

UNIVERSITE SAAD DAHLAB DE BLIDA

Faculté des Sciences
Département de physique

MEMOIRE DE MAGISTER

en physique

Spécialité: Physique Théorique

LA METHODE VARIATIONNELLE DE FEYNMAN-KLEINERT APPLIQUEE A DES POTENTIELS RATIONNELS A DEUX DIMENSIONS

Par

ZERGUINI Hocine

Devant le jury composé de :

Mr. S. BOUKRAA	Professeur. U. S. D. Blida	Président
Mlle. N. ALLAL	Professeur. U.S.T.H.B.	Examineur
Mr. R. BELAL	Professeur. U.S.D. Blida	Examineur
Mr. M. BENKADOUR	Chargé de cours. U.S.D. Blida	Examineur
Mr. M. BENTAIBA	Professeur. U. S. D. Blida	Rapporteur

Blida, Septembre 2005

ملخص

بطريقة معممة نعرف نوعين من الصيغ في الميكانيك الكمومي. الصيغة المتداولة و المعتمدة على التكميم القانوني للملاحظات الفيزيائية وكذا صيغة التكاملات المسلك لفاينمان.

تعتمد هذه الاخيرة على مفهوم المصطلح الناشر او -النواة- الذي ينقل كل المعلومات الخاصة بالمنظومة الفيزيائية المدروسة.

المشكل المطروح هو ان الحساب الرياضياتي للناشر غير ممكن و هذا في اغلب الاحيان مما يستوجب علينا استعمال بعض الطرق التقريبية لتعدي الاشكال. مؤخرا واعتمادا على الاعمال التي بدأها فاينمان وكلاينرت تم تطوير طريقة جديدة يعرف بالنظرية الاضطرابية التغيرية لمصفوفات الكثافة و ذات تقارب عفوي من طرف كلاينرت و باكمان. من جهة اخرى لدينا فئة من الكمونات تسمى بالكمونات اللاكثيرات الحدود و التي لها دور مهم في الفيزياء و التي يصعب دراستها بالطرق الرياضياتية المباشرة.

في اطار هذه الاطروحة نقترح دراسة هذه الفئة من الكمونات المذكورة اعلاه باستعمال النظرية الاضطرابية التغيرية لمصفوفات الكثافة.

RESUME

D'une manière générale, nous définissons deux types de formalismes de la mécanique quantique. Le formalisme standard (ou canonique) basé sur la quantification canonique des observables physiques en association avec l'algèbre des opérateurs, et le formalisme des intégrales de chemins de Feynman.

La base du formalisme de Feynman est une certaine entité nommée Propagateur (ou Kernel) qui véhicule toutes les informations concernant le système physique étudié.

Mais il se trouve, que dans la majorité des cas, un calcul analytique exact du Propagateur n'est pas évident. D'où le recours à des techniques d'approximation pour contourner ce problème. Récemment, et en continuité à des travaux initiés par Feynman et Kleinert : une méthode dite : méthode des perturbations variationnelles pour matrices densités à convergence systématique (théorie VPT), a été mise au point par Bachmann et Kleinert.

D'autre part nous avons une catégorie de potentiels, nommés : Potentiels Non Polynomiaux, jouant un rôle capital dans différentes branches de la physique et qui sont pratiquement impossibles à étudier par des méthode analytiques directes.

On se propose, dans ce travail, d'étudier ces potentiels par la théorie VPT.

ABSTRACT

Generally, we define two types of formalism of quantum mechanics. The canonical formalism based on the canonical quantization of physical observables in partnership with the operators algebra, and the formalism of path integrals owed to Richard Feynman.

The basis of the Feynman's formalism is a certain entity called Kernel which conveys all information concerning the studied physical system.

But an exact analytical calculation of the kernel, and that in the majority of the cases, is not obvious. For this reason, we need to recourse to techniques of approximation to circumvent this problem. Recently, and in continuity with the work initiated by Feynman and Kleinert a method known as: variational perturbation theory for density matrices with a systematic convergence (VPT), was developed by Bachmann and Kleinert.

In addition we have a category of potentials, named: NonPolynomial potentials, playing a capital role in various branches of physics, are practically impossible to study by exact analytical method.

One proposes, in this work, to study these potentials using the VPT theory.

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 du Professeur Mustapha BENTAIBA, directeur du laboratoire et chef du département de physique, que je ne pourrai jamais remercier suffisamment, pour m'avoir tout d'abord encourager à continuer mes études, en me redonnant confiance en moi-même, ensuite pour avoir dirigé mon travail avec une grande efficacité. Faire partie de son équipe était un plaisir et une expérience très enrichissante.

Je remercie particulièrement :

Mr. S. Boukraa	Professeur. U. S. D. Blida
Mlle. N. Allal	Professeur. U.S.T.H.B.
Mr. R. Belal	Professeur. U.S.D. Blida
Mr. M. Benkaddour	Chargé de cours. U.S.D. Blida

pour m'avoir fait l'honneur d'accepter d'évaluer ce travail et de composer le jury.

Mes sincères remerciements à toute l'équipe du Laboratoire : Enseignants et collègues de la Post-Graduation pour leurs aide et leurs encouragements à leur tête Monsieur Toufik Doumaz .

Ma première pensée va à mes parents et ma grand-mère Baya, qui m'ont donné le meilleur d'eux même, et particulièrement à mon père et ma grand-mère, avec lesquels je ne peut malheureusement pas partager ma joie (que dieu ait leurs âmes).

Je dédie ce travail à : Ma femme Radhia, mes enfants : Ali, Adam et Baya.

Mon frère Hicham et mes sœurs.

Mon cousin et ami Youcef et toute la famille.

Tous mes ami(e)s.

TABLE DES MATIERES

RESUME	1
REMERCIEMENTS	4
TABLE DES MATIERES	5
LISTES DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX	6
INTRODUCTION	7
1. FORMALISME DES INTEGRALES DE CHEMINS ET THEORIE DES PERTURBATIONS VARIATIONNELLES	11
1.1. Formalisme des intégrales de chemins.	11
1.2. Méthode des perturbations variationnelles.	19
2. THEORIE DES PERTURBATIONS VARIATIONNELLES POUR MATRICES DENSITES	34
2.1. Caractéristiques générales	34
2.2. Matrices densités pour l'oscillateur harmonique	38
2.3. Théorie VPT pour matrices densités.	39
2.4. Formule maculée pour matrices densités.	41
2.5. Formule maculée au premier ordre.	44
2.6. Formule maculée à des dimensions supérieures à un.	49
3. APPLICATION DE LA THEORIE VPT AUX POTENTIELS NON POLYNOMIAUX	52
3.1. Introduction	52
3.2. Application et résultats	53
CONCLUSION	72
REFERENCES	74

LISTES DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX

Figure	1.1	Discrétisation d'une trajectoire entre l'état initial et l'état final	13
Figure	1.2	Trajectoires possibles entre les états initial et final	14
Figure	1.3	Rotation de Wick	19
Figure	1.4	Illustration de la convexité de la fonction exponentielle	24
Figure	2.1	Dépendance des fonctions $C_{\beta}^{(n)}$ de la température	46
Tableau	3.1	Energie fondamentale du potentiel $V^{\pm}(x)$	58
Tableau	3.2.1	Energie fondamentale du potentiel $V^{\pm}(x,y)$, $a_{xx} = a_{yy} = a_{xy} = 0$	63
Tableau	3.2.2	Energie fondamentale du potentiel $V^{\pm}(x,y)$, $a_{xx} = a_{yy} = a_{xy} = 1$	63
Tableau	3.2.3	Energie fondamentale du potentiel $V^{\pm}(x,y)$, $a_{xx} = a_{yy} = 1, a_{xy} = 0.5$	64
Tableau	3.2.4	Energie fondamentale du potentiel $V^{\pm}(x,y)$, $a_{xx} = a_{yy} = 0, a_{xy} = 0.25$	64
Tableau	3.3.1	Energie fondamentale du potentiel $V^{\pm}(x,y,z)$, $a_{xx} = a_{yy} = a_{zz} = a_{xy} = a_{xz} = a_{yz} = 0$	69
Tableau	3.3.2	Energie fondamentale du potentiel $V^{\pm}(x,y,z)$, $a_{xx} = a_{yy} = a_{zz} = a_{xy} = a_{xz} = a_{yz} = 1$	70
Tableau	3.3.3	Energie fondamentale du potentiel $V^{\pm}(x,y,z)$, $a_{xx} = a_{yy} = a_{zz} = 1, a_{xy} = a_{xz} = a_{yz} = 0.5$	70
Tableau	3.3.4	Energie fondamentale du potentiel $V^{\pm}(x,y,z)$, $a_{xx} = a_{yy} = a_{zz} = 0, a_{xy} = a_{xz} = a_{yz} = 0.25$	71

INTRODUCTION

La physique théorique est définie comme un ensemble de formalismes mathématiques permettant une modélisation des problèmes physiques réels. C'est ainsi que d'une manière générale, nous définissons deux types de formalismes de la mécanique quantique ; le formalisme standard (ou canonique) basé sur la quantification canonique des observables physiques en association avec l'algèbre des opérateurs, et le formalisme des intégrales de chemins de Feynman.

C'est donc à Richard Feynman, que revient le mérite d'introduire la quantification par les intégrales de chemins [1]. Ce fut la concrétisation d'un rêve récurrent d'une électrodynamique classique formulée sans le champ électromagnétique et qui – ainsi débarrassée de l'infinité de degrés de liberté associés à celui-ci – devrait être exempte des infinis (l'énergie propre d'une charge ponctuelle par exemple) qui l'affectent habituellement. Cette idée, suscitait l'espoir qu'elle puisse permettre de résoudre les difficultés analogues dans l'électrodynamique quantique proposée par Paul Dirac [2]. La première partie de ce programme est achevée par Wheeler et Feynman à l'automne de 1940, sous le nom de théorie interactive du rayonnement (le champ électromagnétique est remplacée par l'interaction entre les charges). Dans cette description, les charges interviennent à des instants différents, ce qui interdit toute formulation hamiltonienne et conduit Feynman à une formulation variationnelle de la théorie au moyen d'un principe d'action stationnaire. La conversion à une théorie quantique – qui s'avère beaucoup plus difficile que prévu – doit alors être possible grâce à une ancienne idée de Dirac permettant de construire un modèle quantique d'un système à partir du lagrangien du système classique analogue.

La thèse de doctorat de Feynman, soutenue en mai 1942 [3], est consacrée au principe de moindre action en mécanique quantique pour des systèmes non relativistes. Dans celle-ci, Feynman montre que les amplitudes de transition calculées au moyen d'intégrales de chemins permettent une formulation plus efficace que la notion de fonction d'onde lorsqu'on traite un système à plusieurs particules en interactions mutuelles. Dès cette époque, il réalise que les solutions des problèmes de physique statistique peuvent aussi s'exprimer en termes d'intégrales de chemins. L'abandon de la fonction d'onde le conduit,

par ailleurs, à une interrogation plus fondamentale sur la signification des opérations de mesure en théorie quantique. Enfin, sa conception de la théorie physique se dégage: *une théorie est l'énoncé complet et précis d'un algorithme de calcul*. Les intégrales de chemins représentent, à cet égard, un moyen particulièrement efficace, autant pour les calculs de mécanique quantique et de physique statistique que pour l'interprétation même de la théorie quantique. A partir de 1945, Feynman se consacre à des questions soulevées à la suite de sa thèse, sur la thermodynamique des systèmes en interaction électromagnétique et sur la description d'une particule de spin 1/2 relativiste (particule de Dirac), au moyen d'intégrales de chemins. Tout ceci est couronné en 1948 [1] par la fameuse publication dans laquelle Feynman finalisa le formalisme des intégrales de chemins. Ce dernier est basé sur le postulat suivant : L'évolution de la fonction d'onde entre deux points de l'espace-temps (q,t) et (q',t') est définie en calculant une entité nommée "Propagateur" (ou " Kernel ") à partir de la fonction de phase de $\exp[iS/\hbar]$, où : $S = \int L(q, \dot{q}, t) dt$ est l'action classique, $L(q, \dot{q}, t)$ le Lagrangien et \hbar la constante de Planck. L'hypothèse centrale de ce nouveau formalisme fut donc l'introduction de la notion de "Propagateur", celui-ci contiendrait toutes les informations dynamiques concernant le système quantique considéré. L'idée d'un noyau calculé à partir de l'action classique fut déjà proposée par Dirac en 1933 [2], mais au moment où ce dernier préconise de ne considérer que le chemin dit classique (vérifiant le principe de moindre action), Feynman reconsidéra ceci en postulant que tous les chemins possibles, entre les deux points (q,t) et (q',t') , contribuent à l'action donc au propagateur. Cette nouvelle approche de la quantification a eu plus tard un énorme impact en promouvant notre compréhension des interactions fondamentales qui régissent la dynamique des constituants de la matière. Il s'agit d'une méthode basée sur un puissant concept qui relie directement la mécanique quantique à la mécanique classique. Ce principe représenterait, dans un sens, un point de départ didactique approprié pour la discussion de la physique quantique car il permet de contourner la complexité mathématique qui caractérise l'approche canonique [4-7] basée sur l'équation de Schrödinger. Un exemple où ceci devient particulièrement évident est la quantification de l'atome d'hydrogène par les intégrales de chemin.

D'autre part il se trouve que dans la majorité des cas, l'information concernant un système physique ne peut être obtenue que par des méthodes d'approximation. Ceci est dû au fait que les équations décrivant les phénomènes physiques ne peuvent être résolues analytiquement que pour une minorité de problèmes. C'est ainsi que différentes techniques

d'approximation ont été développées pour traiter ce type de situations. Ces méthodes peuvent être classées en deux catégories : les méthodes numériques et les méthodes analytiques. Les méthodes numériques ont prouvé qu'elles sont de puissants et fructueux outils pouvant décrire les scénarios physiques les plus compliqués, à un tel point que la « computational physics » est devenue une branche de la physique totalement indépendante [8]. Cependant les méthodes analytiques, non moins puissantes que les précédentes, offrent en plus l'avantage d'être basées sur des principes physiques.

Dans le cadre de la théorie des intégrales de chemins, et bien que la quantification par ce formalisme se soit révélée être d'une grande efficacité [12-15], le calcul analytique exact du propagateur n'est possible que pour des systèmes dont l'action, exprimée en variables canoniques, est quadratique [16,17]. C'est ainsi que les propagateurs de la particule libre et de l'oscillateur harmonique sont facilement déterminés par un calcul exact. Pour des potentiels plus compliqués, mais qui peuvent être ramenés à des formes du type oscillateur harmonique, par une reparamétrisation des variables spatio-temporelles [19], le calcul exact est toujours possible. Le reste des cas, nécessite le recours à des techniques d'approximation. Dans la catégorie des méthodes analytiques, Feynman et Kleinert proposèrent dès 1986 [20-25] la méthode variationnelle, celle-ci a fait plus tard l'objet de maintes améliorations [26-33] et applications [34-40], pour aboutir en 1999 à la théorie des perturbations variationnelles pour matrices densités (théorie VPT) de Bachmann et Kleinert [29,30].

Dans ce mémoire on se propose d'utiliser la théorie des perturbations variationnelles pour matrices densités pour la détermination de l'énergie de l'état fondamental d'une classe de potentiels rationnels ou oscillateurs non polynomiaux [45,56].

Dans le chapitre 1, nous donnons un aperçu du formalisme des intégrales de chemins, en définissant le propagateur et en montrant son rôle en mécanique quantique. On fera ensuite la jonction avec la physique statistique via l'introduction du temps imaginaire. L'approche variationnelle de Feynman-Kleinert est présentée d'une manière plus détaillée. A la fin du chapitre nous introduisons la théorie des perturbations variationnelles comme conséquence de l'apport des corrections systématiques à l'approche variationnelle.

Dans le chapitre 2 nous développons la théorie des perturbations variationnelles pour matrices densité.

Le chapitre 3 : décrit de l'application de la théorie des perturbations variationnelles pour matrices densité pour la détermination de l'énergie de l'état fondamental de classes de potentiels rationnels. Les résultats obtenus [57,58] seront comparés à ceux donnés par la littérature [55,56] dans les cas unidimensionnels et bidimensionnels. Une généralisation sera faite pour le cas tridimensionnel.

La dernière partie de ce travail sera consacrée à la conclusion et à la présentation des perspectives qui en découlent.

CHAPITRE 1

FORMALISME DES INTEGRALES DE CHEMINS ET THEORIE DES PERTURBATIONS VARIATIONNELLES

1.1 Formalisme des intégrales de chemins

1.1.1 Introduction

Durant les années vingt, E. Schrödinger et W. Heisenberg, ont développé d'une manière plus ou moins simultanée la formulation standard ou canonique de la mécanique quantique [4-7]. La principale caractéristique de cette formulation est qu'elle est basée sur une conception différentielle des équations dynamiques de base de la théorie quantique ; ceci est dû à l'origine Hamiltonienne de ce formalisme.

En 1933, Paul A. M. Dirac a émis l'hypothèse suivante [2]: l'Action classique S (définie par : $S = \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}, t) dt$, L étant le lagrangien du système donné par $L(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x, t)$) qui joue un rôle crucial en mécanique classique, peut être utilisée en mécanique quantique, pour reformuler cette dernière dans un cadre Lagrangien. Il faudra cependant attendre jusqu'à 1948 [1] pour voir R. P. Feynman développer l'idée de Dirac et en tirer une troisième formulation de la mécanique quantique : celle des intégrales de chemins.

1.1.2 Le Propagateur

Considérons l'équation de Schrödinger à une dimension pour une particule soumise à un potentiel externe $V(x)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x)\Psi(x, t) = \hat{H}_x \Psi, \quad (1.1)$$

notons qu'il s'agit d'une équation aux dérivées partielles, du premier ordre en t et second ordre en x , dont la solution est déterminée si la fonction d'onde est connue à l'origine, disant à t' [4,7]. En outre, cette solution dépend linéairement de la fonction d'onde à l'origine, ce qu'on peut exprimer sous forme intégrale par :

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, t; x', t') \Psi(x', t') dx', \quad (1.2)$$

$K(x, t; x', t')$ est nommé propagateur (noyau) [1,4,12,13], il indique comment la fonction d'onde ‘ ‘ se propage’ ’ dans le temps comme le montre l'équation intégrale (1.2). Ce propagateur satisfait d'autre part à l'équation

$$\left(\hat{H}_x - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) K(x, t; x', t') = -i\hbar \delta(x - x') \delta(t - t'), \quad (1.3)$$

il est ainsi lui même solution de l'équation de Schrödinger .

Si l'Hamiltonien est dépendant du temps, le propagateur peut aussi s'exprimer en termes d'énergies et de fonctions propres de la manière suivante :

$$K(x, t; x', t') = \sum_n \exp[-iE_n(t - t')] \Psi_n^*(x) \Psi_n(x'). \quad (1.4)$$

Ainsi, le propagateur est un outil contenant toutes les informations dynamiques concernant le système quantique considéré.

1.1.3 Méthode des intégrales de chemins de Feynman

Considérons l'hamiltonien d'une particule de masse m se déplaçant dans un potentiel $V(q)$ indépendant du temps :

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q), \quad (1.5)$$

Les fonctions d'onde du système considéré, aux points : initial (q, t) et final (q', t') , sont respectivement données par : $\psi(q, t) \equiv \langle q, t | a \rangle$ et $\psi(q', t') \equiv \langle q', t' | a \rangle$,

où $|a\rangle$ est un état quantique normalisé à l'unité, c'est-à-dire :

$$\langle a' | a \rangle = \delta(a' - a) \quad , \quad \int da |a\rangle \langle a| = 1. \quad (1.6)$$

Dans le formalisme canonique, on exprime l'évolution du système considéré, de l'état initial à l'état final, à l'aide de l' « opérateur d'évolution temporelle » donné par :

$$U(t) = \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right), \quad (1.7)$$

dont les éléments de matrice dans l'espace des configurations sont donnés par :

$$U(q', t'; q, t) = \langle q' | \exp\left(\frac{-iH(t' - t)}{\hbar}\right) | q \rangle. \quad (1.8)$$

C'est cet élément de matrice $U(q', t'; q, t)$ exprimant l'amplitude de probabilité pour que la particule aille du point (q, t) au point (q', t') , qu'on nomme *propagateur* et qu'on note $K(q', t'; q, t)$.

$$K(q', t'; q, t) = \langle q' | \exp\left(\frac{-iH(t' - t)}{\hbar}\right) | q \rangle. \quad (1.9)$$

1.1.3.1 Postulat de Feynman

Décomposons l'intervalle de temps $T = t' - t$ en N intervalles ε infinitésimaux tels que $\varepsilon = t_{i+1} - t_i = \frac{T}{N}$ (Figure 1.1), ce qui permet de réécrire l'expression (1.9) sous la forme :

$$K(q', t'; q, t) = \langle q' | e^{-\frac{iHT}{\hbar}} | q \rangle = \langle q' | e^{-\frac{iH}{\hbar} \sum_{i=1}^N \varepsilon} | q \rangle = \langle q' | e^{-\frac{iH\varepsilon}{\hbar}} e^{-\frac{iH\varepsilon}{\hbar}} \dots e^{-\frac{iH\varepsilon}{\hbar}} | q \rangle. \quad (1.10)$$

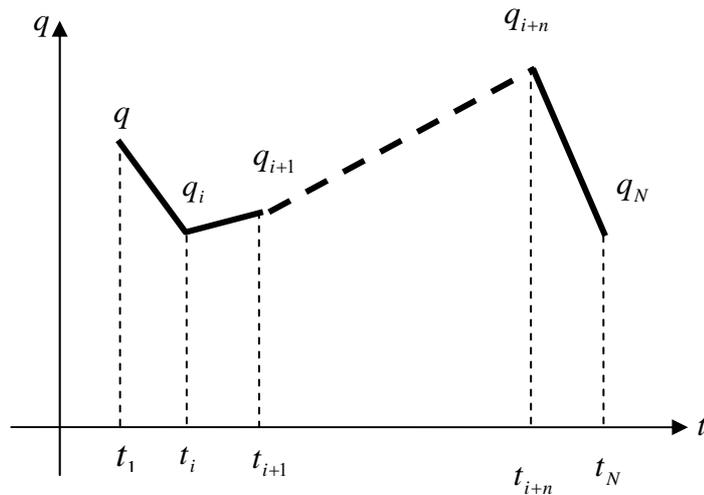


Figure 1.1 : Discretisation d'une trajectoire entre l'état initial (q, t) et l'état final (q', t') .

En insérant la relation de fermeture (1.6) écrite dans l'espace des configurations, pour chaque intervalle ε , l'expression (1.10) devient :

$$K(q', t'; q, t) = \langle q' | e^{-\frac{iH\varepsilon}{\hbar}} \int dq_{N-1} |q_{N-1}\rangle \langle q_{N-1} | e^{-\frac{iH\varepsilon}{\hbar}} \int dq_{N-2} |q_{N-2}\rangle \langle q_{N-2} | \dots \int dq_2 |q_2\rangle \langle q_2 | \times$$

$$\begin{aligned}
& e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} \int dq_1 |q_1\rangle \langle q_1| e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} |q\rangle \\
&= \int dq_1 dq_2 \dots dq_{N-1} \langle q' | e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} |q_{N-1}\rangle \dots \langle q_2 | e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} |q_1\rangle \langle q_1 | e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} |q\rangle \\
&= \int dq_1 dq_2 \dots dq_{N-1} K_{q_N, q_{N-1}} K_{q_{N-1}, q_{N-2}} \dots K_{q_2, q_1} K_{q_1, q_0}, \tag{1.11}
\end{aligned}$$

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

En insérant la relation de fermeture N fois et en faisant tendre N vers l'infini, on couvre toutes les trajectoires possibles entre l'état initial et l'état final (Figure 1.2) :

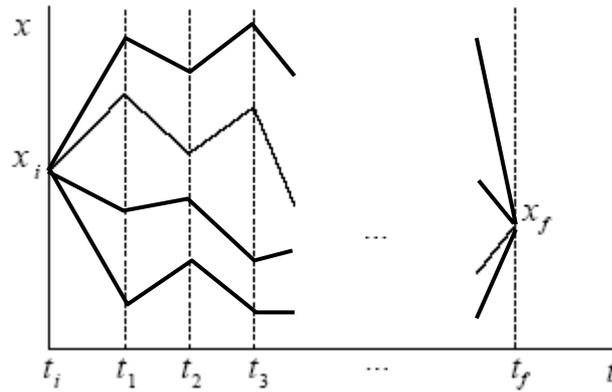


Figure 1.2 : Trajectoires possibles entre l'état initial (q_i, t_i) et l'état final (q_f, t_f) .

L'écriture condensée de l'expression (1.10) donne :

$$K(q', t'; q, t) = \sum_{\substack{\text{tous les chemins} \\ \text{allant de } q \text{ à } q'}} K_{\text{chemin}}, \tag{1.12}$$

on a donc :

$$\sum_{\substack{\text{tous les chemins} \\ \text{allant de } q \text{ à } q'}} \equiv \int dq_1 dq_2 \dots dq_{N-1}. \tag{1.13}$$

et :

$$K_{\text{chemin}} = K_{q_N, q_{N-1}} K_{q_{N-1}, q_{N-2}} \dots K_{q_2, q_1} K_{q_1, q_0}. \tag{1.14}$$

Calculons le propagateur K_{q_{i+1}, q_i} sur un intervalle de temps infinitésimal : $\varepsilon = t_{i+1} - t_i$ (les calculs sont faits au premier ordre par rapport à ε) :

$$K_{q_{i+1}, q_i} \equiv \langle q_{i+1} | e^{-\frac{iH \varepsilon}{\hbar}} | q_i \rangle \approx \langle q_{i+1} | q_i \rangle - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \langle q_{i+1} | H | q_i \rangle + o(\varepsilon^2). \tag{1.15}$$

Le premier terme du membre droit de (1.15) représente la fonction delta de Dirac :

$$\langle q_{i+1} | q_i \rangle = \delta(q_{i+1} - q_i) = \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{ip_i}{\hbar}(q_{i+1} - q_i)\right), \quad (1.16)$$

Insérons la relation de fermeture (dans l'espace des phases) dans le deuxième terme du membre droit de (1.15), nous obtenons :

$$\begin{aligned} -i\varepsilon \langle q_{i+1} | \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}) \right) \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} |p_i\rangle \langle p_i| q_i \rangle &= -i\varepsilon \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \left(\frac{p_i^2}{2m} + V(q_{i+1}) \right) \langle q_{i+1} | p_i \rangle \langle p_i | q_i \rangle \\ &= -i\varepsilon \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \left(\frac{p_i^2}{2m} + V(q_{i+1}) \right) \exp\left(\frac{ip_i}{\hbar}(q_{i+1} - q_i)\right). \end{aligned} \quad (1.17)$$

En introduisant la variable $\tilde{q}_i = \frac{1}{2}(q_{i+1} + q_i)$ dans la représentation du point milieu [13,14]

et en combinant les expressions (1.15) et (1.17), nous obtenons :

$$\begin{aligned} K_{q_{i+1}, q_i} &= \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} e^{\frac{ip_i}{\hbar}(q_{i+1}-q_i)} \left[1 - i\varepsilon \left(\frac{p_i^2}{2m} + V(\tilde{q}_{i+1}) \right) + o(\varepsilon^2) \right] \\ &= \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} e^{\frac{ip_i}{\hbar}(q_{i+1}-q_i)} \exp\left[-\frac{i\varepsilon H(p_i, \tilde{q}_i)}{\hbar} \right]. \end{aligned} \quad (1.18)$$

L'expression (1.14) devient ainsi :

$$K_{che\ min} = \int \prod_{i=0}^{N-1} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} (p_i \dot{q}_i - H(p_i, \tilde{q}_i)) \right]. \quad (1.19)$$

On déduit alors le propagateur écrit dans l'espace des phases :

$$\begin{aligned} K &= \int dq_1 dq_2 \dots dq_{N-1} K_{che\ min} \\ &= \int \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \int \prod_{i=0}^{N-1} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} (p_i \dot{q}_i - H(p_i, \tilde{q}_i)) \right]. \end{aligned} \quad (1.20)$$

L'introduction du terme énergie cinétique $\frac{p_i^2}{2m}$ et du terme énergie potentielle $V(\tilde{q}_i)$ de

l'hamiltonien, ainsi que l'intégration par rapport à dp_i donne l'expression du propagateur :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \exp\left[i\varepsilon \left(p_i \dot{q}_i - \frac{p_i^2}{2m} \right) \right] = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}} e^{\frac{im\delta}{2\hbar} \dot{q}_i^2}, \quad (1.21)$$

et le terme restant correspond au lagrangien classique discrétisé.

Le passage au cas continu impose le remplacement de la somme discrète par une intégrale par rapport au temps t , ce qui donne :

$$\begin{aligned}
K &= \int \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \exp \left[-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} V(\tilde{q}_i) \right] \prod_{i=0}^{N-1} \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}} e^{\frac{im\varepsilon}{2\hbar} \dot{q}_i^2} \right) \\
&= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon} \right)^{N/2} \int \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \exp \left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{m\dot{q}_i^2}{2} - V(\tilde{q}_i) \right) \right]. \tag{1.22}
\end{aligned}$$

Soit l'élément différentiel formel suivant :

$$Dq = \prod_{i=0}^N \frac{dq_i}{A_i}, \tag{1.23}$$

où A_i est un coefficient à déterminer.

Ecrivons alors le propagateur sous la forme :

$$K(q', t'; q, t) = \int_{(q,t)}^{(q',t')} Dq(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int dt L(q, \dot{q}) \right\} = \int_{(q,t)}^{(q',t')} Dq(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[q(t)] \right\}. \tag{1.24}$$

On constate que toutes les trajectoires allant de (q, t) à (q', t') contribuent au propagateur $K(q', t'; q, t)$ avec un poids égal à l'exponentielle complexe de son action. Le postulat de Feynman consiste à :

- introduire dans l'intégrale du propagateur le lagrangien classique,
- identifier le coefficient A_i au propagateur d'une particule libre.

Pour terminer on remarque que, dans la base des fonctions propres de l'Hamiltonien, le propagateur prend la forme :

$$\begin{aligned}
K(q', t'; q, t) &= \langle q' | e^{-\frac{iH(t'-t)}{\hbar}} | q \rangle = \sum_n \langle q' | e^{-\frac{iH(t'-t)}{\hbar}} | n \rangle \langle n | q \rangle \\
&= \sum_n \psi_n(q') \psi_n^*(q) e^{-\frac{iE_n(t'-t)}{\hbar}}. \tag{1.25}
\end{aligned}$$

ce qui permet de déterminer les niveaux d'énergies E_n et les fonctions propres $\psi_n(q)$ de l'hamiltonien en connaissant le propagateur.

1.1.3.2 Equivalence du formalisme de Feynman avec la formulation de Schrödinger

On peut montrer qu'il y a équivalence entre le formalisme des intégrales de chemins et la mécanique ondulatoire [5,12-14], ceci permet de lier le propagateur à l'équation de Schrödinger.

Supposons que la fonction d'onde à (q, t) est connue, alors à l'instant $t + \varepsilon$ on a :

$$\psi(q', t + \varepsilon) = \int dq K(q', t + \varepsilon; q, t) \psi(q, t), \tag{1.26}$$

on pose : $\chi = |q' - q|$,

le lagrangien est donc donné par :

$$L = \frac{m}{2} \left(\frac{\chi}{\varepsilon} \right)^2 - V \left(\frac{q + q'}{2}, t \right), \quad (1.27)$$

l'action classique sur le chemin est approximée par :

$$S = \frac{m}{2} \frac{\chi^2}{\varepsilon} - V \left(\frac{q + q'}{2}, t \right) \varepsilon, \quad (1.28)$$

ce qui conduit à la fonction d'onde :

$$\psi(q', t + \varepsilon) = C(\varepsilon) \int d\chi e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \chi^2} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V \right] \psi(q' - \chi, t). \quad (1.29)$$

Le développement en série de la fonction $\psi(q', t + \varepsilon)$ et l'exponentielle du potentiel au premier ordre en ε suivi de $\psi(q' - \chi, t)$ au deuxième ordre, donne :

$$\psi(q', t) + \varepsilon \frac{\partial \psi(q', t)}{\partial q'} = C(\varepsilon) \int_{-\infty}^{\infty} d\chi \left(1 - \frac{iV\varepsilon}{\hbar} \right) e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \chi^2} \left[\psi(q', t) + \chi \frac{\partial \psi(q', t)}{\partial q'} + \frac{\chi^2}{2} \frac{\partial^2 \psi(q', t)}{\partial q'^2} \right]. \quad (1.30)$$

Les intégrales en puissances paires de χ apportent une contribution non nulle à l'intégrale et il est clair qu'on peut identifier la constante de normalisation $C(\varepsilon)$ au propagateur de la particule libre

$$C(\varepsilon) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}}. \quad (1.31)$$

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

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q', t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(q', t)}{\partial q'^2} + V(q', t) \psi(q', t), \quad (1.32)$$

Ceci 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 (1.26).

1.1.3.3 Limite classique

Il existe une infinité de trajectoires possibles entre les points de départ (q, t) et d'arrivée (q', t') , mais les seules qui contribuent au propagateur sont celles pour lesquelles l'action est stationnaire. Ceci est du au fait que dans le cas classique $\hbar \rightarrow 0$, la fonction de phase $\frac{S}{\hbar}$ du propagateur (1.24) devient très grande et l'amplitude de probabilité oscille rapidement, éliminant les contributions de la plupart des chemins. Seules les contributions des chemins pour lesquelles l'action S ne varie pas, même quand on change de chemin, subsistent, c'est-à-dire : les chemins correspondant à l'action stationnaire [4,12,13].

1.1.4 Mécanique statistique et intégrales de chemins

Une intéressante et très utile jonction peut être établie entre le formalisme des intégrales de chemins et la mécanique statistique en considérant l'expression du propagateur d'un côté et celle de la fonction de partition de l'autre.

Nous savons qu'un système quantique statistique [9-11] en équilibre thermodynamique à la température T est décrit par l'opérateur densité :

$$\hat{\rho}(\beta) = \frac{1}{Z} \exp[-\beta \hat{H}], \quad (1.33)$$

où Z est le facteur de normalisation donné par : $Z = Tr[\exp[-\beta \hat{H}]]$ et $\beta = \frac{1}{k_B T}$,

k_B étant la constante de Boltzmann.

La fonction Z est la fonction de partition, laquelle regroupe l'essentiel des propriétés thermodynamiques du système considéré, et dans la base des $|x\rangle$ elle est donnée par

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle. \quad (1.34)$$

En considérant les équations (1.2), (1.8) et (1.9) définissant le propagateur comme élément

de matrice de l'opérateur d'évolution pris entre les états $|x', t'\rangle$ et $|x, t\rangle$, on écrit alors :

$$K(x, t; x', t') = \langle x | \exp[-i\hat{H}(t-t')/\hbar] | x' \rangle \quad (1.35)$$

avec $t > t'$ à $\hat{U}(t, t') = \exp[-i\hat{H}(t-t')/\hbar]$ définit l'opérateur d'évolution.

Le lien entre les équations (1.33) et (1.35) peut se faire en substituant [12,13] :
 $t - t'$ et $-i\hbar\beta$ (c-à-d en posant $t = -i\hbar\beta$ et $t' = 0$) ; ensuite en appliquant la rotation
 de Wick (Figure I.3) : $t = -i\tau$.

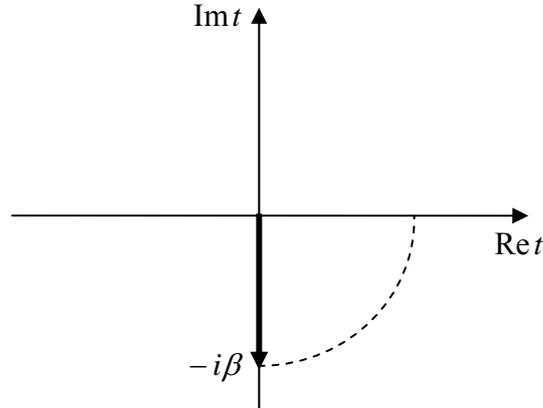


Figure 1.3 : Rotation de Wick

Ceci nous permet d'écrire :

$$\rho(x, x') = \frac{1}{Z} \langle x | \exp[-\beta \hat{H}] | x' \rangle = \frac{1}{Z} K(x', \hbar\beta; x, 0) = \int_{x(0)=x}^{x(\hbar\beta)=x'} D[x(t)] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S[x]\right]. \quad (1.36)$$

On déduit alors l'expression de la fonction de partition :

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{x'}^x D[x(t)] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S[x]\right] = \oint D[x(t)] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S[x]\right], \quad (1.37)$$

avec la formule (1.12) il suffit d'utiliser l'énergie libre d'Helmholtz F donnée par :

$$Z = \exp[-\beta F], \quad (1.38)$$

pour déduire l'énergie du système pour $T \rightarrow 0$.

1.2 La théorie des perturbations variationnelles

1.2.1 Introduction

Bien que la quantification par le formalisme des intégrales de chemin se soit révélée être d'une grande efficacité, son application par un calcul analytique exact du propagateur n'est pas toujours faisable, et ceci malgré les différentes améliorations apportées dans ce sens : l'introduction du paramètre temps [19] et la reparamétrisation du chemin. Il a fallu donc recourir à des techniques d'approximation. L'idée d'appliquer de tels procédés dans

le cadre du formalisme des intégrales de chemin remonte déjà aux années cinquante [18]. Il a fallu cependant attendre l'année 1986 pour voir Feynman et Kleinert mettre au point la méthode variationnelle [20] : il s'agit d'une procédure d'approximation convergente, permettant de calculer l'intégrale de chemins euclidienne à une température finie. L'hypothèse de base de cette théorie est l'approche variationnelle. L'introduction de corrections systématiques [26,27] a permis, plus tard la synthèse de la théorie des perturbations variationnelles systématiquement convergente.

1.2.2 Méthode des perturbations variationnelles : Développement [13,20,27]

Pour une particule de masse M soumise à un potentiel $V(x)$, la fonction de partition quantique, exprimée dans le cadre du formalisme des intégrales de chemin, est donnée par :

$$Z \equiv e^{-\beta F} = \int D x(\tau) \exp \left[- \int_0^{\beta \hbar} d\tau \left[\frac{\dot{x}^2(\tau)}{2} + V(x(\tau)) \right] \right]. \quad (1.39)$$

Dans l'expression (1.39), on reconnaît l'action euclidienne définie par :

$$A[x(\tau)] = \int_0^{\beta \hbar} \left[\frac{1}{2} M \dot{x}^2(\tau) + V(x(\tau)) \right] d\tau. \quad (1.40)$$

En considérant le développement en série de Fourier de la trajectoire $x(\tau)$:

$$x(\tau) = x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} \left(x_m e^{i\omega_m \tau} + c.c \right), \quad (1.41)$$

avec les notations : $x_m^{\text{Re}} = \text{Re } x_m$, $x_m^{\text{Im}} = \text{Im } x_m$, $\omega_m = \frac{2\pi m}{\beta \hbar}$ et $\beta = \frac{1}{k_B T}$;

l'expression de la fonction de partition prend la forme :

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi \hbar^2 \beta / M}} \prod_{m=1}^{\infty} \left[\int \frac{dx_m^{\text{Re}} dx_m^{\text{Im}}}{\pi / \beta M \omega_m^2} \right] \exp \left[- \beta M \sum_{m=1}^{\infty} \omega_m^2 |x_m|^2 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} V(x(\tau)) d\tau \right]. \quad (1.42)$$

Effectuer les intégrations sur les composantes réelles et imaginaires de x_m (pour $m \neq 0$), nous mène à une intégrale simple par rapport à x_0 de la forme :

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi \hbar^2 \beta / M}} \exp \left[- \beta V^{\text{eff},cl}(x_0) \right], \quad (1.43)$$

où on a introduit un nouveau potentiel noté : $V^{\text{eff},cl}(x_0)$ appelé : potentiel effectif classique du système. Il tient compte des effets de toutes les fluctuations quantiques.

Quant à la variable d'intégration x_0 : elle coïncide avec la position moyenne du chemin fluctuant, dans l'intervalle de temps $\left[0, \beta = \frac{1}{k_B T}\right]$, elle est donc définie par :

$$x_0 \equiv \bar{x} = \frac{1}{\beta \hbar} \int_0^{\beta \hbar} d\tau x(\tau). \quad (1.44)$$

Le potentiel effectif classique, introduit plus haut, est défini par son intégrale de chemin de la manière suivante :

$$\exp\left[-\frac{1}{k_b T} V^{eff,cl}(x_0)\right] \equiv \int Dx(\tau) \tilde{\delta}(\bar{x} - x_0) e^{-A/\hbar}, \quad (1.45)$$

avec : $\tilde{\delta}(\bar{x} - x_0) = \sqrt{2\pi \hbar \beta^2 / M} \delta(\bar{x} - x_0)$ est la fonction delta de Dirac modifiée qui permet de restreindre les trajectoires au chemin moyen x_0 .

1.2.1.2 Cas du potentiel harmonique

L'oscillateur harmonique est un cas particulier pour lequel le calcul exact du potentiel effectif classique est possible.

Dans la formule (1.42), le facteur de Boltzmann prend, pour un potentiel harmonique, la forme :

$$\exp\left[-\beta M \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \omega^2) |x_m|^2\right] e^{-\frac{\beta}{2} M \omega^2 x_0^2}. \quad (1.46)$$

L'intégration, pour le calcul de Z , sur x_m^{Re} et x_m^{Im} donne le résultat :

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi \hbar^2 \beta / M}} \prod_{m=1}^{\infty} \left(\frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \omega^2}\right) e^{-\frac{\beta M \omega^2 x_0^2}{2}}. \quad (1.47)$$

Le calcul de $\prod_{m=1}^{\infty} \left(\frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \omega^2}\right)$ donne [43] :

$$\prod_{m=1}^{\infty} \left(\frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \omega^2}\right) = \frac{\hbar \beta \omega / 2k}{\sinh\left[\frac{\hbar \beta \omega}{2}\right]}. \quad (1.48)$$

on définit alors la fonction de partition locale par :

$$Z_{\omega}^{x_0} = \frac{\hbar\beta\omega/2}{\sinh\left[\hbar\beta\omega/2\right]} e^{-\frac{\beta}{2}\omega^2 x_0^2}, \quad (1.49)$$

ce qui permet de réécrire l'expression de Z :

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} Z_{\omega}^{x_0}. \quad (1.50)$$

Le potentiel effectif classique correspondant prend la forme, en posant $\beta = \frac{1}{k_B T}$:

$$\begin{aligned} V_{\omega}^{eff,cl}(x_0) &= \frac{1}{\beta} \ln \frac{\sinh[\beta\hbar\omega/2]}{\beta\hbar\omega/2} + V(x_0) \\ &= -\frac{1}{\beta} \ln(\beta\hbar\omega) + \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{\beta} \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega}) + V(x_0) \end{aligned} \quad (1.51)$$

La fonction de partition complète et exacte, incluant tous les effets quantiques, est obtenue à partir de l'intégrale (1.40) :

$$Z_{\omega} = \frac{1}{2 \sinh[\beta\hbar\omega/2]}. \quad (1.52)$$

Des résultats obtenus pour le potentiel harmonique, et en considérant le cas des basses températures, on peut faire deux remarques importantes :

1. Le potentiel effectif classique de l'oscillateur harmonique tend aux basses températures vers la somme du potentiel classique évalué à la position moyenne x_0 et d'une constante $\frac{\hbar\omega}{2}$ dépendant de la température et qui n'est autre que l'énergie du niveau fondamental de l'oscillateur harmonique. Ce qu'on peut illustrer mathématiquement par :

$$V^{eff,cl}(x_0) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \frac{\hbar\omega}{2} + V(x_0). \quad (1.53)$$

2. Alors que la fonction de partition complète exacte est réduite à la limite des basses températures au facteur de Boltzmann dont l'exposant est le rapport entre l'énergie thermique donnée par $k_B T$ et l'énergie du niveau fondamental de l'oscillateur harmonique donnée par : $\hbar\omega/2$; ce qui s'exprime mathématiquement par :

$$Z \longrightarrow \beta\hbar\omega e^{-\beta\hbar\omega/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} e^{-\beta M \omega^2 x_0^2/2} \equiv e^{-\beta\hbar\omega/2}. \quad (1.54)$$

1.2.2.2 Fonction de partition d'essai de Feynman-Kleinert

Le calcul exact du potentiel effectif classique $V^{eff,cl}(x_0)$ est pratiquement impossible pour la plupart des problèmes physiques. Cependant, il n'est pas difficile de trouver une approximation simple et assez bonne du potentiel $V^{eff,cl}(x_0)$. Cette approximation, est obtenue en comparant l'intégrale de chemins en question avec l'intégrale de chemins d'essai bien définie. L'intégrale de chemin d'essai consiste en une superposition d'intégrales de chemins de l'oscillateur harmonique local centré autour d'une position moyenne x_0 arbitraire, où chaque oscillateur a sa propre fréquence d'essai $\Omega^2(x_0)$. Les coefficients de la superposition ainsi que les fréquences sont choisies de telle sorte que le potentiel effectif classique du système d'essai coïncide avec la borne supérieure optimale du potentiel effectif classique exact.

L'action d'essai locale pour un oscillateur harmonique centré en un point x_0 est donnée par :

$$A_{\Omega}^{x_0} \equiv \int_0^{\beta \hbar} d\tau M \left[\frac{\dot{x}^2}{2} + \Omega^2(x_0) \frac{(x - x_0)^2}{2} \right], \quad (1.55)$$

où $\Omega(x_0)$ est une fréquence d'essai locale indéterminée. La fonction de partition d'essai locale correspondante est :

$$\begin{aligned} Z_{\Omega}^{x_0} &= \int Dx(\tau) \tilde{\delta}(\bar{x} - x_0) e^{-A_{\Omega}^{x_0}/\hbar} \\ &= \prod_{m=1}^{\infty} \left[\int \frac{dx_m^{Re} dx_m^{Im}}{\pi / \beta M \omega_m^2} \right] \exp \left[-\beta M \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)) |x_m|^2 \right]. \end{aligned} \quad (1.56)$$

L'expression (1.56) est évaluée de la même manière que (1.47), cela donne :

$$Z_{\Omega}^{x_0} = \frac{\beta \hbar \Omega(x_0)/2}{\sinh(\beta \hbar \Omega(x_0)/2)}. \quad (1.57)$$

Le potentiel effectif classique de l'oscillateur harmonique est par conséquent égal à l'énergie libre locale :

$$V_{\Omega}^{eff,cl}(x_0) \equiv F_{\Omega}^{x_0} = -\frac{1}{\beta} \log Z_{\Omega}^{x_0} = \frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{\sinh(\beta \hbar \Omega(x_0)/2)}{\beta \hbar \Omega(x_0)/2} \right]. \quad (1.58)$$

Sachant que la valeur moyenne locale d'une fonction arbitraire $F[x(\tau)]$ à l'intérieur de l'intégrale de chemins harmonique (1.56) est définie par :

$$\langle F[x(\tau)] \rangle_{\Omega}^{x_0} \equiv [Z_{\Omega}^{x_0}]^{-1} \int Dx(\tau) \tilde{\delta}(\bar{x} - x_0) F[x(\tau)] e^{-A_{\Omega}^{x_0}/\hbar}. \quad (1.59)$$

La formule (1.59) permet d'exprimer le potentiel effectif classique par :

$$\begin{aligned} \exp[-\beta V^{eff,cl}(x_0)] &\equiv Z^{x_0} = \int Dx(\tau) \tilde{\delta}(\bar{x} - x_0) e^{-A_{\Omega}^{x_0}/\hbar} \\ &= \int Dx(\tau) \tilde{\delta}(\bar{x} - x_0) \exp[-A_{\Omega}^{x_0}/\hbar] \exp[-(A/\hbar - A_{\Omega}^{x_0}/\hbar)] \\ &= [Z_{\Omega}^{x_0}]^{-1} \langle \exp[-(A/\hbar - A_{\Omega}^{x_0}/\hbar)] \rangle_{\Omega}^{x_0}. \end{aligned} \quad (1.60)$$

L'utilisation de l'inégalité de Jensen-Peierls permet une majoration des valeurs moyennes de (1.60), ce qui donne :

$$\langle \exp[-(A/\hbar - A_{\Omega}^{x_0}/\hbar)] \rangle_{\Omega}^{x_0} \geq \exp[-(A/\hbar - A_{\Omega}^{x_0}/\hbar)]_{\Omega}^{x_0}, \quad (1.61)$$

L'inégalité de Jensen-Peierls est une conséquence de la convexité de la fonction exponentielle. Elle impose que la valeur moyenne de la somme des deux exponentielles de deux nombres différents est toujours supérieure à l'exponentielle de la valeur moyenne arithmétique de ces deux nombres (Figure I.4) :

$$\frac{e^{-x_1} + e^{-x_2}}{2} \geq e^{-\frac{x_1+x_2}{2}}, \quad (1.62)$$

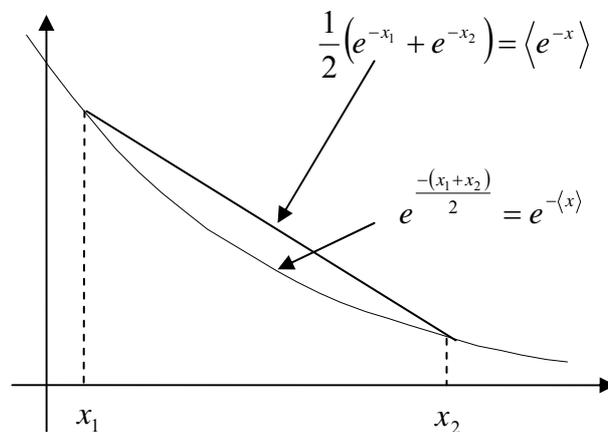


Figure 1.4 : Illustration de la convexité de la fonction exponentielle e^{-x} , imposant

$$\langle e^{-x} \rangle \geq e^{-\langle x \rangle} \text{ quel que soit } x.$$

La propriété de la convexité de la fonction exponentielle peut être généralisée au cas des fonctionnelles exponentielles. Soit $O[x]$ une fonctionnelle arbitraire dans l'espace de la trajectoire $x(\tau)$, et

$$\langle O[x] \rangle \equiv \int D\mu[x] O[x], \quad (1.63)$$

est la valeur moyenne considérée dans cet espace. La mesure d'intégration $\mu[x]$ est supposée normalisée. La formule (1.62) est ainsi généralisée à :

$$\langle e^{-o} \rangle \geq e^{-\langle o \rangle}. \quad (1.64)$$

Pour obtenir le résultat (1.64), il faut tout d'abord considérer que l'expression (1.62) reste vraie en passant des variables x_1, x_2 à des fonction arbitraires $O(x)$ ce qui donne :

$$\frac{e^{-o(x_1)} + e^{-o(x_2)}}{2} \geq e^{-\frac{o(x_1) + o(x_2)}{2}}. \quad (1.65)$$

L'inégalité (1.65) est ensuite généralisée, en utilisant une mesure d'intégration $\mu(x)$ positive et normalisée à l'unité, c'est-à-dire $\int d\mu(x) = 1$, pour écrire :

$$\int d\mu(x) e^{-o(x)} \geq e^{\int d\mu(x) o(x)}, \quad (1.66)$$

ceci implique directement :

$$\int D\mu[x] e^{-o(x)} \geq e^{\int d\mu[x] o(x)}, \quad (1.67)$$

où $\mu(x)$ est donc une mesure fonctionnelle positive arbitraire avec la normalisation $\int D\mu(x) = 1$.

Le résultat (1.61) nous permet de majorer supérieurement le potentiel effectif classique :

$$V^{eff,cl}(x_0) \leq F_{\Omega}^{x_0} + \frac{1}{\beta} \langle A/\hbar - A_{\Omega}^{x_0}/\hbar \rangle_{\Omega}^{x_0}. \quad (1.68)$$

Du moment que les énergies cinétiques des deux actions A et $A_{\Omega}^{x_0}$ sont égales, l'inégalité (1.68) est explicitée par :

$$V^{eff,cl}(x_0) \leq F_{\Omega}^{x_0} + \frac{1}{\beta \hbar} \int_0^{\hbar} d\tau \left\langle \left[V(x(\tau)) - M \frac{\Omega^2(x_0)}{2} (x(\tau) - x_0)^2 \right] \right\rangle_{\Omega}^{x_0}. \quad (1.69)$$

La valeur moyenne du membre droit de l'inégalité (1.69) se calcule facilement. Après avoir déterminé en premier la largeur locale des fluctuations $\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0}$, on introduit la décomposition en série de Fourier de la trajectoire $x(\tau)$ (1.41), on obtient ainsi :

$$\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0} = \left\langle \sum_m |x_m|^2 + \sum_{m \neq m'} x_m x_{m'}^* \exp[-i(\omega_m - \omega_{m'})\tau] \right\rangle_{\Omega}^{x_0}, \quad (1.70)$$

Utilisant la décomposition de la fonction de partition locale de (1.56), on calcule la valeur moyenne locale telle que donnée par (1.59), ce qui donne :

$$\langle \dots \rangle_{\Omega}^{x_0} = [Z_{\Omega}^{x_0}]^{-1} \prod_{m=1}^{\infty} \left[\int \frac{dx_m^{\text{Re}} dx_m^{\text{Im}}}{\pi / \beta M \omega_m^2} \right] (\dots) \exp \left[-\beta M \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)) |x_m|^2 \right]. \quad (1.71)$$

Les fonctions de corrélations des variables d'intégration Gaussienne sont données par :

$$\langle x_m x_{m'}^* \rangle_{\Omega}^{x_0} = \delta_{mm'} \frac{1}{\beta M} \frac{1}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)}. \quad (1.72)$$

La sommation dans (1.70) sur toutes les valeurs $m = m'$, donne la largeur locale des fluctuations :

$$\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0} = a^2(x_0), \quad (1.73)$$

où

$$a^2(x_0) = \frac{2}{\beta M} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)}. \quad (1.74)$$

Pour calculer la somme de (1.74) on utilise la formule (1.48), on obtient :

$$\begin{aligned} a^2(x_0) &= \frac{2}{\beta M} \frac{\partial}{\partial \Omega^2} \log \prod_{m=1}^{\infty} \frac{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)}{\omega_m^2} \\ &= \frac{1}{\beta M} \frac{1}{\Omega} \frac{\partial}{\partial \Omega} \log \frac{\sinh \left[\frac{\hbar \beta \Omega(x_0)}{2} \right]}{\hbar \beta \Omega(x_0) / 2} \\ &= \frac{1}{\beta M \Omega^2(x_0)} \left[\frac{\hbar \beta \Omega(x_0)}{2} \coth \left[\frac{\hbar \beta \Omega(x_0)}{2} \right] - 1 \right] \end{aligned} \quad (1.75)$$

Notons que le résultat (1.73) est indépendant de la variable τ , contrairement à la formule (1.70), à cause de l'invariance par translation le long de l'axe des τ .

Remarque : la différence entre la largeur locale des fluctuations $a^2(x_0)$ et la valeur moyenne $\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega(x_0)}^{x_0}$ pour l'oscillateur harmonique n'est autre que le terme omis dans la somme (1.74) et qui correspond à $\omega_0 = 0$:

$$\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega(x_0)}^{x_0} = a^2(x_0) + \frac{1}{\beta M \Omega^2(x_0)}. \quad (1.76)$$

L'existence de la propriété (1.76) est essentielle pour la qualité de l'approximation. Au moment où la largeur locale des fluctuations $a^2(x_0)$ se rétrécit à de hautes températures en $\beta \hbar^2 / 12M$, le terme $1 / \beta M \Omega^2(x_0)$ tend vers l'infini. Ainsi la largeur locale des

fluctuations mesure l'effet des fluctuations quantiques à des températures non nulles, elle évolue dans le sens inverse de celui de la température. A l'opposé, le terme correspondant à $\omega_0 = 0$ évolue dans le même sens que celui de la température : il mesure l'effet des fluctuations thermiques.

Alors, du moment que la largeur $a^2(x_0)$ est finie quelle que soit la température considérée : les effets quantiques peuvent donc être estimés avec une bonne approximation. Cette dernière est d'autant plus précise que la température augmente, donc que $a^2(x_0)$ tend vers zéro. Par contre le terme $1/\beta M \Omega^2(x_0)$ diverge aux hautes températures et rend ainsi son évaluation faisable uniquement par intégration numérique sur la variable x_0 dans l'expression de la fonction de partition classique (1.43).

Ayant déterminé $a^2(x_0)$, le calcul de la valeur moyenne $\langle V(x(\tau)) \rangle_{\Omega}^{x_0}$ est assez simple. On commence par développer $V(x(\tau))$ en série de Fourier :

$$V(x(\tau)) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp[ik x(\tau)] \tilde{V}(k). \quad (1.77)$$

L'utilisation de la formule (1.65) permet d'écrire :

$$\begin{aligned} \langle V(x(\tau)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= [Z_{\Omega}^{x_0}]^{-1} \prod_{m=1}^{\infty} \left[\int \frac{dx_m^{\text{Re}} dx_m^{\text{Im}}}{\pi/\beta M \omega_m^2} \right] \exp \left[-\beta M \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)) |x_0|^2 \right] \times \\ &\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp \left[ik \left(x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (x_m e^{i\omega_m \tau} + c.c) \right) \right] \tilde{V}(k), \end{aligned} \quad (1.78)$$

excepté la $k^{\text{ième}}$ intégration qui est facilement calculable à la fin, l'intégrale multiple de (1.78) ne diffère de l'intégrale de chemin (1.56) que par le terme $ik \left(x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (x_m e^{i\omega_m \tau} + c.c) \right)$

de l'exposant. Le calcul de cette dernière donne :

$$\exp \left[-\beta M \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)) \left\{ \left(x_m^{\text{Re}} - \frac{ik \cos \omega_m \tau}{\beta \omega_m^2 + \Omega^2(x_0)} \right)^2 + \left(x_m^{\text{Im}} - \frac{ik \sin \omega_m \tau}{\beta \omega_m^2 + \Omega^2(x_0)} \right)^2 \right\} - \frac{a^2(x_0)}{2} k^2 \right]. \quad (1.79)$$

L'intégrale gaussienne sur x_m^{Re} et x_m^{Im} , est évaluée de la même manière que l'intégrale (1.56), donnant un facteur $Z_{\Omega}^{x_0}$ qui annule le terme de normalisation de l'expression (1.78).

Le résultat final est donné par :

$$\langle V(x(\tau)) \rangle_{\Omega}^{x_0} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp \left[ikx_0 - \frac{a^2(x_0)}{2} k^2 \right] \tilde{V}(k). \quad (1.80)$$

D'une manière similaire à (1.78), le terme de droite de (1.80) est indépendant de la variable τ . En y réinsérant les coefficients de Fourier du potentiel on a :

$$\tilde{V}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) e^{-ikx}, \quad (1.81)$$

ensuite l'intégration sur la variable k donne :

$$\langle V(x(\tau)) \rangle_{\Omega}^{x_0} \equiv V_{a^2}(x_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx'_0}{\sqrt{2\pi a^2(x_0)}} \exp \left[-(x'_0 - x_0)^2 / 2a^2(x_0) \right] V(x'_0). \quad (1.82)$$

La valeur moyenne $\langle V(x(\tau)) \rangle_{\Omega}^{x_0} = V_{a^2}(x_0)$ résulte d'une intégrale de convolution [44] du potentiel original avec une distribution gaussienne de la longueur $a(x_0)$. Cette intégrale de convolution permet d'approximer le potentiel original exact par un autre potentiel qui tient compte de la statistique quantique des fluctuations. Ce potentiel d'approximation est appelé : potentiel maculé, ou bien en anglais : Smearing potential.

Signalons que la valeur moyenne $\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0}$ calculée dans (1.76) n'est qu'un cas particulier de la formule maculée générale donnée par :

$$(x(\tau) - x_0)_{a^2}^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx'}{\sqrt{2\pi a^2(x_0)}} e^{-(x' - x_0)^2 / 2a^2(x_0)} (x' - x_0)^2 \equiv a^2(x_0). \quad (1.83)$$

Tout ceci nous mène à l'approximation du potentiel effectif classique d'essai :

$$W_1(x_0) = F_{\Omega}^{x_0} + V_{a^2}(x_0) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0), \quad (1.84)$$

Lequel est tout simplement une borne supérieure du potentiel effectif classique exact, conséquemment à l'inégalité de Jensen-Peierls, ce qui s'exprime par :

$$W_1(x_0) \geq V^{eff,cl}(x_0) \quad (1.85)$$

L'apparition de cette borne supérieure optimale est une conséquence de la minimisation de $W_1(x_0)$ via la fréquence d'essai $\Omega(x_0)$.

Pour le cas du potentiel harmonique $V(x) = \omega^2 x^2 / 2$, le calcul du potentiel maculé correspondant conduit au résultat $V_{a^2}(x_0) = \frac{\omega^2 x_0^2}{2} + \frac{a^2}{2}$, et l'extrémum de $W_1(x_0)$ est : $\Omega(x_0) = \omega$. Dans ce cas $W_1(x_0)$ est borné par :

$$W_1(x_0) = F_{\omega}^{x_0} + \frac{M \omega^2 x_0^2}{2}, \quad (1.86)$$

on constate que pour l'oscillateur harmonique, $W_1(x_0)$ coïncide avec le potentiel effectif classique exact $V_{\omega}^{eff.cl}(x_0)$ calculé en (1.51).

Dans le cas où le potentiel original est donné par son développement en série entière par :

$$V(x) = \sum_{n=0}^{\infty} V_n x_n^n. \quad (1.87)$$

son développement autour d'un point x_0 prend la forme :

$$V(x) = \sum_{n=0}^{\infty} V_n \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x_0^{n-k} (x - x_0)^k. \quad (1.88)$$

Utilisant la formule d'intégration suivante :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi a^2}} \exp\left[-\frac{1}{2a^2}(x - x_0)^2\right] (x' - x_0)^k = \begin{cases} (k-1)!! a^k \\ 0 \end{cases} \text{ pour } \begin{cases} k \text{ pair} \\ k \text{ impair} \end{cases}. \quad (1.89)$$

On aboutit alors au potentiel maculé suivant :

$$V_{a^2}(x_0) = \sum_{n=0}^{\infty} V_n \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x_0^{n-k} (k-1)!! a^k(x_0). \quad (1.90)$$

1.2.2.3 La détermination de la borne supérieure optimale via $\Omega(x_0)$

La détermination de la fréquence $\Omega(x_0)$ de l'oscillateur permet de calculer la borne supérieure optimale de $W_1(x_0)$ telle que définie dans (1.85). Pour cela on dérive $W_1(x_0)$ par rapport à $\Omega^2(x_0)$, on obtient :

$$\frac{dW_1(x_0)}{d\Omega^2(x_0)} = \frac{\partial W_1(x_0)}{\partial \Omega^2(x_0)} + \left[\frac{\partial W_1(x_0)}{\partial a^2(x_0)} \right]_{\Omega(x_0)} \cdot \frac{\partial a^2(x_0)}{\partial \Omega^2(x_0)}. \quad (1.91)$$

Le premier terme de (1.91) est :

$$\frac{\partial W_1(x_0)}{\partial \Omega^2(x_0)} = \frac{M}{2} \left[\frac{1}{\beta M \Omega^2(x_0)} \left(\frac{\beta \hbar \Omega(x_0)}{2} \coth \frac{\beta \hbar \Omega(x_0)}{2} - 1 \right) - a^2(x_0) \right]. \quad (1.92)$$

Ce terme est automatiquement nul conformément à l'expression (1.75). Ce qui réduit la minimisation de $W_1(x_0)$ par rapport à $a^2(x_0)$ seulement, on écrit donc :

$$\frac{\partial W_1(x_0)}{\partial a^2(x_0)} = 0, \quad (1.93)$$

En utilisant l'expression de $W_1(x_0)$, donnée par (1.84), qui détermine la fréquence d'essai $\Omega^2(x_0)$ via la condition (1.92), on obtient :

$$\Omega^2(x_0) = \frac{2}{M} \frac{\partial V_{a^2}(x_0)}{\partial a^2(x_0)} = \frac{1}{M} \frac{\partial^2 V_{a^2}(x_0)}{\partial x_0^2}. \quad (1.94)$$

Dans l'intégrale de Fourier (1.80) pour $V_{a^2}(x_0)$: la dérivée $2 \frac{\partial}{\partial a^2} V_{a^2}$ est représentée par

un facteur $-k^2$ qui est l'équivalent de $\frac{\partial}{\partial x_0^2}$. Ceci nous mène à l'équation :

$$\Omega^2(x_0) = \frac{1}{M} \left[\frac{\partial^2 V_{a^2}(x_0)}{\partial x_0^2} \right]_{a^2=a^2(x_0)}. \quad (1.95)$$

On note que la dérivée partielle de (1.89) est effectuée pour a^2 fixée, ce dernier est pris, en fin de calcul, égal à $a^2(x_0)$.

Le potentiel $W_1(x_0)$ constitue, avec l'extremum $\Omega^2(x_0)$ associé $a^2(x_0)$ de (1.74), l'approximation variationnelle de Feynman-Kleinert du potentiel effectif classique $V^{eff,cl}(x_0)$.

Il est important de noter que : en raison de l'annulation de la dérivée partielle (1.92) on peut considérer $\Omega^2(x_0)$ et $a^2(x_0)$ comme des paramètres variationnels arbitraires dans l'expression (1.84) de $W_1(x_0)$. Ainsi la variation de $W_1(x_0)$, par rapport à ces deux paramètres variationnels, engendre simultanément la relation (1.75) ainsi que la condition de minimisation (1.94) pour $\Omega^2(x_0)$.

A partir de $W_1(x_0)$ optimisé, on déduit l'approximation de la fonction de partition et de l'énergie libre :

$$Z_1 \equiv e^{-\beta F_1} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi \hbar^2 \beta / M}} e^{-\beta W_1(x_0)} \leq Z. \quad (1.96)$$

Notons, enfin, qu'on peut facilement vérifier que la dérivée seconde de $W_1(x_0)$, par rapport à $\Omega^2(x_0)$, est positive ; cela implique que la valeur optimisée de $W_1(x_0)$, déterminée plus haut : est un minimum.

1.2.3 La précision de l'approximation

La qualité de l'approximation du potentiel effectif classique d'essai $W_1(x_0)$ est évaluée de la manière suivante : à la limite des hautes températures, et principalement en raison de la propriété (1.76), l'approximation est parfaite. Ceci entraîne la convergence de $W_1(x_0)$ vers $V(x_0)$, comme le montre la formule (1.84), de la même manière que le potentiel effectif classique exact.

Par contre, à la limite des basses températures, l'intégrale sur x_0 dans (1.96) est dominée par le minimum de $W_1(x_0)$, qui donne l'approximation F_1 de l'énergie libre. En prenant la limite $T \rightarrow 0$ dans (1.78) nous constatons que :

$$\lim_{T \rightarrow 0} W_1(x_0) = V_{a^2}(x_0) + \frac{\hbar \Omega(x_0)}{2} - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0). \quad (1.97)$$

Toujours à la limite des basses températures, l'expression (1.69) donne :

$$\lim_{T \rightarrow 0} a^2(x_0) = \frac{\hbar}{2M\Omega(x_0)}. \quad (1.98)$$

Avec les deux limites (1.97) et (1.98) on déduit :

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow 0} W_1(x_0) &= \frac{\hbar \Omega(x_0)}{4} + V_{a^2}(x_0) \\ &= \frac{1}{8} \frac{\hbar^2}{M a^2(x_0)} + V_{a^2}(x_0). \end{aligned} \quad (1.99)$$

Il est évident que le membre droit de l'expression (1.99) est identifiable à la valeur moyenne de l'opérateur hamiltonien \hat{H} donné par :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + V(x), \quad (1.100)$$

Sachant que pour un paquet d'onde Gaussien normalisé et de largeur a centré en x_0 , la fonction d'onde a pour forme :

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi a^2(x_0))^{1/4}} \exp\left[-\frac{1}{4a^2(x_0)}(x-x_0)^2\right]. \quad (1.101)$$

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

$$\langle H \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) H \psi(x) = \frac{1}{8} \frac{\hbar^2}{M a^2(x_0)} + V_{a^2}(x_0). \quad (1.102)$$

Soit E_1 le minimum de cette moyenne de l'opérateur Hamiltonien H soumis à la variation des deux paramètres x_0 et a^2 :

$$E_1 = \min_{x_0, a^2(x_0)} \langle H \rangle_\psi, \quad (1.103)$$

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

$$\lim_{T \rightarrow 0} F_1 = E_1. \quad (1.104)$$

Le potentiel effectif classique approximatif $W_1(x_0)$, obtenu avec l'approche variationnelle de Feynman-Kleinert, est plus précis que l'estimation de l'énergie de l'état fondamental par la minimisation de la valeur moyenne (1.103) de l'opérateur Hamiltonien dans un paquet d'onde Gaussien, et ceci quelles que soient la température et la valeur x_0 considérées.

Et avec un potentiel effectif classique possédant des limites, qui s'avèrent être de bonnes approximations à des hautes et basses températures, il ne serait pas étonnant que cette approximation soit acceptable pour toute température.

1.2.4 Corrections systématiques de l'approximation variationnelle de Feynman Kleinert : Introduction à la théorie des perturbations variationnelles.

Des corrections systématiques ont été apportées à l'approche variationnelle de Feynman-Kleinert [19,20], aboutissant à la théorie des perturbations variationnelles.

Pour un système quantique, le développement en série de l'action considérée sur le chemin moyen $x_0 \equiv \tilde{x}$:

$$\delta x(\tau) \equiv x(\tau) - x_0, \quad (1.105)$$

est donné par :

$$A = V(x_0) + A_\Omega^{x_0} + A_{\text{int}}^{x_0}, \quad (1.106)$$

où $A_\Omega^{x_0}$ est l'action d'essai, pour les fluctuations $\delta x(\tau)$, s'écrivant sous la forme :

$$A_\Omega^{x_0} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{M}{2} \left\{ [\delta \dot{x}(\tau)]^2 + \Omega^2(x_0) [\delta x(\tau)]^2 \right\}, \quad (1.107)$$

alors que l'action d'interaction $A_{\text{int}}^{x_0}$ est donnée par :

$$A_{\text{int}}^{x_0} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{g_2}{2!} [\delta \dot{x}(\tau)]^2 + \frac{g_3}{3!} [\delta \dot{x}(\tau)]^3 + \frac{g_4}{4!} [\delta \dot{x}(\tau)]^4 + \dots \right\}. \quad (1.108)$$

Les constantes de couplage dépendent généralement de x_0 et sont données par :

$$g_i(x_0) = V^{(i)}(x_0) - \Omega^2 \delta_{i2} \quad ; \quad V^{(i)}(x_0) \equiv \frac{d^i V(x_0)}{dx_0^i} . \quad (1.109)$$

Avec la décomposition (1.106), l'approximation (1.69), à la fonction de partition effective classique, prend la forme :

$$W_1(x_0) = V(x_0) + F_\Omega^{x_0} + \frac{1}{\hbar \beta} \langle A_{\text{int}}^{x_0} \rangle_\Omega^{x_0} . \quad (1.110)$$

Pour généraliser la formule (1.110), on remplace l'énergie libre locale $F_\Omega^{x_0}$ par $F_\Omega^{x_0} + \Delta F^{x_0}$, où ΔF^{x_0} est définie par analogie avec le développement en cumulant (chapitre 03 Réf [13]). Ce qui conduit au développement, par la technique des perturbations variationnelles, du potentiel effectif classique :

$$V^{\text{eff cl}}(x_0) = V(x_0) + F_\Omega^{x_0} + \frac{1}{\hbar \beta} \langle A_{\text{int}}^{x_0} \rangle_{\Omega, c}^{x_0} - \frac{1}{2! \hbar \beta} \langle A_{\text{int}}^{x_0 2} \rangle_{\Omega, c}^{x_0} + \frac{1}{3! \hbar \beta} \langle A_{\text{int}}^{x_0 3} \rangle_{\Omega, c}^{x_0} + \dots (1.111)$$

en terme de valeurs moyennes connectées des puissances de l'interaction :

$$\langle A_{\text{int}}^{x_0 2} \rangle_{\Omega, c}^{x_0} = \langle A_{\text{int}}^{x_0 2} \rangle_\Omega^{x_0} - \langle A_{\text{int}}^{x_0} \rangle_\Omega^{x_0 2} , \quad (1.112)$$

$$\langle A_{\text{int}}^{x_0 3} \rangle_{\Omega, c}^{x_0} = \langle A_{\text{int}}^{x_0 3} \rangle_\Omega^{x_0} - 3 \langle A_{\text{int}}^{x_0} \rangle_\Omega^{x_0} \langle A_{\text{int}}^{x_0 2} \rangle_\Omega^{x_0} + 2 \langle A_{\text{int}}^{x_0} \rangle_\Omega^{x_0 3} , \quad (1.113)$$

⋮

Par conception de la théorie, la somme infinie (1.111) est indépendante du choix de la fréquence d'essai $\Omega(x_0)$.

En arrêtant le développement (1.111) à l'ordre N, on obtient l'approximation par l'approche des perturbations variationnelles $W_N(x_0)$ du potentiel effectif classique $V^{\text{eff cl}}(x_0)$.

Du fait que la somme infinie (1.111) est indépendante de $\Omega(x_0)$, l'optimisation du potentiel effectif est obtenue pour la valeur $\Omega_N(x_0)$ minimum de $W_N(x_0)$.

La valeur $\Omega_N(x_0)$ optimale est donnée par :

$$\frac{\partial W_N(x_0)}{\partial \Omega(x_0)} = 0 . \quad (1.114)$$

Le calcul explicite des valeurs moyennes de la formule (1.111) nécessite le recours aux diagrammes de Feynman (Chapitre 3 Réf. [13]).

CHAPITRE 2

THEORIE DES PERTURBATIONS VARIATIONNELLES POUR MATRICES DENSITE

La méthode variationnelle de Feynman-Kleinert a donc fait l'objet de maintes applications et améliorations [26,40]. C'est Kleinert et al. qui, à partir des corrections systématiques de l'approche variationnelle, ont développé la théorie des perturbations variationnelles pour matrices densité [29,30].

2.1 Caractéristiques générales

La théorie des perturbations variationnelles permet d'approcher un système quantique statistique par un développement perturbatif autour d'un oscillateur harmonique avec des fréquences d'essai optimisées pour chaque ordre du développement appliqué. En considérant l'énergie, il est essentiel d'accorder une attention particulière aux fluctuations du chemin moyen : $\bar{x} = \frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} x(\tau) d\tau$; ceci est dû au fait que ces dernières peuvent être énormes aux hautes températures [30]. Le traitement d'un tel système n'est évident que par un développement perturbatif autour d'un potentiel harmonique. De cette manière les effets des fluctuations peuvent facilement être calculés à l'aide d'une simple intégration numérique. C'est pour cette raison que le développement par la méthode des perturbations variationnelles est effectué séparément pour chaque position x_0 du chemin moyen dont les extrémités x_a et x_b sont fixées, aboutissant au N^{ième} ordre à l'approximation $W_N(x_0)$ de l'énergie libre locale appelée aussi *potentiel effectif classique* $V_{eff,cl}(x_0)$. Il est clair qu'on peut obtenir la fonction de partition quantique totale Z à partir de $V_{eff,cl}(x_0)$ par une simple intégrale par rapport à la variable x_0 , exactement comme en statistique classique :

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2 \beta/M}} \exp[-\beta V^{eff,cl}(x_0)] . \quad (2.1)$$

En étendant l'analogie avec la mécanique statistique classique, on détermine l'approximation au N^{ième} ordre de la fonction de partition, après avoir calculé $W_N(x_0)$, par l'expression :

$$Z_N = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2 \beta/M}} \exp[-\beta W_N(x_0)]. \quad (2.2)$$

Signalons au passage que considérer le chemin moyen x_0 assure une convergence rapide à des hautes températures à la limite desquelles $W_N(x_0)$ tend vers le potentiel initial $V(x_0)$ et ceci quel que soit l'ordre N.

Avant de continuer avec la théorie des perturbations variationnelles pour matrices densité, il est essentiel de donner quelques caractéristiques des chemins fluctuants. On considère l'intégrale de chemins euclidiens prise sur tous les chemins périodiques $x(\tau)$, bouclés par les extrémités $x(0) = x(\hbar\beta)$, pour 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 dans ce cas est donnée par :

$$A^{\Omega, x_m}[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{1}{2} M \dot{x}^2(\tau) + \frac{1}{2} M \Omega^2 (x(\tau) - x_m)^2 \right\}, \quad (2.3)$$

la fonction de partition correspondante est :

$$Z^{\Omega, x_m} = \oint Dx \exp\{-A^{\Omega, x_m}[x]/\hbar\} = \frac{1}{2 \sinh(\hbar\beta \Omega/2)}. \quad (2.4)$$

Quant aux fonctions de corrélation d'entités locales [13,29] $O_1(x), O_2(x) \dots$ elles sont données en termes de valeurs moyennes par :

$$\langle O_1(x(\tau_1)) O_2(x(\tau_2)) \dots \rangle^{\Omega, x_m} = \frac{1}{Z^{\Omega, x_m}} \times \oint Dx O_1(x(\tau_1)) O_2(x(\tau_2)) \dots \exp\{-A^{\Omega, x_m}[x]/\hbar\}. \quad (2.5)$$

La distribution des particules évoluant dans un oscillateur harmonique est donnée par :

$$P_H(x) \equiv \langle \delta(x - x(\tau)) \rangle^{\Omega, x_m} = \left(\frac{1}{2\pi a_H^2} \right)^{1/2} \exp\left[-\frac{(x - x_m)^2}{2a_H^2} \right], \quad (2.6)$$

où a_H^2 représente la largeur de la distribution gaussienne est définie par :

$$a_H^2 = \left(\hbar/2M\Omega \right) \coth\left[\hbar\beta\Omega/2 \right], \quad (2.7)$$

notons que l'indice H dans (2.6) est pour harmonique.

A la limite des températures nulles on retrouve le carré de la fonction d'onde de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique de largeur :

$$a_{H0}^2 = \frac{\hbar}{2M\Omega}, \quad (2.8)$$

et à la limite classique $\hbar \rightarrow 0$, les équations (2.6) et (2.7) donnent la formule de distribution classique :

$$P_{Hcl}(x) = \left(\frac{1}{2\pi a_{Hcl}^2} \right)^{1/2} \exp\left[-\frac{(x-x_m)^2}{2a_{Hcl}^2} \right], \quad (2.9)$$

avec :

$$a_{Hcl}^2 = \frac{k_B T}{M\Omega^2}. \quad (2.10)$$

Les fluctuations classiques sont décrites par l'intégrale représentant la fonction de partition classique :

$$Z_{Hcl} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi \hbar^2 \beta / M k_B T}} \exp\left[-M\Omega^2 (x-x_m)^2 / 2k_B T \right], \quad (2.11)$$

telle que :

$$\exp\left[-M\Omega^2 (x-x_m)^2 / 2k_B T \right], \quad (2.12)$$

étant le facteur de Boltzmann.

Ceci nous permet de réécrire la distribution classique (2.9) en terme de valeur moyenne :

$$P_H(x) \equiv \langle \delta(x-x(\tau)) \rangle_{cl}^{\Omega, x_m} = \frac{1}{Z_{cl}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{x}}{\sqrt{2\pi \hbar^2 \beta / M k_B T}} \delta(\bar{x}-x_0) \exp\left[-M\Omega^2 (x-x_m)^2 / 2k_B T \right]. \quad (2.13)$$

Le but de la théorie des perturbations variationnelles est de supprimer la divergence de la largeur harmonique a_H^2 de la formule (2.10), à de hautes températures. Ceci en traitant séparément les fluctuations du chemin moyen \bar{x} . Cette moyenne est fixée à une certaine valeur x_0 à l'aide de la fonction delta $\delta(\bar{x}-x_0)$. Et pour chaque valeur x_0 on introduit une valeur moyenne locale telle que :

$$\langle O_1(x(\tau_1)) O_2(x(\tau_2)) \dots \rangle_{x_0}^{\Omega, x_m} = \frac{\langle \delta(\bar{x}-x_0) O_1(x(\tau_1)) O_2(x(\tau_2)) \dots \rangle_{x_0}^{\Omega, x_m}}{\langle \delta(\bar{x}-x_0) O \rangle_{x_0}^{\Omega, x_m}}. \quad (2.14)$$

L'expression (2.6) de la distribution quantique, dans le cas de l'oscillateur harmonique, regroupe les fluctuations de $\bar{x} = x_0$ et celles autour de x_0 , ce qu'on peut ré exprimer sous la forme :

$$P_H(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 P_{x_0}(x-x_0) P_{Hcl}(x_0), \quad (2.15)$$

où est pris en considération la distribution classique (2.9) et la distribution locale définie par :

$$P_{x_0}(x) \equiv \langle \delta(x-x(\tau)) \rangle_{x_0}^{\Omega, x_m} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a_{x_0}^2}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2a_{x_0}^2}\right], \quad (2.16)$$

la largeur locale $a_{x_0}^2$ est donnée par :

$$a_{x_0}^2 = a_{Hcl}^2 - a_{cl}^2 = \frac{\hbar}{2M\Omega} \left(\coth \frac{\hbar \Omega}{2k_B T} - \frac{2k_B T}{\hbar \Omega} \right), \quad (2.17)$$

Ceci garantit une convergence à $T \rightarrow \infty$ et permet d'avoir à cette limite $W_N(x_0) = V(x_0)$ quelle que soit la valeur de N.

Avec ce choix de la séparation du chemin moyen, la fonction de partition est donnée par :

$$Z = \oint Dx \text{Exp}[-A[x]/\hbar], \quad (2.18)$$

pour une action globale de la particule définie par :

$$A[x] = \int_0^{\beta\hbar} \left[\frac{1}{2} M \dot{x}(\tau) + V(x(\tau)) \right] d\tau, \quad (2.19)$$

et possédant la représentation effective classique (2.1) dont le potentiel effectif classique est donné par :

$$V_{eff,cl}(x_0) = -\frac{1}{\beta} \ln \left[\left(\frac{2\pi\hbar^2 \beta}{M} \right)^{1/2} \oint Dx \delta(x_0 - \bar{x}) \exp[-A[x]/\hbar] \right]. \quad (2.20)$$

Dans la méthode des perturbations variationnelles [13,30], un développement perturbatif du potentiel effectif classique est fait autour de x_0 dépendant du potentiel harmonique avec une fréquence d'essai $\Omega(x_0)$, dont l'optimisation conduit à l'approximation de $W_N(x_0)$ avec $V_{eff,cl}(x_0)$.

2.2 Matrice densité pour l'oscillateur harmonique

La matrice densité est définie par l'expression normalisée suivante :

$$\rho(x_b, x_a) = \frac{1}{Z} \tilde{\rho}(x_b, x_a), \quad (2.21)$$

où $\tilde{\rho}(x_b, x_a)$ est l'amplitude de transition non normalisée donnée par l'intégrale de chemin :

$$\tilde{\rho}(x_b, x_a) = (x_b \hbar \beta | x_a 0) = \int_{(x_a 0) \rightarrow (x_b, \beta \hbar)} Dx \exp[-A[x]/\hbar], \quad (2.22)$$

sur toutes les trajectoires d'extrémités $x(0) = x_a$ et $x\left(\frac{\hbar}{k_B T}\right) = x_b$ fixées.

La fonction de partition est déterminée en fonction de la trace de $\rho(x_b, x_a)$ par l'expression suivante :

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, x) dx. \quad (2.23)$$

On définit la matrice densité non normalisée de l'oscillateur harmonique centré en $x_m(x_b, x_a)$ et de fréquence $\Omega(x_b, x_a; x_0)$ avec l'action (2.3), à partir de la définition (2.6) comme une fonction dépendante de x_a et x_b , ainsi que des deux paramètres arbitraires $\Omega(x_b, x_a; x_0)$ et $x_m(x_b, x_a)$:

$$\rho_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a) = \sqrt{\frac{M \Omega}{2\pi \hbar \sinh(\hbar \beta \Omega)}} \exp\left\{-\frac{M \Omega}{2\hbar \sinh(\hbar \beta \Omega)} \left[(\tilde{x}_b^2 + \tilde{x}_a^2) \cosh(\hbar \beta \Omega) - 2\tilde{x}_b \tilde{x}_a \right]\right\}, \quad (2.24)$$

avec l'abréviation : $\tilde{x}(\tau) = x(\tau) - x_m$.

Et aux extrémités x_a et x_b fixées, les fonctions de corrélations quantiques et la distribution sont respectivement données par [29] :

$$\langle O_1(x(\tau_1)) O_2(x(\tau_2)) \dots \rangle_{x_a, x_b}^{\Omega, x_m} = \frac{1}{\rho_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)} \times \oint Dx O_1(x(\tau_1)) O_2(x(\tau_2)) \dots \exp\{-A^{\Omega, x_m}[x]/\hbar\}, \quad (2.25)$$

$$P_H(x, \tau) \equiv \langle \delta(\tilde{x} - x(\tau)) \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} = \frac{1}{\sqrt{2\pi b_H^2(\tau)}} \exp\left[-\frac{(\tilde{x} - x_{cl}(\tau))^2}{2b_H^2(\tau)}\right]. \quad (2.26)$$

Notons enfin que la trajectoire classique pour un potentiel harmonique est donnée par :

$$x_{cl}(\tau) = \frac{\tilde{x}_b \sinh(\Omega \tau) + \tilde{x}_a \sinh \Omega(\hbar\beta - \tau)}{\sinh(\hbar\beta \Omega)} . \quad (2.27)$$

avec une largeur dépendante de la température exprimée par :

$$b_H^2(\tau) = \frac{\hbar}{2M\Omega} \left\{ \coth \left[\frac{\hbar \Omega}{k_B T} \right] - \frac{\cosh \left[\Omega \left(2\tau - \frac{\hbar}{k_B T} \right) \right]}{\sinh \left[\frac{\hbar \Omega}{k_B T} \right]} \right\} . \quad (2.28)$$

Comme le temps τ évolue dans l'intervalle $[0, \hbar/k_B T]$, la largeur (2.28) est bornée supérieurement par :

$$b_H^2(\tau) \leq \frac{\hbar}{2M\Omega} \tanh \left[\frac{\hbar \Omega}{2k_B T} \right] , \quad (2.29)$$

cette largeur reste alors constante quelle que soit la température.

2.3 Théorie des perturbations variationnelles pour Matrices densité

Pour obtenir une approximation variationnelle pour la matrice densité, il est commode de développer l'action globale (2.19) en une action d'essai dont le propagateur Euclidien est connu, et une action d'interaction contenant le potentiel original $V(x)$:

$$A[x] = A^{\Omega, x_m}[x] + A_{\text{int}}[x] , \quad (2.30)$$

le terme d'interaction est donné par :

$$A_{\text{int}}[x] = \int_0^{\beta \hbar} V_{\text{int}}[x(\tau)] d\tau , \quad (2.31)$$

alors que $x_m = (x_a, x_b)$ est déterminé par la minimisation de $V(x)$, avec x_a et x_b étant les extrémités du chemin et Ω la fréquence d'essai.

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

$$V_{\text{int}}(x) = V(x) - \frac{1}{2} M \Omega^2 (x - x_m)^2 . \quad (2.32)$$

L'intégrale de chemin (2.31) est évaluée en considérant l'action d'interaction (2.31) comme une perturbation, ce qui s'exprime par :

$$\tilde{\rho}(x_b, x_a) = \tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a) \left[1 - \frac{1}{\hbar} \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} + \frac{1}{2\hbar^2} \langle A_{\text{int}}^2[x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} - \dots \right] , \quad (2.33)$$

où $\tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)$ est l'intégrale de chemin pour l'oscillateur harmonique donnée par (2.25) et correspond donc à l'ordre zéro du développement (2.33).

Les fonctions de corrélations quantiques dans l'équation (2.33) peuvent être partagées en fonctions déconnectées [29] (diagrammes de Feynman déconnectés) et des fonctions connectées menant ainsi aux cumulants. On peut démontrer [N] 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 connectés. Ce qui nous permet d'écrire :

$$\ln \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} = \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_b, x_a; c}^{\Omega, x_m}. \quad (2.34)$$

L'expression (2.33) devient :

$$\tilde{\rho}(x_b, x_a) = \tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_b, x_a; c}^{\Omega, x_m} + \frac{1}{2\hbar^2} \langle A_{\text{int}}^2[x] \rangle_{x_b, x_a; c}^{\Omega, x_m} - \dots \right], \quad (2.35)$$

la série obtenue est tronquée à l'ordre N :

$$\tilde{\rho}_N(x_b, x_a) = \tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a) \exp \left[\sum_{n=0}^N \frac{(-1)^n}{n! \hbar^n} \langle A_{\text{int}}^n[x] \rangle_{x_b, x_a; c}^{\Omega, x_m} \right], \quad (2.36)$$

$\tilde{\rho}(x_b, x_a)$ dépend explicitement des paramètres variationnels Ω et x_m .

D'autre part, les premiers cumulants sont donnés par :

$$\langle O_1(x(\tau_1)) \rangle_{x_b, x_a; c}^{\Omega, x_m} = \langle O_1(x(\tau_1)) \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m}$$

$$\langle O_1(x(\tau_1)) O_2(x(\tau_2)) \rangle_{x_b, x_a; c}^{\Omega, x_m} = \langle O_1(x(\tau_1)) O_2(x(\tau_2)) \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} - \langle O_1(x(\tau_1)) \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} \langle O_2(x(\tau_2)) \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m}$$

⋮

Par analogie avec la statistique classique de Boltzmann définissant la fonction de distribution pour un potentiel $V(x)$ par :

$$\tilde{\rho}_{cl}(x_b, x_a) = \left(\frac{M}{2\pi \hbar^2 \beta} \right)^{1/2} \exp[-\beta V(x)], \quad (2.37)$$

un potentiel effectif classique est introduit pour définir la matrice densité non normalisée :

$$\tilde{\rho}(x_b, x_a) = \left(\frac{M}{2\pi \hbar^2 \beta} \right)^{1/2} \exp[-\beta V_{\text{eff}, cl}(x_b, x_a)], \quad (2.38)$$

et son approximation à l'ordre N obtenue à partir de l'intégrale de chemins de l'oscillateur harmonique $\tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)$, ainsi que des équations (2.36) et (2.38) via l'expression des cumulants, nous conduit à :

$$\begin{aligned}
W_N^{\Omega, x_m}(x_b, x_a) &= \frac{1}{2\beta} \ln \left[\frac{\sinh \hbar\beta\Omega}{\hbar\beta\Omega} \right] + \frac{M\Omega}{2\hbar\beta \sinh \hbar\beta\Omega} \left[(\tilde{x}_b^2 + \tilde{x}_a^2) \cosh \hbar\beta\Omega - 2\tilde{x}_b\tilde{x}_a \right] \\
&\quad - \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^N \frac{(-1)^n}{n! \hbar^n} \langle A_{\text{int}}^n[x] \rangle_{x_b, x_a, c}^{\Omega, x_m}, \quad (2.39)
\end{aligned}$$

W_n^{Ω, x_m} est optimisé pour tous les couples de points x_a et x_b par rapport aux paramètres variationnels Ω^2 et x_m , le résultat ainsi obtenu est noté $W_N(x_b, x_a)$.

Les valeurs optimales $\Omega^2(x_b, x_a)$ et $x_m(x_b, x_a)$ sont déterminées comme extrema de la fonction $W_N^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)$ par les conditions :

$$\frac{\partial W_N^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)}{\partial \Omega^2} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial W_N^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)}{\partial x_m} = 0, \quad (2.40)$$

les solutions obtenues sont notées Ω^{2N} et x_m^N , et sont fonction de x_b et x_a .

Signalons que l'approximation au N^{eme} ordre de la matrice densité normalisée est obtenue par la relation :

$$\rho_N(x_b, x_a) = Z_N^{-1} \tilde{\rho}_N^{\Omega^{2N}, x_m^N}(x_b, x_a), \quad (2.41)$$

où la fonction de partition correspondante est donnée par :

$$Z_N = \int_{-\infty}^{\infty} dx \tilde{\rho}_N^{\Omega^{2N}, x_m^N}(x_b, x_a). \quad (2.42)$$

2.4 Formule maculée pour matrices densité

Pour déterminer les fonctions de corrélations connectées du développement perturbatif variationnel (2.36) il est essentiel de trouver la formule adéquate pour évaluer les valeurs moyennes de (2.25), quelle que soit la puissance de l'action d'interaction donnée par (2.31) [13,29]:

$$\begin{aligned}
\langle A_{\text{int}}^n[x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} &= \frac{1}{\tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)} \times \\
&\quad \int_{x_a}^{\tilde{x}_b} D\tilde{x} \prod_{l=1}^n \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau_l V_{\text{int}}(\tilde{x}(\tau_l) + x_m) \right] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} A^{\Omega, x_m}[\tilde{x}(\tau) + x_m] \right\}. \quad (2.43)
\end{aligned}$$

Le calcul recherché est faisable à l'aide de la technique du développement maculé de la référence [28]. Pour cela, on reconsidère le développement du potentiel d'interaction en y introduisant la fonction delta, ce qui donne :

$$V_{\text{int}}(\tilde{x}(\tau_l) + x_m) = \int_{-\infty}^{\infty} dz_l V_{\text{int}}(z_l + x_m) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda_l}{2\pi} \exp\{i\lambda_l z_l\} \exp\left[-\int_0^{\hbar\beta} i\lambda_l \delta(\tau - \tau_l) \tilde{x}(\tau) d\tau\right], \quad (2.44)$$

Soit le courant donné par [29,30] :

$$J(\tau) = \sum_{l=1}^n i\hbar\lambda_l \delta(\tau - \tau_l), \quad (2.45)$$

l'équation (2.43) devient :

$$\begin{aligned} \langle A_{\text{int}}^n [x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} &= \frac{1}{\tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)} \times \\ &\prod_{l=1}^n \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau_l \int_{-\infty}^{\infty} dz_l V_{\text{int}}(z_l + x_m) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda_l}{2\pi} \exp[i\lambda_l z_l] \right] K^{\Omega, x_m}[J(\tau)]. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Avec $K^{\Omega, x_m}[J(\tau)]$ étant le propagateur : sous forme de fonction génératrice de toutes les fonctions de corrélations (donc de tous les diagrammes Feynman) de l'oscillateur harmonique déplacé :

$$K^{\Omega, x_m}[J(\tau)] = \int_{\tilde{x}_a}^{\tilde{x}_b} D\tilde{x} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{m}{2} \dot{\tilde{x}}^2(\tau) + \frac{M}{2} \Omega^2 \tilde{x}^2(\tau) + J(\tau) \tilde{x}(\tau) \right]\right\}, \quad (2.47)$$

Il est facile de constater dans (2.47), que pour un courant nul, $K^{\Omega, x_m}[J(\tau)]$ se réduit au propagateur harmonique euclidien donnée en (2.24) :

$$K^{\Omega, x_m}[J] \Big|_{J=0} = \tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a). \quad (2.48)$$

Pour des courants non nuls, la solution de l'équation intégrale (2.47) est :

$$K^{\Omega, x_m}[J] = \tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a) \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau J(\tau) x_{cl}(\tau) + \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' J(\tau) G^{\Omega}(\tau, \tau') J(\tau')\right], \quad (2.49)$$

où $x_{cl}(\tau)$ est le chemin classique (2.27) et $G^{\Omega}(\tau, \tau')$ sont les fonctions de Green harmoniques définies par :

$$G^{\Omega}(\tau, \tau') = \frac{\hbar}{2M\Omega} \frac{\cosh\Omega(|\tau - \tau'| - \hbar\beta) - \cosh\Omega(\tau + \tau' - \hbar\beta)}{\sinh(\hbar\beta\Omega)}. \quad (2.50)$$

L'expression (2.49) peut être simplifiée en introduisant la formule du courant (2.45) et celle de la fonction de Green (2.50), ce qui donne :

$$K^{\Omega, x_m} [J(\tau)] = \tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m} (x_b, x_a) \exp \left[-i \vec{\lambda}^T \vec{x}_{cl} - \frac{1}{2} \vec{\lambda}^T G \vec{\lambda} \right], \quad (2.51)$$

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 transposés de dimensions n , et G est une matrice symétrique $n \times n$ dont les éléments sont $G_{kl} = G^\Omega(\tau_k, \tau_l)$.

La substitution de (2.51) dans (2.46), et le calcul de l'intégrale par rapport à $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, donne l'expression de la formule maculée pour matrice densité d'ordre n :

$$\begin{aligned} \langle A_{\text{int}}^n [x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} &= \frac{1}{\tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m} (x_b, x_a)} \prod_{l=1}^n \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau_l \int_{-\infty}^{\infty} dz_l V_{\text{int}}(z_l + x_m) \right] \times \\ &\quad \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n \det G}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^n (z_k - x_{cl}(\tau_k)) G_{kl}^{-1} (z_l - x_{cl}(\tau_l)) \right\}. \end{aligned} \quad (2.52)$$

L'intégrant contient une distribution gaussienne d'ordre n décrivant simultanément les fluctuations thermiques et quantiques autour du chemin classique harmonique $x_{cl}(\tau)$ dans un oscillateur d'essai centré en x_m , et dont la largeur est décrite par la fonction de Green donnée en (2.50).

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

$$\rho(x_a) = \frac{1}{Z} \tilde{\rho}(x_a, x_a) = \frac{1}{Z} \oint Dx \delta(x - x_a) \exp \left\{ -\frac{A[x]}{\hbar} \right\}, \quad (2.53)$$

et la formule (2.52) est réécrite sous la forme :

$$\langle A_{\text{int}}^n [x] \rangle_{x_a, x_a}^{\Omega, x_m} = \frac{1}{\rho_0^{\Omega, x_m} (x_a)} \prod_{l=1}^n \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau_l \int_{-\infty}^{\infty} dz_l V_{\text{int}}(z_l + x_m) \right] \frac{\exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^n z_k a_{kl}^{-2} z_l \right\}}{\sqrt{(2\pi)^{n+1} \det a^2}}, \quad (2.54)$$

où $z_0 = \tilde{x}_a$ et $\tau_0 = 0$, a^2 représente une matrice symétrique $(n+1) \times (n+1)$ dont les éléments $a_{kl}^2 = a^2(\tau_k, \tau_l)$ sont obtenus par la fonction de Green pour les chemins périodiques $G^\Omega(\tau, \tau')$ comme :

$$a^2(\tau, \tau') \equiv \frac{\hbar}{M} G^\Omega(\tau, \tau') = \frac{\hbar}{2M\Omega} \frac{\cosh \Omega(|\tau - \tau'| - \hbar\beta/2)}{\sinh(\hbar\beta\Omega/2)}. \quad (2.55)$$

Les éléments diagonaux $a^2(\tau, \tau')$ représentent la largeur des fluctuations (2.7) laquelle converge à la limite classique vers la formule (2.10), et à la température nulle vers (2.8).

D'autre part les formules maculées (2.52) et (2.54) sont d'une grande utilité car elles permettent de déterminer toutes les valeurs moyennes connexes harmoniques, dans le cadre de la théorie des perturbations variationnelles pour matrice densité, en terme d'une intégrale Gaussienne ordinaire.

2.5 Formule maculée au premier ordre

Une approximation variationnelle au premier ordre donne dans la majorité des cas une bonne estimation des quantités calculées. Examinons maintenant les limites quantique et classique de cette approximation. Pour simplifier la procédure, cherchons une nouvelle représentation de la formule maculée (2.54) au premier ordre permettant d'effectuer l'intégrale sur l'espace et sur le temps imaginaire. Cette nouvelle représentation devrait dépendre uniquement de la température T, ainsi nous pourrions aisément en déduire les limites aux températures extrêmes (basses et hautes).

2.5.1 Formulation alternative de la Formule maculée au premier ordre

Pour simplifier les calculs, nous allons nous restreindre au cas de la densité de particules, dans un potentiel $V(x)$ symétrique et centré à l'origine. Si $V(x)$ possède un seul minimum à l'origine, x_m est alors nul. Dans le cas où $V(x)$ posséderait plusieurs minima symétriques, x_m ne serait nul qu'aux hautes températures [13,29] :

La formule maculée (2.54) est donnée, au premier ordre [29], par :

$$\langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} = \frac{1}{\rho_0^{\Omega}(x_a)} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} V_{\text{int}}(z) \frac{1}{\sqrt{a_{00}^4 - a_{01}^4}} \exp\left\{ -\frac{1}{2} \frac{(z^2 + x_a^2)a_{00}^2 - 2zx_a a_{01}^2}{a_{00}^4 - a_{01}^4} \right\}. \quad (2.56)$$

En considérant la formule de Mehler [43] sous la forme :

$$\frac{1}{\sqrt{1-b^2}} \exp\left\{ -\frac{(x^2 + x'^2)(1+b^2) - 4xx'b}{2(1-b^2)} \right\} = \exp\left\{ -\frac{1}{2}(x^2 + x'^2) \right\} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{b^n}{2^n n!} H_n(x) H_n(x') \quad (2.57)$$

on développe la formule (2.54) en terme de polynômes d'Hermite $H_n(x)$, ce qui donne :

$$\langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hbar\beta}{2^n n!} C_{\beta}^{(n)} H_n\left(\frac{x_a}{\sqrt{2a_{00}^2}}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi a_{00}^2}} V_{\text{int}}(z) e^{-z^2/2a_{00}^2} H_n\left(\frac{z}{\sqrt{2a_{00}^2}}\right), \quad (2.58)$$

Comme on peut facilement le constater, la dépendance temporelle des polynômes $H_n(x)$ est la conséquence de la présence, dans l'expression de ces derniers, des éléments diagonaux de la fonction de Green harmonique (2.55).

D'autre part, dans l'expression (2.58) les $C_\beta^{(n)}$ sont des fonctions sans dimensions définies par :

$$C_\beta^{(n)} = \frac{1}{\hbar \beta} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \left(\frac{a_{01}^2}{a_{00}^2} \right)^n, \quad (2.59)$$

et leur dépendance de la température est montrée par la Figure 2.1.

L'insertion de la formule (2.55) dans (2.59) et le calcul de l'intégrale par rapport à la variable τ , nous conduit à l'expression usuelle des $C_\beta^{(n)}$:

$$C_\beta^{(n)} = \frac{1}{\hbar \beta} \int_0^{\hbar \beta} d\tau \left(\frac{a_{01}^2}{a_{00}^2} \right)^2 = \frac{1}{2^n \cosh^n \left(\frac{\hbar \beta \Omega}{2} \right)} \sum_{k=0}^n C_n^k \frac{\sinh \left(\hbar \beta \Omega \left(\frac{n}{2} - k \right) \right)}{\hbar \beta \Omega \left(\frac{n}{2} - k \right)}. \quad (2.60)$$

Comme le montre la Figure (1.2), les fonctions $C_\beta^{(n)}$ de β tendent toutes vers l'unité, à $T \rightarrow \infty$ (c-a-d : $\beta \rightarrow 0$) :

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} C_\beta^{(n)} = 1. \quad (2.61)$$

Alors qu'à des basses températures ($T \rightarrow 0$), nous avons :

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} C_\beta^{(n)} = \begin{cases} 1 & , n = 0 \\ 2/\hbar \beta \Omega n & , n > 0 \end{cases} \quad (2.62)$$

D'après l'expression (2.39) l'approximation du potentiel effectif classique au premier ordre est donnée par :

$$W_1^\Omega(x_a) = \frac{1}{2\beta} \ln \frac{\sinh(\hbar \beta \Omega)}{\hbar \beta \Omega} + \frac{M \Omega}{\hbar \beta} x_a^2 \tanh \frac{\hbar \beta \Omega}{2} + V_{a^2}^\Omega(x_a), \quad (2.63)$$

où le potentiel d'interaction maculé a pour forme :

$$V_{a^2}^\Omega(x_a) = \frac{1}{\hbar \beta} \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_a, x_a}^\Omega, \quad (2.64)$$

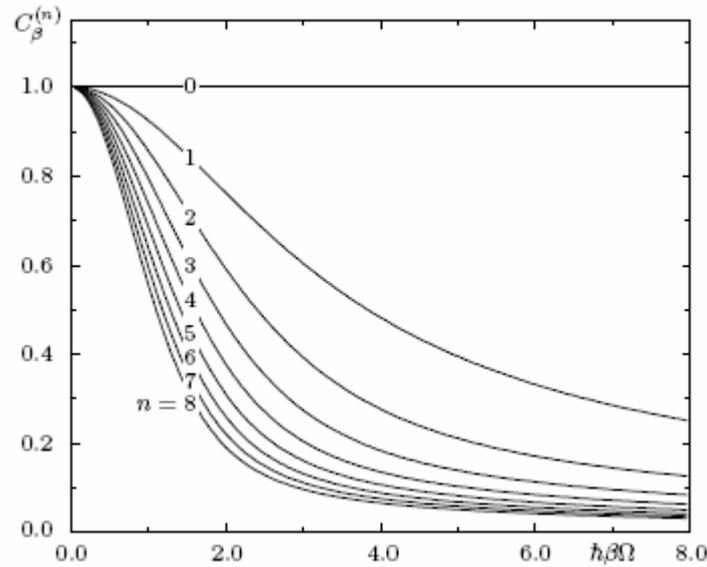


Figure 2.1 : Illustration de la dépendance des fonctions $C_{\beta}^{(n)}$ de la température

Dans le but d'une discussion instructive, il est commode de séparer les cas limites $\beta \rightarrow 0$ et $\beta \rightarrow \infty$, qui caractérisent respectivement la dominance des fluctuations thermiques et celle des fluctuations quantiques.

2.5.2 Limite classique du potentiel effectif classique

A la limite classique intervenant dans le cas des hautes températures ($\beta \rightarrow 0$), le premier ordre du potentiel effectif classique (2.63) se réduit à :

$$W_1^{\Omega}(x_a) = \frac{1}{2} M \Omega^2 x_a^2 + \lim_{\beta \rightarrow 0} V_a^{\Omega}(x_a). \quad (2.65)$$

Le second terme de (2.65) est déterminé en insérant, d'un côté l'expression (2.10) de la largeur des fluctuations aux hautes températures, et de l'autre la limite (2.61), dans l'expression (2.58), cela donne :

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} V_a^{\Omega}(x_a) = \lim_{\beta \rightarrow 0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} H_n \left(\sqrt{\frac{M \Omega^2 \beta}{2}} x_a \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi / M \Omega^2 \beta}} V_{\text{int}}(z) e^{-\beta M \Omega^2 z^2 / 2} H_n \left(\sqrt{\frac{M \Omega^2 \beta}{2}} z \right) \quad (2.66)$$

L'application de la relation de fermeture pour les polynômes d'Hermite [43] :

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} H_n(x) H_n(x') = \delta(x - x'), \quad (2.67)$$

découlant de la formule de Mehler (2.57) pour le cas limite $b \rightarrow 1^-$ avec l'intégration sur z , nous conduit du potentiel d'interaction maculé au potentiel d'interaction pure :

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} V_{a^2}^{\Omega}(x_a) = V_{\text{int}}(x_a). \quad (2.68)$$

En reconsidérant l'équation (2.32) avec $\beta \rightarrow 0$, il est clair que le potentiel effectif classique au premier ordre se rapproche du potentiel classique (2.65), ce qu'on peut exprimer sous la forme :

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} W_1^{\Omega, cl}(x_a) = V(x_a), \quad (2.69)$$

ceci est la conséquence de l'annulation de la largeur des fluctuations b_H^2 de la trajectoire autour de l'orbite classique. Cette propriété reste valable pour des ordres d'approximation, du potentiel effectif classique (2.39), supérieur à un. Ainsi tous les termes correctifs pour des $n > 1$ s'annulent à la limite des hautes températures :

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} \frac{-1}{\beta} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \langle A_{\text{int}}^n[x] \rangle_{x_a, x_b, c}^{\Omega} = 0. \quad (2.70)$$

2.5.3 La limite des basses températures

Aux basses températures, le premier ordre du potentiel effectif classique (2.63) devient :

$$W_1^{\Omega}(x_a) = \frac{\hbar\beta}{2} + \lim_{\beta \rightarrow \infty} V_{a^2}^{\Omega}(x_a). \quad (2.71)$$

La limite, quand $T \rightarrow 0$, du potentiel d'interaction maculé présent dans le second terme de l'équation (2.64) découlant de l'équation (2.63) est calculée en tenant compte aussi bien des valeurs de convergence des polynômes $C_{\beta}^{(n)}$, obtenus dans (2.62), que de la largeur des fluctuations (2.8). En rajoutant les considérations suivantes : $H_0(x) = 1$ et de l'inverse de la

longueur $\kappa = \sqrt{\frac{M\Omega}{\hbar}}$, on obtient comme limite :

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} V_{a^2}^{\Omega}(x_a) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \sqrt{\frac{\kappa^2}{\pi}} V_{\text{int}}(z) \exp\{-\kappa^2 z^2\} H_0^2(\kappa z). \quad (2.72)$$

En introduisant les valeurs propres harmoniques :

$$E_n^{\Omega} = \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.73)$$

ainsi que les fonctions d'onde harmoniques propres correspondantes :

$$\psi_n^\Omega(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{\kappa^2}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\kappa^2 z^2/2} H_n(\kappa x), \quad (2.74)$$

on peut ré exprimer le potentiel effectif classique (2.71), à la limite des températures nulles par :

$$W_1^\Omega(x_a) = E_0^\Omega + \langle \psi_0^\Omega | V_{\text{int}} | \psi_0^\Omega \rangle. \quad (2.75)$$

La formule (2.71) exprime d'autre part l'énergie de l'état fondamental déterminée par la théorie des perturbations stationnaires de Rayleigh-Schrödinger.

Pour ce qui est de la limite quantique du premier ordre de la densité normalisée définie par :

$$\rho_1^\Omega(x_a) \equiv \frac{\tilde{\rho}_1^\Omega(x_a)}{2} = \rho_0^\Omega(x_a) \frac{\exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_a, x_a}^\Omega\right\}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx_a \rho_0^\Omega(x_a) \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_a, x_a}^\Omega\right\}}, \quad (2.76)$$

on doit commencer par calculer le développement au premier ordre de (2.76), on obtient :

$$\rho_1^\Omega(x_a) = \rho_0^\Omega(x_a) \left[1 - \frac{1}{\hbar} \left(\langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_a, x_a}^\Omega - \int_{-\infty}^{\infty} dx_a \rho_0^\Omega(x_a) \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_a, x_a}^\Omega \right) \right], \quad (2.77)$$

insérons ensuite les expressions (2.24) et (2.58) dans le troisième terme de l'équation (2.77), en considérant que Ω ne dépend pas explicitement de x_a , on peut alors constater que l'intégrale sur x_a se réduit à une relation d'orthogonalité pour les polynômes d'Hermite, telle que :

$$\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_a H_n(x_a) H_0(x_a) e^{-x_a^2} = \delta_{n0}, \quad (2.78)$$

avec le résultat (2.78) le troisième terme de (2.77) devient

$$-\int_{-\infty}^{\infty} dx_a \rho_0^\Omega(x_a) \langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_a, x_a}^\Omega = -\beta \int_{-\infty}^{\infty} dz \left(\frac{\kappa^2}{\pi} \right)^{1/2} V_{\text{int}}(z) \exp\{-\kappa^2 z^2\}. \quad (2.79)$$

Ce dernier résultat correspond tout simplement au cas $n = 0$ de l'expression (2.58) avec un signe opposé pour éliminer la composante zéro du second terme de (2.77) (autrement on aurait eu une divergence pour $\beta \rightarrow 0$).

L'approximation au premier ordre de la densité normalisée sera donc donnée par :

$$\rho_1^\Omega(x_a) = \rho_0^\Omega(x_a) \left[1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta}{2^n n!} C_\beta^{(n)} H_n(\kappa x_a) \int_{-\infty}^{\infty} dz \sqrt{\frac{\kappa^2}{\pi}} V_{\text{int}}(z) e^{-\kappa^2 z^2} H_n(\kappa z) \right]. \quad (2.80)$$

Les expressions (2.62) et (2.73) nous permettent de déterminer la forme des fonctions $C_\beta^{(n)}$ dans le cas des basses températures :

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \beta C_\beta^{(n)} = \frac{2}{E_n^\Omega - E_0^\Omega} . \quad (2.81)$$

Avec l'équation (2.80), on obtient la limite :

$$\rho_1^\Omega(x_a) = \rho_0^\Omega(x_a) \left[1 - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} \frac{1}{E_n^\Omega - E_0^\Omega} H_n(\kappa x_a) \int_{-\infty}^{\infty} dz \sqrt{\frac{\kappa^2}{\pi}} V_{\text{int}}(z) e^{-\kappa^2 z^2} H_n(\kappa z) H_0(\kappa z) \right]. \quad (2.82)$$

En tenant compte des fonctions propres harmoniques (2.74), on peut reformuler l'équation (2.82) par :

$$\rho_1^\Omega(x_a) = |\psi_0(x_a)|^2 = |\psi_0^\Omega(x_a)|^2 - 2\psi_0^\Omega(x_a) \sum_{n>0} \psi_n^\Omega(x_a) \frac{\langle \psi_n^\Omega | V_{\text{int}} | \psi_0^\Omega \rangle}{E_n^\Omega - E_0^\Omega} . \quad (2.83)$$

Dans la formule (2.83) il est aisé de constater l'équivalence avec la densité de particule obtenue par la théorie des perturbations de Rayleigh-Schrödinger.

On peut affirmer que la méthode des perturbations variationnelles pour matrices densités nous a permis de retrouver , aussi bien à la limite des hautes que celle des basses températures, les formules obtenues via d'autres méthodes. Et qu'on peut s'en servir (via l'expression (2.83)) pour déterminer la fonction propre $\psi_0(x_a)$ de l'état fondamental du système considéré.

2.6 La formule maculée à des dimensions supérieures à un

Dans la majorité des problèmes, les systèmes physiques étudiés possèdent un nombre de degrés de liberté supérieur à un. Pour cela, on doit étendre la méthode des perturbations variationnelles à des espaces de dimensions supérieure à un. En général, car c'est le cas des systèmes réels, on fait appel à des systèmes d'essai harmoniques et anisotropiques : dans lesquels le paramètre variationnel Ω^2 devient une matrice $D \times D$ d'éléments $\Omega_{\mu\nu}^2$, avec les indices $\mu, \nu = 1, 2, \dots, D$.

2.6.1 L'approximation isotropique

L'approximation isotropique, concerne la fréquence d'essai Ω^2 , via l'hypothèse suivante :

$$\Omega_{\mu\nu}^2 = \Omega^2 \delta_{\mu\nu} . \quad (2.84)$$

L'hypothèse (2.84) donne une grossière estimation des propriétés du système considéré. Avec cette hypothèse, la formule maculée (2.54) d'ordre n peut être directement généralisée de la manière suivante :

$$\langle A_{\text{int}}^n [\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^{\Omega} = \frac{1}{\rho_0^{\Omega}(\vec{r}_a)} \times \prod_{l=1}^n \left[\int_0^{h\beta} d\tau_l \int_{-\infty}^{\infty} d^D z_l V_{\text{int}}(\vec{z}_l) \right] \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{n+1} \det a^2}^D} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^n \vec{z}_k a_{kl}^{-2} \vec{z}_l \right\}, \quad (2.85)$$

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

A noter que les indices grecs $\mu, \nu, \dots = 1, 2, \dots, D$ spécifient la dimension spatiale, 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 noté \vec{r}_a , alors que la matrice a^2 représente la même chose qu'à la section 2.4.

La densité harmonique normalisée est donnée par :

$$\rho_0^{\Omega}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a_{00}^2}^D} \exp \left\{ -\frac{1}{2a_{00}^2} \sum_{\mu=1}^D x_{\mu}^2 \right\}. \quad (2.86)$$

2.6.2 L'approximation anisotropique

Dans le cas de l'approximation anisotropique, et vue leur simplicité et leur rôle dans les problèmes physiques, on ne considère que les potentiels à symétrie radiale $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$.

Dans ce cas la fréquence d'essai se décompose automatiquement en une fréquence radiale Ω_L et une fréquence transversale Ω_T [13,29], ce qui s'exprime par :

$$\Omega_{\mu\nu}^2 = \Omega_L^2 \frac{x_{a\mu} x_{a\nu}}{r_a^2} + \Omega_T^2 \left(\delta_{\mu\nu} - \frac{x_{a\mu} x_{a\nu}}{r_a^2} \right), \quad (2.87)$$

avec $r_a = |\vec{r}_a|$.

Pour rendre les calculs plus pratiques, on effectue une rotation définie par une matrice U , des coordonnées du système, ce qui permet d'écrire $\bar{\bar{x}}_n = U \bar{x}_n$, de sorte que le vecteur $\bar{\bar{r}}_a$ soit dirigé le long du premier axe, ainsi :

$$\left(\bar{\bar{r}}\right)_\mu \equiv \bar{z}_{,\mu 0} = \begin{cases} r_a & , \quad n=0 \\ 0 & , \quad 2 \leq \mu \leq D \end{cases} . \quad (2.88)$$

La nouvelle matrice Ω^2 est donc diagonale, et s'exprime par :

$$\bar{\Omega}^2 = \begin{pmatrix} \Omega_L^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Omega_T^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \Omega_T^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \Omega_T^2 \end{pmatrix} = U \Omega^2 U^{-1} . \quad (2.89)$$

Avec cette rotation, la formule maculée anisotrope d'ordre n et de dimension D s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle A_{\text{int}}^n[\bar{\bar{r}}] \rangle_{\bar{\bar{r}}_a, \bar{\bar{r}}_a}^\Omega &= \frac{(2\pi)^{-D(n+1)/2}}{\rho_0^{\Omega_L, \Omega_T}(\bar{\bar{r}}_a)} \prod_{l=1}^n \left[\int_0^{h\beta} d\tau_l \int_{-\infty}^{\infty} d^D \bar{z}_l V_{\text{int}}(|\bar{\bar{z}}_l|) \right] (\det a_L^2)^{-1/2} (\det a_T^2)^{-(D-1)/2} \times \\ &\exp\left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^n \bar{z}_{lk}^T (a_L^{-2})_{kl} \bar{z}_{ll} \right\} \exp\left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^D \sum_{k,l=1}^n \bar{z}_{lk}^T (a_T^{-2})_{kl} \bar{z}_{\mu l} \right\} . \end{aligned} \quad (2.90)$$

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

$$(a_L^2)_{kl} = a_L^2(\tau_k, \tau_l) \quad , \quad (a_T^2)_{kl} = a_T^2(\tau_k, \tau_l) \quad , \quad (2.91)$$

où la fréquence d'essai Ω de (2.55) a été remplacée respectivement par les nouveaux paramètres variationnels Ω_L et Ω_T .

Quant à la densité de particule harmonique $\rho_0^{\Omega_L, \Omega_T}(\bar{\bar{r}}_a)$, qui sera utilisée pour normaliser l'expression (2.90), elle est donnée par :

$$\rho_0^{\Omega_L, \Omega_T}(\bar{\bar{r}}) = \left(\frac{1}{2\pi (a_{00}^2)_L} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{2\pi (a_{00}^2)_T} \right)^{(D-1)/2} \exp\left[-\frac{\bar{x}_1^2}{2(a_{00}^2)_L} - \frac{1}{2(a_{00}^2)_T} \sum_{\mu=2}^D \bar{x}_\mu^2 \right] . \quad (2.92)$$

CHAPITRE 3
APPLICATION DE LA THEORIE DES PERTURBATIONS VARIATIONNELLES
A DES CLASSES DE POTENTIELS NON-POLYNOMIAUX

3.1 Introduction

Les oscillateurs rationnels (ou non polynomiaux) ont eu un intérêt énorme ces vingt dernières années pour leurs applications dans des domaines aussi variés que l'optique non linéaire (théorie des Lasers) [45,46], la théorie des champs et la physique des particules élémentaires [45,50].

Les classes de potentiels non polynomiaux qu'on va étudier, ont pour expressions :

$$V^{\mp}(x) = \frac{1}{2}x^2 \mp g \frac{x^4}{1 + \alpha gx^2}, \quad (3.1)$$

$$V^{\mp}(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) \mp g \left(\frac{x^4}{1 + \alpha gx^2} + \frac{y^4}{1 + \alpha gy^4} \right) + g(a_{xx}x^4 + a_{xy}x^2y^2 + a_{yy}y^4), \quad (3.2)$$

$$V^{\mp}(x, y, z) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2) \mp g \left(\frac{x^4}{1 + \alpha gx^2} + \frac{y^4}{1 + \alpha gy^4} + \frac{z^4}{1 + \alpha gz^4} \right) + g(a_{xx}x^4 + a_{yy}y^4 + a_{zz}z^4 + a_{xy}x^2y^2 + a_{xz}x^2z^2 + a_{yz}z^2y^2), \quad (3.3)$$

avec g et α paramètres réels.

Etudier ce type de potentiels par un calcul analytique exact, aussi bien dans le formalisme de Schrödinger que dans le formalisme de Feynman, n'a pas été réalisé jusqu'à présent, il a fallu donc recourir à des méthodes d'approximations pour contourner le problème. Maintes techniques ont été alors utilisées pour déduire le spectre d'énergie de ces classes de potentiels. Dans le cadre de ce mémoire, nous nous proposons d'appliquer la théorie des perturbations variationnelles pour matrices densité pour la détermination de l'énergie de l'état fondamentale des potentiels (3.1), (3.2) et (3.3).

Pour les potentiels à une et deux dimensions (3.1) et (3.2), il s'agit d'une étude comparative, du moment que ces derniers ont fait l'objet de plusieurs publications précédentes, nous utiliserons en particuliers les travaux [55,56] pour comparer nos résultats [57,58]. Nous nous proposons ensuite de généraliser l'application de la théorie des perturbations variationnelles au cas du potentiel tridimensionnel (3.3) pour des couples de valeurs de α et g déjà considérés dans le cas bidimensionnel.

3.2 Application et résultats

Commençons par noter que l'application de la théorie des perturbations variationnelles aux potentiels rationnels et le développement des calculs qui en découlent, sans restriction sur les valeurs des paramètres α et g , conduit à des potentiels polynomiaux en x^4 et y^4 qui mènent à une divergence des intégrales gaussiennes. Pour éviter ce problème de la divergence, nous appliquons un développement en séries des potentiels étudiés autour de $(\alpha, g) \rightarrow 0$, ceci signifie qu'on ne peut considérer que des couples (α, g) vérifiant la condition : $g/\alpha \ll 1$.

La deuxième source de divergence, mais celle-là dans le calcul numérique de l'énergie libre F , est l'ordre du développement limité appliqué aux potentiels étudiés. Ainsi pour faire converger les calculs on arrête, dans le cas de la parité positive le développement à un ordre impair, alors que pour celui de la parité négative on l'arrête à un ordre pair. Notons qu'entre un développement limité d'ordre 3 et un développement d'ordre 13 la différence entre les valeurs de l'énergie qui en découlent avoisine les 10^{-10} , on se contentera alors d'arrêter les développements respectivement à 4 et 5 pour les potentiels de parité impaire et paire.

Notons enfin que pour ce type de potentiels on se contentera d'optimiser, dans le cadre de la théorie des perturbations variationnelles, par rapport au paramètre variationnel $\Omega^2(\vec{r}_a)$ seulement, car pour des raisons de symétrie le deuxième paramètre sera considéré nul $\vec{r}_m = \vec{0}$, et cela quelle que soit la dimension de \vec{r} .

Quant aux résultats numériques ils sont donnés en unités $\hbar = m = k_B = \omega = 1$.

3.2.1 Potentiels unidimensionnels (3.1)

3.2.1.1 Introduction

Le potentiel à une dimension (3.1) a été largement étudié :

- G. Auberson [49] a montré que le développement perturbatif des valeurs propres E en termes de g , avec α fixé, est sommable au sens de Borel.
- G. Auberson et T. Boissiere [50] ont calculé l'énergie du niveau fondamental pour une large gamme de valeurs de α et g , en utilisant plusieurs méthodes.
- G.P. Flessas [51] a étudié le même potentiel, prouvant qu'il existe une classe de valeurs propres et de fonctions propres exactes quand certaines relations algébriques entre α et g sont vérifiées, avec α et g tous les deux et positifs.
- M.R.M. Witwit et J.P. Killingbeck [52] ont appliqué les théorèmes de Hellmann-Feynman et de l'hyperviriel pour calculer les niveaux d'énergie pour quelques valeurs limitées de a et de g .
- M.R.M. Witwit [54] a calculé les valeurs propres de diverses formes de potentiels à une dimension en employant la méthode des différences finies et celle des séries renormalisées.
- C.R. Handy et al.[53] ont appliqué la méthode du moment propre pour calculer les niveaux d'énergie pour différentes valeurs de a et α de g .

3.2.1.2 Application et résultats

L'approximation au premier ordre de la densité dans le cas unidimensionnel est donnée par:

$$\tilde{\rho}_1^\Omega(x_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} \exp\left[-\beta\tilde{W}_1^\Omega(x_a)\right]. \quad (3.4)$$

Et la formule maculée pour le potentiel effectif est donnée par:

$$\tilde{W}_1^\Omega(x_a) = \frac{1}{2\beta} \ln \frac{\sinh \beta\Omega}{\beta\Omega} + \frac{\Omega}{\beta} x_a^2 \tanh \frac{\beta\Omega}{2} + \frac{1}{\beta} \left\langle A_{\text{int}}^{(1)}[x] \right\rangle_{x_a, x_a}^\Omega. \quad (3.5)$$

On prendra pour ce cas $x_m = 0$ dans la formule maculée (3.5) et on minimisera ensuite par rapport à $\Omega^2(x_a)$.

Nous obtenons les résultats suivants :

A) Résultats analytiques

A.1) Potentiels unidimensionnels à parité positive :

$$\langle A_{\text{int}}[x] \rangle_{x_a, x_a}^{\Omega, (+)} = \left(\begin{aligned} & A_0 - \frac{1}{16\Omega^3 a_{00}^4} A_1 B_1 + \frac{g}{256\Omega^5 a_{00}^8} A_2 B_2 - \frac{g^2 \alpha}{6144\Omega^7 a_{00}^{12}} A_3 B_3 \\ & + \frac{g^3 \alpha^2}{393216\Omega^9 a_{00}^{16}} A_4 B_4 - \frac{g^4 \alpha^3}{5242880\Omega^{11} a_{00}^{20}} A_5 B_5 + \frac{g^5 \alpha^4}{251658240\Omega^{13} a_{00}^{24}} A_6 B_6 \end{aligned} \right)$$

Avec :

$$A_0 = \frac{a_{00}^2}{2} \beta \left(1 - \Omega^2 + 6g a_{00}^2 \left(1 + 5g\alpha a_{00}^2 \left(-1 + 7g\alpha a_{00}^2 \left(1 + 9g\alpha a_{00}^2 \left(-1 + 11g\alpha a_{00}^2 \right) \right) \right) \right) \right)$$

$$A_1 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^2 (\beta\Omega + \sinh[\beta\Omega])$$

$$B_1 = (a_{00}^2 - x_0^2) \left(\frac{6g^2 a_{00}^2 (2 + 5g\alpha a_{00}^2 (-3 + 7g\alpha a_{00}^2 (4 + 9g\alpha a_{00}^2 (-5 + 66g\alpha a_{00}^2))))}{+1 - \Omega^2} \right)$$

$$A_2 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^4 (6\beta\Omega + 8\sinh[\beta\Omega] + \sinh[2\beta\Omega])$$

$$B_2 = (3a_{00}^4 - 6a_{00}^2 x_0^2 + x_0^4) \left(1 + 15g\alpha a_{00}^2 \left(-1 + \left(\frac{7g\alpha a_{00}^2 \times}{(2 + 15g\alpha a_{00}^2 (-2 + 33g\alpha a_{00}^2))} \right) \right) \right)$$

$$A_3 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^6 (30\beta\Omega + 45\sinh[\beta\Omega] + 9\sinh[2\beta\Omega] + \sinh[3\beta\Omega])$$

$$B_3 = (-1 + 14g\alpha a_{00}^2 (2 + 45g\alpha a_{00}^2 (-1 + 22g\alpha a_{00}^2))) \times (15a_{00}^6 - 45a_{00}^4 x_0^2 + 15a_{00}^2 x_0^4 - x_0^6)$$

$$A_4 = \csc \left[\frac{\beta \Omega}{2} \right]^8 \left(420 \beta \Omega + 672 \sinh [\beta \Omega] + 168 \sinh [2 \beta \Omega] + 32 \sinh [3 \beta \Omega] \right) \\ + 3 \sinh [4 \beta \Omega]$$

$$B_4 = \left(1 + 45 g \alpha a_{00}^2 (-1 + 33 g \alpha a_{00}^2) \right) \times \\ \left(105 a_{00}^8 - 420 a_{00}^6 x_0^2 + 210 a_{00}^4 x_0^4 - 28 a_{00}^2 x_0^6 + x_0^8 \right)$$

$$A_5 = \csc \left[\frac{\beta \Omega}{2} \right]^{10} \left(30(42 \beta \Omega + 70 \sinh [\beta \Omega] + 20 \sinh [2 \beta \Omega] + 5 \sinh [3 \beta \Omega]) \right) \\ + 25 \sinh [4 \beta \Omega] + 2 \sinh [5 \beta \Omega]$$

$$B_5 = \left(-1 + 66 g \alpha a_{00}^2 \right) \times \\ \left(945 a_{00}^{10} - 4725 a_{00}^8 x_0^2 + 3150 a_{00}^6 x_0^4 - 630 a_{00}^4 x_0^6 + 45 a_{00}^2 x_0^8 - x_0^{10} \right)$$

$$A_6 = \csc \left[\frac{\beta \Omega}{2} \right]^{12} \left(13860 \beta \Omega + 23760 \sinh [\beta \Omega] + 7425 \sinh [2 \beta \Omega] + 2200 \sinh [3 \beta \Omega] \right) \\ + 345 \sinh [4 \beta \Omega] + 72 \sinh [5 \beta \Omega] + 5 \sinh [6 \beta \Omega]$$

$$B_6 = 10395 a_{00}^{12} - 62370 a_{00}^{10} x_0^2 + 51975 a_{00}^8 x_0^4 - 13860 a_{00}^6 x_0^6 + 1485 a_{00}^4 x_0^8 \\ - 66 a_{00}^2 x_0^{10} + x_0^{12}$$

A.2) Potentiels unidimensionnels à parité négative :

$$\langle A_{\text{int}} [x] \rangle_{x_a, x_a}^{\Omega, (-)} = \left(\begin{array}{l} A_0 + \frac{1}{16 \Omega^3 a_{00}^4} A_1 B_1 + \frac{g}{256 \Omega^5 a_{00}^8} A_2 B_2 - \frac{g^2 \alpha}{6144 \Omega^7 a_{00}^{12}} A_3 B_3 \\ + \frac{g^3 \alpha}{393216 \Omega^9 a_{00}^{16}} A_4 B_4 - \frac{g^4 \alpha^3}{5242880 \Omega^{11} a_{00}^{20}} A_5 B_5 + \frac{g^5 \alpha^4}{251658240 \Omega^{13} a_{00}^{24}} A_6 B_6 \\ - \frac{g^6 \alpha^5}{14092861440 \Omega^{15} a_{00}^{28}} A_7 B_7 \end{array} \right)$$

Avec :

$$A_0 = -\frac{a_{00}^2}{2} \beta \left(-1 + \Omega^2 + 6 g a_{00}^2 - 30 g^2 \alpha a_{00}^4 + 210 g^3 \alpha^2 a_{00}^6 - 1890 g^4 \alpha^3 a_{00}^8 \right) \\ + 20790 g^5 \alpha^4 a_{00}^{10} - 270270 g^6 \alpha^5 a_{00}^{12}$$

$$A_1 = \csc \left[\frac{\beta \Omega}{2} \right]^2 (\beta \Omega + \sinh [\beta \Omega])$$

$$B_1 = \left(-1 + \Omega^2 + 12 g a_{00}^2 - 90 g^2 \alpha a_{00}^4 + 840 g^3 \alpha^2 a_{00}^6 - 9450 g^4 \alpha^3 a_{00}^8 \right) (a_{00}^2 - x_0^2) \\ + 124740 g^5 \alpha^4 a_{00}^{10} - 1891890 g^6 \alpha^5 a_{00}^{12}$$

$$A_2 = \csc\left[\frac{\beta\Omega}{2}\right]^4 (6\beta\Omega + 8\sinh[\beta\Omega] + \sinh[2\beta\Omega])$$

$$B_2 = (3a_{00}^4 - 6a_{00}^2x_0^2 + x_0^4) \times \\ \left(\begin{array}{l} -1 + 15g\alpha a_{00}^2 - 210g^2\alpha^2 a_{00}^4 + 3150g^3\alpha^3 a_{00}^6 - 51975g^4\alpha^4 a_{00}^8 \\ + 945945g^5\alpha^5 a_{00}^{10} \end{array} \right)$$

$$A_3 = \csc\left[\frac{\beta\Omega}{2}\right]^6 (30\beta\Omega + 45\sinh[\beta\Omega] + 9\sinh[2\beta\Omega] + \sinh[3\beta\Omega])$$

$$B_3 = \left(\begin{array}{l} 1 - 28g\alpha a_{00}^2 + 630g^2\alpha^2 a_{00}^4 - 13860g^3\alpha^3 a_{00}^6 \\ + 315315g^4\alpha^4 a_{00}^8 \end{array} \right) (15a_{00}^6 - 45a_{00}^4x_0^2 + 15a_{00}^2x_0^4 - x_0^6)$$

$$A_4 = \csc\left[\frac{\beta\Omega}{2}\right]^8 \left(\begin{array}{l} 420\beta\Omega + 672\sinh[\beta\Omega] + 168\sinh[2\beta\Omega] + 32\sinh[3\beta\Omega] \\ + 3\sinh[4\beta\Omega] \end{array} \right)$$

$$B_4 = (105a_{00}^8 - 420a_{00}^6x_0^2 + 210a_{00}^4x_0^4 - 28a_{00}^2x_0^6 + x_0^8) \times \\ (-1 + 45g\alpha a_{00}^2 - 1485g^2\alpha^2 a_{00}^4 + 45045g^3\alpha^3 a_{00}^6)$$

$$A_5 = \csc\left[\frac{\beta\Omega}{2}\right]^{10} \left(\begin{array}{l} 1260\beta\Omega + 2100\sinh[\beta\Omega] + 600\sinh[2\beta\Omega] + 150\sinh[3\beta\Omega] \\ + 25\sinh[4\beta\Omega] + 2\sinh[5\beta\Omega] \end{array} \right)$$

$$B_5 = (1 - 66g\alpha a_{00}^2 + 3003g^2\alpha^2 a_{00}^4) \times \\ (645a_{00}^{10} - 4725a_{00}^8x_0^2 + 3150a_{00}^6x_0^4 - 6330a_{00}^4x_0^6 + 45a_{00}^2x_0^8 - x_0^{10})$$

$$A_6 = \csc\left[\frac{\beta\Omega}{2}\right]^{12} \left(\begin{array}{l} 13860\beta\Omega + 23760\sinh[\beta\Omega] + 7425\sinh[2\beta\Omega] + 2200\sinh[3\beta\Omega] \\ + 495\sinh[4\beta\Omega] + 72\sinh[5\beta\Omega] + 5\sinh[6\beta\Omega] \end{array} \right)$$

$$B_6 = (-1 + 91g\alpha a_{00}^2) \left(\begin{array}{l} 10395a_{00}^{12} - 62370a_{00}^{10}x_0^2 + 519755a_{00}^8x_0^4 - 13860a_{00}^6x_0^6 + 1485a_{00}^4x_0^8 \\ - 66a_{00}^2x_0^{10} + x_0^{12} \end{array} \right)$$

$$A_7 = \csc\left[\frac{\beta\Omega}{2}\right]^{14} \left(\begin{array}{l} 180180\beta\Omega + 315315\sinh[\beta\Omega] + 105105\sinh[2\beta\Omega] + 35035\sinh[3\beta\Omega] \\ + 9555\sinh[4\beta\Omega] + 1911\sinh[5\beta\Omega] + 245\sinh[6\beta\Omega] + 15\sinh[7\beta\Omega] \end{array} \right)$$

$$B_7 = \begin{pmatrix} 135135a_{00}^{14} - 945945a_{00}^{12}x_0^2 + 945945a_{00}^{10}x_0^4 - 315315a_{00}^8x_0^6 + 45045a_{00}^6x_0^8 \\ - 3003a_{00}^4x_0^{10} + 91a_{00}^2x_0^{12} - x_0^{14} \end{pmatrix}$$

B) Résultats numériques

$E_{ww}^{(0)}$ énergies données dans la Réf.[55].

$E_K^{(0)}$ énergies trouvées par la théorie VPT [57-58].

Tableau 3.1 : Energie Fondamentale dans le cas du potentiel $V^\mp(x)$,
pour différentes valeurs des paramètres α et g .

\mp	g	α	$E_{ww}^{(0)}$	$E_K^{(0)}$
+	0.001	100	0.5006073	0.5006222489
-	0.001	100	0.4993900	0.4993956551
+	0.001	50	0.5006679376	0.5006665798
-	0.001	20	0.4992828382	0.4992784675
+	0.005	15	0.503114886	0.5031904973
-	0.005	10	0.4966047151	0.4966087615
+	0.001	10	0.5007294798	0.5007254007
-	0.005	5	0.4964102209	0.4964121833
-	0.005	1	0.4962306184	0.4962345119
+	0.01	3	0.5067943146	0.5068174413
-	0.01	4	0.4929543322	0.4929767052
+	0.01	2	0.5069395835	0.5069611482
-	0.01	2.5	0.4927008357	0.4927255763
+	0.01	0.5	0.5071734951	0.5071981041
-	0.01	3	0.4927881329	0.4928115402
+	0.02	1.5	0.5132395699	0.5133199008
-	0.02	2	0.4854342883	0.4855536041
+	0.02	2	0.512984860	0.5130717189
-	0.01	10	0.49377219	0.4938936036
-	0.02	1	0.4846543046	0.4848073751
-	0.02	4	0.4867027	0.4868855131
-	0.02	5	0.4872327	0.4875454819
-	0.02	3.5	0.4864146367	0.4865604405

3.2.2 Potentiels bidimensionnels (3.2) :

3.2.2.1 Introduction

Le potentiel à deux dimensions (3.2) a fait à son tour le sujet de plusieurs études dans [47-53] avant que M.R.M. Witwit et J.P. Killingbeck ne l'étudient en employant la technique du produit interne [56].

2.2.2.2 Application et résultats

Pour le cas bidimensionnel, on applique le potentiel effectif classique au premier ordre :

$$W_1^{(2)\Omega}(\vec{r}_a) = \frac{1}{\beta} \ln \frac{\sinh(\beta\Omega)}{\beta\Omega} + \frac{\Omega}{\beta} (x_a^2 + y_a^2) \tanh \frac{\beta\Omega}{2} + \frac{1}{\beta} \langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^{\Omega}, \quad (3.6)$$

L'action dans (3.6) est :

$$\langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^{\Omega} = \frac{1}{\rho_0^{\Omega}(\vec{r}_a)} \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_{-\infty}^{\infty} d^2 z_1 V_{\text{int}}(\vec{z}_1) \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2 \det a^2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{k,l=0}^1 \vec{z}_k^T a_{kl}^{-2} \vec{z}_l \right], \quad (3.7)$$

où le vecteur position \vec{z}_1 est donné par :

$$\vec{z}_1 = \begin{pmatrix} z_{10} \\ z_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \vec{z}_1^T \equiv (z_{10}, z_{11}) = (x_1, y_1). \quad (3.8)$$

Quand au potentiel d'interaction il est défini par :

$$V_{\text{int}}(\vec{z}_1) = V(\vec{z}_1) - \frac{1}{2} \Omega^2 \vec{z}_1^2. \quad (3.9)$$

Nous obtenons les résultats suivants :

A) Résultats analytiques

A.1) Potentiels bidimensionnels à parité positive :

$$\langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^{\Omega, (+)} = \left(\begin{array}{l} A_0 - \frac{1}{16\Omega^3 a_{00}^4} A_1 B_1 + \frac{g}{256\Omega^5 a_{00}^8} A_2 B_2 - \frac{g^2 \alpha}{6144\Omega^7 a_{00}^{12}} A_3 B_3 \\ + \frac{g^3 \alpha^2}{393216\Omega^9 a_{00}^{16}} A_4 B_4 - \frac{g^4 \alpha^3}{5242880\Omega^{11} a_{00}^{20}} A_5 B_5 + \frac{g^5 \alpha^4}{251658240\Omega^{13} a_{00}^{24}} A_6 B_6 \end{array} \right)$$

Avec :

$$A_0 = \beta a_{00}^2 \left(\begin{array}{c} 1 - \Omega^2 + \\ g a_{00}^2 \left(\begin{array}{c} 3a_{xx} + 2a_{xy} \\ + 3 \left(\begin{array}{c} a_{yy} + \\ 2(1 + 5g\alpha a_{00}^2(-1 + 7g\alpha a_{00}^2(1 + 9g\alpha a_{00}^2(-1 + 11g\alpha a_{00}^2)))) \end{array} \right) \end{array} \right) \end{array} \right)$$

$$A_1 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^2 (\beta\Omega + \sinh[\beta\Omega])$$

$$B_1 = \left(\begin{array}{c} (24g + 12g a_{xx} + 8g a_{xy} + 12g a_{yy})a_{00}^4 - 180g^2\alpha a_{00}^6 + 1680g^3\alpha^2 a_{00}^8 \\ - 18900g^4\alpha^3 a_{00}^{10} + 249480g^5\alpha^4 a_{00}^{12} \\ + 2a_{00}^2(-1 + \Omega^2 + 2g((3 + 3a_{xx} + a_{xy})x_0^2 + (a_{xy} + 3(1 + a_{yy}))y_0^2)) \\ + (x_0^2 + y_0^2) \left(\begin{array}{c} -1 + \Omega^2 + 90g^2\alpha a_{00}^4 - 840g^3\alpha^2 a_{00}^6 + 9450g^4\alpha^3 a_{00}^8 \\ - 124740g^5\alpha^4 a_{00}^{10} \end{array} \right) \end{array} \right)$$

$$A_2 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^4 (6\beta\Omega + \sinh[\beta\Omega] + \sinh[2\beta\Omega])$$

$$B_2 = \left(\begin{array}{c} (6 + 3a_{xx} + 2a_{xy} + 3a_{yy})a_{00}^4 - 90g\alpha a_{00}^6 + 1260g^2\alpha^2 a_{00}^8 - 18900g^3\alpha^3 a_{00}^{10} \\ + 311850g^4\alpha^4 a_{00}^{12} + a_{00}^2(-2(3 + 3a_{xx} + a_{xy})x_0^2 - 2(a_{xy} + 3(1 + a_{yy}))y_0^2) + \\ (1 + a_{xx})x_0^4 + 2a_{xy}x_0^2y_0^2 + (1 + a_{yy})y_0^4 \\ + (90g^2\alpha a_{00}^4 - 1260g^2\alpha^2 a_{00}^6 + 18900g^3\alpha^3 a_{00}^8 - 311850g^4\alpha^4 a_{00}^{10})(x_0^2 + y_0^2) \\ + (-15g\alpha a_{00}^2 + 210g^2\alpha^2 a_{00}^4 - 3150g^3\alpha^3 a_{00}^6 + 519755210g^4\alpha^4 a_{00}^{88})(x_0^4 + y_0^4) \end{array} \right)$$

$$A_3 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^6 (30\beta\Omega + 45\sinh[\beta\Omega] + 9\sinh[2\beta\Omega] + \sinh[3\beta\Omega])$$

$$B_3 = (-1 + 14g\alpha a_{00}^2(2 + 45g\alpha a_{00}^2(-1 + 22g\alpha a_{00}^2))) \times \\ (30a_{00}^6 - 45a_{00}^4(x_0^2 + y_0^2) + 15a_{00}^2(x_0^4 + y_0^4) - (x_0^6 + y_0^6))$$

$$A_4 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^8 (420\beta\Omega + 672\sinh[\beta\Omega] + 168\sinh[2\beta\Omega] + 32\sinh[3\beta\Omega] + 3\sinh[4\beta\Omega])$$

$$B_4 = (1 + 45g\alpha a_{00}^2(-1 + 33g\alpha a_{00}^2)) \left(\begin{array}{c} 210a_{00}^8 - 420a_{00}^6(x_0^2 + y_0^2) + 210a_{00}^4(x_0^4 + y_0^4) \\ - 28a_{00}^2(x_0^6 + y_0^6) + (x_0^8 + y_0^8) \end{array} \right)$$

$$A_5 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^{10} \left(30(42\beta\Omega + 70 \sinh[\beta\Omega] + 20 \sinh[2\beta\Omega] + 5 \sinh[3\beta\Omega]) + 25 \sinh[4\beta\Omega] \right. \\ \left. + 2 \sinh[5\beta\Omega] \right)$$

$$B_5 = (-1 + 66g\alpha a_{00}^2) \left(1890a_{00}^{10} - 4725a_{00}^8(x_0^2 + y_0^2) + 3150a_{00}^6(x_0^4 + y_0^4) - 630a_{00}^4(x_0^6 + y_0^6) \right. \\ \left. + 45a_{00}^2(x_0^8 + y_0^8) - (x_0^{10} + y_0^{10}) \right)$$

$$A_6 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^{12} \left(13860\beta\Omega + 23760 \sinh[\beta\Omega] + 7425 \sinh[2\beta\Omega] + 2200 \sinh[3\beta\Omega] \right. \\ \left. + 495 \sinh[4\beta\Omega] + 72 \sinh[5\beta\Omega] + 5 \sinh[6\beta\Omega] \right)$$

$$B_6 = \left(20790a_{00}^{12} - 62370a_{00}^{10}(x_0^2 + y_0^2) + 51975a_{00}^8(x_0^4 + y_0^4) - 13860a_{00}^6(x_0^6 + y_0^6) \right. \\ \left. + 1485a_{00}^4(x_0^8 + y_0^8) - 66a_{00}^2(x_0^{10} + y_0^{10}) + (x_0^{12} + y_0^{12}) \right)$$

A.2) Potentiels bidimensionnels à parité négative :

$$\langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^{\Omega, (-)} = \left(\begin{array}{l} A_0 - \frac{1}{16\Omega^3 a_{00}^4} A_1 B_1 + \frac{g}{256\Omega^5 a_{00}^8} A_2 B_2 - \frac{g^2 \alpha}{6144\Omega^7 a_{00}^{12}} A_3 B_3 \\ + \frac{g^3 \alpha^2}{393216\Omega^9 a_{00}^{16}} A_4 B_4 - \frac{g^4 \alpha^3}{5242880\Omega^{11} a_{00}^{20}} A_5 B_5 \end{array} \right)$$

Avec :

$$A_0 = \beta a_{00}^2 \left(1 - \Omega^2 + g a_{00}^2 (3a_{xx} + 2a_{yy} + 3(-2 + 10g\alpha a_{00}^2 (1 + 7g\alpha a_{00}^2 (-1 + 9g\alpha a_{00}^2)) + a_{yy})) \right)$$

$$A_1 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^2 (\beta\Omega + \sinh[\beta\Omega])$$

$$B_1 = \left(\begin{array}{l} 180g^2 \alpha a_{00}^6 - 1680g^3 \alpha^2 a_{00}^8 + 18900g^4 \alpha a_{00}^{10} \\ + a_{00}^2 (-24g + 12g a_{xx} + 8g a_{yy} + 12g a_{yy}) \\ + (-1 + \Omega^2 - 90g^2 \alpha a_{00}^4 + 840g^3 \alpha^2 a_{00}^6 - 9450g^4 \alpha^3 a_{00}^8) (x_0^2 + y_0^2) \\ - 2a_{00}^2 (-1 + \Omega^2 + 2g((-3 + 3a_{xx} + a_{yy})x_0^2 + (-3 + a_{yy} + 3a_{yy})y_0^2) \end{array} \right)$$

$$A_2 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^4 (6\beta\Omega + 8 \sinh[\beta\Omega] + \sinh[2\beta\Omega])$$

$$B_2 = \left(\begin{array}{l} 90g\alpha a_{00}^6 - 1260g^2\alpha^2 a_{00}^8 + 18900g^3\alpha^3 a_{00}^{10} + a_{00}^4(-6 + 3a_{xx} + 2a_{xy} + 3a_{yy}) \\ + (-1 + a_{xx})x_0^4 + 2a_{xy}x_0^2y_0^2 + (-1 + a_{yy})y_0^4 \\ + (-90g\alpha a_{00}^4 + 1260g^2\alpha^2 a_{00}^6 - 18900g^3\alpha^3 a_{00}^{88})(x_0^2 + y_0^2) \\ + a_{00}^2(-2(-3 + 3a_{xx} + a_{xy})x_0^2 - 2(-3 + a_{xy} + 3a_{yy})y_0^2) \\ + (15g\alpha a_{00}^2 - 210g^2\alpha^2 a_{00}^4 + 3150g^3\alpha^3 a_{00}^6)(x_0^4 + y_0^4) \end{array} \right)$$

$$A_3 = \csc\left[\frac{\beta\Omega}{2}\right]^6 (30\beta\Omega + 45\sinh[\beta\Omega] + 9\sinh[2\beta\Omega] + \sinh[3\beta\Omega])$$

$$B_3 = (1 + 14g\alpha a_{00}^2(-2 + 45g\alpha a_{00}^2)) \times \\ (30a_{00}^6 - 45a_{00}^4(x_0^2 + y_0^2) + 15a_{00}^2(x_0^4 + y_0^4) - (x_0^6 + y_0^6))$$

$$A_4 = \csc\left[\frac{\beta\Omega}{2}\right]^8 (420\beta\Omega + 672\sinh[\beta\Omega] + 168\sinh[2\beta\Omega] + 32\sinh[3\beta\Omega] + 3\sinh[4\beta\Omega])$$

$$B_4 = (-1 + 45g\alpha a_{00}^2) \times \\ (210a_{00}^2 - 420a_{00}^6(x_0^2 + y_0^2) + 210a_{00}^4(x_0^4 + y_0^4) - 28a_{00}^2(x_0^6 + y_0^6) + (x_0^8 + y_0^8))$$

$$A_5 = \csc\left[\frac{\beta\Omega}{2}\right]^{10} \left(30(42\beta\Omega + 70\sinh[\beta\Omega] + 20\sinh[2\beta\Omega] + 5\sinh[3\beta\Omega]) + 25\sinh[4\beta\Omega] \right. \\ \left. + 2\sinh[5\beta\Omega] \right)$$

$$B_5 = 1890a_{00}^{10} - 4725a_{00}^8(x_0^2 + y_0^2) + 3150a_{00}^6(x_0^4 + y_0^4) - 630a_{00}^2(x_0^6 + y_0^6) + 45a_{00}^2(x_0^8 + y_0^8) \\ - (x_0^{10} + y_0^{10})$$

B) Résultats numériques

$E_{ww}^{(0)}$ énergies données dans la Réf.[56].

$E_K^{(0)}$ énergies trouvées par la théorie VPT [57,58].

Tableau 3.2.1 : Energie Fondamentale dans le cas du potentiel $V^\mp(x,y)$,
pour différentes valeurs des paramètres α et g .

$$a_{xx} = a_{xy} = a_{yy} = 0$$

\mp	g	α	$E_{ww}^{(0)}$	$E_K^{(0)}$
+	0.001	20	1.0014253844	1.0014170839
-	0.001	20	0.9985656731	0.9985568866
+	0.004	2.5	1.0057798898	1.0057810371
-	0.004	2.5	0.9940652946	0.9940657565
+	0.005	5	1.0069639610	1.0069677572
-	0.005	2	0.9925557408	0.9925622227
+	0.015	2	1.0201141923	1.0201944500
-	0.01	2.2	0.9852940133	0.9853447817
+	0.01	1.5	1.0140306182	1.0140727282
-	0.012	2.3	0.9824733644	0.9825474031
+	0.01	1	1.0141864797	1.0142318345
-	0.016	2.2	0.9767438534	0.9768791154

Tableau 3.2.2 : Energie Fondamentale dans le cas du potentiel $V^\mp(x,y)$,
pour différentes valeurs des paramètres α et g .

$$a_{xx} = a_{xy} = a_{yy} = 1$$

\mp	g	α	$E_{ww}^{(0)}$	$E_K^{(0)}$
+	0.001	10	1.0034374037	1.0034317140
-	0.001	10	0.9965089808	1.0005266411
+	0.001	20	1.0034042942	1.0033984447
-	0.001	20	0.9965437910	1.0005605117
+	0.002	8	1.0067845189	1.0067869442
-	0.002	8	0.9930049414	1.0011021297
+	0.005	10	1.0161422377	1.0161868856
-	0.005	10	0.98265436	1.0032750611
+	0.005	5	1.0164760353	1.0165246456
-	0.005	5	0.9822339387	1.0029041496
+	0.01	5	1.0313122545	1.0314802964
-	0.008	3	0.9707587605	1.0046086045
+	0.03	0.5	1.1086911740	1.0879794074
-	0.007	2.3	0.9744314802	1.0038586990
+	0.01	0.1	1.0325879019	1.0327955998
-	0.004	3	0.9857150463	1.0021538950

Tableau 3.2.3. : Energie Fondamentale dans le cas du potentiel $V^\mp(x,y)$,
pour différentes valeurs des paramètres α et g .

$$a_{xx} = a_{yy} = 1, a_{xy} = 0.5$$

\mp	g	α	$E_{ww}^{(0)}$	$E_K^{(0)}$
+	0.1	0.1	1.2169627	1.22139690
-	0.002	8	0.9935195	1.00060390
+	0.002	8	1.0062978	1.00629956
-	0.003	5	0.9901941	1.00089961
+	0.003	5	1.0093927	1.00940653
-	0.004	4	0.9868374	1.00121508
+	0.004	4	1.0124288	1.01245781
-	0.005	2.5	0.9833457	1.00146084
+	0.01.	2.5	1.0297046	1.02987872

Tableau 3.2.4 : Energie Fondamentale dans le cas du potentiel $V^\mp(x,y)$,
pour différentes valeurs des paramètres α et g .

$$a_{xx} = a_{yy} = 0 ; a_{xy} = 0.25$$

\mp	g	α	$E_{ww}^{(0)}$	$E_K^{(0)}$
+	0.001	10	1.0015831	1.00157501
-	0.001	10	0.9984055	0.99864838
+	0.004	4	1.0061891	1.00618987
-	0.004	4	0.9936389	0.99466252
+	0.1	0.1	1.1248859	1.12687304
-	0.01	2.5	0.9840703	0.98677239
+	0.1	0.5	1.1183981	1.11787537
-	0.015	2.2	0.9760921	0.98031738

3.2.3 Potentiels tridimensionnels (3.3):

Pour le cas tridimensionnel, on applique le potentiel effectif classique au premier ordre :

$$W_1^{(3)\Omega}(\vec{r}_a) = \frac{3}{2\beta} \ln \frac{\sinh(\beta\Omega)}{\beta\Omega} + \frac{\Omega}{\beta} (x_a^2 + y_a^2 + z_a^2) \tanh \frac{\beta\Omega}{2} + \frac{1}{\beta} \langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^{\Omega}, \quad (3.10)$$

L'action dans (3.10) est :

$$\langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^{\Omega} = \frac{1}{\rho_0^{\Omega}(\vec{r}_a)} \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_{-\infty}^{\infty} d^2 z_1 V_{\text{int}}(\vec{z}_1) \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2 \det a^2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{k,l=0}^1 \vec{z}_k^T a_{kl}^{-2} \vec{z}_l \right], \quad (3.11)$$

où le vecteur position \vec{z}_1 est donné par :

$$\vec{z}_1 = \begin{pmatrix} z_{10} \\ z_{11} \\ z_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \vec{z}_1^T = (z_{10}, z_{11}, z_{12}) = (x_1, y_1, z_1). \quad (3.12)$$

Quant au potentiel d'interaction il est défini par :

$$V_{\text{int}}(\vec{z}_1) = V(\vec{z}_1) - \frac{1}{2} \Omega^2 \vec{z}_1^2. \quad (3.13)$$

Nous obtenons les résultats suivants :

A) Résultats analytiques

A.1) Potentiels tridimensionnels à parité positive :

$$\langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^{\Omega, (+)} = \left(\begin{array}{l} A_0 - \frac{1}{16\Omega^3 a_{00}^4} A_1 B_1 + \frac{g}{256\Omega^5 a_{00}^8} A_2 B_2 - \frac{g^2 \alpha}{6144\Omega^7 a_{00}^{12}} A_3 B_3 \\ + \frac{g^3 \alpha^2}{393216\Omega^9 a_{00}^{16}} A_4 B_4 - \frac{g^4 \alpha^3}{5242880\Omega^{11} a_{00}^{20}} A_5 B_5 + \frac{g^5 \alpha^4}{251658240\Omega^{13} a_{00}^{24}} A_6 B_6 \end{array} \right)$$

Avec :

$$A_0 = \frac{\beta a_{00}^2}{2} \left(3 - 3\Omega^2 + 2g a_{00}^2 \left(3a_{xx} + 2a_{xy} + 2a_{xz} + 3a_{yy} + 2a_{yz} + 3a_{zz} \right. \right. \\ \left. \left. + \left(9(1 + 5g\alpha a_{00}^2 (-1 + 7g\alpha a_{00}^2 (1 + 9g\alpha a_{00}^2 (-1 + 11g\alpha a_{00}^2)))) \right) \right) \right)$$

$$A_1 = \text{csc} \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^2 (\beta\Omega + \sinh[\beta\Omega])$$

$$B_1 = \left(\begin{array}{l} +374220g^5\alpha^4a_{00}^{12} + (\Omega^2 - 1)(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2) + 30g^2\alpha a_{00}^6(-9 - 28g\alpha(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2)) \\ + 5670g^4\alpha^3a_{00}^{10}(-5 - 22g\alpha(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2)) + 630g^3\alpha^2a_{00}^8(4 + 15g\alpha(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2)) \\ + 2ga_{00}^4 \left(\begin{array}{l} 18 + 6a_{xx} + 4a_{xy} + 4a_{xz} + 6a_{yy} + 4a_{yz} + 6a_{zz} \\ + 45g\alpha(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2) \end{array} \right) \\ - a_{00}^2 \left(\begin{array}{l} 3(\Omega^2 - 1) + 4g \left(\begin{array}{l} (3 + 3a_{xx} + a_{xy} + a_{xz})x_0^2 + (3 + a_{xy} + 3a_{yy} + a_{yz})y_0^2 \\ + (3 + a_{xz} + a_{yz} + 3a_{zz})z_0^2 \end{array} \right) \end{array} \right) \end{array} \right)$$

$$A_2 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^4 (6\beta\Omega + \sinh[\beta\Omega]\sinh[2\beta\Omega])$$

$$B_2 = \left(\begin{array}{l} 467775g^4\alpha^4a_{00}^{12} + a_{00}^2(-2(3 + 3a_{xx} + a_{xy})x_0^2 - 2(a_{xy} + 3(1 + a_{yy}))y_0^2) \\ + (1 + a_{xx})x_0^4 + 2a_{yz}y_0^2z_0^2 + (1 + a_{yy})y_0^4 + (1 + a_{zz})z_0^4 + 2x_0^2(a_{xy}y_0^2 + a_{xz}z_0^2) \\ + 28350g^3\alpha^3a_{00}^{10}(-1 - 11g\alpha(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2)) \\ + a_{00}^2 \left(\begin{array}{l} -2(3 + 3a_{xx} + a_{xy} + a_{xz})x_0^2 - 2(3 + a_{xy} + 3a_{yy} + a_{yz})y_0^2 - 2(3 + a_{xz} + a_{yz} + 3a_{zz})z_0^2 \\ - 15g\alpha(x_0^4 + y_0^4 + z_0^4) \end{array} \right) \\ + 45g\alpha a_{00}^6(-3 + 14g\alpha(-2(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2) - 5g\alpha(x_0^4 + y_0^4 + z_0^4))) \\ + a_{00}^4 \left(\begin{array}{l} 9 + 3a_{xx} + 2a_{xy} + 2a_{xz} + 3a_{yy} + 2a_{yz} + 3a_{zz} \\ + 30g\alpha(3(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2) + 7g\alpha(x_0^4 + y_0^4 + z_0^4)) \end{array} \right) \\ + 945g^2\alpha^2a_{00}^8(2 + 5g\alpha(4(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2) + 11g\alpha(x_0^4 + y_0^4 + z_0^4))) \end{array} \right)$$

$$A_3 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^6 (30\beta\Omega + 45\sinh[\beta\Omega] + 9\sinh[2\beta\Omega] + \sinh[3\beta\Omega])$$

$$B_3 = (-1 + 14g\alpha a_{00}^2(2 + 45g\alpha a_{00}^2(-1 + 22g\alpha a_{00}^2))) \times \\ (45a_{00}^6 - 45a_{00}^4(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2) + 15a_{00}^2(x_0^4 + y_0^4 + z_0^4) - (x_0^6 + y_0^6 + z_0^6))$$

$$A_4 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^8 (420\beta\Omega + 672\sinh[\beta\Omega] + 168\sinh[2\beta\Omega] + 32\sinh[3\beta\Omega] + 3\sinh[4\beta\Omega])$$

$$B_4 = (1 + 45g\alpha a_{00}^2(-1 + 33g\alpha a_{00}^2)) \times \\ (315a_{00}^8 - 420a_{00}^6(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2) + 210a_{00}^4(x_0^4 + y_0^4 + z_0^4) - 28a_{00}^2(x_0^6 + y_0^6 + z_0^6) \\ + (x_0^8 + y_0^8 + z_0^8))$$

$$A_5 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^{10} \left(30(42\beta\Omega + 70 \sinh[\beta\Omega] + 20 \sinh[2\beta\Omega] + 5 \sinh[3\beta\Omega]) + 25 \sinh[4\beta\Omega] \right. \\ \left. + 2 \sinh[5\beta\Omega] \right) \\ B_5 = (-1 + 66g\alpha a_{00}^2) \times \\ \left(1890a_{00}^{10} - 4725a_{00}^8(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2) + 3150a_{00}^6(x_0^4 + y_0^4 + z_0^4) - 630a_{00}^4(x_0^6 + y_0^6 + z_0^6) \right. \\ \left. + 45a_{00}^2(x_0^8 + y_0^8 + z_0^8) - (x_0^{10} + y_0^{10} + z_0^{10}) \right)$$

$$A_6 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^{12} \left(13860\beta\Omega + 23760 \sinh[\beta\Omega] + 7425 \sinh[2\beta\Omega] + 2200 \sinh[3\beta\Omega] \right. \\ \left. + 495 \sinh[4\beta\Omega] + 72 \sinh[5\beta\Omega] + 5 \sinh[6\beta\Omega] \right) \\ B_6 = \left(31185a_{00}^{12} - 62370a_{00}^{10}(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2) + 51975a_{00}^8(x_0^4 + y_0^4 + z_0^4) \right. \\ \left. - 13860a_{00}^6(x_0^6 + y_0^6 + z_0^6) + 1485a_{00}^4(x_0^8 + y_0^8 + z_0^8) - 66a_{00}^2(x_0^{10} + y_0^{10} + z_0^{10}) \right. \\ \left. + (x_0^{12} + y_0^{12} + z_0^{12}) \right)$$

A.2) Potentiels tridimensionnels à parité négative :

$$\langle A_{\text{int}}[\vec{r}] \rangle_{\vec{r}_a, \vec{r}_a}^{\Omega, (-)} = \left(A_0 - \frac{1}{16\Omega^3 a_{00}^4} A_1 B_1 + \frac{g}{256\Omega^5 a_{00}^8} A_2 B_2 - \frac{g^2 \alpha}{6144\Omega^7 a_{00}^{12}} A_3 B_3 \right. \\ \left. + \frac{g^3 \alpha^2}{393216\Omega^9 a_{00}^{16}} A_4 B_4 - \frac{g^4 \alpha^3}{5242880\Omega^{11} a_{00}^{20}} A_5 B_5 \right)$$

Avec :

$$A_0 = \beta a_{00}^2 \left(3 - 3\Omega^2 \right. \\ \left. + 2a_{00}^2 \left(2(a_{xy} + 2a_{yz}) + g \left(-3 + 2a_{xz} + 3a_{yy} \right. \right. \right. \\ \left. \left. + 3g \left(-2 + 5(1 + 2g)\alpha a_{00}^2 (1 + 7g\alpha a_{00}^2 (-1 + 9g\alpha a_{00}^2)) \right) \right. \right. \left. \left. + a_{xx} + a_{zz} \right) \right) \right)$$

$$A_1 = \csc \left[\frac{\beta\Omega}{2} \right]^2 (\beta\Omega + \sinh[\beta\Omega])$$

$$B_1 = \left(\begin{array}{l} + 30g^2\alpha a_{00}^6(3 + 6g + 28g\alpha(y_0^2 + g(x_0^2 + z_0^2))) + 9450g^4(1 + 2g)\alpha^3 a_{00}^{10} \\ + 210g^3\alpha^2 a_{00}^8 \left(\begin{array}{l} -4 + 8g \\ -45g\alpha(y_0^2 + g(x_0^2 + z_0^2)) \end{array} \right) + (\Omega^2 - 1)(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2) \\ + 2a_{00}^4 \left(\begin{array}{l} 4(a_{xy} + a_{yz}) + g \left(\begin{array}{l} -6 + 4a_{xz} + 6a_{yy} + 6g(-2 + a_{xx} + a_{zz}) \\ -45g\alpha(y_0^2 + g(x_0^2 + z_0^2)) \end{array} \right) \end{array} \right) \\ - a_{00}^2 \left(\begin{array}{l} 3(\Omega^2 - 1) + 4 \left(\begin{array}{l} a_{xy}(x_0^2 + y_0^2) + a_{yz}(y_0^2 + z_0^2) + 3g^2((-1 + a_{xx})x_0^2 + (-1 + a_{zz})z_0^2) \\ + g(3(-1 + a_{yy})y_0^2 + a_{xz}(x_0^2 + z_0^2)) \end{array} \right) \end{array} \right) \end{array} \right)$$

$$A_2 = \csc\left[\frac{\beta\Omega}{2}\right]^4 (6\beta\Omega + 8\sinh[\beta\Omega] + \sinh[2\beta\Omega])$$

$$B_2 = \left(\begin{array}{l} 9450g^4(1 + 2g)\alpha^3 a_{00}^{10} + g(-1 + a_{yy})y_0^4 + 2ga_{xz}x_0^2z_0^2 + 2(a_{xy}x_0^2 + a_{xz}z_0^2)y_0^2 \\ + g^2((-1 + a_{xx})x_0^4 + (-1 + a_{zz})z_0^4) \\ + 45g^2\alpha^2 a_{00}^6 \left(\begin{array}{l} 1 + 2g \left(\begin{array}{l} 1 + 7\alpha \left(\begin{array}{l} 2(y_0^2 + g(x_0^2 + z_0^2)) \\ + 5g\alpha(y_0^4 + g(x_0^4 + z_0^4)) \end{array} \right) \end{array} \right) \end{array} \right) \\ + 630g^3\alpha^2 a_{00}^8 (-1 - 2g - 30g\alpha(y_0^2(x_0^2 + z_0^2))) \\ + a_{00}^2 \left(\begin{array}{l} -2(a_{xy} + g(3g(-1 + a_{xy}) + a_{xz}))x_0^2 - 2(a_{xy} + 3g(-1 + a_{yy}) + a_{yz})y_0^2 \\ -2(a_{yz} + g(3g(-1 + a_{zz}) + a_{xz}))z_0^2 + 15g^2\alpha(y_0^4 + g(x_0^4 + z_0^4)) \end{array} \right) \\ + a_{00}^4 \left(\begin{array}{l} 2(a_{xy} + a_{yz}) \\ + g \left(\begin{array}{l} -3 + 2a_{xz} + 3a_{yy} + 3g \left(\begin{array}{l} -2 + a_{xx} + a_{zz} - 30\alpha(y_0^2 + g(x_0^2 + z_0^2)) \\ -70g\alpha(y_0^4 + g(x_0^4 + z_0^4)) \end{array} \right) \end{array} \right) \end{array} \right) \end{array} \right)$$

$$A_3 = \csc\left[\frac{\beta\Omega}{2}\right]^6 (30\beta\Omega + 45\sinh[\beta\Omega] + 9\sinh[2\beta\Omega] + \sinh[3\beta\Omega])$$

$$B_3 = (1 + 14g\alpha a_{00}^2(-2 + 45g\alpha a_{00}^2)) \\ (15(1 + 2g)a_{00}^6 - gx_0^6 - y_0^6 - gz_0^6 + 15a_{00}^2(y_0^4 + g(x_0^4 + z_0^4)) - 45a_{00}^4(y_0^2 + g(x_0^2 + z_0^2)))$$

$$A_4 = \csc\left[\frac{\beta\Omega}{2}\right]^8 (420\beta\Omega + 672\sinh[\beta\Omega] + 168\sinh[2\beta\Omega] + 32\sinh[3\beta\Omega] + 3\sinh[4\beta\Omega])$$

$$B_4 = (-1 + 45g\alpha a_{00}^2) \\ (105(1 + 2g)a_{00}^8 + y_0^8 + g(x_0^8 + y_0^8) - 28a_{00}^2(y_0^6 + g(x_0^6 + z_0^6)) \\ + 210a_{00}^4(y_0^4 + g(x_0^4 + z_0^4)) - 420a_{00}^6(y_0^2 + g(x_0^2 + z_0^2)))$$

$$A_5 = \csc\left[\frac{\beta\Omega}{2}\right]^{10} \left(30(42\beta\Omega + 70 \sinh[\beta\Omega] + 20 \sinh[2\beta\Omega] + 5 \sinh[3\beta\Omega]) \right. \\ \left. + 25 \sinh[4\beta\Omega] + 2 \sinh[5\beta\Omega] \right)$$

$$B_5 = \left(945(1+2g)a_{00}^{10} - g x_0^{10} - y_0^{10} - g z_0^{10} + 45a_{00}^2 (y_0^8 + g(x_0^8 + z_0^8)) \right. \\ \left. - 630a_{00}^4 (y_0^6 + g(x_0^6 + z_0^6)) + 3150a_{00}^6 (y_0^4 + g(x_0^4 + z_0^4)) - 4725a_{00}^8 (y_0^2 + g(x_0^2 + z_0^2)) \right)$$

B) Résultats numériques

Tableau 3.3.1 : Energie Fondamentale dans le cas du potentiel $V^\mp(x,y,z)$,
pour différentes valeurs des paramètres α et g .

$$a_{xx} = a_{yy} = a_{zz} = a_{xy} = a_{xz} = a_{yz} = 0$$

\mp	g	α	$E_k^{(0)}$
+	0.001	20	1.50212564
-	0.001	20	0.49926913
+	0.004	2.5	1.50867156
-	0.004	2.5	0.49702094
+	0.005	5	1.51045176
-	0.005	2	1.49267752
+	0.015	2	1.53029235
-	0.01	2.2	0.49264350
+	0.01	1.5	1.52110949
-	0.012	2.3	0.49123443
+	0.01	1	1.52134813
-	0.016	2.2	1.48837592

Tableau 3.3.2 : Energie Fondamentale dans le cas du potentiel $V^{\mp}(x,y,z)$,
pour différentes valeurs des paramètres α et g

$$a_{xx} = a_{yy} = a_{zz} = a_{xy} = a_{xz} = a_{yz} = 1$$

\pm	g	α	$E_k^{(0)}$
+	0.001	10	1.50588684
-	0.001	10	2.05715749
+	0.001	20	1.50583708
-	0.001	20	2.05716154
+	0.002	8	1.51163845
-	0.002	8	2.05735944
+	0.005	10	1.52779139
-	0.005	10	2.05802262
+	0.005	5	1.52829190
-	0.005	5	2.05797573
+	0.01	5	1.55384189
-	0.008	3	2.05858154
+	0.03	0.5	1.64831892
-	0.007	2.3	2.05835680
+	0.01	0.1	1.64947489
-	0.004	3	2.05835680

Tableau 3.3.3 : Energie Fondamentale dans le cas du potentiel $V^{\mp}(x,y,z)$,
pour différentes valeurs des paramètres α et g .

$$a_{xx} = a_{yy} = a_{zz} = 1, \quad a_{xy} = a_{xz} = a_{yz} = 0.5$$

\mp	g	α	$E_k^{(0)}$
+	0.1	0.1	1.54919410
-	0.002	8	1.83983754
+	0.002	8	1.51018043
-	0.003	5	1.83997601
+	0.003	5	1.51511929
-	0.004	4	1.84011828
+	0.004	4	1.52011402
-	0.005	2.5	1.84024752
+	0.01	2.5	1.54815827

Tableau 3.3.4 : Energie Fondamentale dans le cas du potentiel $V^{\mp}(x,y,z)$,
pour différentes valeurs des paramètres α et g .

$$a_{xx} = a_{yy} = a_{zz} = 0, \quad a_{xy} = a_{xz} = a_{yz} = 0.25$$

\mp	g	α	$E_k^{(0)}$
+	0.001	10	1.50254885
-	0.001	10	1.69638523
+	0.004	4	1.51001637
-	0.004	4	1.69521646
+	0.1	0.1	1.70256106
-	0.01	2.5	1.69288752
+	0.1	0.5	1.69240579
-	0.015	2.2	1.69098393

CONCLUSION

Dans ce travail, nous avons appliqué la théorie des perturbations variationnelles pour matrices densité [29,30] dans le but de déterminer l'énergie de l'état fondamental des classes de potentiels rationnels [45-56] de la forme (3.1), (3.2) et (3.3).

Composé de trois parties, ce mémoire commence, au chapitre 1 par une introduction au formalisme des intégrales de chemins, en définissant le propagateur, en montrant son rôle en mécanique quantique et ensuite en soulignant l'équivalence avec la fonction de partition de la mécanique statistique. Sachant que le calcul analytique exact du propagateur n'est pas toujours possible, nous avons présenté, dans la deuxième partie du chapitre 1, une alternative : la théorie des perturbations variationnelles [27,30], qui est une extension de l'approche variationnelle de Feynman-Kleinert [20] par l'apport de corrections systématiques [26,27].

Le chapitre 2 a été consacré au développement de la théorie des perturbations variationnelles pour matrices densité [29,30]. Après avoir défini le potentiel effectif classique de la théorie et qui est pratiquement impossible à calculer, nous avons utilisé l'inégalité de Jensen-Peierls (1.62) [13,27,28] pour introduire un potentiel effectif classique d'essai permettant une convergence systématique des calculs. Ceci nous a permis d'aboutir à la formule maculée de l'action (2.54) [30] et en déduire le potentiel effectif classique (2.55) qui conduit au calcul des énergies aux basses températures. Ce dernier possède les caractéristiques suivantes :

- Il permet l'obtention systématique de la convergence.
- Il tient compte des fluctuations quantiques et thermiques du système.
- Il permet de contourner le problème des potentiels à singularité (potentiel de Coulomb, potentiel de Yukawa..) [29,30].

Dans le chapitre 3, nous avons présenté les résultats obtenus [57,58], et nous les avons comparés, dans les cas des potentiels à une et deux dimensions, à ceux donnés par la littérature [55,56]. Il est aisé de constater que les résultats donnés par la théorie des perturbations variationnelles pour matrices densité sont en parfait accord avec ceux obtenus via d'autres méthodes.

Nous pouvons conclure, en tenant compte d'autres travaux [30,31,37-40] ayant appliqué la théorie des perturbations variationnelles pour matrices densité, que cette dernière est une méthode d'approximation efficace permettant, d'une part l'obtention systématique de la convergence au moment où les autres méthodes passent par des procédés mathématiques [41,42] pour le faire, et d'autre part, la résolution du problème des singularités dans le cas de certains potentiels [30].

Comme perspectives, il serait intéressant d'étendre la théorie au cas des forts couplages, au calcul des énergies des états excités ainsi qu'à l'étude des potentiels rationnels complexifiés.

REFERENCES

1. Feynman R.P., Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics, *Rev. Mod. Phy*, 20 (1948) 367-387.
2. Dirac P.A.M., *Pysikalische Zeitschrift der Sowjetnion* 3, (1933) 64.
3. Feynman R.P., The principle of least action in quantum mechanics, Ph.D. Thesis, Princeton University, May 1942.
4. Elbaz E., *Quantique*, Ellipse, Paris, 1995.
5. Dirac P.A.M., *The principales of Quantum Mechanics*, Oxford Univ. Press, Oxford, 1958.
6. Landau L., Lifchitz E., *Mécanique Quantique, Théorie non Relativiste, Tome III*, troisième édition, Edition Mir, Moscou, 1980.
7. Cohen-Tannoudji C., Diu B., Laloë F., *Mécanique Quantique, Tome I-II*, Edition Hermann, Paris, 1973.
8. Hors Serie, *Computational Physics*, *Physik Journal* 3 (2004) Nr. 5.
9. Reif F., *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, McGraw-Hill, New-York, 1965.
10. Landau L., Lifchitz E., *Physique Statistique, Tome V, Deuxième Ed.*, Edition Mir, Moscou, 1967.
11. Lagoutine A., *Eléments de Statistique Quantique*, OPU, Alger, 1985.
12. Feynman R.P., Hibbs A.R., *Quantum Mechanics and Path Integral*, McGraw, New-York, 1965.
13. Kleinert H., *Path Integral in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and financial Markets*, Third ed., World Scientific, Singapore, 2005.
14. Kashiwa T., Ohnuki Y., Suzuki M., *Path Integral Methods*, Clarendon Press-Oxford, 1997.
15. Khandekar D.C., Lawande S.V., Bhagwat B.V., *Path Integral Methods and its applications*, World Scientific, Singapore, 1993.
16. Grosche C., Steiner F., *Handbook of Feynman Path Integral*, Springer, Berlin, 1998.
17. Inomata A., Junker. G., A history of Feynman's sum over histories in quantum mechanics, *quant-ph / 9811023*.

18. Feynman R.P., Phys. Rev. 97 (1955) 660.
19. Duru I. M., Kleinert H., Phys. Lett. B 84 (1979) 30.
20. Feynman R.P., Kleinert H., Phys. Rev, A 34 (1986) 5080.
21. Giachetti R., Toghetti V., Phys. Rev. Lett. 55 (1985) 912;
22. Giachetti R., Toghetti V., Intern J. Magn. Mater. 54-57 (1986) 861.
23. Giachetti R., Toghetti V., Vaia R., Phys. Rev. B 33 (1986) 7647;
24. Giachetti R., Toghetti V., Vaia R., Phys. Rev. A 37 (1988) 2165;
25. Giachetti R., Toghetti. V., Vaia. R., Phys. Rev. A 38 (1988) 1521,1638.
26. Kleinert H., Phys. Lett. B 280 (1992) 251.
27. Kleinert H., Phys. Lett. A 173 (1993) 332.
28. Kleinert H., Kürzinger W., Pelster A., J. Phys. A 31 (1998) 8307.
29. Bachmann M., PH-D Thesis, Fachbereich Physik, Freie Universität, Berlin.
30. Bachmann M., Kleinert H., Pelster A., Phys. Rev. A 60 (1999) 3429.
31. Weissbach F., Pelster A., Hamprecht B., Phys. Rev. E 66 (2002) 036129.
32. Brandt S.F., Kleinert H., arXiv: quant-ph / 0406206.
33. Brandt S.F., Ph.D Thesis, Fachbereich Physik, Freie Universität, Berlin, (Mai 2004).
34. Bentaiba M., Chetouani L., Hammann T.F., Naturforsch Z., A 47 (1992) 1013.
35. Bentaiba M., Chetouani L., Hammann T.F., Phys. Lett. A 189 (1994) 433.
36. Bentaiba M., Thèse de Doctorat es-Sciences, Physique, Université de Blida, 1997.
37. Bentaiba M., Chetouani L., Mazouz A., Phys. Lett. A 295 (2002) 13.
- 38 Bentaiba M., International Conference on Theoretical Physics, Paris, UNISCO, July 22nd-27th 2002.
39. Bentaiba M., Yahiaoui S-A., Chetouani L., Phys. Lett. A 331 (2004) 175.
40. Bentaiba M., 4th Workshop in Theoretical Physics, 14-16 June (1999), Constantine, Algeria.
41. Bender C.M., Orszag S.A., Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers, McGraw-Hill, New-York, 1978.
42. Della Dora J., Crescenzo C., Padé Approximation and its applications, ed. L. Wuytack, Springer, Berlin, 1979.
43. Gradshtey I.S., Ryzhik I.M., Table of Integrals, Series and Products, Academic Press, London, 1965.
44. Arfken G., Mathematical methods for Physicist, Second Edition, Academic Press, New York, 1970.
45. Biswas S.N. et al., J. Math. Phys. 14, 1190 (1973).

46. Mitra A.K., J. Math. Phys. 19, 2018 (1978).
47. Whitehead R.R. et al., J. Phys. A15 (1982) 1217.
48. Scherrer H., Risken H. and Leiber T., Phys. Rev. A38 (1988) 3949.
49. Auberson G., Commun. Math. Phys. 84(1982)531.
50. Auberson G. and Boissiere T., Nuovo Cimento B 75 (1983) 105.
51. Flessas G. P., Phys. Lett. A 100 (1984) 383.
52. Witwit M.R.M., Killingbeck J. P., Can. J. Phys. 70 (1992) 1261.
53. Handy. C. R. and al. J. Phys. A 26 (1993) 2649.
54. Witwit. M.R.M., Journal of Physics A 24 (1991) 4535.
55. Witwit. M.R.M., Journal of Pure and Applied Physics Vol.32 (1994) 291.
56. Witwit. M.R.M., Killingbeck J. P., Phys. Lett. A189 (1994) 429.
57. Bentaiba M., Zerguini H, J.S.A.F. 2004, Colloque de Ouargla (11-13 Décem 2004).
58. Bentaiba M., Zerguini H., C.N.P.A. 2004 , Congrès de Tizi-Ouzou (5-7 Décem 2004).