

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche
Scientifique
Université de Djilali Bounaama de Khemis Miliana
جامعة الجليلي بونعاما خميس مليانة
Faculté des Sciences et de la Technologie
Département des Sciences de la Matière



Mémoire de fin d'étude
En vue de l'obtention d'un diplôme de **Master** en Physique
Spécialité Physique Théorique

Thème :

**Application des inégalités de Bertlmann-Martin et la méthode
des corrections systématiques sur un potentiel central.**

Réalisé par :

- MEKLATI Sabiha
- NOUARI Hizia

SOUTENU LE : 24 /06 /2018

Devant le jury composé de :

A. Diaf	Président	Professeur	U. D. B. Khemis-Miliana
H. Boukabcha	Encadreur	M. C. B	U. D. B. Khemis-Miliana
M. Douici	Examineur	M. C. B	U. D. B. Khemis-Miliana

Année Universitaire 2017/2018

REMERCIEMENTS

Sous la direction de Monsieur Hocine BOUKABCHA,
maitre de conférence B à l'université Djilali
Bounaama, que ce travail a été réalisé.

Nous exprimons notre gratitude pour son
encadrement, sa patience et ses conseils judicieux
malgré leur plan de charge.

En quelques simples mots, Merci pour votre
confiance.

Pour cela, nous voulons remercier du fond du cœur
les membres de jury car votre acceptabilité de juger
ce mémoire, nous remercions *Monsieur Ahmed Diaf*
d'avoir présidé le jury et nous adressons également
notre remerciements à *Monsieur Mohamed Douici*
d'avoir examiné ce mémoire.

Un remerciement particulier ira à nos parents, tous
les membres de notre famille et toutes les personnes
qui ont eu partagé à construire ce travail.

En fin, nous remercions tous nos amis et nos
collègues pour leurs encouragements avec toute
légèreté.

Dédicaces

Je dédie ce travail à :

- Mon Papa **Abd el Kader** et maman **Halima** pour leurs conseils et leurs sacrifices.
- Mes frères **Yousef** et **Toufik** qui ont suivi ce travail avec grande intérêt.
- Mon binôme **Sabiha.**
- Mon grand père **Larbi** et ma grande mère **Arbia**
- Mes oncles **Mohamed** et **Toufik** et toutes la famille **CHETTAH.**
- Ainsi ma chère tante **Samia.**
- A mes amis et mes collègues sans exception.

NOUARI hizia



Dédicace :

A mes chers parents *Boualem* et *Chafia* qui ont été toujours là pour rester avec moi.

A mon respectueux mari *Mohamed Hamdaoui* vraiment je ne trouve aucune dédicace pour lui pour sa patience au cours de ce travail, sans oublier sa mère *Djamila*.

A mes belles sœurs *Hamida* et *Lamia* et leurs enfants *Ahmed, Madjid, Anes, Isaak* et *katkouta Israa*.

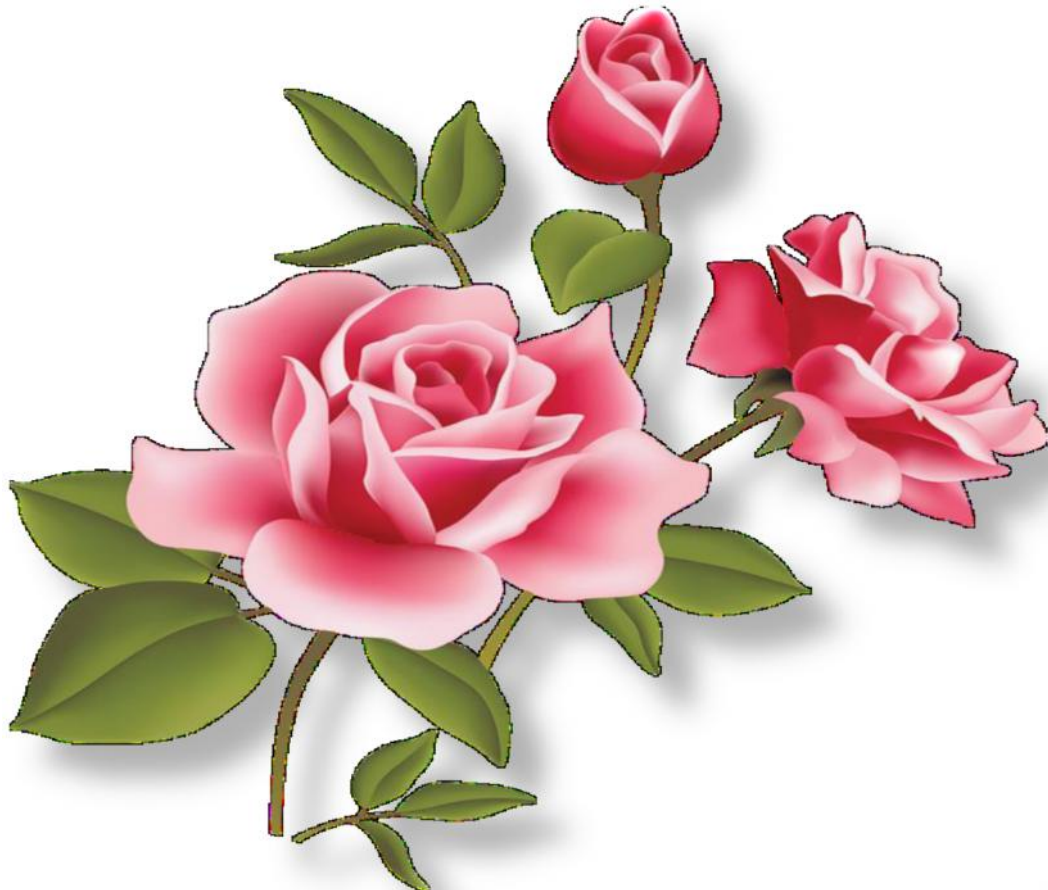
A mes couteux frères *Toufik, Hakim, Abdenour* et *Nasro* et leurs petits *Mohamed, Nada, Siraj* et *Tadjou*.

A mon binôme *Hizia*

Sans oublier ma chère amie *Sabrina Bakbak*

A tous mes collègues, mes amis et mes proches un par un.

Meklati Sabiha



مكانيك

في هذا العمل قمنا بـ كيفية تطبيق تقنيات تـ
، قمنا بكتابة شكل ناشر فيمان و تقويم قرين و .

و قمنا بعرض طريقة بار تلمان و مارتين من اجل حساب طيف الطاقات بواسطة
و طاقة الحالة الأساسية.

و من ثم قمنا بإحداث تصحيحات ملقبة بالنظامية بغرض تحسين نتائج ، هذه التصحيحات عبارة عن
حتويات ذي الرتبة الثالثة على حيث قمنا بحساب طاقة الحالة الأساسية
. المرور إلى محتوى ذي رتبة أعلى من الثلاثة يؤدي إلى
الأسى تؤدي إلى نتائج أقل تعقيدا.

Résumé :

Dans ce travail, nous avons étudié l'application des techniques basées sur les intégrales de chemins dans la résolution des problèmes de la mécanique quantique. Nous avons présenté la forme du propagateur de Feynman, et la fonction de Green puis la fonction de partition.

Nous avons exposé la méthode des inégalités de Bertlman-Martin pour calculer de tout le spectre des énergies via la fonction d'onde et l'énergie de l'état fondamental.

Ensuite, nous avons introduit des corrections dites systématiques afin d'améliorer nos résultats, ces corrections sont des cumulant d'ordre 3 en fonction de degrés de l'action A, tel que nous avons calculé l'énergie de l'état fondamentale pour un potentiel quartique anharmonique. Le passage aux cumulant d'ordre supérieure à trois conduit à des calculs compliqués mais sous forme exponentielle conduit à des résultats moins compliqués.

Abstract:

In this work, we have applied the technics depends on path integrals in solutions of problems in quantum mechanics. We have presented the Feynman's propagator, the Green function and the partition function.

We have exposed the of Bertlmann-Martin inequalities method to calculate the spectrum of energies by the wave function and the energy of fundamental energy case.

After that, we were introduced the corrections called systematic in the aim to ameliorate our results. These corrections are the cumulant in the third degree, in term of Action degree Where we calculated the energy of fundamental case of anharmonic quartic potential. The passage at cumulant in degree high then three will lead at complex calculs but in the exponential form will lead at less complex results.

Table des matières

Introduction	3
1 Généralités sur le formalisme de Feynman	5
1.1 Introduction	5
1.2 Expérience de Feynman	5
1.3 Amplitude de probabilité	6
1.4 Le propagateur du système	7
1.5 Intégrales de chemins dans l'espace des phases par la méthode de Lie-Trotter	8
1.6 La fonction de Green	10
1.7 La fonction de partition en physique statistique	10
1.8 La fonction de partition en termes d'intégrale de chemins	11
2 Les inégalités de Bertlman et Martin	13
2.1 Introduction	13
2.2 Les relations de récurrences entre les moments de la densité du fondamental	13
2.2.1 Cas unidimensionnel ($D = 1$)	13
2.2.2 Cas tridimensionnel ($D = 3$)	16
2.2.3 Description de la méthode des inégalités de Bertlman-Martin	16
2.3 Application de la méthode des inégalités de B-M sur le potentiel de Pöschl-Teller	19
2.3.1 1 ^{er} cas à une dimension	19
2.3.2 2 ^{ième} cas à 3 dimension	21
2.3.3 Discussion	22
3 Les corrections systématiques	23
3.1 Introduction	23

3.2	Fonction de corrélation et de fonctionnelle génératrice	23
3.3	La fonction de Green	25
3.4	Règle de wick	26
3.5	Développement perturbatif de la fonction de partition	27
3.6	Application au potentiel anaharmonique	29
3.7	Résultats et discussions	34
3.8	La fonction de partition à D dimensions	36
3.8.1	A basse température	39
	Conclusion	44

Introduction

Vers la fin du 19^{ième} siècle, et le début du 20^{ième} siècle, la mécanique classique a démontré que plusieurs problèmes non expliqués dans l'interprétation de ses limites, tels le rayonnement du corps noir et l'effet photoélectrique...etc. Pour lever le voile sur toutes les ambiguïtés, les physiciens comme Planck, De Broglie, Einstein ont fourni de généreux efforts avant d'arriver à une nouvelle théorie plus adaptée à ce genre de problèmes. Un formalisme de la physique mathématique s'élaborer par Schrödinger permet à l'explication des phénomènes naturels, ce dernier formalisme prend le nom de physique quantique, qui avait deux essentiels formalismes: le formalisme matriciel de Heisenberg, tel que Heisenberg en 1926 a démontré que si les énergies étaient définies comme les valeurs propres de l'opérateur hamiltonien H , les mêmes règles de quantification pouvait être obtenues pour un système séparable. Le deuxième formalisme, c'est le formalisme différentiel introduit par Schrödinger en 1927 qui avait connu le nom "la mécanique ondulatoire" où Schrödinger a formulé une autre approche basée sur le concept de fonction d'onde dont l'état d'un système est repéré par une fonction d'onde dont l'évolution temporelle est régie par l'équation:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t). \quad (0.1)$$

Ainsi, que le nom moins célèbre théoricien Richard Feynman a pu construire un troisième formalisme lagrangien et fonctionnel basé sur le principe de la superposition [1] quantique est très tôt manifeste, et qui a introduit dans sa thèse soutenue en Mai 1942, les intégrales de chemin en physique portant sur la mécanique quantique basée sur le lagrangien a de nombreux avantages, tous ces résultats ne seront publiés qu'en 1948, à cause de la deuxième guerre mondiale.

L'intégrale de chemin est un outil puissant car elle met les deux mécaniques classique et quantique de façon très explicite, le monde de la physique quantique est non local et très vaste.

Feynman introduit des notions ou des outils de la mécanique classique telle que l'action S , la trajectoire classique, le Lagrangien L et d'autre part, l'amplitude de probabilité $U(x_b, t_b, x_a, t_a)$ pour aller d'un point espace-temps (x_a, t_a) à un autre point (x_b, t_b) est proportionnelle à $\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$, où S est l'action, sous forme: $S = \int L dt$, l'amplitude totale appelée "propagateur" est la somme des amplitudes relatives à tous les chemins possibles.

La formulation lagrangienne de la théorie de Feynman a également facilité le passage au cas relativiste [4, 5, 6, 7] et à la théorie des champs.

En plus, l'analogie formelle qui existe entre les intégrales de Feynman et celle de Wiener [8], a permis d'étendre les champs d'application à la physique statistique [9, 10], car nous pouvons en effet calculer à partir du propagateur de Feynman qui contient toute l'information sur le système considéré, la fonction de partition, l'énergie libre, la fonction d'onde et le spectre des énergies [10].

Le succès de calculer le propagateur associé au problème de l'atome d'hydrogène en 1979 [11] faire une révérence définitive dans le développement du formalisme de l'intégrale de chemin.

En fin, le formalisme de Feynman trouve une large application en géophysique et dans le domaine des sciences financières [9].

L'application des intégrales de parcours n'anordit pas la mécanique quantique non relativiste, mais il inclut aussi la mécanique quantique relativiste [12], la Théorie des Champs de Jauge [13, 14], la Théorie de la Quantification Stochastique [15], la Théorie des Intentions [9, 16] ...

L'objet de ce travail s'inscrit dans le cadre de l'application des techniques basées sur les intégrales de chemins dans la résolution des problèmes de la mécanique quantique.

Nous avons conçu un mémoire comportant trois chapitres.

Le premier chapitre constitue un rappel historique sur l'intégrale de chemins et ses applications, tel que nous écrivons le propagateur de Feynman sous forme discrète sur des intervalles de largeur ε , et on présenter la fonction de Green puis la fonction de partition.

Dans le second chapitre, nous exposerons la méthode des inégalités de Bertlman-Martin pour calculer de tout le spectre des énergies via la fonction d'onde et l'énergie de l'état fondamental.

Le troisième chapitre sera consacrée à introduction des corrections systématiques qui sont appliquées à l'oscillateur à 1 dimension et à 3 dimensions anharmoniques (*OAH*) .

Enfin, nous terminerons notre travail par une conclusion générale.

1

Généralités sur le formalisme de Feynman

1.1 Introduction

Les intégrales de chemin paraient être très élégantes et attractives puisqu'elles s'adaptent d'une manière irréprochable au calcul des perturbations, aux méthodes numériques et l'approximation semi-classique.

Nous présentons dans ce chapitre, les notions du propagateur, la fonction de Green et la fonction de partition de l'oscillateur harmonique, et en générale les intégrales de chemin de Feynman, ces derniers ont ramené le calcul de l'intégrale fonctionnelle [17] à une intégrale multiple de dimension N .

Alors, le propagateur de Feynman est parmi les notions élémentaires où ce physicien a devisé un intervalle en N intervalles de temps égaux de largeur ε [18, 19].

1.2 Expérience de Feynman

On peut l'appeler aussi «expérience de pensée de Feynman», inspiré de l'expérience des interférences de «Young» [20]. Afin de construire son formalisme, Feynman a imaginé un dispositif expérimental dans le quelle la source lumineuse monochromatique est remplacée par un canon à électron, ces dernières sont captées par un détecteur peut être placé à des distances x variées du centre afin d'enregistrer l'arrivée de chaque électron émis par le canon, en considérant une expérience à deux (02) fentes. Les résultats enregistrées sur l'écran sont différent, car si les deux fentes sont ouvertes, l'intensité est $P(x)$, supposons qu'on ferme

une (01) de ces fentes et on laisse la deuxième (02) ouverte; l'intensité enregistrée $P_2(x)$ par contre qu'on ferme la fente (02) et on laisse la première (01) fente ouverte; l'intensité est $P_1(x)$.

Tous ces résultats sont représentés sur la figure ci-dessous:

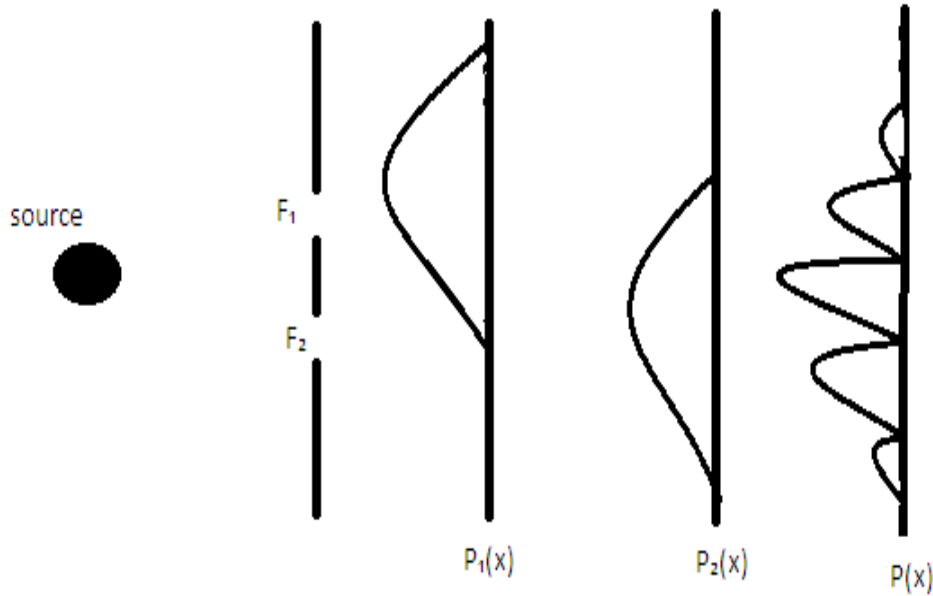


Figure 01: Les probabilités $P_1(x)$, $P_2(x)$ et $P(x)$ pour qu'une particule soit détectée à la position x

Alors, il est clair d'après ces résultats de la figure que ceci permet de constater que :

$$P(x) \neq P_1(x) + P_2(x). \quad (1.1)$$

En conclusion, si on compare cette expérience à celle de Young, on peut dire les électrons ont interféré, alors, les électrons peuvent être considérées comme une source lumineuse monochromatique.

1.3 Amplitude de probabilité

Pour donner une explication de problème précédent, Feynman a eu l'idée d'associer une amplitude de probabilité $\Phi(x)$, et en disant que $P(x)$ est en fait le module au carré du $\Phi(x)$ et $\Phi(x)$ est « l'amplitude de probabilité d'arriver en x », c'est à dire:

$\Phi_1(x)$: l'amplitude de probabilité des électrons détectés sur l'écran en passant par la fente 1.

$\Phi_2(x)$: l'amplitude de probabilité des électrons détectés sur l'écran en passant par la fente 2.

Ces dernières données par :

$$P(x) = |\Phi(x)|^2 \quad \text{avec :} \quad \Phi(x) = \Phi_1(x) + \Phi_2(x) \quad (1.2)$$

$$\begin{aligned} P_1(x) &= |\Phi_1(x)|^2, \\ P_2(x) &= |\Phi_2(x)|^2. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Si en imaginant un dispositif comportant une infinité de fentes; Ceci conduit à l'amplitude globale correspondant à tous les chemins, tel que :

$$\Phi_G(x) = \sum_{\substack{\text{sur tous} \\ \text{les chemins}}} \Phi(x(t)). \quad (1.4)$$

1.4 Le propagateur du système

Dans le formalisme des intégrales des chemins, la dernière expression (1.4) de l'amplitude global est appelée « *propagateur* » dont la forme :

$$K(x'', t''; x', t') = \sum_{\substack{\text{sur tous} \\ \text{les chemins} \\ \text{possibles}}} \Phi(x(t)). \quad (1.5)$$

Le propagateur d'une particule de masse m se mouvant dans un potentiel unidimensionnel $V(x)$ entre deux instants voisins $[t_{i-1}, t_i]$, selon le résultat de Dirac [3] s'écrit :

$$K(x_i, t_i; x_{i-1}, t_{i-1}) = \left[\frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{m} \right] \exp \left\{ \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{m(x_i - x_{i-1})^2}{2\varepsilon^2} - V(x_i) \right] \right\}, \quad (1 \leq i \leq N) \quad (1.6)$$

avec : $t'' - t' = N\varepsilon$ pour chaque instant $t_i = t' + i\varepsilon$ est associé la position $x_i = x(t_i)$.

En outre, nous pouvons démontrer que le propagateur permet de calculer la fonction d'onde à l'instant t'' à partir de celle de l'instant t' pour que :

$$K(x'', t''; x', t') = \langle x'' | U(t'', t') | x' \rangle, \quad (1.7)$$

où $U(t'', t')$ est l'opérateur d'évolution dans le temps.

Alors:

$$\Psi(x'', t'') = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x', t''; x', t') \Psi(x', t') dx', \quad (1.8)$$

ainsi, nous pouvons exprimer le propagateur global comme :

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_N, x_{N-1}; \varepsilon) \prod_{i=1}^{N-1} K(x_i, x_{i-1}; \varepsilon) dx_i. \quad (1.9)$$

Quand on remplace $K(x_i, x_{i-1}; \varepsilon)$ par son expression (1.6), ceci conduit au propagateur de Feynman [18] :

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{m} \right]^{1/2} \int \left[\prod_{i=1}^{N-1} \frac{dx_i}{\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{1/2}} \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N S(x_i, x_{i-1}; \varepsilon) \right], \quad (1.10)$$

avec : $S(x_i, x_{i-1}; \varepsilon)$ c'est l'action relative à l'intervalle de temps $[t_{i-1}, t_i]$ où sa formule donnée par :

$$S(x_i, x_{i-1}; \varepsilon) = \frac{m(x_i - x_{i-1})^2}{2\varepsilon} - \varepsilon V(x_i). \quad (1.11)$$

Dans la littérature, le propagateur de Feynman s'écrit d'une manière condensée comme:

$$K(x'', t''; x', t') = \int Dx(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x(t)) \right], \quad (1.12)$$

avec :

$$Dx(t) = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N-1}{2}} \prod_{i=1}^{N-1} dx_i, \quad (1.13)$$

$Dx(t)$ représente la mesure d'intégration de tous les chemins possibles.

1.5 Intégrales de chemins dans l'espace des phases par la méthode de Lie-Trotter

Le propagateur de Feynman entre les deux états $|x''\rangle$ et $|x'\rangle$ de l'espace de la configuration peut être exprimé comme :

$$K(x'', t''; x', t') = \left\langle x'' \left| \exp \left[-\frac{i}{\hbar} T H \right] \right| x' \right\rangle, \quad (1.14)$$

où H représente l'opérateur d'hamiltonien.

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(x). \quad (1.15)$$

En utilisant la formule de *Lie – Trotter* [13] suivante :

$$\exp (A + B) = \lim_{N \rightarrow \infty} [\exp (A/N) \exp(B/N)]^N. \quad (1.16)$$

D'après l'équation (1.16) nous pouvons transformer le propagateur (1.14) comme suit :

$$\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} T \left[\frac{P^2}{2m} + V(x) \right] \right\} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \exp \left[-\frac{iT P^2}{2\hbar m N} \right] \exp \left[-\frac{iT V(x)}{\hbar N} \right] \right\}^N, \quad (1.17)$$

alors on a :

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle x'' \left| \left\{ \exp \left[-\frac{iT P^2}{2\hbar m N} \right] \exp \left[-\frac{iT V(x)}{\hbar N} \right] \right\}^N \right| x' \right\rangle. \quad (1.18)$$

L'équation (1.18) devient après l'injection de la relation de fermeture $\int |x_j\rangle \langle x_j| dx_j = 1$ ($N - 1$) fois :

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{i=1}^N \exp \left[-\frac{iT}{\hbar N} V(x_i) \right] \left\langle x_i \left| \exp \left[-\frac{iT P^2}{2\hbar m N} \right] \right| x_{i-1} \right\rangle \prod_{i=1}^{N-1} dx_i. \quad (1.19)$$

En injectant la relation de fermeture de l'espace des impulsions, l'élément de matrice de l'opérateur énergie cinétique se calcule :

$$\left\langle x_i \left| \exp \left[-\frac{iT P^2}{2\hbar m N} \right] \right| x_{i-1} \right\rangle = \int \left\langle x_i \left| \exp \left[-\frac{iT P^2}{2\hbar m N} \right] \right| p_i \right\rangle \langle p_i | x_{i-1} \rangle dp_i, \quad (1.20)$$

avec :

$$\langle x_i | p_i \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left\{ \frac{p_i x_i}{\hbar} \right\}, \quad (1.21)$$

et

$$\langle p_i | x_{i-1} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left\{ -\frac{i p_i x_{i-1}}{\hbar} \right\}. \quad (1.22)$$

On remplace (1.21) et (1.22) dans l'expression (1.20) vient :

$$\begin{aligned} \left\langle x_i \left| \exp \left[-\frac{iT P^2}{2\hbar m N} \right] \right| x_{i-1} \right\rangle &= \int \left[-\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{T}{2mN} p_i^2 - p_i(x_i - x_{i-1}) \right\} \right] dp_i \\ &= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}} \exp \left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon} (x_i - x_{i-1})^2 \right]. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Le propagateur global peut s'écrire comme :

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{i=1}^N \left[\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{N/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m(x_i - x_{i-1})^2}{2\varepsilon} - \varepsilon V(x) \right\} \right] \prod_{i=1}^{N-1} dx_i . \quad (1.24)$$

Ainsi, il est toute fois intéressant d'écrire la forme hamiltonienne du propagateur :

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{m}{2\pi\hbar} \right]^N \int \cdots \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N \left[p_i(x_i - x_{i-1})^2 - \varepsilon \left(\frac{m}{2\varepsilon} p_i^2 + V(x_i) \right) \right] \right\} \prod_{i=1}^{N-1} dx_i \prod_{i=1}^N dp_i . \quad (1.25)$$

1.6 La fonction de Green

La fonction de Green n'est autre que la transformée de Fourier du propagateur [21] :

$$G(x'', x', E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} dT \exp \left(\frac{iE T}{\hbar} \right) K(x'', x', T) . \quad (1.26)$$

Alors, la transformée inverse est :

$$K(x'', x', T) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(\frac{-iE T}{\hbar} \right) G(x'', x', E) dE . \quad (1.27)$$

1.7 La fonction de partition en physique statistique

On considère un système physique, chaque élément de volume de l'espace des phases $\left(\frac{dpdq}{2\pi\hbar} \right)$ et dont l'hamiltonien H ne dépend pas explicitement du temps sera occupé avec une probabilité proportionnelle au facteur de Boltzmann $\exp \left\{ \frac{-H}{K_B T} \right\}$, où H est l'hamiltonien, K_B la constante de Boltzmann qui est $K_B = 1.3806221 \cdot 10^{-16} \text{ erg/}^\circ \text{ kelvin}$ et T est la température.

On appelle β l'inverse du produit de la température et la constante K_B : $\beta = \frac{1}{K_B T}$.

La fonction de partition classique est l'intégrale du facteur de Boltzmann sur l'espace de phase avec son expression :

$$Z_{cl}(T) = \int \frac{dpdq}{2\pi\hbar} \exp \{ -\beta H \} . \quad (1.28)$$

Dans le cas des statistiques quantiques, et pour un système à plusieurs degrés de liberté, alors l'hamiltonien est remplacé par l'opérateur H et l'intégrale de l'espace des phases $\prod_n \int \frac{dp_n dq_n}{2\pi\hbar}$ par la trace dans l'espace de Hilbert :

$$Z(T) \equiv Tr (\exp -\beta H), \quad (1.29)$$

$Z(T)$ est appelée la fonction de partition quantique ([9]).

Cette dernière fonction de partition (1.29) s'écrit pour l'hamiltonien possède un nombre discret et complet d'états $\{|i\rangle\}$ compte tenu $H |i\rangle = E_i |i\rangle$ (E_i est l'énergie propre) comme :

$$Z(T) = \sum_i \langle i | (\exp -\beta H) | i \rangle, \quad (1.30)$$

il vient,

$$Z(T) = \sum_i (\exp -\beta E_i). \quad (1.31)$$

En outre, on définit la valeur moyenne de l'énergie par :

$$E = \frac{Tr (H \exp -\beta H)}{Tr (\exp -\beta H)}, \quad (1.32)$$

alors :

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log(Z(T)). \quad (1.33)$$

L'énergie de Helmholtz (l'énergie libre) $F(T)$ quand à elle devient :

$$F(T) = -\frac{1}{\beta} \log(Z(T)). \quad (1.34)$$

1.8 La fonction de partition en termes d'intégrale de chemins

La fonction de partition quantique est reliée à l'opérateur d'évolution quantique, on définit alors la trace de cet opérateur :

$$\begin{aligned} Z_{MQ}(t_b, t_a) &= Tr (U(t'', t')) \\ &\equiv Tr \left[\exp \left(\frac{-iH(t'', t')}{\hbar} \right) \right], \end{aligned} \quad (1.35)$$

la fonction de partition devient une intégrale sur l'amplitude de transition, dans une base locale avec $x'' = x'$:

$$Z_{MQ}(t_b, t_a) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle x't'' | x't' \rangle, \quad (1.36)$$

avec:

$$\langle x't'' | x't' \rangle = \int Dx \int \frac{Dp}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{iA[p, x]}{\hbar} \right]. \quad (1.37)$$

En subdivisant l'intervalle $[t'', t']$ en N intervalles de largeur ε identique, la nouvelle intégration sur $x_{N+1} = x'$ devient :

$$\begin{aligned} \prod_{n=1}^{N+1} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_n dp_n}{2\pi\hbar} &= \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{N+1} \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right]. \end{aligned} \quad (1.38)$$

De manière que la fonction de partition des statistiques quantiques, la trace quantique sur toutes les positions peut être obtenue par l'intégration de l'amplitude d'évolution temporelle sur $x'' \equiv x'$:

$$Z(T) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x | (\exp -\beta H) | x \rangle. \quad (1.39)$$

On peut trouver pour $Z(T)$ une représentation intégrale de chemins similaire à celle de la fonction de partition quantique, en divisant l'intervalle $[0, \beta]$ en N intervalles, tous de largeur $\varepsilon = \frac{\hbar\beta}{N+1}$:

$$\begin{aligned} Z(T) &= \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \right] \left\langle x_{N+1} \left| \exp \left(-\frac{\varepsilon H}{\hbar} \right) \right| x_n \right\rangle \left\langle x_n \left| \exp \left(-\frac{\varepsilon H}{\hbar} \right) \right| x_{n-1} \right\rangle \cdots \\ &\quad \left\langle x_1 \left| \exp \left(-\frac{\varepsilon H}{\hbar} \right) \right| x_{N+1} \right\rangle. \end{aligned} \quad (1.40)$$

A partir de la fonction de partition, nous pouvons définir l'énergie de l'état fondamental $E_0 = -\frac{1}{\beta} \log(Z)$ à $\beta \rightarrow +\infty$, comme nous verrons dans le chapitre 3.

2

Les inégalités de Bertlman et Martin

2.1 Introduction

Afin d'étudier le spectre d'énergie, pendant 40 ans de ça, Bertlman et Martin [22, 23] ont proposé quelques inégalités valident en cas d'une particule déplace dans un potentiel à une seule dimension. Nous utilisons ces inégalités pour calculer les moments de la densité du fondamental moyennant des énergies calculées.

La résolution de l'équation de Schrödinger nous permet d'aboutir aux fonctions d'onde associées pour des potentiels tels: le potentiel de Morse, potentiel de Hulthen, l'oscillateur harmonique...etc.

Dans ce chapitre, nous proposerons une nouvelle approche de calcul des énergies des états $1l$ à partir des propriétés de l'état $1s$; la méthode est basée sur les inégalités de Bertlman-Martin généralisées qui permettent d'obtenir des relations récurrentes entre les moments de la densité du fondamental et les différentes énergies $(E_{1l} - E_{1s})$.

2.2 Les relations de récurrences entre les moments de la densité du fondamental

2.2.1 Cas unidimensionnel ($D = 1$)

$$\langle x^2 \rangle_{1s} \leq \frac{\hbar^2}{2m(E_{1l} - E_0)}, \quad (2.1)$$

et pour $\hbar = m = 1$ on a :

$$\langle x^2 \rangle_{1s} \leq \frac{1}{2(E_{1l} - E_0)}, \quad (2.2)$$

$$\langle T \rangle_{1S} \geq \frac{1}{4}(E_{1l} - E_0) , \quad (2.3)$$

tel que m : représente la masse de la particule considérée.

E_{1S} : représente l'énergie de l'état fondamental $1S$.

E_{1l} : représente l'énergie de l'état $1l$.

x^2 : représente le rayon carré moyen à $1D$.

T : représente l'énergie cinétique moyenne de l'orbite $1S$.

Nous rappelons que la valeur exacte de $\langle x^2 \rangle$ est:

$$\langle x^2 \rangle = \int |\Psi_0(x)|^2 x^2 dx , \quad (2.4)$$

avec : Ψ_0 est la fonction d'onde de l'état fondamental.

avec

$$\int |\Psi_0(x)|^2 dx = 1 . \quad (2.5)$$

Nous partons du commutateur $[H, x]$ où:

$$H = T + V(x) .$$

$$T = \frac{P_x^2}{2m} , \quad (2.6)$$

avec dans notre cas $1S$:

$$P_x = -i \frac{d}{dx} . \quad (2.7)$$

L'application du commutateur $[H, x]$ sur une fonction $f(x)$ donne:

$$\begin{aligned} [H, x] f(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [x f(x)] + x \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left[f(x) + x \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right] + x \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) , \end{aligned} \quad (2.8)$$

alors le commutateur

$$[H, x] = -i\hbar \frac{P_x}{m} . \quad (2.9)$$

On considère le double commutateur suivant:

$$[[H, x], x] = \left[-\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x}, x \right] f(x) , \quad (2.10)$$

de même façon on a :

$$\begin{aligned} [[H, x], x] f(x) &= -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x} (x f(x)) + x \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x} f(x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{m} f(x) . \end{aligned} \quad (2.11)$$

Alors le double commutateur devient:

$$[[H, x], x] = -\frac{\hbar^2}{m} . \quad (2.12)$$

D'autre part, ce dernier s'écrit :

$$\begin{aligned} [[H, x], x] &= [(H x - x H), x] \\ &= 2H x^2 - 2x H x . \end{aligned} \quad (2.13)$$

Alors la valeur moyenne du ce double commutateur dans l'état $|0\rangle$:

$$\langle 0 | [[H, x], x] | 0 \rangle = 2\langle 0 | H x^2 | 0 \rangle - 2\langle 0 | x H x | 0 \rangle . \quad (2.14)$$

En injectant la relation de fermeture

$$\sum_j |j\rangle \langle j| = 1 , \quad (2.15)$$

$$H |0\rangle = E_0 |0\rangle , \quad (2.16)$$

alors ;

$$\begin{aligned} \langle 0 | [[H, x], x] | 0 \rangle &= 2E_0 \langle 0 | x^2 | 0 \rangle - 2 \sum_j \langle 0 | x H | j \rangle \langle j | x^* | 0 \rangle \\ &= 2 \sum_j (E_0 - E_j) |\langle 0 | x^2 | j \rangle|^2 , \end{aligned} \quad (2.17)$$

par comparaison entre les deux équations (2.12) et (2.17) nous écrivons l'équation suivante:

$$2 \sum_j (E_0 - E_j) |\langle 0 | x^2 | j \rangle|^2 = -\frac{\hbar^2}{m} , \quad (2.18)$$

on a :

$$2m \sum_j (E_j - E_0) |\langle 0 | x^2 | j \rangle|^2 = \hbar^2 , \quad (2.19)$$

alors nous pouvons écrire:

$$2m(E_1 - E_0) |\langle 0 | x^2 | 0 \rangle|^2 \leq \hbar^2 , \quad (2.20)$$

ce ci donne :

$$\langle 0 | x^2 | 0 \rangle \leq \frac{\hbar^2}{2m(E_1 - E_0)} . \quad (2.21)$$

A partir de la valeur moyenne de x^2 , nous pouvons écrire l'expression de la valeur moyenne de l'énergie cinétique :

$$\langle T \rangle \geq \frac{1}{4}(E_{1l} - E_{1s}) . \quad (2.22)$$

2.2.2 Cas tridimensionnel ($D = 3$)

on a:

$$\langle r^2 \rangle_{1s} \leq \frac{3\hbar^2}{2m(E_{1l} - E_{1s})} , \quad (2.23)$$

$$\langle T \rangle_{1s} \geq \frac{3}{4}(E_{1l} - E_{1s}) . \quad (2.24)$$

Nous rappelons que la valeur exacte de $\langle r^2 \rangle$ est :

$$\langle r^2 \rangle = \int |\Psi_0(\vec{r})|^2 r^2 d\Omega , \quad (2.25)$$

où $d\Omega$ est l'élément d'intégration dans 3 dimensions avec :

$$\int |\Psi_0(\vec{r})|^2 d\Omega = 1 . \quad (2.26)$$

Il est ainsi possible d'obtenir une limite supérieure pour les énergies à partir de trouver une borne supérieure de la valeur $\langle r^2 \rangle$.

2.2.3 Description de la méthode des inégalités de Bertlman-Martin

La connaissance de l'énergie et la fonction d'onde radiale $\Psi_{1s}(r)$ de l'état fondamental sont essentielles à l'application des inégalités de Bertlman-Martin. La généralisation des ces dernière se fait, à partir des règles de somme multipolaires [24]. On considère l'opérateur :

$$\Phi_{l0} = r^l Y_{l0}(\theta, \varphi) , \quad (2.27)$$

où Φ_{l0} c'est l'opérateur de transition multipolaire donné en fonction des harmoniques sphériques $Y_{l0}(\theta, \varphi)$.

Nous partons du commutateur $[H, \Phi_{l0}]$ où :

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V(r), \quad (2.28)$$

est un opérateur d'hamiltonien.

Comme nous avons vu avant, l'hamiltonien contient un terme énergie cinétique, dans le cas d'un potentiel central s'écrit :

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta = \frac{-\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{L^2}{2mr^2}. \quad (2.29)$$

Quand on calcule et on remplace H et Φ_{l0} le commutateur devient :

$$[H, \Phi_{l0}] = \frac{-\hbar^2}{m}(2l+1)r^{l-1}Y_{l0}(\theta, \varphi)\frac{\partial}{\partial r}. \quad (2.30)$$

On considère le double commutateur $[\Phi_{l0}, [H, \Phi_{l0}]]$ comme :

$$[\Phi_{l0}, [H, \Phi_{l0}]] = \Phi_{l0}, [H, \Phi_{l0}] - [H, \Phi_{l0}]\Phi_{l0}, \quad (2.31)$$

alors :

$$[\Phi_{l0}, [H, \Phi_{l0}]] = r^l Y_{l0} \left\{ \frac{-\hbar^2}{m}(2l+1)r^{l-1}Y_{l0}(\theta, \varphi)\frac{\partial}{\partial r}\Psi \right\} + \frac{\hbar^2}{m}(2l+1)r^{l-1}Y_{l0}(\theta, \varphi)\frac{\partial}{\partial r}(r^l Y_{l0}(\theta, \varphi)\Psi), \quad (2.32)$$

$$[\Phi_{l0}, [H, \Phi_{l0}]] = \frac{\hbar^2}{m}l(2l+1)r^{2l-2}Y_{l0}^2. \quad (2.33)$$

On calcul la valeur moyenne du double commutateur, dans l'état $|0\rangle$:

$$\langle 0 | [\Phi_{l0}, [H, \Phi_{l0}]] | 0 \rangle = \frac{\hbar^2}{m}l(2l+1)\langle r^{2l-2} \rangle_{1s}, \quad (2.34)$$

avec :

$$\langle r^{2l-2} \rangle_{1s} = \langle 0 | Y_{l0}(\theta, \varphi)r^{2l-2}Y_{l0}(\theta, \varphi) | 0 \rangle. \quad (2.35)$$

D'autre part, le double commutateur peut être écrit comme :

$$[\Phi_{l0}, [H, \Phi_{l0}]] = 2\Phi_{l0}H\Phi_{l0} - \Phi_{l0}^2H - H\Phi_{l0}^2, \quad (2.36)$$

alors :

$$\langle 0 | [\Phi_{l0}, [H, \Phi_{l0}]] | 0 \rangle = 2\langle 0 | \Phi_{l0} H \Phi_{l0} | 0 \rangle - \langle 0 | \Phi_{l0}^2 H | 0 \rangle - \langle 0 | H \Phi_{l0}^2 | 0 \rangle , \quad (2.37)$$

de l'équation de Schrödinger : $H | 0 \rangle = E_0 | 0 \rangle$ et $H | j \rangle = E_j | j \rangle$

On obtient alors :

$$\langle 0 | [\Phi_{l0}, [H, \Phi_{l0}]] | 0 \rangle = 2\langle 0 | \Phi_{l0} H \Phi_{l0} | 0 \rangle - 2E_0 \langle 0 | \Phi_{l0}^2 | 0 \rangle . \quad (2.38)$$

On injecte la relation de fermeture suivante: $\sum_j |j\rangle \langle j| = 1$, il vient :

$$\langle 0 | [\Phi_{l0}, [H, \Phi_{l0}]] | 0 \rangle = 2 \sum_j (E_j - E_0) |\langle 0 | \Phi_{l0} | j \rangle|^2 . \quad (2.39)$$

Les l'identification de (2.34) avec (2.39) donne :

$$2 \sum_j (E_j - E_0) |\langle 0 | \Phi_{l0} | j \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{m} l(2l+1) \langle r^{2l-2} \rangle_{1s} , \quad (2.40)$$

et sachant que : $E_1 - E_0 \leq E_2 - E_0 \leq E_3 - E_0 \dots \Rightarrow E_{1l} - E_0 \leq E_j - E_0$

Alors l'équation précédente (2.40) s'écrit comme une inégalité;

$$2(E_{1l} - E_0) \sum_j |\langle 0 | \Phi_{l0} | j \rangle|^2 \leq \frac{\hbar^2}{m} l(2l+1) \langle r^{2l-2} \rangle_{1s} . \quad (2.41)$$

À partir de :

$$2 \sum_j \langle 0 | \Phi_{l0}^* | j \rangle \langle j | \Phi_{l0} | 0 \rangle \leq \frac{\hbar^2}{m} \frac{l(2l+1)}{(E_{1l} - E_0)} \langle r^{2l-2} \rangle_{1s} , \quad (2.42)$$

avec : $\sum_j |j\rangle \langle j| = 1$ on a :

$$\begin{aligned} \langle 0 | \Phi_{l0}^* \Phi_{l0} | 0 \rangle &= \langle 0 | Y_{l0} r^{2l} Y_{l0} | 0 \rangle \\ &= \langle r^{2l} \rangle_{1s} . \end{aligned} \quad (2.43)$$

L'identification de (2.43) et (2.42) donne:

$$\langle r^{2l} \rangle_{1s} \leq \frac{\hbar^2}{2M} \frac{l(2l+1)}{(E_{1l} - E_0)} \langle r^{2l-2} \rangle_{1s} , \quad (2.44)$$

pour $k = 2l$ on a :

$$\begin{aligned}
 \langle r^k \rangle_{1s} &= \int_{-\infty}^{+\infty} r^k |\Psi_{1s}(r)|^2 r^2 dr \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} r^{k+2} |\Psi_{1s}(r)|^2 dr .
 \end{aligned} \tag{2.45}$$

à partir de cette inégalité, on peut définir les énergies E_{1l} , pour des potentiels précisés, puisque cette inégalité n'est pas toujours utiliser comme égalité, donc, nous pouvons chercher sur un terme de correction pour définir le spectre des énergies pour n'importe quel potentiel.

Par conséquence, ces récurrentes résultats ont montré la nécessité d'introduire un facteur correctif en cas de potentiel coulombien [25, 26] par contre en cas d'un oscillateur harmonique, les potentiels quartiques et séxtiques, on choisit un facteur correctif $C = 0$.

En généralisation, Bertlman et Martin [22], on calcul ce facteur correctif pour des potentiels centraux, qui donne dans l'expression suivante :

$$\langle r^{2l} \rangle_{1s} \simeq \frac{\hbar^2}{2m} l(2l+1) \frac{\langle r^{2l-2} \rangle}{(E_{1s} - E_0)} \left[1 - \frac{l}{2(l+1)} C \right] , \tag{2.46}$$

avec :

$$C = \left(\frac{E_{(l+1)0} + E_0 - 2E_{1l}}{E_{(l+1)0} + E_0} \right)^2 . \tag{2.47}$$

On peut calculer ce facteur correctif pour écrire l'inégalité comme une égalité.

2.3 Application de la méthode des inégalités de B-M sur le potentiel de Pöschl-Teller

Afin de tester de cette méthode il faut faire une application, parmi ces applications on utilise le potentiel de type Pöschl-Teller sur deux cas (1D et 3D)

2.3.1 1^{er} cas à une dimension

Le type de potentiel de Pöschl-Teller s'écrit sous forme:

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m} \alpha^2 \frac{\lambda(\lambda-1)}{\cosh^2(\alpha x)} , \tag{2.48}$$

où α et λ sont des paramètres

La fonction d'onde du système pour $\lambda \geq 2$ s'écrit [27] :

$$\phi_0(x) = N_0^{-\frac{1}{2}}(\lambda) \cosh^{1-\lambda}(\alpha x) , \quad (2.49)$$

où N_0 est la constante de normalisation s'écrit toujours dans le cas où $\lambda \geq 2$ comme:

$$N_0(\lambda) = 2 \int_0^{+\infty} \frac{dx}{\cosh^{2\lambda-2}(\alpha x)} = \frac{1}{\alpha} \frac{\Gamma(\frac{1}{2}) \Gamma(\lambda-1)}{\Gamma(\lambda-\frac{1}{2})} . \quad (2.50)$$

A partir de la fonction d'onde, nous pouvons calculer les relations de récurrences du moment $\langle x^k \rangle$.

Comme exemple $k = 2$:

$$\langle x^2 \rangle_\lambda = \frac{N_0(\lambda-1)}{\alpha^2 N_0(\lambda) (2\lambda-3)(\lambda-2)} \left[2(\lambda-2) \alpha^2 \langle x^2 \rangle_{\lambda-1} - 1 \right] , \quad (2.51)$$

et

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_{\lambda=2} &= \frac{1}{4\alpha^2} \Gamma(3) \Gamma(2) \\ &= \frac{\pi^2}{12\alpha^2} . \end{aligned} \quad (2.52)$$

D'autre part, le terme de l'énergie cinétique s'écrit comme :

$$T = \frac{\hbar^2 \alpha^2 (\lambda-1)^2}{2m (2\lambda-1)} , \quad (2.53)$$

alors que l'expression de l'énergie dépend des moments est donnée par:

$$E_{1p} - E_{1s} = E_1 - E_0 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} [(\lambda-1)^2 - (\lambda-2)^2] . \quad (2.54)$$

ce sur conduit à,

$$E_n = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} (\lambda-1-n)^2 , \quad (2.55)$$

avec: $n \leq \lambda-1$

Pour $n = 0$:

$$E_0 = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} (\lambda-1)^2 . \quad (2.56)$$

Et pour $n = 1$:

$$E_1 = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} (\lambda-2)^2 . \quad (2.57)$$

alors

$$E_1 - E_0 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} [(\lambda - 1)^2 - (\lambda - 2)^2] . \quad (2.58)$$

Nous pouvons vérifier facilement la seconde inégalité de B-M:

$$T = \frac{\hbar^2 \alpha^2 (\lambda - 1)^2}{2m (2\lambda - 1)} \geq \frac{1}{4} \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} [(\lambda - 1)^2 - (\lambda - 2)^2] . \quad (2.59)$$

2.3.2 2^{ième} cas à 3 dimension

l'expression du potentiel de Pöschl-Teller s'écrit par rapport à la variable r (c'est-à-dire potentiel central) comme [28]:

$$V(r) = -\frac{1}{2} \frac{\lambda (\lambda - 1)}{\cosh^2 \alpha r} . \quad (2.60)$$

ce cas à été étudié pour $l = 0$ et $\alpha = 1$ [29]

$$\phi_{1s}(r) = N(0) \sinh(r) (\cosh(r))^{1-\lambda} , \quad (2.61)$$

les moments de la densité du fondamental $|\phi_{1s}(r)|^2$ s'écrivent à partir de l'expression suivante:

$$\langle r^k \rangle = N(0) \int_0^\infty \frac{r^k (\sinh r)^2}{(\cosh r)^{2\lambda-2}} dr . \quad (2.62)$$

Le calcul de cette intégrale n'est pas facile, pour cela, nous utilisons les méthodes des intégrales numériques, avec la constante de normalisation $N(0)$ s'écrit comme:

$$N(0) = \frac{(2\lambda - 3) \Gamma(2\lambda - 4)}{4^{\lambda-3} (\Gamma(\lambda - 2))^2} . \quad (2.63)$$

L'expression de l'énergie de l'état $1S$ donnée par:

$$E_{n0} = -\frac{1}{2} [\lambda - 2 - 2n]^2 , \quad n = 0, 1, 2, \dots , \quad \lambda \geq 2 . \quad (2.64)$$

	E_{1p}	E_{1d}	E_{1f}	E_{1g}	E_{1h}	E_{1i}	E_{1j}
λ	7						
<i>Exact</i>	-7.702	-3.672	-0.546				
<i>E_{IBM}</i>	-7.718	-4.002					
λ	9						
<i>Exact</i>	-17.999	-12.195	-7.124	-2.907			
<i>E_{IBM}</i>	-17.701	-11.802	-7.256				
λ	11						
<i>Exact</i>	-31.686	-23.586	-16.238	-9.698	-4.050		
<i>E_{IBM}</i>	-31.693	-23.716	-16.860	-11.560			
λ	15						
<i>Exact</i>	-71.680	-59.557	-48.155	-37.499	-27.624	-18.575	-10.418
<i>E_{IBM}</i>	-71.684	-59.635	-48.509	-38.522	-29.962	-23.206	

Tableau 01: Les énergies des niveaux d'Yrast pour le potentiel de Pöschl-Teller.

2.3.3 Discussion

Nous avons calculés les énergies de la ligne d'Yrast pour le potentiel de Pöschl-Teller par la méthode des inégalités de Bertlman-Martin, ces énergies sont comparées à celles données par la valeur exacte. Nous pouvons estimer que le résultat obtenu dépend de la valeur du paramètre λ , tel que quand λ est très petite ceci conduit à un bon résultat.

3

Les corrections systématiques

3.1 Introduction

Pour un système quantique donné, la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert [9] permet d'évaluer l'énergie de l'état fondamental, Kleinert a jugé d'introduire dans sa technique pour une méthode très performante, des corrections, ces dernières dites, corrections systématiques [30, 31, 32, 33, 34]. Afin d'aboutir à un potentiel effectif classique exprimé sous forme d'une série convergente, Kleinert combine les méthodes perturbative et variationnelle.

3.2 Fonction de corrélation et de fonctionnelle génératrice

En général, pour un système quantique donné, les fonctions de corrélation du chemin $x(\tau)$ sont définies dans ce système les moyennes fonctionnelles des produits des variables position à différents instants:

$$G^{(n)}(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n) = \langle x(\tau_1) \dots x(\tau_n) \rangle. \quad (3.1)$$

Ou encore:

$$G^{(n)}(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n) = Z^{-1} \int Dx x(\tau_1) x(\tau_2) \dots x(\tau_n) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} A_e \right], \quad (3.2)$$

avec:

$$Dx = dx_1 dx_2 \dots dx_n. \quad (3.3)$$

Puisque le calcul direct de cette intégrale est un peu compliqué, pour cela on utilise une méthode qui est basée sur les dérivées fonctionnelles de la fonction de partition $Z [j]$ du système un terme source $j(\tau)$, cette dernière, est appelée fonctionnelle génératrice de la théorie, pour l'oscillateur harmonique donnée par:

$$Z [j] = \int Dx(\tau) \exp \left(-\frac{1}{\hbar} A_e [j] \right), \quad (3.4)$$

avec $A_e [j]$ est l'action euclidienne s'exprime comme:

$$A_e [j] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} (\dot{x}^2 + w^2 x^2) - j(\tau) x(\tau) \right]. \quad (3.5)$$

La fonction $x(\tau)$ est une fonction périodique, alors nous pouvons effectuer une intégration par parties du terme énergie cinétique, effectivement peut se mettre sous la forme:

$$\int_0^{\hbar\beta} \dot{x} x d\tau = \dot{x} x \Big|_0^{\hbar\beta} - \int_0^{\hbar\beta} x \ddot{x} d\tau. \quad (3.6)$$

Vu la périodicité de ce chemin $x(\tau)$, le premier terme est en réalité nul, puisque la fonction $x(\tau)$ périodique, l'action euclidienne devient:

$$A_e [j] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} x(\tau) D_e x(\tau) - j(\tau) x(\tau) \right], \quad (3.7)$$

avec:

$$D_e (\tau, \tau') = -\partial_\tau^2 + w^2, \quad (3.8)$$

et en général, $D_e(\tau, \tau')$ est la fonctionnelle définie par:

$$D_e (\tau, \tau') = (-\partial_\tau^2 + w^2) \delta(\tau - \tau'), \quad \tau - \tau' \in [0, \hbar\beta] \quad (3.9)$$

l'inverse de cette fonction $D_e^{-1}(\tau, \tau')$ est la fonction euclidienne de Green $G_e^p(\tau, \tau')$, qui est alors:

$$G_e^p (\tau, \tau') = (-\partial_\tau^2 + w^2)^{-1}. \quad (3.10)$$

Alors, on utilise le changement de variable suivant:

$$x(\tau) = x'(\tau) + \frac{1}{M} G_e^p(\tau, \tau') j(\tau'). \quad (3.11)$$

Quand on remplace cette dernière $x(\tau)$ dans l'expression (3.7), on trouve:

$$A_e [j] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} x'(\tau) D_e(\tau, \tau') x'(\tau) - \frac{1}{2M} \int_0^{\hbar\beta} j(\tau) G_e^p(\tau, \tau') j(\tau') d\tau' \right]. \quad (3.12)$$

L'expression de la fonction de partition

$$\mathbb{Z} [j] = \int Dx(\tau) \exp \left(-\frac{1}{\hbar} A_e [j] \right). \quad (3.13)$$

On distingue dans cette dernière une partie fonction de x' , alors l'intégration conduit à la fonction de partition de l'oscillateur harmonique qui est:

$$\mathbb{Z}_w = \frac{1}{2 \sinh (\hbar\beta w/2)}, \quad (3.14)$$

la fonction de partition totale $\mathbb{Z} [j]$ s'écrit comme produit entre deux fonctions, la première de l'oscillateur harmonique et la deuxième est exponentielle de l'action du terme source:

$$\mathbb{Z} [j] = \mathbb{Z}_w \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} A_e^s [j] \right\}, \quad (3.15)$$

où, le terme source devient:

$$A_e^s [j] = -\frac{1}{2M} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\int_0^{\hbar\beta} j(\tau) G_e^p(\tau, \tau') j(\tau') d\tau' \right]. \quad (3.16)$$

3.3 La fonction de Green

Les fonctions propres de l'opérateur différentiel $-\partial_\tau^2$ sont données par $\exp(-i w_m \tau)$, qui permet de développer la fonction de Green et s'écrit sur la base des fonctions propres de l'opérateur différentielle comme suit [34]:

$$G_e^p(\tau) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{w_m^2 + w^2} \exp(-i w_m \tau), \quad (3.17)$$

associées aux valeurs propres w_m^2

avec : $w_m = 2\pi m / \hbar\beta$ et $m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$

w_m : fréquences de Matsubara

où:

$$G_e^p(\tau) = \frac{1}{2w} \frac{\cosh w (\tau - \hbar\beta/2)}{\sinh (\hbar\beta w/2)}. \quad (3.18)$$

$$|\tau| \in [0, \hbar\beta]$$

Nous pouvons écrire cette fonction sous la forme des fonctions de l'exponentiel comme:

$$\frac{\cosh w (\tau - \hbar\beta/2)}{\sinh (\hbar\beta w/2)} = \frac{\exp (w \tau - \hbar\beta w) + \exp (-w \tau)}{1 - \exp (-\hbar\beta w)}, \quad (3.19)$$

aux basses températures ($\beta \rightarrow +\infty$), $G_e^p(\tau)$ prend la forme:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} G_e^p(\tau) = \frac{1}{2w} \exp (-w |\tau|). \quad (3.20)$$

Avec: $|\tau| \in [0, \hbar\beta]$

où $a^2 = \frac{1}{2w}$ et $\hbar^2 = M = 1$

3.4 Règle de wick

A partir de la définition de la fonction de partition $\mathbb{Z} [j]$ tel que (3.13), et la relation (3.7), permet d'écrire la fonction de corrélation du système comme suit:

$$G^{(n)} (\tau_1 \dots \tau_n) = \mathbb{Z}^{-1} \int dx_1 \dots dx_n x(\tau_1) \dots x(\tau_n) \exp \left(-\frac{1}{\hbar} A_e \right) \quad (3.21)$$

$$= \left[\mathbb{Z}^{-1} [j] \hbar \frac{\delta}{\delta j(\tau_1)} \dots \hbar \frac{\delta}{\delta j(\tau_n)} \mathbb{Z} [j] \right]_{j=0}, \quad (3.22)$$

la fonction de partition $\mathbb{Z} [j]$ est appelée fonctionnelle génératrice de la théorie. Cette dernière est donnée par (3.15).

Après substitution, ceci donne :

$$\begin{aligned} G^{(n)}(\tau_1 \dots \tau_n) &= (\hbar)^n \frac{\delta^n}{\delta j(\tau_1) \delta j(\tau_2) \dots \delta j(\tau_n)} \\ &\times \exp \left\{ \frac{1}{2\hbar M} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' j(\tau) G_e^p(\tau, \tau') j(\tau') \right\} \Big|_{j=0} \\ &= \frac{\hbar}{M} G_e^p(\tau, \tau'), \end{aligned} \quad (3.23)$$

les simplifications dans le calcul des fonctions de corrélations qui sont introduites de l'existence de la fonction $G^{(2)} (\tau, \tau')$, se font via la règle de wick:

$$G^{(n)}(\tau_1 \dots \tau_n) = \sum_{\text{paires}} G^{(2)}(\tau_{p(1)}, \tau_{p(2)}) \dots G^{(2)}(\tau_{p(n-1)}, \tau_{p(n)}). \quad (3.24)$$

Tel que les moments d'ordre impair sont nuls.

3.5 Développement perturbatif de la fonction de partition

En cas de l'oscillateur harmonique perturbé, la fonction de partition est donnée par:

$$\mathbb{Z} = \int D x \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2 + M \frac{w^2}{2} x^2 + V(x) \right] \right\}, \quad (3.25)$$

où $V(x)$ est le terme de perturbation.

On utilise le développement, du terme exponentiel qui contient le terme interaction $V(x)$ on trouve:

$$\begin{aligned} \mathbb{Z} = \int D x \left\{ 1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} V(x_1) d\tau_1 + \frac{1}{2!\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} V(x_2) d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} V(x_1) d\tau_1 \right. \\ \left. - \frac{1}{3!\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} V(x_3) d\tau_3 \int_0^{\hbar\beta} V(x_2) d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} V(x_1) d\tau_1 + \dots \right\} \\ \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2 + M \frac{w^2}{2} x^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Cette expression devient:

$$\begin{aligned} \mathbb{Z} = \int D x \left\{ 1 - \frac{1}{\hbar} A_{int, e} + \frac{1}{2!\hbar^2} A_{int, e}^2 - \frac{1}{3!\hbar^3} A_{int, e}^3 + \dots \right\} \\ \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2 + M \frac{w^2}{2} x^2 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

avec:

$$A_{int, e} = \int_0^{\hbar\beta} V(x(\tau)) d\tau. \quad (3.28)$$

Alors la fonction de partition \mathbb{Z} va être si s'exprimer en fonction des valeurs moyennes calculées par rapport à la fonction \mathbb{Z}_w de l'oscillateur harmonique:

$$\langle f \rangle_w = \mathbb{Z}_w^{-1} \int D x f \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2 + M \frac{w^2}{2} x^2 \right] \right\}. \quad (3.29)$$

Alors nous obtenons:

$$\mathbb{Z} = \mathbb{Z}_w \left(1 - \frac{1}{\hbar} \langle A_{int, e} \rangle_w + \frac{1}{2!\hbar^2} \langle A_{int, e}^2 \rangle_w - \frac{1}{3!\hbar^3} \langle A_{int, e}^3 \rangle_w + \dots \right). \quad (3.30)$$

Par l'utilisation des commodes calculent, la série ci-dessus, il est préférable de la réécrire sous une forme exponentielle:

$$\begin{aligned}
 & 1 - \frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_w + \frac{1}{2!\hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_w - \frac{1}{3!\hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_w + \dots \\
 & = \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_w + \frac{1}{2!\hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{w,c} - \frac{1}{3!\hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_{w,c} + \dots \right\}, \quad (3.31)
 \end{aligned}$$

où $\langle \dots \rangle_{w,c}$ ces valeurs moyennes sont appelées cumulants, et elles sont reliées aux valeurs moyennes d'ordre n par:

$$\langle A_{int,e}^n \rangle_{w,c} = \langle [A_{int,e} - \langle A_{int,e} \rangle_w]^n \rangle_w.$$

Pour $n = 2$:

$$\langle A_{int,e}^2 \rangle_{w,c} = \langle [A_{int,e} - \langle A_{int,e} \rangle_w]^2 \rangle_w = \langle A_{int,e}^2 \rangle_w - \langle A_{int,e} \rangle_w^2.$$

Pour $n = 3$:

$$\langle A_{int,e}^3 \rangle_{w,c} = \langle [A_{int,e} - \langle A_{int,e} \rangle_w]^3 \rangle_w = \langle A_{int,e}^3 \rangle_w - 3 \langle A_{int,e}^2 \rangle_w \langle A_{int,e} \rangle_w + 2 \langle A_{int,e} \rangle_w^3.$$

Les cumulants contribuent à l'énergie libre du système

$$F = - \left(\frac{1}{\beta} \right) \log \mathbb{Z}. \quad (3.32)$$

Alors \mathbb{Z} nous permet d'écrire une expression pour l'énergie libre F en fonction de ces cumulants

$$F = -\frac{1}{\beta} \left\{ \log \mathbb{Z}_w + \left(-\frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_w + \frac{1}{2!\hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{w,c} - \frac{1}{3!\hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_{w,c} + \dots \right) \right\}, \quad (3.33)$$

avec :

$$F = F_w + \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_w - \frac{1}{2!\hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{w,c} + \frac{1}{3!\hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_{w,c} + \dots \right\}. \quad (3.34)$$

Alors, on peut exprimer la variation de l'énergie libre du système par rapport à celle de l'oscillateur harmonique comme suit:

$$\Delta F = \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_w - \frac{1}{2!\hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{w,c} + \frac{1}{3!\hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_{w,c} + \dots \right\}. \quad (3.35)$$

Cette variation de l'énergie libre conduit à la correction sur l'énergie de l'état fondamental E_0 du système étudié :

$$\Delta E_0 = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_w - \frac{1}{2!\hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{w,c} + \frac{1}{3!\hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_{w,c} + \dots \right\}. \quad (3.36)$$

3.6 Application au potentiel anaharmonique

Il y a quelques années, D. Bessis a supposé sur la base des études numériques que le spectre de l'hamiltonien $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}\omega^2 x^2 + ix^3$ est réel et positif [35, 36], après. Nous citons deux exemples des potentiels à symétrie P-T étudiés par les physiciens: $V_1(x) = \frac{1}{2}x^2 + ix^3 + ix$ et $V_2(x) = \frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{2}x^2 + i\lambda x^3$, leurs spectres d'énergies ont été trouvés réels et positifs. La définition de la symétrie P-T dépend des opérateurs, de parité et de renversement du temps comme suit:

$$P : \begin{cases} p \rightarrow -p \\ x \rightarrow -x \end{cases} \quad \left| \quad T : \begin{cases} p \rightarrow -p \\ x \rightarrow x \\ i \rightarrow -i \end{cases}$$

Dans le but d'appliquer la méthode des corrections systématiques, nous traitons le potentiel de la forme [37] :

$$\begin{aligned} V(x) &= \frac{\sigma}{2} x^2 + \eta x^4 + i\gamma x^3 \\ &= \frac{M}{2} \Omega^2 x^2 - \frac{M}{2} \Omega^2 x^2 + \frac{\sigma}{2} x^2 + \eta x^4 + i\gamma x^3. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Sachant que:

$$V(x) = V_{int, e}(x) + \frac{M}{2} \Omega^2 x^2, \quad (40)$$

avec:

$$V_{int, e}(x) = \frac{\alpha}{2} x^2 + \eta x^4 + i\gamma x^3,$$

où:

$$\alpha = \sigma - M\Omega^2.$$

A l'ordre 1, la valeur moyenne $\langle A_{int, e} \rangle_{\omega, c}$ est :

$$\begin{aligned} \langle A_{int, e} \rangle_{\omega, c} &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \langle V_{int, e}(x) \rangle_{\omega} \\ &= \frac{\alpha}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \langle x(\tau)^2 \rangle + \eta \int_0^{\hbar\beta} d\tau \langle x(\tau)^4 \rangle. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Les fonctions de corrélation $G^{(n)}(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n)$ seront utilisées pour calculer ces valeurs moyennes, en appliquant le théorème de Wick en mécanique quantique et en théorie des champs.

Le terme d'ordre quatre s'écrira alors :

$$\begin{aligned}
 \langle x(\tau_1)x(\tau_2)x(\tau_3)x(\tau_4) \rangle &= G^{(4)}(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4) \\
 &= \langle x(\tau_1)x(\tau_2) \rangle \langle x(\tau_3)x(\tau_4) \rangle + \langle x(\tau_1)x(\tau_3) \rangle \langle x(\tau_2)x(\tau_4) \rangle \\
 &\quad + \langle x(\tau_1)x(\tau_4) \rangle \langle x(\tau_2)x(\tau_3) \rangle,
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

pour $\tau_i = \tau$, $i = 1, 2, 3, 4$

Il vient alors :

$$\begin{aligned}
 \langle x(\tau)^4 \rangle_\omega &= 3 \langle x^2(\tau) \rangle_\omega^2 \\
 &= 3 [G^{(2)}(\tau, \tau)]^2,
 \end{aligned} \tag{3.40}$$

de même :

$$\langle x^2(\tau) \rangle = G^{(2)}(\tau, \tau). \tag{3.41}$$

Alors le cumuland correspondant sera :

$$\langle A_{int, e} \rangle_{\omega, c} = \frac{\alpha}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau [G^{(2)}(\tau, \tau)] + 3\eta \int_0^{\hbar\beta} d\tau [G^{(2)}(\tau, \tau)]^2, \tag{3.42}$$

lorsque à $\beta \rightarrow \infty$, ce ci donne :

$$\frac{1}{\beta} \langle A_{int, e} \rangle_{\omega, c} = \frac{\alpha}{2} \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau [G^{(2)}(\tau, \tau)] + 3\eta \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau [G^{(2)}(\tau, \tau)]^2. \tag{3.43}$$

Pour calculer ces intégrales, il faut utiliser la fonction de Green ($\beta \rightarrow \infty$);

$$G_e^p(\tau_1, \tau_2) = a^2 \exp(-\omega |\tau_1 - \tau_2|), \tag{3.44}$$

$$G^{(2)}(\tau, \tau') = \frac{\hbar^2}{M} G_e^p(\tau, \tau'), \tag{3.45}$$

et

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} G_e^p(\tau) = \frac{1}{2\omega} \exp(-\omega |\tau|). \tag{3.46}$$

Après les calculs, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
 \int_0^{\hbar\beta} d\tau G^{(2)}(\tau, \tau) &= a^2 \beta, \\
 \int_0^{\hbar\beta} d\tau G^{(2)}(\tau, \tau)^2 &= a^4 \beta,
 \end{aligned} \tag{3.47}$$

alors, $\langle A_{int, e} \rangle_{\omega, c}$ devient :

$$\langle A_{int, e} \rangle_{\omega, c} = \left(\frac{\alpha}{2} a^2 + 3\eta a^4 \right) \beta. \quad (3.48)$$

Le terme d'interaction correspondant, en calculant les cumulant d'ordre deux; $\langle V_{int, e}(x(\tau_1)) V_{int, e}(x(\tau_2)) \rangle$

$$\langle A_{int, e}^2 \rangle = \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \langle V_{int, e}(x(\tau_1)) V_{int, e}(x(\tau_2)) \rangle, \quad (3.49)$$

avec:

$$\begin{aligned} \langle V_{int, e}(x(\tau_1)) V_{int, e}(x(\tau_2)) \rangle &= \frac{\alpha^2}{4} \langle x^2(\tau_1) x^2(\tau_2) \rangle + \eta^2 \langle x^4(\tau_1) x^4(\tau_2) \rangle - \gamma^2 \langle x^3(\tau_1) x^3(\tau_2) \rangle \\ &\quad + \frac{\alpha}{2} \eta \{ \langle x^4(\tau_1) x^2(\tau_2) \rangle + \langle x^2(\tau_1) x^4(\tau_2) \rangle \}. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Ces valeurs moyennes sont simples à calculer et s'écrit comme :

$$\begin{aligned} \langle x^2(\tau_1) x^2(\tau_2) \rangle_{\omega} &= G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) + 2G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) \\ \langle x^4(\tau_1) x^4(\tau_2) \rangle_{\omega} &= 9G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_2)^2 + 72G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) \\ &\quad G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) + 24G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^4 \\ \langle x^3(\tau_1) x^3(\tau_2) \rangle_{\omega} &= 9G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) + 6G^{(3)}(\tau_1, \tau_2) \\ \langle x^4(\tau_1) x^2(\tau_2) \rangle_{\omega} &= 3G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) + 12G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) \\ \langle x^2(\tau_1) x^4(\tau_2) \rangle_{\omega} &= 3G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) + 12G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G^{(2)}(\tau_2, \tau_2). \end{aligned} \quad (3.51)$$

Afin de calculer $\langle A_{int, e}^2 \rangle_{\omega}$ et $\langle A_{int, e}^3 \rangle_{\omega}$ lorsque $\beta \rightarrow \infty$ en doit déterminer les intégrales ci-dessous:

$$\begin{aligned} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) &= \frac{2}{\omega} a^2 \beta, \\ \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 &= \frac{1}{\omega} a^4 \beta, \\ \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) &= \frac{1}{\omega} a^8 \beta. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Alors, le calcul à la fin donne :

$$\langle A_{int, e}^2 \rangle_\omega = \frac{\alpha^2}{4} a^4 \beta + 9\eta^2 a^8 \beta + 3\alpha\eta a^6 \beta + \frac{1}{2} \alpha^2 \frac{a^4}{\omega} \beta + 84\eta^2 \frac{a^8}{\omega} \beta + 12\alpha\eta \frac{a^6}{\omega} \beta - 22\gamma^2 \frac{a^6}{\omega} \beta. \quad (3.53)$$

Il vient :

$$\langle A_{int, e}^2 \rangle_\omega = \frac{1}{\omega} \left[\frac{1}{2} \alpha^2 a^4 \beta + 84\eta^2 a^8 \beta - 22\gamma^2 a^6 \beta + 12\alpha\eta a^6 \beta \right] \quad (3.54)$$

L'énergie E_0 du système étudié s'écrira :

$$E_0 = \frac{\omega}{2} + \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{\hbar} \langle A_{int, e} \rangle_\omega - \frac{1}{2! \hbar^2} \langle A_{int, e}^2 \rangle_{\omega, c} + \dots \right\}. \quad (3.55)$$

En ce qui concerne le cas étudié $[V(x) = \frac{\alpha}{2} x^2 + \eta x^4 + i\gamma x^3]$, nous aboutissons, après de longues et fastidieux calculs, au résultat suivant à d'ordre 2 :

$$E_0 = \frac{\omega}{2} + \frac{\alpha}{2} a^2 + 3\eta a^4 + \frac{1}{\omega} \left\{ -\frac{\alpha^2}{4} a^4 - 42\eta^2 a^8 - 11\gamma^2 a^6 - 6\eta a^6 \right\}, \quad (3.56)$$

en calculant les valeurs moyennes $\langle A_{int, e} \rangle_{\omega, c}$ d'ordre trois $\langle V_{int, e}(x(\tau_1)) V_{int, e}(x(\tau_2)) V_{int, e}(x(\tau_3)) \rangle$:

$$\langle A_{int, e}^3 \rangle_\omega = \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \langle V_{int, e}(x(\tau_1)) V_{int, e}(x(\tau_2)) V_{int, e}(x(\tau_3)) \rangle. \quad (3.57)$$

La valeur moyenne, est simple à calculer :

$$\begin{aligned} \langle x^2(\tau_1) x^2(\tau_2) x^4(\tau_3) \rangle_\omega &= 3G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) G^{(2)}(\tau_3, \tau_3)^2 + 12G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) G(\tau_2, \tau_3)^2 \\ &\quad G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) + 6G(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_3, \tau_3)^2 + 24G(\tau_1, \tau_2) G(\tau_1, \tau_3) \\ &\quad G(\tau_2, \tau_3) G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) + 24G(\tau_1, \tau_2) G(\tau_1, \tau_3) G(\tau_2, \tau_3) \\ &\quad G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) + 12G(\tau_1, \tau_3)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) + 24G(\tau_1, \tau_3)^2 \\ &\quad G(\tau_2, \tau_3)^2 \end{aligned} \quad (3.58)$$

$$\begin{aligned}
 \langle x^2(\tau_1)x^4(\tau_2)x^4(\tau_3) \rangle &= 9G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G^{(2)}(\tau_2, \tau_2)^2G^{(2)}(\tau_3, \tau_3)^2 + 60G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) \\
 &G(\tau_2, \tau_3)^2G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) + 12G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G(\tau_2, \tau_3)^2G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) \\
 &G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) + 24G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G(\tau_2, \tau_3)^4 + 36G(\tau_1, \tau_2)^2G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) \\
 &G^{(2)}(\tau_3, \tau_3)^2 + 192G(\tau_1, \tau_2)G(\tau_1, \tau_3)G^{(2)}(\tau_2, \tau_2)G(\tau_2, \tau_3) \\
 &G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) + 96G(\tau_1, \tau_2)G(\tau_1, \tau_3)G(\tau_2, \tau_3)G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) \\
 &G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) + 192G(\tau_1, \tau_2)G(\tau_1, \tau_3)G(\tau_2, \tau_3)^3 + 36G(\tau_1, \tau_3)^2 \\
 &G^{(2)}(\tau_2, \tau_2)^2G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) + 144G(\tau_1, \tau_3)^2G(\tau_2, \tau_3)^2G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) \\
 &+ 144 G(\tau_1, \tau_2)^2G(\tau_2, \tau_3)^2G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) \tag{3.59}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle x^4(\tau_1)x^3(\tau_2)x^3(\tau_3) \rangle &= 27G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G(\tau_1, \tau_2)G^{(2)}(\tau_2, \tau_2)G^{(2)}(\tau_3, \tau_3)^2 + 108G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G(\tau_1, \tau_2) \\
 &G(\tau_2, \tau_3)^2G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) + 108G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G(\tau_1, \tau_3)G(\tau_2, \tau_3) \\
 &G^{(2)}(\tau_2, \tau_2)G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) + 72G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G(\tau_1, \tau_3)G(\tau_2, \tau_3)^3 + 18G(\tau_1, \tau_2)^3 \\
 &G^{(2)}(\tau_3, \tau_3)^2 + 216G(\tau_1, \tau_2)^2G(\tau_1, \tau_3)G(\tau_2, \tau_3)G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) + 108G(\tau_1, \tau_2) \\
 &G(\tau_1, \tau_3)^2G^{(2)}(\tau_2, \tau_2)G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) + 216G(\tau_1, \tau_2)G(\tau_1, \tau_3)^2G(\tau_2, \tau_3)^2 \\
 &+ 72G(\tau_1, \tau_3)^3G(\tau_2, \tau_2). \tag{3.60}
 \end{aligned}$$

Pour déterminer le terme $\langle A_{int, e}^3 \rangle_\omega$, on doit calculer l'intégrale suivante:

$$\begin{aligned}
 \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G(\tau_1, \tau_3)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 &= \frac{a^8 \beta}{\omega^2}, \\
 \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G(\tau_1, \tau_2) G(\tau_1, \tau_3) G(\tau_2, \tau_3)^3 &= \frac{5 a^{10} \beta}{8 \omega^2}, \\
 \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G(\tau_1, \tau_2) G(\tau_1, \tau_3)^2 G(\tau_2, \tau_3)^2 &= \frac{5 a^{10} \beta}{9 \omega^2}. \tag{3.61}
 \end{aligned}$$

Alors, les valeurs moyennes données par:

$$\begin{aligned}
 \langle A_{int, e}^3 \rangle_{w, c} &= \frac{1}{w^2} \{ (\eta)^3 1332a^{12}\beta - \gamma^2 \eta 396a^{10}\beta \} \\
 &+ \frac{1}{w} \left\{ \begin{aligned} &-\frac{3}{4}\alpha^3 a^6 \beta - \frac{252}{2}\alpha \eta a^{10} \beta + \frac{66}{2}\gamma^2 \alpha a^8 \beta^2 - \frac{9}{2}\alpha^2 \eta a^8 \beta \\ &+ 756 (\eta)^3 a^{12} \beta^2 + 198 \gamma^2 \eta a^{10} \beta^2 + \frac{12}{2}\alpha^2 \eta a^8 \beta^2 \\ &+ 36\alpha (\eta)^2 a^{10} \beta^2 \end{aligned} \right\} \\
 &+ \frac{\alpha^3}{4} a^6 \beta + 18 (\eta)^3 a^7 \beta. \tag{3.62}
 \end{aligned}$$

L'énergie de l'état fondamental du système étudié s'écrira:

$$E = \frac{w}{2} + \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{\hbar} \langle A_{int, e} \rangle_w - \frac{1}{2! \hbar^2} \langle A_{int, e}^2 \rangle_{w, c} + \frac{1}{3! \hbar^3} \langle A_{int, e}^3 \rangle_{w, c} \right]. \quad (3.63)$$

Il vient:

$$E = \frac{684\gamma^2}{w^2} a^{10} + 3\eta a^4 - \frac{11\gamma^2}{w} a^6 + \frac{1332}{w^2} \eta^3 a^{12} - \frac{42}{w} \eta^2 a^8 + \frac{1}{2} w. \quad (3.64)$$

L'énergie libre (3.36) s'écrira par son expression:

$$F_0 = F_w + \frac{684\gamma^2}{w^2} a^{10} + 3\eta a^4 - \frac{11\gamma^2}{w} a^6 + \frac{1332}{w^2} \eta^3 a^{12} - \frac{42}{w} \eta^2 a^8 + \frac{1}{2} w. \quad (3.65)$$

3.7 Résultats et discussions

Nous avons présenté dans les tableaux ci-dessous, *Tableau 02* et *Tableau 03* les valeurs de l'énergie de l'état fondamental du potentiel anharmonique quartique qui est donné par l'expression:

$$V(x) = \frac{\alpha}{2} x^2 + \eta x^4 + i\gamma x^3.$$

Tel que les paramètres α , η , γ , ont des différentes valeurs. Nous pouvons affirmer que les résultats obtenus via la méthode de Kleinert incluant les corrections systématique et celle obtenus par M. Sadouki dans sa mémoire de Magister (*Tableau 02*) et (*Tableau 03*) les résultats sont comparées à celle obtenus par H. Boukabcha dans sa mémoire de Magister.

η	$E_{\text{exa}}^{(0)}[9]$	$E_{\text{Systematique}}^{(\text{correction})}$	$E_{\text{corr, d'ordre2}}[20]$
0.1	0559146	0.5591542188	0.5591423147
0.5	0.696176	0.696253628	0.6962570874
0.8	0.765144	0.7652636971	0.7652924530
0.9	0.785032	0.7851634941	0.7852003617
1	0.803771	0.8039140529	0.8039587691
10	1.50497	1.505497503	1.505838465
50	2.49971	2.500699629	2.501400904
100	3.13138	3.132656558	3.133571265
500	5.31989	5.322117092	5.323742646
1000	6.69422	6.697032864	6.699096093

Tableau 02: Energie de l'état fondamental de l'oscillateur anharmonique quartique, et pour différents jeux de paramètre η , avec $\alpha = 1$ pour le cas: $V_{int}(x) = \frac{\alpha}{2}x^2 + \eta x^4$.

γ	η	$E(\text{Méthode de } F - K)[34]$	$E(\text{correction Systematique})$	$E(\text{littérature})$
0.01	0.0	0.5000000002	0.499862500	0.4998624 ^(a)
	0.01	05072875253	0.507151591	0.5071369 ^(a)
	0.1	0.5603073713	0.559129146	0.559091188640 ^(b)
	1	0.8125000002	0.803913252	0.803763303 ^(b)
	10	1.5312500000	1.505497496	1.504971949 ^(b)
	100	3.192444044	3.132656557	3.131384142 ^(b)
	1000	6.827953314	6.697032862	6.694220849 ^(b)
	10000	14.68713887	14.40408702	14.397995343 ^(b)
0.1	0.0	0.5000000002	0.486250000	0.4843110 ^(a)
	0.01	0.507287525	0.496760899	0.4942218 ^(a)
	0.1	0.560307371	0.556047465	0.5535637 ^(a)
	1	0.8125000002	0.803796101	0.8030350201245 ^(b)
	10	1.531250000	1.505496692	1.50492650589 ^(b)
	100	3.192444044	3.132656568	3.131381887 ^(b)
	1000	6.827953314	6.697032863	6.694220743 ^(b)
	10000	14.68713887	14.40408700	14.39799534 ^(b)
1	1	0.8125000002	0.775926535	0.72046305 ^(b)
	10	1.531250000	1.504950843	1.50037353661 ^(b)
	100	3.192444044	3.132656725	3.1311563681 ^(b)
	1000	6.827953314	6.697032957	6.694210119 ^(b)
	10000	14.68713887	14.40408704	14.397945374 ^(b)
10	10	1.531250000	1.348111609	0.8253511 ^(c)
	100	3.192444044	3.129083558	3.1084444114 ^(b)
	1000	6.827953314	6.697033979	6.693147577 ^(b)
	10000	14.68713887	14.40408750	14.397945374 ^(b)
100	100	3.192444044	2.358542848	2 ^(b)
	10000	14.68713887	14.40405475	14.392996719 ^(b)

^(a) [38], ^(b) [39], ^(c) [40]

Tableau 03: Energie de l'état fondamental de l'oscillateur anharmonique, pour différents jeux de paramètres γ et η , avec $\alpha = 1$ pour le cas: $V_{int}(x) = \frac{\alpha}{2}x^2 + \eta x^4 + i\gamma x^3$.

3.8 La fonction de partition à D dimensions

En générale, nous pouvons écrire l'expression de la fonction de partition d'une particule dans un système à D dimension comme :

$$\mathbb{Z} = \int D^D q \sqrt{g} \exp(-A[q]), \quad (3.66)$$

où $A[q]$ est l'expression de l'action euclidien

$$A[q] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{1}{2} g_{\mu\nu}(q(\tau)) \dot{q}^\mu(\tau) \dot{q}^\nu(\tau) + V(q(\tau)) \right], \quad (3.67)$$

avec $g_{\mu\nu}$ est la métrique.

Pour développer la méthode, nous séparons l'action $A[q]$ en deux parties, la première est l'action des fluctuations harmoniques s'écrit:

$$A^{(0)}[q_a; \delta q] = \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau g_{\mu\nu}(q_a) [\delta \dot{q}^\mu(\tau) \delta \dot{q}^\nu(\tau) + \omega^2 \delta q^\mu(\tau) \delta q^\nu(\tau)], \quad (3.68)$$

la deuxième partie représente l'interaction autour d'un point q_a^μ en puissances de la perturbation $\delta q^\mu = q^\mu - q_a^\mu$

$$A^{int}[q_a; \delta q] \equiv A[q] - A^{(0)}[q_a, \delta q]. \quad (3.69)$$

Le deuxième terme de l'équation (3.68) dépend de fréquence est appelé terme de fréquence. Elle n'est pas invariant sous les transformations de coordonnées.

On détermine la fonction de partition dans le cas générale, à partir du terme de la mesure, mais le problème qui pose est la racine carrée de la métrique dans l'équation (3.66).

Nous pouvons écrire la forme continue de définition de la mesure comme:

$$\begin{aligned} \int D^D q \sqrt{g} &\equiv \Pi_\tau \int d^D q(\tau) \sqrt{g(\tau)} \\ &= \left[\Pi_\tau \int d^D q(\tau) \sqrt{g(q_a)} \right] \exp \left[\frac{1}{2} \sum_\tau \log \frac{g(q(\tau))}{g(q_a)} \right], \end{aligned} \quad (3.70)$$

$\delta(0)$ est définie dans l'intégrale $\int d\tau \delta(\tau) = 1$, dans la représentation de transformation de Fourier elle s'écrit comme :

$$\delta(0) = \int \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Alors le terme de mesure s'écrit :

$$\int D^D q \sqrt{g} = \left[\Pi_\tau \int d^D q(\tau) \sqrt{g(q_a)} \right] \exp \left[\frac{1}{2} \delta(0) \int_0^{\hbar\beta} d\tau \log \frac{g(q(\tau))}{g(q_a)} \right]. \quad (3.71)$$

Et encore :

$$\int D^D q \sqrt{g(q_a)} \exp(-A^g[q]), \quad (3.72)$$

où nous introduisons l'action effective associée de la mesure :

$$A_g[q] = -\frac{1}{2} \delta(0) \int_0^{\hbar\beta} d\tau \log \frac{g(q(\tau))}{g(q_a)}. \quad (3.73)$$

Pour un traitement perturbatif, cette action est simplifiée pour plusieurs valeur de δq :

$$A_g[q_a, \delta q] = -\frac{1}{2} \delta(0) \int_0^{\hbar\beta} d\tau [\log g(q_a, \delta q(\tau)) - \log g(q_a)], \quad (3.74)$$

on injecte ce terme de l'action effective en équation (3.69) pour donner l'action d'interaction totale :

$$A_{tot}^{int}[q_a, \delta q] = A^{int}[q_a, \delta q] + A_g[q_a, \delta q].$$

D'après ces calculs, nous pouvons écrire la forme de la fonction de partition:

$$\mathbb{Z} = \int D^D q \sqrt{g(q_a)} \exp(-A^{(0)}[q]) \exp(-A_{tot}^{int}[q]). \quad (3.75)$$

Selon les règles de la théorie des perturbation, nous étendons le facteur $A_{tot}^{int}[q]$ dans puissances de l'interaction totale, et obtenir les séries de perturbation, par rapport à la fonction de partition Z_ω de l'oscillateur harmonique :

$$\begin{aligned} \mathbb{Z} &= \int D^D q \sqrt{g(q_a)} \left(1 - A_{tot}^{int} + \frac{1}{2! \hbar^2} A_{tot}^{int^2} - \frac{1}{3! \hbar^3} A_{tot}^{int^3} + \dots \right) \exp(-A^{(0)}[q]) \\ &= Z_\omega \left[1 - \langle A_{tot}^{int} \rangle + \frac{1}{2! \hbar^2} \langle A_{tot}^{int^2} \rangle - \frac{1}{3! \hbar^3} \langle A_{tot}^{int^3} \rangle + \dots \right], \end{aligned} \quad (3.76)$$

où:

$$\begin{aligned} \mathbb{Z}_\omega &= \int D^D q \sqrt{g(q_a)} \exp(-A^{(0)}[q]) \\ &= \exp(-\beta F_\omega). \end{aligned} \quad (3.77)$$

Nous pouvons calculer ces valeurs moyennes par l'expression :

$$\langle \dots \rangle = Z_\omega^{-1} \int D q \sqrt{g(q_a)} (\dots) \exp(-A^{(0)}[q]). \quad (3.78)$$

Les valeurs moyennes $\langle \dots \rangle_{\omega, c}$ sont appelées cumulants

$$\langle A_{tot}^{int} \rangle_{\omega, c} = \langle A_{tot}^{int} \rangle, \quad (3.79)$$

$$\begin{aligned} \langle A_{tot}^{int^2} \rangle_{\omega, c} &= \langle [A_{tot}^{int} - \langle A_{tot}^{int} \rangle_\omega]^2 \rangle_\omega \\ &= \langle A_{tot}^{int^2} \rangle_\omega - \langle A_{tot}^{int} \rangle_\omega^2, \end{aligned} \quad (3.80)$$

et

$$\begin{aligned} \langle A_{tot}^{int^3} \rangle_{\omega, c} &= \langle [A_{tot}^{int} - \langle A_{tot}^{int} \rangle_\omega]^3 \rangle_\omega \\ &= \langle A_{tot}^{int^3} \rangle_\omega - 3 \langle A_{tot}^{int^2} \rangle_\omega \langle A_{tot}^{int} \rangle_\omega + 2 \langle A_{tot}^{int} \rangle_\omega^3. \end{aligned} \quad (3.81)$$

Cas général, à l'ordre n :

$$\langle A_{tot}^{int^{(n)}} \rangle_{\omega, c} = \langle [A_{tot}^{int} - \langle A_{tot}^{int} \rangle_\omega]^{(n)} \rangle_\omega. \quad (3.82)$$

Alors, la fonction de partition peut écrire sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathbb{Z} &= \exp(-\beta F) \\ &= \exp \left[-\beta F_\omega - \langle A_{tot}^{int} \rangle_c + \frac{1}{2! \hbar^2} \langle A_{tot}^{int^2} \rangle_c - \frac{1}{3! \hbar^3} \langle A_{tot}^{int^3} \rangle_c + \dots \right], \end{aligned} \quad (3.83)$$

où F_ω est l'énergie libre associée à Z_ω s'écrit :

$$F_\omega = -\beta^{-1} \log \mathbb{Z}.$$

La fonction de partition de l'oscillateur harmonique donnée dans Z_ω (3.77) est performée en utilisant les formules;

$$\begin{aligned} \mathbb{Z}_\omega &= \exp(-F_\omega \beta) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{\omega'} \log(\omega' + \omega^2)\right), \end{aligned} \quad (3.84)$$

et

$$F_\omega = \frac{D \omega}{2}.$$

On peut choisir $g_{\mu\nu}(q_a) = \delta_{\mu\nu}$, nous obtenons à D -dimensions:

$$\begin{aligned} \mathbb{Z}_\omega &= \int Dq \exp(-A_\omega[q]) \\ &= \exp\left[-\frac{D}{2} \text{Tr} \log(-\partial^2 + \omega^2)\right] \\ &\equiv \exp(-\beta F_\omega). \end{aligned} \quad (3.85)$$

3.8.1 A basse température

Nous considérons la limite que $T \rightarrow 0$ or $\beta \rightarrow \infty$, alors l'énergie libre :

$$\begin{aligned} F_\omega &= \frac{D\omega}{2} \quad \text{sachant que: } D = 1, 2, 3 \\ &= \frac{1}{\beta} \frac{D}{2} \text{Tr} \log(-\partial^2 + \omega^2) \\ &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \frac{D}{2} \text{Tr} \log(-\partial^2 + \omega^2) \\ &= \frac{D}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \log(k^2 + \omega^2), \end{aligned} \quad (3.86)$$

quand $\beta \rightarrow \infty$; La valeur moyenne des cumulant $\left\langle A_{tot}^{int^2} \right\rangle_c$ contient des intégrales temporelles mis sous forme de produits des fonctions de corrélations :

$$G_{\mu\nu}^{(2)}(\tau, \tau') = \left\langle q_\mu(\tau) q_\nu(\tau') \right\rangle, \quad (3.87)$$

$$\partial_\tau G_{\mu\nu}^{(2)}(\tau, \tau') = \left\langle \dot{q}_\mu(\tau) q_\nu(\tau') \right\rangle, \quad (3.88)$$

$$\partial_{\tau'} G_{\mu\nu}^{(2)}(\tau, \tau') = \left\langle q_{\mu}(\tau) \dot{q}_{\nu}(\tau') \right\rangle, \quad (3.89)$$

$$\partial_{\tau} \partial_{\tau'} G_{\mu\nu}^{(2)}(\tau, \tau') = \left\langle \dot{q}_{\mu}(\tau) \dot{q}_{\nu}(\tau') \right\rangle. \quad (3.90)$$

Supposons $g_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}$, la fonction de corrélation s'écrit :

$$G_{\mu\nu}^{(2)}(\tau, \tau') = \delta_{\mu\nu} \Delta(\tau - \tau'), \quad (3.91)$$

avec $\Delta(\tau - \tau')$ abrégé la corrélation de la fonction de Green à basse température $G_{\omega^2, e}^p(\tau)$, tel que :

$$\begin{aligned} G_{\omega^2, e}^p(\tau) &= \int \frac{d\omega_m}{2\pi} \frac{1}{\omega_m^2 + \omega^2} \exp(-i\omega_m \tau) \\ &= \frac{1}{2\omega} \exp(-\omega |\tau|), \end{aligned} \quad (3.92)$$

alors:

$$\begin{aligned} \Delta(\tau - \tau') &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk \exp(ik(\tau - \tau'))}{2\pi k^2 + \omega^2} \\ &= \frac{1}{2\omega} \exp(-\omega |\tau - \tau'|). \end{aligned} \quad (3.93)$$

Comme conséquence, la seconde fonction de corrélation (3.88) a une discontinuité :

$$\begin{aligned} \partial_{\tau} G_{\mu\nu}^{(2)}(\tau, \tau') &= \delta_{\mu\nu} i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk \exp(ik(\tau - \tau')) k}{2\pi k^2 + \omega^2} \\ &= \delta_{\mu\nu} \dot{\Delta}(\tau - \tau') \\ &= -\frac{1}{2} \delta_{\mu\nu} \epsilon(\tau - \tau') \exp(-\omega |\tau - \tau'|), \end{aligned} \quad (3.94)$$

avec $\epsilon(\tau - \tau')$ est une distribution définie comme :

$$\epsilon(\tau - \tau') = -1 + 2 \int_{-\infty}^{\tau} d\tau'' \delta(\tau'' - \tau'). \quad (3.95)$$

La troisième fonction de corrélation (3.89) simplifiée la négativité de (3.88)

$$\begin{aligned}
 \partial_{\tau'} G_{\mu\nu}^{(2)}(\tau, \tau') &= -\partial_{\tau} G_{\mu\nu}^{(2)}(\tau, \tau') \\
 &= -\delta_{\mu\nu} \dot{\Delta}(\tau - \tau').
 \end{aligned} \tag{3.96}$$

A $\tau = \tau'$, l'intégrale (3.94):

$$\begin{aligned}
 \partial_{\tau} G_{\mu\nu}^{(2)}(\tau, \tau') \Big|_{\tau=\tau'} &= -\partial_{\tau'} G_{\mu\nu}^{(2)}(\tau, \tau') \\
 &= \delta_{\mu\nu} i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{k}{k^2 + \omega^2} \\
 &= \delta_{\mu\nu} \dot{\Delta}(0) = 0.
 \end{aligned} \tag{3.97}$$

La quatrième fonction de corrélation (3.90) contient la fonction δ :

$$\begin{aligned}
 \partial_{\tau} \partial_{\tau'} G_{\mu\nu}^{(2)}(\tau, \tau') &= -\partial_{\tau}^2 G_{\mu\nu}^{(2)}(\tau, \tau') \\
 &= \delta_{\mu\nu} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\exp(ik(\tau - \tau')) k^2}{k^2 + \omega^2} \\
 &= -\delta_{\mu\nu} \ddot{\Delta}(\tau - \tau') \\
 &= \delta_{\mu\nu} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp(ik(\tau - \tau')) \left(1 - \frac{\omega^2}{k^2 + \omega^2}\right) \\
 &= \delta_{\mu\nu} \delta(\tau - \tau') - \omega^2 G_{\mu\nu}^{(2)}(\tau, \tau').
 \end{aligned} \tag{3.98}$$

La dernière équation est la fonction de Green, qui est la solution de l'équation de mouvement inhomogène relative l'action harmonique (3.68) :

$$-\ddot{q}(\tau) + \omega^2 q(\tau) = \delta(\tau - \tau'). \tag{3.99}$$

La fonction de Green $\Delta(\tau - \tau')$ est la solution de cette équation admet :

$$\ddot{\Delta}(\tau) = \omega^2 \Delta(\tau) - \delta(\tau). \tag{3.100}$$

Nous considérons un oscillateur harmonique ordinaire à $1D$, avec l'action A_{ω} est :

$$A_{\omega} = \frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\tau \left[\dot{x}^2(\tau) + \omega^2 x^2(\tau) \right]. \tag{3.101}$$

La valeur exacte de la fonction de partition donnée par (3.86) est :

$$\begin{aligned}
 Z_\omega &= \int Dx \exp(-A_\omega [x]) \\
 &= \exp \left[-\frac{D}{2} \text{Tr} \log(-\partial^2 + \omega^2) \right] \\
 &= \exp(-\beta F_\omega).
 \end{aligned} \tag{3.102}$$

La transformation de coordonnées de $x(\tau)$ à $q(\tau)$ tourne (3.102) à une intégrale de chemin de type (l'équation (3.66)), pour simplifier, nous supposons une simple transformation de coordonnée $x \rightarrow -x$:

$$\begin{aligned}
 x(\tau) &= \mathcal{F}_\eta(\eta q(\tau)) \\
 &= \frac{1}{\eta} \mathcal{F}(\eta q(\tau)) \\
 &= q - \frac{\eta}{3} q^3 + a \frac{\eta^2}{5} q^5 - \dots
 \end{aligned} \tag{3.103}$$

Où η est un paramètre de l'expansion.

a est un extra paramètre.

La transformation change la fonction de partition (3.102) à :

$$Z = \int Dq(\tau) \exp(-A_j [q]) \exp(-A [q]). \tag{3.104}$$

Où $A_j [q]$ est l'action transformée donnée par :

$$A_j [q] = -\delta(0) \int d\tau \log \left(\frac{\partial \mathcal{F}(q(\tau))}{\partial q(\tau)} \right). \tag{3.105}$$

Qui est l'action effective apportée du *Jacobien* de la transformation de coordonnée :

$$J = \prod_\tau \sqrt{\frac{\partial \mathcal{F}(q(\tau))}{\partial q(\tau)}}. \tag{3.106}$$

Le *Jacobien* joue le rôle de la racine carrée du déterminant de la métrique dans (3.66), et $A_j [q]$ correspond à l'action effective $A_g [\delta q]$ dans l'équation (3.74), l'action transformée est :

$$A_\omega [q] = \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \left[\dot{q}^2(\tau) + \omega^2 q^2(\tau) \right]. \tag{3.107}$$

Et le terme interaction correspond à (3.69), donné en terme du seconde ordre du paramètre η :

$$A^{int} [q] = \int_0^\beta d\tau \left\{ -\eta \left[q^2(\tau) \dot{q}^2(\tau) + \frac{\omega^2}{3} q^4(\tau) \right] + \eta^2 \left[\left(\frac{1}{2} + a \right) q^4(\tau) \dot{q}^2(\tau) + \omega^2 \left(\frac{1}{18} + \frac{2a}{5} \right) q^6(\tau) \right] \right\}. \quad (3.108)$$

Cette dernière est trouvée d'après (3.69) par l'insertion de la métrique à $1D$:

$$\begin{aligned} g_{00}(q) &= g(q) \\ &= [\mathcal{F}'(\eta q)]^2 \\ &= 1 - 2\eta q^2 + (1 + 2a)\eta^2 q^4 + \dots \end{aligned} \quad (3.109)$$

L'action *Jacobienne* (3.105) est :

$$A_j [q] = -\delta(0) \int_0^\beta d\tau \left[-\eta q^2(\tau) + \eta^2 \left(a - \frac{1}{2} \right) q^4(\tau) \right]. \quad (3.110)$$

Et la perturbation (3.83) fait paraître avec l'interaction totale :

$$A_{tot}^{int} [q] = A^{int} [q] + A_j [q], \quad (3.111)$$

pour $\eta = 0$, la fonction de partition transformée (3.104) coïncide avec (3.102).

L'application de la méthode des corrections systématiques sur un potentiel central est très importante dans la mécanique quantique pour faire un plus du formalisme de Feynman. Nous pouvons déterminer la fonction de partition en fonction des valeurs moyennes de l'action d'interaction totale d'ordre 3. Cette fonction nous a permis de déterminer aussi l'énergie de l'état fondamental du système.

Conclusion

Dans notre travail, nous avons utilisés les intégrales de chemins dans la résolution des problèmes de la mécanique quantique.

Nous avons présenté deux parties distinctes : la première avait pour objet, de calculer le spectre des énergies en appliquant la méthode des inégalités de Bertlman-Martin en utilisant l'énergie et la fonction d'onde de l'état fondamentale décrite par un potentiel de $P-T$. Nous avons introduit un terme correctif (facteur correctif C) afin de définir le spectre des énergies pour n'importe quel potentiel. Pour cela, nous avons également calculé par la méthode des inégalités de Bertlman-Martin les énergies de la ligne de Yrast pour le potentiel de Pöschl-Teller: À une dimension la valeur de l'énergie de l'état de fondamentale est exacte, par contre à 3 dimensions le calcul est délicate, alors nous sommes passés à résoudre numériquement. Nos résultats se comparent à celles données par les valeurs exactes.

Dans la deuxième partie, afin de calculer dans l'énergie de l'état fondamental, nous avons introduit les correction dites systématiques, qui fait appel au traitement perturbatif et à la méthode variationnelle de Kleinert. Ces corrections sont des cumulants d'ordre 3 interviennent de degrés de l'action A .

Nous avons calculé l'énergie de l'état fondamentale pour un potentiel quartique anharmonique (de degré 4). En tenant compte des cumulants du premier, deuxième et troisième ordre, nos résultats obtenus pour les cas étudiés sont meilleurs, le passage aux cumulants d'ordre supérieure à trois conduit à des calculs compliqués mais sous forme exponentielle conduit à des résultats moins compliqués.

Bibliographie

- [1] R. P. Feynman and Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals (Mc Graw-Hill, 1965).
- [2] R. P. Feynmann, Rev. Mod. Phys. 20 (1948) 367.
- [3] P. M. A. Dirac, The principles of quantum mechanics (Oxford Clarindon press, London, 1958).
- [4] T. Ichinose and H. Tamura, Prog. Theor. Phys. Supp. 92 (1987) 144.
- [5] T. Jacobson, J. Phys. A 17 (1984) 2433
- [6] T. Jacobson and L. S. Schulman, J. Phys A 17 (1984) 375.
- [7] T. Boudjedaa, L. Chetouani, L. Guechi and T. F. Hammann, Physica Scripta 46 (1992) 289.
- [8] E. Nelson, J. Math. Phys. 5 (1964) 332.
- [9] H. Kleinert, Path integrals in Quantum Mechanics, Statistic, Polymer Physics and Financial Markets (World Scientific, Singapore, 2004).
- [10] L. Chetouani, A. Chouchaoui and T. F. Hammann, Phys. Lett, A 204 (1995) 798b.
- [11] I. H. Duru and H. Kleinert, Phys. Lett, B 84 (1979) 185.
- [12] T. Jacobson and L. S. Schulman, J. Phys A : Math. Gen. 17(1984) 375.
- [13] L. S. Schulman, Techniques and Applications of Path Integrals (Wiley, New York, 1981).
- [14] M. S. Swanson, Path integrals and Quantum Processes (Academic Press Inc. , New York, 1992).

- [15] J. L. Gervais, A. Jevicki and B. Sakita, *Phys. Rep.* 23 C (1975) 281.
- [16] S. Coleman, *Uses of Instantons in The Whys of Subnuclear Physics*, Erice 1977, ed. A. Zichichi (Plenum, New York, 1995).
- [17] V. Volterra, *Theory of Functionals and of Integral and Integro-Differentiel Equation* (McGraw, NewYork, 1965).
- [18] R. P. Feynmann, A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw, NewYork, 1965).
- [19] D. C. Khandekar, S. V. Lawande, *Phys. Rev.* 37 (1986) 115.
- [20] M. Sadouki, (Mémoire de Magister, U. S. T. H. B, 2009).
- [21] L. Boudebza, (Mémoire de Magister, Université Mentouri Constanine, 2007).
- [22] R. A. Bertlmann and A. Martin, *Nucl. Phys. B* 168 (1980) 111.
- [23] R. A. Bertlmann and A. Martin, *Nucl. Phys. B* 182 (1981) 35.
- [24] W. Thirring, *Lehrbuch der Mathematischen Physik, Bd.3, Quanten-mechanik von Atomen und Molekülen* (Springer-Verlag, 1979).
- [25] I. H. Duru and H. Kleinert, *Fortschr. Phys.* 30 (1982) 4010.
- [26] A. Inomata, *Phys. Lett. A* 101 (1984) 253.
- [27] F. Z. Ighezou and R. J. Lombard. *Ann. Phys.* 278, (1999) 265.
- [28] R. J. Lombard. S. Marcos and J. Mares. *Phys. Rev. C* 50, (1994) 2900.
- [29] R. Dutt and U. Mukherji, *Phys. Lett. A* 90 (1982), 395.
- [30] A. Grigahcène, (Thèse de Magister, U. S. T. H. B, 1999).
- [31] H. Kleinert, *Phys. lett. A* 173 (1993) 332.
- [32] H. Kleinert, *Phys. lett. B* 280 (1992) 251.
- [33] M. Bentaiba, (Thèse de doctorat es-Sciences Physiques. Université de Blida, 1997).
- [34] H. Boukabcha, (Mémoire de Magister, U. S. T. H. B, 2005).

- [35] C. M. Bender, G. V. Dunne, *J. Math. Phys.* 40 (1999) 4616.
- [36] A. Mazouz, (Thèse de Magister, U. S. T. H. B, 2001).
- [37] H. Boukabcha, A. Diaf and A. Chouchaoui. *Acta Physica Polonica B*, vol 40 (2009) 15.
- [38] S. Srivastuva and Vishwamittar, *Chimical. Phys. Lett.* Volume 176, number 3, 4 (1990) 266.
- [39] C. S. Lai and M. P. Madan, *Mol. Phys.* 54 (1985) 669.
- [40] C. S. Hsue and J. L. Chern, *Phys. Rev. D* 29 (1984) 643.