbar\beta\omega/2)] - \frac{j^2}{2M\omega^2}. \quad (2.65)$$

D'après l'équation (2.34), la dérivée première de l'énergie libre (2.65) par rapport au courant j est :

$$\frac{\partial F(j)}{\partial j} \equiv -X = -\frac{j}{M\omega^2} \Rightarrow j = M\omega^2 X. \quad (2.66)$$

En injectant (2.66) dans (2.65), on obtient :

$$V_{\text{eff}}(X) = \frac{1}{\beta} \ln[2 \sinh(\hbar\beta\omega/2)] + \frac{M}{2} \omega^2 X^2. \quad (2.67)$$

Nous constatons la similitude entre les expressions (2.61) et (2.67).

2.5 Exemple: Intégrale Ordinaire

L'action effective est étudiée ici en utilisant une intégrale ordinaire de la précédente section.

Soit $A(x)$ une fonction arbitraire vérifiant la définition suivante :

$$Z(j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left[-\frac{1}{\hbar} A(x, j)\right], \quad (2.68)$$

Dans le cas où le courant externe j et la position x sont indépendants du temps τ , l'éq. (2.16) devient :

$$A(x, j) = A[x, j] = A[x] - \hbar\beta j x. \quad (2.69)$$

Dans le cas d'un courant externe et d'une position constante, l'extremum de x dans l'exposant de (2.68) est une valeur classique, notée x_{cl} . Alors la dérivée de l'exposant par rapport à x est nulle:

$$\left. \frac{\partial A(x, j)}{\partial x} \right|_{x=x_{cl}} = 0, \quad (2.70)$$

où :

$$\left. \frac{\partial A(x)}{\partial x} \right|_{x=x_{cl}} = \hbar \beta j. \quad (2.71)$$

En utilisant le développement de Taylor de la fonction $A(x, j)$ au voisinage de x_{cl} appliqué à l'identité (2.69), on obtient :

$$A(x, j) = A(x_{cl}, j) + \frac{1}{2} A''(x_{cl}) (\delta x)^2 + \frac{1}{6} A'''(x_{cl}) (\delta x)^3 + \frac{1}{24} A^{(4)}(x_{cl}) (\delta x)^4 + o(\delta x^5), \quad (2.72)$$

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

En insérant l'expression (2.72) dans (2.68), cette dernière devient :

$$Z(j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} A(x_{cl}, j)\right) \int_{-\infty}^{+\infty} d(\delta x) \exp\left[-\frac{1}{\hbar} A''(x_{cl}) \delta x^2\right] \\ \times \left[1 - \frac{1}{6\hbar} A'''(x_{cl}) \delta x^3 - \frac{1}{24\hbar} A^{(4)}(x_{cl}) \delta x^4 + \frac{1}{72\hbar^2} (A'''(x_{cl}))^2 \delta x^6 + \dots\right], \quad (2.73)$$

et en substituant l'identité [34]:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^n \exp\left(\frac{-1}{2\hbar} \lambda x^2\right) = \frac{(n-1)!! \hbar^{\frac{n}{2}}}{\sqrt{\lambda^{n+1}}}, \quad [\lambda > 0]. \quad (2.74)$$

où n est un nombre entier et paire. Il est à noter que si n est impair, l'intégrale est nulle.

Dans (2.73), on obtient :

$$Z(j) = \exp\left[-\frac{1}{\hbar} A(x_{cl}, j)\right] \left[\frac{1}{\sqrt{A''(x_{cl})}} - \frac{\hbar A^{(4)}(x_{cl})}{8\sqrt{(A''(x_{cl}))^5}} + \frac{5\hbar (A'''(x_{cl}))^2}{24\sqrt{(A''(x_{cl}))^7}} + o(\hbar^2) \right], \quad (2.75)$$

En utilisant le développement :

$$\ln(1-x) = -\left(x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \dots + \frac{x^n}{n} + \dots\right), \quad (2.76)$$

l'équation (2.75) est transformée en :

$$Z(j) = \exp \left[-\frac{1}{\hbar} A(x_{cl}, j) - \frac{1}{2} \ln(A''(x_{cl})) + \hbar \left\{ \frac{5[A'''(x_{cl})]^2}{24[A''(x_{cl})]^3} - \frac{A^{(4)}(x_{cl})}{8[A''(x_{cl})]^2} \right\} + o(\hbar^2) \right], \quad (2.77)$$

D'après (2.33), on obtient :

$$F(j) = \frac{1}{\hbar\beta} A(x_{cl}, j) + \frac{1}{2\hbar\beta} \ln(A''(x_{cl})) - \frac{\hbar^2}{\hbar\beta} \left\{ \frac{5[A'''(x_{cl})]^2}{24[A''(x_{cl})]^3} - \frac{A^{(4)}(x_{cl})}{8[A''(x_{cl})]^2} \right\} + o(\hbar^3). \quad (2.78)$$

Dans la partie précédente, nous avons défini le chemin moyen X en (2.20) par l'expression suivante :

$$X = X(j) = \frac{1}{Z(j)} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x(j) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} A(x, j) \right]. \quad (2.79)$$

où la première dérivée de $F(j)$ par rapport à j est donnée par :

$$-X = \frac{\partial F(j)}{\partial j}. \quad (2.80)$$

Selon l'identité (2.71), on déduit que:

$$A''(x_{cl}) = \hbar\beta \frac{\partial j}{\partial x_{cl}}, \quad (2.81)$$

ou bien :

$$\frac{\partial x_{cl}}{\partial j} = \frac{\hbar\beta}{A''(x_{cl})}. \quad (2.82)$$

En utilisant la dernière identité et les résultats (2.78) et (2.80), nous obtenons :

$$X = x_{cl} - \frac{\hbar A'''(x_{cl})}{2[A''(x_{cl})]^2} + \hbar^2 \left\{ \frac{2 A'''(x_{cl}) A^{(4)}(x_{cl})}{3 [A''(x_{cl})]^4} - \frac{5 [A'''(x_{cl})]^3}{8 [A''(x_{cl})]^5} - \frac{1 A^{(5)}(x_{cl})}{8 [A''(x_{cl})]^3} \right\} + o(\hbar^3). \quad (2.83)$$

où, en transposant les termes, nous aurons (2.83):

$$x_{cl} = X + \frac{\hbar A'''(X + \hbar A'''(X)/2[A''(X)]^2)}{2[A''(X + \hbar A'''(X)/2[A''(X)]^2)]^2} + \hbar^2 \left\{ -\frac{2 A'''(X) A^{(4)}(X)}{3 [A''(X)]^4} + \frac{5 [A'''(X)]^3}{8 [A''(X)]^5} + \frac{1 A^{(5)}(X)}{8 [A''(X)]^3} \right\} + o(\hbar^3). \quad (2.84)$$

Le développement de Taylor en puissances de \hbar du dénominateur dans l'éq. (2.84) au second ordre est :

$$A''\left(X + \hbar \frac{A'''(X)}{2[A''(X)]^2}\right) = A''(X) + \hbar A'''(X) \frac{A'''(X)}{2[A''(X)]^2} + o(\hbar^2). \quad (2.85)$$

L'expression suivante:

$$\frac{1}{(1+x)^2} = 1 - 2x + 3x^2 - 4x^3 + \dots + (n+1)(-x)^n + \dots, \quad (2.86)$$

est utilisée pour identifier la correction au premier ordre de x_{cl} donné par :

$$x_{cl} = X + \hbar X_1 + \hbar^2 X_2 + o(\hbar^3), \quad (2.87)$$

Par identification, on obtient :

$$X_1 = \frac{1}{2} \frac{A'''(X)}{[A''(X)]^2}, \quad (2.88)$$

et la correction au second ordre est donnée par :

$$X_2 = -\frac{5}{12} \frac{A'''(X)A^{(4)}(X)}{[A''(X)]^4} + \frac{1}{8} \frac{[A'''(X)]^3}{[A''(X)]^5} + \frac{1}{8} \frac{A^{(5)}(X)}{[A''(X)]^3}. \quad (2.89)$$

La transformée de Legendre concernant l'énergie libre $F(j)$ est exprimée par :

$$\Gamma(X) = \hbar\beta [F(j) + jX]. \quad (2.90)$$

En insérant (2.87) dans (2.78), l'expression de $\Gamma(X)$ en puissance de \hbar est une fonction de $A(X)$ au voisinage de x_{cl} :

$$\begin{aligned} \Gamma[X] = & A(X) + \hbar\beta jX + \frac{\partial A(X)}{\partial X} (\hbar X_1 + \hbar^2 X_2) - \hbar\beta j(X + \hbar X_1 + \hbar^2 X_2) \\ & + \frac{\hbar}{2} \ln A''(X + \hbar X_1) - \hbar^2 \left\{ \frac{5}{24[A''(X)]^3} [A'''(X)]^2 - \frac{[A^{(4)}(X)]}{8[A''(X)]^2} \right\} + o(\hbar^3). \end{aligned} \quad (2.91)$$

Selon les identités (2.71) et (2.88), on déduit que:

$$\Gamma[X] = A(X) + \frac{\hbar}{2} \ln A''(X) + \hbar^2 \left\{ \frac{-1}{12[A''(X)]^3} [A'''(X)]^2 + \frac{1[A^{(4)}(X)]}{8[A''(X)]^2} \right\} + o(\hbar^3). \quad (2.92)$$

A la limite $\hbar \rightarrow 0$, l'expression de l'action effective (2.91) devient :

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \Gamma(X) = A(X). \quad (2.93)$$

2.6. Méthode standard par les intégrales ordinaires

Dans cette section, nous nous intéressons à la méthode dite standard pour déterminer l'action effective à partir des diagrammes de Feynman [24]. La méthode standard "*Back-ground Method*" a été initiée et élaborée par R. Jackiw dans le cadre de la théorie quantique des champs relativistes [28]. Nous illustrons cette technique dans les intégrales ordinaires de la partie précédente, en considérant l'intégrale (2.68) sans courant externe j :

$$Z = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left[-\frac{1}{\hbar} A(x)\right], \quad (2.94)$$

le développement de Taylor de la fonction $A(x)$ au voisinage du point d'origine, noté X est donnée par:

$$A(X + \delta x) = A(X) + A'(X)\delta x + \frac{1}{2}A''(X)(\delta x)^2 + A^{(\text{int})}(\delta x), \quad (2.95)$$

où $A^{(\text{int})}(\delta x)$ est dite action d'interaction, elle est exprimée par :

$$A^{(\text{int})}(\delta x) = \frac{1}{6}A'''(X)\delta x^3 + \frac{1}{24}A^{(4)}(X)\delta x^4 + \dots, \quad (2.96)$$

et la déviation dans (2.95) est donnée par : $\delta x = x - X$.

En tenant compte de (2.92) et de (2.95), on déduit que l'action $A(X)$ est de l'ordre zéro pour l'action effective et que le deuxième terme du membre de droite dans (2.94) peut être négligé en l'identifiant à (2.91) [24].

Le second ordre $A''(X)\delta x^2/2$ mène à l'expression $[\hbar \ln A''(X)]/2$ en tenant compte de la relation (2.91), les termes d'interaction de l'expression (2.95) génèrent les diagrammes de Feynman, ces derniers sont déterminés par les règles de Feynman suivantes [24] :

- Chaque ligne représente la fonction de Green inversée de $A''(X)$:

$$i \text{ ————— } j \equiv \frac{\hbar}{A''(X)}. \quad (2.97)$$

- Chaque vertex ayant n lignes sortantes, est représenté par la dérivée de $A^{(n)}(X)$:

$$\begin{array}{c} 2 \\ | \\ \bullet \\ | \\ n \\ \text{---} \quad \text{---} \quad \text{---} \\ 1 \quad \quad \quad 3 \end{array} \equiv -\frac{1}{\hbar} A^{(n)}(X). \quad (2.98)$$

Ainsi, l'action effective est donnée par :

$$\Gamma(X) = A(X) + \frac{\hbar}{2} \ln A''(X) + \Gamma^{(\text{int})}(X), \quad (2.99)$$

où $\Gamma(X)$ est composée de tous les diagrammes de Feynman d'une particule irréductible (non tronqués), l'action effective d'interaction $\Gamma^{(\text{int})}(X)$ peut être développée en puissance de \hbar sous la forme :

$$\Gamma^{(\text{int})}(X) = -\hbar \sum_{l=2}^{\infty} \Gamma^{(l)}(X), \quad (2.100)$$

où $\Gamma^{(l)}(X)$ représente tous les diagrammes de Feynman d'une particule irréductible (non tronqués) ayant un nombre de boucles (loops) égale à l . Le nombre de boucles est lié au nombre de vertex par la relation:

$$l = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N n_i - (N - 1), \quad (2.101)$$

tel que N est le nombre de vertex, et n_i est le degré des vertex (nombre des lignes sortantes). Il est évident selon (2.101) que la contribution des l -boucles, l'action $\Gamma^{(l)}(X)$ est de l'ordre de \hbar^{l-1} . Ainsi, selon (2.100), la contribution des l -boucles à l'action d'interaction (2.100) est de l'ordre de $\hbar \times \hbar^{l-1} = \hbar^l$.

Exemple d'application :

Dans le cas de la théorie- φ^3 , les diagrammes de Feynman pour $l = 2, 3$ sont indiqués par :

$$\Gamma^{(2)}(X) = \frac{1}{12} \text{---} \bigcirc \text{---}, \quad (2.102)$$

$$\Gamma^{(3)}(X) = \frac{1}{16} \text{---} \bigcirc \text{---} + \frac{1}{24} \text{---} \bigotimes \text{---}. \quad (2.103)$$

En appliquant les règles de Feynman (2.97) et (2.98) sur les résultats (2,102) et (2,103), on obtient l'expression analytique de l'action d'interaction suivante :

$$\Gamma^{(int)}(X) = \hbar^2 \left[\frac{-1}{12} \frac{(A'''(X))^2}{(A''(X))^3} \right] + \hbar^3 \left[-\frac{5}{48(A''(X))^6} (A'''(X))^4 \right] + o(\hbar^4). \quad (2.104)$$

Le terme de \hbar^2 correspond au précédent résultat établie en (2.92).

2.7. Méthode standard par les intégrales de Chemins :

Le traitement de la méthode standard par les intégrales de chemins est réalisé par l'application sur la fonction de partition:

$$Z = \oint D x \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} A[X] \right\}. \quad (2.105)$$

Le développement de Taylor de l'action $A[X(\tau)]$ au voisinage $X(\tau)$ est exprimé par:

$$\begin{aligned} A[X + \delta x] &= A[X] + \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \frac{\delta A[X]}{\delta X(\tau_1)} \delta x(\tau_1) \\ &+ \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \frac{\delta^2 A[X]}{\delta X(\tau_1) \delta X(\tau_2)} \delta x(\tau_1) \delta x(\tau_2) + \frac{1}{6} \times \\ &\int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \frac{\delta^3 A[X]}{\delta X(\tau_1) \delta X(\tau_2) \delta X(\tau_3)} \delta x(\tau_1) \delta x(\tau_2) \delta x(\tau_3) \\ &+ \frac{1}{24} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_4 \frac{\delta^4 A[X]}{\delta X(\tau_1) \delta X(\tau_2) \delta X(\tau_3) \delta X(\tau_4)} \delta x(\tau_1) \delta x(\tau_2) \delta x(\tau_3) \delta x(\tau_4) + \dots \end{aligned} \quad (2.106)$$

Notons que la variation est donnée par $\delta x(\tau) = x(\tau) - X(\tau)$.

Le deuxième terme dans (2.106) contenant la première dérivée de l'action par rapport au chemin moyen est nul à cause des équations de Lagrange, le troisième terme contribue à la fonction inversée de Green :

$$G^{-1}(\tau_1, \tau_2) = \frac{\delta^2 A[X]}{\delta X(\tau_1) \delta X(\tau_2)}, \quad (2.107)$$

quant aux termes restants, ils contribuent à l'action d'interaction exprimée par:

$$\begin{aligned}
A^{(\text{int})}[\delta x] &= \frac{1}{6} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \frac{\delta^3 A[X]}{\delta X(\tau_1) \delta X(\tau_2) \delta X(\tau_3)} \delta x(\tau_1) \delta x(\tau_2) \delta x(\tau_3) \\
&+ \frac{1}{24} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_4 \frac{\delta^4 A[X]}{\delta X(\tau_1) \delta X(\tau_2) \delta X(\tau_3) \delta X(\tau_4)} \delta x(\tau_1) \delta x(\tau_2) \delta x(\tau_3) \delta x(\tau_4) + \dots
\end{aligned} \tag{2.108}$$

Ainsi, la fonction de partition (2.105) s'écrit :

$$Z = \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} A[X]\right\} \times \oint D\delta x \exp\left\{-\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 G^{-1}(\tau_1, \tau_2) \delta x(\tau_1) \delta x(\tau_2) - \frac{1}{\hbar} A^{(\text{int})}(\delta x)\right\}. \tag{2.109}$$

Afin de déterminer la contribution du premier ordre de la fonction de partition, nous utilisons l'identité suivante :

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(-\frac{1}{2} Ax^2\right) = \frac{1}{\sqrt{A}} ; \quad \text{avec } [A > 0]. \tag{2.110}$$

Pour un système à D -dimensions, l'intégrale Gaussienne (2.110) peut être généralisée en:

$$\frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d^D x \exp\left(-\frac{1}{2} X^T A X\right) = \frac{1}{\sqrt{\det(A)}} ; \quad [A = A^+, \det(A) > 0], \tag{2.111}$$

où X et A sont le vecteur et la matrice à D -dimensions, respectivement.

En appliquant le résultat (2.111) sur l'expression, au second ordre dans (2.109), on obtient :

$$\oint D\delta x \exp\left\{-\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 G^{-1}(\tau_1, \tau_2) \delta x(\tau_1) \delta x(\tau_2)\right\} = \frac{1}{\sqrt{\det(G^{-1})}}. \tag{2.112}$$

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

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 G^{-1}(\tau_1, \tau_2) \delta x_k(\tau_2) = M \lambda_k \delta x_k(\tau_1), \tag{2.113}$$

où $\delta x_k(\tau)$ est périodique :

$$\delta x_k(0) = \delta x_k(\hbar\beta). \tag{2.114}$$

Le membre de droite dans (2.112) peut être exprimé par la relation :

$$\frac{1}{\sqrt{\det(G^{-1})}} = \exp\left(-\frac{1}{2}Tr \ln G^{-1}\right), \quad (2.115)$$

où :

$$Tr \ln G^{-1} = \sum_k \ln \lambda_k. \quad (2.116)$$

Dans l'annexe A, la fonction de partition pour l'oscillateur harmonique est évaluée en appliquant les résultats (2.111)-(2.113). La méthode standard permet dans le cas d'un courant externe nul, en tenant compte de (2.24), d'obtenir :

$$Z[X] = \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\Gamma[X]\right\}, \quad (2.117)$$

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

L'approximation au premier ordre de l'action effective est donnée par :

$$\Gamma^{(0)}[X] + \Gamma^{(1)}[X] = A[X] + \frac{\hbar}{2}Tr \ln G^{-1}, \quad (2.118)$$

et l'action effective complète est réduite à [24]:

$$\Gamma[X] = A[X] + \frac{\hbar}{2}Tr \ln G^{-1} + \Gamma^{(int)}[X]. \quad (2.119)$$

Le premier terme $A[X]$ dans l'équation (2.119) est désigné sous le nom : niveau arbre (Tree levels), l'action interaction $\Gamma^{(int)}[X]$ caractérise les diagrammes de Feynman.

Dés lors, les règles de Feynman sont :

- 1) chaque ligne de connexion entre les vertex i et j est représentée par :

$$\overline{\underset{i}{\quad} \quad \underset{j}{\quad}} \equiv G(\tau_i, \tau_j) = G_{ij}, \quad (2.120)$$

- 2) le propagateur $G(\tau_i, \tau_j)$ est défini par l'identité suivante :

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau_i G^{-1}(\tau_h, \tau_i) G_\omega(\tau_i, \tau_j) \equiv \hbar\delta(\tau_h - \tau_j). \quad (2.121)$$

Il est à noter que de chaque vertex ayant n -lignes sortantes, $n \geq 3$, est exprimée par la dérivée n -ième de la fonction $A[X]$ par rapport aux paramètres

$X(\tau_i), X(\tau_j), X(\tau_k), \dots, X(\tau_m)$ où i, j, k, \dots, m désignent les lignes sortantes, le vertex est donc exprimé par :

$$\begin{array}{c} 2 \\ | \\ 1 \text{---} \bullet \text{---} 3 \\ | \\ m \end{array} \rightarrow -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_i \int_0^{\hbar\beta} d\tau_j \int_0^{\hbar\beta} d\tau_k \cdots \int_0^{\hbar\beta} d\tau_m \frac{\delta^n A[X]}{\delta X_i \delta X_j \delta X_k \dots \delta X_m}. \quad (2.122)$$

où nous avons utilisé les abréviations suivantes $\delta X_\alpha = \delta X(\tau_\alpha)$ et $\delta x_\alpha = \delta x(\tau_\alpha)$ avec $\alpha = i, j, k, \dots, m$.

$\Gamma^{(\text{int})}[X]$ est composé de tous les diagrammes de Feynman d'une particule irréductible donnée par :

$$\Gamma^{(\text{int})}(X) = -\hbar \sum_{l=2}^{\infty} \Gamma^{(l)}(X), \quad (2.123)$$

où l désigne le nombre de boucles (loops) et doit être $l \geq 2$. En appliquant les règles de Feynman (2.120)-(2.122) sur les diagrammes (2.102) et (2.103), l'expression (2.123) est donnée par l'expression analytique suivante :

$$\begin{aligned}
 \Gamma^{(\text{int})}[X] = & -\hbar \left[\frac{1}{12\hbar^2} \int_{12\dots 6} G_{12} G_{34} G_{56} \frac{\delta^3 A[X]}{\delta X_1 \delta X_3 \delta X_5} \frac{\delta^3 A[X]}{\delta X_2 \delta X_4 \delta X_6} \right. \\
 & + \frac{1}{24\hbar^4} \int_{12\dots \bar{2}} G_{12} G_{34} G_{56} G_{78} G_{9\bar{0}} G_{\bar{1}\bar{2}} \frac{\delta^3 A[X]}{\delta X_1 \delta X_8 \delta X_9} \frac{\delta^3 A[X]}{\delta X_2 \delta X_3 \delta X_{\bar{1}}} \frac{\delta^3 A[X]}{\delta X_4 \delta X_5 \delta X_{\bar{0}}} \frac{\delta^3 A[X]}{\delta X_6 \delta X_7 \delta X_{\bar{2}}} \\
 & \left. + \frac{1}{16\hbar^4} \int_{12\dots \bar{2}} G_{12} G_{34} G_{56} G_{78} G_{9\bar{0}} G_{\bar{1}\bar{2}} \frac{\delta^3 A[X]}{\delta X_1 \delta X_8 \delta X_9} \frac{\delta^3 A[X]}{\delta X_2 \delta X_3 \delta X_{\bar{1}}} \frac{\delta^3 A[X]}{\delta X_4 \delta X_5 \delta X_{\bar{2}}} \frac{\delta^3 A[X]}{\delta X_6 \delta X_7 \delta X_{\bar{0}}} + \dots \right], \quad (2.124)
 \end{aligned}$$

où, pour alléger l'écriture, nous avons utilisé les abréviations suivantes :

$$\int_{12\dots n} \equiv \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \cdots \int_0^{\hbar\beta} d\tau_n. \quad (2.125)$$

Nous désignons les chiffres supérieurs à dix par la notation barre, par exemple : $\bar{0} = 10, \bar{1} = 11, \bar{2} = 12, \dots$ et $G(\tau_i, \tau_j) = G_{ij}$. Il est à noter que l'expression de l'action effective $\Gamma^{(l)}[X]$ est une expression donnée en fonction de puissance de \hbar .

2.8. Calcul du potentiel effectif :

L'objectif de cette section est de déterminer l'expression analytique du potentiel effectif en utilisant la méthode standard développée dans la section précédente. La première dérivée de l'action par rapport au chemin moyen $X(\tau_1)$ est :

$$\frac{\delta A[X]}{\delta X(\tau_1)} = -M\ddot{X}(\tau_1) + V'(x)|_{x=X(\tau_1)}. \quad (2.126)$$

Selon la définition (2.108), la dérivée seconde de l'action par rapport aux chemins moyens $X(\tau_1), X(\tau_2)$ est égale à la fonction de Green inversée :

$$G^{-1}(\tau_1, \tau_2) = \left[-M \frac{d^2}{d\tau_1^2} + V''(x)|_{x=X(\tau_2)} \right] \delta(\tau_1 - \tau_2). \quad (2.127)$$

Pour $n \geq 3$, la dérivée n -ième de l'action $A^{(n)}[X]$ est donnée par :

$$\frac{\delta^n A[X]}{\delta X(\tau_1) \delta X(\tau_2) \dots \delta X(\tau_n)} = \delta(\tau_1 - \tau_2) \delta(\tau_2 - \tau_3) \dots \delta(\tau_{n-1} - \tau_n) V^{(n)}(x)|_{x=X_n}. \quad (2.128)$$

En substituant (2.127) dans (2.121), on obtient :

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[-M \frac{d^2}{d\tau_1^2} + V''(X) \right] \delta(\tau_1 - \tau) G_X(\tau, \tau_2) = \hbar \delta(\tau_1 - \tau_2). \quad (2.129)$$

Cette équation peut être réduite du problème correspondant à l'oscillateur harmonique (2.45) et (2.49) où on définit la fréquence d'essai à une dimension par [38]:

$$\Omega = \sqrt{\frac{V''(X)}{M}}. \quad (2.130)$$

À partir du résultat précédent (2.50), on obtient la fonction de Green pour un potentiel arbitraire :

$$G_\Omega(\tau_1, \tau_2) = \frac{\hbar}{2M\Omega} \frac{\cosh(\Omega|\tau_1 - \tau_2| - \hbar\beta/2)}{\sinh(\hbar\beta\Omega/2)}. \quad (2.131)$$

À la limite des basses températures, $T \rightarrow 0$, (2.131) devient :

$$\lim_{T \rightarrow 0} G_\Omega(\tau_1, \tau_2) = \frac{\hbar}{2M\Omega} \exp\{-\Omega|\tau_1 - \tau_2|\}, \quad (2.132)$$

où par similitude avec (2.123), le potentiel d'interaction effectif est donné en fonction du potentiel effectif à l -boucles par la relation :

$$V_{eff}^{(int)}(X) = -\hbar \sum_{l=2}^{\infty} V_{eff}^{(l)}(X). \quad (2.133)$$

Le potentiel effectif à l -boucles est liée à l'action effective à l -boucles par :

$$V_{eff}^{(l)}(X) = \frac{1}{\hbar\beta} \Gamma^{(l)}[X] \Big|_{X(\tau)=X}, \quad (2.134)$$

en tenant compte des expressions (2.123), (2.124), (2.133) et (2.134), le potentiel d'interaction effectif correspondant à l'action d'interaction effective (2.124) est donné par :

$$V_{eff}^{(int)}(X) = \frac{1}{\beta} \left[-\frac{[V^{(3)}(X)]^2}{12\hbar^2} \int_{12} G_{12}^3 - \frac{[V^{(3)}(X)]^4}{\hbar^4} \int_{1234} \left(\frac{G_{12}G_{13}G_{14}G_{23}G_{24}G_{34}}{24} + \frac{G_{13}G_{24}G_{12}^2G_{34}^2}{16} \right) + \dots \right], \quad (2.135)$$

En utilisant de nouveaux les règles de Feynman (2.120)-(2.122) :

- la connexion entre les vertex i et j est représentée par :

$$\begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \text{---} \\ | \\ \bullet \\ \begin{array}{c} i \\ j \end{array} \end{array} \equiv G_{\Omega}(\tau_i, \tau_j), \quad (2.136)$$

Le propagateur $G_{\Omega}(\tau_i, \tau_j)$ aux températures arbitraires est donné par (2.131) et aux basses températures le propagateur se réduit à (2.132).

- chaque vertex, ayant n -lignes sortantes, est représenté par l'identité suivante :

$$\begin{array}{c} 2 \\ | \\ \bullet \\ | \\ 1 \text{---} \bullet \text{---} 3 \\ | \\ n \end{array} \equiv -\frac{V^{(n)}(X)^{\hbar\beta}}{\hbar} \int_0^{\beta} d\tau_i. \quad (2.137)$$

Afin de déterminer l'expression analytique du potentiel d'interaction effectif (2.135), il est nécessaire d'évaluer celles correspondantes, respectivement, à 2 et 3-boucles.

Pour cela, on recourt à la substitution des expressions (2.131) et (2.132) dans (2.136) et nous avons comparé cette dernière avec (2.134), on obtient pour 2-boucles le potentiel effectif suivant :

$$V_{eff}^{(2)}(X) = \frac{[V^{(3)}(X)]^2}{12\beta(2M\Omega)^3} \frac{1}{\sinh^3(\hbar\beta\Omega/2)} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \cosh^3(\Omega|\tau_1 - \tau_2| - \hbar\beta\Omega/2). \quad (2.138)$$

en utilisant le résultat de l'annexe A, (2.138) devient :

$$V_{eff}^{(2)}(X) = \frac{\hbar}{6\Omega} \frac{[V^3(X)]^2}{(2M\Omega)^3} \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{\sinh^2(\hbar\beta\Omega/2)} \right]. \quad (2.139)$$

En écrivant analytiquement le diagramme de Feynman (2.103) aux basses températures, le potentiel effectif à 3-boucles est donné par :

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow 0} V^{(3)}(X) &= \frac{\hbar [V^{(3)}(X)]^4}{(2M\Omega)^6 \beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_4 \times \\ &\quad \left[\frac{1}{24} \exp(-\Omega|\tau_1 - \tau_2| - \Omega|\tau_1 - \tau_3| - \Omega|\tau_1 - \tau_4| - \Omega|\tau_2 - \tau_3| - \Omega|\tau_2 - \tau_4| - \Omega|\tau_3 - \tau_4|) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{16} \exp(-\Omega|\tau_1 - \tau_2| - 2\Omega|\tau_1 - \tau_4| - 2\Omega|\tau_2 - \tau_3| - \Omega|\tau_3 - \tau_4|) \right] \end{aligned} \quad (2.140)$$

L'expression (2.140) est évaluée en utilisant les expressions (A-9) et (A-24)-(A-27) de l'annexe A, elle est exprimée par :

$$\lim_{T \rightarrow 0} V_{eff}^{(3)}(X) = \frac{17\hbar^2 [V^{(3)}(X)]^4}{216\Omega^3 (2M\Omega)^6}. \quad (2.141)$$

En tenant compte du fait que l'action d'interaction effective est nulle dans le cas d'un oscillateur harmonique, l'expression (2.116) est obtenue en comparant (2.59) à (2.119) donnant :

$$Tr \ln G_{\omega}^{-1} = -2 \ln Z_{\omega} = 2 \ln(2 \sinh \hbar\beta\omega/2). \quad (2.142)$$

D'après (2.37), (2.119), (2.133) et (2.139), le potentiel effectif à 2-boucles est :

$$V_{eff}(X) = V(X) + \frac{\hbar}{\hbar\beta} \ln \left(2 \sinh \frac{\hbar\beta\omega}{2} \right) - \frac{\hbar^2 [V^3(X)]^2}{6\Omega (2M\Omega)^3} \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{\sinh^2(\hbar\beta\Omega/2)} \right] + o(\hbar^3). \quad (2.143)$$

où aux basses températures, l'expression (2.143) est réduite à :

$$\lim_{T \rightarrow 0} V_{eff}(X) = V(X) + \frac{\hbar\Omega}{2} - \frac{\hbar^2}{18\Omega} \frac{[V^3(X)]^2}{(2M\Omega)^3} + o(\hbar^3) \quad (2.144)$$

en substituant (2.144) dans (2.141), on déduit l'expression du potentiel effectif aux basses températures au troisième ordre en \hbar donné par :

$$\lim_{T \rightarrow 0} V_{eff}(X) = V(X) + \frac{\hbar\Omega}{2} - \frac{\hbar^2}{18\Omega} \frac{[V^3(X)]^2}{(2M\Omega)^3} - \frac{17\hbar^2 [V^{(3)}(X)]^4}{216\Omega^3 (2M\Omega)^6} + o(\hbar^4). \quad (2.145)$$

2.9 Potentiel anharmonique complexe PT -symétrique

On considère comme exemple le potentiel de l'oscillateur anharmonique à une dimension complexe suivant :

$$V(x) = \frac{M}{2} \omega^2 x^2 + igx^3, \quad (2.146)$$

où g est la constante de couplage du système.

Dans cette partie, le potentiel effectif pour l'oscillateur anharmonique est calculé à deux boucles aux basses températures en utilisant l'expression du propagateur $G_\Omega(\tau_1, \tau_2)$, la fréquence d'essai est alors :

$$\Omega = \omega \sqrt{1 + \frac{6igX}{M\omega^2}}. \quad (2.147)$$

En remplaçant cette dernière dans (2.143) pour l'oscillateur anharmonique à une dimension, on obtient :

$$V_{eff}(X) = \frac{M}{2} \omega^2 X^2 + igX^3 + \frac{\hbar}{\hbar\beta} \ln \left(2 \sinh \left[\frac{\hbar\beta\Omega}{2} \right] \right) - \frac{\hbar^2}{6\Omega} \frac{(6ig)^2}{(2M\Omega)^3} \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{\sinh^2 \left(\frac{\hbar\beta\Omega}{2} \right)} \right] + o(\hbar^3) \quad (2.148)$$

En substituant $X(\tau)$ par :

$$X = i(X_0^{(N)} + \hbar X_1^{(N)} + \hbar^2 X_2^{(N)}) + o(\hbar^3), \quad (2.149)$$

dans la dérivée première du potentiel effectif par rapport à X , on trouve au premier ordre ($N=1$) un système de trois équations et tous les solutions sont données par :

$$X_0^{(1)} = 0 \quad ; \quad X_1^{(1)} = \frac{-3g}{2M^2\omega^3} \quad ; \quad X_2^{(1)} = \frac{33g^3}{2\omega^8 M^5}. \quad (2.150)$$

En insérant les résultants (2.150) dans (2.148) en tenant compte de (2.149), on déduit l'énergie de l'état fondamental aux basses températures $T \rightarrow 0$:

$$E = \lim_{T \rightarrow 0} V_{eff}(X) = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{11\hbar^2 g^2}{8M^3 \omega^4} + o(\hbar^3). \quad (2.151)$$

2.10. La Théorie des perturbations : diagrammes de Feynman

La fonction de partition du potentiel de l'oscillateur anharmonique à une dimension (2.146) est :

$$Z = \oint Dx \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2(\tau) + \frac{M}{2} \omega^2 x^2(\tau) + igx^3(\tau) \right] \right\}. \quad (2.152)$$

où g la constante de couplage. Les contributions harmoniques et anharmoniques de la fonction de partition Z sont données par :

$$Z = \oint Dx \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2(\tau) + \frac{M}{2} \omega^2 x^2(\tau) \right] \right\} \\ \times \left\{ 1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 [igx^3(\tau_1)] + \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 [igx^3(\tau_1)][igx^3(\tau_2)] + \dots \right\}, \quad (2.153)$$

en appliquant le développent de Taylor sur la constante de couplage g , ($g \rightarrow 0$), et la contribution des intégrales impaires du chemin $x(\tau)$ est nulle .

L'expression de la fonction de partition est alors donnée par :

$$Z = Z_\omega \left[1 - \frac{g^2}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \langle x^3(\tau_1)x^3(\tau_2) \rangle_\omega + O(g^4) \right], \quad (2.154)$$

où nous avons adopté la notation suivante :

$$\langle \bullet \rangle_\omega = \frac{1}{Z_\omega} \oint Dx(\bullet) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2(\tau) + \frac{M}{2} \omega^2 x^2(\tau) \right] \right\}, \quad (2.155)$$

dite : produit de convolution.

Le produit de convolution donné dans (2.155) est transformé en appliquant les rotation de Wick [4] où il est défini en terme du propagateur (fonction de Green) par :

$$G_\omega(\tau_1, \tau_2) = \langle x(\tau_1)x(\tau_2) \rangle_\omega. \quad (2.156)$$

Il est dès lors possible de généraliser le produit de convolution à n -chemins $x(\tau_\alpha)$, $\alpha = 1, \dots, n$, par identité :

$$\langle x(\tau_1)x(\tau_2)x(\tau_3)\dots x(\tau_n) \rangle_\omega = G(\tau_1, \tau_2)\langle x(\tau_3)x(\tau_4)\dots x(\tau_n) \rangle_\omega + G(\tau_1, \tau_3)\langle x(\tau_2)x(\tau_4)\dots x(\tau_n) \rangle_\omega + \dots + G(\tau_1, \tau_n)\langle x(\tau_2)x(\tau_3)\dots x(\tau_{n-1}) \rangle_\omega. \quad (2.157)$$

En tenant compte des expressions (2.156) et (2.157), le produit de convolution donné dans (2.154) est :

$$\langle x^3(\tau_1)x^3(\tau_2) \rangle_\omega = 9G_\omega(\tau_1, \tau_1)G_\omega(\tau_1, \tau_2)G_\omega(\tau_2, \tau_2) + 6G_\omega^3(\tau_1, \tau_2). \quad (2.158)$$

A l'aide des équations (2.43) et (2.47), Le propagateur $G_\omega(\tau_1, \tau_2)$ défini pour un courant nul par :

$$\begin{aligned} \langle x(\tau_1)x(\tau_2) \rangle_\omega &= \frac{\hbar^2}{Z_\omega} \frac{\delta^2}{\delta j(\tau_1)\delta j(\tau_2)} \oint Dx \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \left\{ A_\omega[x] + \int_0^{\hbar\beta} d\tau x(\tau)j(\tau) \right\}\right) \Bigg|_{j=0} \\ &\equiv \hbar^2 \frac{\delta^2}{\delta j(\tau_1)j(\tau_2)} \exp\left[\frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 G_\omega(\tau_1, \tau_2)j(\tau_1)j(\tau_2)\right] \Bigg|_{j=0}. \end{aligned} \quad (2.159)$$

En insérant (2.158) dans (2.154), on déduit expression analytique de l'énergie libre :

$$\begin{aligned} F &= -k_B T \ln(Z) \\ &= -k_B T \ln(Z_\omega) + k_B T \left\{ + \frac{g^2}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 [9G_\omega(\tau_1, \tau_1)G_\omega(\tau_1, \tau_2)G_\omega(\tau_2, \tau_2) + 6G_\omega^3(\tau_1, \tau_2)] \right\}. \end{aligned} \quad (2.160)$$

L'énergie libre peut être exprimée en termes des diagrammes de Feynman. Dans le cas d'un potentiel complexe, les règles de Feynman sont données par :

- La connexion entre les vertex i et j est représentée par le propagateur :

$$i \bullet \text{---} \bullet j \equiv G_\omega(\tau_i, \tau_j). \quad (2.161)$$

- Chaque vertex, ayant 3-lignes sortants, est représenté par :

$$\begin{array}{c} \diagup \\ \bullet \\ \diagdown \\ | \\ i \end{array} \rightarrow -\frac{6ig}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_i. \quad (2.162)$$

En appliquant les règles de Feynman on déduit la représentation schématique de l'énergie libre (2.160) [35]:

$$F = -k_B T \ln Z_\omega - k_B T \left\{ \frac{1}{8} \text{diagram} + \frac{1}{12} \text{diagram} + o(g^4) \right\}. \quad (2.163)$$

En utilisant (2.50) et en substituant les résultats (A-4) et (A-7) de l'annexe A dans (2.160), l'expression de l'énergie libre est exprimée par :

$$F = -k_B T \ln Z_\omega + g^2 \left[\frac{9\hbar^2}{\omega(2M\omega)^3} \right] \frac{1}{\tanh^2(\hbar\beta\omega/2)} + \frac{6\hbar^2 g^2}{\omega(2M\omega)^3} \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{\sinh^2(\hbar\beta\omega/2)} \right] + o(g^4) \quad (2.164)$$

Aux basses températures, et en tenant compte de l'expression de Z_ω , l'énergie libre sera donnée par :

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{11g^2\hbar^2}{8M^3\omega^4} - \frac{465g^4}{32M^6\omega^9} + o(g^6), \quad (2.165)$$

où $\hbar\omega/2$ est l'énergie de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique.

2.11. Méthode des perturbations de Bender-Wu : Relations de récurrences

2.11.1 Introduction:

L'expression de l'énergie de l'état fondamental de l'oscillateur anharmonique à une dimension (2.146) en fonction de la constante de couplage est obtenue en appliquant la méthode des récurrences de Bender-Wu [29]. Cette méthode a été développée par les auteurs de la Réf. [38] dans le but de la résolution de l'équation de Schrödinger approximativement [29,30].

La fonction d'onde d'essai est exprimée par [24] :

$$\psi(x) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[\frac{-M\omega x^2}{2\hbar} + \phi(x) \right] \approx \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(\frac{-M\omega x^2}{2\hbar} \right) [1 + \phi(x)], \quad (2.166)$$

où la fonction d'onde $\phi(x)$ est exprimée en puissance de g par :

$$\phi(x) = \sum_{k=1}^{\infty} g^k \phi_k(x). \quad (2.167)$$

2.11.2. L'énergie de l'état fondamental :

Pour le potentiel anharmonique :

$$V(x) = \frac{M}{2} \omega^2 x^2 + i g x^3, \quad (2.168)$$

l'équation de Schrödinger correspondante est :

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \psi''(x) + \left(\frac{M}{2} \omega^2 x^2 + i g x^3 \right) \psi(x) = E \psi(x). \quad (2.169)$$

En insérant la fonction d'onde donnée par (2.166) dans l'équation de Schrödinger (2.169), on obtient une équation différentielle en termes de la fonction d'onde $\phi(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \phi''(x) + \hbar \omega x \phi'(x) - \frac{\hbar^2}{2M} [\phi'(x)]^2 + i g x^3 = \varepsilon. \quad (2.170)$$

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

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar \omega}{2} + \varepsilon \\ &= \frac{\hbar \omega}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} g^k \varepsilon_k \end{aligned} \quad (2.171)$$

En substituant (2.167) dans l'expression (2.170) et en identifiant les termes égaux en puissances de g , on déduit une équation différentielle en fonction de $\phi_k(x)$ [38] :

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \phi_k''(x) + \hbar \omega x \phi_k'(x) - \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{l=1}^{k-1} \phi_{k-l}'(x) \phi_l'(x) + \delta_{k,1} i x^3 = \varepsilon_k. \quad (2.172)$$

Pour résoudre l'équation différentielle (2.172), $\phi_k(x)$ est supposée être un polynôme vérifiant l'identité suivante [38] :

$$\phi_k(x) = \sum_{m=1}^{k+2} C_m^{(k)} x^m, \quad (2.173)$$

où $C_m^{(k)}$ sont des coefficients, réels et/ou complexes, à déterminer.

En insérant (2.173) dans (2.172), et en comparant les termes entre eux, on déduit pour $k = 1$ (l'ordre du développement) les coefficients et l'énergie correspondants :

$$C_1^{(1)} = \frac{-i}{M\omega^2} ; C_2^{(1)} = 0 ; C_3^{(1)} = \frac{-i}{3\hbar\omega} \quad \text{et} \quad \varepsilon_1 = 0. \quad (2.174)$$

ainsi que pour $k = 2$:

$$C_1^{(2)} = 0 ; C_2^{(2)} = \frac{-7}{8M^2\omega^4} ; C_3^{(2)} = 0 ; C_4^{(2)} = \frac{-1}{8M\hbar\omega^3} \quad \text{et} \quad \varepsilon_2 = \frac{11\hbar^2}{8M^3\omega^4}. \quad (2.175)$$

Connaissant les coefficients obtenus en (2.174) et (2.175), il est possible d'en déduire ceux pour $k \geq 3$. Le tableau 2.1 illustre les coefficients d'énergie jusqu'à l'ordre 5

k	1	2	3	4	5
ε_k	0	$\frac{11}{8\omega^4}$	0	$-\frac{465}{32\omega^9}$	0

Tableau 2.1 : les coefficients du spectre d'énergie pour le potentiel anharmonique (2.168).

CHAPITRE 03 PROCEDURE DE RESOMMATION AUX FORTS COUPLAGES

3.1. Introduction :

Dans le chapitre précédent, nous avons élaboré les différentes techniques de calcul (théorie des perturbations, règles de Feynman, méthode de Bender-Wu) qui nous ont permis de déterminer le spectre d'énergie du potentiel anharmonique (2.168).

L'objectif de ce chapitre est de déduire, à partir des résultats obtenus pour des faibles constantes de couplages, l'expression du spectre d'énergie aux forts couplages par une procédure mathématique dite de resommation [29-31].

Le point de départ de cette technique est fondé sur un paramètre de resommation introduit par Kleinert [24-26, 38, 41,42], ce dernier permet de traiter le passage des séries d'énergies aux faibles couplage ($g \rightarrow 0$) à celles des forts couplages ($g \rightarrow \infty$).

3.2. Procédure de resommation du potentiel complexe unidimensionnel:

L'équation de Schrödinger pour le potentiel complexe anharmonique (2.168) prise dans les unités naturelles ($\hbar = M = 1$), est donnée par :

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \left(\frac{1}{2} \omega^2 x^2 + igx^3 \right) \psi(x) = E \psi(x). \quad (3.1)$$

La substitution $x \rightarrow g^{-\frac{1}{5}} x$ et $\alpha = g^2$, transforme l'équation (3.1) à :

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \left(\frac{1}{2} g^{-\frac{4}{5}} \omega^2 x^2 + ix^3 \right) \psi(x) = g^{-\frac{2}{5}} E \psi(x). \quad (3.2)$$

Les expressions de la fonction d'onde et du spectre d'énergie sont données respectivement par [5, 24-26, 43, 44] :

$$\psi(x) = \psi_0(x) + g^{-\frac{4}{5}} \psi_1(x) + g^{-\frac{8}{5}} \psi_2(x) + \dots, \quad (3.3)$$

$$E = g^{\frac{2}{5}} b_0 + g^{-\frac{2}{5}} b_1 + g^{-\frac{6}{5}} b_2 + \dots \quad (3.4)$$

où $b_\alpha, \alpha = 1, 2, \dots$, sont les coefficients des corrections de l'énergie aux ordres élevés.

En substituant des expressions (3.3) et (3.4) dans (3.2), cette dernière permet de déduire le coefficient b_0 donné dans (3.4) et qui représente la valeur de l'énergie à l'état fondamental aux forts couplages. La valeur numérique de b_0 a été calculée par C M .Bender [38,39,45] :

$$b_0 = 0,76285377\dots \quad (3.5)$$

3.2.1. La resommation de l'énergie de l'état fondamental :

La resommation de l'énergie de l'état fondamentale aux forts couplages par rapport à la constante de couplage g passe impérativement par la connaissance de l'expression de l'énergie aux faibles couplages, celle-ci a pour expression :

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{11g^2\hbar^2}{8M^3\omega^4} - \frac{g^4 465\hbar^3}{32M^6\omega^9} + \dots, \quad (3.6)$$

En remplaçant $g^2 \rightarrow \alpha$ dans l'équation (3.6), on obtient :

$$E = \omega \left(\frac{\hbar}{2} + \alpha \frac{11\hbar^2}{8M^3\omega^6} - \alpha^2 \frac{465}{32M^6\omega^{10}} + \dots \right). \quad (3.7)$$

Dans le cas d'un oscillateur anharmonique l'expression du spectre d'énergie (3.4) est donnée par [38] :

$$E^{(N)} = \alpha^{\frac{1}{5}} \left(b_0^{(N)} + \alpha^{-\frac{2}{5}} b_1^{(N)} + \alpha^{-\frac{4}{5}} b_2^{(N)} + \dots \right). \quad (3.8)$$

La resommation des deux premiers membres de l'énergie (3.6) effectuée en introduisant le paramètre de resommation de Kleinert [24,38] défini par :

$$\omega \rightarrow \Omega \sqrt{1 + g r} ; r = \frac{\omega^2 - \Omega^2}{g\Omega^2}, \quad (3.9)$$

et qui permet d'aboutir à la nouvelle expression de l'énergie en fonction de Ω :

$$E^{(1)}(\Omega) = \frac{\hbar\Omega}{4} + \frac{\hbar\omega^2}{4\Omega} + \frac{\alpha 11\hbar^2}{8M^3\Omega^4}. \quad (3.10)$$

La minimisation de $E^{(1)}(\Omega)$ par rapport à Ω est nulle, l'équation qui en découle est :

$$\left(\Omega^{(1)}\right)^5 - \omega^2 \left(\Omega^{(1)}\right)^3 - \alpha \frac{22\hbar}{M^3} = 0. \quad (3.11)$$

En identifiant l'expression de $\Omega^{(1)}$ à celle de $E^{(N)}$, pour $N = 1$, on trouve [38]:

$$\Omega^{(1)} = \alpha^{\frac{1}{5}} \left(\Omega_0^{(1)} + \Omega_1^{(1)} \alpha^{-\frac{2}{5}} + \Omega_2^{(1)} \alpha^{-\frac{4}{5}} \right) + \dots, \quad (3.12)$$

et en substituant (3.12) dans (3.11), on obtient :

$$\Omega_0^{(1)} = \sqrt[5]{\frac{22\hbar}{M^3}}, \quad \Omega_1^{(1)} = \frac{\omega^2}{5} \sqrt[5]{\frac{M^3}{22\hbar}}, \quad \Omega_2^{(1)} = \frac{\omega^4 M^5}{25} \sqrt[5]{\frac{M^4}{10648\hbar^3}}. \quad (3.13)$$

En réinsérant (3.13) dans (3.10) et en la comparant à (3.8), nous déduisons les coefficients $b_i^{(1)}$ ($i = 0,1,2$) correspondant à l'énergie de l'état fondamental $E^{(1)}$ aux forts couplages :

$$b_0^{(1)} = \frac{5\hbar}{16} \sqrt[5]{\frac{22\hbar}{M^3}}, \quad b_1^{(1)} = 4\hbar\omega^2 \sqrt[5]{\frac{M^3}{22\hbar}}, \quad b_2^{(1)} = -\frac{\hbar\omega^4}{100} \sqrt[5]{\frac{M^3}{22\hbar}}. \quad (3.14)$$

Le résultat au première ordre donne la valeur de $b_0^{(1)}$:

$$b_0^{(1)} = \frac{5\hbar}{16} \sqrt[5]{\frac{22\hbar}{M^3}} \approx 0,5799.$$

Pour se rapprocher de plus en plus de la valeur numérique de b_0 donnée en (3.5), il est nécessaire de prolonger le développement à des ordres élevés en α , pour $\alpha \geq 2$. L'erreur relative correspondante à l'énergie de l'état fondamental au premier ordre à pour valeur :

$$\frac{|b_0^{(1)} - b_0|}{b_0} \cong 24\%. \quad (3.15)$$

Il est important de remarquer que l'erreur relative obtenue en (3.15) est importante et non négligeable, dès lors il est nécessaire de procéder à une nouvelle resommation pour améliorer le résultat

$$b_0^{(1)} = \frac{5\hbar}{16} \sqrt[5]{\frac{22\hbar}{M^3}}.$$

3.2.2. Resommation du potentiel effectif :

La convergence du calcul élaboré dans la section précédente peut-être améliorée en introduisant un nouveau paramètre variationnelle Ω , en tenant compte de la théorie des perturbations variationnelles et du potentiel effectif.

Ainsi, tous les calculs effectués pour améliorer le résultat obtenu en (3.15) sont fondés sur la formule:

$$V_{eff}(X) = \sum_{l=0}^{\infty} \hbar^l V^{(l)}(X). \quad (3.16)$$

Le paramètre variationnel (ou fréquence d'essai) Ω est donné par :

$$\Omega = \sqrt{\frac{V''(X)}{M}} = \sqrt{\omega^2 + \frac{6igX}{M}}, \quad (3.17)$$

$V''(X)$ étant la dérivée seconde par rapport à X du potentiel donné par (2.168).

l	0	1	2
$V^{(l)}(X)$	$\frac{M}{2}\omega^2 X^2 + igX^3$	$\frac{1}{2}\sqrt{\omega^2 + \frac{6ig}{M}}$	$\frac{g^2}{4M(M\omega^2 + 6igX)^2}$

Le tableau 3.1 : représente les deux premiers ordres en \hbar correspondants respectivement aux nombres de boucles (loops).

En substituant le paramètre de Kleinert en \hbar définit par [38] :

$$\omega \rightarrow \Omega\sqrt{1 + \hbar r} \quad \text{et} \quad r = \frac{\omega^2 - \Omega^2}{\hbar\Omega^2}, \quad (3.18)$$

dans la formule (3.16) et en tenant compte des résultats du tableau (3.1), on obtient le potentiel effectif au premier ordre par rapport à \hbar (1-boucle) :

$$V_{eff}^{(1)}(X, \Omega) = \frac{M}{2}\omega^2 X^2 + ig X^3 + \frac{\hbar}{2}\sqrt{\Omega^2 + \frac{6igX}{M}}. \quad (3.19)$$

L'énergie de l'état fondamental est obtenue en minimisant (3.19) par rapport aux paramètre Ω et X :

$$\left. \frac{\partial V_{eff}^{(1)}(X, \Omega)}{\partial \Omega} \right|_{X=X^{(1)}, \Omega=\Omega^{(1)}} = 0, \quad (3.20)$$

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

La résolution du système d'équation (3.20) correspondant au potentiel (2.168) conduit aux équations suivantes :

- $\Omega = 0,$
- $$X^{(1)} + \frac{M\omega^2}{3ig} + \frac{\hbar}{2\sqrt{6igM}(X^{(1)})^{\frac{3}{2}}} = 0. \quad (3.21)$$

Comme dans le cas de la resommation par rapport à g , le comportement asymptotique de $X^{(1)}$ au voisinage de l'infini dans (3.21) est exprimé par :

$$X^{(1)} = -ig^{-\frac{1}{5}} \left(X_0^{(1)} + X_1^{(1)} g^{-\frac{4}{5}} + X_2^{(1)} g^{-\frac{8}{5}} + \dots \right). \quad (3.22)$$

En substituant cette dernière dans (3.21), les coefficients obtenus sont :

$$X_0^{(1)} = \sqrt[5]{\frac{\hbar^2}{24M}}, \quad X_1^{(1)} = -\frac{2M}{15}\omega^2, \quad X_2^{(1)} = \frac{M^2\omega^4}{75}\sqrt[5]{\frac{24M}{\hbar^2}}. \quad (3.23)$$

Ayant obtenu l'expression de $X^{(1)}$, nous la réinjectons dans (3.19) et nous la comparons à celle de l'énergie :

$$E^{(1)} = g^{\frac{2}{5}} \left(b_0^{(1)} + b_1^{(1)} g^{-\frac{4}{5}} + b_2^{(1)} g^{-\frac{8}{5}} + \dots \right), \quad (3.24)$$

nous déduisons les coefficients de $b_\alpha^{(1)}$, ($\alpha = 0,1,2$), correspondant à l'énergie de l'état fondamental :

$$b_0^{(1)} = \frac{5\hbar}{2}\sqrt[5]{\frac{\hbar}{432M^3}} \approx 0,7427511023, \quad b_1^{(1)} = -\frac{M}{4}\omega^2\sqrt[5]{\frac{\hbar^4}{18M^2}}, \quad b_2^{(1)} = \frac{M^2\omega^4}{15}\sqrt[5]{\frac{\hbar^2}{24M}}. \quad (3.25)$$

L'erreur relative calculée de $b_0^{(1)}$ en (3.25) par rapport à celle déduite par C.M Bender [38] en (3.5) est en très bon accord en la comparant à celle déduite en (3.15), en effet, elle est de l'ordre de :

$$\frac{|b_0^{(1)} - b_0|}{b_0} \cong 3\%. \quad (3.26)$$

Pour améliorer le résultat précédant, il est important d'aller aux ordres plus élevés en boucles. Par exemple, dans le cas à deux boucles ($l = 2$), le potentiel effectif est donnée par :

$$V_{eff}^{(2)}(X, \Omega) = \frac{M}{2} \omega^2 X^2 + i g X^3 + \hbar \frac{M(\omega^2 + \Omega^2) + 12 i g X}{4M \sqrt{\Omega^2 + \frac{6 i g X}{M}}} + \frac{\hbar^2 g^2}{4M(M \Omega^2 + 6 i g X)^2}. \quad (3.27)$$

En procédant de la même manière qu'au premier ordre, le résultat final de $b_0^{(2)}$ est [39,45] :

$$b_0^{(2)} \approx 0,764570478. \quad (3.28)$$

A deux boucles, le résultat numérique $b_0^{(2)}$ s'approche du résultat numérique obtenu par C. M. Bender. L'erreur relative est :

$$\frac{|b_0^{(2)} - b_0|}{b_0} \cong 0,06\%. \quad (3.29)$$

CHAPITRE 4

POTENTIEL EFFECTIF ET PROCEDURE DE RESOMMATION : CAS DES POTENTIELS MULTIDIMENSIONNELS AUX FAIBLES ET FORTS COUPLAGES.

4.1. Introduction :

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à étudier et déduire les spectres d'énergie correspondant, respectivement, aux potentiels complexes PT -symétrique:

$$V(x, y) = \frac{M\omega^2}{2}(x^2 + y^2) + igxy^2, \quad (4.1)$$

$$V(x, y, z) = \frac{M\omega^2}{2}(x^2 + y^2 + z^2) + igxyz. \quad (4.2)$$

aux forts couplages par la procédure de resommation. Ces potentiels appartiennent à des classes de potentiels étudiés dans le cadre de la théorie quantique des champs (φ^3 -theory).

Le présent chapitre est composé de quatre parties hormis l'introduction. La première est consacrée à la détermination des spectres d'énergie des potentiels (4.1) et (4.2) aux faibles couplages par la théorie des perturbations traitée en terme de diagrammes de Feynman connectés. La deuxième partie portera sur la méthode des récurrences de Bender-Wu, nous déduisons les spectres d'énergie des précédents potentiels et nous les comparons à ceux déduits dans la première partie. Quant à la troisième partie, elle traitera de la procédure de la resommation aux forts couplages des spectres d'énergie trouvés dans les deux premières parties en termes de la constante de couplage g . Enfin, l'objet de la quatrième partie se portera sur la notion du potentiel effectif, en déduisant (i) les expressions des spectres d'énergie aux faibles couplages, et (ii) d'améliorer les résultats obtenus dans la troisième partie en resommant la série d'énergie en terme de la constante \hbar des potentiels effectifs aux basses températures.

4.2. Théorie des perturbations : Diagrammes de Feynman

Les séries perturbatives de l'énergie de l'état fondamental des potentiels (4.1) et (4.2), où g est la constante de couplage, peuvent être représentés par les diagrammes de Feynman connectés.

Les fonctions des partitions sont données par:

$$Z_{2D} = \oint Dx Dy \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} [\dot{x}^2(\tau) + \dot{y}^2(\tau)] + \frac{M}{2} \omega^2 [x^2(\tau) + y^2(\tau)] + i g x(\tau) y^2(\tau) \right]\right). \quad (4.3)$$

$$Z_{3D} = \oint Dx Dy Dz \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{M}{2} [\dot{x}^2(\tau) + \dot{y}^2(\tau) + \dot{z}^2(\tau)]\right) \times \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \omega^2 [x^2(\tau) + y^2(\tau) + z^2(\tau)] + i g x(\tau) y(\tau) z(\tau) \right]\right) \quad (4.4)$$

Les contributions harmoniques et anharmoniques des fonctions de partitions Z_{2D} et Z_{3D} sont données par :

$$Z_{2D} = \oint Dx Dy \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} [\dot{x}^2(\tau) + \dot{y}^2(\tau)] + \frac{M}{2} \omega^2 [x^2(\tau) + y^2(\tau)]\right]\right) \times \left\{ 1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 [i g x(\tau_1) y^2(\tau_1)] + \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 [i g x(\tau_1) y^2(\tau_1)] [i g x(\tau_2) y^2(\tau_2)] + \dots \right\}. \quad (4.5)$$

$$Z_{3D} = \oint Dx Dy Dz \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{M}{2} [\dot{x}^2(\tau) + \dot{y}^2(\tau) + \dot{z}^2(\tau)] + \frac{M}{2} \omega^2 [x^2(\tau) + y^2(\tau) + z^2(\tau)] \right)\right) \left\{ 1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 [i g x(\tau_1) y(\tau_1) z(\tau_1)] + \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 [i g x(\tau_1) y(\tau_1) z(\tau_1)] [i g x(\tau_2) y(\tau_2) z(\tau_2)] + \dots \right\} \quad (4.6)$$

Dans le cas multidimensionnel, les fonctions de corrélations (produits de convolutions) sont généralisées selon :

$$\langle \bullet \rangle_\omega = \frac{1}{\prod_{a=1}^N Z_{x_a}^\omega} \oint \prod_{a=1}^N Dx_a(\bullet) \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{a=1}^N \left(\frac{M}{2} \dot{x}_a^2(\tau) + \frac{M}{2} \omega^2 x_a^2(\tau) \right)\right\}, \quad (4.7)$$

où $a = 1, 2$ à 2D et $a = 1, 2, 3$ à 3D, et conduisent aux expressions des fonctions de partitions suivantes :

$$Z_{2D} = Z_x^\omega Z_y^\omega \left[1 - \frac{g^2}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \langle x(\tau_1)y^2(\tau_1)x(\tau_2)y^2(\tau_2) \rangle + o(g^4) \right], \quad (4.8)$$

$$Z_{3D} = Z_x^\omega Z_y^\omega Z_z^\omega \left[1 - \frac{g^2}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \langle x(\tau_1)y(\tau_1)z(\tau_1)x(\tau_2)y(\tau_2)z(\tau_2) \rangle + o(g^4) \right], \quad (4.9)$$

où $Z_{x_a}^\omega$ sont les fonctions de partitions de l'oscillateur harmonique données par :

$$Z_\omega = Z_x^\omega = Z_y^\omega = Z_z^\omega = \frac{1}{2} \sinh^{-1} \left(\frac{\hbar\beta\omega}{2} \right). \quad (4.10)$$

Evaluation des expressions (4.8) et (4.9) revient à écrire les produits de convolutions en appliquant les rotations de Wick [4]. Ils sont définis en termes des propagateurs par :

$$G_\omega(\tau_1, \tau_2) = \begin{cases} \langle x_a(\tau_1)x_b(\tau_2) \rangle_\omega \neq 0 & \text{si } a = b \\ \langle x_a(\tau_1)x_b(\tau_2) \rangle_\omega = 0 & \text{si } a \neq b \end{cases}. \quad (4.11)$$

Les fonctions de corrélations dans (4.8) et (4.9) sont exprimées à l'aide de (4.11) par :

$$\langle x(\tau_1)y^2(\tau_1)x(\tau_2)y^2(\tau_2) \rangle_\omega = G_\omega(\tau_1, \tau_1)G_\omega(\tau_1, \tau_2)G_\omega(\tau_2, \tau_2) + 2G_\omega^3(\tau_1, \tau_2), \quad (4.12)$$

$$\langle x(\tau_1)y(\tau_1)z(\tau_1)x(\tau_2)y(\tau_2)z(\tau_2) \rangle_\omega = G_\omega^3(\tau_1, \tau_2). \quad (4.13)$$

En insérant (4.12) et (4.13) dans (4.8) et (4.9), respectivement, on déduit les expressions de l'énergie libre au quatrième ordre en constante de couplage g :

$$F_{2D} = -2k_B T \ln Z_\omega + k_B T \left\{ \frac{g^2}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 [G_\omega(\tau_1, \tau_1)G_\omega(\tau_1, \tau_2)G_\omega(\tau_2, \tau_2) + 2G_\omega^3(\tau_1, \tau_2)] \right\}. \quad (4.14)$$

$$F_{3D} = -3k_B T \ln Z_\omega + k_B T \left\{ \frac{g^2}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 [G_\omega^3(\tau_1, \tau_2)] \right\}. \quad (4.15)$$

En appliquant les précédentes règles de Feynman données par (2.161) et (2.162), on déduit la représentation schématique des spectres d'énergie aux faibles couplages à 4-vertex par :

$$E_{2D} = \hbar\omega - \lim_{T \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{72} \text{diagram 1} + \frac{1}{36} \text{diagram 2} + \frac{1}{324} \text{diagram 3} + \frac{5}{1296} \text{diagram 4} + \frac{1}{648} \text{diagram 5} + \frac{1}{1296} \text{diagram 6} \right\} + o(g^6). \quad (4.16)$$

$$E_{3D} = \frac{3}{2} \hbar \omega - \lim_{T \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{72} \text{---} + \frac{1}{1728} \text{---} + \frac{1}{5184} \text{---} \right\} + o(g^6). \quad (4.17)$$

En utilisant (2.50) et en substituant les résultats (A-4) et (A-7) de l'annexe A, les expressions analytique des spectres d'énergie aux basses températures, $\beta \rightarrow \infty$, sont exprimées par :

$$E_{2D}^{(0)} = \hbar \omega + \frac{5g^2 \hbar^2}{24M^3 \omega^4} - \frac{223g^4 \hbar^3}{864M^6 \omega^9} + o(g^6). \quad (4.18)$$

$$E_{3D}^{(0)} = \frac{3}{2} \hbar \omega + \frac{g^2 \hbar^2}{24M^3 \omega^4} - \frac{7g^4 \hbar^3}{576M^6 \omega^9} + o(g^6). \quad (4.19)$$

4.3. Méthode perturbative de Bender-Wu : Relations de récurrences

Les équations de Schrödinger correspondantes aux potentiels anharmoniques (4.1) et (4.2) sont respectivement données par :

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{2D}^2 \psi(x, y) + \left(\frac{M\omega^2}{2} (x^2 + y^2) + i g x y^2 \right) \psi(x, y) = E_{2D} \psi(x, y). \quad (4.20)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{3D}^2 \psi(x, y, z) + \left(\frac{M\omega^2}{2} (x^2 + y^2 + z^2) + i g x y z \right) \psi(x, y, z) = E_{3D} \psi(x, y, z). \quad (4.21)$$

Les fonctions d'onde d'essai sont exprimées par :

$$\psi(x, y) = N \exp \left[-\frac{M\omega^2}{2} (x^2 + y^2) + \phi(x, y) \right]. \quad (4.22)$$

$$\psi(x, y, z) = N \exp \left[-\frac{M\omega^2}{2} (x^2 + y^2 + z^2) + \phi(x, y, z) \right]. \quad (4.23)$$

où les fonctions d'onde $\phi(x, y)$ et $\phi(x, y, z)$ sont exprimées en termes de séries en puissance de la constante de couplage g :

$$\phi(x_\alpha) = \sum_{k=1}^{\infty} g^k \phi_k(x_\alpha), \quad (\alpha = 1, 2, 3). \quad (4.24)$$

En substituant (4.22) et (4.23) dans les expressions (4.20) et (4.21) et en identifiant les termes égaux en puissance de g , on déduit les équations différentielles en $\phi_k(x, y)$ et $\phi_k(x, y, z)$ en se plaçant dans le système des unités naturelles ($\hbar = \omega = M = 1$):

$$-\frac{1}{2}\nabla_{2D}^2\phi_k(x,y)+x\partial_x\phi_k(x,y)+y\partial_y\phi_k(x,y)+igxy^2\delta_{k,1} \\ -\frac{1}{2}\left[\sum_{l=1}^{k-1}\partial_x\phi_{k-l}(x,y)\cdot\partial_x\phi_l(x,y)+\partial_y\phi_{k-l}(x,y)\cdot\partial_y\phi_l(x,y)\right]=\varepsilon_k^{(2D)} \quad (4.25)$$

$$-\frac{1}{2}\nabla_{3D}^2\phi_k(x,y,z)+x\partial_x\phi_k(x,y,z)+y\partial_y\phi_k(x,y,z)+z\partial_z\phi_k(x,y,z)+igxyz\delta_{k,1} \\ -\frac{1}{2}\left[\sum_{l=1}^{k-1}\partial_x\phi_{k-l}(x,y)\cdot\partial_x\phi_l(x,y)+\partial_y\phi_{k-l}(x,y)\cdot\partial_y\phi_l(x,y)+\partial_z\phi_{k-l}(x,y)\cdot\partial_z\phi_l(x,y)\right]=\varepsilon_k^{(3D)} \quad (4.26)$$

où nous avons utilisé l'abréviation $\partial_{x_\alpha} \equiv \frac{\partial}{\partial x_\alpha}$.

L'énergie de l'état fondamental dans la théorie des perturbations est exprimée généralement par les séries :

$$E_{2D} = \hbar\omega + \sum_{k=1}^{\infty} g^k \varepsilon_k^{(2D)} \quad (4.27)$$

$$E_{3D} = \frac{3\hbar\omega}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} g^k \varepsilon_k^{(3D)} \quad (4.28)$$

Pour résoudre les équations différentielles (4.25) et (4.26), nous écrivons les fonctions $\phi_k(x,y)$ et $\phi_k(x,y,z)$ sous forme de polynômes vérifiant, respectivement, les identités suivantes :

$$\phi_k(x,y) = \sum_{j,m=0}^k a_{j,m}^{(k)} x^j y^{2m} \quad (4.29)$$

$$\phi_k(x,y,z) = \sum_{j,m,n=0}^k a_{j,m,n}^{(k)} x^j y^m z^n \quad (4.30)$$

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

Les coefficients $a_{j,m}^{(k)}, a_{j,m,n}^{(k)}$ sont déduits en insérant (4.29) et (4.30), respectivement, dans (4.25) et (4.26), leurs valeurs ainsi que le coefficient d'énergie correspondant sont données ci-dessus à 2-boucles.

- 2-D

Pour $k=1$:

$$a_{11}^{(1)} = a_{10}^{(1)} = -\frac{i}{3}, \quad a_{01}^{(1)} = 0 \quad (4.31)$$

Pour $k = 2$:

$$a_{10}^{(2)} = a_{11}^{(2)} = a_{12}^{(2)} = a_{22}^{(2)} = 0, \quad a_{20}^{(2)} = -\frac{1}{36}, \quad a_{21}^{(2)} = -\frac{1}{18}, \quad a_{02}^{(2)} = -\frac{1}{72}, \quad a_{01}^{(2)} = -\frac{1}{8}. \quad (4.32)$$

• 3-D

pour $k = 1$:

$$a_{100}^{(1)} = a_{101}^{(1)} = a_{110}^{(1)} = a_{011}^{(1)} = a_{001}^{(1)} = a_{010}^{(1)} = 0, \quad a_{111}^{(1)} = -\frac{i}{3}. \quad (4.33)$$

pour $k = 2$:

$$a_{220}^{(2)} = a_{202}^{(2)} = a_{200}^{(2)} = a_{022}^{(2)} = a_{020}^{(2)} = a_{002}^{(2)} = -\frac{1}{72}; \quad \text{tous les autres : } a_{j,m,n}^{(2)} = 0. \quad (4.34)$$

Pour $k \geq 3$, les relations de récurrences liant les coefficients $a_{(j,m,n)}^{(k)}$ et l'énergie $\mathcal{E}_k^{(2D,3D)}$ sont exprimées par :

• 2-D :

$$a_{j,m}^{(k)} = \frac{1}{2(j+m)} \left[a_{j-1,m-1}^{(k-1)} - 2 \sum_{l=1}^k (a_{2,0}^{(l)} + a_{0,2}^{(l)}) a_{j,m}^{(k-l)} + (j+1)(j+2) a_{j+2,m}^{(k)} + (m+1)(m+2) a_{j,m+2}^{(k)} \right] \quad (4.35)$$

$$\mathcal{E}_k^{(2D)} = \frac{1}{2} (-1)^{k+1} (a_{2,0}^{(2k)} + a_{0,2}^{(2k)}). \quad (4.36)$$

• 3-D

$$a_{j,m,n}^{(k)} = \frac{1}{2(j+m+n)} \left[a_{j-1,m-1,n-1}^{(k-1)} - 2 \sum_{l=1}^k (a_{2,0,0}^{(l)} + a_{0,2,0}^{(l)} + a_{0,0,2}^{(l)}) a_{j,m,n}^{(k-l)} + (j+1)(j+2) a_{j+2,m,n}^{(k)} + (m+1)(m+2) a_{j,m+2,n}^{(k)} + (n+1)(n+2) a_{j,m,n+2}^{(k)} \right]. \quad (4.37)$$

$$\mathcal{E}_k^{(3D)} = \frac{1}{2} (-1)^{k+1} (a_{2,0,0}^{(2k)} + a_{0,2,0}^{(2k)} + a_{0,0,2}^{(2k)}). \quad (4.38)$$

Les valeurs des coefficients du spectre d'énergie sont consignées dans les tableaux 4.1 et 4.2 ci-dessous pour k allant de 1 à 10. Il est dès lors intéressant de constater la concordance entre les coefficients $\mathcal{E}_k^{(2D,3D)}$ donnés dans les tableaux 4.1 et 4.2 et ceux établis par les diagrammes de Feynman exprimés dans les expressions (4.18) et (4.19) à l'ordre g^4 .

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 4.1 : les coefficients du spectre d'énergie du hamiltonien (4.1)

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	$\frac{8034211571}{752467968000}$

Tableau4.2 : les coefficients du spectre d'énergie du hamiltonien (4.2)

4.4. Procédure de Resommation :

La procédure de resommation est une technique mathématique qui permet de transformer des séries perturbatives divergentes aux faibles couplages en séries non perturbatives convergentes aux forts couplages. Les séries en question sont celles des spectres d'énergie aux faibles couplages (4.18) et (4.19), le traitement aux forts couplages s'effectue, donc, par la substitution suivante :

$$x_\alpha \rightarrow x_\alpha g^{-1/5}. \quad (4.39)$$

où $(x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$ et l'exposant (1/5) caractérise les potentiels complexes cubiques à D -dimensions. Dans cette section, nous appliquons la procédure de la resommation à 2-boucles. L'équation de Schrödinger correspondante aux potentiels (4.1) et (4.2), tenant compte de (4.39), s'écrit respectivement :

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{2D}^2 \psi(x, y) + \left(\frac{M\omega^2}{2} g^{-\frac{4}{5}} (x^2 + y^2) + ixy^2 \right) \psi(x, y) = g^{-\frac{2}{5}} E_{2D} \psi(x, y). \quad (4.40)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{3D}^2\psi(x,y,z)+\left(\frac{M\omega^2}{2}g^{-\frac{4}{5}}(x^2+y^2+z^2)+ixyz\right)\psi(x,y,z)=g^{-\frac{2}{5}}E_{3D}\psi(x,y,z). \quad (4.41)$$

Les fonctions d'onde d'essai ainsi que les spectres d'énergie sont donnés aux forts couplages, respectivement, par :

$$\psi(x,y)=\psi_0(x,y)+g^{-\frac{4}{5}}\psi_1(x,y)+g^{-\frac{8}{5}}\psi_2(x,y)+\dots \quad (4.42)$$

$$\psi(x,y,z)=\psi_0(x,y,z)+g^{-\frac{4}{5}}\psi_1(x,y,z)+g^{-\frac{8}{5}}\psi_2(x,y,z)+\dots \quad (4.43)$$

$$E_D=g^{\frac{2}{5}}b_0+g^{-\frac{2}{5}}b_1+g^{-\frac{6}{5}}b_2+\dots ; \quad D=2,3. \quad (4.44)$$

4.4.1. Resommation de l'énergie de l'état fondamental :

Avant de passer à la procédure de resommation de l'énergie de l'état fondamental aux forts couplages, il est impératif de connaître les expressions de l'énergie aux faibles couplages. Nous traiterons comme exemple la resommation qu'au second ordre en g , les expressions (4.18) et (4.19) donnent :

$$E_{2D}^{(0)}=\hbar\omega+\frac{5g^2\hbar^2}{24M^3\omega^4}+o(g^4). \quad (4.45)$$

$$E_{3D}^{(0)}=\frac{3}{2}\hbar\omega+\frac{g^2\hbar^2}{24M^3\omega^4}+o(g^4). \quad (4.46)$$

En substituant $g^2 \rightarrow \alpha$, les expressions (4.45) et (4.46) s'écrivent :

$$E_{2D}^{(0)}=\omega\left(\hbar+\frac{5\alpha\hbar^2}{24M^3\omega^5}\right)+o(g^4). \quad (4.47)$$

$$E_{3D}^{(0)}=\omega\left(\frac{3\hbar}{2}+\frac{\alpha\hbar^2}{24M^3\omega^5}\right)+o(g^4). \quad (4.48)$$

La précision du calcul du spectre d'énergie (4.44) aux forts couplages est liée à l'ordre du calcul perturbatif, il est donc important d'écrire (4.44) à l'ordre N en α , en d'autres termes :

$$E^{(N)}=g^{\frac{2}{5}}b_0^{(N)}+g^{-\frac{2}{5}}b_1^{(N)}+g^{-\frac{6}{5}}b_2^{(N)}+\dots \quad (4.49)$$

En introduisant le paramètre de Kleinert formulé dans l'expression :

$$\omega \rightarrow \Omega\sqrt{1+\alpha r}, \quad (4.50)$$

où

$$r = \frac{\omega^2 - \Omega^2}{\alpha \Omega^2}, \quad (4.51)$$

et en l'appliquant sur (4.47) et (4.48), on aboutit à des nouvelles expressions d'énergies au premier ordre en α , en fonction du paramètre variationnel Ω :

$$E_{2D}^{(1)}(\alpha, \omega, \Omega) = \frac{\hbar \Omega}{2} + \frac{\hbar \omega^2}{2 \Omega} + \alpha \frac{5\hbar^2}{24\Omega^4} + o(\alpha^2). \quad (4.52)$$

$$E_{3D}^{(1)}(\alpha, \omega, \Omega) = \frac{3\hbar \Omega}{2} + \frac{3\hbar \omega^2}{4 \Omega} + \alpha \frac{\hbar^2}{24\Omega^4} + o(\alpha^2). \quad (4.53)$$

En minimisant les énergies $E_{2D}^{(1)}(\alpha, \omega, \Omega)$ et $E_{3D}^{(1)}(\alpha, \omega, \Omega)$ par rapport à Ω , on déduit les équations correspondantes par rapport à Ω , noté $\Omega^{(1)}$:

- 2-D

$$\frac{\hbar}{2} - \frac{\hbar}{2} \omega^2 \left(\frac{1}{\Omega^{(1)}} \right)^2 - \alpha \frac{5}{24} \hbar^2 \left(\frac{4}{\Omega^{(1)5}} \right) = 0. \quad (4.54)$$

- 3-D

$$\frac{3\hbar}{4} - \frac{\hbar}{4} \omega^2 \left(\frac{1}{\Omega^{(1)}} \right)^2 - \alpha \frac{1}{24} \hbar^2 \left(\frac{4}{\Omega^{(1)5}} \right) = 0. \quad (4.55)$$

Pour résoudre chacune des équations en $\Omega^{(1)}$, nous identifions cette dernière à celle de l'énergie au premier ordre, c'est-à-dire :

$$\Omega^{(1)} = \alpha^{\frac{1}{5}} \left(\Omega_0^{(1)} + \Omega_1^{(1)} \alpha^{-\frac{1}{5}} + \Omega_2^{(1)} \alpha^{-\frac{3}{5}} + \dots \right). \quad (4.56)$$

et en substituant (4.56) dans (4.54) et (4.55), on obtient :

- 2D :

$$\Omega_0^{(1)} = \sqrt[5]{\frac{5\hbar}{3}}, \quad \Omega_1^{(1)} = \frac{\omega^2}{5} \sqrt[5]{\frac{3}{5\hbar}}, \quad \Omega_2^{(1)} = \frac{\omega^4}{25} \sqrt[5]{\frac{27}{125\hbar^3}}, \quad (4.57)$$

- 3D :

$$\Omega_0^{(1)} = \sqrt[5]{\frac{2\hbar}{9}}, \quad \Omega_1^{(1)} = \frac{\omega^2}{5} \sqrt[5]{\frac{9}{2\hbar}}, \quad \Omega_2^{(1)} = \frac{3\omega^4}{25} \sqrt[5]{\frac{3}{8\hbar^3}}. \quad (4.58)$$

En réinsérant (4.49) dans (4.47) et (4.48) et en la comparant à (4.44) pour $N = 1$, nous déduisons les coefficients $b_i^{(1)}$ ($i = 0, 1, 2$) correspondant aux énergies à l'état fondamental $E_{2D,3D}^{(1)}$ aux forts couplages :

- 2D :

$$b_0^{(1)} = \frac{5}{8} \sqrt[5]{\frac{5\hbar^6}{3}} = 0.69222 \hbar^{6/5}, \quad b_1^{(1)} = \frac{\omega^2}{2} \sqrt[5]{\frac{3\hbar^4}{5}}, \quad b_2^{(1)} = \frac{\omega^4}{20} \sqrt[5]{\frac{3\hbar^2}{5}}. \quad (4.59)$$

- 3D :

$$b_0^{(1)} = \frac{5}{8} \sqrt[5]{\frac{27\hbar^6}{16}} = 0.69395 \hbar^{6/5}, \quad b_1^{(1)} = \frac{3\omega^2}{4} \sqrt[5]{\frac{9\hbar^4}{2}}, \quad b_2^{(1)} = \frac{-9\omega^4}{40} \sqrt[5]{\frac{3\hbar^2}{8}}. \quad (4.60)$$

Cependant, les valeurs numériques des spectres d'énergies obtenues en (4.59) et (4.60) aux forts couplages s'avèrent être inférieures à celles calculées aux faibles couplages (en effet, $E_{2D}^{(0)} \approx 1$ et $E_{3D}^{(0)} \approx 1.5$, voir Eqs.(4.18) et (4.19)). Ainsi, la convergence de la théorie des perturbations variationnelles est peu satisfaisante. Suivant la référence [38], les coefficients $b_0^{(1)}(2D,3D)$ doivent être supérieurs à ceux déduits aux faibles couplages.

4.5. Potentiel effectif à D-dimensions :

Pour un potentiel donné, le potentiel effectif correspondant est généralement déduit de l'action effective dépendant du paramètre du chemin moyen X_α où $X_\alpha = (X, Y, Z)$ pour $\alpha = 1, 2, 3$ dans le cas particulier d'un courant externe constant, Il est défini comme étant la transformation de Legendre de l'énergie libre. Aux basses températures, le potentiel effectif se réduit à l'énergie de l'état fondamental, il permet de donner des résultats très proches des résultats attendus pour les énergies de l'état fondamental non perturbé de oscillateur harmonique 2-et 3-dimensions. Aux faibles couplages, Le développement du potentiel effectif en termes de \hbar , il est donné, pour des potentiels à D -Dimension à l -boucles, par :

$$\begin{aligned} V_{eff}(X_\alpha) &\equiv \sum_{l=0}^{\infty} \hbar^l V^{(l)}(X_\alpha) \\ &= V(X_\alpha) + \frac{\hbar}{2} \sum_{\alpha} tr \ln G_{X_\alpha}^{-1} + V^{(int)}(X_\alpha) \end{aligned}, \quad (4.61)$$

où les fonctions $\frac{\hbar}{2} \sum_{\alpha} \text{tr} \ln G_{X_{\alpha}}^{-1}$ donnent l'énergie de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique aux différents chemins moyens X_{α} , elles sont liées aux fréquences d'essai partielles $\tilde{\omega}_X, \tilde{\omega}_Y$ et $\tilde{\omega}_Z$ par :

$$\frac{\hbar}{2} \text{tr} \ln G_{X_{\alpha}}^{-1} \equiv \frac{\hbar \tilde{\omega}_{X_{\alpha}}}{2} = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\partial_{X_{\alpha}}^2 V_{2D,3D}(X_{\alpha})} \quad , \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (4.62)$$

La fréquence d'essai totale est alors définie comme étant la norme des fréquences partielles, elle est donnée par :

$$\tilde{\omega}_D = \sqrt{\sum_{\alpha} \tilde{\omega}_{X_{\alpha}}^2}. \quad (4.63)$$

$V^{(\text{int})}(X_{\alpha})$, dit potentiel d'interaction, contient tous les diagrammes de Feynman à une particule irréductible non tronquée.

4.5.1. Spectre d'énergie aux faibles couplages :

Le spectre d'énergie de l'état fondamental aux faibles couplages de (4.1) et (4.2), calculé par le potentiel effectif, est déduit par la substitution des expressions (4.62) et (4.63) dans (4.61) en tenant compte des potentiels d'interaction qui contiennent uniquement les diagrammes de Feynman à une particule irréductible non tronquée. La base des unités naturelles est appliquée pour $M = 1$.

Les fréquences d'essai totale des potentiels (4.1) et (4.2) sont données par :

$$\tilde{\omega}_{2D} = \sqrt{2\omega^2 + 2i gX}. \quad (4.64)$$

$$\tilde{\omega}_{3D} = \sqrt{3}\omega. \quad (4.65)$$

Les termes des potentiels d'interaction $V_{2D,3D}^{(\text{int})}(X_{\alpha})$ sont :

$$V^{(\text{int})}(X, Y) = -\lim_{T \rightarrow 0} k_B T \left\{ \frac{1}{36} \text{Diagram 1} + \frac{5}{1296} \text{Diagram 2} + \frac{1}{648} \text{Diagram 3} \right\} + o(\hbar^4). \quad (4.66)$$

$$V^{(\text{int})}(X, Y, Z) = -\lim_{T \rightarrow 0} k_B T \left\{ \frac{1}{72} \text{Diagram 1} + \frac{1}{1728} \text{Diagram 2} + \frac{1}{5184} \text{Diagram 3} \right\} + o(\hbar^4). \quad (4.67)$$

Ces diagrammes sont déduits à partir des règles de Feynman données par :

- Chaque ligne est représentée par la fonction de Green :

$$G_{\omega}(\tau_i, \tau_j) \longrightarrow i \bullet \text{---} \bullet j \quad (4.68)$$

- Chaque vertex a 3-lignes sortantes, et est représenté par :

$$\frac{-D}{\hbar} \left[\sum_{\alpha=i,j,k}^D \partial_i \partial_j \partial_k V(X_\alpha) \right] \longrightarrow \text{Y-junction diagram} \quad (4.69)$$

En substituant les expressions (4.64)-(4.67) dans (4.61) et en tenant compte des règles de Feynman (4.68) et (4.69), les expressions du potentiel effectif aux basses températures sont exprimées par :

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow 0} V_{\text{eff}}(X, Y) &= \frac{\omega^2}{2} (X^2 + Y^2) + igXY^2 + \frac{\hbar}{2} \omega + \frac{\hbar}{2} \sqrt{\omega^2 + 2igX} + \frac{\hbar^2 g^2}{3(2\omega^2 + 2igX)^2} \\ &\quad - \left[\frac{2}{3} \cdot \frac{1}{648} + \frac{22}{27} \cdot \frac{5}{1296} \right] \cdot \frac{4 \cdot 3^4 \cdot \sqrt{2} \hbar^3 g^4}{(2\omega^2 + 2igX)^{9/2}} + o(\hbar^4). \end{aligned} \quad (4.70)$$

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow 0} V_{\text{eff}}(X, Y, Z) &= \frac{\omega^2}{2} (X^2 + Y^2 + Z^2) + igXYZ + \frac{3\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar^2}{24\omega^4} \\ &\quad - \left[\frac{2}{3} \cdot \frac{1}{5184} + \frac{22}{27} \cdot \frac{1}{1728} \right] \cdot \frac{3^4 \hbar^3 g^4}{4\omega^9} + o(\hbar^4). \end{aligned} \quad (4.71)$$

En minimisant (4.70) et (4.71) par rapport aux paramètres X_α , et en substituant ce dernier par :

$$X_\alpha = i(X_{\alpha 0} + \hbar X_{\alpha 1} + \hbar^2 X_{\alpha 2}), \quad (4.72)$$

on retrouve un système d'équations en fonction de $X_{\alpha 0}$, $X_{\alpha 1}$ et $X_{\alpha 2}$, et dont les solutions sont données par :

- 2D :

$$\begin{cases} X_{10} \equiv X_0 = 0, & X_{11} \equiv X_1 = -g/2\omega^3, & X_{12} \equiv X_2 = 5g^3/12\omega^8 \\ X_{20} \equiv Y_0 = 0, & X_{21} \equiv Y_1 = 0, & X_{22} \equiv Y_2 = 0. \end{cases} \quad (4.73)$$

- 3D :

$$X_{\alpha k} = 0, \quad k = 0, 1, 2. \quad (4.74)$$

En insérant de nouveau les résultats obtenus dans (4.73) et (4.74) dans les expressions des potentiels effectifs (4.70) et (4.71), on déduit les expressions analytiques des énergies de l'état fondamental aux basses températures, $T \rightarrow 0$:

- 2-D :

$$E_{2D}^{(0)} = \hbar\omega + \frac{5}{24} \frac{\hbar^2 g^2}{\omega^4} - \frac{223}{864} \frac{\hbar^3 g^4}{\omega^9} + o(\hbar^4). \quad (4.75)$$

- 3-D :

$$E_{3D}^{(0)} = \frac{3}{2} \hbar \omega + \frac{1}{24} \frac{\hbar^2 g^2}{\omega^4} - \frac{7}{576} \frac{\hbar^3 g^4}{\omega^9} + o(\hbar^4). \quad (4.76)$$

Remarquons que les expressions (4.75) et (4.76) sont identiques à celles calculées dans les parties précédentes (voir les équations (4.18) et (4.19)).

4.5.2. Resommation du potentiel effectif : spectre d'énergie aux forts couplages

Le calcul du spectre d'énergie aux faibles couplage a donnée de bonnes résultats par la théorie du potentiel effectif, Il est donc intéressant de refaire les calculs en combinant le concept du potentiel effectif à la théorie des perturbations variationnelles, en vue de l'amélioration des résultats (4.59) et (4.60), et ceci par introduction d'un nouveau paramètre variationnel Ω , et qui de plus des paramètres des chemins moyens X_α , permettent de traiter la convergence des coefficients $b_0^{(1)}$ aux forts couplages. La resommation du potentiel effectif est traitée ici uniquement pour $l=1$ -boucles. Le potentiel effectif (4.61) est développé en puissance de \hbar , il est donc le paramètre de Kleinert est exprimé en terme de \hbar au lieu de la constante de couplage g , il est donné par:

$$\omega \longrightarrow \Omega \sqrt{1 + \hbar r}, \quad (4.77)$$

où

$$r = \frac{\omega^2 - \Omega^2}{\hbar \Omega^2}. \quad (4.78)$$

Le paramètre variationnel Ω est lié à la fréquence d'essai totale par les expressions (4.64) et (4.65), il est donné par :

- 2-D

$$\Omega_{2D} \equiv \tilde{\omega}_{2D} = \sqrt{2\omega^2 + 2igX}. \quad (4.79)$$

- 3-D

$$\Omega_{3D} \equiv \tilde{\omega}_{3D} = \sqrt{3}\Omega. \quad (4.80)$$

En substituant le paramètre de Kleinert (4.77) dans les expressions des potentiels effectifs donnés en (4.70) et (4.71) en tenant compte de (4.78) au premier ordre de \hbar , on obtient :

$$V_{eff}^{(2D)}(X, Y) = \frac{\omega^2}{2}(X^2 + Y^2) + i g X Y^2 + \frac{\hbar \Omega}{2} + \frac{\hbar}{2} \sqrt{\Omega^2 + 2i g X}. \quad (4.81)$$

$$V_{eff}^{(3D)}(X, Y, Z) = \frac{\omega^2}{2}(X^2 + Y^2 + Z^2) + i g X Y Z + \frac{3 \hbar \Omega}{2}. \quad (4.82)$$

L'énergie de l'état fondamental est obtenue en minimisant les équations (4.81) et (4.82) par rapport aux paramètres Ω et X_α en tenant compte des expressions de $\Omega_\alpha^{(l)}$, $\alpha = 0, 1, 2$, données en (4.57) et (4.58). Pour accéder à la procédure de la resommation en \hbar du potentiel effectif aux forts couplages, nous appliquerons les mêmes étapes suivies dans la section (4.4).

Pour cela, nous écrivons les paramètres X_α à $l = 1$ -boucle sous la forme :

$$X_\alpha = -i g^{-1/5} (X_{\alpha 0} + X_{\alpha 1} g^{-4/5} + X_{\alpha 2} g^{-8/5} + \dots). \quad (4.83)$$

Les coefficients $X_{\alpha k}$ où $\alpha = 1, 2, 3$ et $k = 0, 1, 2$ sont obtenus en substituant (4.83) ainsi que (4.79) et (4.80) dans (4.81) et (4.82), on obtient :

- 2-D :

$$\begin{cases} X_0 = 0.417288 \hbar^{6/5}, & X_1 = -0.245404 \omega^2, & X_2 = 0.063624 \omega^2 \hbar^{-6/5} \\ Y_0 = \sqrt{2} X_0, & Y_1 = \sqrt{2} X_1, & Y_2 = \sqrt{2} X_2 \end{cases}. \quad (4.84)$$

- 3-D :

La minimisation du potentiel effectif (4.82) par rapport à Ω donne une constante non nulle égale $3\hbar/2$, ainsi le problème à 3-D nécessite un traitement spécial. Pour éliminer cette ambiguïté, nous proposons de substituer le paramètre variationnel Ω par :

$$\Omega \longrightarrow \sqrt{\Omega^2 + 2i g \lambda X}; \quad \lambda \ll 1. \quad (4.85)$$

En appliquant le développement asymptotique au voisinage de zéro ($\lambda \rightarrow 0$), et en substituant le résultat obtenu dans (4.82) et en minimisant par rapport à X_α , on obtient :

- 3-D :

$$\begin{cases} X_0 = \frac{1}{\lambda} \sqrt[5]{\frac{\hbar^2}{648}}; & X_1 = \frac{\omega^2}{5\lambda}; & X_2 = \frac{\omega^2 (20 + \sqrt[5]{648} \omega^2)}{100\lambda} \hbar^{-6/5} \\ Y_0 = 0; & Y_1 = \omega^2; & Y_2 = \hbar^{-6/5} \\ Z_0 = -\frac{1}{\lambda} \sqrt[5]{\frac{\hbar^2}{648}}; & Z_1 = -\frac{\omega^2}{5\lambda}; & Z_2 = -\frac{3\omega^4}{50\lambda} \sqrt[5]{\frac{81}{5\hbar^6}} \end{cases}. \quad (4.86)$$

En insérant de nouveau les expressions (4.84)-(4.86) dans (4.83) ensuite dans (4.81) et (4.82), respectivement, et en comparant les résultats obtenus aux basses températures avec l'expression de l'énergie (4.44), on obtient les coefficients $b_0^{(1)}$ de l'énergie à l'état fondamental aux forts couplages pour les potentiels (4.1) et (4.2) donnés par :

- 2-D :

$$b_0^{(1)} \approx 1.1263168 \hbar^{6/5}. \quad (4.87)$$

- 3-D :

$$b_0^{(1)} = \frac{3^{3/5}}{2^{3/10}} \hbar^{6/5} \approx 1.5702317 \hbar^{6/5}. \quad (4.88)$$

On constate que les nouvelles valeurs numériques déduites en (4.87) et (4.88) sont en parfait accord avec les résultats attendus pour les énergies de l'état fondamental non perturbé de oscillateur harmonique 2- et 3-dimensions.

4.5.3. Résultats et discussions :

Dans ce mémoire, nous avons déterminé les spectres d'énergie de l'état fondamental des potentiels complexes multidimensionnels PT -symétrique, aux faibles et forts couplages g .

Dans le cas des faibles couplages, on a déterminé les mêmes expressions des spectres d'énergies (4.18) et (4.19) de l'état fondamental en termes de la constante de couplage g pour les potentiels complexes multidimensionnels aux faibles couplages ($g \rightarrow 0$) par l'utilisation de chacune des trois méthodes citées précédemment.

Par ailleurs, le spectre d'énergie aux forts couplages ($g \rightarrow \infty$) a été déterminé grâce à l'utilisation d'une technique mathématique dite : procédure de resommation, introduite pour éliminer la divergence des spectres d'énergie. Les résultats obtenus en (4.59) et (4.60) à travers la resommation des expressions des spectres d'énergie aux faibles couplages ne correspondent pas aux résultats attendus pour l'énergie de l'oscillateur harmonique à 2- et 3-dimensions et conduisent à une mauvaise estimation de l'énergie aux forts couplages. Ceci est dû à notre avis à la nature de la procédure, c'est-à-dire, la lente convergence de la série d'énergie obtenue après resommation.

Il est clair que les résultats obtenus dans la section 4.5 lors de la resommation du potentiel effectif en \hbar conduisent ; d'une part aux expressions (4.75) et (4.76) identiques à celles obtenues, respectivement, en (4.18) et (4.19) pour le cas des faibles couplage. D'autre part, aux grandes valeurs de g (forts couplages), cette resommation donne des résultats très proches des résultats attendus pour les énergies de l'état fondamental non perturbé de oscillateur harmonique 2- et 3-dimensions (4.87) et (4.88), respectivement.

CONCLUSION

Nous avons déduit les spectres d'énergie de l'état fondamental en série de g dans le cas des faibles couplages par un traitement perturbatif pour les potentiels complexes multidimensionnels (4.1) et (4.2) en utilisant : les diagrammes de Feynman connectés [38] et les relations de récurrence de Bender-Wu [38] ainsi que le traitement perturbatif des potentiels effectifs. On constate que les résultats ainsi obtenus sont en parfaite concordance avec ceux donnés par la théorie des perturbations variationnelles pour les matrices de densité.

La procédure de resommation permet de traiter la transition des séries d'énergies perturbatives divergentes aux faibles couplages en séries non perturbatives convergentes aux forts couplages en utilisant le paramètre de convergence de Kleinert [38] en terme de la constante de couplage g aux séries d'énergies obtenues aux faibles couplages. Cependant, les coefficients $b_{0,D}^{(1)}$ déduits sont largement inférieurs à ceux calculés aux faibles couplages, ainsi, le taux d'accélération de la convergence est moins satisfaisant. Le concept du potentiel effectif dépendant du paramètre variationnel du chemin moyen a été introduit et, une fois combiné à la théorie des perturbations variationnelles, conduit aux résultats obtenus aux faibles couplages (4.18) et (4.19). Afin de restaurer la convergence aux forts couplages, nous avons procédé à la resommation du potentiel effectif correspondant en introduisant le paramètre de Kleinert en terme de la constante de Planck \hbar au lieu de la constante de couplage g déjà utilisée, les coefficients $b_{0,D}^{(1)}$ obtenus en (4.87) et (4.88) s'avèrent être en accord avec les résultats espérés, cette resommation donne des résultats très proches des résultats attendus pour les énergies de l'état fondamental non perturbé de oscillateur harmonique 2- et 3-dimensions.

Comme perspectives futures : il est intéressant d'appliquer le concept du potentiel effectif à une particule ayant une masse dépendante de la position se mouvant dans un potentiel complexe Multi-dimensionnel.

Annexe A

A.1. Intégrales pour les températures arbitraires :

La fonction de Green de l'oscillateur harmonique $G_{\Omega}(\tau_1, \tau_2)$ est donnée par (2.50) :

$$G_{\omega}(\tau_1, \tau_2) = \frac{\hbar}{2M\omega} \frac{\cosh(\omega|\tau_1 - \tau_2| - \hbar\beta/2)}{\sinh(\hbar\beta\omega/2)}. \quad (\text{A.1})$$

L'expression de l'énergie libre donnée par (2.160) à 2-boucles conduit à évaluer l'intégrale double suivante :

$$I_1 = \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \cosh\left(\omega|\tau_1 - \tau_2| - \frac{\hbar\beta\omega}{2}\right). \quad (\text{A.2})$$

La valeur absolue dans (A.2) permet de décomposer l'intégrale en deux intégrales doubles :

$$I_1 = \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cosh\left(\omega(\tau_1 - \tau_2) - \frac{\hbar\beta\omega}{2}\right) + \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cosh\left(\omega(\tau_2 - \tau_1) - \frac{\hbar\beta\omega}{2}\right). \quad (\text{A.3})$$

En effectuant la permutation $\tau_1 \leftrightarrow \tau_2$ dans la deuxième intégrale double, on obtient :

$$I_1 = 2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cosh\left(\omega(\tau_1 - \tau_2) - \frac{\hbar\beta\omega}{2}\right) = \frac{2\hbar\beta}{\omega} \sinh\left(\frac{\hbar\beta\omega}{2}\right). \quad (\text{A.4})$$

Le propagateur d'un potentiel arbitraire (2.131) est obtenu en introduisant la fréquence (2.130), il a la même forme que le propagateur de l'oscillateur harmonique (2.50), par conséquent, les résultats précédents peuvent être appliqués pour calculer le potentiel effectif (2.139) et l'énergie libre (2.160). Dans les deux cas, l'intégrale double est donnée par

$$I_2 = \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cosh^3\left(\omega|\tau_1 - \tau_2| - \frac{\hbar\beta\omega}{2}\right). \quad (\text{A.5})$$

Comme précédemment, l'intégrale I_2 se décompose en deux intégrales doubles :

$$I_2 = 2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cosh^3 \left(\omega |\tau_1 - \tau_2| - \frac{\hbar\beta\omega}{2} \right), \quad (\text{A.6})$$

on obtient :

$$I_2 = \frac{2\hbar\beta}{\Omega} \left[\sinh \left(\frac{\hbar\beta\Omega}{2} \right) + \frac{1}{3} \sinh^3 \left(\frac{\hbar\beta\Omega}{2} \right) \right]. \quad (\text{A.7})$$

A.2. l'intégrale aux basses températures :

Aux basses températures, $T \rightarrow 0$, le propagateur $G_\Omega(\tau_1, \tau_2)$ est donnée par (2.132) :

$$\lim_{T \rightarrow 0} G_\Omega(\tau_1, \tau_2) = \frac{\hbar}{2M\Omega} \exp(-\Omega |\tau_1 - \tau_2|). \quad (\text{A.8})$$

La détermination du potentiel effectif aux basses températures à $l=3$ -boucles se fait par évaluation analytique des diagrammes de Feynman (2.103), qui sont régis par les règles de Feynman (2.161) et (2.162), et conduit aux intégrales multiples standard. La multiplicité d'une intégrale (double, triple, ...) est déterminée selon le nombre de vertex qui composent le diagramme de Feynman. A deux vertex, l'intégrale étant double et est donnée par :

$$I(n_{12}) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \exp(-n_{12}\Omega |\tau_1 - \tau_2|). \quad (\text{A.9})$$

Un diagramme à trois vertex correspond à une intégrale triple :

$$I(n_{12}, n_{13}, n_{23}) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_3 \exp(-n_{12}\Omega |\tau_1 - \tau_2| - n_{13}\Omega |\tau_1 - \tau_3| - n_{23}\Omega |\tau_2 - \tau_3|), \quad (\text{A.10})$$

quant au diagramme à quatre vertex lui correspond une intégrale quartique :

$$I(n_{12}, n_{13}, n_{14}, n_{23}, n_{24}, n_{34}) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_3 \int_0^{\tau_3} d\tau_4 \exp(-n_{12}\Omega |\tau_1 - \tau_2| - n_{13}\Omega |\tau_1 - \tau_3| - n_{14}\Omega |\tau_1 - \tau_4| - n_{23}\Omega |\tau_2 - \tau_3| - n_{24}\Omega |\tau_2 - \tau_4| - n_{34}\Omega |\tau_3 - \tau_4|), \quad (\text{A.11})$$

où le nombre naturel n_{ij} est le nombre de lignes liant les vertex i et j . Les expressions (A.9)-(A.11) seront évaluées aux basses températures $\beta \rightarrow \infty$, pour cela, l'expression (A.9) est décomposée en deux intégrales ($2! = 2$ contributions) :

$$I(n_{12}) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \exp(-n_{12}\Omega(\tau_1 - \tau_2)) + \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \exp(-n_{12}\Omega(\tau_2 - \tau_1)), \quad (\text{A.12})$$

donc :

$$I(n_{12}) = \frac{2}{n_{12}\Omega} \left[\hbar\beta + \frac{1}{n_{12}\Omega} [\exp(-n_{12}\hbar\beta) - 1] \right] \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{2\hbar\beta}{n_{12}\Omega}. \quad (\text{A.13})$$

L'intégrale triple (A.10) peut être décomposée en à six intégrales (3! = 6 contributions) :

$$I(n_{12}, n_{13}, n_{23}) = J(n_{12}, n_{13}, n_{23}) + J(n_{12}, n_{23}, n_{13}) + J(n_{13}, n_{12}, n_{23}) + J(n_{13}, n_{23}, n_{12}) + J(n_{23}, n_{12}, n_{13}) + J(n_{23}, n_{13}, n_{12}), \quad (\text{A.14})$$

où l'intégrale :

$$J(n_{12}, n_{13}, n_{23}) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \exp[-n_{12}\Omega(\tau_1 - \tau_2) - n_{13}\Omega(\tau_1 - \tau_3) - n_{23}\Omega(\tau_2 - \tau_3)] \quad (\text{A.15})$$

mène à :

$$J(n_{12}, n_{13}, n_{23}) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{\hbar\beta}{\Omega^2 (n_{12} + n_{13})(n_{13} + n_{23})}. \quad (\text{A.16})$$

En substituant (A.16) dans (A.10), en tenant compte de la permutation des n_{ij} , on obtient :

$$I(n_{12}, n_{13}, n_{23}) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{4\hbar\beta}{\Omega^2} \frac{n_{12} + n_{13} + n_{23}}{(n_{12} + n_{13})(n_{12} + n_{23})(n_{13} + n_{23})}. \quad (\text{A.17})$$

L'intégrale quartique (A.11) est résolue de la même manière, mais elle doit être décomposée en 24-intégrales (4! = 24 contributions) :

$$I(n_{12}, n_{13}, n_{14}, n_{23}, n_{24}, n_{34}) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_4 \exp(-n_{12}\Omega(\tau_1 - \tau_2) - n_{13}\Omega(\tau_1 - \tau_3) - n_{14}\Omega(\tau_1 - \tau_4) - n_{23}\Omega(\tau_2 - \tau_3) - n_{24}\Omega(\tau_2 - \tau_4) - n_{34}\Omega(\tau_3 - \tau_4)) + 23 \text{ I.Q.} \quad (\text{A.18})$$

où I.Q. désigne l'abréviation du terme : *Intégrales Quartiques*. La première contribution qui correspond à l'équation (A.18) avec la condition $\tau_1 \geq \tau_2 \geq \tau_3 \geq \tau_4$ est donnée par :

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_4 \exp(-n_{12}\Omega(\tau_1 - \tau_2) - n_{13}\Omega(\tau_1 - \tau_3) - n_{14}\Omega(\tau_1 - \tau_4) - n_{23}\Omega(\tau_2 - \tau_3) - n_{24}\Omega(\tau_2 - \tau_4) - n_{34}\Omega(\tau_3 - \tau_4))$$

$$\xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{\hbar\beta}{\Omega^3 (n_{12} + n_{13} + n_{14})(n_{14} + n_{24} + n_{34})(n_{13} + n_{14} + n_{23} + n_{24})}. \quad (\text{A.19})$$

En évaluant les 23 intégrales quartiques restantes, on obtient le résultat final suivant :

$$\begin{aligned} I(n_{12}, n_{13}, n_{23}, n_{24}, n_{34}) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} & \frac{2\hbar\beta}{\Omega^3} \left\{ \frac{1}{n_{12} + n_{13} + n_{24} + n_{34}} \left[\frac{1}{n_{12} + n_{13} + n_{14}} + \frac{1}{n_{14} + n_{24} + n_{34}} \right] \xi \right. \\ & + \frac{1}{n_{12} + n_{14} + n_{23} + n_{34}} \left[\frac{1}{n_{12} + n_{23} + n_{24}} + \frac{1}{n_{14} + n_{24} + n_{34}} \right] \psi \\ & \left. + \frac{1}{n_{13} + n_{14} + n_{23} + n_{24}} \left[\frac{1}{n_{13} + n_{23} + n_{34}} + \frac{1}{n_{14} + n_{24} + n_{34}} \right] \zeta \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

où les

fonctions $\xi(n_{ij})$, $\psi(n_{ij})$ et $\zeta(n_{ij})$ sont exprimées par :

$$\xi = \frac{1}{n_{12} + n_{23} + n_{24}} + \frac{1}{n_{13} + n_{23} + n_{34}}. \quad (\text{A.21})$$

$$\psi = \frac{1}{n_{12} + n_{13} + n_{14}} + \frac{1}{n_{13} + n_{23} + n_{34}}. \quad (\text{A.22})$$

$$\zeta = \frac{1}{n_{12} + n_{13} + n_{14}} + \frac{1}{n_{12} + n_{23} + n_{24}}. \quad (\text{A.23})$$

Aux basses températures, les intégrales sont indiquées selon le nombre de vertex correspondant:

- 3-vertex :

$$I(2,1,2) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{5\hbar\beta}{9\Omega^2}. \quad (\text{A.24})$$

$$I(1,2,1) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{8\hbar\beta}{9\Omega^2}. \quad (\text{A.25})$$

- 4-vertex :

$$I(1,1,1,1,1) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{2\hbar\beta}{3\Omega^3}. \quad (\text{A.26})$$

$$I(1,2,2,1,0,0) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{22\hbar\beta}{27\Omega^3}. \quad (\text{A.27})$$

⋮

REFERENCES

- [1] Feynman, R.P, Mod.Phy.20 (1948)367.
- [2] Feynman, R.P., Hibbs, A.R, Quantum Mechanics and path Integral, McGraw, New-York, 1965.
- [3] Keinert,H.,Path Integral in Quantum Mechanics,Statistics,Polymer Physics,and Financial MarKets,Third ed.,World Scientific Singapore,2004.
- [4] Kashiwa, T.,Ohnuki,Y.,Suzuki,M.,Path Integral Methods,Clarendon Press-Oxford, 1997.
- [5] Khandekar,D.C., Lawande,S.V. Bhagwat, B.V. Path Integral Methods and its applications,World Scientific,Singapore,1993.
- [6] Elbaz, E, Quantique, Ellipse, 1995.
- [7] Dirac, P.A.M.,The principales of Quantum Mechanics,Oxford Univ.press, Oxford, 1958.
- [8] Cohen-Tannoudji, C , Diu, B., Laloë,F., Mécanique Quantique,Tome I-II,Edition Hermann, Paris, 1973.
- [9] Bender, C.M., Boettcher, S , Phys.Rev.Lett.80 (1998) 5243.
- [10] Bender, C.M., Boettcher, S., Meisinger, P.N., J.Math.Phys.40 (1999) 2201.
- [11] Bender,C.M.,Brody,D.C.,Jones,H.F.,Phys.Rev.Lett.89(2002)270401,
Bender,C.M.,Brody,D.C.,Jones,H.F.,Am.J.Phys.71(2003) 1095.
- [12] Bender,C.M.,Dunne,G.V., J. Math. Phys. 40 (1999) 4616.
- [13] M.Bentaiba, S-A. Yahiaoui, L. Chetouani, Phys. Lett. A 331 (2004),
M.Bentaiba, L. Chetouani, A. Mazouz, Phys. Lett. A 295 (2002) 13.
- [14] Kretschmer, R., Szymanowsky,L.,arXiv:quant-ph / 0309118.
- [15] Znojil, M., Phys. Lett. A 285 (2001) 7.
- [16] Shin, K.S., Commun. Math. Phys. 229 (2002) 543.
- [17] Bender, C.M., Brod, J.,Refig, A., Rreuter , M., arXiv:quant-ph / 0402026,
Bender, C.M.,arXiv:quant-ph / 0501052.
- [18] Reif, F., Fundamentals of Statistical and Thermal Physics, McGraw-Hill, New-York, 1965.

- [19] Landau, L., Lifchitz, E., Physique Statistique, Tome V, Deuxième Ed., Edition Mir, Moscou, 1967.
- [20] Lagoutine, A., Eléments de Statistique Quantique, OPU, Alger, 1985.
- [21] Nelson, D.R., Shnerb, N.M., Phys. Rev. E 58 (1998) 1383.
- [22] Hatano, N., Nelson, D.R. Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 570,
Hatano, N., Nelson, D.R. Phys. Rev. B 56 (1997) 8651.
- [23] Znojil, M., Cannata, F., Bagchi, B., arXiv : hep-th / 0003277,
Znojil, M., arXiv: hep-th / 0404145,
Aktas, M., Sever, R., arXiv: hep-th / 0404213,
Bakchi, B., Mallik, S., Quesne, C., arXiv : hep-th / 0102093.
- [24] Kleinert.H., Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, And Financial Markets, Third Edition (World Scientific, Singapore, 2003).
- [25] Kleinert. H., Schulte.V-Frohlinde, Critical Properties of ϕ^4 – Theories (World Scientific, Singapore, 2001).
- [26] Pelster. A. Analytic Approximation Methods in Statistics, Fielde Theory, and Nonlinear Dynamics, habilitation thesis, Freie Universität Berlin (2003).
- [27] DeWitt. B. Dynamical Theory of Groups and fields (Gordon and Breach, New York, (1965).
- [28] Jackiw. R, Phys.Rev.D 9 ,1686 (1974).
- [29] Bender. C.M., T.T., Wu, Phys.Rev .184, 1231 (1969).
- [30] Bender.C.M.And T.T.,Wu, Phys. Rev . D 7, 1620 (1973).
- [31] Feynman.R.P., Hibbs A.R., Quantum Mechanics and Path Integrals (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [32] Feynman.R.P., Statistical Mechanics: A Set of Lectures by Feynman R.P. (Addison- Wesley, Reading, MA,1998).
- [33] Itzkjson. C., Zuber, J.-B., Quantum Field Theory (McGraw-Hill, New York, 1980).
- [34] Gradshteyn.I.S., Ryzhik.I.M., Table of Integrals, Series, and Products (Academic Press, New York, 1965).
- [35] Pelster.A., Kleinert. H, Physica A 323, 370 (2003).

- [36] Weißbach. F., Pelster. A., Hamprecht. B., Phys.Rev.E 66,036129 (2002).
- [37] Dreger.J., Pelster. A., Hamprecht. B., High-Order Variational Perturbation Theory for Fokker-Planck Equation with Anharmonic, Drift, (in preparation).
- [38] Kleinert. H. Particles and Quantum Fields, lecture notes, Freie Universität Berlin (2004).
- [39] Vinette. F., čížek.J. , J. Math. Phys.32,3392 (1991).
- [40] Janke. W., Kleinert. H., Resummation of Divergent Perturbation Serie – An Intro-duction to Theory and a Guide to Practical Applications (to be Published by World Scientific, Singapore, 2004).
- [41] Bender C.M., Orszag. S.A., Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers- Asymptotic Methods and Perturbation Theory (Springer-Verlag, New York, 1990).
- [42] Hamprecht. B., Kleinert. H., Phys. Rev. D68, 065001, (2003).