

UNIVERSITE SAAD DAHLAB DE BLIDA

Faculté des Sciences
Département de physique

MEMOIRE DE MAGISTER

en physique

Spécialité: Physique Théorique

**LA MECANIQUE QUANTIQUE *PT*-SYMETRIQUE PAR
LA THEORIE DES PERTURBATIONS
VARIATIONNELLES**

Par

YAHIAOUI Sid-Ahmed

Devant le jury composé de :

Mr. M. BENZINNA	Professeur. U.S.D. Blida	Président
Mr. S. BOUKRAA	Professeur. U.S.D. Blida	Examineur
Mme. F. CHAFA	Maître de conférences. U.S.T.H.B.	Examineur
Mr. M. BENTAIBA	Professeur. U.S.D. Blida	Rapporteur

Blida, Avril 2005

ملخص

سمحت لنا الديناميكية الكمومية بإعادة وصف الميكانيك الكومومي باستعمال صياغة رياضية جديدة تعرف بـ : تكاملات المسلك لفايمان .

تعتمد هذه الصياغة أساسا على مفهوم المصطلح : الناشر ، و الذي بإمكانه نشر دالة الموجة من نقطة زمنية ابتدائية إلى نقطة زمنية نهائية .

رغم لمعرفتنا الدقيقة للعلاقة الرياضية لناشر جسم الحر، لهزاز التوافقي، و لذرة الهدروجين، إلا أنها بقية غير تامة لمعظم الأنظمة الفيزيائية. مما استوجب استعمال بعض النماذج التقريبية، أهمها نموذج يعرف بـ: النظرية الاضطرابية التغيرية.

هدف هذه المذكرة مزدوج:

- أولا : معالجة زمرة هاملتونية مركبة (تخايليه) متعددة الأبعاد و مرتبطة بهزاز التوافقي وذلك باستعمال النظرية الاضطرابية التغيرية .
- ثانيا : إثبات و إظهار إيجابية و حقيقية طيف الطاقة المرافق للهاملتوني المدروس.

RESUME

Les résultats de la dynamique quantique permettent de donner une description cohérente et différente de la mécanique quantique, et d'introduire la notion plus générale du formalisme des intégrales du chemin. Cette formulation, introduite par Richard P. Feynman, est considérée aujourd'hui comme une méthode puissante de quantification.

Ce formalisme est basée essentiellement sur la connaissance exacte d'un être mathématique communément appelé : propagateur (*Kernel*), ce dernier permet de propager la fonction d'onde d'un instant antérieur à un instant ultérieur.

Le calcul analytique exact du propagateur pour différents systèmes physiques n'est pas tout à fait au point, malgré les progrès considérables dans ce domaine, notamment l'introduction du paramètre temps et la reparamétrisation du chemin, ce qui nécessite l'introduction de quelques techniques d'approximations, parmi lesquelles une procédure fondée à la fois sur le principe variationnel et le calcul perturbatif, connue sous le nom : *Théorie des perturbations variationnelles convergente pour matrice densité*.

L'intérêt grandissant porté, ces dernières années, aux Hamiltoniens complexes *PT* symétriques prouve bien que l'on a affaire à un champ de recherche dynamique et prometteur. Ces Hamiltoniens, qui ne sont pas hermitiens mais invariants sous la symétrie *PT*, ont un spectre en énergie réel et positif.

La réalité et la positivité du spectre sont dues apparemment à l'invariance du Hamiltonien à la symétrie *PT*.

Motivé par les récents travaux de recherche sur ce sujet, ce mémoire a pour but, d'une part, de traiter une classe d'Hamiltoniens complexes cubiques multidimensionnels couplés aux oscillateurs harmoniques par la théorie des perturbations variationnelles pour matrice densité, d'autre part, de prouver la réalité et la positivité du spectre d'énergie. Les résultats sont comparés avec ceux déduits par la méthode des récurrences de Bender-Wu.

ABSTRACT

The quantum dynamics allows us to avoid the operator formalism by the use of infinity products of integrals, called Path-Integrals, yields the quantum mechanical amplitudes (Kernel) in global approach involving the properties of a system at all time.

Most path-integrals cannot be performed exactly. It is therefore necessary to develop approximation procedures. The Variational Perturbation Theory (VPT) is one of these procedures, it's consist in using the approximation of quantum statistical system by perturbation expansion round Harmonic Oscillator with trial frequency Ω . The corresponding action serves as trial system and the remainder as perturbation.

Treating separately zero-frequency mode, it's possible to reexpress the quantum statistical partition function by an integral over a classically Boltzmann-factor, which contains the effective classical potential. Based on Jensen-Peiels inequality, variation with respect to the trial frequency Ω yields an upper bound for the effective classical potential.

The purpose of this thesis is to measure the spectrum of complex multidimensional PT-symmetric Hamiltonians, via VPT for density matrices. The results are compared with these calculated by Bender-Wu recursion relations.

It is found that the corresponding eigen-energies are entirely real and positive.

REMERCIEMENTS

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, 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 ma Post-Graduation et pour avoir examiné en grand détail ce travail.

Je tiens à exprimer mes remerciements à monsieur Mohammed BENZZINA, Professeur à l'université Saad DAHLAB et doyen de la faculté des Sciences, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant la présidence du jury de soutenance.

Je remercie tout particulièrement madame Fazia MEKIDECHE-CHAFI, Maître de conférences à l'U.S.T.H.B. (Alger), pour avoir voulu examiner ce travail et aussi pour l'intérêt particulier qu'elle porte au sujet traité.

Mes remerciements vont également à monsieur Salah BOUKRAA, Professeur à l'université Saad DAHLAB, pour avoir voulu participer au jury.

J'adresse mes plus vifs remerciements à toute l'équipe du Laboratoire de Physique Théorique et Interactions Rayonnement-Matière pour leurs conseils et leurs encouragements en particulier à monsieur Toufik DOUMAZ, chargé de cours au département de Physique ainsi à mes collègues de la Post-Graduation.

Je dédie ce modeste travail

- A la mémoire de mes grands parents.
- A mes parents. J'aimerais les remercier, mais leur amour ne s'embarrasse ni ne s'acquitte de remerciements.
- A ma sœur Kahina et frères Karim, Amine, Rafik, et Mehdi, à mes oncles et tantes 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 ami(e)s.

TABLE DES MATIERES

RESUME.....	1
REMERCIEMENTS	4
TABLE DES MATIERES.....	5
LISTES DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX.....	6
INTRODUCTION.....	7
1. INTEGRATION FONCTIONNELLE EN MECANIQUE QUANTIQUE ET EN MECANIQUE STATISTIQUE	11
1.1. Introduction.....	11
1.2. Intégrales du chemin en Mécanique Quantique.....	11
1.3. Mécanique statistique et intégrales du chemin.....	18
2. LA THEORIE DES PERTURBATIONS VARIATIONNELLES EN MECANIQUE STATISTIQUE QUANTIQUE.	22
2.1. Introduction.....	22
2.2. L'approche variationnelle de Feynman-Kleinert.....	22
2.3. Théorie des perturbations variationnelles pour matrices densités.....	31
3. LA MECANIQUE QUANTIQUE <i>PT</i> - SYMETRIQUE.....	45
3.1. Introduction.....	45
3.2. Hamiltoniens non hermétiques <i>PT</i> symétriques	46
3.3. Vers une nouvelle théorie quantique	55
4. APPLICATIONS DE LA THEORIE DES PERTURBATIONS VARIATIONNELLES AUX HAMILTONIENS COMPLEXES CUBIQUES <i>PT</i> SYMETRIQUES.....	58
4.1. Introduction	58
4.2. Applications.....	59
4.3. Résultats et discussion.....	68
CONCLUSION.....	73
APPENDICE.....	75
REFERENCES	79

LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX.

Figure 1.1	Les différentes trajectoires entre les états initial et final.....	13
Figure 1.2	La rotation de Wick.	20
Figure 2.1	Illustration de la convexité de la fonction exponentielle.....	26
Figure 2.2	Les 9 premières fonctions $C_{\beta}^{(n)}$ en fonction de $\hbar\beta\Omega$	39
Figure 3.1	Le contour d'intégration de l'équation différentielle (3.4).....	47
Figure 3.2	Les niveaux d'énergie du Hamiltonien (3.1).	48
Figure 3.3	Les trajectoires classiques dans le plan complexe pour $\varepsilon = 0$	51
Figure 3.4	Les trajectoires classiques dans le plan complexe pour $\varepsilon = 1$	52
Figure 3.5	Les trajectoires classiques dans le plan complexe pour $\varepsilon = 2$	53
Figure 3.6	Les trajectoires classiques pour $\varepsilon = -0.2, -0.15, -0.1$	54
Figure 3.7	Les trajectoires classiques pour $\varepsilon = -1$	54
Tableau 2.1	Les diagrammes de Feynman connectés " <i>connexes</i> "	34
Tableau 4.1	Spectre d'énergie du hamiltonien $H^{(2)}$ au premier et au second ordre.....	70
Tableau 4.2	Spectre d'énergie du hamiltonien $H^{(3)}$ au premier et au second ordre.....	70
Tableau 4.3	Spectre d'énergie du hamiltonien $H^{(h-h)}$ au premier et au second ordre.....	71

INTRODUCTION

L'interprétation de la mécanique quantique par l'école de Copenhague repose sur la séparation d'un système en une partie régie par la mécanique classique déterministe, basée sur l'observateur et son appareil de mesure, et l'autre partie régie par l'hypothèse essentielle de la mécanique quantique probabiliste, fondée sur le système physique observé.

La conciliation entre les deux parties est restée insaisissable pendant plusieurs années jusqu'à ce que Richard P. Feynman les réunisse à travers le concept du noyau "*Kernel*" de l'équation de Schrödinger dans sa fameuse représentation des intégrales du chemin [1]. Depuis, ce formalisme ne cesse de se développer et il continue à inspirer, à la fois, les communautés physiciennes et mathématiciennes du monde.

D'une part, les physiciens considèrent le kernel comme un outil essentiel et très puissant, aussi bien au niveau conceptuel qu'au niveau des calculs [2-6]. D'autre part, pour les mathématiciens, il semble n'être qu'un objet mathématique ordinaire, fondé sur les équations intégrales de Volterra et Fredholm, mais ils continuent d'espérer en un développement d'une théorie cohérente et acceptable.

Grâce aux travaux antérieurs dus à Paul A. M. Dirac [7], Feynman établit que le formalisme des intégrales du chemin, souvent appelé la troisième quantification, est équivalent à la fois aux formalismes habituels de Schrödinger (1^{ère} quantification) et d'Heisenberg-Dirac (2^{ème} quantification). Il semble en effet que les trois formalismes aboutissent au même résultat.

Plus tard, Feynman attribua cette diversité à décrire les phénomènes quantiques à *s'emparer des éléments clés dans notre description des phénomènes atomiques, elle n'est autre que l'expression et la représentation de la simplicité de la nature*¹ [5].

Les trois formulations de la mécanique quantique sont associées aux trois disciplines des mathématiques, c'est-à-dire l'Analyse, l'Algèbre et la Géométrie. En effet, tandis que le formalisme de Schrödinger, fondé sur l'analyse mathématique explicitant la relation

¹ to our having captured key elements in our descriptions of atomic phenomena and is an expression and representation of the simplicity of nature.

entre l'espace physique abstrait de Hilbert et l'espace réel et qui est basé sur une fonction d'onde, projette les états quantiques de l'espace de Hilbert sur les états de configuration, le formalisme d'Heisenberg-Dirac, reposant sur des bases algébriques, suppose que les états physiques, vecteurs de l'espace de Hilbert du précédent formalisme, ont tous été recensés et qu'il ne reste plus qu'à indiquer si un de ces états est vide ou occupé [6-9].

Quant au formalisme de Feynman, il se fonde sur la géométrie. Cette manière de "*géométriser*" le principe de superposition quantique est d'une importance capitale, puisqu'elle nous permet de visualiser directement la construction et la destruction des interférences qui résultent des différents chemins possibles. Les expériences "*conceptuelles*" des fentes de Young et d'Aharonov-Bohm en sont les exemples parfaits [2,5].

Ce formalisme repose sur une conjecture [6]; dans la formulation de la mécanique quantique par les intégrales du chemin, la fonction d'onde en un point q' à l'instant t' est basé sur la connaissance des fonctions d'ondes à un instant antérieur t partout dans l'espace et d'une fonction propageant la fonction d'onde d'un point à l'instant t en un autre point à l'instant t' . Cette conjecture est communément connue sous le nom de *conjecture de Feynman* ; elle permet de calculer le propagateur entre deux instants et deux points infiniment voisins à partir de la fonction de phase classique $\exp(iS/\hbar)$ [7], où : $S = \int L(q, \dot{q}, t) dt$ est l'action classique, $L(q, \dot{q}; t)$ le lagrangien du système et \hbar étant la constante de Planck.

Pour être plus précis, *il convient d'attribuer une phase à chaque trajectoire, la valeur de cette phase est dictée par la mécanique quantique et ainsi qu'une amplitude, pour aller du point $q(t)$ au point $q'(t')$, donnée par $\exp(iS/\hbar)$.*

Malheureusement, cette action n'est pas déterminée de façon univoque car l'amplitude peut contenir un facteur de phase dont on pourrait penser qu'il est *inobservable* et donc arbitraire. Comme l'amplitude de la fonction est la somme de toutes les amplitudes résultant des chemins possibles dans l'espace des configurations, la phase est donc liée à certaines propriétés des intégrales du chemin dans l'espace des configurations.

Il est clair que le formalisme des intégrales du chemin adopte le point de vue de Schrödinger, qui inclue l'évolution de la fonction d'onde dans le propagateur même.

Le calcul analytique exact du propagateur n'est pas tout à fait au point, malgré l'introduction du paramètre temps et la reparamétrisation du chemin [10]. Il est donc nécessaire de mettre en œuvre des méthodes d'approximations pour permettre d'approcher le résultat exact avec une bonne précision. A cet égard, une approximation, fondée sur le principe variationnel, a été introduite par R. P. Feynman et H. Kleinert, et indépendamment par R. Giachetti, V. Toghetti, et R. Vaia [11-18], améliorée et étendue depuis par un calcul perturbatif développé par H. Kleinert et al. [19-23], connue aujourd'hui sous le nom de la *théorie des perturbations variationnelles* convergente.

Dans ce mémoire nous nous intéressons tout particulièrement à la mesure des états d'énergie d'une classe d'Hamiltoniens complexes cubiques multidimensionnels non hermitiens couplés aux oscillateurs harmoniques et invariants sous la transformation PT [24-43], par la théorie des perturbations variationnelles convergente dans le formalisme des intégrales du chemin pour matrices densités. Nous calculerons aussi les spectres d'énergie à la même classe d'Hamiltoniens par la méthode des récurrences de Bender-Wu, fondée sur un calcul perturbatif autour d'un oscillateur harmonique associé à un poids statistique ayant une forme gaussienne (voir le détail du calcul dans l'appendice). Dans les deux cas, le spectre d'énergie qui en a résulté a été trouvé réel et positif [35, 40, 41].

Ce mémoire est divisé en quatre chapitres.

Le chapitre 1 est consacré à une introduction à la mécanique quantique des intégrales du chemin [1-6]. Nous soulignons l'importance de la fonction de phase dans la fonction d'onde et celle du propagateur explicité par la *conjecture de Feynman* à partir des données classiques du système, ainsi que l'extension du formalisme à la physique statistique quantique [44-46].

Dans le chapitre 2, nous présenterons la théorie des perturbations variationnelles (*TPV*) convergente pour matrices densités, ainsi que sa version antérieure dite méthode variationnelle de Feynman-Kleinert (*FK*). Nous définissons la *potentiel effectif classique exact* de la théorie [11-23], et qui est pratiquement impossible à calculer. De ce fait, l'utilisation de l'inégalité de Jensen-Peierls nous permet d'introduire un *potentiel effectif classique d'essai* qui approche le potentiel effectif classique exact par une limite supérieure, donnant systématiquement un caractère de convergence à la théorie. Nous représentons l'intégrale du chemin d'essai correspondant au potentiel effectif classique d'essai comme une superposition d'autres intégrales du chemin dont la fonction d'essai est

le potentiel de l'oscillateur harmonique local, où chaque oscillateur à sa propre fréquence d'essai Ω^2 .

Nous proposons au chapitre 3 un état des lieux des travaux de recherche sur la mécanique quantique PT symétrique. Nous présentons les résultats obtenus dans l'étude de la famille d'Hamiltoniens : $H = p^2 + x^2(ix)^\varepsilon$ (ε est réel) [24-27]; nous verrons que les systèmes qu'ils décrivent exhibent une transition de phase à $\varepsilon = 0$, aussi bien au niveau classique que quantique. Dans la dernière partie, nous exposons brièvement une tentative de formulation d'une théorie quantique cohérente et viable fondée sur ces Hamiltoniens PT symétrique, ayant une norme CPT [29-34].

Quant au chapitre 4, il traitera de l'application sur théorie des perturbations variationnelles pour matrices densités à une classe d'Hamiltoniens complexes cubiques multidimensionnels couplés aux oscillateurs harmoniques [36, 41, 42], et dont les résultats obtenus sont comparés à ceux de la méthode perturbatif de Rayleigh-Schrödinger que nous avons déduits par la méthode des récurrences de Bender-Wu [47-50].

Enfin la dernière partie est consacrée à la conclusion et aux perspectives.

Un appendice suit le corps de ce mémoire, celui-ci n'a d'autre prétention que de fournir aux lecteurs le moyen de calculer le spectre d'énergie d'un Hamiltonien tridimensionnel par la méthode des récurrences de Bender-Wu.

CHAPITRE 1

INTEGRATION FONCTIONNELLE EN MECANIQUE QUANTIQUE ET EN MECANIQUE STATISTIQUE

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, ici les quantités classiques sont remplacées par des objets mathématiques appelés opérateurs qui agissent dans l'espace abstrait de Hilbert. L'autre méthode, que nous détaillons longuement dans ce chapitre, a été initiée par Paul A. M. Dirac et développée par Richard. P. Feynman en 1948 et porte le nom d'*intégration fonctionnelle* [1-7]. Lorsqu'on l'applique à un système composé d'une particule ou d'un nombre fini de particules, le nom approprié à la méthode est *l'intégrale du chemin*. Cette méthode est intuitive, puisqu'elle permet la réintroduction de la notion de trajectoire.

1.2. Intégrales du chemin en Mécanique Quantique

Nous allons utiliser 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* parce que, propageant la fonction d'onde de (q, t) en (q', t') , donne l'amplitude de probabilité pour que la particule soit observée au point q' au temps t' que nous noterons $K(q', t'; q, t)$.

Décomposons la fonction exponentielle dans (1.4) en deux temps infinitésimaux, $e^{-iH(t'-t)/\hbar} = e^{-iH(t'-t_1)/\hbar} e^{-iH t_1/\hbar}$, 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 du chemin propose.

1.2.1. Conjecture de Feynman [6]

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

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

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

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

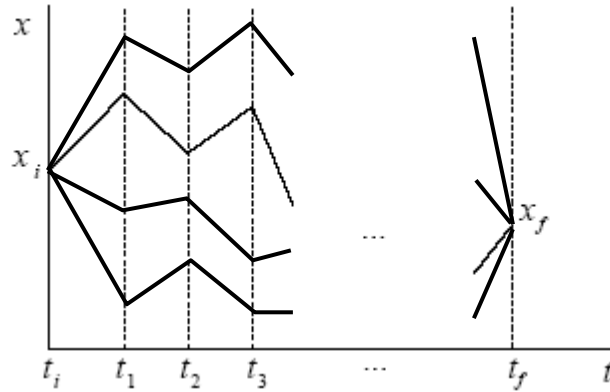


Figure 1.1 : Les différentes trajectoires possibles entre les états initial et final.

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

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

avec :

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

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

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

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 :

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

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*) "MidPoint Prescription" [3-5] et en combinant (1.11) à (1.13), nous obtenons :

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

Ainsi, la seconde expression dans (1.10) devient :

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

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

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

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 :

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

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 Hamiltonienne $S[q(t)]$ dans l'espace des configurations :

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

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 $\left(\int_{(q,t)}^{(q',t')}\right)$ 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 (1.16).

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.

1.2.2. Limite classique

Les trajectoires sont généralement très irrégulières, peu sont celles qui contribuent directement au propagateur, car leurs énergies cinétiques sont élevées provoquant ainsi de fortes oscillations de l'exponentielle complexe d'une trajectoire à l'autre : *leurs contributions s'annulent mutuellement* [6]. Les trajectoires qui contribuent le plus au propagateur $K(q', t'; q, t)$ sont celles qui se situent tout près de la trajectoire classique où l'action reste stationnaire et minimale.

Les trajectoires qui contribuent à l'amplitude sont celles dont l'action ne diffère de l'action classique $S[q_{cl}(t)]$ que par un terme d'ordre \hbar , c'est-à-dire : $S - S_{\min} \approx \hbar$. La limite classique est obtenue quand l'action de la trajectoire classique est beaucoup plus grande que \hbar . Dans le cas contraire, des trajectoires très différentes de la trajectoire classique provoquent des fluctuations d'ordre \hbar incitant un calcul quantique complet et exact de (1.21).

1.2.3. Equivalence avec l'équation de Schrödinger

La conjecture de Feynman sur les intégrales du chemin peut conduire à l'équation de Schrödinger à condition de montrer l'équivalence avec la mécanique ondulatoire [3, 6].

Il a été démontré que la dérivée temporelle de la fonction d'onde donnée par évaluation de l'intégrale de Feynman est égale à $\frac{-i}{\hbar}$ multiplier par l'Hamiltonien \hat{H} qui agit sur l'état initial de la fonction d'onde.

Supposons connue la fonction d'onde à (q, t) , à un instant $t + \delta$ on écrira :

$$\psi(q', t + \delta) = \int dq K(q', t + \delta; q, t) \psi(q, t), \quad (1.22)$$

on pose $\xi = |q' - q|$, le lagrangien devient :

$$L = \frac{m}{2} \left(\frac{\xi}{\delta} \right)^2 - V \left(\frac{q + q'}{2}, t \right), \quad (1.23)$$

et l'action sur la trajectoire est approximée par :

$$S = \frac{m}{2} \frac{\xi^2}{\delta} - V \left(\frac{q + q'}{2}, t \right) \delta, \quad (1.24)$$

et qui conduit à l'évolution de la fonction d'onde suivant :

$$\psi(q', t + \delta) \approx C(\delta) \int d\xi e^{\frac{im}{2\hbar\delta}\xi^2} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \delta V \right] \psi(q' - \xi, t). \quad (1.25)$$

Développons en série la fonction $\psi(q', t + \delta)$ et l'exponentielle du potentiel au premier ordre en δ suivi de $\psi(q' - \xi, t)$ au deuxième ordre, ce qui donne la fonction d'onde

$$\psi(q', t) + \delta \frac{\partial \psi(q', t)}{\partial q'} \approx C(\delta) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left(1 - \frac{iV\delta}{\hbar} \right) e^{\frac{im}{2\hbar\delta}\xi^2} \left[\psi(q', t) + \xi \frac{\partial \psi(q', t)}{\partial q'} + \frac{\xi^2}{2} \frac{\partial^2 \psi(q', t)}{\partial q'^2} \right]. \quad (1.26)$$

Les intégrales en puissance paires de ξ apportent une contribution non nulle à l'intégrale et il devient naturel d'identifier la constante de normalisation $C(\delta)$ au propagateur de la particule libre

$$C(\delta) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\delta}}. \quad (1.27)$$

En intégrant sur ξ , puis en égalant terme à terme, on obtient l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q', t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(q', t)}{\partial q'^2} + V(q', t) \psi(q', t). \quad (1.28)$$

Cela montre l'équivalence entre la méthode des intégrales du chemin et la mécanique ondulatoire. *L'équation de Schrödinger n'est qu'une approximation au premier ordre du résultat exact obtenu à partir de l'équation (1.22).*

1.3. Mécanique statistique et intégrales du chemin

La mécanique statistique s'intéresse aux propriétés moyennes d'un système prises sur un ensemble d'états. D'après Gibbs [44-46], 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 [44, 45]. 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

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | \hat{O} | n \rangle e^{-\beta E_n}, \quad (1.29)$$

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

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}, \quad (1.30)$$

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 [9]. Il est défini par :

$$\rho = e^{-\beta E} = \sum_n |n\rangle \langle n| e^{-\beta E_n}. \quad (1.31)$$

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 :

$$i \hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]_-. \quad (1.32)$$

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 :

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \langle \hat{\rho} \hat{O} \rangle. \quad (1.33)$$

1.3.1. Mécanique statistique par les intégrales du chemin

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, 46].

Cette substitution, appelée *rotation de Wick*, est schématisée ci-dessous sur la Figure 1.2. Il est clair que τ est une variable réelle variant de 0 à β . L'utilisation de la rotation de Wick est vue comme le moyen théorique pour exploiter la similitude avec les intégrales du chemin.

Rappelons la définition du propagateur

$$K(q', T; q, 0) = \langle q' | \exp \left[-\frac{iHT}{\hbar} \right] | q \rangle. \quad (1.34)$$

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

$$\begin{aligned} K(q', -i\hbar\beta; q, 0) &= \langle q' | e^{-\frac{iH(-i\hbar\beta)}{\hbar}} | q \rangle = \langle q' | e^{-\beta H} \sum_n | n \rangle \langle n | q \rangle \\ &= \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | q \rangle \langle q' | n \rangle. \end{aligned} \quad (1.35)$$

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

$$\begin{aligned} \int dq K(q, -i\hbar\beta; q, 0) &= \int dq \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | q \rangle \langle q | n \rangle \\ &= \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \int dq | q \rangle \langle q | n \rangle \\ &= \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | n \rangle \\ &= Z. \end{aligned} \quad (1.36)$$

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

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

$$K(q', -i\hbar\beta; q, 0) \equiv \rho(q', q) = \langle q' | e^{-\beta H} | q \rangle. \quad (1.37)$$

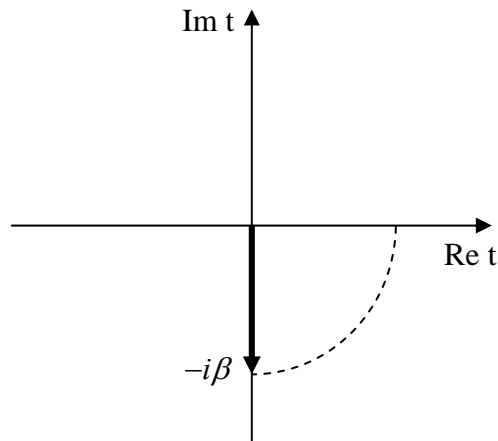


Figure 1.2 : La rotation de Wick dans l'espace des temps

Il est tout à fait possible de réécrire la fonction de partition en terme des intégrales du chemin, l'action devient :

$$S = i \int d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 + V[q(\tau)] \right] = i S_{\text{Euc}}, \quad (1.38)$$

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 :

$$\begin{aligned} \rho(q) &= \int Dq(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{-i\hbar\beta} dt \left(\frac{m}{2} \dot{q}^2 - V[q(t)] \right) \right] \\ &= \int Dq(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 + V[q(\tau)] \right) \right] \\ &= \int Dq(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S_{\text{Euc}}[q(\tau)] \right]. \end{aligned} \quad (1.39)$$

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

$$Z = \int dq \rho(q, q). \quad (1.40)$$

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.

CHAPITRE 2

LA THEORIE DES PERTURBATIONS VARIATIONNELLES EN MECANIQUE QUANTIQUE STATISTIQUE

2.1. Introduction

Ce chapitre, principalement fondé sur les références [3, 11-23], se veut une synthèse globale de la théorie des perturbations variationnelles convergente, ainsi que sa version antérieure dite l'approche variationnelle de Feynman-Kleinert. Deux grandes parties feront l'objet de ce chapitre dont la première est consacrée à l'approximation de Feynman-Kleinert basée, essentiellement, sur le principe variationnel et l'inégalité de Jensen-Peierls [3, 11-18]. La seconde traitera des améliorations sur les corrections systématiques de l'approche variationnelle de Feynman-Kleinert, conduisant ainsi à la théorie des perturbations variationnelles pour matrices densités [19-23].

Le calcul analytique exact du propagateur n'est possible que *s'il existe* ou *s'il venait de prendre une forme gaussienne par une quelconque transformation*. Depuis les années cinquante, différentes procédures d'approximations ont été mises au point pour résoudre ce problème, unifiées depuis en une seule théorie cohérente applicable aussi bien aux faibles qu'aux forts couplages. Ce dernier cas nécessite l'utilisation de quelques techniques de sommation comme celles de Borel et Padé [48-50]. Cette théorie est aujourd'hui connue sous le nom : *théorie des perturbations variationnelles pour matrices densités*. Initiée essentiellement par Feynman [2,14] en 1954 pour résoudre le problème des polarons dans les solides, cette procédure a été améliorée depuis par R. P. Feynman et H. Kleinert et, indépendamment, par R. Giachetti et V. Toghetti [11-18]. L'extension systématique de la théorie à des ordres élevés a été développée par H. Kleinert et ces collaborateurs [19-23], donnant naissance à la théorie des perturbations variationnelles systématiquement convergente.

2.2. L'approche variationnelle de Feynman-Kleinert

2.2.1. Fonction de partition effective classique

Pour des potentiels $V(x)$, nous considérons une action euclidienne $A[x(\tau)]$ d'une particule de masse M par :

$$A[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2(\tau) + V(x(\tau)) \right], \quad (2.1)$$

où le chemin $x(\tau)$ exprimé en série de Fourier

$$x(\tau) = x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (x_m e^{i\omega_m \tau} + c.c.), \quad \omega_m = \frac{2\pi m}{\beta}, \quad (2.2)$$

permet d'obtenir la fonction de partition [3] :

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi \hbar^2 \beta / M}} \prod_{m=1}^{\infty} \left[\int \frac{dx_m^{\text{Re}} dx_m^{\text{Im}}}{\pi / \beta M \omega_m^2} \right] \exp \left[-\beta M \sum_{m=1}^{\infty} \omega_m^2 |x_m|^2 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau V(x(\tau)) \right], \quad (2.3)$$

avec x_m^{Re} et x_m^{Im} sont, respectivement, les abréviations de $\text{Re } x_m$ et $\text{Im } x_m$, et $\beta = 1/k_B T$.

En effectuant l'intégration sur les composantes réelles et imaginaires du chemin $x(\tau)$, avec la contrainte sur l'indice m telle que $m \neq 0$, nous obtenons une fonction de partition, d'une particule de masse M soumise à un potentiel modifié, exprimée en terme d'une intégrale dans l'espace des phases :

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi \hbar} \exp \left[-\beta \left(\frac{p^2}{2M} + V^{\text{eff},cl}(x_0) \right) \right]. \quad (2.4)$$

Après avoir intégré dans l'espace des phases, l'expression (2.4) devient :

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi \hbar^2 \beta / M}} \exp \left[-\beta V^{\text{eff},cl}(x_0) \right]. \quad (2.5)$$

La variable d'intégration x_0 est la position moyenne du chemin fluctuant :

$$\bar{x} = \frac{1}{\beta \hbar} \int_0^{\beta \hbar} d\tau x(\tau) \equiv x_0. \quad (2.6)$$

Pour des raisons de similitude entre la fonction de partition donnée en (2.4) et la fonction de partition classique, la fonction $V^{\text{eff},cl}(x_0)$ est appelée : *potentiel effectif classique exact*¹ du système ; celle-ci tient compte des effets de toutes les fluctuations quantiques. La définition explicite de l'intégrale du chemin du potentiel effectif classique est donnée par :

$$\exp \left[-\beta V^{\text{eff},cl}(x_0) \right] \equiv \int Dx(\tau) \tilde{\delta}(\bar{x} - x_0) e^{-A[x(\tau)]/\hbar}, \quad (2.7)$$

où,

¹ A ne pas confondre avec le potentiel effectif de la théorie quantique des champs, générateur des fonctions de Green connexes $W[J(\tau)]$ par la transformation de Legendre.

$$\tilde{\delta}(\bar{x} - x_0) = \sqrt{2\pi \hbar^2 \beta / M} \delta(\bar{x} - x_0)$$

est la fonction delta de Dirac modifiée.

2.2.2. Cas particulier : l'oscillateur harmonique

Pour l'oscillateur harmonique, le facteur de Boltzmann dans l'expression (2.3) est :

$$\exp\left[-\beta M \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \omega^2) |x_m|^2\right] e^{-\beta M \omega^2 x_0^2 / 2},$$

en l'intégrant sur les bornes x_m^{Re} et x_m^{Im} , nous obtenons :

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi \hbar^2 \beta / M}} \prod_{m=1}^{\infty} \left(\frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \omega^2} \right) e^{-\beta M \omega^2 x_0^2 / 2}. \quad (2.8)$$

La fonction de partition (2.8) peut être écrite sous une forme plus compacte :

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi \hbar^2 \beta / M}} Z_{\omega}^{x_0}, \quad (2.9)$$

où $Z_{\omega}^{x_0}$ est appelée fonction de partition locale donnée par :

$$Z_{\omega}^{x_0} = \frac{\beta \hbar \omega / 2}{\sinh(\beta \hbar \omega / 2)} e^{-\beta M \omega^2 x_0^2 / 2}. \quad (2.10)$$

Notons que [51] :

$$\prod_{m=1}^{\infty} \left(\frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \omega^2} \right) = \frac{\beta \hbar \omega / 2}{\sinh(\beta \hbar \omega / 2)}.$$

Le potentiel effectif classique correspondant est :

$$\begin{aligned} V_{\omega}^{\text{eff.cl}}(x_0) &= \frac{1}{\beta} \ln \frac{\sinh(\beta \hbar \omega / 2)}{\beta \hbar \omega / 2} + V(x_0) \\ &= -\frac{1}{\beta} \ln(\beta \hbar \omega) + \frac{\hbar \omega}{2} + \frac{1}{\beta} \ln(1 - e^{-\beta \hbar \omega}) + V(x_0). \end{aligned} \quad (2.11)$$

La fonction de partition complète est finalement obtenue en utilisant (2.5) :

$$Z_{\omega} = \frac{1}{2 \sinh(\beta \hbar \omega / 2)}. \quad (2.12)$$

Aux basses températures ($T \rightarrow 0$), le potentiel effectif classique de l'oscillateur harmonique est la somme du potentiel classique autour d'un point x_0 plus un terme constant additionnel, qui tend vers $\hbar\beta\omega/2$, garantissant ainsi la limite exacte du niveau fondamental de l'énergie

$$V^{eff,cl}(x_0) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \frac{\hbar\omega}{2} + V(x_0).$$

La fonction de partition complète se comporte en facteur de Boltzmann avec une énergie correspondant au niveau fondamental $\hbar\beta\omega/2$

$$Z \longrightarrow \beta \hbar\omega e^{-\beta \hbar\omega/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi \hbar^2 \beta/M}} e^{-\beta M \omega^2 x_0^2/2} \equiv e^{-\beta \hbar\omega/2}.$$

2.2.3. La fonction de partition d'essai

Il est pratiquement impossible de calculer le potentiel effectif classique $V^{eff,cl}(x_0)$ exactement. Il est nécessaire de trouver une bonne approximation, simple et précise à la fois, à la fonction $V^{eff,cl}(x_0)$, et qui doit approcher le potentiel effectif classique exact par une limite supérieure [12-15]. L'intégrale du chemin d'essai correspondant au potentiel effectif classique d'essai est représentée en terme d'une superposition d'intégrales du chemin de l'oscillateur harmonique local centré autour d'une position moyenne x_0 arbitraire, où chaque oscillateur à sa propre fréquence d'essai $\Omega^2(x_0)$. Ces fréquences sont choisies de telle sorte que le potentiel effectif classique exact ait comme limite supérieure optimale le potentiel effectif classique d'essai.

L'action d'essai locale relative à l'oscillateur harmonique centré en x_0 est

$$A_{\Omega}^{x_0} \equiv \int_0^{\beta\hbar} d\tau M \left[\frac{\dot{x}^2}{2} + \Omega^2(x_0) \frac{(x - x_0)^2}{2} \right], \quad (2.13)$$

où $\Omega(x_0)$ est une fréquence d'essai locale arbitraire. La fonction de partition d'essai associée est donnée par :

$$\begin{aligned} Z_{\Omega}^{x_0} &= \int Dx(\tau) \tilde{\delta}(\bar{x} - x_0) \exp[-A_{\Omega}^{x_0}[x(\tau)]/\hbar] \\ &= \prod_{m=1}^{\infty} \left[\int \frac{dx_m^{Re} dx_m^{Im}}{\pi/\beta M \omega_m^2} \right] \exp \left[-\beta M \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)) |x_m|^2 \right] \\ &= \frac{\beta \hbar \Omega(x_0)/2}{\sinh(\beta \hbar \Omega(x_0)/2)}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Le potentiel effectif classique de oscillateur harmonique est égal à l'énergie libre correspondante :

$$V^{eff,cl}(x_0) \equiv F_{\Omega}^{x_0} = \frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{\sinh(\beta \hbar \Omega(x_0)/2)}{\beta \hbar \Omega(x_0)/2} \right]. \quad (2.15)$$

Définissons maintenant la valeur moyenne locale d'une fonction arbitraire quelconque :

$$\langle \dots \rangle_{\Omega}^{x_0} \equiv [Z_{\Omega}^{x_0}]^{-1} \int Dx(\tau) \tilde{\delta}(\bar{x} - x_0) (\dots) \exp[-A_{\Omega}^{x_0}[x(\tau)]/\hbar]. \quad (2.16)$$

Le potentiel effectif classique s'exprime donc :

$$\begin{aligned} \exp[-\beta V^{eff,cl}(x_0)] &\equiv Z^{x_0} = \int Dx(\tau) \tilde{\delta}(\bar{x} - x_0) \exp[-A[x(\tau)]/\hbar] \\ &= \int Dx(\tau) \tilde{\delta}(\bar{x} - x_0) \exp[-A_{\Omega}^{x_0}/\hbar] \exp[-(A/\hbar - A_{\Omega}^{x_0}/\hbar)] \\ &= [Z_{\Omega}^{x_0}]^{-1} \langle \exp[-(A/\hbar - A_{\Omega}^{x_0}/\hbar)] \rangle_{\Omega}^{x_0}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

L'utilisation de l'inégalité de Jensen-Peierls, qui est une conséquence de la convexité de la fonction exponentielle e^{-x} illustrée sur la figure 2.1,

$$\langle \exp[-(A/\hbar - A_{\Omega}^{x_0}/\hbar)] \rangle_{\Omega}^{x_0} \geq \exp\langle -(A/\hbar - A_{\Omega}^{x_0}/\hbar) \rangle_{\Omega}^{x_0}, \quad (2.18)$$

implique que le potentiel effectif classique exact a une *limite supérieure*

$$V^{eff,cl}(x_0) \leq F_{\Omega}^{x_0} + \frac{1}{\beta} \langle A/\hbar - A_{\Omega}^{x_0}/\hbar \rangle_{\Omega}^{x_0}.$$

C'est-à-dire :

$$V^{eff,cl}(x_0) \leq F_{\Omega}^{x_0} + \frac{1}{\beta \hbar} \int_0^{\beta \hbar} d\tau \left\langle V(x(\tau)) - M \frac{\Omega^2(x_0)}{2} (x(\tau) - x_0)^2 \right\rangle_{\Omega}^{x_0}. \quad (2.19)$$

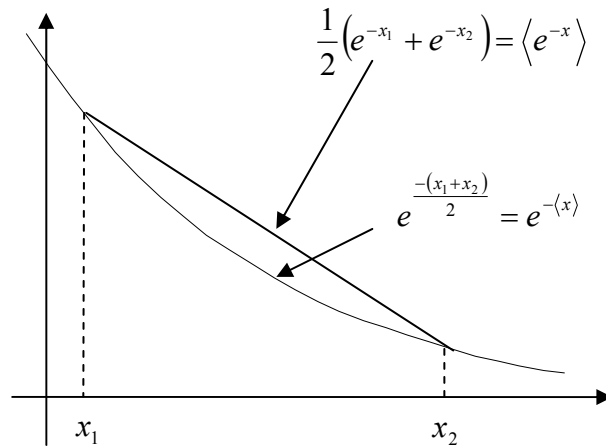


Figure 2.1 : Illustration de la convexité de la fonction exponentielle e^{-x} , vérifiant partout $\langle e^{-x} \rangle \geq e^{-\langle x \rangle}$.

Le calcul de la valeur moyenne sous l'intégrale s'effectue facilement. En calculant en premier la largeur de la fluctuation locale $\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0}$, nous obtenons :

$$\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0} = \left\langle \sum_m |x_m|^2 + \sum_{m \neq m'} x_m x_{m'}^* \exp[-i(\omega_m - \omega_{m'})\tau] \right\rangle_{\Omega}^{x_0}, \quad (2.20)$$

avec le chemin $x(\tau) = x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (x_m e^{i\omega_m \tau} + c.c)$ avec : $x_{-m} = x_m^*$.

La valeur moyenne locale définie en (2.16) est égale à :

$$\langle \dots \rangle_{\Omega}^{x_0} = [Z_{\Omega}^{x_0}]^{-1} \prod_{m=1}^{\infty} \left[\int \frac{dx_m^{\text{Re}} dx_m^{\text{Im}}}{\pi / \beta M \omega_m^2} \right] (\dots) \exp \left[-\beta M \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2) |x_m|^2 \right]. \quad (2.21)$$

La valeur moyenne locale du produit $x_m x_{m'}^*$ dans (2.20) n'est autre que les fonctions de corrélations des variables d'intégration données par :

$$\langle x_m x_{m'}^* \rangle_{\Omega}^{x_0} = \delta_{mm'} \frac{1}{\beta M} \frac{1}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)}. \quad (2.22)$$

En sommant sur toutes les valeurs $m = m'$, nous obtenons finalement la largeur de la fluctuation locale :

$$\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0} = a^2(x_0), \quad (2.23)$$

où,

$$\begin{aligned} a^2(x_0) &= \frac{2}{\beta M} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)} \\ &= \frac{1}{\beta M} \frac{1}{\Omega(x_0)} \frac{\partial}{\partial \Omega(x_0)} \ln \frac{\sinh(\beta \hbar \Omega(x_0)/2)}{\beta \hbar \Omega(x_0)/2}. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Remarquons que la différence entre la largeur de la fluctuation locale $a^2(x_0)$ et la valeur moyenne $\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0}$ est :

$$\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega(x_0)} - a^2(x_0) = \frac{1}{\beta M \Omega^2(x_0)}. \quad (2.25)$$

Cette différence est importante; aux basses températures, la largeur de la fluctuation locale $a^2(x_0)$ se comporte asymptotiquement en $\beta \hbar^2 / 12M$, elle diminue alors que le terme $1/\beta M \Omega^2(x_0)$ tend vers l'infini [3, 11-20]. *Ce dernier montre l'importance des fluctuations locales thermiques, alors que la largeur de fluctuation locale $a^2(x_0)$ mesure l'importance des fluctuations quantiques.*

Après avoir calculé $a^2(x_0)$, le calcul de $\langle V(x(\tau)) \rangle_{\Omega}^{x_0}$ dans (2.19) est facile. L'idée consiste à décomposer $V(x(\tau))$ suivant les composantes de Fourier :

$$V(x(\tau)) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp[ik x(\tau)] \tilde{V}(k). \quad (2.26)$$

En utilisant (2.21), on obtient :

$$\begin{aligned} \langle V(x(\tau)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= [Z_{\Omega}^{x_0}]^{-1} \prod_{m=1}^{\infty} \left[\int \frac{dx_m^{\text{Re}} dx_m^{\text{Im}}}{\pi / \beta M \omega_m^2} \right] \exp \left[-\beta M \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)) |x_0|^2 \right] \times \\ &\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp \left[ik \left(x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (x_m e^{i\omega_m \tau} + c.c) \right) \right] \tilde{V}(k). \end{aligned} \quad (2.26)$$

L'exposant dans la fonction exponentielle (2.27) se ramène à

$$\begin{aligned} \exp \left[-\beta M \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)) \left\{ \left(x_m^{\text{Re}} - \frac{ik \cos \omega_m \tau}{\beta \omega_m^2 + \Omega^2(x_0)} \right)^2 + \left(x_m^{\text{Im}} - \frac{ik \sin \omega_m \tau}{\beta \omega_m^2 + \Omega^2(x_0)} \right)^2 \right\} \right] \times \\ \exp \left[-\frac{a^2(x_0)}{2} k^2 \right]. \end{aligned}$$

L'intégration sur x_m^{Re} et x_m^{Im} étant de type gaussien, le résultat est donné par

$$\langle V(x(\tau)) \rangle_{\Omega}^{x_0} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp \left[ikx_0 - \frac{a^2(x_0)}{2} k^2 \right] \tilde{V}(k). \quad (2.28)$$

En réinsérant de nouveau les coefficients de Fourier du potentiel

$$\tilde{V}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) e^{-ikx}, \quad (2.29)$$

et en effectuant l'intégration sur la variable k , nous obtenons

$$\langle V(x(\tau)) \rangle_{\Omega}^{x_0} \equiv V_{a^2}(x_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx'_0}{\sqrt{2\pi a^2(x_0)}} \exp \left[-(x'_0 - x_0)^2 / 2a^2(x_0) \right] V(x'_0). \quad (2.30)$$

$V_{a^2}(x_0)$ est appelé : *le potentiel maculé*, en anglais "*Smearing potential*" [3, 11-20], il tient compte des fluctuations de la statistique quantique sur une échelle de longueur $a(x_0)$. Il est

clair que la valeur moyenne $\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0}$ calculée dans (2.24) est un cas particulier,

vérifiant la formule maculée :

$$(x(\tau) - x_0)_{a^2}^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx'}{\sqrt{2\pi a^2(x_0)}} e^{-(x'-x_0)^2 / 2a^2(x_0)} (x' - x_0)^2 \equiv a^2(x_0). \quad (2.23)$$

Nous obtenons l'approximation du potentiel effectif classique d'essai :

$$W_1(x_0) = F_{\Omega}^{x_0} + V_{a^2}(x_0) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0), \quad (2.31)$$

et qui, par l'utilisation de l'inégalité de Jensen-Peierls, est une limite supérieure du potentiel effectif classique exact :

$$W_1(x_0) \geq V^{eff,cl}(x_0). \quad (2.32)$$

2.2.4. La détermination de $\Omega(x_0)$

La minimisation de $W_1(x_0)$ par rapport à $\Omega^2(x_0)$ permet de déterminer la fréquence $\Omega(x_0)$ de l'oscillateur harmonique d'essai locale. Dérivons $W_1(x_0)$ par rapport à $\Omega^2(x_0)$, nous obtenons deux termes :

$$\frac{dW_1(x_0)}{d\Omega^2(x_0)} = \frac{\partial W_1(x_0)}{\partial \Omega^2(x_0)} + \left[\frac{\partial W_1(x_0)}{\partial a^2(x_0)} \right]_{\Omega(x_0)} \cdot \frac{\partial a^2(x_0)}{\partial \Omega^2(x_0)}. \quad (2.33)$$

Le premier terme de (2.33) donne :

$$\frac{\partial W_1(x_0)}{\partial \Omega^2(x_0)} = \frac{M}{2} \left[\frac{1}{\beta M \Omega^2(x_0)} \left(\frac{\beta \hbar \Omega(x_0)}{2} \coth \frac{\beta \hbar \Omega(x_0)}{2} - 1 \right) - a^2(x_0) \right]. \quad (2.34)$$

Ce terme est nul conformément à l'expression (2.24). La minimisation se fait donc uniquement par rapport à $a^2(x_0)$ via la condition :

$$\frac{\partial W_1(x_0)}{\partial a^2(x_0)} = 0, \quad (2.35)$$

et qui détermine la fréquence d'essai $\Omega^2(x_0)$:

$$\begin{aligned} \Omega^2(x_0) &= \frac{2}{M} \frac{\partial V_{a^2}(x_0)}{\partial a^2(x_0)} \\ &= \frac{1}{M} \frac{\partial^2 V_{a^2}(x_0)}{\partial x_0^2}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Le potentiel $W_1(x_0)$ avec le couple minimisé $\Omega^2(x_0)$ et $a^2(x_0)$ constituent l'approximation variationnelle de Feynman-Kleinert du potentiel effectif classique exact.

L'approximation de la fonction de partition est donnée par :

$$Z_1 \equiv e^{-\beta F_1} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi \hbar^2 \beta / M}} e^{-\beta W_1(x_0)} \leq Z. \quad (2.37)$$

2.2.5. La précision de l'approximation

Aux hautes températures, l'approximation du potentiel effectif classique d'essai $W_1(x_0)$ est parfaite. En effet, $W_1(x_0)$ tend vers le potentiel $V(x_0)$ de la même manière que

le potentiel effectif classique exact. Aux basses températures, l'intégrale sur x_0 dans (2.37) est dominée par le minimum de $W_1(x_0)$ qui donne l'approximation F de l'énergie libre, nous constatons que :

$$\lim_{T \rightarrow 0} W_1(x_0) = V_{a^2}(x_0) + \frac{\hbar \Omega(x_0)}{2} - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0). \quad (2.38-a)$$

Aux basses températures, $a^2(x_0)$ est inversement proportionnelle au carré de la fréquence d'essai, $\hbar/2M\Omega^2(x_0)$. L'expression (2.38-a) est équivalente à :

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow 0} W_1(x_0) &= \frac{\hbar \Omega(x_0)}{4} + V_{a^2}(x_0) \\ &= \frac{1}{8} \frac{\hbar^2}{M a^2(x_0)} + V_{a^2}(x_0). \end{aligned} \quad (2.38-b)$$

Soient H et $\psi(x)$, respectivement, le Hamiltonien et la fonction d'onde correspondants à un système donné [6-9] :

$$H = \frac{p^2}{2M} + V(x), \quad (2.39)$$

et,

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi a^2(x_0))^{1/4}} \exp\left[-\frac{1}{4a^2(x_0)}(x-x_0)^2\right]. \quad (2.40)$$

La valeur moyenne de l'opérateur de l'Hamiltonien H prise sur les états des fonctions d'ondes $\psi(x)$ dans l'espace des configurations est :

$$\langle H \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) H \psi(x) = \frac{1}{8} \frac{\hbar^2}{M a^2(x_0)} + V_{a^2}(x_0). \quad (2.38-b)$$

Ainsi donc, l'expression (2.38-b) n'est autre que la valeur moyenne de l'opérateur H . Si E_1 est le minimum de la valeur moyenne de l'opérateur Hamiltonien H soumis à la variation des deux paramètres x_0 et $a^2(x_0)$ [44-46] :

$$E_1 = \min_{x_0, a^2(x_0)} \langle H \rangle_\psi, \quad (2.41)$$

alors, aux basses températures, l'approximation F_1 de l'énergie libre converge vers E_1

$$\lim_{T \rightarrow 0} F_1 = E_1. \quad (2.42)$$

2.3. Théorie des perturbations variationnelles pour matrices densités

2.3.1. Caractéristiques générales de la théorie.

Dans cette partie, nous développons la théorie des perturbations variationnelles dans la représentation des intégrales du chemin pour les matrices densités, en tenant compte des ordres élevés.

La théorie des perturbations variationnelles a été conçue pour approximer l'oscillateur harmonique en théorie quantique statistique, via un développement perturbatif. Il est particulièrement essentiel d'attribuer un traitement spécial aux fluctuations du chemin moyen \bar{x} donné dans (2.6), puisqu'aux hautes températures, des fortes fluctuations thermiques surgissent. Ces fluctuations ne peuvent être traitées par un développement perturbatif quelconque, à moins que le potentiel soit harmonique [19-21]. Pour cette raison, on doit développer l'intégrale du chemin autour d'un chemin d'essai harmonique avec les points x_a et x_b fixes, correspondants aux deux extrémités du chemin $x(\tau)$, un chemin moyen x_0 et une fréquence d'essai $\Omega(x_b, x_a; x_0)$, donnant l'approximation $W_N(x_b, x_a; x_0)$ d'ordre N à l'énergie libre locale appelée : *potentiel effectif classique* et qui sera optimisé par rapport à $\Omega(x_b, x_a; x_0)$.

Ayant calculé $W_N(x_b, x_a; x_0)$ et en procédant en complète analogie avec la mécanique statistique quantique, on intègre le facteur de Boltzmann $\exp[-\beta W_N(x_b, x_a; x_0)]$ sur x_0 pour obtenir finalement la fonction de partition quantique complète d'ordre N .

$$Z_N = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi \hbar^2 \beta / M}} \exp[-\beta W_N(x_b, x_a; x_0)]. \quad (2.43)$$

La représentation de l'intégrale du chemin euclidien dans l'espace des configurations est équivalente à la matrice densité dans l'intervalle des temps imaginaires, elle est donnée par [19-21] :

$$\rho(x_b, x_a) = \frac{1}{Z} \tilde{\rho}(x_b, x_a), \quad (2.44)$$

où $\tilde{\rho}(x_b, x_a)$ est la matrice densité non normalisée :

$$\tilde{\rho}(x_b, x_a) = \oint Dx \exp\{-A[x]/\hbar\}. \quad (2.45)$$

Considérons maintenant l'intégrale du chemin euclidien pris sur tous les chemins périodiques $x(\tau)$, avec la condition aux limites sur le chemin $x(0) = x(\hbar\beta)$, d'un oscillateur

harmonique avec un minimum $x_m(x_b, x_a)$ et une fréquence d'essai $\Omega(x_b, x_a; x_0)$, l'action est donnée par :

$$A^{\Omega, x_m}[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{1}{2} M \dot{x}^2(\tau) + \frac{1}{2} M \Omega^2 (x(\tau) - x_m)^2 \right\}. \quad (2.46)$$

La fonction de partition correspondante est :

$$Z^{\Omega, x_m} = \oint Dx \exp\left\{-A^{\Omega, x_m}[x]/\hbar\right\} = \frac{1}{2 \sinh(\hbar\beta\Omega/2)}. \quad (2.47)$$

On définit la matrice densité non normalisée de l'oscillateur harmonique à partir de la définition (2.45) comme une fonction dépendante de x_a et x_b , ainsi que des deux paramètres arbitraires $\Omega(x_b, x_a; x_0)$ et $x_m(x_b, x_a)$ [19] :

$$\rho_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a) = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar \sinh(\hbar\beta\Omega)}} \exp\left\{-\frac{M\Omega}{2\hbar \sinh(\hbar\beta\Omega)} \left[(\tilde{x}_b^2 + \tilde{x}_a^2) \cosh(\hbar\beta\Omega) - 2\tilde{x}_b\tilde{x}_a \right]\right\}. \quad (2.48)$$

où nous avons introduit l'abréviation :

$$\tilde{x}(\tau) = x(\tau) - x_m. \quad (2.49)$$

Les fonctions de corrélations quantiques sont données par :

$$\langle \dots \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} \equiv \frac{1}{\tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)} \int_{x(0)=x_a}^{x(\hbar\beta)=x_b} Dx (\dots) \exp\left[-A^{\Omega, x_m}[x]/\hbar\right]. \quad (2.50)$$

Le chemin classique d'une particule se mouvant dans un potentiel harmonique est :

$$x_{cl}(\tau) = \frac{\tilde{x}_b \sinh(\Omega\tau) + \tilde{x}_a \sinh \Omega(\hbar\beta - \tau)}{\sinh(\hbar\beta\Omega)}. \quad (2.51)$$

2.3.2. La théorie des perturbations variationnelles pour matrice densité

Pour obtenir l'approximation variationnelle de la matrice de densité, il est utile de séparer l'action générale :

$$A[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2(\tau) + V(x(\tau)) \right], \quad (2.52)$$

en une action d'essai, pour laquelle la matrice densité est connue plus une action contenant l'expression du potentiel original. Mais comme $x(\tau)$ fluctue étroitement au voisinage du chemin classique de l'oscillateur harmonique $x_{cl}(\tau)$ liant x_a à x_b , il est nécessaire

d'effectuer un calcul perturbatif pour le potentiel effectif classique autour d'un minimum x_m déterminé par les points x_a et x_b , et par le minimum du potentiel initial $V(x)$.

Nous utiliserons l'intégrale du chemin euclidien de l'oscillateur harmonique pour matrices densités centré en x_m comme système d'essai traitant les fluctuations du chemin moyen x_0 autour de x_m , de la même manière que les autres fluctuations (thermiques et quantiques).

Décomposons l'action (2.52) comme :

$$A[x(\tau)] = A^{\Omega, x_m}[x(\tau)] + A_{\text{int}}[x(\tau)], \quad (2.53)$$

avec

$$A_{\text{int}}[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau V_{\text{int}}[x(\tau)], \quad (2.54)$$

où le potentiel d'interaction est la différence entre le potentiel original $V(x)$ et celui de l'oscillateur harmonique déplacé de x_m :

$$V_{\text{int}}[x] = V[x] - \frac{1}{2} M \Omega^2 (x(\tau) - x_m)^2. \quad (2.55)$$




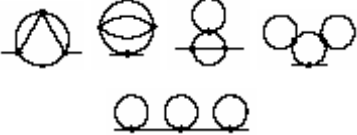
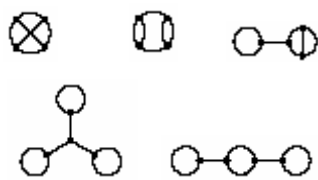
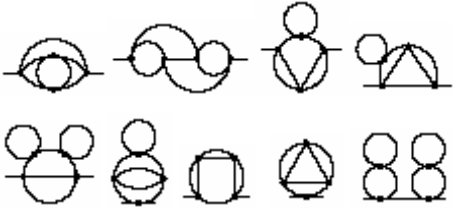
Evaluons l'intégrale du chemin euclidien non normalisé (2.45) entre les deux points $x_a = x(0)$ et $x_b = x(\hbar\beta)$, en traitant l'interaction (2.54) comme une perturbation conduisant momentanément au développement suivant :

$$\tilde{\rho}(x_b, x_a) = \tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a) \left[1 - \frac{1}{\hbar} \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} + \frac{1}{2\hbar^2} \langle A_{\text{int}}^2[x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} - \dots \right], \quad (2.56)$$

avec $\langle \dots \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m}$ sont définies dans (2.50). Remarquons que l'ordre zéro du développement (2.56) consiste à la contribution de l'oscillateur harmonique calculé dans (2.48). Aux ordres élevés, les contributions contiennent les moyennes de l'interaction définie en (2.54).

Dans l'expression (2.56), les fonctions de corrélations quantiques correspondantes font apparaître deux types de diagrammes de Feynman bien distincts, les premiers sont des diagrammes composés de plusieurs parties indépendantes, "*déconnectées*" les unes des autres. Au contraire, les autres sont formés d'un seul bloc, nous les nommerons "*connexes*" [3, 19, 23, 46]. Le tableau 2.1 illustre quelques diagrammes de Feynman connexes pour les interactions en x^3 et x^4 , où p se réfère aux nombres des sommets (*vertex*). L'ordre 1 et 3 n'existe pas dans le cas de l'interaction en x^3 à cause du caractère impaire de l'interaction.

Tableau 2.1 : Quelques diagrammes de Feynman connectés "connexes" correspondants aux interactions en x^3 et x^4 .

p	Les diagrammes connexes de l'interaction en x^3 [22].	Les diagrammes connexes de l'interaction en x^4 [19].
1		
2		
3		
4		

On peut démontrer que la fonction $\ln \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m}$ est exactement égale à la somme des contributions de tous les diagrammes de Feynman connexes. Donc, la relation :

$$\ln \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} = \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_b, x_a; c}^{\Omega, x_m}, \quad (2.57)$$

étant d'une importance capitale, permet d'éliminer tous les diagrammes non connexes.

Brièvement, l'expression (2.56) devient :

$$\tilde{\rho}(x_b, x_a) = \tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_b, x_a; c}^{\Omega, x_m} + \frac{1}{2\hbar^2} \langle A_{\text{int}}^2[x] \rangle_{x_b, x_a; c}^{\Omega, x_m} - \dots \right]. \quad (2.58)$$

Les valeurs moyennes $\langle \dots \rangle_{x_b, x_a; c}^{\Omega, x_m}$ sont appelées *cumulants*, les deux premiers sont définis par [3, 19, 20] :

$$\begin{aligned} \langle O_1(x(\tau_1)) \rangle_{x_b, x_a; c}^{\Omega, x_m} &= \langle O_1(x(\tau_1)) \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m}, \\ \langle O_1(x(\tau_1)) O_2(x(\tau_2)) \rangle_{x_b, x_a; c}^{\Omega, x_m} &= \langle O_1(x(\tau_1)) O_2(x(\tau_2)) \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} - \langle O_1(x(\tau_1)) \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} \langle O_2(x(\tau_2)) \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} \\ &\vdots \end{aligned} \quad (2.59)$$

La série (2.58) est tronquée après le N^{eme} terme, donnant l'approximation au N^{eme} ordre pour la matrice densité :

$$\tilde{\rho}(x_b, x_a) = \tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a) \exp \left[\sum_{n=1}^N \frac{(-1)^n}{n! \hbar^n} \langle A_{int}^n [x] \rangle_{x_b, x_a; c}^{\Omega, x_m} \right], \quad (2.60)$$

qui dépend explicitement des paramètres variationnels Ω^2 et x_m .

Dans l'espace des configurations, la distribution de Boltzmann est contrôlée par le potentiel classique initial $V(x)$:

$$\tilde{\rho}_{cl}(x) = \sqrt{\frac{M}{2\pi \hbar^2 \beta}} \exp[-\beta V(x)]. \quad (2.61)$$

Par analogie, on introduit un potentiel effectif classique $V^{eff,cl}(x_b, x_a)$ qui gouverne la matrice densité non normalisée :

$$\tilde{\rho}(x_b, x_a) = \sqrt{\frac{M}{2\pi \hbar^2 \beta}} \exp[-\beta V^{eff,cl}(x_b, x_a)], \quad (2.62)$$

conduisant à la matrice densité non normalisée d'ordre N contrôlée par le potentiel effectif classique $W_N^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)$:

$$\tilde{\rho}_N(x_b, x_a) = \sqrt{\frac{M}{2\pi \hbar^2 \beta}} \exp[-\beta W_N^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)], \quad (2.63)$$

où $W_N^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)$ est obtenue à partir des équations (2.48), (2.60) et (2.62) via un développement des cumulants :

$$\begin{aligned} W_N^{\Omega, x_m}(x_b, x_a) = & \frac{1}{2\beta} \ln \frac{\sinh(\hbar\beta\Omega)}{\hbar\beta\Omega} + \frac{M\Omega}{2\hbar\beta \sinh(\hbar\beta\Omega)} \left[(\tilde{x}_b^2 + \tilde{x}_a^2) \cosh(\hbar\beta\Omega) - 2\tilde{x}_b\tilde{x}_a \right] \\ & - \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^N \frac{(-1)^n}{n! \hbar^n} \langle A_{int}^n [x] \rangle_{x_b, x_a; c}^{\Omega, x_m}, \end{aligned} \quad (2.64)$$

et qui sera optimisé par rapport aux paramètres variationnels explicites Ω^2 et x_m , le résultat sera noté $W_N(x_b, x_a)$:

$$\frac{\partial W_N^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)}{\partial \Omega^2} = 0, \quad \frac{\partial W_N^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)}{\partial x_m} = 0, \quad (2.65)$$

et nous noterons les solutions trouvées par : $\Omega^{2^N}(x_b, x_a)$ et $x_m^N(x_b, x_a)$, respectivement.

L'approximation au N^{eme} ordre de la matrice densité normalisée est obtenue de la relation :

$$\rho_N(x_b, x_a) = Z_N^{-1} \tilde{\rho}_N^{\Omega^2, x_m}(x_b, x_a), \quad (2.66)$$

où la fonction de partition correspondante est donnée par :

$$Z_N = \int_{-\infty}^{\infty} dx \tilde{\rho}_N^{\Omega^2, x_m}(x_b, x_a). \quad (2.67)$$

2.3.3. Formule maculée pour matrice densité

Pour aboutir à une expression analytique exacte de $W_N^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)$, il est nécessaire de trouver une manière efficace et élégante d'évaluer les fonctions de corrélations connexes (2.50) aux différents ordres de l'interaction (2.54) centré en x_m :

$$\begin{aligned} \langle A_{\text{int}}^n[x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} &= \frac{1}{\tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)} \times \\ &\int_{\tilde{x}_a}^{\tilde{x}_b} D\tilde{x} \prod_{l=1}^n \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau_l V_{\text{int}}(\tilde{x}(\tau_l) + x_m) \right] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} A^{\Omega, x_m}[\tilde{x}(\tau) + x_m] \right\}. \end{aligned} \quad (2.68)$$

L'introduction de la fonction delta de Dirac et sa transformée de Fourier permet de réécrire le potentiel d'interaction sous la forme [19, 20] :

$$V_{\text{int}}(\tilde{x}(\tau_l) + x_m) = \int_{-\infty}^{\infty} dz_l V_{\text{int}}(z_l + x_m) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda_l}{2\pi} \exp\{i\lambda_l z_l\} \exp \left[-\int_0^{\hbar\beta} i\lambda_l \delta(\tau - \tau_l) \tilde{x}(\tau) d\tau \right], \quad (2.69)$$

et en introduisant le courant :

$$J(\tau) = \sum_{l=1}^n i\hbar\lambda_l \delta(\tau - \tau_l), \quad (2.70)$$

l'équation (2.68) devient :

$$\begin{aligned} \langle A_{\text{int}}^n[x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} &= \frac{1}{\tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)} \times \\ &\prod_{l=1}^n \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau_l \int_{-\infty}^{\infty} dz_l V_{\text{int}}(z_l + x_m) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda_l}{2\pi} \exp[i\lambda_l z_l] \right] K^{\Omega, x_m}[J(\tau)]. \end{aligned} \quad (2.71)$$

On reconnaît bien là, en $K^{\Omega, x_m}[J(\tau)]$, l'expression mathématique du propagateur :

$$K^{\Omega, x_m}[J(\tau)] = \int_{\tilde{x}_a}^{\tilde{x}_b} D\tilde{x} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{m}{2} \dot{\tilde{x}}^2(\tau) + \frac{M}{2} \Omega^2 \tilde{x}^2(\tau) + J(\tau) \tilde{x}(\tau) \right] \right\}, \quad (2.72)$$

il représente la fonction génératrice de toutes les fonctions de corrélations de l'oscillateur harmonique déplacé, et dépendant explicitement du courant $J(\tau)$.

Remarquons que pour un courant nul, $K^{\Omega, x_m}[J(\tau)]$ se réduit au propagateur harmonique donnée en (2.48) :

$$K^{\Omega, x_m}[J] \Big|_{J=0} = \tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a). \quad (2.73)$$

Pour des courants non nuls, la solution de l'intégrale fonctionnelle (2.72) est :

$$K^{\Omega, x_m}[J] = \tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau J(\tau) x_{cl}(\tau) + \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' J(\tau) G^\Omega(\tau, \tau') J(\tau') \right], \quad (2.74)$$

où $x_{cl}(\tau)$ est le chemin classique (2.51) et $G^\Omega(\tau, \tau')$ sont les fonctions de Green harmoniques définies par :

$$G^\Omega(\tau, \tau') = \frac{\hbar}{2M\Omega} \frac{\cosh \Omega(\tau - \tau' - \hbar\beta) - \cosh \Omega(\tau + \tau' - \hbar\beta)}{\sinh(\hbar\beta\Omega)}. \quad (2.75)$$

En utilisant l'expression du courant (2.70), l'équation (2.74) devient :

$$K^{\Omega, x_m}[J(\tau)] = \tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a) \exp \left[-i\vec{\lambda}^T \vec{x}_{cl} - \frac{1}{2} \vec{\lambda}^T G \vec{\lambda} \right], \quad (2.76)$$

où $\vec{\lambda} \equiv (\lambda_1, \dots, \lambda_n)^T$ et $\vec{x}_{cl} \equiv (x_{cl}(\tau_1), \dots, x_{cl}(\tau_n))^T$ sont des vecteurs à n dimensions et T dénote la transposition. G est une matrice $n \times n$ symétrique dont les éléments sont $G_{kl} = G^\Omega(\tau_k, \tau_l)$.

En substituant (2.76) dans (2.71), et en effectuant l'intégrale par rapport à $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, on obtient l'expression de la formule maculée pour matrice densité d'ordre n :

$$\begin{aligned} \langle A_{\text{int}}^n[x(\tau)] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} &= \frac{1}{\tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)} \prod_{l=1}^n \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau_l \int_{-\infty}^{\infty} dz_l V_{\text{int}}(z_l + x_m) \right] \times \\ &\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n \det G}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^n (z_k - x_{cl}(\tau_k)) G_{kl}^{-1} (z_l - x_{cl}(\tau_l)) \right\}. \end{aligned} \quad (2.77)$$

L'intégrand contient une distribution gaussienne d'ordre n décrivant les fluctuations thermiques et quantiques autour du chemin classique harmonique $x_{cl}(\tau)$ centré en x_m , ayant comme largeur la fonction de Green donnée en (2.75).

Pour les chemins fermés, les extrémités du chemin coïncident avec la condition $x_a = x_b$, la matrice densité se réduit à la densité de particule, $\rho(x_a, x_a) \equiv \rho(x_a)$,

$$\rho(x_a) = \frac{1}{Z} \tilde{\rho}(x_a, x_a) = \frac{1}{Z} \oint Dx \delta(x - x_a) \exp \left\{ -\frac{A[x(\tau)]}{\hbar} \right\}, \quad (2.78)$$

et la formule (2.77) est réécrite sous la forme :

$$\langle A_{\text{int}}^n [x] \rangle_{x_a, x_a}^{\Omega, x_m} = \frac{1}{\rho_0^{\Omega, x_m}(x_a)} \prod_{l=1}^n \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau_l \int_{-\infty}^{\infty} dz_l V_{\text{int}}(z_l + x_m) \right] \frac{\exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^n z_k a_{kl}^{-2} z_l \right\}}{\sqrt{(2\pi)^{n+1} \det a^2}}, \quad (2.79)$$

où $z_0 = \tilde{x}_a$, a^2 dénote la matrice $(n+1) \times (n+1)$ dont les éléments $a_{kl}^2 = a^2(\tau_k, \tau_l)$ sont obtenus de la fonction de Green pour les chemins périodiques $G^\Omega(\tau, \tau')$ comme [3,19,20] :

$$a^2(\tau, \tau') \equiv \frac{\hbar}{M} G^\Omega(\tau, \tau') = \frac{\hbar}{2M\Omega} \frac{\cosh \Omega(|\tau - \tau'| - \hbar\beta/2)}{\sinh(\hbar\beta\Omega/2)}. \quad (2.80)$$

Le résultat obtenu en (2.79) est très intéressant : *toutes les valeurs moyennes connexes de l'interaction (2.54) sont décrites par la formule maculée (2.79) pour les matrices densités, en terme d'une intégrale de type gaussienne ordinaire.*

2.3.4. Formule maculée au premier ordre

On cherche à déduire une nouvelle représentation pour la formule maculée (2.79) au premier ordre permettant d'effectuer l'intégrale sur l'espace et sur le temps imaginaire.

Intéressons-nous aux potentiels $V(x)$ symétriques et centrés à l'origine. Si $V(x)$ a un minimum à l'origine, alors x_m est nul. Par contre s'il a plusieurs minima, alors x_m ne sera nul qu'aux hautes températures.

Au premier ordre, la formule maculée s'écrit :

$$\langle A_{\text{int}} [x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} = \frac{1}{\rho_0^\Omega(x_a)} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} V_{\text{int}}(z) \frac{1}{\sqrt{a_{00}^4 - a_{01}^4}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{(z^2 + x_a^2)a_{00}^2 - 2zx_a a_{01}^2}{a_{00}^4 - a_{01}^4} \right\}. \quad (2.81)$$

Utilisation de la formule de Mehler [51] :

$$\frac{1}{\sqrt{1-b^2}} \exp \left\{ -\frac{(x^2 + x'^2)(1+b^2) - 4xx'b}{2(1-b^2)} \right\} = \exp \left\{ -\frac{1}{2}(x^2 + x'^2) \right\} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{b^n}{2^n n!} H_n(x) H_n(x'), \quad (2.82)$$

conduit à un développement en terme de polynômes d'Hermite $H_n(x)$ de la formule (2.81)

$$\langle A_{\text{int}} [x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hbar\beta}{2^n n!} C_\beta^{(n)} H_n \left(\frac{x_a}{\sqrt{2a_{00}^2}} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi a_{00}^2}} V_{\text{int}}(z) e^{-z^2/2a_{00}^2} H_n \left(\frac{z}{\sqrt{2a_{00}^2}} \right), \quad (2.83)$$

où nous avons introduit les fonctions sans dimensions $C_\beta^{(n)}$ définies par :

$$C_\beta^{(n)} = \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{a_{01}^2}{a_{00}^2} \right)^2 = \frac{1}{2^n \cosh^n \left(\frac{\hbar\beta\Omega}{2} \right)} \sum_{k=0}^n C_n^k \frac{\sinh \left(\hbar\beta\Omega \left(\frac{n-k}{2} \right) \right)}{\hbar\beta\Omega \left(\frac{n-k}{2} \right)}. \quad (2.84)$$

Aux hautes températures, ces fonctions tendent toutes vers l'unité :

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} C_\beta^{(n)} = 1, \quad (2.85)$$

tandis qu'aux basses températures, nous avons :

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} C_\beta^{(n)} = \begin{cases} 1 & , n = 0 \\ 2/\hbar\beta\Omega n & , n > 0 \end{cases}. \quad (2.86)$$

L'approximation du potentiel effectif classique en premier ordre est donnée par :

$$W_1^\Omega(x_a) = \frac{1}{2\beta} \ln \frac{\sinh(\hbar\beta\Omega)}{\hbar\beta\Omega} + \frac{M\Omega}{\hbar\beta} x_a^2 \tanh \frac{\hbar\beta\Omega}{2} + V_{a^2}^\Omega(x_a), \quad (2.87)$$

avec

$$V_{a^2}^\Omega(x_a) = \frac{1}{\hbar\beta} \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_a, x_a}^\Omega, \quad (2.88)$$

est le potentiel d'interaction maculé du système considéré.

La figure 2.2 illustre le comportement des fonctions $C_\beta^{(n)}$ en fonction du produit $\hbar\beta\Omega$.

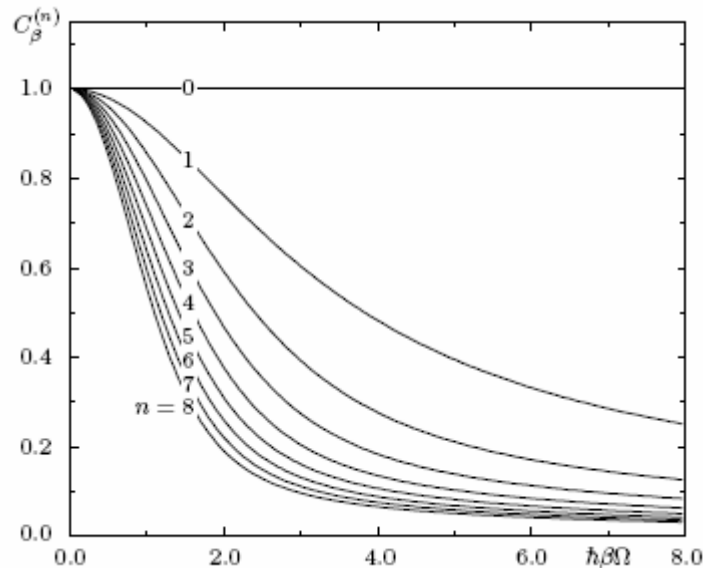


Figure 2.2 : Les 9 premières fonctions $C_\beta^{(n)}$ en fonction de $\hbar\beta\Omega$, d'après [20].

Il est instructif de discuter, séparément, les limites $\beta \rightarrow 0$ et $\beta \rightarrow \infty$, caractérisées par la dominance des fluctuations thermiques et quantiques, respectivement.

- la limite classique

La limite classique correspond à la limite des hautes températures ($\beta \rightarrow 0$), le potentiel effectif classique (2.87) se réduit à :

$$W_1^\Omega(x_a) = \frac{1}{2} M \Omega^2 x_a^2 + \lim_{\beta \rightarrow 0} V_{a^2}^\Omega(x_a). \quad (2.89)$$

Le second terme se déduit en insérant (2.85) dans (2.83), conduisant la limite du potentiel d'interaction maculé à :

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} V_{a^2}^\Omega(x_a) = \lim_{\beta \rightarrow 0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} H_n \left(\sqrt{\frac{M \Omega^2 \beta}{2}} x_a \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi / M \Omega^2 \beta}} V_{\text{int}}(z) e^{-\beta M \Omega^2 z^2 / 2} H_n \left(\sqrt{\frac{M \Omega^2 \beta}{2}} z \right) \quad (2.90)$$

En utilisant la propriété des polynômes d'Hermite [51] :

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} H_n(x) H_n(x') = \delta(x - x'), \quad (2.91)$$

et en intégrant sur z , on réduit le potentiel d'interaction maculé au potentiel d'interaction :

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} V_{a^2}^\Omega(x_a) = V_{\text{int}}(x_a). \quad (2.92)$$

Ainsi, aux hautes températures, le potentiel effectif classique au premier ordre approche le potentiel classique initial :

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} W_1^\Omega(x_a) = \frac{1}{2} M \Omega^2 x_a^2 + V_{\text{int}}(x_a) = V(x_a). \quad (2.93)$$

- la limite des températures zéro

Aux basses températures, le potentiel effectif classique (2.87) devient :

$$W_1^\Omega(x_a) = \frac{\hbar \beta}{2} + \lim_{\beta \rightarrow \infty} V_{a^2}^\Omega(x_a). \quad (2.94)$$

La limite des températures zéro du potentiel d'interaction maculé est calculée en tenant compte des équations (2.83) et (2.88), et de la limite des polynômes $C_\beta^{(n)}$ obtenus dans (2.86), on obtient alors, avec $H_0(x) = 1$ [51] et de la constante inverse de la longueur

$\kappa = \sqrt{\frac{M \Omega}{\hbar}}$, la limite suivante :

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} V_{a^2}^\Omega(x_a) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \sqrt{\frac{\kappa^2}{\pi}} V_{\text{int}}(z) \exp\{-\kappa^2 z^2\} H_0^2(\kappa z). \quad (2.95)$$

En introduisant les valeurs propres harmoniques :

$$E_n^\Omega = \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.96)$$

ainsi que les fonctions d'ondes harmoniques correspondantes :

$$\psi_n^\Omega(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{\kappa^2}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\kappa^2 z^2/2} H_n(\kappa x), \quad (2.97)$$

le potentiel effectif classique (2.94) est réexprimé par :

$$W_1^\Omega(x_a) = E_0^\Omega + \langle \psi_0^\Omega | V_{\text{int}} | \psi_0^\Omega \rangle. \quad (2.98)$$

On reconnaît dans cette dernière relation [7-9], l'expression de l'énergie de l'état fondamental déduite par la théorie des perturbations stationnaires de Rayleigh-Schrödinger.

La densité de particule normalisée est donnée par :

$$\rho_1^\Omega(x_a) \equiv \frac{\tilde{\rho}_1^\Omega(x_a)}{2} = \rho_0^\Omega(x_a) \frac{\exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_a, x_a}^\Omega\right\}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx_a \rho_0^\Omega(x_a) \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_a, x_a}^\Omega\right\}}, \quad (2.99)$$

et le développement au premier ordre de (2.99) donne :

$$\rho_1^\Omega(x_a) = \rho_0^\Omega(x_a) \left[1 - \frac{1}{\hbar} \left(\langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_a, x_a}^\Omega - \int_{-\infty}^{\infty} dx_a \rho_0^\Omega(x_a) \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_a, x_a}^\Omega \right) \right]. \quad (2.100)$$

En insérant (2.48) et (2.83) dans le troisième terme de l'équation (2.100), l'intégrale sur x_a se transforme en une intégrale sur z :

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_a \rho_0^\Omega(x_a) \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_a, x_a}^\Omega = \beta \int_{-\infty}^{\infty} dz \sqrt{\frac{\kappa^2}{\pi}} V_{\text{int}}(z) \exp[-\kappa^2 z^2], \quad (2.101)$$

en tenant compte de la relation d'orthonormalité des polynômes d'Hermite [51] :

$$\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx_a H_n(x_a) H_0(x_a) \exp[-x_a^2] = \delta_{n0}. \quad (2.102)$$

Mais, remarquons que, l'équation (2.101) n'est autre que le terme nul ($n=0$) de l'expression (2.83) de signe opposé, éliminant ainsi la composante zéro du second terme de (2.100). L'expression qui en résulte est :

$$\rho_1^\Omega(x_a) = \rho_0^\Omega(x_a) \left[1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta}{2^n n!} C_\beta^{(n)} H_n(\kappa x_a) \int_{-\infty}^{\infty} dz \sqrt{\frac{\kappa^2}{\pi}} V_{\text{int}}(z) e^{-\kappa^2 z^2} H_n(\kappa z) \right]. \quad (2.103)$$

Aux basses températures, les fonctions $C_\beta^{(n)}$ s'écrivent d'après (2.86) et (2.96) comme :

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \beta C_{\beta}^{(n)} = \frac{2}{E_n^{\Omega} - E_0^{\Omega}}. \quad (2.104)$$

On obtient alors de (2.60) la limite :

$$\rho_1^{\Omega}(x_a) = \rho_0^{\Omega}(x_a) \left[1 - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} \frac{1}{E_n^{\Omega} - E_0^{\Omega}} H_n(\kappa x_a) \int_{-\infty}^{\infty} dz \sqrt{\frac{\kappa^2}{\pi}} V_{\text{int}}(z) e^{-\kappa^2 z^2} H_n(\kappa z) H_0(\kappa z) \right]. \quad (2.105)$$

En tenant compte des fonctions propres harmoniques (2.97), on peut réécrire l'équation (2.105) sous la forme :

$$\rho_1^{\Omega}(x_a) = |\psi_0(x_a)|^2 = |\psi_0^{\Omega}(x_a)|^2 - 2\psi_0^{\Omega}(x_a) \sum_{n>0} \psi_n^{\Omega}(x_a) \frac{\langle \psi_n^{\Omega} | V_{\text{int}} | \psi_0^{\Omega} \rangle}{E_n^{\Omega} - E_0^{\Omega}}, \quad (2.106)$$

et qui est équivalente à la densité de particule déduite par la théorie des perturbations stationnaires de Rayleigh-Schrödinger.

En résumé, on vient de voir que cette méthode reproduit le spectre d'énergie exactement comme il est décrit par la théorie des perturbations stationnaires à hautes et basses températures. L'approche variationnelle de la densité de particule (2.106) peut être utilisée pour déterminer, approximativement, la fonction d'onde $\psi_0(x_a)$ de l'état fondamental d'un système. Ainsi, elle fournit aux théories perturbatives et variationnelles le moyen de calculer directement la fonction d'onde de l'état fondamental.

2.3.5. La formule maculée généralisée ($D>1$)

En pratique, la plupart des systèmes physiques étudiés possèdent un nombre fini de degrés de liberté D , ($D > 1$), ce qui nécessite une extension de la formule maculée [19, 20].

En général, on considère un système harmonique d'essai anisotropique, où le paramètre variationnel Ω^2 devient une matrice $d \times d$, et dont les éléments sont données par $\Omega_{\mu\nu}^2$ avec $\mu, \nu = 1, 2, \dots, D$.

- L'approximation isotropique

L'hypothèse isotropique sur les fréquences d'essai

$$\Omega_{\mu\nu}^2 = \Omega^2 \delta_{\mu\nu}, \quad (2.107)$$

apporte une appréciation aux propriétés du système. Dans ce cas, la formule maculée d'ordre n en (2.79) peut être généralisée directement à :

$$\langle A_{\text{int}}^n[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^{\Omega} = \frac{1}{\rho_0^{\Omega}(\vec{r}_a)} \times \prod_{l=1}^n \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau_l \int_{-\infty}^{\infty} d^D z_l V_{\text{int}}(\vec{z}_l) \right] \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{n+1} \det a^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^n \vec{z}_k a_{kl}^{-2} \vec{z}_l \right\}, \quad (2.108)$$

avec le vecteur $\vec{z}_l = (z_{1l}, z_{2l}, \dots, z_{dl})^T$.

Notons que les indices grecs $\mu, \nu, \dots = 1, 2, \dots, D$ spécifient la dimension de l'espace, alors que les indices latins $k, l, \dots = 0, 1, 2, \dots, n$ se réfèrent aux différents temps imaginaires. Le vecteur \vec{z}_0 est dénoté \vec{r}_a . La densité de particule normalisée :

$$\rho_0^{\Omega}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a_{00}^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2a_{00}^2} \sum_{\mu=1}^D x_{\mu}^2 \right\}, \quad (2.109)$$

est utilisée pour normaliser l'expression (2.108).

- L'approximation anisotropique

Considérons les potentiels à symétries radiales $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$, la fréquence d'essai se décompose en une fréquence radiale (longitudinale) Ω_L et une autre transversale Ω_T :

$$\Omega_{\mu\nu}^2 = \Omega_L^2 \frac{x_{a\mu} x_{a\nu}}{r_a^2} + \Omega_T^2 \left(\delta_{\mu\nu} - \frac{x_{a\mu} x_{a\nu}}{r_a^2} \right), \quad (2.110)$$

avec $r_a = |\vec{r}_a|$. Pour des raisons pratiques, on introduit une rotation sur les coordonnées du système via une matrice de rotation U , $\vec{x}_n = U \vec{x}_n$, de telle manière que le vecteur \vec{r}_a soit dirigé le long du premier axe :

$$\left(\vec{r} \right)_{\mu} \equiv \vec{z}_{\mu 0} = \begin{cases} r_a, & n = 0 \\ 0, & 2 \leq \mu \leq D \end{cases}, \quad (2.111)$$

La matrice Ω^2 est diagonale :

$$\overline{\Omega}^2 = \begin{pmatrix} \Omega_L^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Omega_T^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \Omega_T^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \Omega_T^2 \end{pmatrix} = U \Omega^2 U^{-1}. \quad (2.112)$$

Après avoir effectué la rotation, la formule maculée anisotropique d'ordre et de dimension n s'écrit :

$$\begin{aligned}
\langle A_{\text{int}}^n[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^{\Omega} &= \frac{(2\pi)^{-D(n+1)/2}}{\rho_0^{\Omega_L, \Omega_T}(\vec{r}_a)} \prod_{l=1}^n \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau_l \int_{-\infty}^{\infty} d^D \bar{z}_l V_{\text{int}}(|\bar{z}_l|) \right] (\det a_L^2)^{-1/2} (\det a_T^2)^{-(D-1)/2} \times \\
&\exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^n \bar{z}_{1k}^T (a_L^{-2})_{kl} \bar{z}_{1l} \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^D \sum_{k,l=1}^n \bar{z}_{\mu k}^T (a_T^{-2})_{kl} \bar{z}_{\mu l} \right\}. \quad (2.113)
\end{aligned}$$

Les composantes longitudinales et transversales de la matrice a^2 sont :

$$(a_L^2)_{kl} = a_L^2(\tau_k, \tau_l), \quad (a_T^2)_{kl} = a_T^2(\tau_k, \tau_l). \quad (2.114)$$

La densité de particule $\rho_0^{\Omega_L, \Omega_T}(\vec{r}_a)$ est donnée par :

$$\rho_0^{\Omega_L, \Omega_T}(\vec{r}_a) = \sqrt{\frac{1}{2\pi (a_{00}^2)_L}} \sqrt{\frac{1}{2\pi (a_{00}^2)_T}}^{D-1} \exp \left[-\frac{\bar{x}_1^2}{2(a_{00}^2)_L} - \frac{1}{2(a_{00}^2)_T} \sum_{\mu=2}^D \bar{x}_{\mu}^2 \right]. \quad (2.115)$$

CHAPITRE 3 LA MECANIQUE QUANTIQUE *PT*-SYMETRIQUE

3.1. Introduction

En mécanique quantique, l'opérateur Hamiltonien H a 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 hermitien. Cependant, il existe des classes d'Hamiltonien non hermitiens, mais dont le spectre est entièrement réel. Ces Hamiltoniens vérifient la condition d'être invariants sous les opérations combinées de réflexion de parité P 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 au début par Bender et Boettcher [24-26] qui ont étudié des Hamiltoniens de la forme : $H = p^2 + x^2(ix)^\varepsilon$ (ε est réel), ils ont montré que le spectre de ce type d'Hamiltoniens est réel et positif uniquement pour $\varepsilon \geq 0$, et qu'une transition de phase survient en $\varepsilon = 0$, aussi bien au niveau classique que quantique, au cours de laquelle le système passe d'une phase de symétrie PT non brisée ($\varepsilon \geq 0$) à la phase de symétrie PT spontanément brisée ($\varepsilon < 0$), correspondant à un basculement du spectre de H dans le domaine complexe [27-30]. 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 [31], 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 [52] et en physique de l'état solide (notamment pour l'étude des transitions de délocalisation comme celles des lignes de flux dans les superconducteurs de type-II) [53]. Ils présentent également un grand

intérêt dans le domaine de la théorie quantique des champs et des théories dites super symétriques [54].

3.2. Hamiltoniens non hermitiens PT symétriques

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

$$H = p^2 + x^2(ix)^\varepsilon, \quad (\varepsilon \text{ est réel}). \quad (3.1)$$

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 :

$$\begin{aligned} P: \quad x &\rightarrow -x & , & & p &\rightarrow -p \\ T: \quad x &\rightarrow x & , & & p &\rightarrow -p & , & & i &\rightarrow -i. \end{aligned} \quad (3.2)$$

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 :

$$\begin{aligned} P: \quad \text{Re } x &\rightarrow -\text{Re } x & , & & \text{Im } x &\rightarrow -\text{Im } x \\ & \text{Re } p &\rightarrow -\text{Re } p & & \text{Im } p &\rightarrow -\text{Im } p \\ T: \quad \text{Re } x &\rightarrow \text{Re } x & , & & \text{Im } x &\rightarrow -\text{Im } x \\ & \text{Re } p &\rightarrow -\text{Re } p & & \text{Im } p &\rightarrow \text{Im } p. \end{aligned} \quad (3.3)$$

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

$$-\psi'' + (x^2(ix)^\varepsilon - E)\psi = 0. \quad (3.4)$$

Cette équation doit être résolue, pour ε 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 (3.4) oscille. Pour $\varepsilon > -1$, les bords gauche (L) et droite (R) sont localisés à des angles :

$$\theta_L = -\pi + \frac{\varepsilon \pi}{2(\varepsilon + 4)}, \quad \theta_R = -\frac{\varepsilon \pi}{2(\varepsilon + 4)}, \quad (3.5)$$

et dont la différence est donnée par :

$$\Delta_\theta = \theta_L - \theta_R = \frac{2\pi}{\varepsilon + 4}. \quad (3.6)$$

La figure 3.1 montre les coins dans le plan complexe contenant le contour sur lequel est intégrée l'équation différentielle (3.4) pour la valeur $\varepsilon = 2.2$.

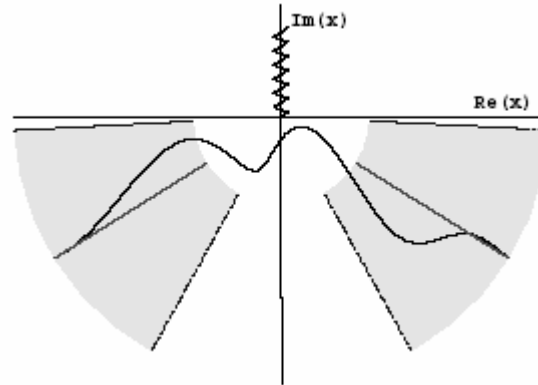


Figure 3.1 : Le contour sur lequel est intégrée l'équation différentielle (3.4) dans le plan complexe, pour $|x| \rightarrow \infty$. D'après [25, 31].

3.2.1. Niveaux d'énergie du Hamiltonien (3.1).

La figure 3.2 montre le spectre du Hamiltonien (3.1) exhibant trois comportements différents, en fonction du paramètre ε :

- $\varepsilon \geq 0$: Le spectre est infini, discret, entièrement réel et positif, pour $\varepsilon = 0$ on retrouve les niveaux d'énergie équidistants de l'oscillateur harmonique (la ligne en pointillée à droite).
- $-1 < \varepsilon < 0$: 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 ε 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 $\varepsilon = -0.57793$ augmente lorsque ε décroît, pour finalement diverger lorsque $\varepsilon \rightarrow -1^+$ (la ligne en pointillée à gauche).
- $\varepsilon < -1$: Le spectre ne comporte plus de valeurs propres réelles.

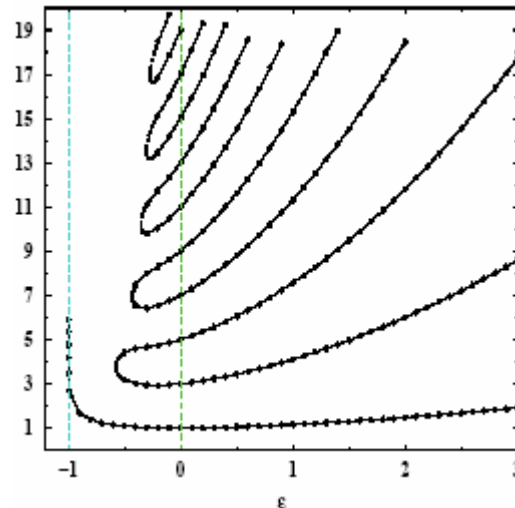


Figure 3.2 : Niveaux d'énergie du Hamiltonien (3.1) en fonction du paramètre réel ε . D'après [25].

3.2.2. Brisure spontanée de la symétrie

Etude du spectre en énergie de l'Hamiltonien (3.1) met ainsi en évidence une transition pour $\varepsilon = 0$ qui peut s'interpréter en terme de symétrie PT du système.

En effet, pour tout ε réel, le Hamiltonien H commute avec l'opérateur PT . Cependant, comme ce dernier opérateur n'est pas linéaire en raison de l'antilinearité de T , il n'est en rien, en première vue, que les fonctions propres de H sont aussi fonctions propres de PT . Si tel n'est pas le cas, alors on dit que la symétrie PT du Hamiltonien est *spontanément brisée*. En revanche, si toutes les fonctions propres de H sont en même temps fonctions propres de PT , alors la symétrie de l'Hamiltonien est dite *non brisée*, et les valeurs propres de l'Hamiltonien sont réelles. Pour montrer cela, notons d'abord que les valeurs propres de l'opérateur PT sont de la forme $e^{i\varphi}$ (φ est réel). En effet, si ψ est fonction propre de PT correspondant à la valeur propre λ , alors $PT \psi = \lambda \psi$. Or, comme $(PT)^2 = 1$, on obtient en faisant agir PT sur cette équation la relation $\psi = \lambda^* \lambda \psi$, d'où $\lambda = e^{i\varphi}$. Sans perte de généralité, on peut redéfinir ψ par $e^{i\varphi/2} \psi$, ce qui permet de normaliser à 1 la valeur propre : $PT \psi = \psi$. Nous considérons alors un état propre ψ de H , de valeur propre E , à priori complexe. Par hypothèse, ψ est aussi un état propre de PT . En multipliant l'équation aux valeurs propres $H \psi = E \psi$ à gauche par PT , et en utilisant $[H, PT]_- = 0$, on obtient finalement $E \psi = E^* \psi$, d'où $E = E^*$.

Bender et ces collaborateurs ont vérifié numériquement que les fonctions propres de H étaient aussi ceux de l'opérateur PT pour $\varepsilon \geq 0$ [31]. Récemment, une preuve rigoureuse a

été établie par Dorey et ces collaborateurs [33] soulevant ainsi le voile sur ce qui n'était jusqu'à présent qu'une conjecture basée sur des calculs numériques, à savoir que le spectre d'énergie du Hamiltonien H défini en (3.1) est bien réel et positif pour $\varepsilon \geq 0$. En revanche, pour $\varepsilon < 0$, la symétrie PT de H est spontanément brisée ; bien que H commute toujours avec PT , les fonctions propres de H ne sont plus toutes fonctions de PT . Aux fonctions propres de H qui ne sont pas fonctions propres de PT correspondent des énergies complexes. Ainsi il y a en $\varepsilon = 0$ une brisure spontanée de symétrie, qui peut s'interpréter comme une transition de phase : *on bascule d'une phase de symétrie non brisée avec un spectre en énergie purement réel à une phase de symétrie spontanément brisée avec un spectre en partie réel et en partie imaginaire*. Cette transition apparaît aussi bien au niveau classique que quantique [24, 25].

3.2.3. Les systèmes classiques

L'approche classique permet d'illustrer et d'en mieux comprendre la nature de cette transition de phase en $\varepsilon = 0$. Du point de vue classique, l'Hamiltonien (3.1) décrit une particule soumise à une force complexe, ainsi la trajectoire de la particule se situe dans le plan complexe x . Nous nous intéressons seulement aux solutions des équations du mouvement [25], dont le spectre en énergie est réel. Nous verrons plus loin que le mouvement de la particule est périodique. A cet effet, nous observons deux types d'orbites fermées : les unes en lesquelles la particule oscille entre des points tournants complexes "*Turning points*" (points où la vitesse s'annule), les autres où la particule suit des orbites fermées. Dans la plupart des cas, ces orbites fermées se trouvent sur des feuillettes appartenant à des surfaces appelées : *Surfaces de Riemann*. Toutes ces orbites exhibent clairement la symétrie PT par l'existence d'une symétrie gauche-droite ($L-R$) par rapport à l'axe imaginaire de x .

Dans le cas d'une symétrie brisée, les trajectoires ne se ferment plus, mais s'enroulent en spirales vers l'extérieur pour finalement rejoindre l'infini. Ces spirales violent la symétrie PT .

L'équation du mouvement d'une particule décrite par H en (3.1) est obtenue par les équations de Hamilton :

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p} = 2p, \\ \frac{dp}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial x} = i(2 + \varepsilon)(ix)^{1+\varepsilon}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Combinons ces deux équations, nous obtenons :

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = 2i(2 + \varepsilon)(ix)^{1+\varepsilon}, \quad (3.8)$$

qui n'est d'autre que la version *complexe* de la loi de Newton : $\vec{F} = m\vec{\gamma}$.

L'équation (3.8) peut être intégrée, donnant :

$$\frac{1}{2} \frac{dx}{dt} = \pm \sqrt{E + (ix)^{2+\varepsilon}}, \quad (3.9)$$

où $x(t)$ est un chemin dans le plan complexe, paramétrisé par la variable réelle de temps t .

La classification des solutions de cette équations fait apparaître le changement de phase qui a lieu à $\varepsilon = 0$. En vertu de l'invariance-*PT* du Hamiltonien, il apparaît raisonnable de restreindre notre attention sur les valeurs réelles du spectre de l'énergie.

En effet, les trajectoires satisfaisant (3.9) se situent toutes sur des feuilletts de la surface de Riemann. Sur cette surface, la fonction $\sqrt{E + (ix)^{2+\varepsilon}}$ possède une seule valeur, elle est donc unique. Les points tournants du mouvement classique sont les solutions de l'équation $E + (ix)^{2+\varepsilon} = 0$ donnés par :

$$x^{(-)} = E^{1/(2+\varepsilon)} e^{i\pi(3/2-1/(2+\varepsilon))}, \quad x^{(+)} = E^{1/(2+\varepsilon)} e^{-i\pi(1/2-1/(2+\varepsilon))}. \quad (3.10)$$

Ces points sont localisés, respectivement, sur le plan inférieur de x , sur l'axe réel et sur le plan supérieur quand $\varepsilon > 0$, $\varepsilon = 0$, et $\varepsilon < 0$ comme le montre la figure 3.1.

Remarquons que ces points tournants sont liées à l'énergie : *une fois qu'ils sont fixés, l'énergie est déterminée*. En effet, la condition de quantification de la méthode *WKB* semi classique; $(n + 1/2)\pi = \int_{x^{(-)}}^{x^{(+)}} dx \sqrt{E + (ix)^{2+\varepsilon}}$, a permis de donner une bonne approximation aux états d'énergies, ils sont donnés en fonction de paramètre ε et du nombre quantique n par :

$$E_n^{(\varepsilon)} \approx \left[\frac{\Gamma\left(\frac{8+3\varepsilon}{4+2\varepsilon}\right) \sqrt{\pi} \left(n + \frac{1}{2}\right)^{\frac{4+2\varepsilon}{4+\varepsilon}}}{\sin\left(\frac{\pi}{2+\varepsilon}\right) \Gamma\left(\frac{3+\varepsilon}{2+\varepsilon}\right)} \right]^{\frac{4+2\varepsilon}{4+\varepsilon}}. \quad (3.11)$$

La symétrie *PT* du système se traduit ici par la symétrie des trajectoires par rapport à l'axe des ordonnées (axe imaginaire). En effet, si la variable x est complexe, l'opérateur *PT* laisse sa partie imaginaire (ordonnée) invariante mais change sa partie réelle (abscisse) en son opposé.

Sans perte de généralité, en imposant au système la contrainte $E = 1$, étudions l'allure des trajectoires pour différentes valeurs du paramètre ε suivant la référence [25] :

- $\varepsilon = 0$:

Les trajectoires classiques dans le plan complexe représentent les chemins possibles décrite par le Hamiltonien $H = p^2 + x^2$. Ce sont des ellipses dont les foyers sont les points tournants -1 et 1 , comme le montre la figure 3.3. Le segment réel reliant ces points tournants correspond au mouvement périodique classique de l'oscillateur harmonique. La solution exacte de (3.9) est :

$$x(t) = \cos[\arccos(x(0)) \pm t], \quad (3.12)$$

où le signe (\pm) indique la direction que prend la particule sur l'ellipse. La période du mouvement est :

$$T_0 = \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = 2\pi. \quad (3.13)$$

Nous remarquons que tous les chemins fermés (orbites elliptiques) sont symétriques par rapport à la parité P (réflexion suivant le point d'origine) et au renversement du temps T (réflexion suivant l'axe réel), valable aussi pour la symétrie PT (réflexion suivant l'axe imaginaire).

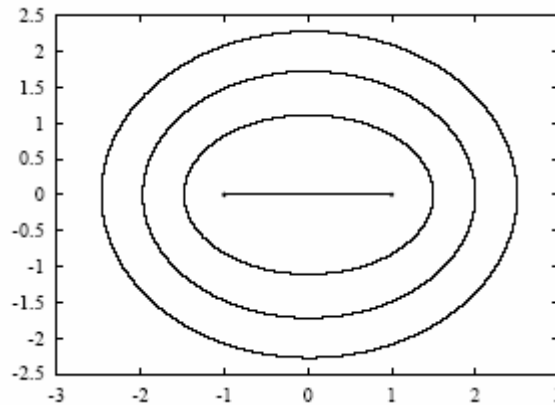


Figure 3.3 : Trajectoires classiques dans le plan complexe pour $\varepsilon = 0$. D'après [25].

- $\varepsilon = 1$:

La résolution de l'équation (3.9) donne trois points tournants. Deux d'entre eux sont localisés au dessous de l'axe réel et sont symétriques par rapport à l'axe imaginaire : $x_- = e^{-5i\pi/6}$ et $x_+ = e^{-i\pi/6}$. Le troisième point tournant appartient à l'axe

imaginaire : $x_0 = i$, comme il est montré sur la figure 3.4. Les trajectoires sont des orbites fermées incluant, comme pour le cas $\varepsilon = 0$, les points tournants x_- et x_+ , excepté le point $x_0 = i$.

La période est donnée par :

$$T_1 = \int_{x_-}^{x_+} \frac{dx}{\sqrt{1-ix^3}} = 2\sqrt{3} \frac{\Gamma(4/3)}{\Gamma(5/6)} \cong 2.74. \quad (3.14)$$

La particule partante du troisième point tournant exhibe un mouvement complètement distinct : elle parcourt l'axe imaginaire jusqu'à atteindre $i\infty$, dans un temps fini $\sqrt{\pi} \frac{\Gamma(4/3)}{\Gamma(5/6)} \cong 1.40$. Ce mouvement n'est pas périodique.

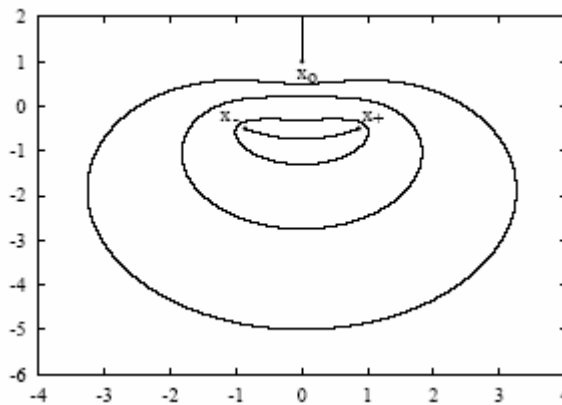


Figure 3.4 : Trajectoires classiques dans le plan complexe pour $\varepsilon = 1$. D'après [25].

- $\varepsilon = 2$:

Quatre points tournants émergent en résolvant l'équation (3.9), deux d'entre eux sont localisés au dessous de l'axe réel et symétrique par rapport à l'axe imaginaire : $x_1 = e^{-3i\pi/4}$ et $x_2 = e^{-i\pi/4}$, les deux derniers sont au dessus de l'axe réel et sont également symétrique par rapport à l'axe imaginaire : $x_3 = e^{i\pi/4}$ et $x_4 = e^{3i\pi/4}$. Les trajectoires classiques oscillent entre les deux paires de points tournants (x_1, x_2) et (x_3, x_4) comme il est montré sur la figure 3.5. La période de cette oscillation est $T_2 = 2\sqrt{2\pi} \frac{\Gamma(5/4)}{\Gamma(3/4)} \cong 3.70$. Le mouvement est périodique, excepté pour les trajectoires situant sur l'axe réel car la particule a tendance de s'enfuir vers $\pm\infty$.

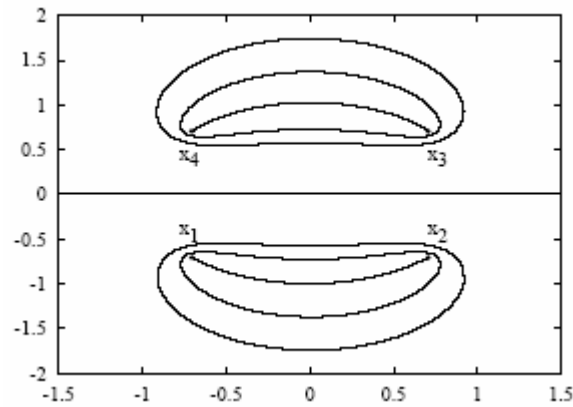


Figure 3.5 : Trajectoires classiques dans le plan complexes pour $\varepsilon = 2$. D'après [25].

En résumé, pour tout $\varepsilon \geq 0$, les trajectoires sont toutes PT -symétrique. Pour $\varepsilon < 0$, toutes les trajectoires s'enroulent en spirales pour atteindre l'infini, générant ainsi une brisure spontanée de la symétrie PT , comme le montre les deux cas qui suivent :

- $-1 < \varepsilon < 0$:

Les trajectoires classiques pour des valeurs négatives de ε sont fondamentalement différentes de celles correspondantes aux valeurs positives, de telles trajectoires n'exhibent plus la symétrie PT . De plus, elles ne se ferment plus, elles s'enroulent sur elles mêmes en spirales vers l'extérieur pour finalement rejoindre l'infini. Généralement, la période pour que la particule atteigne l'infini est l'infinie. L'interprétation de ce brusque changement dans la nature globale du comportement de la trajectoire est expliquée par un changement de phase, pour ε réel positif quelconque, ce sont des orbites fermées symétriques par rapport à l'axe imaginaire. En revanche, pour ε négatif, la violation de la symétrie PT est clairement illustrée par la perte de la symétrie gauche-droite ($L-R$) des trajectoires. Pour mieux illustrer cette perte de symétrie, nous présentons sur la figure 3.6 les trajectoires classiques de la particule pour les différentes valeurs de ε : -0.2 , -0.15 et -0.1 .

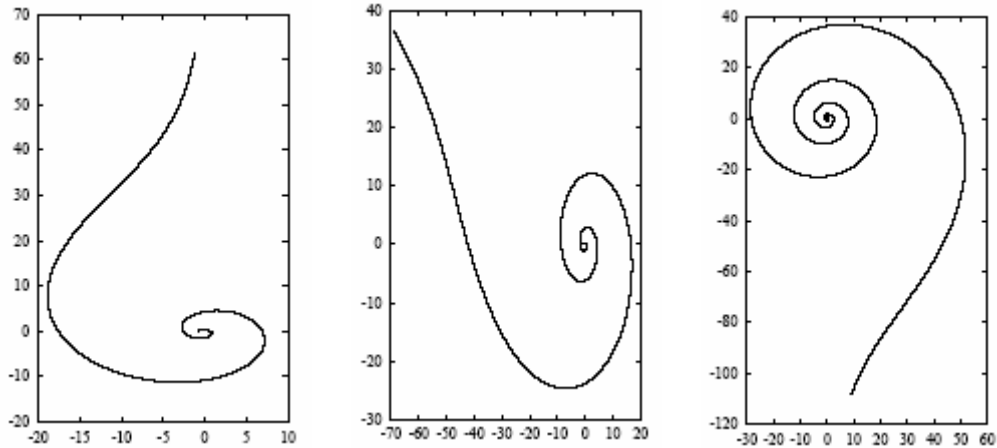


Figure 3.6 : Trajectoires classiques qui violent la symétrie- PT pour : $\varepsilon = -0.2$, -0.15 , et -0.1 , respectivement. Les chemins s'enroulent en spirale jusqu'à l'infini. D'après [25].

- $\varepsilon = -1$:

Pour ce cas spécial, la solution de l'équation (3.9) est exacte. Le résultat est donné par :

$$x(t) = \left(1 - b^2 + \frac{t^2}{4}\right)i + bt \quad , \quad (b \text{ est réel}). \quad (3.15)$$

La figure 3.7 montre que le seul point tournant est $x_0 = i$, et est générateur d'une famille de paraboles. Elles sont toutes symétriques par rapport à l'axe imaginaire. Notons l'existence d'une seule parabole à $b = 0$, se trouvant sur l'axe positif imaginaire juste avant i .

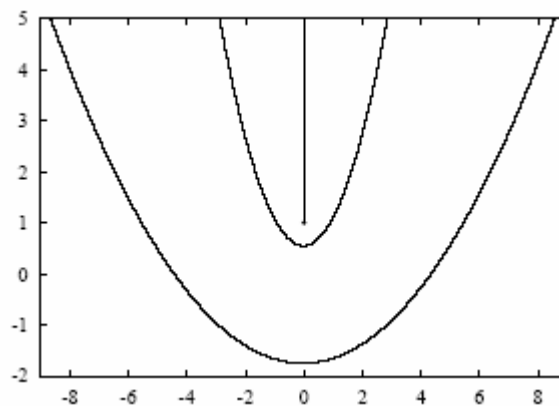


Figure 3.7 : Trajectoires classiques paraboliques non bornées dans le plan complexe pour $\varepsilon = -1$. D'après [25].

3.3. Vers une nouvelle théorie quantique

La question se pose dès lors de savoir si des Hamiltoniens dont la symétrie PT n'est pas brisée, et dont le spectre est entièrement réel et positif, permettent de construire une théorie quantique cohérente, viable et physiquement acceptable. Par une théorie quantique physique, *on sous entend une possibilité de construire un espace de Hilbert des vecteurs d'états, muni d'un produit scalaire avec une norme positive* [6-9]. En mécanique quantique, on interprète la norme d'un état en terme d'une probabilité et est doit être positive.

3.3.1. Construction de l'opérateur C

Pour $\varepsilon \geq 0$, les fonctions propres ψ_n de H sont simultanément fonctions propres de l'opérateur PT . Après redéfinition de la phase, on a donc :

$$PT \psi_n(x) = \psi_n^*(-x) = \psi_n(x). \quad (3.16)$$

Ces fonctions propres forment un système complet ; elles vérifient la relation de fermeture suivante :

$$\sum_n (-1)^n \psi_n(x) \psi_n(y) = \delta(x-y). \quad (3.17)$$

Notons la présence du facteur $(-1)^n$ dans la somme, ce facteur, peu commun, n'apparaît pas dans la mécanique quantique conventionnelle. La présence de ce facteur est ajoutée pour justifier l'orthonormalité de la théorie.

Le produit scalaire est construit à partir de l'opérateur PT , de deux fonctions $f(x)$ et $g(x)$ quelconques :

$$(f, g) \equiv \int_C dx [PT f(x)] g(x), \quad (3.18)$$

où $PT f(x) = [f(-x)]^*$, et l'intégrale est effectuée le long du contour dans le plan complexe décrit dans la première partie. Notons que le produit scalaire associé à la norme (f, f) est indépendant de la phase de $f(x)$ et est conservé dans le temps. Relativement au produit scalaire, il a été vérifié numériquement, avec une très bonne précision [31], que les fonctions propres de H vérifient la relation d'orthonormalisation suivante :

$$(\psi_n, \psi_m) = (-1)^n \delta_{nm}. \quad (3.19)$$

Nous voyons ainsi apparaître l'inconvénient majeur de cette théorie quantique au produit scalaire PT : *sa non positivité*. Il apparaît une alternance de signe de la norme des

fonctions propres : la moitié ont une norme positive, les autres ont une norme négative. Interpréter la norme d'un état en terme de probabilité lève, pour ainsi dire, une objection et une contraction majeure dans la théorie. Cependant, le fait qu'il y ait un nombre égal de fonctions propres de normes positives et négatives traduit une éventuelle symétrie sous jacente de l'Hamiltonien H . La situation ici est analogue au problème que Dirac avait rencontré en formulant son équation d'onde spinorielle en mécanique quantique relativiste [55]. Suivant l'approche de Dirac, plusieurs travaux de recherche ont été dirigés par des physiciens pour résoudre le problème des normes indéfinies en trouvant l'interprétation physique des normes négatives [28-32]. Ils prétendent l'existence d'une nouvelle symétrie de l'Hamiltonien H liée au fait qu'il y a un nombre égal de normes positives et de normes négatives. Pour décrire cette symétrie, ils considèrent un opérateur linéaire C défini dans l'espace des configurations par [34] :

$$\langle x|C|y\rangle \equiv C(x,y) = \sum_n \psi_n(x)\psi_n(y). \quad (3.20)$$

La notation C est justifiée par le fait que les propriétés de cet opérateur sont très proches de celles de l'opérateur de conjugaison de charge en théorie quantique des champs.

L'opérateur C commute avec l'Hamiltonien H . Les états propres de H sont donc états propres de C , et ont une valeur définie de "charge". *A quoi correspond cette charge ?* Le carré de l'opérateur C est égal à l'opérateur unité : $C^2 = 1$. En effet, dans l'espace des configurations, la relation suivante est vérifiée :

$$\int_C dy C(x,y)C(y,z) = \delta(x-z). \quad (3.21)$$

Les valeurs propres de l'opérateur sont donc -1 et 1 . Comme les états propres de H ont une valeur définie de charge, il ne reste plus qu'à déterminer la correspondance entre fonctions propres et valeurs propres :

$$C \psi_n = (-1)^n \psi_n. \quad (3.22)$$

Ainsi, chaque valeur propre de C représente le signe de la norme de la fonction propre à laquelle elle est associée : *l'opérateur C est l'observable correspondant à la norme de la signature de la PT norme d'un état.*

3.3.2. Produit scalaire CPT [31, 32]

Ayant obtenu l'opérateur C , on peut définir un nouveau produit scalaire à partir du produit des trois opérateurs C , P et T :

$$\langle f | g \rangle \equiv \int_C dx [CPT f(x)] g(x). \quad (3.23)$$

Ce produit scalaire conserve les propriétés du produit scalaire PT précédant, notamment l'indépendance de la phase. Mais bien plus, un tel produit scalaire est maintenant défini positif : en effet, l'opérateur C compense l'éventuel effet indésirable du produit PT , c'est-à-dire l'alternance des signes : il multiplie par -1 les états dont la PT norme est négative tandis qu'il laisse invariant (multiplication par $+1$) ceux dont la PT norme est positive.

La nouvelle relation de fermeture s'écrit maintenant :

$$\sum_n \psi_n(x) [CPT \psi_n(y)] = \delta(x - y). \quad (3.24)$$

Le produit scalaire CPT permet donc d'arriver à une théorie quantique physiquement acceptable. Cependant, à la différence du produit scalaire de la mécanique quantique conventionnelle, le produit scalaire CPT est déterminé dynamiquement : en effet, il est défini à partir des fonctions propres ψ_n de l'Hamiltonien H du système, et dépend ainsi du choix de cet Hamiltonien : *à chaque Hamiltonien, c'est-à-dire à chaque système physique différent, correspond un système de fonction propre différent, donc un opérateur C différent, et enfin un produit scalaire différent.*

Pour finir, il est important de noter que l'opérateur C apparaît seulement lorsque l'on étend un Hamiltonien hermitien dans le domaine complexe. En effet, *lorsque le paramètre ε tend vers 0, l'opérateur C devient identique à P et le produit CPT se réduit au seul opérateur T et donc à la conjugaison complexe, et la symétrie CPT se ramène à l'hermiticité.* Cette symétrie apparaît donc comme l'extension naturelle dans le domaine complexe de la condition d'hermiticité. Elle garantit au même temps la réalité du spectre du Hamiltonien et l'unitarité de la dynamique.

CHAPITRE 4
APPLICATIONS DE LA THEORIE DES PERTURBATIONS
VARIATIONNELLES AUX HAMILTONIENS COMPLEXES CUBIQUES PT-
SYMETRIQUES.

4.1. Introduction

Récemment, l'étude de l'Hamiltonien unidimensionnel :

$$H^{(1)}(p, x) = p^2 + x^2 + i\lambda x^3, \quad (4.1)$$

où λ est un paramètre réel, a été l'objet de plusieurs travaux de recherche sur la mécanique quantique PT symétrique [24-34]. Cet Hamiltonien n'est pas hermétique mais invariant sous la transformation PT . Malgré cela, son spectre en énergie est entièrement réel et positif. La réalité du spectre est apparemment due à l'invariance de la symétrie PT .

Tandis que plusieurs et différents exemples sur les systèmes quantiques unidimensionnels non hermitiens et PT symétrique ont été étudiés [27, 32, 35], pas un système quantique complexe PT symétrique couplé à l'oscillateur harmonique multidimensionnel n'a été traité par la théorie des perturbations variationnelles.

Nous proposons, dans ce mémoire et sans avoir recours à la théorie quantique PT symétrique du précédent chapitre, d'appliquer la théorie des perturbations variationnelles convergente dans la représentation des intégrales du chemin pour matrices densités aux Hamiltoniens complexes cubiques multidimensionnels et invariants sous la transformation PT , couplés aux oscillateurs harmoniques au second ordre [36, 40-42] :

$$H^{(2)}(p_x, x; p_y, y) = p_x^2 + p_y^2 + x^2 + y^2 + i\lambda xy^2, \quad (4.2)$$

$$H^{(3)}(p_x, x; p_y, y; p_z, z) = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + x^2 + y^2 + z^2 + i\lambda xyz, \quad (4.3)$$

ainsi qu'au Hamiltonien de Hénon-Heiles quantique complexifié [43] :

$$H^{(h-h)}(p_x, x; p_y, y) = p_x^2 + p_y^2 + x^2 + y^2 + i\lambda \left(xy^2 - \frac{x^3}{3} \right), \quad (4.4)$$

Le but essentiel de ce mémoire est double. D'une part, de montrer que les propriétés de la réalité et de la positivité du spectre d'énergie persistent même pour des systèmes quantiques ayant plusieurs degrés de liberté, sans avoir recours à la théorie quantique PT -symétrique. D'autre part, de souligner la crédibilité et la véracité de la théorie des

perturbations variationnelles en comparant le spectre d'énergie déduit avec celui que nous avons obtenu par la méthode des récurrences de Bender-Wu [47-50].

Pour simplifier les calculs, nous nous plaçons dans le système des unités naturelles ($\hbar = k_B = M = \omega = 1$).

4.2. Applications [36, 40-42]

Il est à noter que la procédure d'optimisation dans la théorie des perturbations variationnelles en utilisant un ou deux paramètres variationnels, devient moins significative pour des systèmes quantiques à plusieurs degrés de liberté. Ainsi, nous restreindrons nos calculs à l'optimisation par rapport à $\Omega^2(\vec{r}_a)$ seulement, en posant $\vec{r}_m = \vec{0}$ [19, 20].

Rappelons que la densité de particule au second ordre pour un système quantique à D dimensions est :

$$\tilde{\rho}_2^{(D)\Omega}(\vec{r}_a) = \left(\frac{1}{2\pi\beta} \right)^{D/2} \exp[-\beta W_2^{(D)\Omega}(\vec{r}_a)]. \quad (4.5)$$

L'approximation au second ordre du potentiel effectif classique d'essai, donnée par,

$$W_2^{(D)\Omega}(\vec{r}_a) = \frac{D}{2\beta} \ln \frac{\sinh(\beta\Omega)}{\beta\Omega} + \frac{\Omega}{\beta} \vec{r}_a^2 \tanh \frac{\beta\Omega}{2} + \frac{1}{\beta} \langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a; c}^\Omega - \frac{1}{2\beta} \langle A_{\text{int}}^2[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a; c}^\Omega, \quad (4.6)$$

nécessite le calcul des fonctions de corrélations connexes "cumulants" du potentiel d'interaction, donnant ainsi les expressions déjà obtenues en (2.59) :

$$\begin{aligned} \langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a; c}^\Omega &= \langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^\Omega, \\ \langle A_{\text{int}}^2[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a; c}^\Omega &= \langle A_{\text{int}}^2[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^\Omega - \left(\langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^\Omega \right)^2, \end{aligned} \quad (4.7)$$

et de l'expression (2.108) :

$$\begin{aligned} \langle A_{\text{int}}^n[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^\Omega &= \frac{1}{\rho_0^\Omega(\vec{r}_a)} \times \\ &\prod_{l=1}^n \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau_l \int_{-\infty}^{\infty} d^D z_l V_{\text{int}}(\vec{z}_l) \right] \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{n+1} \det a^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^n \vec{z}_k^T a_{kl}^{-2} \vec{z}_l \right\}, \end{aligned} \quad (2.108)$$

on déduit les fonctions de corrélations au premier et au second ordre, respectivement pour $n=1$ et $n=2$.

4.2.1. Cas du Hamiltonien $H^{(2)}(\mathbf{p}_x, \mathbf{x}; \mathbf{p}_y, \mathbf{y})$

4.2.1.1. L'approximation au premier ordre

Par définition, le potentiel d'interaction s'écrit :

$$\begin{aligned} V_{\text{int}}(\bar{z}_1) &= V(\bar{z}_1) - \frac{1}{2} \Omega^2 \bar{z}_1^2 \\ &= \left(1 - \frac{\Omega^2}{2}\right) (x_1^2 + y_1^2) + i\lambda x_1 y_1^2, \end{aligned} \quad (4.8)$$

où le vecteur position \bar{z}_1 est défini par :

$$\bar{z}_1^T \equiv (z_{10}, z_{11}) = (x_1, y_1).$$

Au premier ordre, on obtient en prévision de (4.6) et (2.108) les expressions du potentiel effectif classique :

$$W_1^{(2)\Omega}(\bar{r}_a) = \frac{1}{\beta} \ln \frac{\sinh(\beta\Omega)}{\beta\Omega} + \frac{\Omega}{\beta} (x_a^2 + y_a^2) \tanh \frac{\beta\Omega}{2} + \frac{1}{\beta} \langle A_{\text{int}}[\bar{r}] \rangle_{\bar{r}_a, \bar{r}_a}^{\Omega}, \quad (4.9)$$

et de la fonction de corrélation :

$$\langle A_{\text{int}}[\bar{r}] \rangle_{\bar{r}_a, \bar{r}_a}^{\Omega} = \frac{1}{\rho_0^{\Omega}(\bar{r}_a)} \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_{-\infty}^{\infty} d^2 z_1 V_{\text{int}}(\bar{z}_1) \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2 \det a^2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{k,l=0}^1 \bar{z}_k^T a_{kl}^{-2} \bar{z}_l \right], \quad (4.10)$$

où les éléments inverses a_{kl}^{-2} sont déduits de la matrice $[a^2]_{kl}$ symétriques 2×2 suivante :

$$[a^2]_{kl} = \begin{pmatrix} a_{00}^2 & a_{01}^2 \\ a_{01}^2 & a_{00}^2 \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Après avoir évalué l'intégrale (4.10) dans l'espace, puis dans le temps imaginaire, on obtient l'expression analytique de la fonction de corrélation :

$$\begin{aligned} \langle A_{\text{int}}[\bar{r}] \rangle_{\bar{r}_a, \bar{r}_a}^{\Omega} &= \frac{(1 - \Omega^2)}{16a_{00}^4 \Omega^3 \sinh^2 \frac{\beta\Omega}{2}} \left[(\beta\Omega + \sinh \beta\Omega) (x_a^2 + y_a^2 - 2a_{00}^2) - 8a_{00}^6 \beta\Omega^3 (1 - \cosh \beta\Omega) \right] \\ &+ i \frac{\lambda x_a}{12a_{00}^4 \Omega^4} \left[\left(1 + \frac{3}{\sinh^2 \frac{\beta\Omega}{2}} \right) (y_a^2 - a_{00}^2) + 12a_{00}^6 \Omega^2 \right]. \end{aligned} \quad (4.12)$$

où l'expression analytique de a_{00}^2 est donnée par :

$$a_{00}^2 = \frac{1}{2\Omega} \coth \frac{\beta\Omega}{2}. \quad (4.13)$$

4.2.1.2. L'approximation au second ordre.

Au second ordre, la fonction de corrélation est donnée par :

$$\begin{aligned} \langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^{\Omega} &= \frac{1}{\rho_0^{\Omega}(\vec{r}_a)} \times \\ &\int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\beta} d\tau_2 \int_{-\infty}^{\infty} d^2 z_1 \int_{-\infty}^{\infty} d^2 z_2 V_{\text{int}}(\vec{z}_1) V_{\text{int}}(\vec{z}_2) \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3 \det a^2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{k,l=0}^2 \vec{z}_k^T a_{kl}^{-2} \vec{z}_l \right], \end{aligned} \quad (4.14)$$

où les éléments inverses a_{kl}^{-2} sont calculés de la matrice symétrique 3×3 :

$$[a^2]_{kl} = \begin{pmatrix} a_{00}^2 & a_{01}^2 & a_{02}^2 \\ a_{01}^2 & a_{00}^2 & a_{12}^2 \\ a_{02}^2 & a_{12}^2 & a_{00}^2 \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

En intégrant (4.14) et en l'insérant avec (4.7) dans (4.5), on obtient finalement l'expression analytique du potentiel effectif classique donnée par :

$$\begin{aligned} W_2^{(2)\Omega}(\vec{r}_a) &= \frac{1}{\beta} \ln \frac{\sinh(\beta\Omega)}{\beta\Omega} + \frac{\Omega}{\beta} (x_a^2 + y_a^2) \tanh \frac{\beta\Omega}{2} + F_1^{(2)\Omega}(x_a, y_a) + \lambda^2 F_2^{(2)\Omega}(x_a, y_a) \\ &\quad + i\lambda F_3^{(2)\Omega}(x_a, y_a), \end{aligned} \quad (4.16)$$

avec

$$\begin{aligned} F_1^{(2)\Omega}(x_a, y_a) &= \frac{(-1 + \Omega^2)}{256 a_{00}^4 \beta \Omega^6 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} [-1 + (1 - a_{00}^4 + 4a_{00}^2 \beta + 2\beta^2) \Omega^2 + (a_{00}^4 - 20a_{00}^2 \beta \\ &\quad - 2\beta^2 - 8a_{00}^4 \beta^2) \Omega^4 + 8a_{00}^4 \beta (12a_{00}^2 - 1) \Omega^6 + 2a_{00}^2 \Omega^2 (8\beta \Omega^2 + 64a_{00}^4 \beta \Omega^4 \\ &\quad - a_{00}^2 (-1 + \Omega^2) (1 + 4\beta^2 \Omega^2)) \cosh \beta\Omega - (-1 + \Omega^2 + 4a_{00}^2 \beta \Omega^2 - 4a_{00}^2 \beta \Omega^4 \\ &\quad + 32a_{00}^6 \beta \Omega^6) \cosh 2\beta\Omega + 2a_{00}^4 \Omega^2 (-1 + \Omega^2) \cosh 3\beta\Omega + a_{00}^4 \Omega^2 (1 - \Omega^2) \times \\ &\quad \cosh 4\beta\Omega + (3a_{00}^2 \Omega + 4\beta\Omega - 19a_{00}^2 \Omega^3 - 4\beta\Omega^3 - 4a_{00}^2 \beta^2 \Omega^3 + 4a_{00}^2 \beta^2 \Omega^5) \\ &\quad \times \sinh \beta\Omega + 8a_{00}^2 \Omega^3 \sinh 2\beta\Omega + a_{00}^2 \Omega (-1 + \Omega^2) \sinh 3\beta\Omega] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{(x_a^2 + y_a^2)}{256a_{00}^6\beta\Omega^6 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} (-1 + \Omega^2)(\beta\Omega + \sinh \beta\Omega)[a_{00}^2\Omega + 2\beta\Omega - 9a_{00}^2\Omega^3 \\
& - 2\beta\Omega^3 + 8a_{00}^2\Omega^3 \cosh \beta\Omega + a_{00}^2\Omega(-1 + \Omega^2) \cosh 2\beta\Omega - 2(-1 + \Omega^2) \times \\
& (1 - 2a_{00}^2\beta\Omega^2) \sinh \beta\Omega], \tag{4.17}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_2^{(2)\Omega}(x_a, y_a) = & \frac{1}{4608a_{00}^6\beta\Omega^8 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} [-306 + 396a_{00}^4\Omega^2 - 864a_{00}^8\Omega^4 + 24(-5 - 13a_{00}^4 \times \\
& \Omega^2 + 48a_{00}^8\Omega^4) \cosh \beta\Omega - 6(1 + 48a_{00}^8\Omega^4) \cosh 2\beta\Omega - 72a_{00}^4\Omega^2 \cosh 3\beta\Omega \\
& - 12a_{00}^4\Omega^2 \cosh 4\beta\Omega + (707a_{00}^2\Omega + 32a_{00}^6\Omega^3 + 720a_{00}^{10}\Omega^5) \sinh \beta\Omega \\
& (140a_{00}^2\Omega + 16a_{00}^6\Omega^3 - 576a_{00}^{10}\Omega^5) \sinh 2\beta\Omega + (7a_{00}^2\Omega - 24a_{00}^6\Omega^3 + 144 \times \\
& a_{00}^{10}\Omega^5) \sinh 3\beta\Omega - 8a_{00}^6\Omega^3 \sinh 4\beta\Omega + 8a_{00}^6\Omega^3 \sinh 5\beta\Omega] \\
& + \frac{x_a^2}{1152a_{00}^8\beta\Omega^8 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} [51 - 69a_{00}^4\Omega^2 + (20 + 58a_{00}^4\Omega^2) \cosh \beta\Omega \\
& + (1 + 4a_{00}^4\Omega^2) \cosh 2\beta\Omega + 6a_{00}^4\Omega^2 \cosh 3\beta\Omega + a_{00}^4\Omega^2 \cosh 4\beta\Omega \\
& - 101a_{00}^4\Omega^2 \sinh \beta\Omega - 20a_{00}^4\Omega^2 \sinh 2\beta\Omega - a_{00}^4\Omega^2 \sinh 3\beta\Omega] \\
& + \frac{y_a^2}{2304a_{00}^8\beta\Omega^8 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} [306 - 60a_{00}^4\Omega^2 + 20(3 + a_{00}^4\Omega^2) \cosh \beta\Omega \\
& + (6 - 8a_{00}^4\Omega^2) \cosh 2\beta\Omega + 24a_{00}^4\Omega^2 \cosh 3\beta\Omega + 4a_{00}^4\Omega^2 \cosh 4\beta\Omega \\
& - a_{00}^2\Omega(505 + 228a_{00}^4\Omega^2) \sinh \beta\Omega - a_{00}^2\Omega(100 - 96a_{00}^4\Omega^2) \sinh 2\beta\Omega \\
& - a_{00}^2\Omega(5 - 12a_{00}^4\Omega^2) \sinh 3\beta\Omega] \\
& + \frac{(y_a^4 + 4x_a^2y_a^2)}{1152a_{00}^{10}\beta\Omega^8 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} (5 + \cosh \beta\Omega)^2 (-1 + a_{00}^2\Omega \sinh \beta\Omega), \tag{4.18}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_3^{(2)\Omega}(x_a, y_a) = & \frac{x_a}{768a_{00}^6\beta\Omega^7 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} [-30a_{00}^2\Omega - 40\beta\Omega + 102a_{00}^2\Omega^3 - 24a_{00}^6\Omega^3 \\
& + 40\beta\Omega^3 + 312a_{00}^6\Omega^5 - \Omega(-8\beta(-1 + \Omega^2) + 12a_{00}^6\Omega^2(-1 + 33\Omega^2) \\
& + a_{00}^2(3 + 61\Omega^2)) \cosh \beta\Omega + 2a_{00}^2\Omega(15 + (-19 + 12a_{00}^4)\Omega^2 + 36a_{00}^4\Omega^4) \times \\
& \cosh 2\beta\Omega + 3a_{00}^2\Omega(1 - (1 + 4a_{00}^4)\Omega^2 + 4a_{00}^4\Omega^4) \cosh 3\beta\Omega
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (-40 + (40 - 52a_{00}^4 + 60a_{00}^2\beta)\Omega^2 + (52a_{00}^4 - 60a_{00}^2\beta + 48a_{00}^6\beta)\Omega^4 \\
& - 48a_{00}^6\beta\Omega^6) \sinh \beta\Omega + (-4 + (4 + 36a_{00}^4 + 6a_{00}^2\beta)\Omega^2 - (36a_{00}^4 + 6a_{00}^2\beta \\
& + 24a_{00}^6\beta)\Omega^4 + 24a_{00}^6\beta\Omega^6) \sinh 2\beta\Omega + 4a_{00}^4\Omega^2(-1 + \Omega^2) \sinh 3\beta\Omega \\
& + 2a_{00}^4\Omega^2(-1 + \Omega^2) \sinh 4\beta\Omega] \\
& + \frac{x_a y_a^2}{384a_{00}^8\beta\Omega^7 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} (5 + \cosh \beta\Omega)[3\Omega(a_{00}^2 + 2\beta)(1 - \Omega^2) + 8a_{00}^2\Omega^3 \times \\
& \cosh \beta\Omega + 3a_{00}^2\Omega(-1 + \Omega^2) \cosh 2\beta\Omega + 6(1 - (1 + a_{00}^2\beta)\Omega^2 + a_{00}^2\beta\Omega^4) \times \\
& \sinh \beta\Omega]. \tag{4.19}
\end{aligned}$$

4.2.2. Cas du Hamiltonien $H^{(3)}(\mathbf{p}_x, \mathbf{x}; \mathbf{p}_y, \mathbf{y}; \mathbf{p}_z, \mathbf{z})$

En procédant de la même manière que dans le paragraphe (4.2.1), on obtient :

4.2.2.1. L'approximation au premier ordre

Le potentiel d'interaction est défini par :

$$\begin{aligned}
V_{\text{int}}(\bar{z}_1) &= V(\bar{z}_1) - \frac{1}{2}\Omega^2 \bar{z}_1^2 \\
&= \left(1 - \frac{\Omega^2}{2}\right)(x_1^2 + y_1^2 + z_1^2) + i\lambda x_1 y_1 z_1, \tag{4.20}
\end{aligned}$$

où

$$\bar{z}_1^T = (z_{10}, z_{11}, z_{12}) = (x_1, y_1, z_1).$$

Le potentiel effectif classique s'écrit :

$$W_1^{(3)\Omega}(\vec{r}_a) = \frac{3}{2\beta} \ln \frac{\sinh(\beta\Omega)}{\beta\Omega} + \frac{\Omega}{\beta}(x_a^2 + y_a^2 + z_a^2) \tanh \frac{\beta\Omega}{2} + \frac{1}{\beta} \langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^{\Omega}, \tag{4.21}$$

où l'expression analytique de la fonction de corrélation est donnée par :

$$\begin{aligned}
\langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^{\Omega} &= \frac{(1 - \Omega^2)}{16a_{00}^4 \Omega^3 \sinh^2 \frac{\beta\Omega}{2}} [(\beta\Omega + \sinh \beta\Omega)(x_a^2 + y_a^2 + z_a^2 - 2a_{00}^2) - 12a_{00}^6 \beta \Omega^3 \times \\
& (1 - \cosh \beta\Omega)] + i \frac{\lambda x_a y_a z_a}{24a_{00}^4 \Omega^4 \sinh^2 \frac{\beta\Omega}{2}} [5 + \cosh \beta\Omega]. \tag{4.22}
\end{aligned}$$

4.2.2.2. L'approximation au second ordre

En tenant compte des expressions (2.108), (4.6) et (4.7), l'expression analytique du potentiel effectif classique au second ordre est :

$$W_2^{(3)\Omega}(\vec{r}_a) = \frac{3}{2\beta} \ln \frac{\sinh(\beta\Omega)}{\beta\Omega} + \frac{\Omega}{\beta} (x_a^2 + y_a^2 + z_a^2) \tanh \frac{\beta\Omega}{2} + F_1^{(3)\Omega}(x_a, y_a, z_a) \\ + \lambda^2 F_2^{(3)\Omega}(x_a, y_a, z_a) + i\lambda F_3^{(3)\Omega}(x_a, y_a, z_a), \quad (4.23)$$

avec :

$$F_1^{(3)\Omega}(x_a, y_a, z_a) = \frac{3(-1 + \Omega^2)}{512a_{00}^4\beta\Omega^6 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} [-1 + (1 - a_{00}^4 + 4a_{00}^2\beta + 2\beta^2)\Omega^2 + (a_{00}^4 \\ - 20a_{00}^2\beta - 2\beta^2 - 8a_{00}^4\beta^2)\Omega^4 + 8a_{00}^4\beta(\beta - 12a_{00}^2)\Omega^6 + 2a_{00}^2\Omega^2 \times \\ (8\beta\Omega^2 + 64a_{00}^4\beta\Omega^4 - a_{00}^2(-1 + \Omega^2)(1 + 4\beta^2\Omega^2)) \cosh \beta\Omega \\ - (-1 + (1 + 4a_{00}^2\beta)\Omega^2 - 4a_{00}^2\beta\Omega^4 + 32a_{00}^6\beta\Omega^6) \cosh 2\beta\Omega \\ + 2a_{00}^4\Omega^2(-1 + \Omega^2) \cosh 3\beta\Omega - a_{00}^4\Omega^2(-1 + \Omega^2) \cosh 4\beta\Omega \\ + \Omega(3a_{00}^2 + 4\beta(19a_{00}^2 - 4\beta - 4a_{00}^2\beta^2))\Omega^2 + 4a_{00}^2\beta^2\Omega^4) \sinh \beta\Omega \\ 8a_{00}^2\Omega^3 \sinh 2\beta\Omega + a_{00}^2\Omega(-1 + \Omega^2) \sinh 3\beta\Omega] \\ - \frac{(x_a^2 + y_a^2 + z_a^2)}{256a_{00}^6\beta\Omega^6 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} (-1 + \Omega^2)(\beta\Omega + \sinh \beta\Omega)[a_{00}^2\Omega(1 - 9\Omega^2) \\ - 2\beta\Omega(-1 + \Omega^2) + 8a_{00}^2\Omega^3 \cosh \beta\Omega + a_{00}^2\Omega(-1 + \Omega^2) \cosh 2\beta\Omega \\ + 2(1 - (1 + a_{00}^2\beta)\Omega^2 + a_{00}^2\beta\Omega^4) \sinh \beta\Omega], \quad (4.24)$$

$$F_2^{(3)\Omega}(x_a, y_a, z_a) = \frac{(x_a^2 + y_a^2 + z_a^2)}{2304a_{00}^8\beta\Omega^8 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} [51 - 69a_{00}^4\Omega^2 + (20 + 58a_{00}^4\Omega^2) \cosh \beta\Omega \\ + (1 + 4a_{00}^4\Omega^2) \cosh 2\beta\Omega + 6a_{00}^2\Omega^2 \cosh 3\beta\Omega + a_{00}^2\Omega^2 \cosh 4\beta\Omega \\ - 101a_{00}^2\Omega \sinh \beta\Omega - 20a_{00}^2\Omega \sinh 2\beta\Omega - a_{00}^2\Omega \sinh 3\beta\Omega] \\ + \frac{(x_a^2 y_a^2 + x_a^2 z_a^2 + y_a^2 z_a^2)}{1152a_{00}^{10}\beta\Omega^8 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} (5 + \cosh \beta\Omega)^2 (-1 + a_{00}^2\Omega \sinh \beta\Omega) -$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4608a_{00}^6\beta\Omega^8 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} [102 - 414a_{00}^4\Omega^2 + 4(10 + 87a_{00}^4\Omega^2) \cosh \beta\Omega \\
& + (2 + 24a_{00}^4\Omega^2) \cosh 2\beta\Omega + 36a_{00}^4\Omega^2 \cosh 3\beta\Omega + 6a_{00}^4\Omega^2 \cosh 4\beta\Omega \\
& + a_{00}^2\Omega(-303 + 212a_{00}^4\Omega^2) \sinh \beta\Omega - 4a_{00}^2\Omega(15 + 26a_{00}^4\Omega^2) \sinh 2\beta\Omega \\
& - 3a_{00}^2\Omega \sinh 3\beta\Omega + 4a_{00}^6\Omega^3 \sinh 4\beta\Omega - 4a_{00}^6\Omega^3 \sinh 5\beta\Omega], \quad (4.25)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_3^{(3)\Omega}(x_a, y_a, z_a) &= \frac{x_a y_a z_a}{384a_{00}^8\beta\Omega^7 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} (5 + \cosh \beta\Omega) [a_{00}^2\Omega(3 - 11\Omega^2) + 6\beta\Omega(1 - \Omega^2) \\
& + 8a_{00}^2\Omega^3 \cosh \beta\Omega + 3a_{00}^2\Omega(-1 + \Omega^2) \cosh 2\beta\Omega + 6(1 - (1 + a_{00}^2\beta)\Omega^2 \\
& + a_{00}^2\beta\Omega^4) \sinh \beta\Omega]. \quad (4.26)
\end{aligned}$$

4.2.3. Cas du Hamiltonien $H^{(h-h)}(p_x, x; p_y, y)$

4.2.3.1. L'approximation au premier ordre

Le potentiel d'interaction de Hénon-Heiles quantique complexifié est :

$$\begin{aligned}
V_{\text{int}}(\bar{z}_1) &= V(\bar{z}_1) - \frac{1}{2}\Omega^2 \bar{z}_1^2 \\
&= \left(1 - \frac{\Omega^2}{2}\right)(x_1^2 + y_1^2 + z_1^2) + i\lambda \left(x_1 y_1^2 - \frac{x_1^3}{3}\right), \quad (4.27)
\end{aligned}$$

où le vecteur \bar{z}_1 est défini par : $\bar{z}_1^T \equiv (z_{10}, z_{11}) = (x_1, y_1)$.

Le potentiel effectif classique d'essai au premier ordre s'écrit :

$$W_1^{(h-h)\Omega}(\vec{r}_a) = \frac{1}{\beta} \ln \frac{\sinh(\beta\Omega)}{\beta\Omega} + \frac{\Omega}{\beta} (x_a^2 + y_a^2) \tanh \frac{\beta\Omega}{2} + \frac{1}{\beta} \langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^\Omega. \quad (4.28)$$

La fonction de corrélation correspondante est donnée par l'expression analytique suivante :

$$\begin{aligned}
\langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^\Omega &= \frac{(1 - \Omega^2)}{16a_{00}^4\Omega^3 \sinh^3 \frac{\beta\Omega}{2}} [(x_a^2 + y_a^2 - 2a_{00}^2)(\beta\Omega + \sinh \beta\Omega) - 8a_{00}^6\Omega^2(1 - \cosh \beta\Omega)] \\
&+ \frac{i\lambda x_a}{12a_{00}^6\Omega^4} \left[36a_{00}^6\Omega^2 + x_a^2 \left(1 + \frac{3}{\sinh^2 \beta\Omega/2} \right) - 3a_{00}^2 \coth^2 \frac{\beta\Omega}{2} \right]. \quad (4.29)
\end{aligned}$$

4.2.3.2. L'approximation au second ordre

En exécutant le même code de calcul que dans les deux cas précédents, le potentiel effectif classique d'essai au second ordre est :

$$W_2^{(h-h)\Omega}(\vec{r}_a) = \frac{1}{\beta} \ln \frac{\sinh(\beta\Omega)}{\beta\Omega} + \frac{\Omega}{\beta} (x_a^2 + y_a^2) \tanh \frac{\beta\Omega}{2} + F_1^{(h-h)\Omega}(x_a, y_a) + \lambda^2 F_2^{(h-h)\Omega}(x_a, y_a) + i\lambda F_3^{(h-h)\Omega}(x_a, y_a), \quad (4.30)$$

avec :

$$F_1^{(h-h)\Omega}(x_a, y_a) = \frac{(-1 + \Omega^2)}{256a_{00}^4 \beta \Omega^6 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} [-1 + \Omega^2 (1 + 2\beta(6a_{00}^2 + \beta - (\beta + 2a_{00}^2(7 + 2a_{00}^2\beta))) \times \Omega^2 + 4a_{00}^4(-12a_{00}^2 + \beta)\Omega^4) + 4a_{00}^2\beta\Omega^2(-3 + \Omega^2(7 + 2a_{00}^2(\beta + (16a_{00}^2 + \beta)\Omega^2))) \cosh \beta\Omega - (-1 + \Omega^2 + 32a_{00}^6\beta\Omega^6) \cosh 2\beta\Omega + 4\Omega(3a_{00}^2 + \beta - (\beta a_{00}^2(7 + 2a_{00}^2\beta + \beta^2))\Omega^2 + a_{00}^2\beta(2a_{00}^2 + \beta)\Omega^4) \sinh \beta\Omega + 2a_{00}^2\beta(-3 + \Omega^2 \times (7 - 2a_{00}^2\beta(-1 + \Omega^2))) \sinh 2\beta\Omega] \\ \frac{(1 - \Omega^2)(x_a^2 + y_a^2)}{256a_{00}^6 \beta \Omega^6 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} [-1 + \Omega^2(1 + 2\beta(3a_{00}^2 + \beta - (7a_{00}^2 + \beta)\Omega^2)) + \cosh 2\beta\Omega + \Omega(2a_{00}^2\beta\Omega(-3 + 7\Omega^2) \cosh \beta\Omega - \Omega \cosh 2\beta\Omega + 2(3a_{00}^2 + 2\beta - (2\beta + a_{00}^2(7 + \beta^2))\Omega^2 + a_{00}^2\beta^2\Omega^4) \sinh \beta\Omega + a_{00}^2(-3 + 7\Omega^2) \sinh 2\beta\Omega)] \quad (4.31)$$

$$F_2^{(h-h)\Omega}(x_a, y_a) = \frac{x_a^6(5 + \cosh \beta\Omega)^2}{1296a_{00}^{12}\beta\Omega^8 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} - \frac{y_a^4}{4608a_{00}^{10}\beta\Omega^8 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} (-102 + 30a_{00}^2\beta\Omega^2 - 40 \cosh \beta\Omega - 2 \cosh 2\beta\Omega + 104a_{00}^2\Omega \sinh \beta\Omega + 5a_{00}^2\Omega \sinh 2\beta\Omega) - \frac{y_a^2}{576a_{00}^8\beta\Omega^8 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} (51 - 6a_{00}^2(12a_{00}^2 + 5\beta)\Omega^2 + 4(5 + 16a_{00}^2\Omega^2) \times \cosh \beta\Omega + (1 - 12a_{00}^2\Omega^2(-2 + a_{00}^2\beta\Omega^2)) \cosh 2\beta\Omega - 3a_{00}^2\Omega(52 - 24a_{00}^2\beta\Omega^2 + 5 \cosh \beta\Omega) \sinh \beta\Omega) + \frac{x_a^4 y_a^2 (5 + \cosh \beta\Omega)^2}{1728a_{00}^{12}\beta\Omega^8 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} -$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{x_a^4}{4608a_{00}^{10}\beta\Omega^8 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} (510 + 6a_{00}^2(216a_{00}^2 + 5\beta)\Omega^2 + 8(25 - 144a_{00}^4 \\
& \times \Omega^2) \cosh \beta\Omega + 2(5 - 72a_{00}^2\Omega^2) \cosh 2\beta\Omega + a_{00}^2\Omega(104 \sinh \beta\Omega + 5 \times \\
& \sinh 2\beta\Omega)) - \frac{x_a^2 y_a^4 (5 + \cosh \beta\Omega)^2}{1152a_{00}^{12}\beta\Omega^8 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} - \frac{x_a^2 y_a^2}{2304a_{00}^{10}\beta\Omega^8 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} \times \\
& (-102 + 30a_{00}^2\beta\Omega^2 - 40 \cosh \beta\Omega - 2 \cosh 2\beta\Omega + 104a_{00}^2\Omega \sinh \beta\Omega + 5a_{00}^2\Omega \\
& \times \sinh 2\beta\Omega) - \frac{x_a^2}{2304a_{00}^8\beta\Omega^8 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} (255 + 24a_{00}^2\Omega^2(93a_{00}^2 + 5\beta + \\
& 162a_{00}^6\Omega^2) - 4(-25 + 496a_{00}^4\Omega^2 + 1296a_{00}^8\Omega^4) \cosh \beta\Omega + (5 - 248a_{00}^2\Omega^2 + \\
& 1296a_{00}^8\Omega^4) \cosh 2\beta\Omega + 8a_{00}^2\Omega(52 - 12a_{00}^2\beta\Omega^2 + 5 \cosh \beta\Omega) \sinh \beta\Omega).
\end{aligned} \tag{4.32}$$

$$\begin{aligned}
F_3^{(h-h)\Omega}(x_a, y_a) &= - \frac{x_a^5(-1 + \Omega^2)(\beta\Omega + \sinh \beta\Omega)(5 + \cosh \beta\Omega)}{288a_{00}^{10}\beta\Omega^7 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} \\
& - \frac{x_a^3 y_a^2(-1 + \Omega^2)(\beta\Omega + \sinh \beta\Omega)(5 + \cosh \beta\Omega)}{1152a_{00}^{10}\beta\Omega^7 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} \\
& + \frac{x_a^3}{2304a_{00}^8\beta\Omega^7 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} (230\beta\Omega(-1 + \Omega^2) + 504a_{00}^4\beta\Omega^3(-1 + \Omega^2) - \\
& 72a_{00}^2\Omega(2 + \Omega^2) + 2\Omega(23\beta(-1 + \Omega^2) - 236a_{00}^4\beta\Omega^2(-1 + \Omega^2) + 32a_{00}^2 \times \\
& (2 + \Omega^2)) \cosh \beta\Omega + 8a_{00}^2\Omega(2 + \Omega^2(1 - 4a_{00}^2\beta(-1 + \Omega^2))) \cosh 2\beta\Omega + \\
& 2(-1 + \Omega^2)(115 + 12a_{00}^2(9a_{00}^2 - 2\beta)\Omega^2) \sinh \beta\Omega - (-1 + \Omega^2)(-23 + 108 \times \\
& a_{00}^4\Omega^2) \sinh 2\beta\Omega) - \frac{x_a y_a^3(-1 + \Omega^2)(\beta\Omega + \sinh \beta\Omega)(5 + \cosh \beta\Omega)}{384a_{00}^{10}\beta\Omega^7 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} \\
& + \frac{x_a y_a^2(-1 + \Omega^2)}{768a_{00}^8\beta\Omega^7 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} (-144a_{00}^2\Omega - 50\beta\Omega - 2\Omega(5\beta + 4a_{00}^2(-16 + a_{00}^2 \\
& \times \beta\Omega^2)) \cosh \beta\Omega - 50 \sinh \beta\Omega + 8a_{00}^2\Omega((2 + a_{00}^2\beta\Omega^2) \cosh 2\beta\Omega + 3\Omega \times \\
& (3a_{00}^2 + 2\beta - 3a_{00}^2 \cosh \beta\Omega) \sinh \beta\Omega) - 5 \sinh 2\beta\Omega) +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{x_a}{64a_{00}^6\beta\Omega^7 \sinh^4 \frac{\beta\Omega}{2}} [(-5 - 12a_{00}^4\Omega^2 + (-1 + 12a_{00}^4\Omega^2) \cosh \beta\Omega) \times \\ & (-4a_{00}^2\Omega^3 + \beta\Omega(-1 + \Omega^2)(1 + 4a_{00}^4\Omega^2) + 4a_{00}^2\Omega^3(1 + a_{00}^2\beta(1 - \Omega^2)) \times \\ & \cosh \beta\Omega + (-1 + \Omega^2) \sinh \beta\Omega)]. \end{aligned} \quad (4.33)$$

4.3. Résultats et discussion

La théorie des perturbations stationnaires est très largement utilisée en mécanique quantique. Elle admet un développement en puissance, en fonction de la constante de couplage, de l'énergie en série perturbative et dont les coefficients correspondants sont indéterminés [6-9].

Plusieurs procédures sont utilisées pour calculer ces coefficients, parmi elles la technique des *diagrammes de Feynman connexes* [3, 19, 46] et dont elle s'avère, aux ordres élevés, difficile à manier à cause des calculs encombrants. Sa praticabilité est restreinte aux ordres les moins élevés.

Pour traiter des ordres élevés, il est commode d'utiliser la procédure dite *méthode de Bender-Wu* [47-50], elle est fondée essentiellement sur des relations de récurrences. Ces dernières sont déduites directement de l'équation de Schrödinger correspondantes aux Hamiltoniens $H^{(2)}$, $H^{(3)}$, et $H^{(h-h)}$, où les spectres d'énergie correspondants $E_0^{(2)}$, $E_0^{(3)}$ et $E_0^{(h-h)}$ ont les formes asymptotiques suivantes au second ordre, quand $\lambda \rightarrow 0$,

$$E_0^{(2)} \approx 2 + \frac{5}{48} \lambda^2 - \frac{223}{6912} \lambda^4 + \dots, \quad (4.34)$$

$$E_0^{(3)} \approx 3 + \frac{1}{48} \lambda^2 - \frac{7}{4608} \lambda^4 + \dots, \quad (4.35)$$

$$E_0^{(h-h)} \approx 2 + \frac{1}{18} \lambda^2 - \frac{11}{864} \lambda^4 + \dots. \quad (4.36)$$

Nous avons développé dans l'appendice la procédure du calcul de l'expression (4.35), ainsi que la déduction, à partir cette dernière, des expressions de (4.34) et (4.36).

En outre, il a été trouvé [27] que les séries perturbatives de Rayleigh-Schrödinger données en (4.34), (4.35), et (4.36) sont *sommables au sens de Borel* à cause de l'alternance des signes [48, 49] et que *la sommation de Padé* [18] des séries divergentes semble être en excellent accord avec le fait que le spectre en énergie est réel. De plus, la

sommation de Padé permet de pourvoir une évidence numérique puissante que l'énergie fondamentale, considérée comme une fonction en λ^2 , est une *fonction de Stieltjes* convergente [27, 48-50].

D'autre part, la mesure des états d'énergies en utilisant la théorie des perturbations variationnelles convergente passe par la connaissance des expressions analytiques des potentiels effectifs classiques $W_2^{(2)\Omega}(x_a, y_a)$, $W_2^{(3)\Omega}(x_a, y_a, z_a)$ et $W_2^{(h-h)\Omega}(x_a, y_a)$ données dans (4.16), (4.23), et (4.30), et sont optimisés par rapport au paramètre variationnel Ω^2 , en tenant compte de leurs *modules*.

Ayant calculé $W_2^{(2)}(x_a, y_a)|_{\Omega=\Omega_2^*}$, $W_2^{(3)}(x_a, y_a, z_a)|_{\Omega=\Omega_3^*}$, et $W_2^{(h-h)}(x_a, y_a)|_{\Omega=\Omega_{h-h}^*}$ et en procédant en complète analogie avec la mécanique statistique quantique, on intègre les facteurs de Boltzmann suivants : $\exp[-\beta W_2^{(2)}(x_a, y_a)]$, $\exp[-\beta W_2^{(3)}(x_a, y_a, z_a)]$, et $\exp[-\beta W_2^{(h-h)}(x_a, y_a)]$ sur les variables x_a , y_a , et z_a pour obtenir les fonctions de partitions quantiques complètes $Z_2^{(2)}$, $Z_2^{(3)}$, et $Z_2^{(h-h)}$. Les états d'énergies de l'état fondamental sont déduits, aux basses températures, par :

$$E_{VPT}^{(D)} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{\beta} Z_2^{(D)} \right). \quad (4.37)$$

Les tableaux 4.1, 4.2, et 4.3 montrent les valeurs d'énergies des fondamentales relatives aux Hamiltoniens $H^{(2)}$, $H^{(3)}$, et $H^{(h-h)}$. Dans tous les cas, λ représente la constante de couplage, $E_{B-W}^{(0)D}$ est l'énergie de Rayleigh-Schrödinger que nous avons obtenue par la méthode des récurrences de Bender-Wu (voir (4.34), (4.35), et (4.36)), quant à $E_{VPT}^{(0)D}$, c'est l'énergie calculée par l'application de la théorie des perturbations variationnelles pour matrice densité [36, 40-42]. $\delta_r^{(D)}$ est l'erreur relative absolue de l'énergie entre les valeurs $E_{B-W}^{(0)D}$ et $E_{VPT}^{(0)D}$.

Les calculs des spectres d'énergie ont été déduits par l'utilisation du langage MATHEMATICA, version 4.2.

Tableau 4.1 : Spectre d'énergie du Hamiltonien $H^{(2)}$ au premier et au second ordre.

λ	1 ^{er} ordre			2 ^{ème} ordre		
	$E_{VPT}^{(0)}$	$E_{B-W}^{(0)}$	$\delta_r^{(2)}$	$E_{VPT}^{(0)}$	$E_{B-W}^{(0)}$	$\delta_r^{(2)}$
0.015625	2.0000104	2.0000254	7.51×10^{-6}	2.0000989	2.0000254	3.67×10^{-5}
0.03125	2.0000423	2.0001017	2.97×10^{-5}	2.0003866	2.0001017	1.42×10^{-4}
0.0625	2.0001700	2.0004070	1.18×10^{-4}	2.0014742	2.0004064	5.33×10^{-4}
0.125	2.0006788	2.0016276	4.74×10^{-4}	2.0053837	2.0016197	1.87×10^{-3}
0.25	2.0026823	2.0065104	1.91×10^{-3}	2.0182742	2.0063844	5.89×10^{-3}
0.5	2.0127730	2.0260416	7.84×10^{-7}	2.0554486	2.0240252	1.52×10^{-2}
1.0	2.0366146	2.1041667	3.31×10^{-3}	2.1453235	2.0719039	3.42×10^{-2}
2.0	2.1186138	2.4166667	1.40×10^{-2}	2.3259041	1.9004629	1.83×10^{-1}
5.0	2.5368282	4.6041667	8.15×10^{-1}	2.7719200	-15.56004	6.61
10.0	3.8139950	12.416667	6.92×10^{-1}	3.3196219	-310.2106	94.44
100.0	5.9276380	1043.6667	175.0678	7.2385028	3.22×10^7	445535.11

Tableau 4.2 : Spectre d'énergie du Hamiltonien $H^{(3)}$ au premier et au second ordre.

λ	1 ^{er} ordre			2 ^{ème} ordre		
	$E_{VPT}^{(0)}$	$E_{B-W}^{(0)}$	$\delta_r^{(3)}$	$E_{VPT}^{(0)}$	$E_{B-W}^{(0)}$	$\delta_r^{(3)}$
0.015625	3.0000007	3.0000051	1.43×10^{-6}	3.0000199	3.0000050	4.97×10^{-6}
0.03125	3.0000035	3.0000203	5.61×10^{-6}	3.0000795	3.0000203	1.97×10^{-5}
0.0625	3.0000143	3.0000814	2.23×10^{-5}	3.0003114	3.0000813	7.67×10^{-5}
0.125	3.0000576	3.0003255	8.92×10^{-5}	3.0011944	3.0003251	2.89×10^{-4}
0.25	3.0002297	3.0013021	3.57×10^{-4}	3.0044111	3.0012961	1.03×10^{-3}
0.5	3.0009014	3.0052083	1.43×10^{-3}	3.0152722	3.0051134	3.37×10^{-3}
1.0	3.0033642	3.0208333	5.81×10^{-3}	3.0479067	3.0193142	9.38×10^{-3}
2.0	3.0110488	3.0833333	2.40×10^{-2}	3.1320618	3.0590277	2.33×10^{-2}
5.0	3.0381333	3.5208333	1.58×10^{-1}	3.4058718	2.5713975	2.45×10^{-1}
10.0	3.0749624	5.0833333	6.53×10^{-1}	3.8155012	-10.10764	4.088
100.0	3.2695345	211.33333	63.637	7.4004847	-151698.3	44542.42

Tableau 4.3 : Spectre d'énergie du Hamiltonien $H^{(h-h)}$ au premier et au second ordre.

λ	1 ^{er} ordre			2 ^{ème} ordre		
	$E_{VPT}^{(0)}$	$E_{B-W}^{(0)}$	$\delta_r^{(h-h)}$	$E_{VPT}^{(0)}$	$E_{B-W}^{(0)}$	$\delta_r^{(h-h)}$
0.015625	2.0000839	2.0000135	3.52×10^{-5}	2.0000529	2.0000135	1.97×10^{-5}
0.03125	2.0003360	2.0000542	1.40×10^{-4}	2.0002076	2.0000542	7.67×10^{-5}
0.0625	2.0013347	2.0002170	5.58×10^{-4}	2.0007956	2.0002168	2.89×10^{-4}
0.125	2.0051900	2.0008680	2.15×10^{-3}	2.0029372	2.0008649	1.03×10^{-3}
0.25	2.0189328	2.0034722	7.65×10^{-3}	2.0101668	2.0034224	3.35×10^{-3}
0.5	2.0603423	2.0138888	2.25×10^{-2}	2.0319079	2.0130931	9.26×10^{-3}
1.0	2.1613629	2.0555555	4.89×10^{-2}	2.0880726	2.0428240	2.16×10^{-2}
2.0	2.3725547	2.2222222	6.33×10^{-2}	2.2108290	2.0185185	8.70×10^{-2}
5.0	2.9891165	3.3888888	1.34×10^{-1}	2.5448202	-4.568287	2.795131
10.0	3.7450642	7.5555555	1.017470	2.9844918	-119.7592	41.12716
100.0	3.7820226	557.55555	146.423	6.3475159	-1.27×10^6	200079.27

- Discussion

Les résultats consignés dans les tableaux 4.1, 4.2, et 4.3 montrent, clairement, le processus d'accélération de la convergence de la théorie des perturbations variationnelles pour les petites valeurs de λ vers des états d'énergies de l'oscillateur harmonique non perturbé, c'est-à-dire : $E_{O,H}^{(2)} = E_{O,H}^{(h-h)} = 2$, $E_{O,H}^{(3)} = 3$, tandis que pour des grandes valeurs de λ , la convergence est assez lente à cause du caractère perturbatif de la théorie. Ceci nécessite une *resommation* des séries d'énergie divergentes aux faibles couplages en séries convergentes aux forts couplages [22, 23].

Quant à la méthode des récurrences de Bender-Wu, elle reste viable pour les faibles couplages, par contre, aux forts couplages, les états d'énergies diffèrent largement de ceux obtenus par la théorie des perturbations variationnelles. La positivité et la réalité du spectre d'énergie trouvé par la méthode des récurrences de Bender-Wu sont *conditionnées* par le choix $k \rightarrow 2k$. (Voir le détail du calcul dans l'appendice)

Les écarts en énergie augmentent au fur et à mesure que la constante de couplage augmente. L'explication vient, probablement, du code de calcul élaboré pour comparer les résultats obtenus entre les deux théories. En effet, au premier ordre, l'expression du spectre d'énergie dans la méthode de Bender-Wu est en puissance *quadratique* de la constante de couplage [Voir (4.34), (4.35), et (4.36) en λ^2], alors qu'elle est *linéaire* avec un coefficient imaginaire et qui, de plus, ne contribue pas à l'estimation de l'énergie dans la théorie des perturbations variationnelles [Voir (4.12), (4.22), et (4.29)]. (Après avoir optimisé par rapport au paramètre variationnel Ω^2 et faire tendre $\beta \rightarrow \infty$) Au second ordre, l'expression analytique du spectre d'énergie est en puissance *quartique* en λ dans la méthode de Bender-Wu [Voir (4.34), (4.35), et (4.36) en λ^4], alors qu'elle est *quadratique* dans la théorie des perturbations variationnelles [Voir (4.16), (4.23), et (4.30)]. En allant aux ordres élevés, par exemple $n = 3$, on s'attend à ce que le spectre d'énergie soit en puissance *sextique* en λ dans la méthode de Bender-Wu, alors qu'il est en puissance *cubique*, avec un coefficient imaginaire $(-i\lambda^3 F_4^{(\dots)\Omega})$, dans la théorie des perturbations variationnelles.

L'ordre du développement perturbatif, et qui correspond à la puissance de la constante de couplage dans l'expression du potentiel effectif classique, a permis à la théorie des perturbations variationnelles pour matrice densité de traiter, simultanément, des systèmes aussi bien aux faibles qu'aux forts couplages, à l'instar de la méthode des récurrences de Bender-Wu où l'ordre de la puissance de la constante de couplage est deux fois plus grand que celui du développement perturbatif, conduisant ainsi à une mauvaise estimation de l'énergie aux forts couplages.

CONCLUSION

Motivé par les travaux de Bender et ces collaborateurs [24-27, 31, 32, 34, 43] sur la mécanique quantique PT symétrique possédant une norme CPT appliquée à une classe d'Hamiltoniens complexes cubiques unidimensionnels de la forme de l'équation (3.1), ce mémoire a pour but deux points essentiels. D'une part, généralisée la classe d'Hamiltoniens (3.1) au cas multidimensionnels couplés aux oscillateurs harmoniques dans le cas particulier $\varepsilon = 1$. D'autre part, retrouvé la positivité et la réalité du spectre d'énergie, sans avoir recours à la mécanique quantique PT symétrique, par une extension de l'applicabilité de la théorie des perturbations variationnelles convergente pour matrices densités, grâce à l'introduction de la formule maculée généralisée isotropique (2.108) et qui tient compte des effets de toutes les fluctuations thermiques et quantiques.

Les spectres d'énergie sont trouvés réels et positifs, et sont en très bon accord avec ceux obtenus par la méthode des récurrences de Bender-Wu (Rayleigh-Schrödinger) aux faibles couplages [36, 40-42]. Aux forts couplages, le spectre d'énergie *converge lentement* vers celui de l'oscillateur harmonique dans la théorie des perturbations variationnelles, alors qu'il *diverge* dans la méthode de Bender-Wu. Ceci nous permet d'affirmer que la théorie des perturbations variationnelles est une autre technique de sommation, puissante et efficace à la fois, permettant, ainsi, de transformer des séries perturbatives divergentes en séries convergentes et de traiter simultanément des systèmes aux faibles et forts couplages [22, 23] sans avoir accès à des méthodes de renormalisations, là où d'autres méthodes perturbatives (Rayleigh-Schrödinger) échouent.

La théorie que nous venons de présenter (*La théorie des perturbations variationnelles*) est encore assez discutée aujourd'hui, notamment :

- Le problème concernant des systèmes aux forts couplages, dont la théorie conventionnelle "*aux faibles couplages*" donne des résultats meilleurs que ceux obtenus par d'autres méthodes perturbatives et/ou variationnelles, mais restent cependant toujours éloignés des valeurs exactes.

- Le problème des potentiels à structure de point de selle "*Saddle-point*", tels que les potentiels à double puits dont les barrières sont considérées comme des points instables. Il est donc intéressant d'étudier le comportement des fluctuations quantiques du système autour du point de selle où, aux basses températures, des modes de fluctuations quantiques génère la divergence des intégrales du chemin.
- Le problème des états excités, dont la dégénérescence des niveaux d'énergie pose des difficultés majeures à la théorie.

Il est enfin intéressant de trouver le spectre d'énergie exact analytiquement, à cette même classe d'Hamiltoniens, en utilisant des théories comme celles de la supersymétrie de la mécanique quantique (*SUSY-QM*) [56-59], les transformations *non-bijectives* [60], les transformations ponctuelles canoniques (*PCT*) [61], ainsi que par l'approche dynamique de la théorie des groupes (*Algèbre des potentiels*) [62].

APPENDICE METHODE DES RECURRENCES DE BENDER-WU

Nous nous proposons dans cet appendice de retrouver les expressions (4.34), (4.35) et (4.36) du chapitre 4 par la méthode des récurrences de Bender-Wu en l'appliquant au cas tridimensionnel. Les cas bidimensionnel et de Hénon-Heiles quantique complexifié sont déduits directement du cas tridimensionnel.

La méthode de Bender-Wu est une procédure mathématique qui permet la déduction du spectre d'énergie d'un Hamiltonien sous forme d'une série et dont les coefficients sont liés par des relations de récurrences. Cette procédure révèle, immédiatement, la positivité et la réalité des spectres d'énergie $H^{(2)}$, $H^{(3)}$ et $H^{(h-h)}$.

Il est à noter que la constante de couplage λ est considérée dans ce qui suit comme réelle, la substitution $\lambda \rightarrow i\lambda$ est effectuée à la fin des calculs.

- Cas du Hamiltonien $H^{(3)}$

L'équation de Schrödinger correspondante au Hamiltonien $H^{(3)}$ est :

$$-\nabla^2 \psi_N(x, y, z) + (x^2 + y^2 + z^2 + \lambda xyz) \psi_N(x, y, z) = E_N \psi_N(x, y, z), \quad (\text{A.1})$$

En substituant

$$\psi_N(x, y, z) = \exp[-(x^2 + y^2 + z^2)] \phi_N(x, y, z), \quad (\text{A.2})$$

où $\phi_N(x, y, z)$ est une série en puissance de λ et les coefficients de λ^n sont des polynômes de degré $3k$ tel que

$$\phi_N(x, y, z) = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k P_{N,k}(x, y, z), \quad (\text{A.3})$$

dans (A.1), on trouve :

$$\sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k (3 + 2x\partial_x + 2y\partial_y + 2z\partial_z - \nabla^2 + \lambda xyz) P_{n,k}(x, y, z) = E_N \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k P_{N,k}(x, y, z), \quad (\text{A.4})$$

avec l'abréviation suivante :

$$(\partial_x, \partial_y, \partial_z) \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

En posant l'expression du spectre d'énergie :

$$E_N = \sum_{k'=0}^{\infty} \lambda^{k'} \varepsilon_{N,k'} = 2(n+m+p) + 3 + \sum_{k'=1}^{\infty} \lambda^{k'} \varepsilon_{N,k'}, \quad (\text{A.5})$$

où le nombre quantique principal donné par $N = n + m + p$, l'équation (A.4) devient

$$2[x\partial_x + y\partial_y + z\partial_z - (n+m+p)]P_{N,k} = \left(\nabla^2 - \lambda xyz + \sum_{k'=1}^{\infty} \lambda^{k'} \varepsilon_{N,k'} \right) P_{N,k}. \quad (\text{A.6-1})$$

En introduisant la contrainte sur les polynômes

$$\lambda P_{N,k} = -P_{N,k-1},$$

impliquant la condition suivante :

$$\lambda^{k'} P_{N,k} = (-1)^{k'} P_{N,k-k'},$$

la somme dans (A.6-1) sera tronquée à l'ordre k de telle manière que le polynôme $P_{N,k}$

vérifie la condition :

$$P_{N,k} = 0, \quad \text{si} \quad k < 0.$$

L'expression (A.6-1) devient

$$2[x\partial_x + y\partial_y + z\partial_z - (n+m+p)]P_{N,k} = \nabla^2 P_{N,k} + \lambda xyz P_{N,k-1} + \sum_{k'=1}^k (-1)^{k'} \varepsilon_{N,k'} P_{N,k-k'}, \quad (\text{A.6-2})$$

Supposons que $P_{N,k} \equiv P_k$ est un polynôme de degré $3k$ en fonction des variables x , y et z

$$P_k(x, y, z) = \sum_{\alpha=0}^{k+N} \sum_{\beta=0}^{k+N} \sum_{\gamma=0}^{k+N} a_k^{(\alpha,\beta,\gamma)} x^\alpha y^\beta z^\gamma, \quad (\text{A.7})$$

avec la contrainte sur les coefficients

$$a_k^{(\alpha,\beta,\gamma)} \equiv 0, \quad k < 0, \quad \text{ou} \quad (\alpha, \beta, \gamma) < 0. \quad (\text{A.8})$$

En effectuant les dérivées première et seconde par rapport aux variables x , y et z , et en les substituant dans (A.6-2), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \sum_{(\alpha,\beta,\gamma)=0}^{k+N} 2[(\alpha + \beta + \gamma) - (n+m+p)] a_k^{(\alpha,\beta,\gamma)} x^\alpha y^\beta z^\gamma &= \sum_{k'=1}^k (-1)^{k'} \varepsilon_{N,k'} \left(\sum_{(\alpha,\beta,\lambda)=0}^{k+N-k'} a_{k-k'}^{(\alpha,\beta,\gamma)} x^\alpha y^\beta z^\gamma \right) + \\ \sum_{(\alpha,\beta,\gamma)=0}^{k+N} [(\alpha+1)(\alpha+2) a_k^{(\alpha+2,\beta,\gamma)} + (\beta+1)(\beta+2) a_k^{(\alpha,\beta+2,\gamma)} + (\gamma+1)(\gamma+2) a_k^{(\alpha,\beta,\gamma+2)} + a_{k-1}^{(\alpha-1,\beta-1,\gamma-1)}] x^\alpha y^\beta z^\gamma & \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Le premier terme du second membre peut être réajusté pour devenir

$$\begin{aligned} \sum_{(\alpha,\beta,\gamma)=0}^{k+N-k'} x^\alpha y^\beta z^\gamma \left(\sum_{k'=1}^k (-1)^{k'} \varepsilon_{N,k'} a_{k-k'}^{(\alpha,\beta,\gamma)} \right) &\equiv \sum_{(\alpha,\beta,\gamma)=-k'}^{k+N-k'} x^\alpha y^\beta z^\gamma \left(\sum_{k'=1}^k (-1)^{k'} \varepsilon_{N,k'} a_{k-k'}^{(\alpha,\beta,\gamma)} \right) \\ &= \sum_{(\alpha,\beta,\gamma)=0}^{k+N} x^\alpha y^\beta z^\gamma \left(\sum_{k'=1}^k (-1)^{k'} \varepsilon_{N,k'} a_{k-k'}^{(\alpha,\beta,\gamma)} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

En insérant (A.10) dans (A.9), on obtient :

$$2[(\alpha + \beta + \gamma) - (n + m + p)] a_k^{(\alpha, \beta, \gamma)} = \sum_{k'=1}^k (-1)^{k'} \varepsilon_{N, k'} a_{k-k'}^{(\alpha, \beta, \gamma)} + (\alpha + 1)(\alpha + 2) a_k^{(\alpha+2, \beta, \gamma)} + (\beta + 1)(\beta + 2) a_k^{(\alpha, \beta+2, \gamma)} + (\gamma + 1)(\gamma + 2) a_k^{(\alpha, \beta, \gamma+2)} + a_{k-1}^{(\alpha-1, \beta-1, \gamma-1)}. \quad (\text{A.11})$$

On cherche le moyen de déterminer les coefficients $\varepsilon_{N, k'}$ de la série (A.5), les coefficients peuvent être calculés à partir de la relation (A.11).

En effet, en tenant compte de la contrainte (A.8) et en prenant en considération, dans (A.11), l'état fondamental correspondant à $n = m = p = 0$, ainsi qu'à la condition $\alpha = \beta = \gamma = 0$, on obtient :

$$\varepsilon_{0, k} = -2(-1)^k (a_k^{(2, 0, 0)} + a_k^{(0, 2, 0)} + a_k^{(0, 0, 2)}). \quad (\text{A.12})$$

En substituant de nouveau (A.12) dans (A.11), nous obtenons la relation de récurrence sur les coefficients $a_k^{(\alpha, \beta, \gamma)}$ donnée par

$$a_k^{(\alpha, \beta, \gamma)} = \frac{1}{2(\alpha + \beta + \gamma)} [a_{k-1}^{(\alpha-1, \beta-1, \gamma-1)} - 2 \sum_{k'=1}^k (a_{k'}^{(2, 0, 0)} + a_{k'}^{(0, 2, 0)} + a_{k'}^{(0, 0, 2)}) + (\alpha + 1)(\alpha + 2) a_k^{(\alpha+2, \beta, \gamma)} + (\beta + 1)(\beta + 2) a_k^{(\alpha, \beta+2, \gamma)} + (\gamma + 1)(\gamma + 2) a_k^{(\alpha, \beta, \gamma+2)}], \quad (\text{A.13})$$

Le spectre d'énergie de l'état fondamental est donné conformément à la relation (A.5)

$$E_0(\lambda) = 3 + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \varepsilon_{0, k} = 3 + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k [-2(-1)^k (a_k^{(2, 0, 0)} + a_k^{(0, 2, 0)} + a_k^{(0, 0, 2)})]. \quad (\text{A.14})$$

En substituant $\lambda \rightarrow i\lambda$, nous obtenons :

$$E_0(\lambda) = 3 + \sum_{k=1}^{\infty} (i\lambda)^k [-2(-1)^k (a_k^{(2, 0, 0)} + a_k^{(0, 2, 0)} + a_k^{(0, 0, 2)})]. \quad (\text{A.15})$$

La condition $k \rightarrow 2k$ garantie la réalité du spectre d'énergie

$$E_0(\lambda) = 3 + \sum_{k=1}^{\infty} (i\lambda)^{2k} [-2(-1)^{2k} (a_{2k}^{(2, 0, 0)} + a_{2k}^{(0, 2, 0)} + a_{2k}^{(0, 0, 2)})] = 3 - 2 \sum_{k=1}^{\infty} (a_{2k}^{(2, 0, 0)} + a_{2k}^{(0, 2, 0)} + a_{2k}^{(0, 0, 2)}) (-\lambda^2)^k. \quad (\text{A.17})$$

Nous avons utilisé le langage MATHEMATICA, version 4.2 pour évaluer les coefficients de la série (A.16) au second ordre par l'utilisation de la relation de récurrence (A.13). Une fois que les coefficients $a_k^{(\dots)}$ sont connus, avec $k = 1, 2$, la série perturbative correspondante au spectre d'énergie $E_0^{(3)}$ à la forme asymptotique donnée par (4.35).

- Cas du Hamiltonien $H^{(2)}$

La relation de récurrence correspondante au Hamiltonien $H^{(2)}$ se déduit de la relation (A.13) et elle est donnée par :

$$a_k^{(\alpha,\beta)} = \frac{1}{2(\alpha + \beta)} [a_{k-1}^{(\alpha-1,\beta-1)} - 2 \sum_{k'=1}^k (a_{k'}^{(2,0)} + 2a_{k'}^{(0,2)}) a_{k-k'}^{(\alpha,\beta)} + (\alpha + 1)(\alpha + 2) a_k^{(\alpha+2,\beta)} + (\beta + 1)(\beta + 2) a_k^{(\alpha,\beta+2)}]. \quad (\text{A.17})$$

La série perturbative correspondante au spectre d'énergie $H^{(2)}$ est :

$$E_0^{(2)} = 2 - 2 \sum_{k=1}^{\infty} (a_k^{(2,0)} + a_k^{(0,2)}) (-\lambda^2)^k, \quad (\text{A.18})$$

de laquelle nous déduisons la forme asymptotique donnée en (4.34).

- Cas du Hamiltonien $H^{(h-h)}$

La relation de récurrence du Hamiltonien $H^{(h-h)}$ est :

$$h_k^{(\alpha,\beta)} = \frac{1}{2(\alpha + \beta)} [h_{k-1}^{(\alpha-1,\beta-2)} - 2 \sum_{k'=1}^k (h_{k'}^{(2,0)} + 2h_{k'}^{(0,2)}) h_{k-k'}^{(\alpha,\beta)} + (\alpha + 1)(\alpha + 2) h_k^{(\alpha+2,\beta)} + (\beta + 1)(\beta + 2) h_k^{(\alpha,\beta+2)} - \frac{1}{3} h_{k-1}^{(\alpha-3,\beta)}]. \quad (\text{A.19})$$

La série perturbative d'énergie du Hamiltonien $H^{(h-h)}$ est :

$$E_0^{(h-h)} = 2 - 2 \sum_{k=1}^{\infty} (h_{2k}^{(2,0)} + h_{2k}^{(0,2)}) (-\lambda^2)^k, \quad (\text{A.20})$$

et qui conduit à la forme asymptotique donnée en (4.36).

REFERENCE

1. Feynman, R.P., Rev. Mod. Phy. 20 (1948) 367.
2. Feynman, R.P., Hibbs, A.R., Quantum Mechanics and Path Integral, McGraw, New-York, 1965.
3. Kleinert, 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.
 Dirac, P.A.M., Pyhsikalische Zeitschrift der Sowjetnion 3, (1933) 64.
8. Landau, L., Lifchitz, E., Mécanique Quantique, Théorie non Relativiste, Tome III, troisième ed., Edition Mir, Moscou, 1980.
9. Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., Laloë, F., Mécanique Quantique, Tome I-II, Edition Hermann, Paris, 1973.
10. Duru, I. M., Kleinert, H., Phys. Lett. B 84 (1979) 30.
11. Feynman, R.P., Kleinert, H., Phys. Rev, A 34 (1986) 5080.
12. Kleinert, H., Phys. Lett. B 280 (1992) 251.
13. Kleinert, H., Phys. Lett. A 173 (1993) 332.
14. Feynman, R.P., Phys. Rev. 97 (1955) 660.
15. Giachetti, R., Toghetti, V., Phys. Rev. Lett. 55 (1985) 912;
 Giachetti, R., Toghetti, V., Intern. J. Magn. Mater. 54-57 (1986) 861.
16. Giachetti, R., Toghetti, V., Vaia, R., Phys. Rev. B 33 (1986) 7647;

- Giachetti, R., Toghetti, V., Vaia, R., Phys. Rev. A 37 (1988) 2165;
 Giachetti, R., Toghetti, V., Vaia, R., Phys. Rev. A 38 (1988) 1521,1638.
17. Kleinert, H., Kürzinger, W., Pelster, A., J. Phys. A 31 (1998) 8307.
 18. Bentaiba, M., Thèse de Doctorat es-Sciences, Physique, Université de Blida, 1997.
 19. Bachmann, M., PH-D Thesis, Fachbereich Physik, Freie Universität, Berlin, 1999.
 20. Bachmann, M., Kleinert, H., Pelster, A., Phys. Rev. A 60 (1999) 3429.
 21. Weissbach, F., Pelster, A., Hamprecht, B., Phys. Rev. E 66 (2002) 036129.
 22. Brandt, S.F., Kleinert, H., Preprint arXiv: quant-ph / 0406206 (Juin 2004).
 23. Brandt, S.F., Ph.D Thesis, Fachbereich Physik, Freie Universität, Berlin, (Mai 2004).
 24. Bender, C.M., Boettcher, S., Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 5243.
 25. Bender, C.M., Boettcher, S., Meisinger, P.N., J. Math. Phys. 40 (1999) 2201.
 26. 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.
 27. Bender, C.M., Dunne, G.V., J. Math. Phys. 40 (1999) 4616.
 28. Kretschmer, R., Szymanowsky, L., Preprint arXiv : quant-ph / 0309118 (Sep. 2003).
 29. Znojil, M., Phys. Lett. A 285 (2001) 7.
 30. Shin, K.S., Commun. Math. Phys. 229 (2002) 543.
 31. Bender, C.M., Brod, J., Refig, A., Reuter, M., Preprint arXiv: quant-ph / 0402026 (Fev. 2004),
 Bender, C.M., Preprint arXiv: quant-ph / 0501052 (Jan. 2005).
 32. Bender, C.M., Brody, D.C., Jones, H.F., Preprint arXiv: hep-th / 0402183 (Fev. 2004),
 33. Dorey, P., Dunnig, C., Tateo, R., J. Phys. A 34 (2001) 5679.
 34. Bender, C.M., Meisinger, P.N., Wang, Q., J. Phys. A : Math.Gen. 36 (2003) 1973.
 35. Bentaiba, M., Chetouani, L., Mazouz, A., Phys. Lett. A 295 (2002) 13.
 36. Bentaiba, M., Yahiaoui, S-A., Chetouani, L., Phys. Lett. A 331 (2004) 175.
 37. Bentaiba, M., Chetouani, L., Hammann, T.F., Phys. Lett. A 189 (1994) 433.
 38. Bentaiba, M., Chetouani, L., Hammann, T.F., Z. Naturforsch. A 47 (1992) 1013.
 39. Bentaiba, M., 4th Workshop in Theoretical Physics, 14-16 June (1999), Constantine, Algeria.
 40. Bentaiba, M., International Conference on Theoretical Physics, Paris, UNISCO, July 22nd-27th 2002.

41. Yahiaoui, S-A., Bentaiba, M., 6^{ème} Congrès National de la Physique et ses Applications (CNPA VI ' 2004), 5-7 Décembre (2004), Tizi-Ouzou, Algérie.
42. Bentaiba, M., Yahiaoui, S-A., Journées Scientifiques Algéro-Françaises (JSAF2004), 11-13 Décembre (2004), Ouargla, Algérie.
43. Bender, C.M., Dunne, G.V., Meisinger, P.N., Simsek, M., Phys. Lett. A 281 (2001) 311.
44. Reif, F., Fundamentals of Statistical and Thermal Physics, McGraw-Hill, New-York, 1965.
45. Landau, L., Lifchitz, E., Physique Statistique, Tome V, Deuxième Ed., Edition Mir, Moscou, 1967.
46. Lagoutine, A., Eléments de Statistique Quantique, OPU, Alger, 1985.
47. Bender, C.M., Wu, T.T., Phys. Rev. 184 (1969) 1231,
 Bender, C.M., Wu, T.T., Phys. Rev. Lett. 27 (1971) 461,
 Bender, C.M., Wu, T.T., Phys. Rev. D7 (1973) 1620.
48. Hardy, G., Divergent Series, Oxford, 1966.
49. Bender, C.M., Orszag, S.A., Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers, McGraw-Hill, New-York, 1978.
50. Della Dora, J., Crescenzo, C., Padé Approximation and its applications, ed. L. Wuytack, Springer, Berlin, 1979.
51. Gradshteyn, I.S., Ryzhik, I.M., Table of Integrals, Series and Products, Academic Press, London, 1965.
52. Nelson, D.R., Shnerb, N.M., Phys. Rev. E 58 (1998) 1383.
53. Hatano, N., Nelson, D.R. Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 570;
 Hatano, N., Nelson, D.R. Phys. Rev. B 56 (1997) 8651.
54. Znojil, M., Cannata, F., Bagchi, B., Preprint arXiv : hep-th / 0003277 (Mars 2000).
 Znojil, M., Preprint arXiv: hep-th / 0404145 (Avr. 2004).
 Aktaş, M., Sever, R., arXiv: hep-th / 0404213 (Preprint/Avr. 2004).
 Bagchi, B., Mallik, S., Quesne, C., Preprint arXiv : hep-th / 0102093 (Fev. 2001).
55. Dirac, P.A.M., Proc. R. Soc. London, A 180 (1942) 1.
56. Witten, E., Nucl. Phys. B 188 (1981) 513.
57. Cooper, F., Freedman, B., Ann. Phys. 146 (1983) 262.

58. Bender, C.M., Cooper, F., Das, A., Phys. Rev. D28 (1983) 1473.
59. Cooper, F., Khare, A., Sukhatme, U., Preprint arXiv: hep-th / 9405029 (Mai 1994).
60. Kibler, M., Négadi, N., Nuo. Cimen. 37 (1983) 225,
Kibler, M., Négadi, N., Int. J. Quantum. Chem. 27 (1984) 405,
Kibler, M., Négadi, N., Croat. Chem. Acta 578 (1984) 1509.
61. Alhaidari, A.D., Phys. Rev. Lett. 87 (2001) 210405,
Alhaidari, A.D., J. Phys. A34 (2001) 9827,
Alhaidari, A.D., Phys. Rev. A65 (2002) 042109.
62. Alhassid, Y., Gürsey, F., Iachello, F., Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 873,
Alhassid, Y., Gürsey, F., Iachello, F., Ann. Phys. 148 (1983) 346,
Alhassid, Y., Gürsey, F., Iachello, F., Ann. Phys. 167 (1986) 181.