

N° d'ordre: 20 / 2005 - M / PH -

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE**  
**MINISTRE D'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA**  
**RECHERCHE SCIENTIFIQUE.**

**Université des Sciences et de la Technologie**

**«Houari Boumediene »**

**FACULTE DE PHYSIQUE**



## **MEMOIRE**

Présenté pour l'obtention du diplôme de Magister

En : PHYSIQUE

Spécialité: Physique Théorique

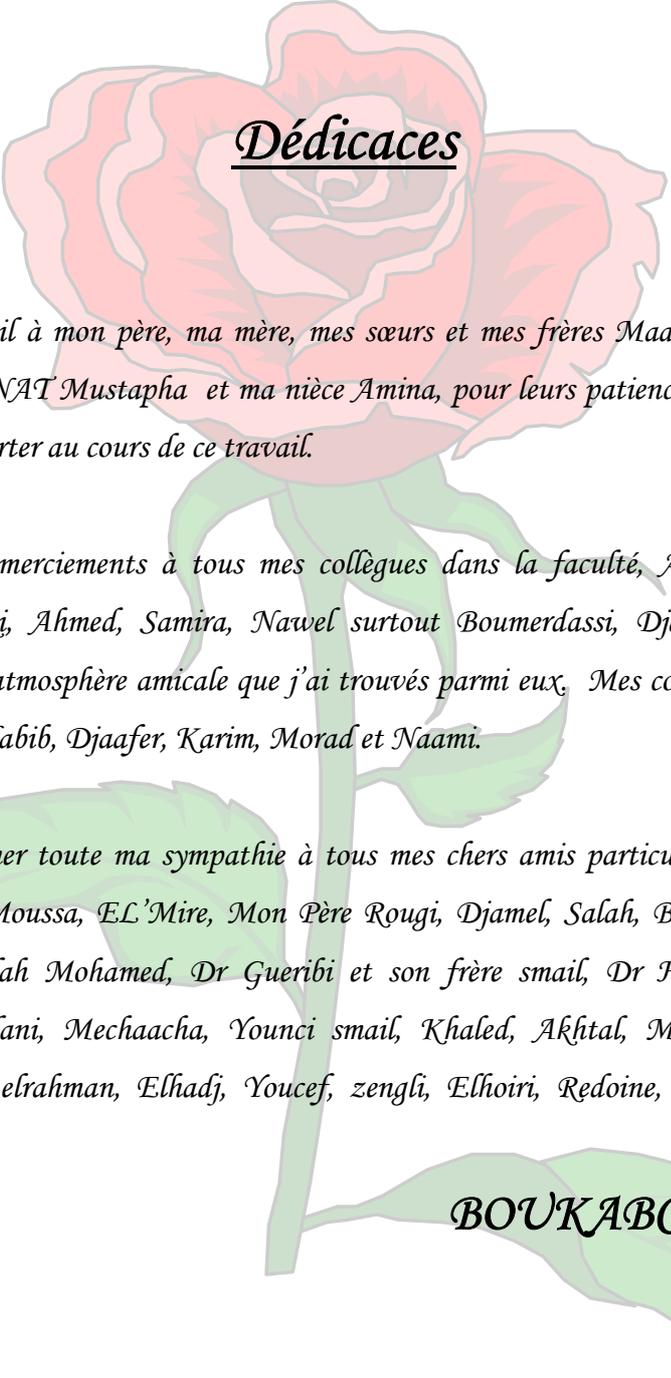
Par: **BOUKABCHA Hocine**

### **Thème:**

**Application des intégrales de chemins et des inégalités de Bertlmann et Martin dans le domaine des basses énergies.**

Soutenu le 09 / 07 /2005 devant le jury composé de:

M. FELLAH	Professeur (U.S.T.H.B)	Président
A. CHOUCHAOUI	Professeur (U.S.T.H.B)	Directeur de thèse
N.H ALLAL	Professeur (U.S.T.H.B)	Examinatrice
F.Z IGHEZOU	Professeur (U.S.T.H.B)	Examinatrice
M. BENTAIBA	Maître de conférences (U. Blida)	Examineur
F. CHAFA	Maître de conférences (U.S.T.H.B)	Examinatrice



## Dédicaces

*Je dédie ce travail à mon père, ma mère, mes sœurs et mes frères Maamer, Ibrahim, Abd elhadî, la famille de BANAT Mustapha et ma nièce Amina, pour leurs patiences et leurs soutiens qu'ils n'ont cessés d'apporter au cours de ce travail.*

*J'exprime mes remerciements à tous mes collègues dans la faculté, Ali, Hassani, Saïd, Moussa, Aissa, Mebarki, Ahmed, Samira, Nawel surtout Boumerdassi, Djamila, Yasmina et Hamida pour l'aide et l'atmosphère amicale que j'ai trouvés parmi eux. Mes collègues de première année PG, Massinissa, Habib, Djaafer, Karim, Morad et Naami.*

*Je tiens à exprimer toute ma sympathie à tous mes chers amis particulièrement Mourad, Ahmed Smina, Karim, Moussa, EL'Mire, Mon Père Rougi, Djamel, Salah, Benzenati, Mekatli, Ali, Aidate, Samir, Delah Mohamed, Dr Gueribi et son frère smail, Dr Habchi, Nouredine, Benouna, Farouk, Madani, Mechaacha, Younci smail, Khaled, Akhital, Mensseur, et à mes collègues: Bouzid, Abd elrahman, Elhadj, Youcef, zengli, Elhoiri, Redoine, Mecrifi et Elhadj BOUKABCHA.*

**BOUKABCHA Hocine**

## Remerciements

*Ce travail a été réalisé au laboratoire de Physique Théorique de la faculté de physique de l'U.S.T.H.B, sous la direction de Monsieur Ahmed CHOUCHAOUI, Professeur à l'U.S.T.H.B. Je tiens à le remercier pour la confiance qu'il m'a témoignée en me confiant ce travail, ainsi que pour l'aide constante et les conseils judicieux qu'il m'a donnés tout au long de ce travail. Qu'il trouve, ici l'expression de ma profonde gratitude.*

*Je remercie Monsieur M. FELLAH, Professeur à l'U.S.T.H.B, pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance, pour avoir accepté de juger ce travail, et pour avoir fourni les moyens matériels à notre équipe de recherche, me permettant de réaliser mon travail dans de bonnes conditions.*

*Je remercie également Melle N. H. ALLAL et Mme F. Z. IGHEZOU, Professeurs à l'U.S.T.H.B, Mme F. CHAFA, Maître de conférences à l'U.S.T.H.B, et M' M. BENTAIBA Maître de conférences à l'université de BLIDA, pour l'intérêt qu'ils ont bien voulu accorder à cette thèse en acceptant de participer au jury.*

*Mes remerciements sont aussi adressés à tous mes collègues du laboratoire de Physique Théorique ainsi qu'à tous mes amis pour leur soutien et leur aide amicale qu'ils m'ont apportés tout au long de ce travail.*

## Sommaire

Introduction.....	1
<b>I. Définition et construction du propagateur de Feynman</b>	
I.1 Expérience de pensée de Feynman.....	5
I.2 Détermination de l'expression du propagateur par la méthode du produit de Lie-Trotter.....	8
<b>II. La méthode de Feynman-Kleinert</b>	
II.1 Notion de physique statistique.....	11
II.2 La fonction de partition en physique statistique.....	11
II.3 La fonction de partition en termes d'intégrales de chemins.....	13
II.4 Mesure fonctionnelle dans l'espace de Fourier.....	17
II.5 Ecriture de la fonction de partition d'essai.....	20
II.5.1 Détermination de la fonction $L_1(x_0)$ .....	24
II.5.2 Détermination de la fréquence d'essai $\Omega(x_0)$ .....	25
II.6 La précision de l'approximation .....	29
II.7 Résultats et discussion.....	31

### III. Les inégalités de Bertlmann et Martin

III.1 Historique de la méthode.....	33
III.2 Formulation des inégalités de Bertlmann et Martin.....	34
III.3 Méthode variationnelle de Ritz.....	36
III.4 Application aux potentiels sextique et quartique.....	38
III.5 Facteur de forme.....	41
III.6 Densité d'états du fondamental.....	52

### IV. Les corrections systématiques

IV.1 Notion de fonction de corrélation et de fonctionnelle génératrice..	58
IV.2 Passage à la fonction de Green.....	60
IV.3 Application de la règle de Wick .....	61
IV.4 Développement perturbatif de la fonction de partition .....	62
IV.5 Application à l'oscillateur anharmonique .....	63
IV.5.1 Application aux potentiels quartique et sextique .....	63
IV.5.2 Cas du potentiel anharmonique englobant des termes cubique et quartique .....	67
IV.6 Introduction des corrections systématiques .....	68
Conclusion .....	73
Appendice .....	75
Bibliographie .....	78

# Introduction

# Introduction

Avant de nous étaler sur le formalisme de Feynman, il est utile de donner un aperçu sur l'état de la physique au début du 20<sup>ème</sup> siècle. Les résultats obtenus par les chimistes vers le milieu du 19<sup>ème</sup> siècle ont imposé la notion d'atome. Cette idée a été renforcée par les travaux des physiciens dans le domaine de la cinétique des gaz. Tous les phénomènes physiques connus à cette époque trouvaient une explication théorique à la lumière de la mécanique classique. Cette sérénité fût vite troublée par la découverte de phénomènes physiques nouveaux qui échappaient, à cette époque, à toute description théorique classique.

Nous pouvons citer comme problèmes:

- Le rayonnement du corps noir.
- L'effet photoélectrique.
- L'effet Compton.

Deux écoles défendaient alors, en se basant sur des "arguments" scientifiques, leur point de vue. Les uns voyaient que la théorie de la continuité était la plus appropriée alors que d'autres (Planck, Boltzmann....), forts de nombreuses preuves expérimentales, étaient les défenseurs de la discontinuité. Il fallait donc trouver des solutions aux problèmes posés, et par la même trancher entre deux conceptions tout à fait inconciliables.

Planck a trouvé en 1900 une solution au problème du corps noir en écrivant que l'énergie d'un oscillateur harmonique ne peut prendre que des valeurs discontinues multiples d'une quantité appelée " quanta d'énergie ". Cette conception donne au rayonnement lumineux un caractère corpusculaire.

Einstein en 1905, allant plus loin que Planck, décrit le rayonnement lumineux comme étant constitué de photons d'énergie  $h\nu$ . Ceci lui a permis de trouver une explication cohérente à l'effet photoélectrique. Schrödinger a, par la suite, fait une synthèse de tous ces résultats avant de présenter en 1926 un formalisme mathématique de la mécanique ondulatoire. Une année après, Heisenberg détruit la notion de trajectoire, propre à la mécanique classique, en introduisant le principe d'incertitude; confirmant ainsi le caractère probabiliste de la théorie ondulatoire [1,2].

Dirac a en 1929, construit une mécanique quantique relativiste qui fait apparaître le spin de l'électron comme une conséquence logique de la théorie, confirmant ainsi les hypothèses de Uhlenbeck et Goudsmit [2]. Ces formalismes reposent sur des équations différentielles qui leur acquièrent un caractère local.

Feynman a, quant à lui, présenté en 1948 un point de vue nouveau de la mécanique ondulatoire. Son formalisme est considéré comme une formulation globale de la mécanique quantique qui s'articule autour d'un être mathématique appelé "propagateur".

Pour construire son propagateur, Feynman a généralisé les résultats de Dirac [3] au cas d'un intervalle de temps fini. Selon Dirac la fonction de Green solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps peut se mettre, dans un intervalle de temps infinitésimal, sous forme d'une exponentielle ayant pour forme:  $\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$ .  $S$  est l'action du système physique étudié, calculée entre deux instants voisins  $t$  et  $t + \varepsilon$ . C'est en divisant un intervalle de temps fini  $[t_i, t_f]$  en  $N$  intervalles de temps égaux à  $\varepsilon$ , que Feynman a pu adapter les résultats de Dirac à son problème en ramenant le calcul de son propagateur à celui d'une intégrale fonctionnelle dont le principe est connu depuis longtemps par les mathématiciens. En effet, Volterra [4] a résolu ce problème en remplaçant la fonctionnelle par une fonction d'un nombre fini  $N$  de variables, et a abouti ainsi à une intégrale multiple de Riemann que l'on sait calculer.

Feynman a pu, tout d'abord, résoudre plusieurs problèmes fondamentaux de la mécanique quantique tels la particule libre, l'oscillateur harmonique et les systèmes physiques décrits par des lagrangiens quadratiques en  $q$  et  $\dot{q}$ . Les travaux réalisés quelques années après, ont

permis à de nouvelles techniques de calcul de voir le jour. Nous pouvons citer, parmi ces méthodes de calcul, la méthode polygonale et l'approximation WKB qui utilise les solutions des équations de Euler-Lagrange dans le calcul des contributions de tous les chemins classiques. Van Vleck, Pauli et Morette [5,6 et 7] ont, quant à eux, proposé une méthode rapide pour arriver à l'expression du propagateur relatif à des systèmes physiques soumis à des potentiels de la forme

$$V(q) = \sum_{i=1}^N a_i q^{2i}.$$

La technique basée sur les transformations spatio-temporelles :  $x \rightarrow f(q)$  et  $t \rightarrow s$  a permis de venir à bout de plusieurs problèmes qui n'avaient pas alors de solutions dans le cadre du formalisme de Feynman. Le problème de l'atome d'hydrogène a résisté durant longtemps aux nombreuses tentatives des physiciens théoriciens. Il a fallu attendre l'année 1979 pour que I. Duru et H. Kleinert [8] trouvent une solution à ce vieux problème qui a focalisé l'attention de nombreux physiciens durant une quarantaine d'années. L'idée était d'utiliser des transformations de coordonnées et de temps semblables à celles que nous utilisons en mécanique classique pour résoudre le problème de Kepler. Ils ont pu ainsi ramener le problème coulombien dans  $\mathfrak{R}^3$  à celui d'un oscillateur harmonique dans  $\mathfrak{R}^4$ , dont le propagateur est connu exactement. Cette idée ingénieuse a ouvert un vaste champ d'investigation aux intégrales de Feynman, en leur permettant de trouver une application en physique statistique [9], en théorie des champs [10], en géophysique et même en économie [9].

Nous déterminerons, dans cette thèse, via le formalisme des intégrales de Feynman appliqué en physique statistique, la fonction d'onde et l'énergie de l'état fondamental qui serviront au calcul de tout le spectre des énergies moyennant les inégalités de Bertlmann et Martin (B.M).

Ces inégalités ont été établies par Bertlmann et Martin en étudiant les propriétés des systèmes à quarks lourds [11]. Elles ont permis d'estimer, de manière satisfaisante, les rayons carrés moyens et les spectres des énergies de différents systèmes physiques.

La méthode des inégalités de Bertlmann et Martin a été, par la suite, généralisée par R. J. Lombard et J. Marès [12]. Ils ont obtenu une suite de relations récurrentes entre les moments de la densité du fondamental et les différences d'énergie  $(E_{1\ell} - E_{1s})$ , où  $E_{1\ell}$  est l'énergie de

l'état  $1p$  et  $E_{1s}$  celle de l'état fondamental. Cette méthode suscite, actuellement, l'intérêt de nombreux physiciens qui tentent d'étendre son champ d'application à de nombreux problèmes tels : le problème à trois corps [13], les potentiels complexes et l'étude du problème inverse [14].

Nous nous intéresserons, d'autre part, à l'étude du facteur de forme et de la densité d'états relatifs à des systèmes physiques décrits par des potentiels anharmoniques. Cette étude nous permettra également de mieux évaluer la qualité de nos résultats obtenus dans le cadre du formalisme des intégrales de chemins.

Enfin, une dernière partie de cette thèse sera consacrée à l'introduction de corrections systématiques dans le calcul du potentiel effectif classique  $W_{eff}$  relatif à un potentiel comportant des perturbations de degrés impairs. Il est utile de rappeler qu'une étude similaire a été déjà réalisée, au sein de notre équipe, en considérant des potentiels sextiques et quartiques. Cette étude nous renseignera, sans doute, sur le choix de l'ordre de troncature de la série donnant  $W_{eff}$ , et de la contribution du chemin moyen  $x_0$  dans le calcul du potentiel effectif aux basses températures.

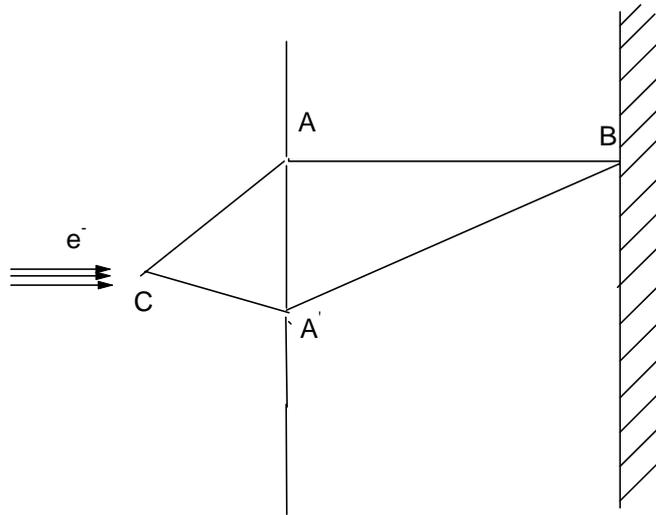
# Chapitre I

**Définition et construction du  
propagateur de Feynman**

## I. Définition et construction du propagateur de Feynman:

### I.1 Expérience de pensée de Feynman:

Le caractère ondulatoire des électrons, prouvé par Davisson et Germer [15], a permis à Feynman d'imaginer une expérience semblable à celle de Young, mais dans laquelle la lumière monochromatique est remplacée par un faisceau d'électrons.



Pour chaque tronçon de chemin suivi par l'électron avant d'arriver au point d'impact B, Feynman a associé une amplitude de probabilité  $\Phi$ . Au tronçon CA correspond une amplitude de probabilité  $\Phi_{CA}$ . L'amplitude pour que le chemin CAB soit suivi par l'électron est donné par:

$$\Phi_{CAB} = \Phi_{CA} \Phi_{AB} \quad (\text{I-01})$$

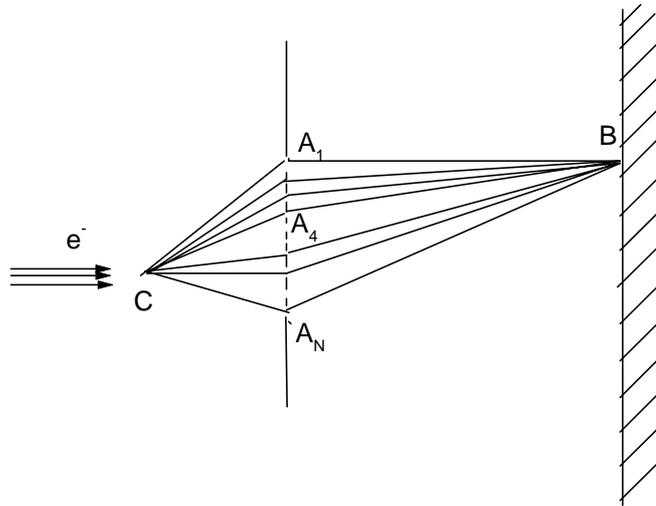
Le principe d'indiscernabilité des particules conduit à une amplitude globale

$$\Phi_G = \Phi_{CA} \Phi_{AB} + \Phi_{CA'} \Phi_{A'B} \quad (\text{I-02})$$

La probabilité pour que l'électron parte du point C et arrive au point B est donnée par:

$$P = |\Phi_{CAB} + \Phi_{CA'B}|^2 \quad (\text{I-03})$$

Feynman a étendu ces résultats, dans l'intervalle de temps  $[t', t'']$ , au cas d'une particule se déplaçant d'un point espace-temps  $(x', t')$  à un autre point  $(x'', t'')$  en imaginant un dispositif comportant une infinité de fentes.



Dans ce cas, l'amplitude de probabilité globale, correspondant à tous les chemins, est donnée par:

$$\Phi_G = \sum_{\text{tous les chemins}} \Phi(x(t)) \quad (\text{I-04})$$

cette amplitude globale est appelée, dans le formalisme des intégrales de chemins, propagateur de Feynman. Les amplitudes de probabilité  $\Phi(x(t))$  sont des fonctionnelles associées à tous les chemins possibles. Leur manipulation pose de sérieuses difficultés de calcul mathématique. Afin de les surmonter, l'intervalle  $[t', t'']$  est subdivisé en  $N$  intervalles de temps de même largeur  $\varepsilon$ . A chaque instant intermédiaire  $t_i = t' + i\varepsilon$  est associée une position  $x_i = x(t_i)$ . Ainsi, nous passons pour chaque chemin, d'une fonctionnelle  $\Phi(x(t))$  à une fonction d'un nombre fini de variables  $\Phi(x', x_1, x_2, \dots, x_{N-1}, x'')$ .

D'autre part, Dirac [3] a montré que le propagateur, solution de l'équation de Schrödinger dépendant de temps, est de la forme:

$$K(x'', t' + \varepsilon; x', t') = \sqrt{\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon}} \exp\left\{\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[ \frac{M}{2} \left( \frac{x'' - x'}{\varepsilon} \right)^2 - V(x') \right]\right\} \quad (\text{I-05})$$

pour  $t'$  voisin de  $t''$ .  $M$  est la masse de particule considérée.

Nous pouvons, en outre, démontrer que.

$$\Psi(x'', t'') = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x'', t' + \varepsilon; x', t') \Psi(x', t') dx' \quad (\text{I-06})$$

En effet,

$|\Psi(t'')\rangle = U(t', t'') |\Psi(t')\rangle$  où  $U(t', t'')$  est l'opérateur d'évolution permettant de connecter deux états associés à deux instants différents. En multipliant les deux membres de l'équation ci-dessus par le bra  $\langle x_2 |$ , et en injectant la relation de fermeture sur  $|x_1\rangle$ , il vient :

$$\langle x_2 | \Psi(t'') \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x_2 | U(t', t'') | x_1 \rangle \langle x_1 | \Psi(t') \rangle dx_1 \quad (\text{I-07})$$

ou encore

$$\Psi(x_2, t'') = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_2, t'', x', t') \Psi(x', t') dx' \quad (\text{I-08})$$

avec  $t'' = t' + \varepsilon$ .

Nous pouvons montrer, de proche en proche, que le propagateur de Feynman prend, pour un intervalle de temps quelconque  $[t', t'']$ , la forme suivante :

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{N/2} \int \dots \int \exp\left( \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N S(x_j, x_{j-1}; \varepsilon) \right) \prod_{j=1}^{N-1} dx_j, \quad (\text{I-09})$$

où  $S(x_j, x_{j-1}; \varepsilon) = \frac{M\varepsilon}{2} \left( \frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon} \right)^2 - \varepsilon V(x_j)$  est l'action du système physique étudié.

Le propagateur de Feynman est souvent donné, dans la littérature, sous la forme condensée:

$$K(x'', t''; x', t') = \int \exp\left( \frac{i}{\hbar} S(x(t)) \right) \mathcal{D}(x(t)), \quad (\text{I-10})$$

où  $\mathcal{D}(x(t))$  est la mesure d'intégration correspondant à tous les chemins possibles.

$$\mathcal{D}(x(t)) = \left( \frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{(N-1)/2} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \quad (\text{I-11})$$

L'expression (I-09) du propagateur de Feynman, montre que tous les chemins contribuent avec la même amplitude mais avec des phases différentes. La plus grande contribution provient des chemins voisins du chemin classique. Certains propagateurs relatifs à des systèmes physiques décrits par des lagrangiens de formes quadratiques en  $x$  et  $\dot{x}$ , se réduisent à leurs formes classiques.

## I.2 Détermination de l'expression du propagateur par la méthode du produit de Lie-Trotter:

Le propagateur de Feynman peut s'écrire en fonction de l'opérateur d'évolution  $U(t, t_0)$  comme suit:

$$K(x, t; x_0, t_0) = \langle x | \exp\left(-\frac{iT}{\hbar} H\right) | x_0 \rangle, \quad (\text{I-12})$$

où l'observable  $H$  est donnée en coordonnées cartésiennes par:

$$H = \frac{P^2}{2M} + V(x) \quad (\text{I-13})$$

$T$  étant l'intervalle de temps au cours duquel se produit la transition  $|x_0, t_0\rangle \rightarrow |x, t\rangle$ .

Nous pouvons d'après Lie et Trotter [16,17] écrire l'opérateur d'évolution sous la forme suivante:

$$\exp\left(-\frac{iT}{\hbar} \left[ \frac{P^2}{2M} + V(x) \right]\right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \exp\left(-\frac{iTP^2}{2M\hbar N}\right) \exp\left(-\frac{iTV(x)}{\hbar N}\right) \right\}^N \quad (\text{I-14})$$

L'équation (I-12) devient alors:

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x | \left\{ \exp\left(-\frac{iTP^2}{2M\hbar N}\right) \exp\left(-\frac{iTV(x)}{\hbar N}\right) \right\}^N | x_0 \rangle \quad (\text{I-15})$$

Sachant que les kets  $|x_i\rangle$  forment une base, cette propriété nous permet d'injecter (N-1) fois la relation de fermeture  $\int |x_i\rangle\langle x_i| dx_i = 1$  entre les N opérateurs partiels. L'équation ci-dessus devient:

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \exp\left(-\frac{iT}{\hbar N} V(x_j)\right) \langle x_j | \exp\left(-\frac{iTP^2}{2M\hbar N}\right) | x_{j-1} \rangle \prod_{j=1}^{N-1} dx_j. \quad (\text{I-16})$$

La seule difficulté réside dans le calcul du terme  $\langle x_j | \exp\left(\frac{-TP^2}{2M\hbar N}\right) | x_{j-1} \rangle$ . Ce dernier s'obtient en injectant la relation de fermeture écrite dans l'espace des impulsions. En effet,

$$\langle x_j | \exp\left(-\frac{iTP^2}{2M\hbar N}\right) | x_{j-1} \rangle = \int \langle x_j | \exp\left(-\frac{iTP^2}{2M\hbar N}\right) | p_j \rangle \langle p_j | x_{j-1} \rangle dp_j. \quad (\text{I-17})$$

L'action de l'opérateur  $P$  sur les kets  $|p_j\rangle$  conduit à:

$$\langle x_j | \exp\left(-\frac{iTP^2}{2M\hbar N}\right) | x_{j-1} \rangle = \int \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \left( \frac{T}{2MN} p_j^2 - p_j (x_j - x_{j-1}) \right)\right] dp_j. \quad (\text{I-18})$$

L'intégration sur la variable impulsion  $p_j$  donne:

$$\langle x_j | \exp\left(-\frac{iTP^2}{2M\hbar N}\right) | x_{j-1} \rangle = \sqrt{\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon}} \exp\left(\frac{iM}{2\hbar\varepsilon} (x_j - x_{j-1})^2\right), \quad (\text{I-19})$$

où  $\varepsilon = t_j - t_{j-1}$

Nous pouvons ainsi écrire le propagateur global  $K(x, t; x_0, t_0)$  sous la forme suivante:

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \left[ \frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left( \frac{M}{2\varepsilon} (x_j - x_{j-1})^2 - \varepsilon V(x_j) \right)\right) \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \quad (\text{I-20})$$

Le passage du produit d'exponentielles à l'exponentielle de la somme,

$$\prod_{j=1}^m \exp(w_j) = \exp\left(\sum_{j=1}^m w_j\right)$$

nous permet de mettre l'expression du propagateur sous sa forme lagrangienne standard.

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ \frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{N/2} \int \cdots \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left( \frac{M}{2\varepsilon} (x_j - x_{j-1})^2 - \varepsilon V(x_j) \right)\right) \prod_{j=1}^{N-1} dx_j. \quad (\text{I-21})$$

Il est parfois impératif d'utiliser la forme hamiltonienne du propagateur. Cette situation se présente dans l'étude de systèmes physiques soumis à des contraintes; telles les conditions

aux frontières pour une particule confinée dans une région [18]. Le calcul du propagateur, dans ce cas, se fait dans l'espace des phases.

Pour arriver à cette forme, nous remplaçons le terme  $\langle x_j | \exp\left(\frac{-T P^2}{2M\hbar N}\right) | x_{j-1} \rangle$  par son expression (I-18), sans pour autant intégrer sur la variable impulsion. Il vient alors,

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ \frac{1}{2\pi\hbar} \right]^N \int \cdots \int \exp\left( \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[ p_j (x_j - x_{j-1}) - \varepsilon \left( \frac{p_j^2}{2M} + V(x_j) \right) \right] \right) \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \prod_{j=1}^N dp_j. \quad (\text{I-22})$$

Il apparaît dans l'expression ci-dessus l'hamiltonien partiel  $H_j = \frac{p_j^2}{2M} + V(x_j)$  et le produit  $p_j \dot{x}_j$ . L'intégration se fait, dans ce cas, sur les deux variables  $x_j$  et  $p_j$  (espace des phases). Nous rencontrons souvent, dans la littérature, cette forme compacte pour le propagateur de Feynman:

$$K(x, t; x_0, t_0) = \int \cdots \int \exp\left( \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t (P\dot{x} - H(x, P)) dt \right) \mathcal{D}(x(t)) \mathcal{D}(P(t)) \quad (\text{I-23})$$

# Chapitre II

**La méthode de Feynman-Kleinert**

## La méthode de Feynman-Kleinert

### II.1 Notion de physique statistique:

Les calculs théoriques en physique statistique peuvent être effectués en termes des puissances de la constante de Planck  $\hbar = 1.0510^{-27} \text{ erg}$  et de la masse  $M$  du système étudié.

La suppression de ces deux grandeurs est équivalente à la suppression des trois unités fondamentales de mesure : le centimètre, la seconde, et le gramme en (c.s.g).

Pour toutes les applications que nous aurons à présenter, nous avons posé  $\hbar = M = 1$ .

### II.2 La fonction de partition en physique statistique:

Considérons un système physique ayant un nombre constant  $N$  de particules, et dont l'hamiltonien  $H$  ne dépend pas explicitement du temps. Chaque élément de volume de l'espace des phases  $\left(\frac{dpdq}{2\pi\hbar}\right)$ , ou cellule quantique, sera occupé avec une probabilité proportionnelle au facteur de Boltzmann.

$$\exp\left(-\frac{H}{k_B T}\right)$$

où  $k_B$  est la constante de Boltzmann  $k_B = 1.380622110^{-16} \text{ erg} / \text{K}$  et  $T$  est la température thermique. Pour des commodités de calcul, nous noterons la quantité  $\frac{1}{k_B T}$  par  $\beta$ , qu'on appellera abusivement température inverse.

L'intégration du facteur de Boltzmann sur tout l'espace des phases conduit à:

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

où  $Z_{cl}(T)$  est appelée fonction de partition classique. Pour un système à plusieurs degrés de liberté, la mesure d'intégrations dans l'espace des phases est donnée par :

$$\prod_n \int \frac{dp_n dq_n}{2\pi\hbar}.$$

Dans le cas de la statistique quantique, l'hamiltonien est remplacé par l'opérateur  $\hat{H}$ , et l'intégrale dans l'espace des phases par la trace dans l'espace de Hilbert. La fonction de partition s'écrit alors comme:

$$Z(T) = \text{tr} \left( \exp(-\beta \hat{H}(\hat{p}, \hat{x})) \right) \quad (\text{II-01})$$

Pour un hamiltonien possédant un ensemble complet et discret d'états propres  $\{|i\rangle\}$ , relatifs à des énergies propres  $E_i$ , la fonction de partition  $Z(T)$  s'écrit:

$$Z(T) = \sum_i \langle i | \exp(-\beta \hat{H}) | i \rangle$$

en tenant compte du fait que:

$$\hat{H}|i\rangle = E_i|i\rangle$$

il vient:

$$Z(T) = \sum_i \exp(-\beta E_i) \quad (\text{II-02})$$

Nous définissons, en outre, la valeur moyenne de l'observable  $\hat{H}$  à une température donnée  $T$ , comme suit :

$$E = \frac{\text{tr}(\hat{H} e^{-\beta \hat{H}})}{\text{tr}(e^{-\beta \hat{H}})} \quad (\text{II-03})$$

ou encore,

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z(T))$$

L'énergie libre  $F(T)$  de Helmholtz est, quant à elle, définie par:

$$F(T) = -\frac{1}{\beta} \ln(Z(T)),$$

cette énergie joue un rôle important dans l'analyse des transitions de phases, des taux de réactions et des caractéristiques des plasmas quark gluon. Certaines grandeurs physiques utilisées en physique statistique s'obtiennent à partir de l'énergie libre. En effet,

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V} \quad \text{et} \quad S = \beta^2 \frac{\partial F}{\partial \beta}$$

où  $V$ ,  $P$  et  $S$  sont respectivement le volume, la pression et l'entropie du système étudié.

En outre, la matrice densité est donnée par:

$$\rho = \sum_i \frac{\exp(-\beta E_i)}{Z} |i\rangle\langle i|$$

Dans la représentation "configuration" cette dernière s'écrit:

$$\rho(x, x') = \frac{1}{Z} \langle x | \exp(-\beta \hat{H}) | x' \rangle$$

en injectant l'identité  $\sum_i |i\rangle\langle i| = 1$ , on aboutit à:

$$\begin{aligned} \rho(x, x') &= \frac{1}{Z} \sum_i \exp(-\beta E_i) \langle x | i \rangle \langle i | x' \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_i \exp(-\beta E_i) \varphi_i(x) \varphi_i^*(x') \end{aligned} \quad (\text{II-04})$$

Il est évident que la connaissance de la fonction de partition est indispensable à la compréhension du comportement d'un système physique vis-à-vis de la température.

### **II.3 La fonction de partition en termes d'intégrale de chemins:**

La fonction de partition est définie comme étant la trace de l'opérateur d'évolution [9].

$$Z_{MQ}(t_b, t_a) = \text{tr}(\hat{U}(t_b, t_a)) = \text{tr} \left( \exp \left[ -i \frac{\hat{H}(t_b - t_a)}{\hbar} \right] \right)$$

Dans une base continue, la fonction de partition devient une intégrale sur l'amplitude de transition où les points de départ et d'arrivée sont supposés identiques.

$$Z_{MQ}(t_b, t_a) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_a \langle x_a t_b | x_a t_a \rangle$$

avec 
$$\langle x_a t_b | x_a t_a \rangle = \int \mathcal{D}x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{iA[p, x]}{\hbar}\right)$$

en tenant compte du fait que  $|x_{N+1}\rangle \equiv |x_0\rangle$ , et en subdivisant l'intervalle  $[t_a, t_b]$  en  $N$  intervalles de même largeur  $\varepsilon$ , la mesure devient:

$$\begin{aligned} \prod_{n=1}^{N+1} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_n dp_n}{2\pi\hbar} &= \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{N+1} \prod_{n=1}^N \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] \end{aligned} \quad (\text{II-05})$$

et à la limite de continuité on a:

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \prod_{n=1}^{N+1} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_n dp_n}{2\pi\hbar} = \oint \mathcal{D}x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar},$$

le symbole  $\oint$  indique la condition aux limites  $x(t_a) \equiv x(t_b)$ .

Dans le cas d'une base continue  $|x\rangle$ , la trace quantique correspond à une intégrale sur toutes les positions, de manière que la fonction de partition de la statistique quantique peut être obtenue en intégrant l'amplitude d'évolution temporelle sur la variable de départ.

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

En divisant l'intervalle  $[0, \beta]$  en  $N$  intervalles de température infinitésimaux, tous de largeur

$\varepsilon = \frac{\hbar\beta}{N+1}$ , la fonction de partition aura la forme d'une intégrale de chemins.

$$\begin{aligned} Z(T) &= \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \right] \langle x_{N+1} | \exp\left(-\frac{\varepsilon \hat{H}}{\hbar}\right) | x_n \rangle \langle x_n | \exp\left(-\frac{\varepsilon \hat{H}}{\hbar}\right) | x_{n-1} \rangle \dots \dots \dots \\ &\dots \langle x_1 | \exp\left(-\frac{\varepsilon \hat{H}}{\hbar}\right) | x_{N+1} \rangle \end{aligned} \quad (\text{II-06})$$

Les éléments de matrice  $\langle x_n | \exp\left(-\frac{\varepsilon \hat{H}}{\hbar}\right) | x_{n-1} \rangle$  s'écrivent de la même manière que dans le cas de la mécanique quantique standard:

$$\langle x_n | \exp\left(-\frac{\varepsilon \hat{H}}{\hbar}\right) | x_{n-1} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left(i \frac{p_n (x_n - x_{n-1})}{\hbar}\right) \exp\left(-\varepsilon \frac{H(p_n, x_n)}{\hbar}\right)$$

ce qui nous permet d'écrire la fonction de partition  $Z(T)$  comme suit:

$$Z(T) = \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} A_e^N\right) \right] \quad (\text{II-07})$$

où  $A_e^N$  est l'action euclidienne discrétisée.

$$A_e^N[p, x] = \sum_{n=1}^{N+1} [-ip_n (x_n - x_{n-1}) + \varepsilon H(p_n, x_n)] \quad . \quad (\text{II-08})$$

Nous avons utilisé le fait que:

$$\prod_{n=1}^{N+1} \exp(-y_n) = \exp\left(-\sum_{n=1}^{N+1} y_n\right)$$

En passant à la limite  $\varepsilon \rightarrow 0$ , l'action euclidienne devient:

$$A_e[p, x] = \int_0^{\hbar\beta} [-ip(\tau) \dot{x}(\tau) + H(p(\tau), x(\tau))] d\tau$$

et la fonction de partition sera donnée par l'intégrale de chemins suivante:

$$Z(T) = \int \mathcal{D}x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} A_e[p, x]\right)$$

$A_e[p, x]$  est également appelée action de la mécanique quantique statistique.

On écrit la fonction de partition statistique d'un hamiltonien de la forme

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

où  $\frac{p^2}{2M}$  est l'énergie cinétique et  $V(x, \tau)$  un potentiel lissé, comme suit:

$$\langle x_a \tau_b | x_a \tau_a \rangle = \prod_{n=1}^N \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} dp_n \right] \exp\left(-\frac{1}{\hbar} A_e^N\right) \quad (\text{II-09})$$

avec

$$A_e^N [p, x] = \sum_{n=1}^{N+1} \left[ -ip_n (x_n - x_{n-1}) + \varepsilon \frac{P_n^2}{2M} + \varepsilon V(x_n, \tau_n) \right] \quad (\text{II-10})$$

avant d'intégrer sur la variable  $P_n$ , nous réécrivons l'action sous la forme suivante :

$$A_e^N [p, x] = \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{\varepsilon}{2M} \left( P_n - i \frac{M(x_n - x_{n-1})}{\varepsilon} \right)^2 + \frac{M}{2} \varepsilon \left( \frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon} \right)^2 + \varepsilon V(x_n, \tau_n) \right] \quad (\text{II-11})$$

La formule de Fresnel [20],

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(i \frac{a}{2} x^2\right) = \frac{1}{\sqrt{|a|}} \begin{cases} \sqrt{i} & a > 0 \\ \sqrt{-i} & a < 0 \end{cases}$$

nous permet d'arriver aux résultats voulus :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dP_n}{2\pi\hbar} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \frac{\varepsilon}{2M} \left( P_n - i \frac{(x_n - x_{n-1})}{\varepsilon} M \right)^2\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\varepsilon/M}}$$

et

$$\begin{aligned} \langle x_a \tau_b | x_a \tau_a \rangle &= \int \mathcal{D}x \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 + V(x, \tau) \right]\right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\varepsilon/M}} \prod_{n=1}^N \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_n}{2\pi\hbar\varepsilon/M} \right] \\ &\quad \times \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{M}{2} \varepsilon \left( \frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon} \right)^2 + \varepsilon V(x_n, \tau_n) \right]\right\} \end{aligned}$$

la fonction de partition des statistiques quantiques est définie comme:

$$Z(T) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x, \hbar\beta | x, 0 \rangle$$

en d'autres termes,

$$Z(T) = \int dx \int_{(x,0) \rightarrow (x,\hbar\beta)} \mathcal{D}x \exp\left(-\frac{i}{\hbar} A_e[x]\right),$$

avec

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

où la mesure est donnée par:

$$\oint \mathcal{D}x = \prod_{n=1}^{N+1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi\hbar\varepsilon/M}}$$

la condition  $x(\hbar\beta) = x(0)$ , implique une périodicité des chemins  $x(\tau)$ . Il est, alors, possible d'exploiter cette périodicité en développant  $x(\tau)$  en termes de série de Fourier.

$$x(\tau) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \frac{x_m}{\sqrt{N+1}} \exp(-i\omega_m \tau)$$

où les  $\omega_m$  sont les fréquences de Matsubara

$$\omega_m \equiv \frac{2\pi m k_\beta T}{\hbar} = \frac{2\pi m}{\hbar\beta}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

et  $x(\tau) = x(\tau + \hbar\beta)$

#### II.4 Mesure fonctionnelle dans l'espace de Fourier:

Nous pouvons exprimer l'intégrale de chemins à l'aide des composantes de Fourier des chemins  $x(\tau)$ . Ceci est rendu possible par l'écriture de  $x(\tau)$  sous la forme suivante:

$$x(\tau) = x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (x_m \exp(i\omega_m \tau) + x_m^* \exp(-i\omega_m \tau))$$

où  $x_m$  est une fonction à variables complexes qui peut se mettre comme suit:

$$x_m = x_m^{re} + i x_m^{im},$$

de plus les composantes  $x_m$  vérifient la condition:

$$x_m = x_{-m}^*.$$

Cette décomposition du chemin  $x(\tau)$  nous permet d'écrire la mesure, intervenant dans l'expression de la fonction de partition, comme:

$$\oint \mathcal{D}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar\varepsilon/M}} \prod_{m=1}^{+\infty} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_m^{re} dx_m^{im}}{\sqrt{(2\pi\hbar\varepsilon/M \omega_m^2)}} \right]$$

alors que le terme énergie cinétique aura pour l'expression:

$$\frac{M}{2} \dot{x}^2 = M \sum_{m=1}^{\infty} \omega_m^2 |x_m|^2.$$

Finalement, la fonction de partition d'un système physique soumis à un potentiel  $V(x)$  est donnée par:

$$Z \equiv \exp(-F\beta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \prod_{m=1}^{+\infty} \left[ \iint \frac{dx_m^{re} dx_m^{im}}{(\pi/M\beta\omega_m^2)} \right] \times \exp \left\{ -M\beta \sum_{m=1}^{+\infty} \omega_m^2 |x_m|^2 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} V(x(\tau)) d\tau \right\} \quad (\text{II-12})$$

où  $F$  est l'énergie libre du système.

Après intégration sur toutes les composantes  $x_m^{re}$  et  $x_m^{im}$ , avec  $m \neq 0$ , l'intégrale ci-dessus se réduit à l'intégrale simple :

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \exp(-\beta V_{eff,cl}(x_0)) \quad (\text{II-13})$$

où  $V_{eff,cl}(x_0)$  est le potentiel effectif classique qui rend compte de tous les effets quantiques.

Nous pouvons appliquer ces calculs au cas d'un potentiel harmonique du type

$$V(x) = \frac{M}{2} \omega^2 x^2.$$

Sachant que:

$$x(\tau) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} x_m \exp(-i\omega_m \tau)$$

et 
$$x^*(\tau) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} x_m^* \exp(i\omega_m \tau)$$

le terme quadratique se réduit à:

$$x^2(\tau) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} |x_m|^2 = |x_0|^2 + 2 \sum_{m=1}^{+\infty} |x_m|^2$$

d'où 
$$V(x) = \frac{M}{2} \omega^2 |x_0|^2 + M \sum_{m=1}^{+\infty} \omega^2 |x_m|^2.$$

La fonction de partition relative à l'oscillateur harmonique s'écrit comme suit :

$$Z_{OH} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \prod_{m=1}^{+\infty} \left[ \iint_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_m^{re} dx_m^{im}}{(\pi/M\beta\omega_m^2)} \right] \times \exp \left\{ -M\beta \sum_{m=1}^{+\infty} (\omega_m^2 + \omega^2) |x_m|^2 - \frac{M\beta}{2} \omega^2 x_0^2 \right\}$$

où  $x_0$  est un nombre réel.

Après intégration sur les variables  $x_m^{re}$  et  $x_m^{im}$ , on obtient l'expression suivante :

$$Z_{OH} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \prod_{m=1}^{+\infty} \left[ \frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \omega^2} \right] \exp\left(-\frac{M\beta}{2}\omega^2 x_0^2\right)$$

### Démonstration:

Partant des relations:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha x^2) dx = \sqrt{\pi/\alpha}$$

et  $|x_m|^2 = |x_m^{re}|^2 + |x_m^{im}|^2$ ,

nous pouvons identifier le paramètre  $\alpha$  au terme  $M\beta(\omega_m^2 + \omega^2)$ , et l'intégrale donnant  $Z_{OH}$  devient:

$$\begin{aligned} Z_{OH} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \prod_{m=1}^{+\infty} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_m^{re}}{\pi/M\beta\omega_m^2} \right] \prod_{m=1}^{+\infty} \exp\left[-M\beta(\omega_m^2 + \omega^2)|x_m^{re}|^2\right] \\ &\quad \times \prod_{m=1}^{+\infty} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{im} \exp\left(-M\beta(\omega_m^2 + \omega^2)|x_m^{im}|^2\right) \right] \exp\left(-\frac{M\beta}{2}\omega^2 x_0^2\right) \end{aligned}$$

ceci conduit à :

$$Z_{OH} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \prod_{m=1}^{+\infty} \left( \frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \omega^2} \right) \exp\left(-\frac{M\beta}{2}\omega^2 x_0^2\right)$$

sachant que :

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

la fonction de partition prend alors la forme suivante :

$$Z_{OH} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \frac{\hbar\beta\omega/2}{\sinh(\hbar\beta\omega/2)} \exp\left(-\frac{M\beta}{2}\omega^2 x_0^2\right)$$

ou encore

$$Z_{OH} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \exp\left(\ln\left(\frac{\hbar\beta\omega/2}{\sinh(\hbar\beta\omega/2)}\right) - \frac{M\beta}{2}\omega^2 x_0^2\right) \quad (\text{II-14})$$

en comparant cette relation à celle faisant intervenir le potentiel effectif classique, on en déduit une expression pour ce dernier.

$$V_{eff,cl} = -\frac{1}{\beta} \ln \left( \frac{\hbar\beta\omega/2}{\sinh(\hbar\beta\omega/2)} \right) + \frac{M}{2} \omega^2 x_0^2 \quad (\text{II-15})$$

enfin, après intégration sur la variable  $x_0$ , l'équation précédente (II-14) devient:

$$Z_{OH} = \frac{1}{2 \sinh(\hbar\beta\omega/2)}. \quad (\text{II-16})$$

### II.5 Ecriture de la fonction de partition d'essai:

Choisissons une fonction de partition d'essai de la forme [9,19]:

$$Z_I = \exp(-\beta F_I) = \int \mathcal{D}x \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{M}{2} (\dot{x}^2 + \Omega^2 (x - x_0)^2) \right] \exp(-\beta L_I(x_0)) \quad (\text{II-17})$$

où les deux fonctions  $\Omega(x_0)$  et  $L_I(x_0)$ , dépendant de  $x_0$ , sont à déterminer. En utilisant les résultats déjà établis:

$$\int_0^{\hbar\beta} \frac{M}{2} \dot{x}^2 d\tau = \frac{M\hbar}{k_\beta T} \sum_{m=1}^{+\infty} \omega_m^2 |x_m|^2$$

et

$$(x - x_0)^2 = 2 \sum_{m=1}^{+\infty} |x_m|^2.$$

la fonction de partition d'essai devient:

$$Z_I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta\hbar^2/M}} \left( \frac{\hbar\beta\Omega(x_0)/2}{\sinh(\hbar\beta\Omega(x_0)/2)} \right) \exp(-\beta L_I(x_0)).$$

Nous pouvons mettre cette dernière sous la forme d'une fonction de partition classique:

$$Z_I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta\hbar^2/M}} \exp(-\beta W_I(x_0)) \quad (\text{II-18})$$

avec

$$W_I(x_0) = -\frac{1}{\beta} \ln \left( \frac{\hbar\beta\Omega(x_0)/2}{\sinh(\hbar\beta\Omega(x_0)/2)} \right) + L_I(x_0) \quad (\text{II-19})$$

nous choisirons parmi les potentiels  $W_I(x_0)$  leur limite supérieure optimale qui approche le mieux le potentiel effectif classique  $V_{eff,cl}(x_0)$ . La recherche d'une borne supérieure nécessite forcément l'utilisation d'une inégalité. Nous utiliserons dans ce travail l'inégalité de Jensen - Peierls [20] dont nous donnons ici un bref aperçu:

Soient deux fonctions  $f(x)$  et  $p(x)$  définies dans l'intervalle  $a \leq x \leq b$  telles que  $\alpha \leq f(x) \leq \eta$  et  $p(x) \neq 0$ . Soit  $\Phi(u)$  une fonction convexe définie dans l'intervalle  $a \leq u \leq b$ , nous pouvons alors écrire,

$$\Phi \left( \frac{\int_a^b f(x)p(x)dx}{\int_a^b p(x)dx} \right) \leq \frac{\int_a^b \Phi(f)p(x)dx}{\int_a^b p(x)dx}$$

en posant  $\Phi(u) = \exp(u)$  et  $p(x) = 1$ , il vient:

$$\exp \left( \frac{\int_a^b f(x)dx}{\int_a^b dx} \right) \leq \frac{\int_a^b \exp(f(x))dx}{\int_a^b dx}$$

d'où

$$\exp \langle f(x) \rangle \leq \langle \exp(f(x)) \rangle .$$

C'est l'inégalité de Jensen -Peierls.

Pour trouver une limite optimale au potentiel effectif classique, écrivons la fonction de partition originale comme suit:

$$Z = \int \mathcal{D}x \exp \left( -\frac{A}{\hbar} \right)$$

où  $A$  est l'action de système.

Nous pouvons mettre l'équation précédente sous la forme suivante:

$$Z = \int \mathcal{D}x \exp \left( -\frac{A_1}{\hbar} \right) \exp \left( -\frac{A - A_1}{\hbar} \right)$$

$A_1$  étant l'action euclidienne relative à la fonction de partition d'essai  $Z_1$ .

Nous pouvons exprimer la valeur moyenne du second terme exponentiel apparaissant dans l'expression ci-dessus comme suit:

$$\left\langle \exp\left(-\frac{A-A_1}{\hbar}\right) \right\rangle_1 = \frac{\int \mathcal{D}x \exp\left(-\frac{A_1}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{A-A_1}{\hbar}\right)}{\int \mathcal{D}x \exp\left(-\frac{A_1}{\hbar}\right)} \quad (\text{II-20})$$

d'où  $Z = Z_1 \left\langle \exp\left(-\frac{A-A_1}{\hbar}\right) \right\rangle_1$

L'écriture de l'inégalité de Jensen –Peierls pour l'équation précédente conduit à:

$$\left\langle \exp\left(-\frac{A-A_1}{\hbar}\right) \right\rangle_1 \geq \exp\left(-\frac{\langle A-A_1 \rangle_1}{\hbar}\right)$$

ou encore

$$Z \geq Z_1 \exp\left(-\frac{\langle A-A_1 \rangle_1}{\hbar}\right)$$

en d'autres termes,

$$\exp(-\beta F) \geq \exp(-\beta F_1) \exp\left(-\frac{\langle A-A_1 \rangle_1}{\hbar}\right)$$

il vient alors,

$$F \leq F_1 + \frac{\langle A-A_1 \rangle_1}{\hbar\beta} \quad (\text{II-21})$$

or

$$\langle A-A_1 \rangle_1 = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\langle V(x(\tau)) - \frac{M}{2} \Omega^2 (x-x_0)^2 - L_1(x_0) \right\rangle_1$$

d'où

$$F \leq F_1 + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\langle V(x(\tau)) - \frac{M}{2} \Omega^2 (x-x_0)^2 - L_1(x_0) \right\rangle_1 \quad (\text{II-22})$$

le calcul de la valeur moyenne du potentiel  $V(x(\tau))$  se fait via sa décomposition en termes de ses composantes de Fourier.

$$V(x(\tau)) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{V}(k) \exp(ikx(\tau))$$

où  $x(\tau)$  a été défini précédemment.

$$\langle V(x(\tau)) \rangle_1 = \frac{\int \mathcal{D}x V(x(\tau)) \exp\left(-\frac{A_1}{\hbar}\right)}{\int \mathcal{D}x \exp\left(-\frac{A_1}{\hbar}\right)}$$

d'une manière explicite,

$$\begin{aligned} \langle V(x(\tau)) \rangle_1 &= Z_1^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \prod_{m=1}^{+\infty} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_m^{re} dx_m^{im}}{\pi/M\beta\omega_m^2} \right] \\ &\times \exp\left\{ -M\beta \sum_{m=1}^{+\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)) |x_m|^2 - \beta L_1(x_0) \right\} \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{V}(k) \exp\left[ i k \left( x_0 + \sum_{m=1}^{+\infty} (x_m \exp(-i\omega_m \tau) + c.c) \right) \right] \end{aligned}$$

L'intégration sur les variables  $x_m^{re}$  et  $x_m^{im}$  conduit à:

$$\begin{aligned} \langle V(x(\tau)) \rangle_1 &= Z_1^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{V}(k) \prod_{m=1}^{+\infty} \left[ \frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)} \right] \\ &\times \exp\left\{ -\sum_{m=1}^{+\infty} \frac{k^2}{M\beta(\omega_m^2 + \Omega^2(x_0))} + i k x_0 - \beta L_1(x_0) \right\} \end{aligned}$$

en posant

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

L'expression de  $\langle V(x(\tau)) \rangle_1$  devient:

$$\begin{aligned} \langle V(x(\tau)) \rangle_1 &= Z_1^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \frac{\hbar\beta\Omega(x_0)/2}{\sinh(\hbar\beta\Omega(x_0)/2)} \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{V}(k) \exp\left\{ i k x_0 - \frac{a^2(x_0)}{2} k^2 - \beta L_1(x_0) \right\} \end{aligned}$$

La substitution de  $\tilde{V}(k)$  par son expression:

$$\tilde{V}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx V(x) \exp(-ikx)$$

donne, après intégration sur la variable  $k$ , le résultat suivant:

$$V_{a^2(x_0)}(x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx'_0}{\sqrt{2\pi a^2(x_0)}} V(x'_0) \exp\left(-\frac{(x'_0 - x_0)^2}{2a^2(x_0)}\right) \quad (\text{II-23})$$

où  $V_{a^2(x_0)}(x_0)$  est le potentiel "entaché d'erreurs" autour de la position  $x_0$ .

D'où enfin

$$\langle V(x(\tau)) \rangle_I = Z_I^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \frac{\hbar\beta\Omega(x_0)/2}{\sinh(\hbar\beta\Omega(x_0)/2)} V_{a^2(x_0)}(x_0) \exp\{-\beta L_I(x_0)\} \quad (\text{II-24})$$

### II.5.1 Détermination de la fonction $L_I(x_0)$ :

La valeur optimale de la fonction de superposition  $L_I(x_0)$  nous permet de minimiser le membre droit de l'expression (II-24). Le passage de  $L_I(x_0)$  à  $L_I(x_0) + \delta L_I(x_0)$  induit une variation dans la fonction de partition  $Z_I$ :

$$Z_I + \delta Z_I = (-\beta) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta\hbar^2/M}} \exp(-\beta W_I(x_0)) \exp(-\beta \delta L_I(x_0))$$

Dans le cas des petites variations  $\delta L_I(x_0)$ , nous pouvons écrire:

$$\exp(-\beta \delta L_I(x_0)) = 1 - \beta \delta L_I(x_0)$$

et sachant que :

$$\langle \delta L_I(x_0) \rangle_I = Z_I^{-1} \int \mathcal{D}x \delta L_I(x_0) \exp(-\beta W_I(x_0))$$

et

$$\mathcal{D}x = \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta\hbar^2/M}}$$

Nous pouvons montrer facilement que le terme  $\langle \delta L_I(x_0) \rangle_I$  correspond à la variation de l'énergie libre  $\delta F_I$ .

Calculons maintenant la variation de la valeur moyenne suivante:

$$\left\langle V_{a^2(x_0)}(x_0) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0) - L_I(x_0) \right\rangle_I = Z_I^{-1} \times \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta\hbar^2/M}} \frac{\hbar\beta\Omega(x_0)/2}{\sinh(\hbar\beta\Omega(x_0)/2)} \left[ V_{a^2(x_0)}(x_0) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0) - L_I(x_0) \right] \exp(-\beta L_I(x_0)) \right\}$$

sa variation s'écrit:

$$\begin{aligned}
& \delta \left\langle V_{a^2(x_0)}(x_0) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0) - L_1(x_0) \right\rangle_1 = -\frac{\delta Z_1}{Z_1^2} \\
& \times \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta\hbar^2/M}} \frac{\hbar\beta\Omega(x_0)/2}{\sinh(\hbar\beta\Omega(x_0)/2)} \left[ V_{a^2(x_0)}(x_0) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0) - L_1(x_0) \right] \exp(-\beta L_1(x_0)) \right\} \\
& - Z_1^{-1} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta\hbar^2/M}} \frac{\hbar\beta\Omega(x_0)/2}{\sinh(\hbar\beta\Omega(x_0)/2)} \delta L_1(x_0) \exp(-\beta L_1(x_0)) \right\} - Z_1^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta\hbar^2/M}} \times \\
& \left\{ \frac{\hbar\beta\Omega(x_0)/2}{\sinh(\hbar\beta\Omega(x_0)/2)} \beta L_1(x_0) \left[ V_{a^2(x_0)}(x_0) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0) - L_1(x_0) \right] \right\} \exp(-\beta L_1(x_0))
\end{aligned}$$

ou encore,

$$\begin{aligned}
& \delta \left\langle V_{a^2(x_0)}(x_0) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0) - L_1(x_0) \right\rangle_1 = -\frac{\delta Z_1}{Z_1} \left\langle V_{a^2(x_0)}(x_0) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0) - L_1(x_0) \right\rangle_1 \\
& - \left\langle \delta L_1(x_0) \right\rangle_1 - \beta \left\langle \delta L_1(x_0) \left[ V_{a^2(x_0)}(x_0) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0) - L_1(x_0) \right] \right\rangle_1
\end{aligned}$$

il est facile de voir que le second membre de l'équation de l'énergie libre atteint sa valeur extrémale pour

$$L_1(x_0) = V_{a^2(x_0)}(x_0) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0) \quad (\text{II-25})$$

il vient alors,

$$F_1 = -\frac{1}{\beta} \ln Z_1 = -\frac{1}{\beta} \ln \left( \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta\hbar^2/M}} \exp(-\beta W_1(x_0)) \right) \quad (\text{II-26})$$

où

$$W_1(x_0) = -\frac{1}{\beta} \ln \left( \frac{\hbar\beta\Omega(x_0)/2}{\sinh(\hbar\beta\Omega(x_0)/2)} \right) + V_{a^2(x_0)}(x_0) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0) \quad (\text{II-27})$$

$F_1$  constitue une borne supérieure pour l'énergie libre  $F$  du système.

### II.5.2 Détermination de la fréquence d'essai $\Omega(x_0)$ :

La variation du potentiel effectif  $W_1(x_0)$  peut s'écrire comme suit:

$$dW_1(x_0) = \frac{\partial W_1(x_0)}{\partial \Omega^2(x_0)} d\Omega^2(x_0) + \frac{\partial W_1(x_0)}{\partial a^2(x_0)} da^2(x_0)$$

il est aisé, également, de montrer que:

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

et que:

$$\frac{\partial W_1(x_0)}{\partial a^2(x_0)} = \frac{\partial V_{a^2(x_0)}(x_0)}{\partial a^2(x_0)} - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0)$$

la fréquence d'essai que nous voulons déterminer, est celle qui rend  $W_1(x_0)$  optimal. Ceci est réalisable en écrivant:

$$\frac{\partial W_1(x_0)}{\partial \Omega^2(x_0)} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial W_1(x_0)}{\partial a^2(x_0)} = 0 \quad (\text{II-28})$$

d'où

$$a^2(x_0) = \frac{I}{\beta M \Omega^2(x_0)} \left\{ \frac{\hbar \beta \Omega(x_0)}{2} \coth \left( \frac{\hbar \beta \Omega(x_0)}{2} \right) - I \right\} \quad (\text{II-29})$$

$$\text{et} \quad \Omega^2(x_0) = \frac{2}{M} \frac{\partial V_{a^2(x_0)}(x_0)}{\partial a^2(x_0)}. \quad (\text{II-30})$$

Il est, d'autre part, possible d'arriver à une autre expression pour la fréquence d'essai  $\Omega^2(x_0)$ , en écrivant la transformée de Fourier du potentiel  $V_{a^2(x_0)}(x_0)$ .

$$V_{a^2(x_0)}(x_0) = \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{V}(k) \exp\left(-\frac{a^2 k^2}{2}\right) \exp(ikx_0)$$

la dérivation de cette expression par rapport à la demi-largeur  $a^2(x_0)$ , nous permet d'aboutir à:

$$\Omega^2(x_0) = \frac{1}{M} \frac{\partial^2 V_{a^2(x_0)}(x_0)}{\partial x_0^2} \quad (\text{II-31})$$

Les équations (II-29) et (II-30) nous permettent d'arriver, après un calcul itératif, aux valeurs optimales de  $\Omega^2(x_0)$  et  $a^2(x_0)$ .

Enfin, le potentiel effectif classique  $W_1(x_0)$  se réduit, aux basses températures, à:

$$W_1(x_0) = \frac{1}{8} \frac{\hbar}{Ma^2(x_0)} + V_{a^2(x_0)}(x_0) \quad (\text{II-32})$$

L'extension au cas à trois dimensions est simple [19,21]. En effet, considérons l'équation standard de la fonction de partition à une température finie  $T$ .

$$\begin{aligned} Z &= \exp(-\beta F) = \int \mathcal{D}r \exp\left(-\int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{1}{2}\dot{r}^2 + V(r(\tau))\right]\right) \\ &= \int \frac{d^3r_0}{(2\pi\beta)^{3/2}} \exp[-\beta V_{eff}(\vec{r}_0)], \end{aligned} \quad (\text{II-33})$$

où  $\vec{r}_0$  est la position moyenne de la particule dans l'intervalle de température  $[0, \beta]$ .  $V_{eff}$  est le potentiel effectif classique qui rend compte de toutes les fluctuations quantiques autour de la position  $\vec{r}_0$ . Il est pratiquement impossible d'arriver à l'expression exacte de  $V_{eff}$  pour des potentiels physiques ayant une forme compliquée. Il est cependant possible de trouver une bonne approximation pour  $V_{eff}$ . Pour des potentiels ne présentant pas de singularités, nous pouvons choisir une fonction de partition d'essai semblable à celle utilisée par Kleinert dans le cas à une dimension.

$$Z_1 = \int \mathcal{D}r \exp\left(-\int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{1}{2}\dot{r}^2 + \frac{1}{2}\Omega^2(r_0)(r-r_0)^2\right]\right) \exp(-L_1(r_0)) \quad (\text{II-34})$$

La connaissance de  $Z_1$  exige la détermination de  $\Omega(\vec{r}_0)$  et  $L_1(\vec{r}_0)$ . Le développement en série de Fourier du terme énergie cinétique, nous permet d'arriver, après intégration sur les variables réelles et imaginaires, à l'expression suivante:

$$Z_1 = \int \frac{\mathcal{D}r_0}{(2\pi\beta)^{3/2}} \exp(-\beta W_1(\vec{r}_0)) \quad (\text{II-35})$$

$$\text{où} \quad W_1(\vec{r}_0) = \frac{3}{\beta} \ln \left[ \frac{\sinh(\beta\Omega/2)}{\beta\Omega/2} \right] + L_1(\vec{r}_0).$$

Un calcul similaire à celui effectué dans le cas à une dimension, nous permet d'aboutir, via l'inégalité de Jenses-Peierls, à une bonne limite supérieure de l'énergie libre du système étudiée.

$$F \leq F_1 + \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\langle V(r) - \frac{1}{2} \Omega^2(r_0)(r-r_0)^2 - L_1(r_0) \right\rangle_1 \quad (\text{II-36})$$

où l'énergie libre  $F$  du système est reliée à la fonction de partition  $Z$  par l'expression:

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad \text{avec} \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$\langle f \rangle_1$  représente la valeur moyenne de  $f$  calculée par rapport à l'action:

$$S_1 = \int_0^{\beta} \left[ \frac{1}{2} \dot{r}^2 + \frac{1}{2} \Omega^2(r_0)(r-r_0)^2 + L_1(r_0) \right] d\tau, \quad (\text{II-37})$$

de façon explicite

$$\langle f \rangle_1 = \frac{\int f \exp(iS_1/\hbar) \mathcal{D}r}{\int \exp(iS_1/\hbar) \mathcal{D}r}.$$

Nous pouvons, en outre, réécrire l'inégalité (II-36) comme suit:

$$F \leq F_1 + \frac{1}{\beta} \left\langle V_{a^2}(r_0) - \frac{3}{2} \Omega^2(r_0) a^2(r_0) - L_1(r_0) \right\rangle_1 \quad (\text{II-38})$$

où  $V_{a^2}(r_0)$  est donné par:

$$V_{a^2}(r_0) = \int \frac{d^3 r'_0}{(2\pi a^2)^{3/2}} \exp \left[ -\frac{(r_0 - r'_0)^2}{2a^2} \right] V(r'_0) \quad (\text{II-39})$$

le potentiel ci-dessus, est le potentiel entaché d'erreurs obtenu à partir du potentiel de départ  $V(r)$ . La minimisation de l'inégalité (II-38) par rapport à  $L_1(r_0)$  et  $\Omega(r_0)$  conduit à la meilleure approximation  $F_1$  de l'énergie libre  $F$ .

$$L_1(r_0) = V_{a^2}(r_0) - \frac{3}{2} \Omega^2(r_0) a^2(r_0) \quad (\text{II-40})$$

le potentiel  $W_1(r_0)$  qui approxime le potentiel effectif classique  $V_{eff}$  est donné par :

$$W_1(r_0) = \frac{3}{\beta} \ln \left[ \frac{\sinh(\beta\Omega/2)}{\beta\Omega/2} \right] + V_{a^2}(r_0) - \frac{3}{2} \Omega^2(r_0) a^2(r_0). \quad (\text{II-41})$$

La valeur optimale de la fréquence d'essai  $\Omega^2(r_0)$  qui optimise l'énergie libre  $F$ , s'écrit comme:

$$\Omega^2(r_0) = \frac{2}{3} \frac{\partial V_{a^2}(r_0)}{\partial a^2(r_0)} \quad (\text{II-42})$$

où la demi largeur de la fonction poids apparaissant dans l'équation (II-39) est définie comme.

$$a^2(r_0) = \frac{1}{\beta\Omega^2(r_0)} \left[ \frac{1}{2} \Omega\beta \coth\left(\frac{1}{2} \Omega\beta\right) - 1 \right] \quad (\text{II-43})$$

## II.6 La précision de l'approximation:

Aux basses températures ( $\beta \rightarrow +\infty$ ), nous pouvons approximer le potentiel effectif classique  $W_1(r_0)$  de l'expression (II-41) par une expression simple. En effet, à la limite des basses températures, l'intégrale sur  $r_0$  dans l'équation (II-35) est dominée par le minimum du potentiel effectif classique  $W_1(r_0)$  qui conduit à une bonne approximation de l'énergie libre. En passant à la limite ( $\beta \rightarrow +\infty$ ) dans l'équation de potentiel effectif classique, nous obtenons:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} W_1(r_0) = V_{a^2}(r_0) + 3 \left[ \frac{\hbar\Omega(r_0)}{2} - \frac{M}{2} \Omega^2(r_0) a^2(r_0) \right] \quad (\text{II-44})$$

et

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} a^2(r_0) = \frac{\hbar}{2M\Omega(r_0)} \quad (\text{II-45})$$

l'expression (II-44) s'écrit, après remplacement de  $a^2(r_0)$  par son expression, comme:

$$\begin{aligned} \lim_{\beta \rightarrow \infty} W_1(r_0) &= V_{a^2}(r_0) + \frac{3\hbar\Omega(r_0)}{4} \\ &= V_{a^2}(r_0) + \frac{3}{8} \frac{\hbar^2}{Ma^2(r_0)} \end{aligned} \quad (\text{II-46})$$

le second membre de l'égalité (II-46) n'est autre que la valeur moyenne de l'opérateur hamiltonien  $H$ .

$$H = \frac{P^2}{2M} + V(r) \quad (\text{II-47})$$

En effet, la valeur moyenne de l'opérateur hamiltonien calculée par rapport à la fonction d'onde gaussienne s'écrit comme:

$$\langle H \rangle_{\Psi} = \int_0^{+\infty} \Psi^*(r) H \Psi(r) d^3r = \frac{3}{8} \frac{\hbar^2}{Ma^2(r_0)} + V_{a^2}(r_0) \quad (\text{II-48})$$

où  $\Psi(r)$  est donnée par:

$$\Psi(r) = \frac{1}{(2\pi a^2)^{3/4}} \exp\left(-\frac{1}{4a^2}(r-r_0)^2\right) \quad (\text{II-49})$$

et

$$V_{a^2}(r) = \frac{1}{(2\pi a^2)^{3/2}} \int_0^{+\infty} V(r) \exp\left(-\frac{1}{2a^2}(r-r_0)^2\right) d^3r \quad (\text{II-50})$$

soit  $E_1$  le minimum de cette valeur moyenne, exprimé en fonction de  $r_0$  et  $a^2$ .

$$E_1 = \min_{r_0, a^2} \langle H \rangle_{\Psi} \quad (\text{II-51})$$

aux basses températures, l'énergie libre  $F_1$  converge vers  $E_1$ .

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} F_1 = E_1 \quad (\text{II-52})$$

Cette expression approchée du potentiel effectif classique, aux basses températures, conduit à une estimation raisonnable de l'énergie  $E_1$  de l'état fondamental. Il s'avère que pour les potentiels centraux anharmoniques, seule la valeur de  $r$  à l'origine contribue le plus dans l'évaluation de l'énergie  $E_1$ .

Nous pouvons obtenir à partir de la minimisation du potentiel effectif classique par rapport à  $a^2(r_0)$ , la valeur optimale  $a_{opt}^2$  qui nous permet d'arriver à la fréquence optimale  $\Omega_{opt}^2$

apparaissant dans l'expression de la fonction d'onde de l'état  $S$ . Cette dernière s'écrit comme suit:

$$\Psi(r) = A_N \exp(-\Omega_{opt} r^2) \quad (\text{II-53})$$

où  $A_N$  est sa constante de normalisation.

## **II.7 Résultats et discussion:**

Nous avons calculé par la méthode de F-K, l'énergie de l'état fondamental pour le potentiel central  $V(r) = \sum_{i=1}^3 C_{2i} r^{2i}$ , où les  $C_{2i}$ , ( $i=1\dots 3$ ) sont des paramètres à fixer. Ces résultats sont consignés avec ceux donnés par la méthode variationnelle de Ritz et la méthode numérique dans les tableaux (II-01) et (II-02).

Aussi, nous avons considéré dans nos calculs aussi bien le cas  $C_6$  nul (potentiel quartique), que le cas  $C_6$  non nul (potentiel anharmonique sextique).

Les énergies de l'état fondamental, obtenues pour différentes valeurs des paramètres  $C_2$ ,  $C_4$  et  $C_6$  sont en très bon accord avec les valeurs des énergies données par la méthode variationnelle de Ritz. L'accord entre nos énergies calculées par la méthode de F-K, et les valeurs exactes est très satisfaisant. L'erreur est voisine de 1%. Les résultats obtenus pour le potentiel central anharmonique quartique, pour les faibles valeurs du terme d'interaction  $C_4$ , sont d'avantage meilleurs (voir le tableau (II-2)) et l'erreur ne dépasse guère le 0.1 %.

$C_2$	$C_4$	La méthode de F-K	La méthode de Ritz	L'erreur relative %	Les valeurs exactes
0.5	0.0001	1.50003749	1.50003749	0.0037625	1.500093932
0.5	0.001	1.503731435	1.503731433	0.0036527	1.5037863626
0.5	0.01	1.535791108	1.535791105	0.0054305	1.5357077111
0.5	0.1	1.773386827	1.773386825	0.2150333	1.7695816367
0.5	1.	2.759935223	2.759935221	0.7989374	2.7380598388
0.5	2.	3.323956424	3.323956423	0.9372185	3.2930929466
0.5	5.	4.345657189	4.345657187	1.065482	4.2998431315
0.5	10.	5.382132834	5.382132834	1.1283323	5.3220820586
0.5	100.	11.32487528	11.32487527	1.2169452	11.188714748
0.5	1000.	24.27218968	24.27218967	1.2319806	23.976800157

**Tableau (II-1):** Valeurs de l'énergie de l'état fondamental, par différentes méthodes de calcul, dans le cas du potentiel quartique.

$C_2$	$C_4$	$C_6$	La méthode de F-K	La méthode de Ritz	L'erreur relative %	Les valeurs exactes
4.	-0.01	0.001	4.238526345	4.238526342	0.0063103	4.238793827
4.5	-0.01	0.001	4.496314178	4.496314177	0.0065029	4.496606590
4.5	-0.1	0.01	4.472741200	4.472741196	0.0063469	4.473025100
4.5	-0.3	0.13	4.437795254	4.437795251	0.0001366	4.437801319
4.5	0.01	0.1	4.550372586	4.550372580	0.0101149	4.549912366
4.5	0.1	0.1	4.585109685	4.585109684	0.0167397	4.584342277
4.5	1.	0.1	4.890301284	4.890301282	0.0987436	4.885477188
4.5	1.	1.	5.123487624	5.123487618	0.4170385	5.102209445
4.5	1.	10.	6.262057834	6.262057830	1.7405107	6.154930605
4.5	10.	10.	7.264907291	7.264907282	1.3439202	7.168567466

**Tableau (II-2):** Valeurs de l'énergie de l'état fondamental, par différentes méthodes de calcul, dans le cas du potentiel sextique.

# Chapitre III

**Les inégalités de Bertlmann et Martin**

## **Les inégalités de Bertlmann et Martin**

### **III.1 Historique de la méthode:**

Les inégalités de Bertlmann et Martin (B-M) [11,22] constituent une méthode d'approximation, valide dans le cas des potentiels confinants à symétrie sphérique. Elles permettent de déterminer la plupart des grandeurs physiques (spectre d'énergie, moments de la densité ....) relatives à un système quantique donné.

La résolution exacte de l'équation de Schrödinger nous permet d'aboutir au spectre des énergies et aux fonctions d'onde associées pour des potentiels décrits par des formes analytiques maniables tels le potentiel coulombien, l'oscillateur harmonique, le puits carré, le potentiel de Morse....etc.

Pour les autres potentiels, la résolution impose dans les cas les plus favorables, des développements fastidieux. En effet, pour remédier à ce genre de problèmes, les théoriciens ont eu recours à différentes méthodes de résolution approchées : méthodes perturbatives, méthodes variationnelles ..., qui donnent généralement des résultats très satisfaisants. Ils utilisent, le cas échéant, la résolution numérique de l'équation de Schrödinger pour arriver aux résultats escomptés.

Nous nous proposons, dans cette partie, de déterminer le spectre des énergies relatives à différentes formes de potentiels confinants en utilisant une méthode d'approximation basée sur les inégalités de Bertlmann et Martin. Les premiers travaux concernant cette méthode remontent à une vingtaine d'années ; leur généralisation est, par contre, beaucoup plus récente [23,24]. Ces inégalités nous permettent de calculer, entre autres, les moments de la densité, le facteur de forme nucléaire de l'état fondamental [25,26]...etc.

Elles trouvent surtout un large domaine d'application dans le cas des potentiels locaux.

Dans leur méthode, le rayon carré moyen et l'énergie cinétique moyenne de l'orbite  $1s$  sont reliés à l'énergie de transition dipolaire la plus basse, à savoir la différence d'énergie entre les états  $1s$  et  $1p$ , par:

$$\langle r^2 \rangle_{1s} \leq \frac{D\hbar^2}{2M(E_{1p} - E_{1s})} \quad (\text{III-01})$$

$$\langle T \rangle_{1s} \geq \frac{3}{4}(E_{1p} - E_{1s}) \quad (\text{III-02})$$

où  $D$  est la dimension de l'espace,  $M$  représente la masse de la particule considérée,  $E_{1s}$  est l'énergie de l'état fondamental, et  $E_{1p}$  celle de l'état  $1p$ .

Pour  $D=3$ , l'équation (III-01) a été généralisée à tous les états  $\ell$ . Le moment de la densité de chaque état  $\ell$  est donné par:

$$\langle r^{2\ell} \rangle_{1s} = \int r^{2\ell} |\Psi_{1s}|^2 d^3r \quad (\text{III-03})$$

$$\text{avec } \int |\Psi_{1s}|^2 d^3r = 1$$

où  $\Psi_{1s}$  est la fonction d'onde de l'état fondamental.

Malgré sa simplicité, l'intérêt de la relation (III-01) est évident. En effet, à partir de la connaissance de la fonction d'onde et l'énergie de l'état fondamental, nous pouvons trouver une borne supérieure pour la valeur  $\langle r^2 \rangle_{1s}$  si  $E_{1p}$  est connue. Réciproquement, ayant  $\langle r^2 \rangle_{1s}$  nous pouvons avoir également une limite supérieure pour  $E_{1p}$ . Ces bornes sont, évidemment, d'autant plus réalistes qu'elles se rapprochent des valeurs exactes.

### **III.2 Formulation des inégalités de Bertlmann et Martin:**

Comme nous l'avons précisé précédemment, la méthode des inégalités de Bertlmann et Martin nécessite la connaissance de l'énergie et de la fonction d'onde radiale  $\Psi_{1s}$  de l'état fondamental. Ces deux données essentielles à l'application des inégalités des B-M, peuvent

être obtenues de diverses manières. Dans le présent travail, elles seront déterminées dans le cadre du formalisme des intégrales de Feynman [27].

La fonction d'onde radiale  $\Psi_{1s}$  de l'état fondamental s'écrit, pour un potentiel central, dans la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert [9] comme suit :

$$\Psi_{1s}(r) = N_0 \exp(-\Omega r^2), \quad (\text{III-04})$$

où  $\Omega$  est la fréquence d'essai qui optimise l'énergie de l'état 1s.  $N_0$  étant la constante de normalisation de la fonction d'onde.

Les inégalités de B-M que nous utiliserons, sont obtenues à partir des règles de somme multipolaires linéaires en énergie [28] et ont pour expression (voir appendice):

$$\sum_j (E_j - E_0) |\langle 0 | Q_{\ell 0} | j \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2M} \ell(2\ell+1) \langle r^{2\ell-2} \rangle_{1s}, \quad (\text{III-05})$$

elles peuvent s'écrire, également, comme :

$$\langle r^{2\ell} \rangle_{1s} \leq \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\ell(2\ell+1)}{(E_{1\ell} - E_0)} \langle r^{2\ell-2} \rangle_{1s} \quad (\text{III-06})$$

$E_0$  étant toujours l'énergie de l'état fondamental, et  $E_{1\ell}$  celle du premier état de la ligne yrast.  $\langle r^k \rangle_{1s}$ ,  $k = 2\ell$  est le moment d'ordre  $k$  de la densité du fondamental donné par:

$$\langle r^k \rangle_{1s} \equiv \int r^k |\Psi_{1s}|^2 d^3r = \int_0^{+\infty} r^{k+2} |\Psi_{1s}(r)|^2 dr$$

Les calculs ont montré que les rapports entre les valeurs exactes des moments de la densité du fondamental et celles données par (III-01) dans les cas de l'oscillateur harmonique et du potentiel coulombien valent respectivement 1 et 3/4. D'où la nécessité d'introduire un facteur correctif dans le second cas. Vu que les potentiels que nous nous proposons d'étudier, les potentiels quartique et sextique, sont proches du potentiel oscillateur harmonique, nous avons choisi un facteur correctif nul [25,26] pour passer à l'égalité dans l'équation (III-06).

### III.3 Méthode variationnelle de Ritz:

La méthode variationnelle de Ritz est très utilisée en physique. Elle permet d'arriver rapidement et de manière satisfaisante, au spectre d'énergie relatif à un potentiel central donné. Cette méthode nécessite, toutefois, un choix judicieux de la fonction d'onde d'essai.

L'équation radiale de Schrödinger a pour forme:

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{2} \frac{d}{dr} + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} + V(r) \right] \Psi_\ell(r) = E_\ell \Psi_\ell(r) \quad (\text{III-07})$$

Avec  $\hbar = M = 1$ .  $\Psi_\ell(r)$  représente la fonction d'onde radiale associée à l'état dans lequel se trouve le système étudié. Nous choisissons une fonction d'onde d'essai de la forme :

$$\Psi_\ell(r) = N_\ell r^\ell \exp(-\beta r^2) \quad (\text{III-08})$$

où  $\beta$  est un paramètre variationnel à déterminer.  $N_\ell$  est la constante de normalisation de la fonction d'onde d'essai.

$$|N_\ell|^2 = \frac{\beta^{\ell+1} 2^{2\ell+3}}{(2\ell+1)!!} \sqrt{\frac{2\beta}{\pi}} \quad (\text{III-09})$$

Compte tenu de:

$$H|\Psi_\ell(r)\rangle = E_\ell|\Psi_\ell(r)\rangle$$

il vient:

$$E_\ell = \frac{\int \Psi_\ell^*(r) H \Psi_\ell(r) d^3r}{\int \Psi_\ell^*(r) \Psi_\ell(r) d^3r} \quad (\text{III-10})$$

La fonction  $\Psi_\ell(r)$  étant normalisée, l'énergie  $E_\ell$  s'écrit alors,

$$E_\ell \equiv \langle \Psi_\ell(r) | H | \Psi_\ell(r) \rangle = \int \Psi_\ell^*(r) H \Psi_\ell(r) d^3r$$

La substitution de  $\Psi_\ell(r)$  par son expression dans l'équation de Schrödinger, conduit à:

$$N_\ell \left[ \beta(2\ell+3)r^\ell - 2\beta^2 r^{\ell+2} + V(r)r^\ell \right] \exp(-\beta r^2) = N_\ell r^\ell E_\ell \exp(-\beta r^2)$$

En multipliant les deux membres de l'équation ci-dessus par la fonction d'onde d'essai conjuguée

$$\Psi_{\ell}^*(r) = N_{\ell}^* r^{\ell} \exp(-\beta r^2)$$

et en intégrant sur la variable radiale  $r$ , l'énergie  $E_{\ell}$  devient:

$$E_{\ell} = \frac{\int_0^{+\infty} [\beta(2\ell+3)r^{2\ell+2} - 2\beta^2 r^{2\ell+4} + V(r)r^{2\ell+2}] \exp(-2\beta r^2) dr}{\int_0^{+\infty} r^{2\ell+2} \exp(-2\beta r^2) dr}$$

La relation ci-dessous [20],

$$\int_0^{+\infty} r^{2n} \exp(-\alpha r^2) dr = \frac{(2n-1)!!}{2(2\alpha)^n} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad \text{pour } \alpha > 0$$

nous permet d'arriver à:

$$E_{\ell} = \frac{\beta(2\ell+3)}{2} + \frac{2^{2\ell+3}}{(2\ell+1)!!} \beta^{\ell+1} \sqrt{\frac{2\beta}{\pi}} \int_0^{+\infty} V(r) r^{2\ell+2} \exp(-2\beta r^2) dr. \quad (\text{III-11})$$

La minimisation de  $E_{\ell}$  par rapport au paramètre variationnel  $\beta$ ,  $\frac{\partial E_{\ell}}{\partial \beta} = 0$ , nous permet d'obtenir la valeur optimale du paramètre  $\beta$  qui nous permet d'estimer de manière satisfaisante l'énergie  $E_{\ell}$ . La valeur  $\beta_{opt}$  est obtenue, dans la plupart des cas, numériquement.

Par ailleurs, il suffit d'injecter la fonction d'onde obtenue par la méthode variationnelle, dans l'expression suivante:

$$\langle r^k \rangle_{1s} = \int_0^{+\infty} r^{k+2} |\Psi_{1s}(r)|^2 dr$$

pour arriver à l'expression:

$$\langle r^k \rangle_{1s} = \frac{(k+1)!!}{2^k} \frac{1}{\beta^{k/2}} \quad \text{pour } k \text{ pair} \quad (\text{III-12})$$

### **III.4 Application aux potentiels sextique et quartique:**

Nous verrons dans ce qui suit comment appliquer les inégalités généralisées de Bertlmann et Martin, moyennant la méthode variationnelle de Ritz, à des cas concrets. Nous déterminerons à partir des caractéristiques de l'état fondamental, les moments de la densité ainsi que le spectre des énergies du système physique étudié.

L'utilisation de l'oscillateur anharmonique comme modèle mathématique dans différents domaines de la physique, tels la physique atomique, moléculaire, nucléaire ...etc. a permis de reproduire de façon satisfaisante certaines données expérimentales.

La famille de potentiels  $V(r) = \sum_{i=1}^3 C_{2i} r^{2i}$  [29,30], où les  $C_{2i}$  sont des paramètres à fixer, peut servir comme modèle dans la description de certains phénomènes physiques. Ce potentiel a été utilisé dans le calcul de spectres d'énergie vibrationnelle moléculaire [31], dans la description du comportement du mélange  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$  et des métamagnets au voisinage du point tricritique [32].

La fréquence du potentiel d'essai ainsi que l'énergie de l'état fondamental ont été obtenues, dans le chapitre précédent, par la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert, en choisissant une fonction d'onde radiale de la forme:

$$\Psi_0(r) = N_0 \exp(-\Omega r^2).$$

En utilisant la valeur de l'énergie de l'état fondamental ainsi que la fonction d'onde  $\Psi_0(r)$ , donnée dessus, nous pouvons déterminer, via la technique de Bertlmann et Martin, le spectre des énergies pour différentes valeurs du moment orbital " $\ell$ ".

$\ell$	$E_\ell$ (méthode de Ritz)	$E_\ell$ (méthode B-M)	$E_\ell$ (exactes)
0	4.437795251		4.43780131991
1	7.397903439	7.398426562	7.39639787251
2	10.39041184	10.35905787	10.38595333251
3	13.43622407	13.31968918	13.42669123897
4	16.55071834	16.28032048	16.53401063763
5	19.74459274	19.24095179	19.71888989946
6	23.02497320	22.20158310	22.98883269502

**Tableau III-01:** Energies de la ligne yrast, calculées par différentes méthodes, dans le cas du potentiel sextique:  $C_2 = 4.5$ ,  $C_4 = -0.3$  et  $C_6 = 0.13$ .

$\ell$	$E_\ell$ (méthode de Ritz)	$E_\ell$ (méthode B-M)	$E_\ell$ (exactes)
0	4.238526342		4.23879382773
1	7.061850760	7.061851869	7.06185010912
2	9.883596296	9.885177395	9.88359551357
3	12.70402940	12.70850292	12.7040286815
4	15.52341768	15.53182844	15.5234171375
5	18.34202938	18.35515396	18.3420290202
6	21.16013308	21.17847948	21.1601327047

**Tableau III-02:** Energies de la ligne yrast, calculées par différentes méthodes, dans le cas du potentiel sextique:  $C_2 = 4$ ,  $C_4 = -0.01$  et  $C_6 = 0.001$ .

Nous avons également considéré le cas du potentiel quartique. Ce dernier s'obtient à partir du potentiel sextique en posant  $C_6 = 0$ .

$\ell$	$E_\ell$ (méthode B-M)	$E_\ell$ (méthode de Ritz)	$E_\ell$ (exactes)
0		4.243109329	4.243377863
1	7.072161250	7.072161217	7.072161236
2	9.901213164	9.901462894	9.901462909
3	12.73026508	12.73101430	12.73101428
4	15.55931701	15.56081536	15.56071531
5	18.38836891	18.39086601	18.39086593
6	21.21842083	21.22116620	21.22116607

**Tableau III-03:** Energies de la ligne yrast, calculées par différentes méthodes, dans le cas du potentiel quartique:  $C_2 = 4.$  et  $C_4 = 0.001.$

$\ell$	$E_\ell$ (méthode B-M)	$E_\ell$ (méthode de Ritz)	$E_\ell$ (exactes)
0		4.288523169	4.2887069941
1	7.177492575	7.177252992	7.1770493390
2	10.06646198	10.08910413	10.088752554
3	12.95543138	13.02355671	13.023026193
4	15.84440078	15.98012073	15.979384017
5	18.73337017	18.95833332	18.957366421
6	21.62233959	21.95775639	21.956538147

**Tableau III-04 :** Energies de la ligne yrast, calculées par différentes méthodes, dans le cas du potentiel quartique:  $C_2 = 4.$  et  $C_4 = 0.1.$

Les inégalités généralisées de Bertlmann et Martin ont donné des estimations des énergies de la ligne yrast qui se comparent favorablement à celles données par les méthodes variationnelle et exacte. Nous pouvons constater que l'écart existant entre les énergies  $E_\ell$ ,

obtenues par les inégalités de B-M, et celles données par la méthode exacte, dépend du choix des paramètres  $C_2$ ,  $C_4$  et  $C_6$ . En effet, plus le paramètre " $C_6$ " est petit devant " $C_2$ ", plus cet écart devient insignifiant. Ceci est dû au fait, que le potentiel sextique s'est approché convenablement du potentiel harmonique d'essai  $V(r) = \frac{1}{2} \beta r^2$ . Le paramètre  $\beta$  est la fréquence correspondant à l'énergie  $E_0$  donnée par la méthode de F-K.

### **III.5 Facteur de forme:**

Le calcul du facteur de forme est d'une grande utilité en physique nucléaire. Il intervient, par exemple, dans le calcul de la section efficace de la diffusion élastique, et nous permet d'aboutir à la densité d'états.

Nous nous intéressons dans cette section à la détermination du facteur de forme  $F(q)$ , où  $q$  est la norme de  $\vec{q}$  qui est la variable conjuguée du vecteur position  $\vec{r}$  dans l'espace des impulsions. Le calcul de ce facteur se fera dans le cadre des inégalités de Bertlmann et Martin.

Partant de la définition du facteur de forme,

$$F(\vec{q}) = \int \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} d^3r \quad (\text{III-13})$$

et sachant que les potentiels que nous considérons dans ce travail sont à symétrie sphérique, nous ne considérerons alors, que la partie radiale de la densité  $\rho(\vec{r})$ . Dans ce cas  $F(q)$  sera donné par:

$$F(q) = \int \rho(r) e^{-iq r \cos(\theta)} r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\varphi$$

ou encore 
$$F(q) = \frac{4\pi}{q} \int r \rho_{1s}(\vec{r}) \sin(qr) dr \quad (\text{III-14})$$

Nous pouvons, pour des commodités de calcul, utiliser le développement de  $\sin(qr)$  en puissances de la variable radiale  $r$ :

$$\sin(qr) = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{(qr)^{2n+1}}{(2n+1)!}$$

ceci nous permet d'écrire  $F(q)$  comme suit:

$$F(q) = 4\pi \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{(q)^{2n}}{(2n+1)!} \int_0^{+\infty} r^{2n+2} \rho(r) dr \tag{III-15}$$

Aux basses températures, seule la fonction d'onde de l'état fondamental contribue dans l'expression de la densité.

$$\rho_{1s}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} |\psi_{1s}(r)|^2$$

il vient alors,

$$F(q) = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{(q)^{2n}}{(2n+1)!} \langle r^{2n} \rangle_{1s}. \tag{III-16}$$

L'équation ci-dessus, nous montre que le facteur de forme est entièrement défini à partir de la connaissance des moments de la densité de l'état fondamental. Pour calculer ces derniers, nous devons, tout d'abord, calculer par les inégalités de Bertlmann et Martin, puis les valeurs exactes des énergies de la ligne yrast (voir les tableaux III-1 à III-4).

En plus du fait que la série (III-16) soit infinie, cette dernière est alternée et diverge vers plus ou moins l'infini selon le signe de son dernier terme. Pour contourner cette difficulté, nous proposons d'utiliser à la place de la série (III-16), son approximant de Padé. Cette procédure mathématique permet d'approximer une série infinie par un polynôme fractionnel de Padé. En d'autres termes, nous écrivons la série (III-16), tronquée à l'ordre  $P$ , via cette approximation, comme une fraction de deux polynômes de degrés  $L$  et  $M$ . Pour avoir la meilleure fraction, il suffit de déterminer les bonnes valeurs des degrés  $L$  et  $M$ .

L'expression d'ordre infini de  $F(q)$  est donnée par [33,25]:

$$F(q) = \sum_{i=0}^{+\infty} a_i q^i \approx \frac{P_L(q)}{Q_M(q)} \tag{III-17}$$

où  $\frac{P_L(q)}{Q_M(q)}$  est la fraction continue de Padé.

Les polynômes  $P_L(q)$  et  $Q_M(q)$  sont développables comme suit:

$$P_L(q) = b_0 + b_1 q^1 + b_2 q^2 + \dots + b_L q^L$$

et

$$Q_M(q) = 1 + d_1 q^1 + d_2 q^2 + \dots + d_M q^M$$

Nous considérons, dans nos calculs, le plus grand degré de troncature pour  $F(q)$  afin d'obtenir les meilleurs polynômes  $P_L(q)$  et  $Q_M(q)$ . Ceci conduit à une relation entre les paramètres  $a_i$  et les coefficients  $b_i$  et  $d_i$ .

En identifiant les deux membres de l'équation (III-17) nous aboutissons à:

$$\begin{aligned}
 a_0 &= b_0 \\
 a_1 + a_0 d_1 &= b_1 \\
 a_2 + a_1 d_1 + a_0 d_2 &= b_2 \\
 &\cdot \\
 &\cdot \\
 a_L + a_{L-1} d_1 &= b_L \\
 a_{L+1} + a_L d_1 + \dots + a_{L-M+1} d_M &= 0 \\
 &\cdot \\
 a_{L+M} + a_{L+M-1} d_1 + \dots + a_0 d_{L+M} &= 0
 \end{aligned}$$

Les calculs nous donnent plusieurs approximants de Padé pour un même ordre  $P$  de la série. Les meilleurs approximants de Padé seront ceux pour lesquels  $L + M = P$  et  $L < M$  [33]. Ces différents approximants seront notés par  $\{L, M\}$ .

Pour tester la fiabilité de nos résultats, nous calculerons le facteur de forme par une seconde méthode : "la méthode variationnelle de Ritz".

Pour ce faire, nous choisissons une fonction d'onde d'essai de la forme:

$$R_0(r) = N_0 \exp(-\beta r^2) \tag{III-18}$$

où  $N_0$  est sa constante de normalisation.

$$|N_0|^2 = 4\pi \left( \frac{2\beta}{\pi} \right)^{3/2}$$

Ainsi l'expression du facteur de forme devient:

$$F(q) = \frac{4\pi}{q} \left( \frac{2\beta}{\pi} \right)^{3/2} \int_0^{+\infty} r \sin(qr) e^{(-2\beta r^2)} dr \tag{III-19}$$

Nous constatons que le facteur de forme  $F(q)$  est une fonction de la seule variable  $q$ . Aussi, il est intéressant de déterminer ce facteur pour toutes les valeurs de  $q$ ; notamment à l'origine.

Il est, d'autre part, utile de rappeler que le paramètre  $\beta$ , apparaissant dans l'équation (III-19), correspond à sa valeur optimale obtenue à partir de l'équation (III-11).

Nous avons également choisi comme exemple d'application, le cas du potentiel sextique pour l'intérêt croissant qu'il présente dans le domaine de la recherche en physique. Il constitue en effet, un bon modèle théorique dans la description des interactions se produisant à l'échelle atomique et nucléaire.

Nous avons consigné dans les tableaux (III-05) à (III-08) les moments de la densité de l'état fondamental pour le potentiel sextique et le potentiel quartique. Ces calculs ont été obtenus par la méthode exacte et par les techniques de Ritz, et de B-M avec une fonction d'onde calculée via la procédure de Feynman –Kleinert. Un examen des résultats concernant  $F(q)$ , fait ressortir une grande adéquation existant entre les résultats donnés par les trois méthodes.

	$k$	$\langle r^k \rangle^{1/k}$ (B-M)	$\langle r^k \rangle^{1/k}$ (Ritz)	$\langle r^k \rangle^{1/k}$ (exactes)
$C_2 = 2,$ $C_4 = 1.116787$ $C_6 = 0.1$	2	0.723826807	0.718127334	0.722941540
	4	0.814016383	0.815950185	0.812445329
	6	0.889914765	0.900545610	0.887545524
	8	0.956236132	0.976269112	0.952988928
	10	1.015566246	1.045498177	1.011386890
	12	1.069507400	1.109698037	1.064353553
	14	1.119134596	1.169851582	1.112853037

**Tableau III-05:** Valeurs des moments de la densité, relatives au potentiel sextique, calculées via les trois méthodes sus-citées.

	$k$	$\langle r^k \rangle^{1/k}$ (B-M)	$\langle r^k \rangle^{1/k}$ (Ritz)	$\langle r^k \rangle^{1/k}$ (exactes)
$C_2 = 0.2$ $C_4 = 0.726095$ $C_6 = 0.1$	2	0.844657822	0.827221237	0.842012503
	4	0.944229874	0.939904790	0.939819744
	6	1.027017711	1.037361481	1.020733901
	8	1.098673603	1.124579142	1.090471166
	10	1.162279163	1.204324433	1.152148799
	12	1.219731672	1.278277178	1.207685692
	14	1.272295894	1.347568914	1.258359931

**Tableau III-06:** Valeurs des moments de la densité, relatives au potentiel sextique, calculées via les trois méthodes sus-citées.

	$k$	$\langle r^k \rangle^{1/k}$ (B-M)	$\langle r^k \rangle^{1/k}$ (Ritz)	$\langle r^k \rangle^{1/k}$ (exactes)
$C_2 = 4$ $C_4 = 0.1$	2	0.7206448640	0.720566651	0.720644087
	4	0.817984940	0.818721784	0.817979791
	6	0.9018969229	0.903604561	0.901882698
	8	0.9767800574	0.979585859	1.044990520
	10	1.045036969	1.049049499	1.108084618
	12	1.108153253	1.113467431	1.167030622
	14	1.167125026	1.230822092	1.222535994
	16	1.222659615	1.284975161	1.275125046

**Tableau III-07:** Valeurs des moments de la densité, relatives au potentiel quartique, calculées via les trois méthodes sus-citées.

	k	$\langle r^k \rangle^{1/k}$ (B-M)	$\langle r^k \rangle^{1/k}$ (Ritz)	$\langle r^k \rangle^{1/k}$ (exactes)
$C_2 = 4$ $C_4 = 0.001$	2	0.7281918003	0.728157238	0.728198664
	4	0.8273666776	0.827346355	0.827377216
	6	0.9131296376	0.913123304	0.913130889
	8	0.9898967069	0.989905004	0.989909979
	10	1.060076579	1.060100386	1.060089546
	12	1.125156648	1.125196909	1.125168921
	14	1.186132944	1.186190604	1.186144452
	16	1.243711823	1.243787807	1.243722614

**Tableau III-08:** Valeurs des moments de la densité, relatives au potentiel quartique, calculées via les trois méthodes sus-citées.

q	$F(q)$ (Ritz)	$F(q)$ (B-M){0,10}	$F(q)$ exactes
0	1.0000000000	1.0000000000	1.000000000
1	0.9171024861	0.9153797259	0.91707924
2	0.7074104710	0.7021097284	0.70723981
3	0.4589452076	0.4512423761	0.45846796
4	0.2504297595	0.2430025360	0.25632566
5	0.1149335381	0.1096473791	0.11462925
6	0.0443652933	0.0414668183	0.04440295
7	0.0144375354	0.0131897388	0.01402135

**Tableau III-09:** Facteur de forme relatif au potentiel quartique pour différentes valeurs de  $q$ .

$$V(r) = C_2 r^2 + C_4 r^4 \text{ avec } C_2 = 4. \text{ et } C_4 = 0.1$$

	$q$	$F(q)$ (Ritz)	$F(q)$ (B-M){0,10}	$F(q)$ exactes
$C_2 = 2$ $C_4 = 1.116787$ $C_6 = 0.1$	0	1.0000000000	1.0000000000	1.0000000000
	1	0.9176390609	0.9162413801	0.9164281826
	2	0.7090674805	0.7034164094	0.7039075590
	3	0.4613675322	0.4497277919	0.4502284790
	4	0.2527844027	0.2366448115	0.2368260439
	5	0.1166265161	0.1003762719	0.1002020210
	6	0.0453093796	0.0332116964	0.0327194373
	7	0.0148225428	0.0083554364	0.0075224539
$C_2 = 0.2$ $C_4 = 0.726095$ $C_6 = 0.1$	0	1.0000000000	1.0000000000	1.0000000000
	1	0.8922140913	0.8874892473	0.8881180707
	2	0.6336892099	0.6168430852	0.6183118785
	3	0.3582792882	0.3292113585	0.3303199497
	4	0.1612520516	0.1290138726	0.1288897449
	5	0.0577732703	0.0338458084	0.0322946739
	6	0.0037409752	0.0054768756	0.0026686355
	7	0.0006761157	0.0006370732	0.0012602926

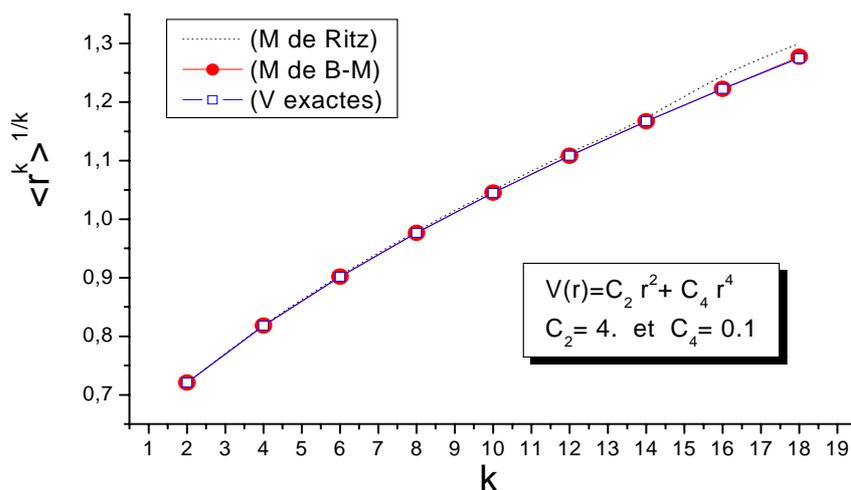
**Tableau III-10:** Valeurs du facteur de forme, relatives au potentiel sextique, calculées via les trois méthodes sus-citées.

$q$	$F(q)$ (Ritz)	$F(q)$ (B-M){0,10}	$F(q)$ exactes
0	1.0000000000	1.0000000000	1.0000000000
1	0.9154318090	0.9154151705	0.915423162
2	0.7022433312	0.7022155731	0.702231755
3	0.4514370025	0.4513884366	0.451420967
4	0.2431926781	0.2431329895	0.243132679
5	0.1097861738	0.1097308498	0.109754032
6	0.0415325517	0.0415066353	0.041502317
7	0.0131665924	0.0132041639	0.013176492

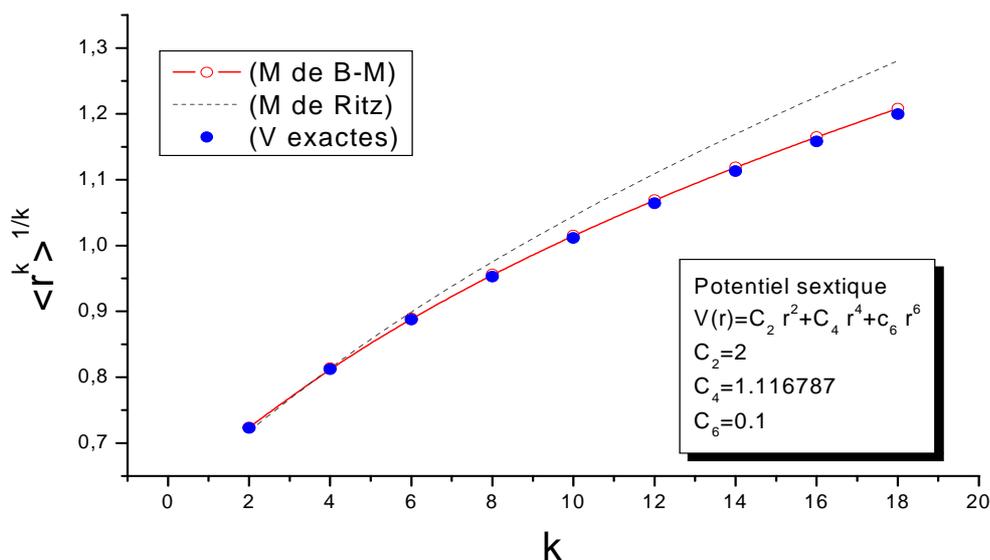
**Tableau III-11:** Facteur de forme relatif au potentiel quartique pour différentes valeurs de  $q$ .

$$V(r) = C_2 r^2 + C_4 r^4 \text{ avec } C_2 = 4. \text{ et } C_4 = 0.001$$

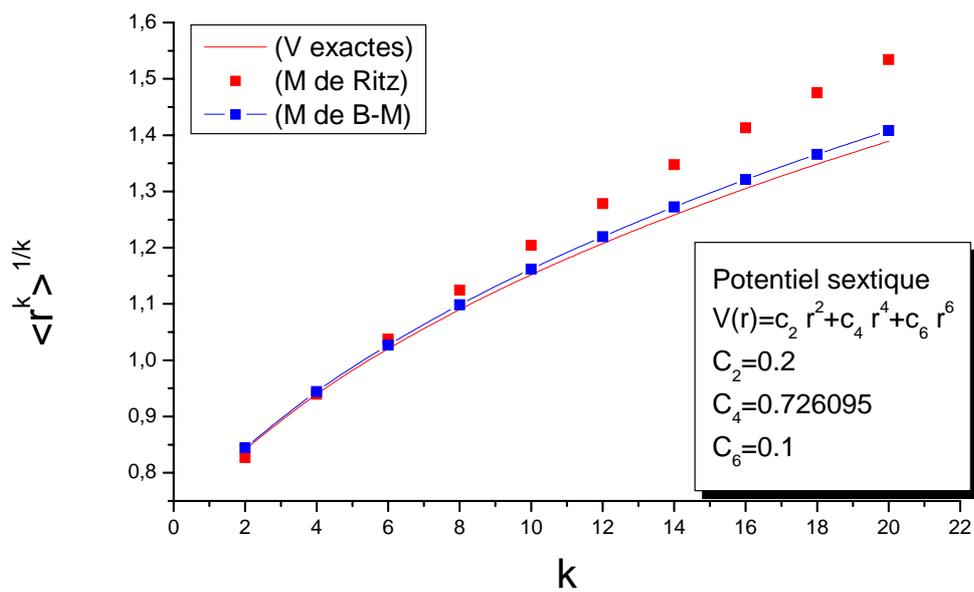
Nous nous sommes également intéressés au comportement des moments de la densité du fondamental en fonction de l'ordre  $k$ . Les courbes obtenues, pour différentes formes du potentiel, montrent que ces moments croissent de façon régulière avec le degré  $k$ . De plus, les courbes données par la méthode de Ritz sont en parfaite adéquation, jusqu'à  $\ell = 7$ , avec nos courbes (voir figures ci-dessous).



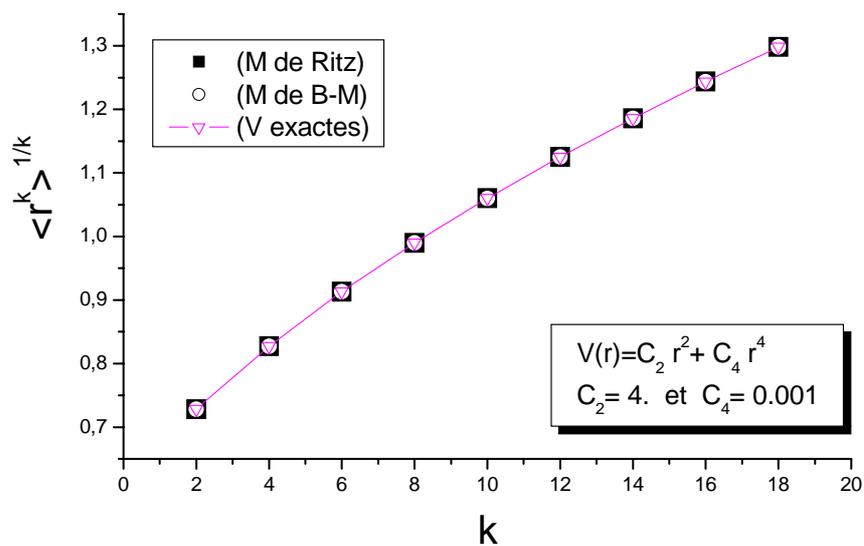
**Fig(III-01)** : Moments de la densité du fondamental, d'ordre  $k$ , dans le cas du potentiel quartique.



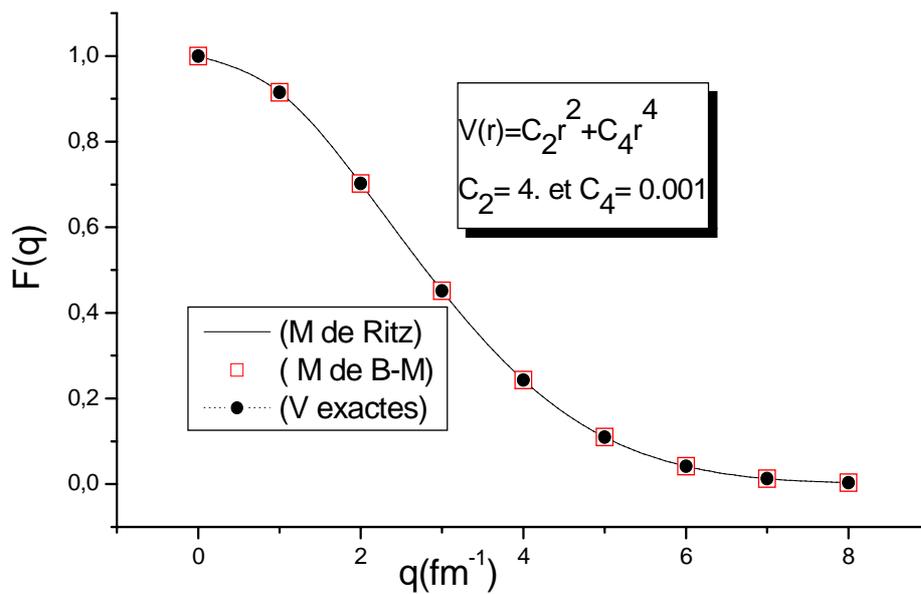
**Fig(III-02)** : Moments de la densité du fondamental, d'ordre  $k$ , dans le cas du potentiel sextique.



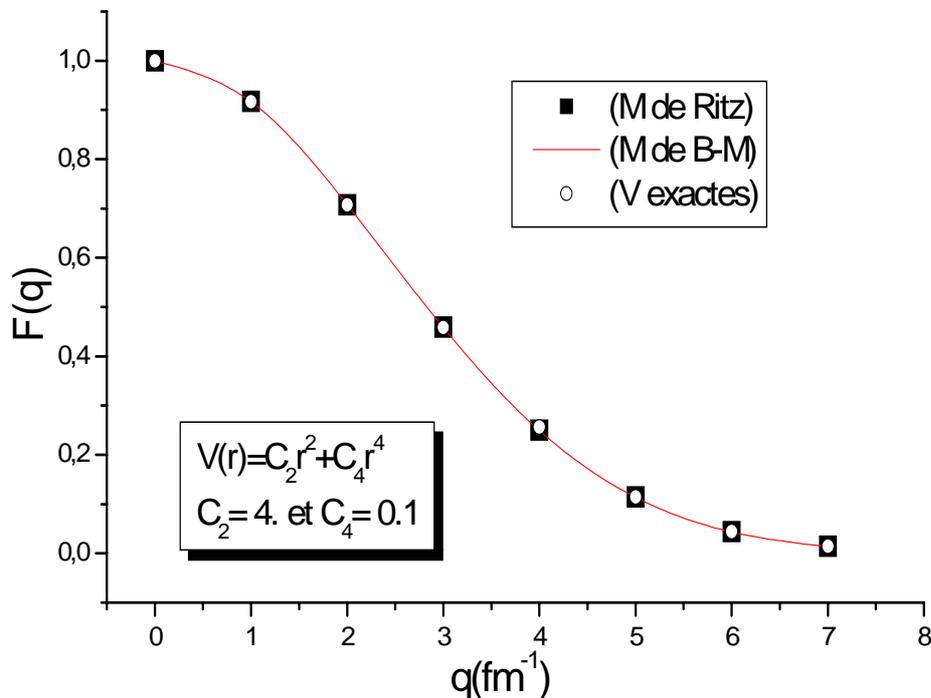
**Fig(III-03) :** Moments de la densité du fondamental, d'ordre k, dans le cas du potentiel sextique.



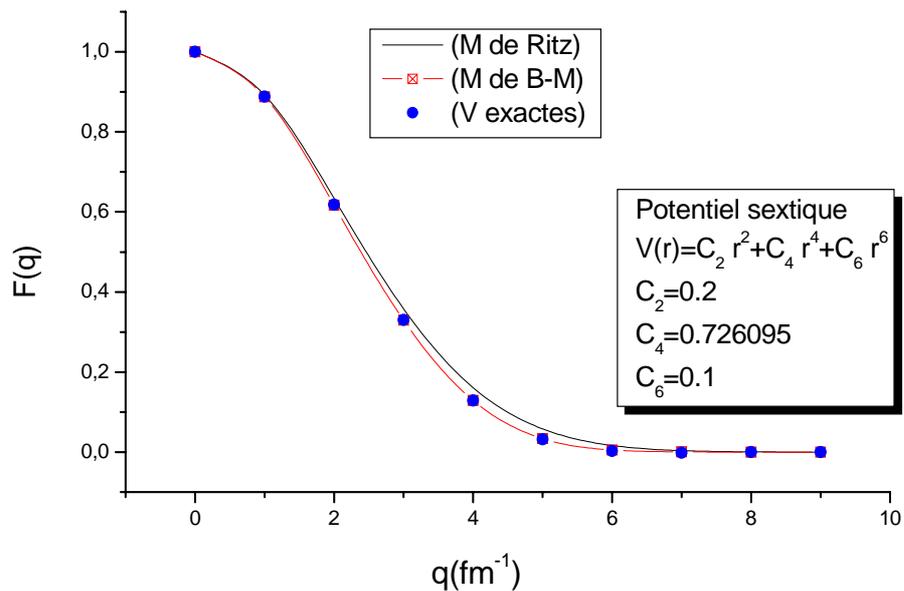
**Fig(III-04) :** Moments de la densité du fondamental, d'ordre k, dans le cas du potentiel quartique.



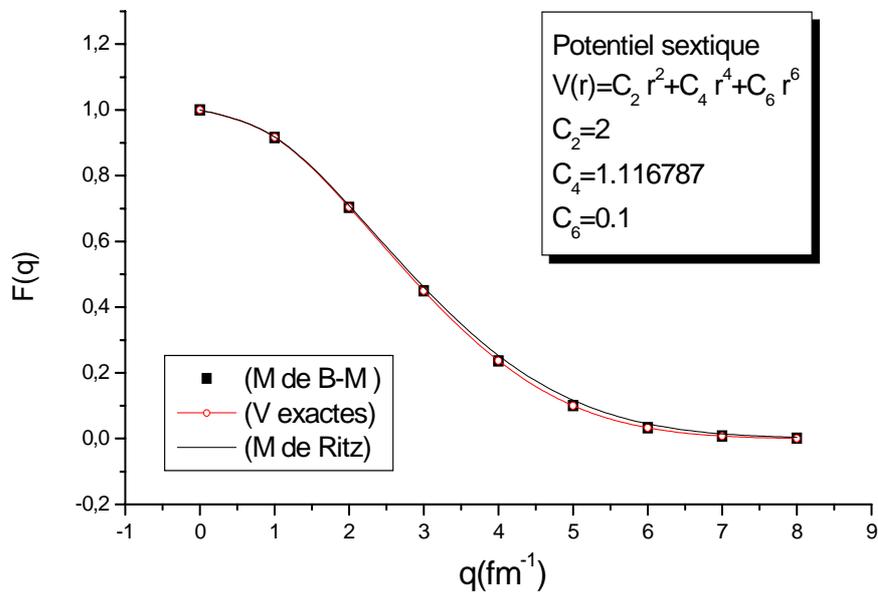
**Fig(III-05) :** Comportement du facteur de forme relatif au potentiel quartique, en fonction de q.



**Fig(III-06) :** Comportement du facteur de forme relatif au potentiel quartique, en fonction de q.



**Fig(III-07) :** Comportement du facteur de forme relatif au potentiel sextique, en fonction de q.



**Fig(III-08) :** Comportement du facteur de forme relatif au potentiel sextique, en fonction de q.

### III.6 Densité d'états du fondamental:

Nous avons pu vérifier, dans les calculs précédents, la fiabilité des inégalités généralisées de Bertlmann et Martin à reproduire les bonnes valeurs des énergies de la ligne yrast, des moments de la densité du fondamental, et du facteur de forme pour les potentiels sextique et quartique. Ces grandeurs ont un lien direct avec de la densité d'états du système quantique étudié. En effet, cette dernière est définie comme étant la transformée de Fourier du facteur de forme.

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int F(\vec{q}) \exp(i\vec{q}\vec{r}) d^3q \quad (\text{III-20})$$

Aux basses températures et pour  $r = 0$ , cette densité se réduit à :

$$\rho_{1s}(0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int F(q) d^3q \quad (\text{III-21})$$

En substituant  $F(q)$  par son expression dans l'équation ci-dessus, il vient :

$$\rho_{1s}(0) = \frac{1}{(2\pi^2)} \int_0^{q_{Max}} q^2 F(q) dq \quad (\text{III-22})$$

La valeur  $q_{Max}$  représente la borne supérieure de la variable  $q$  à partir de laquelle la densité  $\rho_{1s}(0)$  reste constante.

Nous avons consigné dans les tableaux III.9, III.10 et III.11, le facteur de forme pour différentes valeurs de la variable  $q$ . Les tableaux III.12, III.13 et III.14 nous donnent, pour différentes valeurs de troncature de la variable  $q$ , un aperçu sur le comportement de la densité à l'origine. Ces calculs ont été réalisés via la méthode de B-M, et celle de Ritz dans le cas des potentiels sextique et quartique. Les résultats obtenus montrent un parfait accord entre les différentes méthodes. Il est à noter que pour la méthode de Ritz, le facteur de forme  $F(q)$  a été remplacé par son expression (III-19). Ceci nous a permis d'écrire la densité à l'origine comme suit:

$$\rho_{1s}(0) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2\beta}{\pi} \right)^{3/2} \int_0^{q_{Max}} q \left\{ \int_0^{+\infty} r \sin(qr) \exp(-2\beta r^2) d^3r \right\} dq \quad (\text{III-23})$$

Vu que le calcul analytique de l'intégrale (III-23) exige des développements fastidieux, nous l'avons calculée numériquement.

Nous avons appliqué ces techniques à différentes formes de potentiels. Le choix de ces derniers est dicté par le rôle qu'ils jouent dans la modélisation mathématique de phénomènes physiques.

	$q_{\max}$	$\rho_{1s}(0)$ (Ritz)	$\rho_{1s}(0)$ (B-M)	$\rho_{1s}(0)$ (exacte)
$C_2 = 2.$ $C_4 = 1.116787$ $C_6 = 0.1$	2	0.110364228	0.1090910	0.109952963
	3	0.292701217	0.2893631	0.289569214
	4	0.506222685	0.4939339	0.494347400
	6	0.799283772	0.7478557	0.747736494
	7	0.856978110	0.7860011	0.784424227
	8	0.880418741	0.7976021	0.793598088
$C_2 = 0.2$ $C_4 = 0.726095$ $C_6 = 0.1$	2	0.10349083	0.1020576	0.102207416
	3	0.25557477	0.2463627	0.246971733
	4	0.40689314	0.3778331	0.378704585
	6	0.55845320	0.4738747	0.470280918
	7	0.57653809	0.4785255	0.469575550
	8	0.58155805	0.4792430	0.467157865

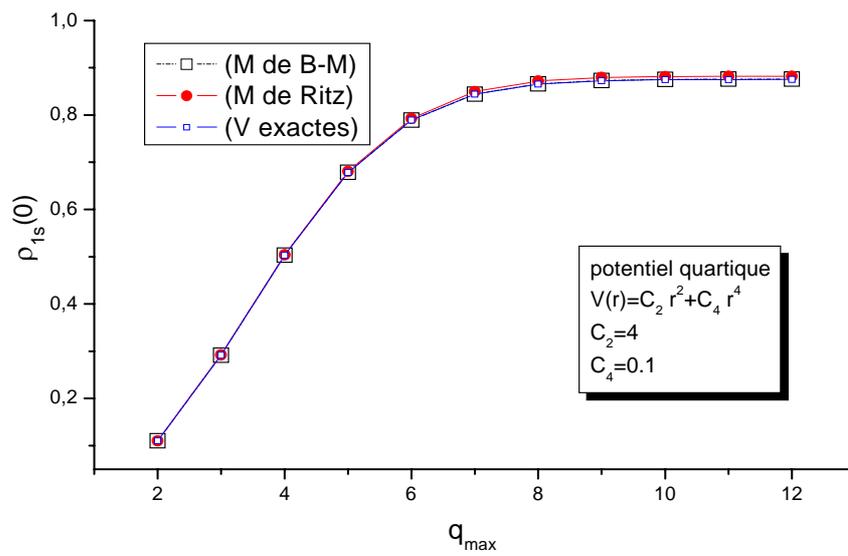
**Tableau III-12:** Densité de l'état fondamental du potentiel sextique en fonction de la variable  $q$ .

$q_{\max}$	$\rho_{1s}(0)$ (Ritz)	$\rho_{1s}(0)$ (B-M)	$\rho_{1s}(0)$ (exacte)
2	0.110215596	0.1102001	0.110200758
4	0.503880519	0.5031562	0.503120078
6	0.792849101	0.7893348	0.789334572
8	0.871858313	0.8660439	0.865801473
10	0.881300797	0.8754389	0.875248873
12	0.881825479	0.8760809	0.868896701

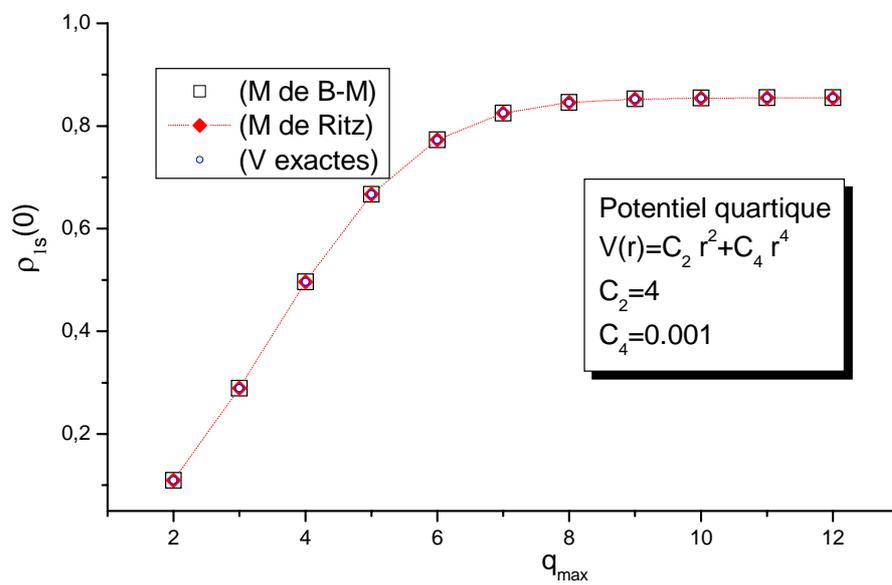
**Tableau III-13:** Densité de l'état fondamental du potentiel quartique en fonction de la variable  $q$ .  $V(r) = C_2 r^2 + C_4 r^4$  avec  $C_2 = 4$ . et  $C_4 = 0.1$ .

$q_{\max}$	$\rho_{1s}(0)$ (Ritz)	$\rho_{1s}(0)$ (B-M)	$\rho_{1s}(0)$ (exacte)
2	0.109751430	0.1097493	0.109749934
4	0.496540737	0.4965031	0.496530231
6	0.773158080	0.7729897	0.772563401
8	0.845868772	0.8459076	0.845209679
10	0.854109378	0.8548128	0.852500024
12	0.854537583	0.8554143	0.854907681

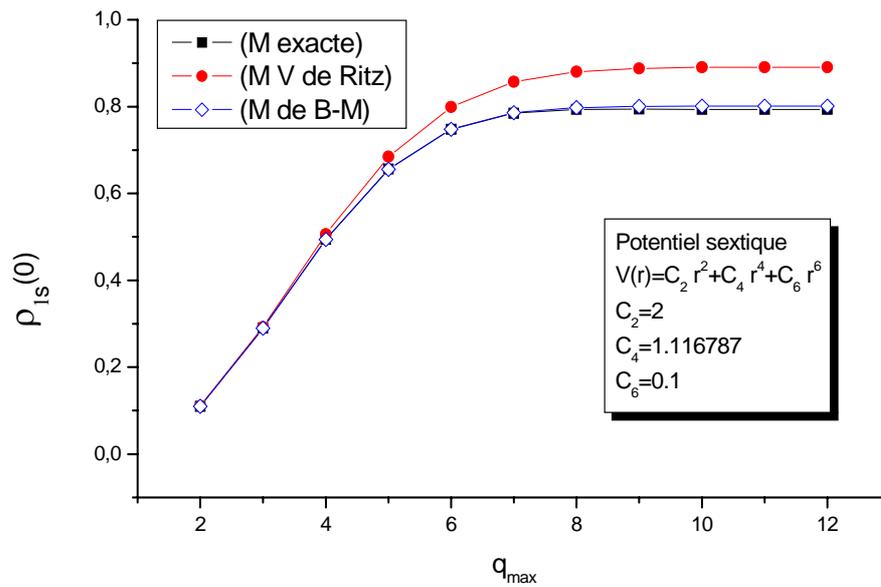
**Tableau III-14 :** Densité de l'état fondamental du potentiel quartique en fonction de la variable  $q$ .  $V(r) = C_2 r^2 + C_4 r^4$  avec  $C_2 = 4$ . et  $C_4 = 0.001$



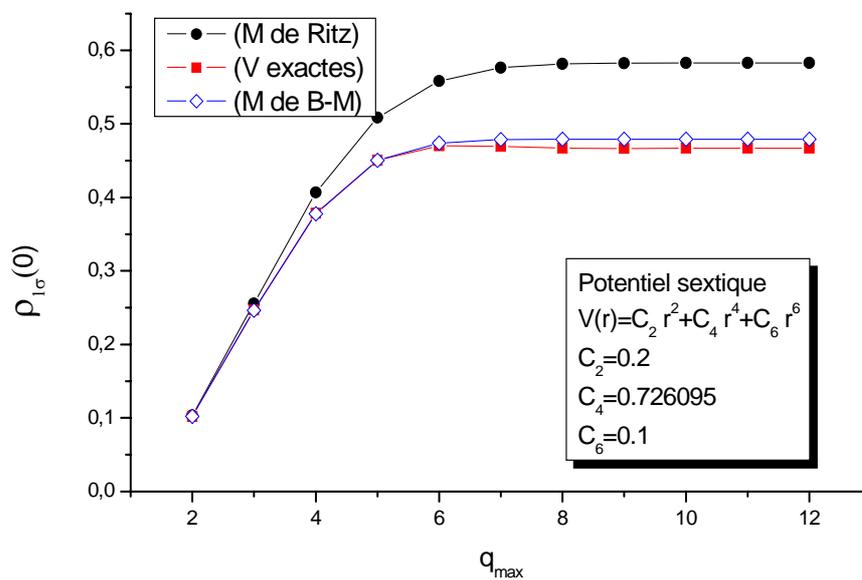
**Fig(III-09) :** Comportement de la densité d'états à l'origine, en fonction de la valeur  $q_{\max}$ , dans le cas du potentiel quartique.



**Fig(III-10) :** Comportement de la densité d'états à l'origine, en fonction de la valeur  $q_{\max}$ , dans le cas du potentiel quartique.



**Fig(III-11)** : Comportement de la densité d'états à l'origine, en fonction de la valeur  $q_{\max}$ , dans le cas du potentiel sextique.



**Fig(III-12)** : Comportement de la densité d'états à l'origine, en fonction de la valeur  $q_{\max}$ , dans le cas du potentiel sextique.

Nous nous sommes, en outre, intéressés au comportement du facteur du forme ainsi que celui de la densité à l'origine en fonction de la variable  $q$ . Les figures (III.05) à (III.12) montrent une parfaite adéquation, dans les cas des potentiels quartique et sextique, entre nos résultats et ceux obtenus exactement.

L'approximation qui consiste à remplacer la série infinie donnant  $F(q)$  par son approximant de Padé, n'a pas altéré nos calculs et a permis, par contre, de surmonter de façon élégante les difficultés liées à la série infinie et alternée. Les résultats obtenus par cette procédure ont été plus que satisfaisants.

# Chapitre IV

Les corrections systématiques

## Les corrections systématiques

La méthode variationnelle de Feynman-Kleinert [9] a permis d'évaluer, de manière satisfaisante, l'énergie de l'état fondamental pour un système quantique donné. Pour rendre cette méthode plus performante, Kleinert a jugé utile d'introduire dans sa technique de départ, des corrections, dites systématiques, et dont la contribution s'avérera plus tard décisive. Dans sa nouvelle méthode [34,35,39,40], Kleinert combine les méthodes perturbative et variationnelle pour exprimer le potentiel effectif classique sous forme d'une série convergente. Les différents termes apparaissant dans l'expression finale de l'énergie, seront calculés via les fonctions de corrélation dont nous donnons ci-après un bref aperçu.

### IV.1 Notion de fonction de corrélation et de fonctionnelle génératrice:

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

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

ou encore,

$$G^{(n)}(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n) = Z^{-1} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_n x(\tau_1) \cdots x(\tau_n) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} A_e\right) \quad \text{(IV-01)}$$

Le calcul direct de cette intégrale de chemins est compliqué. Il existe une méthode plus abordable basée sur les dérivées fonctionnelles de la fonction de partition  $Z[j]$ , relative au système physique étudié auquel nous avons ajouté un terme source  $j(\tau)$ . Cette fonction de partition  $Z[j]$ , dite fonctionnelle génératrice de la théorie, est donnée pour l'oscillateur harmonique par:

$$Z[j] = \int dx_1 dx_2 \dots dx_n \exp\left(-\frac{1}{\hbar} A_e[j]\right) \quad (\text{IV-02})$$

où  $A_e[j]$  est l'action euclidienne:

$$A_e[j] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ \frac{M}{2} (\dot{x}^2 + \omega^2 x^2) - j(\tau)x(\tau) \right] \quad (\text{IV-03})$$

La fonction  $x(\tau)$  étant périodique, nous pouvons alors effectuer une intégration par parties du terme énergie cinétique.

$$\int_0^{\hbar\beta} \dot{x} \dot{x} d\tau = \dot{x} x \Big|_0^{\hbar\beta} - \int_0^{\hbar\beta} x \ddot{x} d\tau \quad (\text{IV-04})$$

la périodicité de la fonction  $x(\tau)$  annule le premier terme de l'équation ci-dessus. L'action euclidienne devient alors:

$$A_e[j] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ \frac{M}{2} x(\tau) D_e x(\tau) - j(\tau)x(\tau) \right] \quad (\text{IV-05})$$

avec  $D_e(\tau, \tau') = -\partial_\tau^2 + \omega^2$

en général,

$$D_e(\tau, \tau') = (-\partial_\tau^2 + \omega^2) \delta(\tau - \tau') \quad \text{où} \quad \tau - \tau' \in [0, \hbar\beta]$$

sa fonctionnelle inverse est appelée fonction euclidienne de Green notée  $G_e^p(\tau, \tau')$ .

$$G_e^p(\tau, \tau') = (-\partial_\tau^2 + \omega^2)^{-1} \quad (\text{IV-06})$$

introduisons le changement de variable :

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

après remplacement de  $x(\tau)$  par son expression dans la relation (IV-05), il vient:

$$A_e[j] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ \frac{M}{2} x'(\tau) D_e(\tau, \tau') x'(\tau) - \frac{1}{2M} \int_0^{\hbar\beta} j(\tau) G_e^p(\tau, \tau') j(\tau') d\tau' \right] \quad (\text{IV-07})$$

Le premier terme de cette action correspond à l'oscillateur harmonique ; ceci nous permet de mettre la fonction de partition sous la forme suivante:

$$Z[j] = Z_\omega \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} A_e^s[j]\right\} \quad (\text{IV-08})$$

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

La partie correspondant au terme source est donnée par:

$$A_e^s[j] = -\frac{1}{2M} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ \int_0^{\hbar\beta} j(\tau) G_e^p(\tau, \tau') j(\tau') d\tau' \right] \quad (\text{IV-09})$$

## IV.2 Passage à la fonction de Green:

La fonction de Green s'écrit sur la base des fonctions propres de l'opérateur différentiel  $D_e$  comme suit:

$$G_e^p(\tau) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\omega_m^2 + \omega^2} \exp(-i\omega_m \tau) \quad (\text{IV-10})$$

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

ou encore

$$G_e^p(\tau) = \frac{1}{2\omega} \frac{\cosh \omega(\tau - \hbar\beta/2)}{\sinh(\hbar\beta\omega/2)} \quad |\tau| \in [0, \hbar\beta]$$

sachant que :

$$\frac{\cosh \omega(\tau - \hbar\beta/2)}{\sinh(\hbar\beta\omega/2)} = \frac{\exp(\omega\tau - \hbar\beta\omega) + \exp(-\omega\tau)}{1 - \exp(-\hbar\beta\omega)}$$

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

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} G_e^p(\tau) = \frac{1}{2\omega} \exp(-\omega|\tau|) \quad |\tau| \in [0, \hbar\beta]$$

$$\text{où} \quad a^2 = \frac{1}{2\omega} \quad (\text{IV-11})$$

**IV.3 Application de la règle de Wick:**

La relation (IV-05) nous permet d'écrire la fonction de corrélation comme suit:

$$G^{(n)}(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n) = Z^{-1} \int dx_1 dx_2 \dots dx_n x(\tau_1) \dots x(\tau_n) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} A_e\right)$$

$$= \frac{\hbar^n}{Z[j]} \frac{\delta^n Z[j]}{\delta j(\tau_1) \delta j(\tau_2) \dots \delta j(\tau_n)} \Big|_{j=0} \tag{IV-12}$$

où  $Z[j]$  est donnée par l'équation(IV-08). Après substitution, la relation ci-dessus devient :

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

il faut noter que nous avons posé  $j=0$  dans l'équation (IV-12) afin de revenir au cas qui nous intéresse. L'introduction du terme source nous a servi uniquement pour développer nos calculs et arriver à l'équation (IV-12). Nous pouvons ainsi en déduire une expression pour  $G^{(2)}(\tau, \tau')$ :

$$G^{(2)}(\tau, \tau') = \hbar^2 \frac{\delta^2}{\delta j(\tau) \delta j(\tau')} \exp\left\{ \frac{1}{2\hbar M} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' j(\tau) G_e^p(\tau - \tau') j(\tau') \right\} \Big|_{j=0}$$

$$= \frac{\hbar}{M} G_e^p(\tau, \tau') \tag{IV-13}$$

La généralisation de nos calculs au cas  $G^{(n)}(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n)$  conduit à:

$$G^{(n)}(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n) = \hbar^n \frac{\delta^n}{\delta j(\tau_1) \delta j(\tau_2) \dots \delta j(\tau_n)} \exp\left\{ \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' j(\tau) G^{(2)}(\tau - \tau') j(\tau') \right\} \Big|_{j=0}$$

Ce résultat est connu en mécanique quantique et en théorie des champs sous l'appellation de théorème de Wick. Les moments d'ordre impair sont nuls, et ceux d'ordre pair s'écrivent :

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

nous avons considéré toutes les combinaisons possibles.

#### IV.4 Développement perturbatif de la fonction de partition:

Dans le cas d'un oscillateur harmonique perturbé, où  $V(x)$  est la perturbation, la fonction de partition est donnée par:

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

le développement, à l'ordre trois, du terme exponentiel contenant le terme interaction  $V(x)$ , conduit à:

$$Z = \int \mathcal{D}x \left\{ \left[ 1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} V(x_1) d\tau_1 + \frac{1}{2! \hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} V(x_2) d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} V(x_1) d\tau_1 - \frac{1}{3! \hbar^3} \int_0^{\hbar\beta} V(x_3) d\tau_3 \int_0^{\hbar\beta} V(x_2) d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} V(x_1) d\tau_1 \right] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 + M \frac{\omega^2}{2} x^2 \right] \right\} \right\} \quad (\text{IV-14})$$

en posant  $A_{int,e} = \int_0^{\hbar\beta} V(x(\tau)) d\tau$ , il vient:

$$Z = \int \mathcal{D}x \left\{ 1 - \frac{1}{\hbar} A_{int,e} + \frac{1}{2! \hbar^2} A_{int,e}^2 - \frac{1}{3! \hbar^3} A_{int,e}^3 + \dots \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 + M \frac{\omega^2}{2} x^2 \right] \right\}$$

Nous pouvons exprimer  $Z$  en fonction des valeurs moyennes calculées par rapport à la fonction de partition de l'oscillateur harmonique  $Z_\omega$ .

$$\langle f \rangle_\omega = Z_\omega^{-1} \int \mathcal{D}x f \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 + M \frac{\omega^2}{2} x^2 \right] \right\}$$

Nous obtenons alors,

$$Z = Z_\omega \left( 1 - \frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_\omega + \frac{1}{2\hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_\omega - \frac{1}{3! \hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_\omega + \dots \right) \quad (\text{IV-15})$$

Par commodité de calcul, il est préférable de réécrire la série ci-dessus sous une forme exponentielle:

$$\begin{aligned} & 1 - \frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_\omega + \frac{1}{2! \hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_\omega - \frac{1}{3! \hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_\omega + \dots \\ & = \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_\omega + \frac{1}{2! \hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c} - \frac{1}{3! \hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_{\omega,c} + \dots \right\} \end{aligned} \quad (\text{IV-16})$$

Les valeurs moyennes  $\langle \dots \rangle_{\omega,c}$  sont appelées cumulants. Elles sont reliées aux premières valeurs moyennes par:

$$\begin{aligned}\langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c} &= \left\langle \left[ A_{int,e} - \langle A_{int,e} \rangle_{\omega} \right]^2 \right\rangle_{\omega} \\ &= \langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega} - \langle A_{int,e} \rangle_{\omega}^2 \\ \langle A_{int,e}^3 \rangle_{\omega,c} &= \left\langle \left[ A_{int,e} - \langle A_{int,e} \rangle_{\omega} \right]^3 \right\rangle_{\omega} \\ &= \langle A_{int,e}^3 \rangle_{\omega} - 3 \langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega} \langle A_{int,e} \rangle_{\omega} + 2 \langle A_{int,e} \rangle_{\omega}^3\end{aligned}$$

La connaissance de  $Z$  nous permet d'écrire une expression pour l'énergie libre  $F$  en fonction de ces cumulants.

$$F = -\frac{I}{\beta} \left\{ \text{Log } Z_{\omega} + \left( -\frac{I}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_{\omega} + \frac{I}{2! \hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c} - \frac{I}{3! \hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_{\omega,c} \right) \right\}$$

ou encore,

$$F = F_{\omega} + \frac{I}{\beta} \left\{ \frac{I}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_{\omega} - \frac{I}{2! \hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c} + \frac{I}{3! \hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_{\omega,c} \right\} \quad (\text{IV-17})$$

Nous pouvons également exprimer la variation de l'énergie libre due à l'interaction comme suit:

$$\Delta F = \frac{I}{\beta} \left\{ \frac{I}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_{\omega} - \frac{I}{2! \hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c} + \frac{I}{3! \hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_{\omega,c} \right\} \quad , \quad (\text{IV-18})$$

cette dernière nous conduit à la correction sur l'énergie de l'état fondamental:

$$\Delta E = \lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{I}{\beta} \left\{ \frac{I}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_{\omega} - \frac{I}{2! \hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c} + \frac{I}{3! \hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_{\omega,c} \right\} \quad (\text{IV-19})$$

## **IV.5 Application à l'oscillateur anharmonique:**

### **IV.5.1 Application aux potentiels quartique et sextique:**

Considérons le cas d'un système quantique décrit par

$$V(x) = \frac{\alpha}{4} x^4 + \frac{\gamma}{6} x^6$$

Nous commençons par le cas, relativement simple, du potentiel quartique.

$$V(x) = \frac{\alpha}{4} x^4$$

calculons le cumulants  $\langle A_{\text{int},e} \rangle_{\omega,c}$

$$\langle A_{\text{int},e} \rangle_{\omega,c} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \langle V(x) \rangle_{\omega} = \frac{\alpha}{4} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \langle x^4(\tau) \rangle_{\omega}$$

en utilisant la règle de Wick,

$$\begin{aligned} \langle x(\tau_1)x(\tau_2)x(\tau_3)x(\tau_4) \rangle_{\omega} &= G^{(4)}(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4) \\ &= \langle x(\tau_1)x(\tau_2) \rangle_{\omega} \langle x(\tau_3)x(\tau_4) \rangle_{\omega} + \langle x(\tau_1)x(\tau_3) \rangle_{\omega} \langle x(\tau_2)x(\tau_4) \rangle_{\omega} + \langle x(\tau_1)x(\tau_4) \rangle_{\omega} \langle x(\tau_2)x(\tau_3) \rangle_{\omega} \end{aligned}$$

dans notre cas  $\tau_i = \tau \quad i = 1, \dots, 4$

il vient alors

$$\langle x(\tau)^4 \rangle_{\omega} = 3 \langle x^2(\tau) \rangle_{\omega}^2 = 3 [G^{(2)}(\tau, \tau)]^2$$

d'où

$$\langle A_{\text{int},e} \rangle_{\omega} = \frac{\alpha}{4} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \langle x^4(\tau) \rangle_{\omega} = \frac{3\alpha}{4} \int_0^{\hbar\beta} d\tau [G^{(2)}(\tau, \tau)]^2 \quad \text{(IV-20)}$$

Calculons le second terme  $\langle A_{\text{int},e}^2 \rangle_{\omega}$ ,

$$\langle A_{\text{int},e}^2 \rangle_{\omega} = \left( \frac{\alpha}{4} \right)^2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \langle x^4(\tau_1)x^4(\tau_2) \rangle_{\omega}$$

le calcul du terme  $\langle x^4(\tau_1)x^4(\tau_2) \rangle_{\omega}$ , par le théorème de Wick, conduit à la relation

suivante :

$$\langle x^4(\tau_1)x^4(\tau_2) \rangle_{\omega} = 9G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_2)^2 + 24G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^4 + 72G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)$$

le second terme s'écrit alors,

$$\langle A_{\text{int},e}^2 \rangle_{\omega} = \left( \frac{\alpha}{4} \right)^2 \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 \left\{ \begin{aligned} &9G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_2)^2 + 24G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^4 \\ &+ 72G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) \end{aligned} \right\}$$

et le cumulants correspondant,

$$\langle A_{\text{int},e}^2 \rangle_{\omega,c} = \left( \frac{\alpha}{4} \right)^2 \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 \left\{ 72G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) + 24G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^4 \right\} \quad \text{(IV-21)}$$

Pour les contributions d'ordre trois,

$$\langle A_{\text{int},e}^3 \rangle_{\omega} = \left( \frac{\alpha}{4} \right)^3 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \langle x^4(\tau_1)x^4(\tau_2)x^4(\tau_3) \rangle_{\omega}$$

le calcul du terme  $\langle x^4(\tau_1)x^4(\tau_2)x^4(\tau_3) \rangle_\omega$  est très fastidieux. Nous nous contentons ici de donner son expression:

$$\begin{aligned} \langle x^4(\tau_1)x^4(\tau_2)x^4(\tau_3) \rangle_\omega = & \left\{ 2592 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) \right. \\ & + 3456 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G^{(2)}(\tau_1, \tau_3) G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^3 \\ & \left. + 1728 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_3)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 + 1728 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G^{(2)}(\tau_1, \tau_3) G^{(2)}(\tau_2, \tau_3) \right\} \end{aligned}$$

le cumuland du même ordre s'écrit comme:

$$\begin{aligned} \langle A_{\text{int},e}^3 \rangle_{\omega,c} = & \left( \frac{\alpha}{4} \right)^3 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \left\{ 2592 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) \right. \\ & + 3456 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G^{(2)}(\tau_1, \tau_3) G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^3 \\ & \left. + 1728 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_3)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 + 1728 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G^{(2)}(\tau_1, \tau_3) G^{(2)}(\tau_2, \tau_3) \right\}. \end{aligned}$$

(IV-22)

Pour calculer les termes intervenant dans l'expression (IV-19) donnant l'énergie, il est impératif de calculer les intégrales correspondantes. Pour ce faire, nous utiliserons la fonction de Green aux basses températures donnée par la relation (IV-11). Ces intégrales s'écrivent:

$$\begin{aligned} \int_0^{\hbar\beta} d\tau G^{(2)}(\tau, \tau) &= a^2 \hbar\beta \\ \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 &= \frac{1}{\omega} a^4 \hbar\beta \\ \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^4 &= \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\omega} \right)^2 a^8 \hbar\beta \\ \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G^{(2)}(\tau_1, \tau_3) G^{(2)}(\tau_2, \tau_3) &= \left( \frac{1}{\omega} \right)^2 \frac{3}{2} a^6 \hbar\beta \\ \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_3)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 &= \frac{3}{8} \left( \frac{1}{\omega} \right)^2 a^{12} \hbar\beta \\ \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G^{(2)}(\tau_2, \tau_3) G^{(2)}(\tau_1, \tau_3)^3 &= \frac{5}{8} \left( \frac{1}{\omega} \right)^2 a^{10} \hbar\beta \\ \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 &= 2 \left( \frac{1}{\omega} \right)^2 a^6 \hbar\beta \end{aligned} \tag{IV-23}$$

$$\int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G^{(2)}(\tau_1, \tau_3) G^{(2)}(\tau_2, \tau_3) = 4 \left(\frac{1}{\omega}\right)^2 a^4 \hbar\beta$$

$$\int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^3 = \frac{4}{3} \left(\frac{1}{\omega}\right)^2 a^8 \hbar\beta$$

$$\int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G^{(2)}(\tau_1, \tau_3)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 = \frac{5}{9} \left(\frac{1}{\omega}\right)^2 a^{10} \hbar\beta$$

ceci conduit aux expressions des différents cumulants:

$$\langle A_{\text{int},e} \rangle_{\omega} = \frac{3\alpha}{4} \hbar\beta a^4$$

$$\langle A_{\text{int},e}^2 \rangle_{\omega,c} = \left(\frac{\alpha}{4}\right)^2 \left\{ \frac{72}{\omega} \hbar\beta a^8 + \frac{24}{\omega} \frac{1}{2} \hbar\beta a^8 \right\} = \left(\frac{\alpha}{4}\right)^2 84 \frac{a^8}{\omega} \hbar\beta \quad (\text{IV-24})$$

$$\begin{aligned} \langle A_{\text{int},e}^3 \rangle_{\omega,c} &= \left(\frac{\alpha}{4}\right)^3 \left\{ 2592 \frac{1}{\omega^2} + 3456 \frac{1}{\omega^2} \frac{5}{8} + 1728 \frac{1}{\omega^2} \frac{3}{2} + 1728 \frac{1}{\omega^2} \frac{3}{8} \right\} a^{12} \hbar\beta \\ &= \left(\frac{\alpha}{4}\right)^3 \frac{7992}{\omega^2} a^{12} \hbar\beta \end{aligned}$$

L'expression de l'énergie libre (IV-19) devient:

$$F = F_{\omega} + 3 \frac{\alpha}{4} a^4 - \frac{1}{2! \hbar\omega} \left[ \left(\frac{\alpha}{4}\right)^2 84 a^8 \right] + \frac{1}{3! \hbar^2 \omega^2} \left[ \left(\frac{\alpha}{4}\right)^3 7992 a^{12} \right] \quad (\text{IV-25})$$

Nous donnons, ci-après, l'expression de l'énergie libre dans le cas du potentiel sextique.

$$\begin{aligned} F &= F_{\omega} + 3 \frac{\alpha}{4} a^4 + 15 \frac{\gamma}{6} a^6 - \frac{1}{2! \hbar\omega} \left[ \left(\frac{\gamma}{6}\right)^2 6990 a^{12} + \left(\frac{\gamma}{6}\right) \left(\frac{\alpha}{4}\right) 1440 a^{10} + \left(\frac{\alpha}{4}\right)^2 84 a^8 \right] \\ &+ \frac{1}{3! \hbar^2 \omega^2} \left[ \left(\frac{\gamma}{6}\right)^3 14876100 a^{18} + \left(\frac{\gamma}{6}\right)^2 \left(\frac{\alpha}{4}\right) 3316680 a^{16} + \left(\frac{\gamma}{6}\right) \left(\frac{\alpha}{4}\right)^2 269280 a^{14} + \left(\frac{\alpha}{4}\right)^3 7992 a^{12} \right] \end{aligned} \quad (\text{IV-26})$$

avec

$$F_{\omega} = \hbar\omega/2$$

### IV.5.2 cas du potentiel anharmonique englobant des termes cubique et quartique:

Nous nous proposons d'appliquer la méthode au potentiel suivant:

$$V(x) = \frac{1}{2} \omega^2 x^2 + \alpha x^3 + \lambda x^4 \quad (\text{IV-27})$$

ici , le terme perturbatif est  $V_{\text{int}}(x) = \alpha x^3 + \lambda x^4$ .  $\alpha$  et  $\lambda$  sont des paramètres à fixer.

Nous avons calculé les cumulants d'ordre trois apparaissant dans l'expression de l'énergie **(IV-19)**.

$$\begin{aligned} \langle A_{\text{int},e} \rangle_{\omega,c} &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \langle V_{\text{int}}(x) \rangle = 3\lambda \int_0^{\hbar\beta} G^{(2)}(\tau, \tau)^2 d\tau \\ \langle A_{\text{int},e}^2 \rangle_{\omega,c} &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \left\{ \alpha^2 \left[ 9G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) + 6G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^3 \right] \right. \\ &\quad \left. + \lambda^2 \left[ 72G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) + 24G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^4 \right] \right\} \quad (\text{IV-28}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle A_{\text{int},e}^3 \rangle_{\omega,c} &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \left\{ 3\alpha^2 \lambda \left[ 216 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)G^{(2)}(\tau_3, \tau_3)G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 108G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G^{(2)}(\tau_2, \tau_2)G^{(2)}(\tau_1, \tau_3)G^{(2)}(\tau_2, \tau_3) + 216 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)G^{(2)}(\tau_1, \tau_3)^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 \right] + \lambda^3 \left[ 2592G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) + 3456 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)G^{(2)}(\tau_1, \tau_3)G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^3 + 1728 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)G^{(2)}(\tau_2, \tau_2)G^{(2)}(\tau_3, \tau_3)G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. G^{(2)}(\tau_1, \tau_3)G^{(2)}(\tau_2, \tau_3) + 1728 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_3)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 \right] \right\} \end{aligned}$$

après substitution des intégrales par leurs expressions, nous obtenons:

$$\begin{aligned} \langle A_{\text{int},e} \rangle_{\omega} &= 3\lambda \int_0^{\hbar\beta} G^{(2)}(\tau, \tau)^2 d\tau = 3\lambda a^4 \hbar\beta \\ \langle A_{\text{int},e}^2 \rangle_{\omega,c} &= \left[ \frac{84}{\omega} \lambda^2 a^8 + \alpha^2 \frac{22}{\omega} a^6 \right] \hbar\beta \\ \langle A_{\text{int},e}^3 \rangle_{\omega,c} &= \left[ \alpha^2 \lambda \frac{4104}{\omega^2} a^{10} + \lambda^3 \frac{7992}{\omega^2} a^{12} \right] \hbar\beta . \quad (\text{IV-29}) \end{aligned}$$

Ceci nous conduit à l'expression de l'énergie de l'état fondamental:

$$E_0 = F_\omega + 3\lambda a^4 - \frac{42}{\omega} \lambda^2 a^8 - \alpha^2 \frac{11}{\omega} a^6 + \alpha^2 \lambda \frac{684}{\omega^2} a^{10} + \lambda^3 \frac{1332}{\omega^2} a^{12} \quad (\text{IV-30})$$

avec  $\hbar = 1$  et  $F_\omega = \frac{\omega}{2}$ .

## IV.6 Introduction des corrections systématiques:

L'introduction de corrections systématiques dans la méthode variationnelle de Feynman - Kleinert, conduit à un développement perturbatif simple à manier. L'idée maîtresse consiste à écrire l'action sous forme d'une série des puissances de l'écart du chemin suivi, par rapport au chemin moyen  $x_0 = \bar{x}$ .

$$\delta x(\tau) = x(\tau) - x_0. \quad (\text{IV-31})$$

Avec ce changement de variable la relation donnant l'action devient:

$$A = V(x_0) \hbar\beta + A_\Omega^{x_0} + A_{\text{int}}^{x_0} \quad (\text{IV-32})$$

où

$$A_\Omega^{x_0} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{M}{2} \left\{ [\delta \dot{x}(\tau)]^2 + \Omega^2(x_0) [\delta x(\tau)]^2 \right\} \quad (\text{IV-33})$$

et

$$A_{\text{int}}^{x_0} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{1}{2!} [\delta x(\tau)]^2 V^{(2)}(x_0) + \frac{1}{3!} [\delta x(\tau)]^3 V^{(3)}(x_0) + \dots \dots - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) [\delta x(\tau)]^2 \right\}$$

La contribution du terme  $V'(x_0)$  est nulle en vertu de la définition de la position moyenne  $x_0$ .

Nous introduirons les coefficients de couplage  $g_i(x_0)$  pour arriver à une nouvelle forme pour l'action  $A_{\text{int}}^{x_0}$ .

$$A_{\text{int}}^{x_0} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{g_2(x_0)}{2!} [\delta x(\tau)]^2 + \frac{g_3(x_0)}{3!} [\delta x(\tau)]^3 + \dots \dots \dots + \frac{g_n(x_0)}{n!} [\delta x(\tau)]^n \right\} \quad (\text{IV-34})$$

avec  $g_i(x_0) = V^{(i)}(x_0) - \Omega^2 \delta_{i2}$  et  $V^{(i)}(x_0) = \left. \frac{d^i V(x)}{dx^i} \right|_{x=x_0}$

Dans le cas de l'oscillateur doublement anharmonique donné par:

$$V(x) = \frac{M}{2} \omega^2 x^2 + \frac{\alpha}{4} x^4 + \frac{\gamma}{6} x^6,$$

nous avons

$$\begin{aligned} g_2(x_0) &= M [\omega^2 - \Omega^2(x_0)] + 3 \alpha x_0^2 + 5 \gamma x_0^4 \\ g_3(x_0) &= 6 \alpha x_0 + 20 \gamma x_0^3 \\ g_4(x_0) &= 6 \alpha + 60 \gamma x_0^2 \\ g_5(x_0) &= 120 \gamma x_0 \\ g_6(x_0) &= 120 \gamma \end{aligned} \quad (\text{IV-35})$$

Sachant qu'aux basses températures, la contribution de  $x_0$ , à l'origine, est la plus importante dans l'évaluation de la fonction de partition, nous pouvons, alors, utiliser l'équation (IV-17) pour en déduire l'expression du potentiel effectif classique  $V_{eff,cl}(x)$  à une température nulle.

$$V_{eff,cl}(x_0) = V(x_0) + F_{\Omega}^{x_0} + \frac{1}{\hbar\beta} \langle A'_{int} \rangle_{\Omega}^{x_0} - \frac{1}{2! \hbar^2 \beta} \langle A'^{x_0 2} \rangle_{\Omega,c}^{x_0} + \frac{1}{3! \hbar^3 \beta} \langle A'^{x_0 3} \rangle_{\Omega,c}^{x_0} + \dots \quad (\text{IV-36})$$

Vu que  $V_{eff,cl}(x)$  dépend explicitement de la pulsation d'essai  $\Omega(x_0)$ , la valeur optimale de ce dernier est obtenu en optimisant  $V_{eff,cl}(x)$  par rapport à  $\Omega(x_0)$ . Ceci revient à chercher une valeur  $\Omega_{opt}(x_0)$  qui rend les erreurs de troncature minimales. Aussi, le potentiel effectif classique à l'ordre trois s'écrit:

$$W_3(x_0) = V(x_0) + F_{\Omega_{opt}}^{x_0} + \frac{1}{\hbar\beta} \langle A'_{int} \rangle_{\Omega_{opt}}^{x_0} - \frac{1}{2! \hbar^2 \beta} \langle A'^{x_0 2} \rangle_{\Omega_{opt},c}^{x_0} + \frac{1}{3! \hbar^3 \beta} \langle A'^{x_0 3} \rangle_{\Omega_{opt},c}^{x_0} \quad (\text{IV-37})$$

Pour déterminer l'expression de  $W_3(x_0)$ , nous utiliserons la relation (IV-30) donnant l'énergie libre, où le paramètre  $\omega$  sera remplacé par  $\sqrt{\Omega^2 + g_2(x_0)}$ , avec  $g_2(x_0) = \omega^2 - \Omega^2$ . Le développement de l'expression obtenue, à l'ordre trois des puissances de  $g_2(x_0)$ , conduit à:

$$\begin{aligned}
F = & \frac{5}{32}\Omega + \frac{413225}{9}\gamma^3 a^{22} + 15355\alpha\gamma^2 a^{20} + 1870\alpha^2\gamma a^{18} + \left(\frac{8155}{3}a^{18} - \frac{3495}{4}a^{14}\right)\gamma^2 \\
& + \left(\frac{105}{2}a^{14} - \frac{147}{8}a^{10}\right)\alpha^2 + (720a^{16} - 240a^{12})\alpha\gamma + \left(12a^{12} - 9a^8 + \frac{9}{4}a^4\right)\alpha \\
& + \left(75a^{14} - \frac{105}{2}a^{10} + \frac{175}{16}a^6\right)\gamma + \frac{333}{4}\alpha^3 a^{16} + a^{10} - \frac{5}{4}a^6 + \frac{15}{16}a^2
\end{aligned} \tag{IV-38}$$

Nous pouvons, de la même manière, obtenir l'expression de l'énergie de l'état fondamental pour le potentiel anharmonique donné par la relation (IV-27).

$$\begin{aligned}
F = & \frac{5}{32}\Omega + \frac{15}{16}\omega^2 a^2 - \frac{5}{4}\omega^4 a^6 + \omega^6 a^{10} + \lambda(64\omega^4 a^{12} - 36\omega^2 a^8 + 9a^4) \\
& + \lambda^2(840\omega^2 a^{14} - 294a^{10}) - \alpha^2(66a^8 - 176\omega^2 a^{12}) + 5328\lambda^3 a^{16} \\
& + 5472\alpha^2\lambda a^{14}
\end{aligned} \tag{IV-39}$$

$$\text{avec} \quad \Omega = \frac{1}{2a^2}$$

Nous avons consigné, respectivement, dans les tableaux Tab(IV.1) et Tab(IV.2) les valeurs de l'énergie de l'état fondamental pour le potentiel sextique et le potentiel donné par (IV-27), pour différents jeux des paramètres  $\alpha$ ,  $\gamma$  et  $\lambda$ . Ces résultats ont été obtenus via la méthode standard de Feynman-Kleinert et celle de Kleinert incluant les corrections systématiques. Nous remarquons que ces corrections ont amélioré, de façon sensible, nos résultats qui se comparent favorablement à ceux donnés dans la littérature. L'écart apparaissant entre nos valeurs et celles calculées par d'autres méthodes, aux grandes valeurs du paramètre  $\lambda$ , peut être réduit en prenant en considération les cumulants d'ordres supérieurs à trois.

$\alpha$	$\gamma$	E (méthode de F-K)	E (correction systématique)	E (littérature)
0.04	0.	0.5072875255	0.5072562180	0.5072562045 <sup>a)</sup>
0.4	0.	0.5603073713	0.5591542187	0.5591463271 <sup>a)</sup>
4.	0.	0.8125000002	0.8039140528	0.8037706512 <sup>c)</sup>
40.	0.	1.531250000	1.505497504	1.50497 <sup>d)</sup>
400.	0.	3.192444044	3.132656559	3.13138 <sup>d)</sup>
4000.	0.	6.827953314	6.697032859	6.6942208505 <sup>c)</sup>
0.	0.003	0.5009297206	0.5009244131	0.5009244078 <sup>a)</sup>
0.	0.3	0.5599674082	0.5549930985	0.554544 <sup>b)</sup>
0.	6.	0.8377971829	0.8089121393	0.80482 <sup>a)</sup>
0.	60.	1.355009282	1.291654984	1.28190 <sup>b)</sup>
-0.1	1.	0.6248649800	0.6128334236	0.61138 <sup>a)</sup>
0.2	0.4	0.5932519805	0.5867948857	0.5863 <sup>a)</sup>
1.	1.	0.6998879016	0.6881563062	0.687254 <sup>a)</sup>
4.	2.	0.8766031579	0.8600377534	0.8590934 <sup>a)</sup>
10.	4.	1.085057001	1.063062166	1.0619997 <sup>a)</sup>
10.	10.	1.155630239	1.125618419	1.123438 <sup>a)</sup>
100.	10.	2.058934379	2.019729430	2.0187277 <sup>a)</sup>
100.	100.	2.207145291	2.149373259	2.146133 <sup>a)</sup>
1000.	1000.	4.502327680	4.395573445	4.391194 <sup>a)</sup>

a) [41] b) [42], c) [43], d) [44]

**Tableau (IV-1):** Energies de l'état fondamental de l'oscillateur anharmonique sextique, par différentes méthodes, et pour différents jeux des paramètres  $\alpha$  et  $\gamma$  avec  $\omega = 1$ .

$\alpha$	$\lambda$	E (méthode variationnelle de F-K)	E (correction systématique)	E (littérature)
0.01	0.0	0.5000000002	0.499862500	0.4998624 <sup>a)</sup>
	0.01	0.5072875255	0.507151591	0.5071369 <sup>a)</sup>
	0.1	0.5603073713	0.559129146	0.559091188640 <sup>b)</sup>
	1.	0.8125000002	0.803913252	0.803763303 <sup>b)</sup>
	10.	1.53125000	1.505497496	1.504971949 <sup>b)</sup>
	100.	3.192444044	3.132656557	3.131384142 <sup>b)</sup>
	1000.	6.827953314	6.697032862	6.694220849 <sup>b)</sup>
	10000.	14.68713887	14.40408702	14.397995343 <sup>b)</sup>
0.1	0.0	0.5000000002	0.486250000	0.4843110 <sup>a)</sup>
	0.01	0.507287525	0.496760899	0.4942218 <sup>a)</sup>
	0.1	0.560307371	0.556047465	0.5535637 <sup>a)</sup>
	1.	0.812500002	0.803796101	0.8030350201245 <sup>b)</sup>
	10.	1.531250000	1.505496692	1.504926560589 <sup>b)</sup>
	100.	3.192444044	3.132656568	3.131381887 <sup>b)</sup>
	1000.	6.827953314	6.697032863	6.694220743 <sup>b)</sup>
	10000.	14.68713887	14.40408700	14.39799534 <sup>b)</sup>
1.	1.	0.812500002	0.775926535	0.72046305 <sup>b)</sup>
	10.	1.531250000	1.504950843	1.50037353661 <sup>b)</sup>
	100.	3.192444044	3.132656725	3.1311563681 <sup>b)</sup>
	1000.	6.827953314	6.697032957	6.694210119 <sup>b)</sup>
	10000.	14.68713887	14.40408704	14.397945374 <sup>b)</sup>
10.	10.	1.531250000	1.348111609	0.8253511 <sup>c)</sup>
	100.	3.192444044	3.129083558	3.1084444114 <sup>b)</sup>
	1000.	6.827953314	6.697033979	6.693147577 <sup>b)</sup>
	10000.	14.68713887	14.40408750	14.397945374 <sup>b)</sup>
100.	100.	3.192444044	2.358542848	2 <sup>b)</sup>
	10000.	14.68713887	14.40405475	14.392996719 <sup>b)</sup>

<sup>a)</sup> [36], <sup>b)</sup> [37] et <sup>c)</sup> [38]

**Tableau (IV-2):** Energies de l'état fondamental de l'oscillateur anharmonique (IV-27), par différentes méthodes, et pour différents jeux des paramètres  $\alpha$  et  $\lambda$  avec  $\omega = 1$ .

# Conclusion

# Conclusion

Ce travail a permis, pour la première fois, d'utiliser l'énergie et la fonction d'onde de l'état fondamental, obtenues par la méthode de Feynman-Kleinert, dans le calcul via les inégalités de Bertlman et Martin, du spectre des énergies, du facteur de forme et de la densité d'états relatifs à un système physique décrit par un potentiel harmonique perturbé. L'approche variationnelle de Feynman-Kleinert, basée sur l'inégalité de Jensen-Peirls, nous a permis d'estimer de manière satisfaisante l'énergie de l'état fondamental et sa fonction d'onde associée. Ces deux grandeurs nous ont permis, via les inégalités de Bertlman et Martin, d'estimer avec une bonne précision les énergies de la ligne  $\gamma$  pour les potentiels quartiques et sextiques. Nos résultats se comparent favorablement à ceux obtenus par la méthode de Ritz. L'intérêt croissant que suscite l'étude du facteur de forme et de la densité d'états en physique nucléaire, nous a incité, à nous intéresser de près à ces deux grandeurs.

Cette étude n'a pas été aisée, vu que nos calculs ont abouti à une forme très peu maniable du facteur de forme  $F(q)$ . Ce problème a été vite aplani en remplaçant la série infinie et alternée apparaissant dans l'expression du facteur de forme, par son approximant de Padé. Il a fallu, également, chercher l'approximant de Padé qui reproduit le mieux la série. Une fois ces difficultés surmontées, nous nous sommes penchés sur l'étude de la densité d'états à l'origine. Cette densité n'est, en fait, que la transformée de Fourier du facteur de forme. Les densités d'états obtenues reproduisent de façon parfaite celles obtenues par la méthode de Ritz. Nous avons étudié, en outre, le comportement des moments de la densité du fondamental vis-à-vis de l'ordre  $k$ . Les résultats montrent que ces moments augmentent de façon monotone avec l'ordre  $k$ .

Nous pouvons améliorer davantage nos résultats en introduisant des corrections systématiques dans le calcul de  $E_0$  et de  $\Psi_{1s}(r)$ . Ces corrections ont fait l'objet d'une étude détaillée, et ont été appliquées dans le cas d'un potentiel anharmonique comportant un terme cubique.

Nous avons calculé pour ce potentiel, l'énergie de l'état fondamental via deux méthodes d'approximation:

- La méthode variationnelle de Feynman - Kleinert.
- La méthode corrigée de Kleinert.

La première méthode consiste à trouver une bonne borne supérieure  $F_1$  à l'énergie libre exacte  $F$ , moyennant l'inégalité de Jensen -Pierls. Cette énergie libre se confond, aux basses températures, avec l'énergie de l'état fondamental. Cette technique conduit à des résultats très satisfaisants où l'erreur est de quelques pour cent. Nous introduisons dans la seconde méthode des corrections dites systématiques. Ces dernières sont, en réalité, des cumulants faisant intervenir différents degrés de l'action  $A$ , et dont le calcul exige beaucoup de patience et de dextérité. Pour assurer au potentiel approché  $W_{eff}$  une valeur optimale, nous choisissons un ordre de troncature impair de la série alternée donnant le potentiel effectif classique exact  $V_{eff}$ . Les résultats obtenus par cette méthode sont davantage meilleurs que ceux donnés par la technique de Feynman - Kleinert. En effet, pour le cas étudié, l'erreur relative est quasiment insignifiante. Nous avons remarqué, toutefois, que pour certaines valeurs des paramètres  $\alpha$  et  $\lambda$ , l'écart n'est plus insignifiant et l'introduction de corrections d'ordre supérieur s'avère nécessaire. Le passage aux cumulants d'ordre supérieur à trois, est loin d'être aisé. Il conduit à des calculs et des expressions extrêmement compliqués. Dans pareils cas, il est avantageux de faire appel à la méthode des perturbations, élaborée par Rayleigh et Schrödinger, pour arriver aux résultats escomptés sans grandes difficultés.

# Appendice

## Appendice

Partons du commutateur  $[H, Q_{\ell 0}]$  où  $H = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + V(r)$  est l'opérateur hamiltonien du système, et  $Q_{\ell 0} = r^\ell Y_{\ell 0}(\theta, \varphi)$  l'opérateur de transition multipolaire donné en fonctions des harmoniques sphériques  $Y_{\ell 0}(\theta, \varphi)$ .

Le terme énergie cinétique s'écrit, dans le cas d'un potentiel central, comme:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta = \frac{P_r^2}{2M} + \frac{L^2}{2Mr^2} = -\frac{\hbar^2}{2Mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2Mr^2}$$

Après calcul, le commutateur  $[H, Q_{\ell 0}]$  devient:

$$[H, Q_{\ell 0}] = -\frac{\hbar^2}{M} (2\ell + 1) r^{\ell-1} Y_{\ell 0}(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial r} \quad (01)$$

Si nous considérons le double commutateur  $[Q_{\ell 0}, [H, Q_{\ell 0}]]$  développable comme suit:

$$[Q_{\ell 0}, [H, Q_{\ell 0}]] = Q_{\ell 0} [H, Q_{\ell 0}] - [H, Q_{\ell 0}] Q_{\ell 0} \quad (02)$$

son action sur une fonction radiale  $\Psi(r)$  conduit à:

$$\begin{aligned} [Q_{\ell 0}, [H, Q_{\ell 0}]]\Psi &= r^\ell Y_{\ell 0} \left( -\frac{\hbar^2}{M} (2\ell + 1) r^{\ell-1} Y_{\ell 0}(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial r} \Psi \right) \\ &\quad + \frac{\hbar^2}{M} (2\ell + 1) r^{\ell-1} Y_{\ell 0}(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial r} (r^\ell Y_{\ell 0}(\theta, \varphi) \Psi) \end{aligned}$$

ou encore,

$$[Q_{\ell 0}, [H, Q_{\ell 0}]] = \frac{\hbar^2}{M} \ell (2\ell + 1) r^{2\ell-2} Y_{\ell 0}^2 \quad (03)$$

La valeur moyenne de ce double commutateur, dans l'état fondamental noté  $|0\rangle$ , s'écrit:

$$\langle 0 | [Q_{\ell 0}, [H, Q_{\ell 0}]] | 0 \rangle = \frac{\hbar^2}{M} \ell (2\ell + 1) \langle r^{2\ell-2} \rangle_{1s} \quad (04)$$

$$\text{où } \langle r^{2\ell-2} \rangle_{1s} = \langle 0 | Y_{\ell 0}(\theta, \varphi) r^{2\ell-2} Y_{\ell 0}(\theta, \varphi) | 0 \rangle.$$

Nous pouvons, en outre, mettre le double commutateur de la relation (02), sous cette forme:

$$[Q_{\ell_0}, [H, Q_{\ell_0}]] = 2Q_{\ell_0}HQ_{\ell_0} - Q_{\ell_0}^2H - HQ_{\ell_0}^2 \quad (05)$$

en considérant sa valeur moyenne dans l'état fondamental  $|0\rangle$ ,

$$\langle 0|[Q_{\ell_0}, [H, Q_{\ell_0}]]0\rangle = 2\langle 0|Q_{\ell_0}HQ_{\ell_0}|0\rangle - \langle 0|Q_{\ell_0}^2H|0\rangle - \langle 0|HQ_{\ell_0}^2|0\rangle$$

et sachant que :

$$H|0\rangle = E_0|0\rangle \quad \text{et} \quad H|j\rangle = E_j|j\rangle$$

nous obtenons:

$$\langle 0|[Q_{\ell_0}, [H, Q_{\ell_0}]]0\rangle = 2\langle 0|Q_{\ell_0}HQ_{\ell_0}|0\rangle - 2E_0\langle 0|Q_{\ell_0}^2|0\rangle$$

Après injection de l'identité  $\sum_j |j\rangle\langle j| = 1$  dans la relation ci-dessus, il vient:

$$\langle 0|[Q_{\ell_0}, [H, Q_{\ell_0}]]0\rangle = 2\sum_j (E_j - E_0) |\langle 0|Q_{\ell_0}|j\rangle|^2 \quad (06)$$

Les équations (04) et (06) nous permettent d'arriver à:

$$2\sum_j (E_j - E_0) |\langle 0|Q_{\ell_0}|j\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{M} \ell(2\ell+1) \langle r^{2\ell-2} \rangle_{1s} \quad (07)$$

En tenant compte du fait que:

$$\langle 0|Q_{\ell_0}^* Q_{\ell_0}|0\rangle \equiv \langle 0|Y_{\ell_0} r^{2\ell} Y_{\ell_0}|0\rangle = \langle r^{2\ell} \rangle_{1s}$$

et

$$E_1 - E_0 \leq E_2 - E_0 \leq E_3 - E_0 \dots\dots\dots$$

il vient :

$$E_{1\ell} - E_0 \leq E_j - E_0 \quad \text{avec} \quad E_j \equiv E_{n\ell}$$

ces résultats nous permettent d'aboutir aux inégalités généralisées de Bertlmann et Martin.

$$2(E_{1\ell} - E_0) \sum_j |\langle 0|Q_{\ell_0}|j\rangle|^2 \leq \frac{\hbar^2}{M} \ell(2\ell+1) \langle r^{2\ell-2} \rangle_{1s}$$

qui peuvent également s'écrire:

$$\langle r^{2\ell} \rangle_{1s} \leq \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\ell(2\ell+1)}{(E_{1\ell} - E_0)} \langle r^{2\ell-2} \rangle_{1s} \quad (08)$$

$E_0$  étant toujours l'énergie de l'état fondamental, et  $E_{1\ell}$  celle du premier état de la ligne yrast.  $\langle r^k \rangle_{1s}$ ,  $k = 2\ell$ , est le moment d'ordre  $k$  de la densité du fondamental défini par:

$$\langle r^k \rangle_{1s} \equiv \int r^k |\Psi_{1s}|^2 d^3r = \int_0^{+\infty} r^{k+2} |\Psi_{1s}(r)|^2 dr$$

# Bibliographie

## **BIBLIOGRAPHIE**

- [1] **C. Cohen- Tannoudji, B. Diu and F. Laloe**, *mécanique quantique* (Hermann, 1977).
- [2] **A. Messiah**, *mécanique quantique* (Dunod, Paris 1962).
- [3] **P. A.M. Dirac**, *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunions* **3** (1933) 1. *For a detailed discussion of the contents of this paper and other associated topics see the book: The principles of Quantum Mechanics by the same author* (Oxford Univ. Press, Oxford, 1958).
- [4] **V. Voltéra**, *Theory of Functionals and integral and integro- Differential Equations* ( Mc Graw –Hill,1965 ).
- [5] **J. H. Van Vleck**, *Proc. Nat. Acad. U.S. Sci.* **14** ( 1928 ) 178.
- [6] **C.De Witt-Morette**, *Phys. Rev.* **81** ( 1952 ) 848.
- [7] **W. Pauli**, “*Feldquantisierung*”, *lecture notes, Zürich, 1951, published as Vol.6, Pauli Lectures on Physics, Selected Topics in Field Quantization* (C.P. Enz, Ed. MIT Press, Cambridge, Mass, 1973).
- [8] **I. H. Duru and H. Kleinert**, *Phys. Lett.* **B 84** ( 1979 ) 185.
- [9] **H.Kleinert**, *Path integrals in Quantum Mechanics, Statistic, Polymer Physics, and Financial Markets.* 3<sup>rd</sup> Edition (World Scientific, Singapore, 2004).
- [10] **C.Itzykson and J.B.Zuber**, *Quantum Field Theory* ( Mc Graw- Hill, 1985 ).
- [11] **R. A Bertlmann and A. Martin**, *Nucl. Phys.* **B 168** ( 1980 ) 111-136.
- [12] **R. J. Lombard and J. Mares**, *Phys. Rev.* **C52**, (1995) 170.
- [13] **A. Meftah**, *Thèse de Magister, sciences physiques*, USTHB, ( 2003 ).
- [14] **F.-Z. Ighezou, R. J. Lombard, and J. Marš.** *Eur. Phys. J. A* **11**, ( 2001 ) 79-85.
- [15] **C.Davisson and L. Germer**, *Nature* **119** ( 1927 ) 558.
- [16] **L. S. Schulman**, *Technics and applications of Path integrals* ( Wiey, New York, 1981 ).

- [17] **P. A. Martin**, *Une initiation à l'intégrale fonctionnelle en physique quantique et statistique*, Presse Polytechnique, 1996.
- [18] **L. Chetouani, A. Chouchaoui and T.F. Hammann**, *J. Math. Phys.* **31** ( 1990 ) 838.
- [19] **R.P. Feynman and H. Kleinert**, *Phys. Rev. A*, V34, N6, ( 1986 ) 5080.
- [20] **I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik**, *Table of integrals, series and Products*. Academic press new york, san Francisco London ( 1965 ).
- [21] **A. Chouchaoui**, *Thèse de Doctorat es- sciences physiques*, USTHB, ( 1996 ).
- [22] **R. A. Bertlmann and A. Martin**, *Nucl. Phys. B* **182** (1981) 35.
- [23] **R. J. Lombard, S. Marcos and J. Mares**, *Phys. Rev. C* **50**, N°6 (1994) 2900.
- [24] **F.-Z. Ighezou and R. J. Lombard**. *Ann. Phys.* **278**, (1999) 265.
- [25] **R. Mezhoud**, *Thèse de Magister*, U.S.T.H.B, (2002).
- [26] **R. Mezhoud, F.-Z. Ighezou, A. Chouchaoui, A.-T. Kerris and R. J. Lombard**. *Ann. Phys.* **308** ( 2003 )143.
- [27] **R. P. Feynman**, *Rev. Mod. Phys.* **20** ( 1948 ) 367.
- [28] **W. Thirring**, *Lehrbuch der Mathematischen Physik, Bd. 3, Quantenmechanik von Atomen und Molekülen* ( Springer – Verlag, 1979 ).
- [29] **L. Chetouani, A. Chouchaoui and T.F. Hammann**, *Phys. Lett. A* **204** ( 1995 ) 79.
- [30] **A. Chouchaoui and A. Diaf**, *Ann. Phys.* **306** ( 2003 ) 232-240.
- [31] **D. G. Lister, J. N. Macdonald and N. L. Owen**; *Internal rotation and inversion* (Academic press, NewYork, 1978).
- [32] **C. A. Aragao de carvalho**, *Nucl. Phys B* **119** (1977) 401.
- [33] **George A. Baker. jr.** *Essentials of Padé Approximants* ( Academic Press, 1975).
- [34] **H. Kleinert**, *Phys. Lett. A* **173** ( 1993 ) 332-342.
- [35] **H. Kleinert**, *Phys. Lett. B* **280** ( 1992 ) 251.
- [36] **Sunita Srivastava and Vishwamittar**, *Chimical. Phys. Lett.* Volume 176, number 3, 4 ( 1990 ) 266.
- [37] **C.S.Lai and M.P.Madan**, *Mol. Phys.* **54** ( 1985 ) 669.
- [38] **C.S.Hsue and J.L. Chern**, *Phys.Rev. D* **29** ( 1984 ) 643.
- [39] **A. Grigahcène**, *Thèse de Magister*, USTHB, ( 1999 ).

- [40] **M. Bentaiba**, *Thèse de doctorat es- Sciences Physiques*, Université de Blida, 1997.
- [41] **S. Srivastava** and **Vishwamittar**, *Molec. Phys* **72** ( 1991 ) 1285.
- [42] **Caswell, W. E.**, *Ann. Phys.* **123** ( 1979 ) 152.
- [43] **F.T. HIOE, Don MacMILLEN** and **E.W. MONTROLL**,  
*Phys. Lett. C* **43** ( 1978 ) 305.
- [44] **J. Jaenicke** and **H. Kleinert**, *Phys. Lett. A* **176** ( 1993 ) 409.