

N° d'ordre : 31/2009-M/PH

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene (U.S.T.H.B)
Faculté de Physique



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de MAGISTER:

EN :PHYSIQUE

Spécialité :Physique Théorique des Basses et Moyennes Energies

Par : MUSTAPHA SADOUKI

THEME :

**Détermination, dans le cadre du formalisme des intégrales de
Feynman, des spectres des énergies de quelques potentiels
complexes à symétrie PT**

Soutenu le 08/07/2009, devant le jury :

M. A. CHAFA	Maitre de Conférences (USTHB)	Président
Mme A.H HAMICI	Maitre de Conférences (USTHB)	Examinatrice
M. M.R OUDIH	Maitre de Conférences (USTHB)	Examineur
M. A. CHOUCHAOUI	Professeur (USTHB)	Directeur de thèse

Remerciements

*Ce travail m'a été proposé par Monsieur **Ahmed CHOUCHAOUI**, Professeur de physique à l'**U.S.T.H.B**, et Directeur de recherches au sein du laboratoire de physique théorique. Je tiens à le remercier vivement de m'avoir constamment suivi et aidé dans la réalisation de ce travail.*

*Je remercie Monsieur **A. CHAFA**, Maitre de conférences de physique à l'**U.S.T.H.B**, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de présider mon jury de soutenance.*

*Mes remerciements vont également à Madame **A.H HAMICI** et Monsieur **M.R OUDIH**, Maitres de conférences de physique à l'**U.S.T.H.B**, pour leur dévouement et pour l'intérêt qu'ils ont bien voulu témoigner à l'égard de ce travail, en acceptant de faire partie du Jury de ma soutenance.*

*Je tiens, également, à remercier mes collègues et amis **A. Diaf** et **H. Boukabcha** pour leurs discussions fructueuses ainsi que pour leurs encouragements.*

Mes remerciements vont enfin, aux membres de ma famille qui m'ont soutenu moralement durant la préparation de ce mémoire.

Sommaire

Introduction	03
--------------------	----

Chapitre I

Définition et construction du propagateur de Feynman

1-Introduction	06
2-Principe de superposition : expérience de Young.....	07
3- Idée de Feynman.....	08
4- Intégrales de Feynman en coordonnées cartésiennes et dans l'espace des phases, par le produit de Lie-Trotter :.....	12
5- Applications :.....	14
a- La particule libre :.....	14
b-L'oscillateur harmonique :.....	15

Chapitre II

Approximation de Feynman-Kleinert appliquée aux potentiels à une, deux et trois dimensions

1- Introduction.....	17
2- La méthode variationnelle de Feynman Kleinert appliquée en physique statistique.....	17
3-Détermination du spectre des énergies d'un potentiel complexe PT symétrique et unidimensionnel, par la méthode de F-K :.....	20
4-Description des deux méthodes utilisées:.....	22
a-Méthode de Feynman-Kleinert	22
b-Méthode de Ritz	23
5- Applications.....	25
5.1- Cas d'un potentiel complexe à symétrie PT :.....	25
a- Cas unidimensionnel	25
b- Cas bidimensionnel	25
c- Cas tridimensionnel	26
5.2- Cas du potentiel de Morse	27
6-Résultats et discussion.....	28

Chapitre III

Calcul par la méthode polygonale, du spectre des énergies relatif à un lagrangien comportant un terme de friction réel ou complexe.

1- Introduction	36
2- Calcul du propagateur	36
a- Calcul de l'argument χ_N	39
b- Calcul de la constante de normalisation D_N	41
3- Détermination du spectre d'énergie	42

Chapitre IV

Corrections systématiques appliquées à un potentiel anharmonique PT-Symétrique

1-Introduction:.....	46
2- Développement perturbatif de la fonction de partition :.....	46
3-Application aux potentiels anharmoniques quartique, sextique PT- symétriques :.....	48
Calculs des cumulants:.....	48
4-Résultats et discussions:.....	54
5-Conclusion:.....	58
 Bibliographie :.....	 61

C'est à la fin du 19^{ème} siècle que la mécanique classique a montré ses limites dans l'interprétation physique de certains phénomènes de la physique subatomique tels le rayonnement du corps noir, l'effet Compton et l'effet photoélectrique. Pour relever ce défi, les physiciens ont alors fourni de généreux efforts avant d'arriver à une nouvelle théorie beaucoup plus adaptée à ce genre de problèmes. Les avancées réalisées au début du 20^{ème} siècle par Planck, De Broglie, Einstein et d'autres physiciens ont en effet, permis à Schrödinger d'élaborer un formalisme de la physique mathématique, capable d'expliquer les phénomènes naturels connus à l'époque, et se produisant à l'échelle atomique. Cette nouvelle physique appelée mécanique quantique, avait deux variantes: le formalisme différentiel de Schrödinger et la formulation matricielle de Heisenberg. Ces deux points de vue sont basés sur la connaissance de l'Hamiltonien du système physique étudié, et ne concerne que les cas non-relativistes :

C'est en s'inspirant d'un travail du célèbre physicien anglais Dirac, que le non moins célèbre théoricien, R.P Feynman, a pu élaborer une formulation lagrangienne et fonctionnelle de la mécanique quantique. Cette théorie nouvelle a l'avantage de traiter les deux cas: relativiste et non-relativiste. Elle a permis tout d'abord, de traiter des cas simples comme l'oscillateur harmonique et la particule libre ^[1,2], et a buté sur le problème de l'atome d'hydrogène. Il a fallu attendre l'année 1978 pour voir I. Duru et H. Kleinert ^[3] venir à bout de ce problème qui est resté posé durant une quarantaine d'années. Encouragés par ce résultat important, les chercheurs ont pu petit à petit étendre ce formalisme à de nombreux potentiels phénoménologiques tels les potentiels de Poshl-Teller ^[4,5], Hulthen ^[6], Rosen Morse, Scarf ^[7] et le potentiel en anneau ^[8] pour ne citer que les plus connus.

La méthode des images, l'algèbre des matrices ^[9] et la théorie des groupes ont été largement utilisées pour venir à bout de nombreux autres problèmes de la physique. En effet, c'est en faisant appel aux propriétés du groupe $SO(3)$ que le spectre des énergies relatif au potentiel de Bargman ^[10] a été calculé dans le cadre de ce formalisme. La formulation lagrangienne de la théorie de Feynman a également facilité le passage au cas relativiste ^[11-14] et à la théorie des champs ^[15-17]. De plus l'analogie formelle existant entre les intégrales de Feynman d'une part, et celle de Wiener ^[18] d'autre part, a permis d'étendre le champs d'application de ce formalisme à la physique statistique ^[19,20]. Nous pouvons en effet,

calculer à partir du propagateur de Feynman, la fonction de partition, l'énergie libre, les fonctions d'onde et le spectre des énergies du système physique considéré.

Notre équipe a pu récemment, étendre ce formalisme au problème à trois corps ^[21,22] en utilisant les transformations de Jacobi. Enfin, ce formalisme trouve une large application en géophysique et dans le domaine des sciences financières ^[49].

Notre travail s'inscrit dans le cadre de l'application de techniques basées sur les intégrales de parcours, dans la résolution des problèmes de la mécanique quantique.

Cette thèse, comporte quatre chapitres. Après un exposé succinct sur les notions fondamentales du formalisme des intégrales de chemins et ses applications, nous exposerons dans le second chapitre, la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert (MVFK). Cette dernière représente la formulation de la physique statistique en termes d'intégrales de chemin. Nous pouvons en effet, via cette technique, ramener le calcul de la fonction de partition quantique à celui d'une fonction de partition classique, et extraire le spectre des énergies d'un système quantique aux basses températures. Après les résultats encourageants obtenus à l'aide de cette méthode pour les potentiels unidimensionnels, nous nous proposons de généraliser cette technique aux cas des potentiels à deux et à trois dimensions et au potentiel de morse.

Dans le troisième chapitre, nous développerons une méthode matricielle pour déterminer le propagateur exacte relatif à un lagrangien comportant un terme de friction réel ou complexe, et calculer le spectre d'énergie correspondant. Cette technique nous conduit à une équation différentielle du deuxième ordre dont la résolution se fera via les fonctions de Green. Le propagateur sera entièrement défini par la connaissance de la phase et de la constante de normalisation.

Enfin, la dernière partie de cette thèse (quatrième chapitre) sera consacrée à l'introduction de corrections systématiques dans le calcul du potentiel effectif classique W_{eff} , relatif à un potentiel comportant des perturbations complexes 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. Nous nous proposons dans cette partie, d'étendre notre étude à un potentiel anharmonique quartique sextique PT-symétrique. Ce travail 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

1-Introduction:

Une intégrale de chemin est une intégrale fonctionnelle, c'est-à-dire que l'intégrand est une fonctionnelle et que la somme est prise sur des fonctions, et non sur des nombres réels (ou complexes) comme pour les intégrales ordinaires. Il s'agit en fait d'une intégrale de dimension infinie. Ainsi, on distinguera soigneusement l'intégrale de chemin (intégrale fonctionnelle) d'une intégrale ordinaire calculée sur un chemin de l'espace physique, que les mathématiciens appellent intégrale curviligne.

C'est Richard Feynman qui a introduit pour la première fois les intégrales de chemin en physique. Son travail entrainait dans le cadre de sa thèse, soutenue en mai 1942, portant sur la formulation lagrangienne de la mécanique quantique ^[23,24]. En effet, le jeune Feynman qui travaillait sous la direction de Wheeler à l'université de Princeton, cherchait une méthode de quantification basée sur le lagrangien pour pouvoir décrire un système ne possédant pas nécessairement d'hamiltonien. Sa motivation première était de quantifier la nouvelle formulation de l'électrodynamique classique basée sur l'action à distance qu'il venait juste de développer avec Wheeler ^[25].

Au printemps de 1941, il rencontre Herbert Jehle, alors visiteur à Princeton, qui le met au courant sur l'existence d'un article de Dirac qui discute précisément de la quantification à partir du lagrangien ^[26]. Jehle précise à Feynman que cette formulation permet une approche relativiste covariante bien plus aisée que celle basée sur le hamiltonien. Le lendemain, les deux physiciens étudient l'article de Dirac. Ils y lisent notamment la phrase suivante : pour deux instants t et $t+\varepsilon$ voisins, l'amplitude de transition élémentaire :

$$\langle q_2(t + \varepsilon) | q_1(t) \rangle \text{ est analogue à } \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q(t)]\right)$$

Dans cette formule, la grandeur $S[q(t)]$ est l'action classique :

$$S[q_2(t + \varepsilon), q_1(t)] = \int_t^{t+\varepsilon} L(q, \dot{q}) dt = L(q_1, \frac{q_2 - q_1}{\varepsilon}) \varepsilon \quad (\text{I-1})$$

Afin de comprendre ce que Dirac voulait dire par analogue, Feynman étudie le cas d'une particule non relativiste de masse m pour laquelle le lagrangien s'écrit :

$$L(q, \dot{q}) = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q) \quad (\text{I-2})$$

A partir de la relation :

$$\langle q_2 | \psi(t + \varepsilon) \rangle = \psi(q_2, t + \varepsilon) = \int_t^{t+\varepsilon} dq_1 \langle q_2(t + \varepsilon) | q_1(t) \rangle \langle q_1 | \psi(t) \rangle \quad (\text{I-3})$$

Feynman proposa une autre formulation de l'expression précédente :

$$\psi(q_2, t + \varepsilon) = A \int_t^{t+\varepsilon} dq_1 \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q]\right) \psi(q_1, t) \quad (\text{I-4})$$

En présence de Jehle, Feynman démontre que $\psi(q, t)$ est solution de l'équation de Schrödinger.:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + V(q) \right] \psi(q, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) \quad (\text{I-5})$$

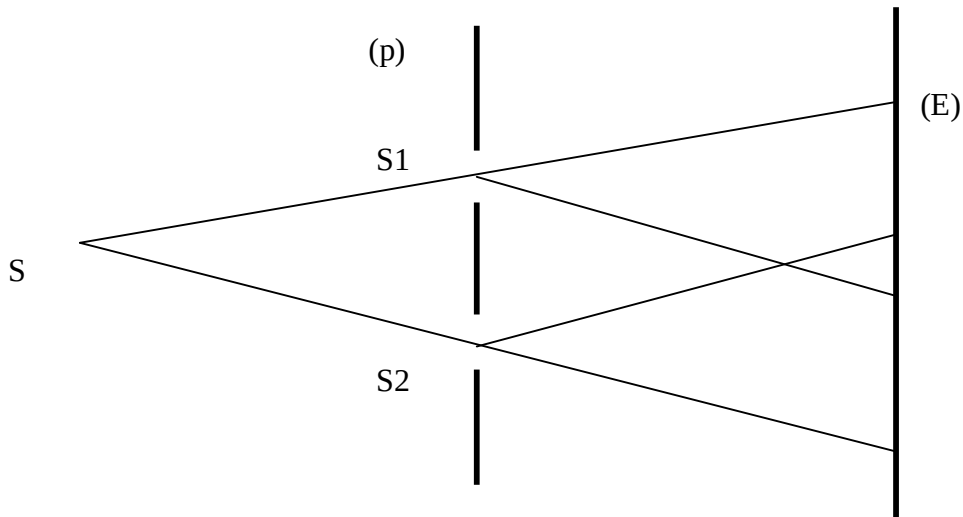
à la condition que la constante A soit égale à :

$$A = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}} \quad (\text{I-6})$$

Il est intéressant de voir, maintenant, comment Feynman a su exploiter certaines expériences réalisées en physique pour construire son formalisme. En effet, Feynman s'est inspiré principalement de l'expérience de Young, que nous nous proposons de rappeler dans ce qui suit, pour présenter une alternative aux points de vue de Schrödinger et Heisenberg.

2-Principe de superposition : expérience de Young

Entre la source lumineuse S, éclairée en lumière monochromatique, et l'écran d'observation (E) on place un écran mince (P) percé de deux fentes fines S₁ et S₂ parallèles et équidistantes de S.



On observe alors sur l'écran, une alternance de bandes verticales claires et foncées. C'est le phénomène des interférences. Il s'explique par le fait que les deux fentes se comportent comme deux sources en accord de phase, lesquelles engendrent deux nouveaux systèmes

d'ondes .Ces trains d'ondes viennent se superposer sur l'écran où, selon les endroits, leurs amplitudes s'ajoutent ou se retranchent, donnant naissance à ces bandes alternativement sombres et brillantes. La courbe représentant l'intensité de la lumière arrivant sur l'écran sera donc une succession de creux et de bosses correspondants aux franges claires et foncées. Si maintenant, on obture tour à tour la fente de gauche, puis celle de droite, on obtient deux courbes dont la somme ne reproduit absolument pas la courbe précédente. Pour passer des courbes relatives à l'ouverture d'une seule fente à la courbe globale correspondant à l'ouverture des deux, on applique la relation suivante :

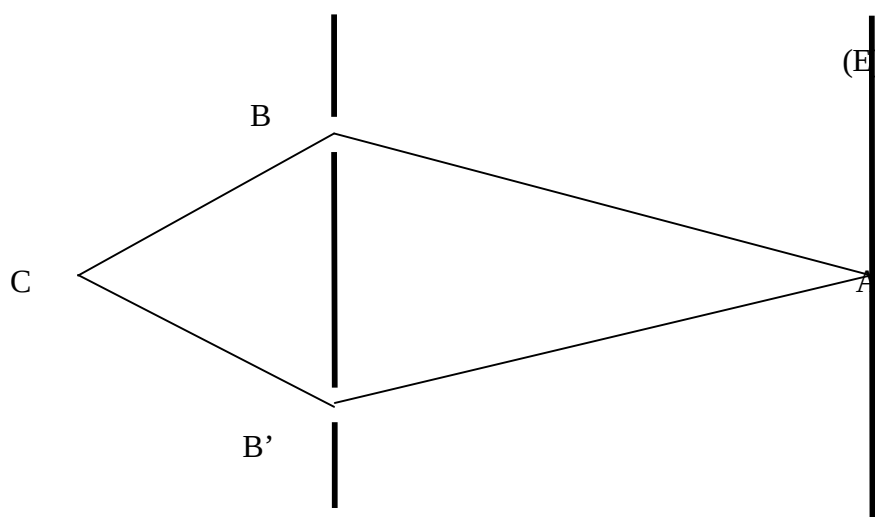
$$I_G = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 \cdot I_2} \quad (\text{I-7})$$

où I est l'intensité de l'onde monochromatique.

Pour Young, c'était le caractère ondulatoire de la lumière qui expliquait les interférences. Or les expériences réalisées au début de notre siècle, telles le rayonnement du corps noir, l'effet photoélectrique et la diffusion des rayons X par les électrons (effet Compton), ont clairement mis en évidence, la nature également corpusculaire du rayonnement. Par ailleurs, les expériences de Davisson et Germer, montrèrent qu'un faisceau d'électrons réfléchi par la surface d'un cristal de Nickel, forme des diagrammes de diffraction, tout à fait analogues à la diffraction de la lumière par un réseau. Ces résultats sont venus confirmer l'hypothèse de De Broglie sur « les ondes de matière ». Cette dualité onde-corpuscule, illustrée par les expériences décrites ci-dessus, a permis à Feynman de construire un formalisme géométrique basé sur le principe de superposition.

3- Idée de Feynman

Feynman a imaginé un dispositif expérimental identique à celui de Young, mais dans lequel la lumière monochromatique a été remplacée par un faisceau d'électrons :



Un électron en C peut atteindre le point A sur l'écran, en prenant les chemins CBA ou CB'A. Nous avons l'habitude en mécanique quantique, d'associer à une particule, une amplitude de probabilité complexe $\Psi(x, t)$ relative à sa position $x(t)$. La densité de probabilité de trouver à l'instant t, la particule à la position x est donnée par $|\Psi(x, t)|^2$. Feynman a eu pour idée d'associer une amplitude de probabilité à tout chemin suivi par la particule. Ainsi pour le chemin CBA, l'amplitude de probabilité est donnée par :

$$\Phi_{CBA} = \Phi_{CB} \cdot \Phi_{BA} \quad (I-8)$$

où Φ_{CB} et Φ_{BA} sont les amplitudes de probabilité relatives aux portions CB et BA. L'amplitude globale est donnée par $\Phi_G = \Phi_{CBA} + \Phi_{CB'A}$. La probabilité pour que l'électron puisse atteindre le point A est alors donnée par :

$$P = |\Phi_{CBA} + \Phi_{CB'A}|^2 \quad (I-9)$$

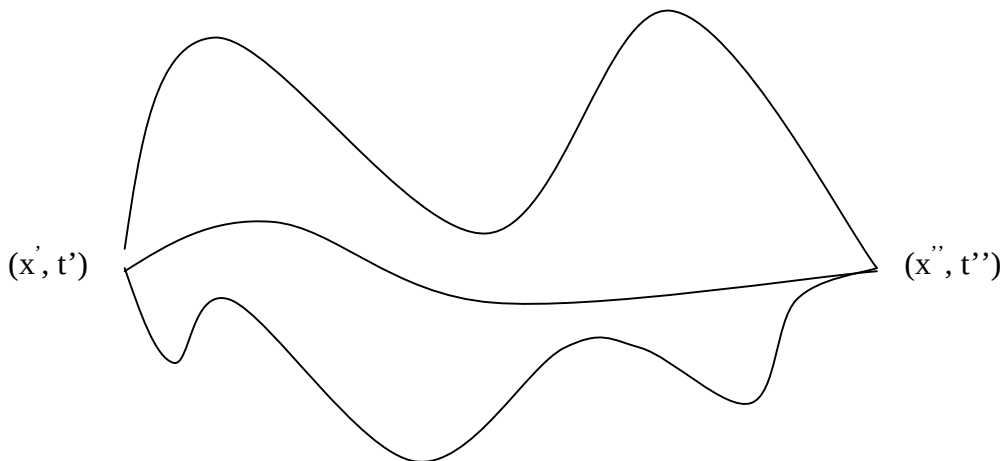
Nous constatons qu'il existe une analogie entre la relation donnant P, et celle donnant I_G (expérience de Young). D'autre part, la probabilité P n'est pas la somme directe des probabilités correspondant aux deux chemins directs, comme c'est le cas en mécanique classique,

$$P \neq P_{CBA} + P_{CB'A} \quad (I-10)$$

avec

$$P_{CBA} = |\Phi_{CBA}|^2 \quad \text{et} \quad P_{CB'A} = |\Phi_{CB'A}|^2 \quad (I-11)$$

Feynman a étendu ces résultats au cas d'une particule se déplaçant d'un point (x', t') à un autre point (x'', t'') dans l'intervalle de temps $[t', t'']$.



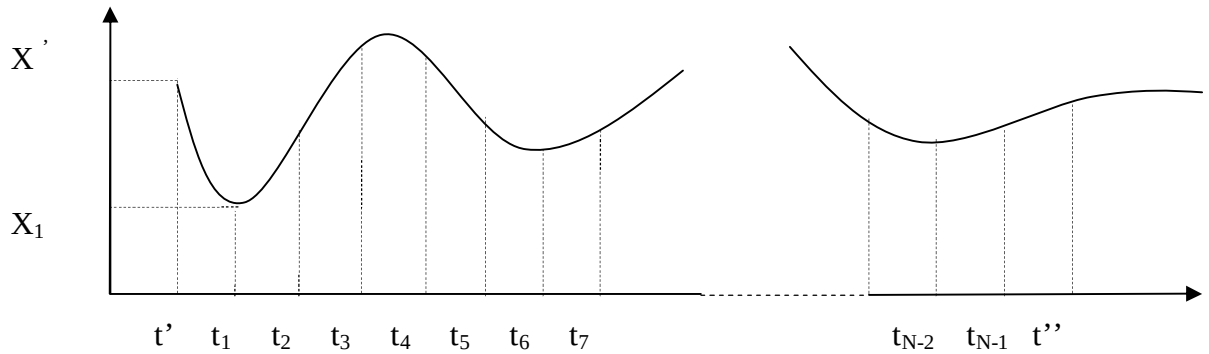
L'amplitude de probabilité totale est alors la somme de toutes les amplitudes partielles de probabilités relatives à tous les chemins possibles $x(t)$ suivis par la particule. Cette amplitude globale de probabilité, appelée généralement « Propagateur », a pour expression:

$$K(x'', t''; x', t') = \sum_{\substack{\text{sur tous les chemins} \\ \text{possibles } x(t)}} \Phi(x(t)) \quad (\text{I-12})$$

La difficulté qui surgit maintenant, est le calcul de la fonction d'onde $\Phi(x(t))$ relative au chemin $x(t)$. Pour surmonter cette difficulté, Feynman a subdivisé l'intervalle de temps $[t', t'']$ en N petits intervalles de temps, tous égaux à ε : avec $t'' - t' = N\varepsilon$.

Nous utiliserons désormais, la notation suivante :

$$X_i = x(t_i), \quad t_i = t' + i\varepsilon \quad \text{où } i = 1, \dots, N \quad ; \quad X' = x(t') \quad \text{et} \quad X'' = x(t'').$$



la fonctionnelle $\Phi(x(t))$ sera dès lors, remplacée par la fonction $\Phi(x', x_1, x_2, \dots, x_{N-1}, x'')$. En exploitant le résultat de Dirac, selon lequel le propagateur $K(x'', t''; x', t')$ tend vers le terme $\exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right)$ quand t' devient très voisin de t'' ; nous pouvons alors écrire :

$$K(x'', t' + \varepsilon; x', t') = \left[\frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{m} \right]^{-1/2} \exp \left\{ \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{m}{2\varepsilon^2} (x'' - x')^2 - V(x') \right] \right\} \quad (\text{I-13})$$

où l'exposant de l'exponentielle n'est autre que le lagrangien d'une particule de masse m , se mouvant dans un potentiel unidimensionnel $V(x)$. De plus, nous savons que l'équation intégrale.

$$\psi(x_2, t_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_2, t_2; x_1, t_1) \psi(x_1, t_1) dx_1 \quad (\text{I-14})$$

donne la fonction d'onde à l'instant t_2 , en termes de la fonction d'onde à l'instant t_1 . Si l'instant t_2 est voisin de t_1 , l'éq (I-14) devient :

$$\psi(x_2, t_1 + \varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_2, t_1 + \varepsilon; x_1, t_1) \psi(x_1, t_1) dx_1 \quad (\text{I-15})$$

La décomposition de l'intervalle de temps $[t', t'']$ en N intervalles de temps tous égaux, nous permet à partir de l'éq. (I-15) d'exprimer le propagateur global sous la forme :

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \cdots \int K(x_N, x_{N-1}; \varepsilon) \prod_{i=1}^{N-1} K(x_i, x_{i-1}; \varepsilon) dx_i \quad (\text{I-16})$$

Le remplacement de chaque propagateur $K(x_i, x_{i-1}; \varepsilon)$ par son expression conduit à :

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{-1/2}} \int \cdots \int \left[\prod_{k=1}^{N-1} \frac{dx_k}{\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{-1/2}} \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N S(x_k, x_{k-1}; \varepsilon) \right] \quad (\text{I-17})$$

$S(x_k, x_{k-1}; \varepsilon)$ étant l'action relative à l'intervalle de temps $[t_{k-1}, t_k]$. Elle est donnée par :

$$S(x_k, x_{k-1}; \varepsilon) = \frac{m}{2} \frac{(x_k - x_{k-1})^2}{\varepsilon^2} - V(x_k) \quad (\text{I-18})$$

D'une manière condensée, $K(x'', t''; x', t')$ s'écrit comme:

$$K(x'', t''; x', t') = \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x(t)) \right] \cdot \mathcal{D}(x(t)) \quad (\text{I-19})$$

$S(x(t))$ est l'action évaluée entre les deux extrémités communes à tous les chemins possibles pour la particule. Le symbole $\mathcal{D}(x(t))$ est la mesure différentielle relative à tous les chemins $x(t)$.

En résumé, la quantité physiquement importante dans la théorie de Feynman, est le Propagateur K représentant l'amplitude de probabilité pour une particule de se mouvoir d'un point espace-temps à un autre. Classiquement, il n'y a qu'un seul parcours ou une seule trajectoire suivie par la particule entre ces deux points; c'est celle qui correspond à une action minimale. En mécanique quantique par contre, tous les parcours contribuent de la même façon à l'amplitude, seule la phase varie en passant d'un chemin à un autre. Il est clair que les parcours qui contribuent le plus sont ceux qui se trouvent dans le voisinage immédiat du parcours classique.

Pour les propagateurs relatifs aux lagrangiens de formes quadratiques en $\mathbf{q}$ et $\dot{\mathbf{q}}$, l'action du système se réduit à l'action classique, et les effets quantiques sont contenus dans le déterminant de Van Vleck-Pauli-Morette.

4-Intégrales de Feynman en coordonnées cartésiennes et dans l'espace des phases, par le produit de Lie-Trotter :

En partant du fait que le propagateur de Feynman n'est autre que l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$, entre deux états $|x\rangle$ et $|x_0\rangle$ de l'espace des configurations,

$$K(x, t; x_0, t_0) = \langle x | e^{-\frac{iT}{\hbar}H} | x_0 \rangle \quad (\text{I-20})$$

où l'opérateur hamiltonien est donné dans sa forme standard par:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (\text{I-21})$$

$[t_0, t]$ est l'intervalle de temps dans lequel se produit le passage de l'état $|x_0, t_0\rangle$ à l'état $|x, t\rangle$.

Il est possible de mettre le propagateur (I-20) sous la forme d'une intégrale multiple de Riemann de dimension N , en décomposant l'opérateur d'évolution en un produit de N opérateurs infinitésimaux, via le produit de Lie-Trotter ^[27,19].

$$e^{-\frac{i}{\hbar}HT} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \exp \left[-\frac{iT}{2\hbar m N} p^2 \right] \exp \left[-\frac{iT}{\hbar N} V(x) \right] \right\}^N \quad (\text{I-22})$$

L'équation (I-20) peut être réécrite grâce à ce théorème comme :

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle x \left| \left\{ \exp \left[-\frac{iT}{2\hbar m N} p^2 \right] \exp \left[-\frac{iT}{\hbar N} V(x) \right] \right\}^N \right| x_0 \right\rangle \quad (\text{I-23}).$$

En injectant (N-1) fois la relation de fermeture $\int |x_j\rangle dx_j \langle x_j| = \mathbf{1}$ entre les N nouveaux opérateurs d'évolution, l'équation (I-23) prendra dès lors la forme suivante :

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \cdots \int \prod_{j=1}^N \exp \left[-\frac{iT}{\hbar N} V(x_j) \right] \langle x_j | \exp \left[-\frac{iT}{2\hbar m N} p^2 \right] | x_{j-1} \rangle \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \quad (\text{I-24})$$

Nous pouvons calculer aisément l'élément de matrice de l'opérateur énergie cinétique, en injectant la relation de fermeture de l'espace des impulsions :

$$\langle x_j | \exp \left[-\frac{iT}{2\hbar m N} p^2 \right] | x_{j-1} \rangle = \int \langle x_j | \exp \left[-\frac{iT}{2\hbar m N} p^2 \right] | p_j \rangle \langle p_j | x_{j-1} \rangle dp_j \quad (\text{I-25})$$

Connaissant l'expression des fonctions propres de l'opérateur P, l'équation (I-25) devient:

$$\left\langle x_j \left| \exp \left[-\frac{iT}{2\hbar mN} p^2 \right] \right| x_{j-1} \right\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[\left(\frac{T}{2mN} p_j^2 \right) - p_j (x_j - x_{j-1}) \right] \right\} dp_j \quad (\text{I-26})$$

Après intégration sur la variable p_j , il vient :

$$\left\langle x_j \left| \exp \left[-\frac{iT}{2\hbar mN} p^2 \right] \right| x_{j-1} \right\rangle = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}} \exp \left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon} (x_j - x_{j-1})^2 \right] \quad (\text{I-27})$$

où $\varepsilon = \frac{T}{N}$.

Le propagateur $K(x, t; x_0, t_0)$ aura donc comme expression :

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \dots \int \prod_{j=1}^N \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2\varepsilon} (x_j - x_{j-1})^2 - \varepsilon V(x_j) \right] \right\} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \quad (\text{I-28})$$

Nous pouvons exprimer en outre, le terme $\prod_{j=1}^N e^{\omega_j}$ comme $\exp(\sum_{j=1}^N \omega_j)$ et le propagateur (I-28) prendra alors, la forme familière ci-après:

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{\frac{N}{2}} \int \dots \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\sum_{j=1}^N \frac{m}{2\varepsilon} (x_j - x_{j-1})^2 - \varepsilon V(x_j) \right] \right\} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \quad (\text{I-29})$$

Nous retrouvons ainsi la forme lagrangienne du propagateur de Feynman.

Il s'avère parfois avantageux de travailler avec l'hamiltonien au lieu du lagrangien pour résoudre des problèmes faisant intervenir des contraintes (exemple: particule confinée dans un secteur, rotateur rigide etc.). Pour ce faire, on remplace le terme $\left\langle x_j \left| \exp \left[-\frac{i}{2\hbar m\varepsilon} p^2 \right] \right| x_{j-1} \right\rangle$ par sa formulation intégrale (I-26) il vient alors :

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^N \int \dots \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[p_j (x_j - x_{j-1}) - \varepsilon \left(\frac{p_j^2}{2m} + V(x_j) \right) \right] \right\} \prod_{j=1}^N dp_j \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \quad (\text{I-30})$$

on reconnait dans l'argument de l'exponentielle, le terme H_j :

$$H_j = \frac{p_j^2}{2m} + V(x_j) \quad (\text{I-31})$$

Nous pouvons également réécrire l'équation (1-30) sous une forme condensée, en utilisant les variables continues $x(t)$ et $p(t)$. Il vient,

$$K(x, t; x_0, t_0) = \int \dots \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t (p\dot{x} - H(x, p)) dt \right\} \mathcal{D}x(t) \mathcal{D}p(t) \quad (\text{I-32})$$

c'est l'expression du propagateur de Feynman dans l'espace des phases.

5-Applications :

Nous présentons quelques exemples sur le calcul du propagateur relatif à un système physique donné :

a- La particule libre :

Le lagrangien relatif à une particule libre est donné dans le cas unidimensionnel par :

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 \quad (\text{I-33})$$

En remplaçant L par son expression dans la relation (I-29) on aboutit à:

$$K = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{\frac{N}{2}} \int \dots \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{m}{2\varepsilon} (x_j - x_{j-1})^2 \right\} \right] \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \quad (\text{I-34})$$

en utilisant le résultat:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2 - \beta x} dx = e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (\text{I-35})$$

nous obtenons après intégrations successives:

$$K = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar T} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{m}{2i\hbar T} (x_N - x_0)^2 \right] \quad (\text{I-36})$$

b- L'oscillateur harmonique :

Le potentiel de l'oscillateur harmonique s'écrit :

$$V = \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \quad (\text{I-37})$$

Il existe plusieurs techniques de calcul du propagateur relatif à un potentiel harmonique : les intégrations successives, la méthode matricielle et la formule de Van-Vleck, Pauli et Morette ^[28]. En effet, ces trois auteurs ont montré que le calcul quantique du propagateur relatif à un lagrangien de type quadratique se ramène à un calcul classique du propagateur ^[29].

$$K(x_b, t_b | x_a, t_a) = \sqrt{\frac{1}{2i\pi\hbar} \left| \frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial x_a \partial x_b} \right|} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}} \quad (\text{I-38})$$

Dans notre cas, le propagateur prend la forme suivante :

$$K_{OH} = \left[\frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin\omega T} \right]^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m\omega}{2\sin\omega T} [(x''^2 + x'^2) \cos\omega T - 2x'x''] \right)} \quad (\text{I-39})$$

Ils existent de nombreuses autres techniques de calcul du propagateur, nous pouvons citer parmi ces dernières :

- L'intégration directe sur des gaussiennes (cas de l'oscillateur harmonique).
- Utilisation de l'algèbre des matrices pour aboutir à l'expression du propagateur.
- Dans le cas où la forme du potentiel étudié est peu maniable, nous faisons appel aux transformations espace – temps pour ramener le problème initial à une forme que l'on sait calculer.

Dès lors, de nombreux travaux ont été réalisés et ont permis à ce formalisme de se développer davantage ^[30]. Le formalisme de Feynman se prête assez bien au calcul de certaines grandeurs physiques rencontrées en physique statistique ^[31], physique des solides ^[28], cosmologie ^[32] et en électrodynamique quantique ^[27].

Chapitre II :

Approximation de Feynman-Kleinert,
appliquée aux potentiels à une, deux et
trois dimensions :

1-Introduction :

Plusieurs méthodes ont été élaborées depuis des décennies pour résoudre l'équation de Schrödinger relative à un système physique donné. Dans la plupart des cas étudiés, les techniques basées sur un calcul exact se sont avérées incapables de résoudre les problèmes où interviennent des potentiels de formes compliquées. Nous sommes souvent contraints de faire appel aux méthodes d'approximation pour arriver aux résultats escomptés. Depuis, plusieurs techniques nouvelles basées sur un calcul variationnelle ont été développées à cet effet. Nous pouvons citer parmi les plus connues, la méthode de Feynman-Kleinert (F-K) ^[31,33] et celle de Ritz ^[34].

Nous donnons au début de ce chapitre, un bref aperçu sur la méthode de F-K appliquée en physique statistique. Cette dernière nous permet de ramener le calcul de la fonction de partition quantique, à celui d'une fonction de partition classique moyennant un potentiel d'essai harmonique. Nous généraliserons, cette technique aux potentiels complexes à symétrie PT de dimensions deux et trois, et au potentiel de Morse.

2-La méthode variationnelle de Feynman-Kleinert appliquée en physique statistique :

Il existe une ressemblance formelle entre les intégrales de Feynman d'une part, et l'expression de la fonction de partition quantique d'autre part. Le calcul de cette fonction est incontournable si l'on veut connaître les propriétés thermodynamiques d'un système physique. La fonction de partition de la statistique quantique est donnée par :

$$Z = \text{tr}(e^{-\beta H}) \quad (\text{II-1})$$

H et β représentent respectivement l'hamiltonien du système et le paramètre de température $\frac{1}{k_B T}$ où k_B est la constante de Boltzmann.

La fonction de partition peut s'écrire également comme:

$$Z = e^{-\beta F} \quad (\text{II-2})$$

où F est l'énergie libre du système.

La fonction de partition de la statistique quantique peut être considérée comme une continuité analytique de la fonction de partition de la mécanique quantique :

$$Z_{mQ} = \text{tr} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}(t_b - t_a)H} \right) \quad (\text{II-3})$$

Le passage de Z_{mQ} à Z se fait via la transformation de Wick ^[35], en posant :

$$t_b - t_a = -i\hbar\beta \quad (\text{II-4})$$

Dans la base locale $\{|x\rangle\}$, la trace de l'opérateur d'évolution correspond à une intégrale sur toutes les positions x . Ainsi nous pouvons obtenir la fonction de partition de la statistique quantique en intégrant $\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle$ sur la variable x et en tenant compte de la condition $x_b = x_a = x$. Il vient:

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle \quad (\text{II-5})$$

Un calcul quantique exige la discrétisation de l'intervalle de température $[0, \beta]$ en petites intervalles de température, de largeur ε .

Posons $|x\rangle = |x_{N+1}\rangle$ et décomposant $e^{-\beta H}$ en $N+1$ facteurs $e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}H}$:

$$Z = \prod_{j=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx_j \right] \langle x_{N+1} | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}H} | x_N \rangle \langle x_N | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}H} | x_{N-1} \rangle \dots \langle x_1 | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}H} | x_{N+1} \rangle \quad (\text{II-6})$$

avec $\varepsilon = \frac{\hbar\beta}{N+1}$.

Le calcul des éléments de matrice $\langle x_j | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}H} | x_{j-1} \rangle$ donne aisément:

$$\langle x_j | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}H} | x_{j-1} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{\left\{ \frac{ip_j}{\hbar}(x_j - x_{j-1}) - \frac{\varepsilon}{\hbar}H(x_j, p_j) \right\}} \quad (\text{II-7})$$

De manière condensée, l'équation (II-6) est donnée par :

$$Z = \prod_{j=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx_j \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \right] e^{-\frac{A_e^N}{\hbar}} \quad (\text{II-8})$$

où A_e^N s'écrit comme:

$$A_e^N = \sum_{j=1}^{N+1} [-ip_j(x_j - x_{j-1}) + \varepsilon H(p_j, x_j)] \quad (\text{II-9})$$

à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$, l'équation (II-8) devient:

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{D}(x) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathfrak{D}(p)}{2\pi\hbar} e^{-\frac{A_e}{\hbar}(x, p)} \quad (\text{II-10})$$

avec

$$A_e(p, x) = \int_0^{+\infty} d\tau [-ip(x)\dot{x}(\tau) + H(p, x)] \quad (\text{II-11})$$

Nous pouvons développer autrement ces calculs en partant de l'expression de l'opérateur d'évolution euclidien :

$$U(\tau_a, \tau_b) = e^{-(\tau_a - \tau_b) \frac{H}{\hbar}} \quad (\text{II-12})$$

en utilisant l'écriture de la fonction de partition en termes de l'opérateur d'évolution euclidien $U(\tau_a, \tau_b)$, il vient:

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} (x, \hbar\beta | x, 0) dx \quad (\text{II-13})$$

avec

$$(x, \hbar\beta | x, 0) = \langle x | U(\hbar\beta, 0) | x \rangle \quad (\text{II-14})$$

et en discrétisant l'intervalle de température $[0, \hbar\beta]$ en N parties toutes égales à ε , il vient:

$$(x, \hbar\beta | x, 0) = \left[\frac{1}{2\pi\hbar\varepsilon/N} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\prod_{j=1}^N \frac{dx_j}{\sqrt{2\pi\hbar\varepsilon/N}} \right] e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon} \right)^2 + V(x_j, \tau_j) \right]} \quad (\text{II-15})$$

Dans le cas où $V(x, \tau)$ est indépendant de τ la fonction de partition de la statistique quantique se réduit à:

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} dx (x, \hbar\beta | x, 0) = \int_{x(\hbar\beta)=x(0)} \mathfrak{D}x e^{-\frac{i}{\hbar} A} \quad (\text{II-16})$$

où la mesure d'intégration est donnée par:

$$\int \mathfrak{D}x = \prod_{j=1}^{N+1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_j}{\sqrt{2\pi\hbar\varepsilon/N}} \quad (\text{II-17})$$

quant à l'action, elle s'écrit comme:

$$A = \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right] \quad (\text{II-18})$$

3- Détermination du spectre des énergies d'un potentiel complexe PT- symétrique et unidimensionnel, par la méthode de F-K :

L'étude des potentiels complexes à symétrie PT revêt un intérêt important dans certains domaines de la physique. La particularité de ce type de potentiels réside dans le fait qu'ils sont non hermétiques mais admettent des valeurs propres réelles et positives.

Dans ce qui suit, on déterminera le spectre des énergies de quelques potentiels complexes à symétrie PT dans le cadre de la méthode de Kleinert. Les énergies obtenues seront, par la suite, comparées à celles calculées par la méthode de Ritz.

Nous utiliserons également, la fonction de partition à basses températures pour calculer les énergies des états excités.

En partant d'une définition euclidienne de l'action A, et en l'écrivant comme la somme de deux termes :

$$A = A_{\Omega}^{x_0} + A_{int} \quad (\text{II-19})$$

où $A_{\Omega}^{x_0}$ représente l'action d'essai, alors que A_{int} est considérée comme une interaction.

La décomposition de la fonction de partition Z relative à l'action A sur une base formée par les fonctions d'onde $\psi_{\Omega}^{x_0}$ de l'O-H, conduit à :

$$Z_{\Omega}^{(n)}(x_0) = \int dx_a dx_b \psi_{\Omega}^{(n)*}(x_b - x_a) \left(\int_{x_a(0)=x_b(\hbar\beta)} \mathfrak{D}x \exp\left(-\frac{A}{\hbar}\right) \right) \psi_{\Omega}^{(n)}(x_b - x_a) \quad (\text{II-20})$$

Les énergies des états excités seront extraites à partir de la relation suivante:

$$\lim_{T \rightarrow 0} Z^{(n)} \approx \exp(-\beta E^{(n)}) \quad (\text{II-21})$$

Le calcul de $Z^{(n)}$ se fera via la relation (II-20), en remplaçant les fonctions d'onde $\psi_{\Omega}^{x_0}$ par leurs expressions. La généralisation de l'inégalité de Jensen-Peierls aux énergies des états excités, nous permet d'écrire en outre,

$$Z^{(n)} \geq Z_{\Omega}^{(n)} \exp\left(-\frac{\langle A_{int} \rangle_{\Omega}^{(n)}}{\hbar}\right) \quad (\text{II-22})$$

La fonction d'essai $Z_{\Omega}^{(n)}$ correspond à la fonction de partition de l'oscillateur harmonique. L'expression (II-22) donne une famille de fonctions minorant la fonction de partition $Z^{(n)}$. Nous devons choisir pour fréquence d'essai Ω , celle qui rend $Z^{(n)}$ optimale.

Le premier terme du membre droit de l'équation (II-22) représente la contribution du $n^{\text{ième}}$ état excité de l'O-H :

$$Z_{\Omega}^{(n)} = \exp[-\beta \hbar \Omega (n + 1/2)] \quad (\text{II-23})$$

alors que le second terme représente la contribution du terme interaction dans la fonction de partition. La parité du potentiel étudié, fait que l'essentiel de la contribution dans le calcul de $Z^{(n)}$ provient du terme x_0 nul. Les valeurs moyennes $\langle x^{2i} \rangle^{(n)}$ qui apparaitront dans le terme $\langle A_{int} \rangle_{\Omega}^{(n)}$, seront calculées via les fonctions d'ondes de l'O.H.^[36] :

$$\psi_{\Omega}^{(n)}(x) = \left(\frac{\Omega}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{\Omega}{2} x^2\right) H_n(\sqrt{\Omega} x) \quad (\text{II-24})$$

où les H_n sont les polynômes d'Hermite.

Les termes de degrés impairs, sont nuls. Alors que ceux de degrés pairs auront pour expression :

$$\langle x^{2j} \rangle_{\Omega}^{(n)} = \frac{\hbar^j}{(m\Omega)^j} n_{2j} \quad (\text{II-25})$$

Pour calculer les coefficients n_{2j} Kleinert ^[19,36] a proposé une méthode utilisant les opérateurs de création et d'annihilation. Nous donnerons les valeurs de ces coefficients, pour différentes valeurs de n et j , au moment de les appliquer à un cas concret.

Après calcul des deux contributions apparaissant dans l'équation (II-22), nous calculerons l'énergie $E^{(n)}$ relative au $n^{\text{ième}}$ état excité, à partir de la relation :

$$Z^{(n)} \approx \exp(-\beta E^{(n)}) \quad (\text{II-26})$$

4-Description des deux méthodes variationnelles utilisées:

a- Méthode de Feynman-Kleinert :

Soit la famille de potentiel définie par :

$$V(x) = \sum_{j=1}^N a_{2j} x^{2j} + i(a_1 x + a_3 x^3) \quad (\text{II-27})$$

où i est le nombre complexe imaginaire pur.

L'action A du système à étudier est donnée par :

$$A[x] = \int_0^\beta d\tau \left(\frac{M}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right) \quad (\text{II-28})$$

En ajoutant et retranchant la même quantité $\frac{M}{2} \Omega^2 (x - x_0)^2$ dans (II-28), l'action $A[x]$ devient^[37] :

$$A[x] = A_\Omega^{x_0} + A_{int}^{x_0} \quad (\text{II-29})$$

avec :

$$A_\Omega^{x_0} = \int_0^\beta d\tau \left(\frac{M}{2} \dot{x}^2 + \frac{M}{2} \Omega^2 (x - x_0)^2 \right) \quad (\text{II-30})$$

Cette action est celle de l'OH d'essai ; alors que la partie :

$$A_{int}^{x_0} = \int_0^\beta d\tau \left(-\frac{M}{2} \Omega^2 (x - x_0)^2 + V(x) \right) \quad (\text{II-31})$$

sera considérée comme une interaction.

Enfin l'énergie du n -ième état excité sera donnée par :

$$E^{(n)} = \langle n | A[x] | n \rangle = \langle n | A_\Omega^{x_0} | n \rangle + \langle n | A_{int}^{x_0} | n \rangle \quad (\text{II-32})$$

Pour calculer ces valeurs moyennes, nous choisissons comme fonction d'essai les fonctions d'ondes de l'OH. Le premier terme correspondant à x_0 nul s'écrira alors,

$$\langle n | A_\Omega^{x_0} | n \rangle = \Omega n_2 \quad (\text{II-33})$$

Le second membre de l'équation (II-27) fait intervenir les valeurs moyennes $\langle x^{2j} \rangle_\Omega^{x_0}$ qui sont données par :

$$\langle x^{2j} \rangle_\Omega^{x_0} = \frac{n_{2j}}{\Omega^j} \quad (\text{II-34})$$

dont les n_{2j} s'écrivent comme:

$$\begin{aligned} j=1 & \quad n_2 = n + 1/2, \\ j=2 & \quad n_4 = 3/2(n^2 + n + 1/2) \\ j=3 & \quad n_6 = 5/4(2n^3 + 3n^2 + 4n + 3/2) \\ & \vdots \end{aligned}$$

Pour les termes impairs :

$$\langle x^{2j+1} \rangle_{\Omega}^{x_0} = 0 \quad (\text{II-35})$$

L'énergie $E^{(n)}$ prendra alors, la forme simplifiée :

$$E^{(n)} = \left(\frac{\Omega_{op}}{2} + \frac{a_2}{\Omega_{op}} \right) + \sum_{j=2}^N a_{2j} \langle x^{2j} \rangle_{\Omega}^{x_0} \quad (\text{II-36})$$

La meilleure valeur de $E^{(n)}$ sera obtenue par optimisation via la condition

$$\frac{\partial E^{(n)}}{\partial \Omega_{op}} = 0 \quad (\text{II-37})$$

La valeur Ω_{op} obtenue, nous donne la meilleure approximation pour $E^{(n)}$.

b- Méthode de Ritz :

Considérons un système physique décrit par un hamiltonien H . Soient $|\varphi_m\rangle$ les kets propres de H relatifs aux valeurs propres E_m :

$$H|\varphi_m\rangle = E_m|\varphi_m\rangle \quad (\text{II-38})$$

Si le système est dans l'état $|\psi\rangle$ tel que :

$$|\psi\rangle = \sum_m a_m |\varphi_m\rangle \quad (\text{II-39})$$

où

$$\sum_m |a_m|^2 = 1 \quad (\text{II-40})$$

Nous pouvons alors écrire,

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_m |a_m|^2 E_m \quad (\text{II-41})$$

Après introduction de la relation de fermeture de l'espace de configuration, nous aboutissons à :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)^* H \psi(x) dx = \sum_m |a_m|^2 E_m \quad (\text{II-42})$$

Pour l'énergie E_n , l'équation ci-dessus devient :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)^* H \psi(x) dx \geq \sum_m |a_m|^2 E_n \quad (\text{II-43})$$

où encore :

$$\int \psi(x)^* H \psi(x) dx \geq E_n \quad (\text{II-44})$$

Le membre gauche de l'équation (II-44) constitue une bonne borne supérieure pour E_n . Pour calculer la borne supérieure qui approche le mieux E_n , nous choisissons comme fonction $\psi(x)$, une fonction d'essai en compatibilité avec le potentiel $V(x)$ décrivant le système étudié. Soit $\psi(x, \alpha, \beta)$ cette fonction d'essai. Le membre gauche de l'équation (II-44) devient :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, \alpha, \beta) H \psi(x, \alpha, \beta) dx = I(\alpha, \beta) \quad (\text{II-45})$$

et l'équation (II-44) prendra la forme suivante :

$$I(\alpha, \beta) \geq E_n \quad (\text{II-46})$$

La meilleure borne supérieure pour E_n est celle qui rend $I(\alpha, \beta)$ minimale :

$$\frac{\partial I}{\partial \alpha} = \frac{\partial I}{\partial \beta} = 0 \quad (\text{II-47})$$

Pour :

$$\begin{cases} \alpha = \alpha_{opt} \\ \beta = \beta_{opt} \end{cases} \quad (\text{II-48})$$

nous pouvons écrire :

$$E_n \approx I(\alpha_{opt}, \beta_{opt}) \quad (\text{II-49})$$

5-Applications :

5.1 Cas de potentiels complexes à symétrie PT :

a) Cas unidimensionnel :

Nous avons pris comme exemple d'application, un potentiel complexe PT symétrique de la forme:

$$V(x) = a_2 x^2 + a_4 x^4 + i(a_1 x + a_3 x^3) \quad (\text{II-50})$$

Dans ce cas, l'expression de l'énergie totale s'écrira :

$$E^{(n)} = \left(\frac{\Omega_x}{2} + \frac{a_2}{\Omega_x} \right) n_2 + a_4 \frac{n_4}{\Omega_x^2} \quad (\text{II-51})$$

L'optimisation de $E^{(n)}$ par rapport à Ω_x conduit à la résolution de l'équation:

$$\frac{\partial E^{(n)}}{\partial \Omega_x} = 0 \quad (\text{II-52})$$

La valeur optimale de la pulsation Ω_x servira au calcul de la meilleure approximation pour l'énergie $E^{(n)}$.

b) Cas bidimensionnel :

La technique développée précédemment peut être étendue au cas bidimensionnel. Nous allons le montrer en considérant les deux familles de potentiels suivantes:

$$V(x, y) = a_2 x^2 + b_2 y^2 + i(cx^2 y + dy^2 x) \quad (\text{II-53})$$

$$V(x, y) = a_2 x^2 + b_2 y^2 + cx^2 y^2 + id x^2 y \quad (\text{II-54})$$

où a_2, b_2, c et d sont des constantes, et i le nombre complexe imaginaire pur.

Les termes non-couplés du potentiel (II-53) et (II-54) sont faciles à traiter. La seule difficulté peut provenir des termes couplés c et d . Nous avons, pour surmonter cet handicap, utilisé un traitement perturbatif dont la validité exige que les termes c et d soient petits devant les autres termes. Ainsi la valeur moyenne des termes couplés, peut être facilement calculée via l'approche stipulant qu'un ensemble de corps en interaction et effectuant un mouvement de vibration de faible amplitude autour d'une position d'équilibre, peut être décrit par une somme d'oscillateurs indépendants^[38,39]. Il en découle :

$$\langle n_x n_y | x^2 y^2 | n_x n_y \rangle \approx \langle n_x | x^2 | n_x \rangle \langle n_y | y^2 | n_y \rangle \quad (\text{II-55})$$

où les valeurs moyennes concernant x^2 et y^2 ont été calculées précédemment. En rassemblant tous les termes entrant dans l'expression de l'énergie totale, il vient :

$$E^{(n)} = \left(\frac{\Omega_x}{2} + \frac{a_2}{\Omega_x}\right)n_{2x} + \left(\frac{\Omega_y}{2} + \frac{b_2}{\Omega_y}\right)n_{2y} + c \frac{n_{2x}n_{2y}}{\Omega_x\Omega_y} \quad (\text{II-56})$$

L'optimisation de $E^{(n)}$ par rapport à Ω_x et Ω_y conduit à la résolution du système d'équations suivant:

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{2} - \frac{a_2}{\Omega_x^2}\right)n_{2x} - c \frac{n_{2x}n_{2y}}{\Omega_x^2\Omega_y} = 0 \\ \left(\frac{1}{2} - \frac{b_2}{\Omega_y^2}\right)n_{2y} - c \frac{n_{2x}n_{2y}}{\Omega_x\Omega_y^2} = 0 \end{cases} \quad (\text{II-57})$$

Parmi les solutions mathématiques trouvées nous choisissons celles qui rendent l'énergie du $n^{\text{-ième}}$ état excité minimale et qui correspondent à une fonction d'onde de carré sommable.

c) Cas tridimensionnel :

Nous pouvons aisément étendre les calculs précédents à un système décrit par un potentiel dépendant de trois variables. Pour cela, considérons le potentiel :

$$V(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2 + i\lambda xyz \quad (\text{II-58})$$

Nous allons, dans le but de simplifier l'étude, utiliser l'approximation introduite précédemment. Le terme correspondant au coefficient λ sera alors approximé par :

$$\langle n_x n_y n_z | x y z | n_x n_y n_z \rangle \approx \langle n_x | x | n_x \rangle \langle n_y | y | n_y \rangle \langle n_z | z | n_z \rangle \quad (\text{II-59})$$

L'expression finale de l'énergie totale $E^{(n)}$ s'écrira comme:

$$E^{(n)} = \left(\frac{\Omega_x}{2} + \frac{1}{\Omega_x}\right)n_{2x} + \left(\frac{\Omega_y}{2} + \frac{1}{\Omega_y}\right)n_{2y} + \left(\frac{\Omega_z}{2} + \frac{1}{\Omega_z}\right)n_{2z} \quad (\text{II-60})$$

L'optimisation de $E^{(n)}$ par rapport aux variables Ω_x , Ω_y et Ω_z conduit au système :

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\Omega_x^2}\right)n_{2x} = 0 \\ \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\Omega_y^2}\right)n_{2y} = 0 \\ \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\Omega_z^2}\right)n_{2z} = 0 \end{cases} \quad (\text{II-61})$$

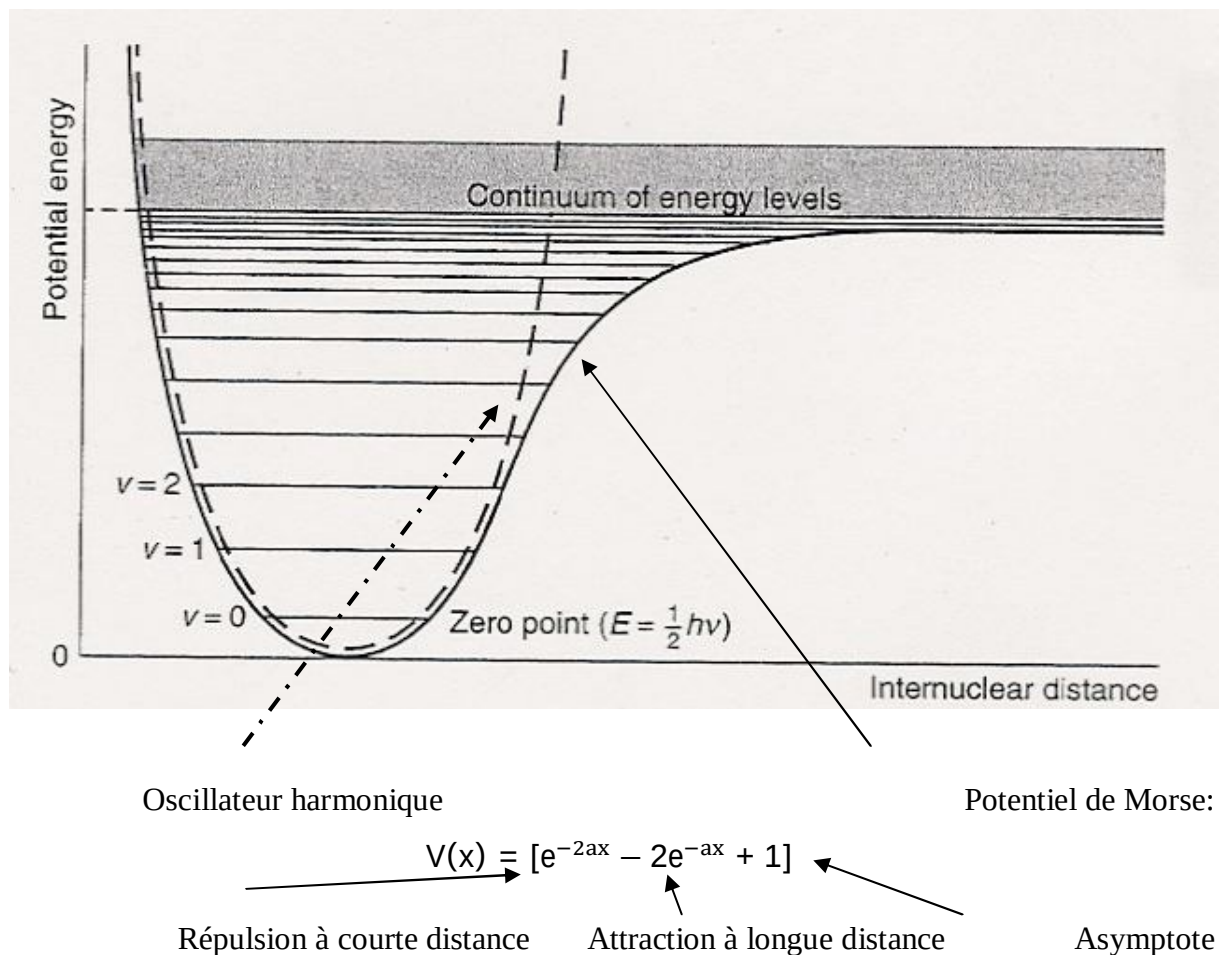
La résolution numérique de ce système nous permet d'obtenir les valeurs optimales des trois composantes de la pulsation. Ces dernières serviront à calculer l'énergie approchée pour tous les états excités.

5.2 Cas du potentiel réel : exemple du potentiel de Morse.

L'énergie potentielle d'interaction entre les atomes d'une molécule diatomique est décrite par le potentiel de Morse. En pratique, les vibrations moléculaires sont plus ou moins anharmoniques et la courbe d'énergie potentielle suit approximativement le potentiel de Morse qui est une expression purement empirique :

$$V(x) = (1 - \exp(-ax))^2 \quad (\text{II-62})$$

où a est une constante positive.



Nous nous proposons de calculer, dans le cadre de formalisme de F-K, le spectre des énergies de ce potentiel pour le cas unidimensionnel.

Les énergies des états excités seront déterminées, dans cette partie, via l'action euclidienne du système, calculée à basse température. Cette dernière sera également considérée comme la somme de deux termes : un premier terme relatif à un oscillateur harmonique d'essai, et un second supposé comme interaction.

Le développement en série du potentiel de Morse au voisinage de $x=0$ s'écrit comme suit :

$$V(x) = \sum_{i=1}^N C_i a^i x^i \quad (\text{III-63})$$

Nous avons remarqué que nos résultats convergent lorsque nous nous contentons des cinq premiers termes de la série donnant le développement du potentiel de Morse. Ce dernier prendra alors la forme suivante :

$$V(x) = a^2 x^2 - a^3 x^3 + \frac{7}{12} a^4 x^4 - \frac{1}{4} a^5 x^5 + \frac{31}{360} a^6 x^6 + O(x^7) \quad (\text{II-64})$$

6- Résultats et discussion :

Nous avons calculé par notre technique, et pour différentes valeurs des paramètres des potentiels étudiés, les énergies propres pour deux familles différentes de potentiels: Le potentiel complexe à symétrie PT et le potentiel de Morse. Nos résultats sont consignés avec ceux obtenus par la méthode de Ritz, dans les tableaux ci après:

a_2	a_4	a_1	a_3	E_{FK}	E_{RITZ}	$\rho(\%)$
0.5	3	0.03	-0.792	1.075929142	1.075929142	0
10	-5	0.3	-12	2.070429418	2.070429417	$4,829.10^{-8}$
100	25.3	0.1	-12.5	7.163524606	7.163524609	$4,188.10^{-8}$
1500	175	13	10.2	27.34223719	27.34223718	$3,657.10^{-8}$

Tableau 01: énergie du fondamental ($n=0$) relative au potentiel donné par l'équation (II-50)

a_2	a_4	a_1	a_3	E_{FK}	E_{RITZ}	$\rho(\%)$
-13	29.5	0.10	-2.5	4.232439803	4.232439801	$4,725.10^{-8}$
55.5	-33	-12.5	0.25	16.33865394	16.33865394	0
250	35	5.	1.5	33.79953447	33.79953446	$2,958.10^{-8}$
3.5	130	30.5	-12.5	12.75455600	12.75455599	$7,840.10^{-8}$

Tableau 02: énergie du premier état excité (n=1) relative au potentiel donné
par l'équation (II-50)

a_2	a_4	a_1	a_3	E_{FK}	E_{RITZ}	$\rho(\%)$
10	-0.2	1.5	-.1	11.08107717	11.08107717	0
-65	93	.5	-2	3.81437427	3.814374290	$5,243.10^{-7}$
115	10.	10	-.3	38.32921153	38.32921153	0
225	320	25	-1	58.73164768	58.73164762	$1,021.10^{-7}$

Tableau 03: énergie du deuxième état excité (n=2) relative au potentiel donné
par l'équation (II-50)

a_2	a_4	a_1	a_3	E_{FK}	E_{RITZ}	$\rho(\%)$
37	-5.5	1.25	-0.23	28.55345608	28.55345614	$2,101.10^{-7}$
-20.	93	5.5	-2.5	27.22311028	27.22311035	$2,571.10^{-7}$
55	4.5	3.	-0.1	37.44571751	37.44571759	$2,136.10^{-7}$
7.5	365	6.5	-0.2	53.42052562	53.42052567	$9,359.10^{-8}$

Tableau 04: énergie du troisième état excité (n=3) relative au potentiel donné
par l'équation (II-50)

$n_x \backslash n_y$	0	1	2	3
0	$E_{FK} = 8.956998933$ $E_{RITZ} = 8.956998935$	14.78795082 14.78795083	20.61890272 20.61890271	26.44985461 26.44985462
1	$E_{FK} = 21.04004490$ $E_{RITZ} = 21.04004490$	26.87099680 26.87099680	32.70194870 32.70194869	38.53290059 38.53290058
2	$E_{FK} = 33.12309088$ $E_{RITZ} = 33.12309088$	38.95404277 38.95404276	44.78499467 44.78499468	50.61594656 50.61594656
3	$E_{FK} = 45.20613686$ $E_{RITZ} = 45.20613680$	51.03708875 51.03708878	56.86804065 56.86804075	62.69899254 62.69899235

Tableau 05: E_{n_x, n_y} énergie relative au potentiel donné par (II-53)

avec: $a_2=17.$, $b_2=73.$, $c=0.3$, $d=0.5$

$n_x \backslash n_y$	0	1	2	3
0	$E_{FK} = 12.98653885$ $E_{RITZ} = 12.98670856$	30.59301626 30.59352542	48.19949364 48.20034226	65.80597098 65.80715906
1	$E_{FK} = 21.35279968$ $E_{RITZ} = 21.35330883$	38.95859816 38.96012566	56.56439656 56.56694249	74.17019488 74.17375937
2	$E_{FK} = 29.71906048$ $E_{RITZ} = 29.71990908$	47.32418002 47.32672595	64.92929940 64.93354293	82.53441866 82.54035963
3	$E_{FK} = 38.08532127$ $E_{RITZ} = 38.08650932$	55.68976182 55.69332617	73.29420219 73.30014299	90.89864236 90.90695995

Tableau 06: E_{n_x, n_y} énergie relative au potentiel donné par (II-53)

avec: $a_2=155.$, $b_2=35.$, $c=-0.1$, $d=0.3$

$\begin{matrix} n_x \\ n_y \end{matrix}$	0	1	2	3
0	$E_{FK} = 5.772392225$ $E_{RITZ} = 5.772392224$	10.24610833 10.24610833	14.71982373 14.71982372	19.19353844 19.19353841
1	$E_{FK} = 12.84503988$ $E_{RITZ} = 12.84503988$	17.32191463 17.32191463	21.79878725 21.79878724	26.27565777 26.27565777
2	$E_{FK} = 19.91768643$ $E_{RITZ} = 19.91768641$	24.39771758 24.39771756	28.87774523 28.87774522	33.35776934 33.35776927
3	$E_{FK} = 26.99033185$ $E_{RITZ} = 26.99033183$	31.47351721 31.47351718	35.95669763 35.95669765	40.43987315 40.43987295

Tableau 07: E_{n_x, n_y} énergie relative au potentiel donné par (II-54)

avec: $a_2=10.$, $b_2=25.$, $c=0.1$, $d=0.5$

$\begin{matrix} n_x \\ n_y \end{matrix}$	0	1	2	3
0	$E_{FK} = 7.790278556$ $E_{RITZ} = 7.790278554$	18.27180347 18.27180347	28.75331138 28.75331136	39.23480214 39.23480211
1	$E_{FK} = 12.88274103$ $E_{RITZ} = 12.88274103$	23.35112642 23.35112641	33.81946060 33.81946060	44.28774323 44.28774319
2	$E_{FK} = 17.97519527$ $E_{RITZ} = 17.97519526$	28.43042451 28.43042451	38.88556823 38.88556826	49.34062577 49.34062578
3	$E_{FK} = 23.06764124$ $E_{RITZ} = 23.06764122$	33.50969768 33.50969772	43.95163406 43.95163410	54.39344952 54.39344979

Tableau 08: E_{n_x, n_y} énergie relative au potentiel donné par (II-54)

avec: $a_2=55.$, $b_2=13.$, $c=-0.7$, $d=0.5$

n_x	n_y	n_z	E_{RITZ}	E_{FK}
0	0	0	2.121320345	2.121320345
1	0	0	3.535533906	3.535533907
2	1	0	6.363961031	6.363961031
3	1	1	9.192388157	9.192388157
0	2	1	6.363961031	6.363961031
1	2	1	7.778174594	7.778174594
2	3	2	12.02081528	12.02081528
3	3	2	13.43502884	13.43502884
0	0	2	4.949747468	4.949747469
1	0	3	7.778174594	7.778174595
2	1	3	10.60660172	10.60660172
3	1	3	12.02081528	12.02081528
0	2	0	4.949747469	4.949747469
1	2	0	6.363961031	6.363961031
2	3	0	9.192388156	9.192388157
3	3	1	12.02081528	12.02081528
0	0	1	3.535533907	3.535533907
1	0	1	4.949747469	4.949747469
2	1	2	9.192388156	9.192388156
3	1	2	10.60660172	10.60660172
0	2	2	7.778174593	7.778174593
1	2	3	10.60660172	10.60660172
2	3	3	13.43502884	13.43502884
3	3	3	14.84924240	14.84924240

Tableau 09: E_{n_x, n_y, n_z} énergie relative au potentiel donné par (II-58)

a	E_{FK}	E_{RITZ}
0.001	0.0007073254214	0.0007073261734
0.02	0.01422877456	0.01422901983
0.35	0.2707915506	0.2716965543
1	0.8683374863	0.8818239042

Table 10: énergie de l'état fondamental ($n=0$) relative au potentiel de Morse.

a	E_{FK}	E_{RITZ}
0.002	0.004247009627	0.004247010284
0.04	0.08655698412	0.08655899577
0.50	1.277215179	1.280446371
0.98	2.807234790	2.827481053

Table 11: énergie du premier état excité ($n=1$) relative au potentiel de Morse.

a	E_{FK}	E_{RITZ}
0.003	0.01063211027	0.01063210926
0.07	0.2604875238	0.2605026472
0.60	2.833436308	2.844131458
0.95	4.952459099	4.990699122

Table 12: énergie du deuxième état excité ($n=2$) relative au potentiel de morse.

a	E_{FK}	E_{RITZ}
0.005	0.02488440931	0.02488441558
0.01	0.05003611454	0.05003615691
0.3	1.854278356	1.857120385
1	7.995798211	8.081759557

Table 13: énergie du troisième état excité ($n=3$) relative au potentiel de morse.

Nous avons constaté que pour le potentiel complexe à symétrie PT et dans les trois cas (Tab.1...9), les résultats obtenus par notre méthode, sont comparables à ceux obtenus par la méthode de Ritz. Nos résultats sont satisfaisants et l'erreur relative ne dépasse guère 0.00001%.

Pour le potentiel de Morse, les valeurs des énergies calculées par notre méthode (Tab.10...13) sont en accord avec celles obtenues via la méthode de Ritz, nos résultats s'écartent sensiblement des résultats exacts sans que l'erreur ne dépasse 0.1 %.

Vu la qualité des résultats obtenus, nous pouvons avancer que méthode de Feynman-Kleinert constitue une sérieuse alternative aux autres méthodes de calcul des spectres d'énergie.

Chapitre III :

Calcul par la méthode polygonale, du spectre des énergies relatif à un lagrangien comportant un terme de friction réel ou complexe.

1-Introduction :

L'évolution d'un système dynamique est décrite par un lagrangien, qui est une fonction des variables dynamiques : position, vitesse et accélération. La connaissance de ce dernier, nous permet d'avoir une somme d'informations sur toutes les grandeurs physiques du système étudié. Les problèmes qui font intervenir des lagrangiens quadratiques en coordonnée et en vitesse sont considérés comme les plus abordables ^[7,11] du point de vue étude. Ils constituent, généralement, une première approximation aux lagrangiens de formes compliquées.

Nous nous proposons dans ce chapitre, de déterminer, via la méthode polygonale, le spectre des énergies d'un système physique soumis à un potentiel complexe à symétrie PT, à partir de l'étude d'un oscillateur harmonique forcé.

Dans notre cas, le lagrangien a pour forme :

$$L = \frac{1}{2} \{m\dot{x}^2 - m\omega^2 x^2\} + \lambda x \quad (\text{III-1})$$

où m représente une masse, et λ est une constante.

Ce lagrangien correspond au mouvement d'un oscillateur de fréquence ω , soumis à une force λx .

Notons que les propagateurs relatifs aux lagrangiens de formes quadratiques, peuvent être, également, calculés via la formule de Van-Vleck-Pauli-Morett :

$$K(x_b, t_b | x_a, t_a) = \sqrt{\frac{1}{2i\pi\hbar} \left| \frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial x_a \partial x_b} \right|} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}} \quad (\text{III-2})$$

S_{cl} étant l'action classique.

2- Calcul du propagateur :

Dans sa forme implicite le propagateur a pour expression:

$$K(x'', t''; x', t') = \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x(t)) \right] \mathcal{D}(x(t)) \quad (\text{III-3})$$

où l'action $S(x(t))$ du système est donnée par:

$$S(x(t)) = \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t) dt \quad (\text{III-4})$$

En décomposant l'intervalle de temps $[t_a, t_b]$ en N petits intervalles de largeur ε le propagateur K devient :

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} K_N(x_N, t_N; x', t') \quad (\text{III-5})$$

K_N étant le propagateur partiel défini par:

$$K_N = A_N \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{k=1}^{N-1} dx_k e^{\frac{i}{\hbar} S_N} \quad (\text{III-6})$$

la constante de normalisation A_N est donnée par:

$$A_N = \left[\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{N/2} \quad (\text{III-7})$$

D'autre part, l'action discrétisée S_N s'écrit comme:

$$S_N = \frac{1}{2\varepsilon} (\sum_{k=1}^N \{m(x_k - x_{k-1})^2 - \varepsilon^2 m \omega^2 x_k^2 + 2\varepsilon^2 \lambda x_k\}) \quad (\text{III-8})$$

Après réarrangement des termes de l'action, cette dernière devient:

$$\frac{i}{\hbar} S_N = \frac{i}{2\hbar\varepsilon} [\{m x_0^2 + m(1 - \omega^2 \varepsilon^2) x_N^2 + 2\varepsilon^2 \lambda x_N\} + X^t P X - 2X^t Y] \quad (\text{III-9})$$

où P est une matrice carrée tridiagonale de dimension (N-1) et d'éléments :

$$\begin{cases} P_{k,k} &= 2m - b\varepsilon^2 \\ P_{k+1,k} &= -m \\ P_{j,k} &= 0 \end{cases} \quad \text{avec } \begin{cases} P_{k,k+1} = P_{k+1,k} \\ \text{si } j \neq k \text{ et } j \neq k \pm 1 \end{cases} \quad (\text{III-10})$$

X et Y représentent deux vecteurs de dimension (N-1).

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N-1} \end{pmatrix} \quad (\text{III-11})$$

avec

$$\begin{aligned} y_1 &= -\lambda \varepsilon^2 + m x_0 \\ &\vdots \\ y_k &= -\lambda \varepsilon^2 \quad \text{pour} \quad 2 \leq k \leq N-2 \\ &\vdots \\ y_{N-1} &= -\lambda \varepsilon^2 + m x_N \end{aligned} \quad (\text{III-12})$$

Le propagateur ainsi obtenu, peut être mis sous la forme suivante :

$$K = \lim_{N \rightarrow \infty} A_N \int \cdots \int \prod_{k=1}^N dx_k \exp \left(\frac{i}{2\hbar\varepsilon} [\{m x_0^2 + m(1 - \omega^2 \varepsilon^2) x_N^2 + 2\varepsilon^2 \lambda x_N\} + X^t P X - 2X^t Y] \right) \quad (\text{III-13})$$

L'intégrale multiple ci-dessus, sera calculée moyennant la relation de Montroll^[40] :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{k=1}^N dx_k e^{i\alpha [X^t P X - 2X^t Y]} = \left(\frac{i\pi}{\alpha} \right)^{\frac{N-1}{2}} (\det P)^{-\frac{1}{2}} e^{-i\alpha y^t P^{-1} y} \quad (\text{III-14})$$

où

$$\alpha = \frac{i}{2\hbar\varepsilon} \quad (\text{III-15})$$

L'expression du propagateur se réduira donc à la forme générale :

$$K_N = \frac{D_N}{\sqrt{i\pi}} e^{(i\chi_N)} \quad (\text{III-16})$$

La nouvelle constante de normalisation s'écrit en fonction du déterminant de la matrice P , et a pour forme:

$$D_N = \left[m^N \left(\frac{\alpha}{\det P} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III-17})$$

Alors que l'argument χ_N devient après intégration :

$$\chi_N = \frac{i}{2\hbar\varepsilon} [\{mx_0^2 + m(1 - \omega^2\varepsilon^2)x_N^2 + 2\varepsilon^2\lambda x_N\} - y^t P^{-1}y] \quad (\text{III-18})$$

Notre propagateur sera entièrement défini après calcul de l'argument et de la constante de normalisation.

a-Calcul de l'argument χ :

L'introduction d'un nouveau vecteur^[7] U tel que :

$$PU = Y \quad (\text{III-19})$$

nous facilitera énormément le calcul de l'argument χ et de la constante D_N apparaissant dans l'expression de K_N . En écrivant l'équation ci-dessus au k ème ordre, il vient:

$$-mu_{k-1} + (2m - b\varepsilon^2)u_k - mu_{k+1} = -\lambda\varepsilon^2 \quad (\text{III-20})$$

En tenant compte du fait que:

$$u(t_0) \equiv u_0 = x_0 \quad \text{et} \quad u_N = x_N$$

et en passant à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ l'équation (III-20) devient :

$$m \frac{d}{dt} [\dot{u}(t)] + m\omega^2 u(t) = \lambda \quad (\text{III-21})$$

Nous obtenons ainsi une équation différentielle non homogène du premier ordre, cette équation n'est autre que l'équation du mouvement classique.

En tenant compte de ces changements, l'équation (III-18) devient:

$$\chi_N = \frac{i}{2\hbar\varepsilon} [\{mx_0^2 + m(1 - \omega^2\varepsilon^2)x_N^2 + 2\varepsilon^2\lambda x_N\} - \sum_{k=1}^{N-1} y_k u_k] \quad (\text{III-22})$$

A la limite continue ($\varepsilon \rightarrow 0$) le terme χ_N aura pour forme:

$$\chi = \frac{i}{2\hbar} \left\{ mx''\dot{u}'' - mx'\dot{u}' + \lambda \int_{t'}^{t''} u(t) dt \right\} \quad (\text{III-23})$$

Pour définir entièrement χ il faut déterminer exactement la fonction $u(t)$ solution de l'équation (III-21). Cette équation sera résolue en faisant appel aux fonctions de Green.

La résolution d'une équation différentielle d'ordre N via ces fonctions a été traitée par P. Ince ^[41]; l'avantage de cette méthode réside dans le fait que l'étude se réduit à la résolution de systèmes d'équations ordinaires. Cette résolution se fait en deux étapes:

1/ Se fixer des conditions aux limites.

2/ Ecrire la fonction de Green $G(t,s)$, comme une combinaison linéaire des solutions de l'équation homogène.

Faisons le changement suivant :

$$v(t) = \sqrt{m} \cdot u(t) \quad (\text{III-24})$$

L'équation (III-21) devient :

$$\ddot{v} + \omega^2 v(t) = \frac{\lambda}{\sqrt{m}} \quad (\text{III-25})$$

Soient $v_1(t)$ et $v_2(t)$ deux solutions de l'équation homogène :

$$\ddot{v} + \omega^2 v(t) = 0 \quad (\text{III-26})$$

cherrchons des solutions vérifiant les deux conditions:

$$v'_1 = 0 \quad \text{et} \quad v''_2 = 0$$

Ces deux solutions sont de la forme:

$$v_1(t) = A \sin \omega(t - t') \quad \text{et} \quad v_2(t) = B \sin \omega(t'' - t) \quad (\text{III-27})$$

en posant:

$$T = t'' - t'$$

L'équation (III-21) aura pour solution:

$$u(t) = x_1 \frac{\sin \omega(T - t)}{\sin \omega T} + x_2 \frac{\sin \omega t}{\sin \omega T} - \lambda \frac{[\sin \omega(T - t) + \sin \omega t]}{m \omega^2 \sin \omega T} + \frac{\lambda^2}{m \omega^2} \quad (\text{III-28})$$

en remplaçant $u(t)$ par son expression dans celle de χ , nous obtenons:

$$\begin{aligned} \chi = & -\frac{\lambda^2 T}{2m\omega^2} + \frac{m\omega}{2\sin \omega T} \left[(x_1^2 + x_2^2) \cos \omega T - 2x_1 x_2 - \frac{2\lambda}{m\omega^2} (x_1 + x_2) (\cos \omega T - 1) \right. \\ & \left. - \frac{2\lambda^2}{m^2 \omega^4} (\cos \omega T - 1) \right] \end{aligned} \quad (\text{III-29})$$

Le second terme de l'équation ci-dessus correspond à la phase du propagateur relatif au potentiel harmonique :

$$v(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 \left(x - \frac{\lambda}{m \omega^2} \right)^2$$

d'où,

$$\chi = -\frac{\lambda^2 T}{2m\omega^2} + \chi_{OH} \quad (\text{III-30})$$

b- Calcul de la constante de normalisation :

Le calcul de l'expression du propagateur doit passer également par celui de la constante de normalisation. Ceci peut être réalisé par différentes méthodes. La méthode proposée par A. Chouchaoui ^[29] est basée sur l'introduction, dans les calculs, de la transformée de Fourier du lagrangien de départ afin de contourner des difficultés de calcul inhérentes aux matrices pentadiagonales. Ici, le problème est moins épineux, car nous avons affaire à des matrices tridiagonales.

Partant du fait que la constante de normalisation D_N est une fonction du déterminant de P .

$$D = \lim_{N \rightarrow \infty} D_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[m^N \frac{\alpha}{\det P} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III-31})$$

écrivant le déterminant de la matrice P , comme suit

$$\det P = \Delta_{N-1} \quad (\text{III-32})$$

Nous pouvons aisément trouver une relation de récurrence entre les déterminants de différents ordres. Ainsi, le déterminant Δ_k d'ordre k de la matrice P , s'écrira en fonction des déterminants d'ordres inférieurs, comme :

$$\Delta_k = m \Delta_{k-1} (2 - \omega^2 \varepsilon^2) - m^2 \Delta_{k-2} \quad (\text{III-33})$$

en posant :

$$\Delta_k = \frac{1}{\varepsilon} m^{k+1} \psi_{k+1} \quad (\text{III-34})$$

à la limite ($\varepsilon \rightarrow 0$) et après simplification, l'équation (III-34) devient:

$$\frac{d}{dt} \psi(t) + \omega^2 \psi = 0 \quad (\text{III-35})$$

En tenant compte de la condition $\psi' = 0$, il vient:

$$\psi(t) = \frac{v_1(t)}{m\dot{v}'_1} \quad (\text{III-36})$$

En remplaçant $\det P$ par son expression dans l'équation (III-32), la constante de normalisation prendra finalement la forme simplifiée suivante :

$$D = \sqrt{\frac{m\dot{v}'_1}{2\hbar v'_1}} \quad (\text{III-37})$$

ou encore,

$$D = \left[\frac{m\omega}{2\hbar \sin \omega T} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III-38})$$

Notre propagateur s'écrit donc en fonction de celui de l'oscillateur harmonique, , comme suit:

$$k(x'', x'; T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin \omega T}} e^{-\frac{i\lambda^2 T}{2\hbar m \omega^2}} e^{\frac{i}{\hbar} \chi_{OH}} \quad (\text{III-39})$$

Ou encore,

$$k(x'', x'; T) = e^{-\frac{i\lambda^2 T}{2\hbar m \omega^2}} K_{OH} \quad (\text{III-40})$$

Où K_{OH} est le propagateur relatif à l'oscillateur harmonique dont la phase est χ_{OH} .

3- Détermination du spectre des énergies:

Pour un Hamiltonien H indépendant du temps, le propagateur de Feynman s'écrit en fonction de l'opérateur d'évolution comme :

$$K(x, T; y, 0) = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} HT} | y \rangle \quad (\text{III-41})$$

ou plus simplement,

$$K(x, T; y, 0) = \sum_n U_n(x) U_n^*(y) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n T} \quad (\text{III-42})$$

L'Hamiltonien H étant indépendant du temps dans notre problème, nous pouvons alors, intégrer aisément $K(x, T; x, 0)$ par rapport à la variable x . Il vient alors,

$$\int K(x, T; x, 0) dx = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n T} \quad (\text{III-43})$$

Ceci découle de l'orthogonalité des fonctions d'ondes $U_n(x)$. Nous pouvons appliquer ce résultat à notre cas en remplaçant $K(x, T; x, 0)$ par son expression donnée par l'équation (III-39), nous obtenons après intégration,

$$\int K(x, x; T) dx = e^{-\frac{i\lambda^2 T}{2\hbar m\omega^2}} \int K_{OH}(x, x; T) dx \quad (\text{III-44})$$

L'intégrale apparaissant dans le second membre de l'équation ci-dessus, se calcule aisément, et vaut :

$$\int K_{OH}(x, x; T) dx = \frac{1}{2i \sin\left(\frac{\omega T}{2}\right)}$$

nous pouvons démontrer en outre, que :

$$\frac{1}{2i \sin\left(\frac{\omega T}{2}\right)} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega T(n+1/2)} \quad (\text{III-45})$$

Les équations (III.40), (III.43) et (III.45) nous conduisent à :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\lambda^2}{2m\omega^2} \quad (\text{III-46})$$

C'est l'énergie du $n^{\text{ième}}$ état excité de l'oscillateur harmonique forcé décrit par le lagrangien (III.1).

Dans le cas où λ est complexe imaginaire pur, $\lambda = i\gamma$, l'énergie E_n correspondant au potentiel complexe à symétrie PT,

$$v(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - i\gamma x \quad (\text{III-47})$$

est donnée par :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\gamma^2}{2m\omega^2} \quad (\text{III-48})$$

Nous constatons que le spectre des énergies du potentiel complexe PT symétrique donné par l'équation (III-47) admet un spectre des énergies réel et positif semblable à celui d'un oscillateur harmonique forcé. Ceci est vérifiable à partir de l'équation de Schrödinger.

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi_n}{\partial x^2} + \left(\frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - i \gamma x \right) \psi_n = E_n \psi_n \quad (\text{III-49})$$

en posant

$$y = x - \frac{i\gamma}{m\omega^2}$$

L'équation (III.49) devient :

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi_n}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 \psi_n = \left(E_n - \frac{\gamma^2}{2m\omega^2} \right) \psi_n \quad (\text{III-50})$$

nous pouvons alors écrire,

$$\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = E_n - \frac{\gamma^2}{2m\omega^2}$$

ou encore,

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\gamma^2}{2m\omega^2} \quad (\text{III-51})$$

ce résultat confirme celui obtenu à l'équation (III.48).

Chapitre IV :

Corrections systématiques appliquées à
un potentiel anharmonique PT-
Symétrique

1-Introduction:

La méthode variationnelle et perturbative de Feynman-Kleinert est une technique de calcul qui s'est avérée très performante dans de nombreux cas de potentiels phénoménologiques. Kleinert l'a obtenue en introduisant dans la technique variationnelle de Feynman, des corrections dites systématiques^[36,42-45], dont la contribution améliore sensiblement la qualité des résultats. Dans ses calculs, Kleinert combine les méthodes perturbative et variationnelle afin d'aboutir à un potentiel effectif classique, exprimé sous forme d'une série convergente. Nous nous proposons de l'appliquer dans ce travail, pour extraire l'énergie propre de l'état fondamental d'un potentiel anharmonique PT-Symétrique

2- Développement perturbatif de la fonction de partition :

La fonction de partition de l'oscillateur harmonique perturbé, où $v(x)$ est considéré comme une perturbation, est donnée par :

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

Le développement, à l'ordre deux, du terme exponentiel contenant le terme interaction $v(x)$, conduit à :

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

où nous avons posé :

$$A_{int,e} = \int_0^{\hbar\beta} v(x(\tau)) d\tau \quad (\text{IV -3})$$

La fonction de partition Z sera exprimée en fonction des valeurs moyennes calculées par rapport à la fonction de partition de l'oscillateur harmonique Z_ω :

$$\langle f \rangle_\omega = Z_\omega^{-1} \int \mathcal{D}x f \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2 + M \frac{\omega^2}{2} x^2 \right] \right\} \quad (\text{IV -4})$$

Ceci nous donne :

$$Z = Z_\omega \left(1 - \frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_\omega + \frac{1}{2!\hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_\omega - \dots \right) \quad (\text{IV -5})$$

Pour des commodités de calcul, la série ci-dessus peut être mise sous la forme exponentielle suivante :

$$1 - \frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_{\omega} + \frac{1}{2!\hbar^2} \langle A_{int}^2 \rangle_{\omega} - \dots = \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_{\omega} + \frac{1}{2!\hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c} - \dots \right\} \quad (IV -6)$$

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

$$\begin{aligned} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c} &= \langle [A_{int,e} - \langle A_{int,e} \rangle_{\omega}]^2 \rangle_{\omega} \\ &= \langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega} - \langle A_{int,e} \rangle_{\omega}^2 \end{aligned} \quad (IV -7)$$

Sachons que Z s'écrit comme,

$$Z = \exp (-\beta F) \quad (IV -8)$$

L'énergie libre F devient:

$$F = -\frac{1}{\beta} \left\{ \log Z_{\omega} + \left(-\frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_{\omega} + \frac{1}{2!\hbar^2} \langle A_{int}^2 \rangle_{\omega,c} \right) \right\} \quad (IV -9)$$

où encore

$$F = F_{\omega} + \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_{\omega} - \frac{1}{2!\hbar^2} \langle A_{int}^2 \rangle_{\omega,c} \right\} \quad (IV -10)$$

Aux basses températures ($\beta \rightarrow \infty$) cette expression converge vers celle de l'énergie de l'état fondamental.

$$E_0 = \frac{\omega}{2} + \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_{\omega} - \frac{1}{2!\hbar^2} \langle A_{int}^2 \rangle_{\omega,c} \right\} \quad (IV -11)$$

3- Application aux potentiels anharmoniques quartique, sextique PT-symétriques :

Nous nous proposons d'appliquer cette méthode à la famille de potentiels définie par :

$$V(x) = \frac{1}{2}\omega^2 x^2 + \eta x^2 + \mu x^4 + \gamma x^6 + i(\alpha x + \theta x^3) \quad (\text{IV -12})$$

Dans ce cas, le terme représentant la perturbation est donné par :

$$v_{int}(x) = \eta x^2 + \mu x^4 + \gamma x^6 + i(\alpha x + \theta x^3) \quad (\text{IV -13})$$

i étant l'imaginaire pur. $i^2=-1$, $\eta, \mu, \gamma, \alpha$ et θ sont des paramètres à fixer.

Calcul des cumulants:

a- Cumulants d'ordre 1:

A l'ordre 1, la valeur moyenne de l'action relative à l'interaction est donnée par:

$$\langle A_{int} \rangle_\omega = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \langle V_{int}(x(\tau)) \rangle \quad (\text{IV -14})$$

$$= \eta \int_0^{\hbar\beta} d\tau \langle x(\tau)^2 \rangle + \mu \int_0^{\hbar\beta} d\tau \langle x(\tau)^4 \rangle + \gamma \int_0^{\hbar\beta} d\tau \langle x(\tau)^6 \rangle \quad (\text{IV -15})$$

Ces valeurs moyennes seront calculées via les fonctions de corrélation $G^{(n)}(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n)$ du chemin $x(\tau)$. Elles sont considérées, pour un système quantique donné, comme étant les moyennes fonctionnelles des produits des variables position à différents instants:

$$G^{(n)}(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n) = \langle x(\tau_1) \dots x(\tau_n) \rangle \quad (\text{IV -16})$$

Cette expression est connue en mécanique quantique et en théorie des champs sous l'appellation de théorème de Wick. Les moments d'ordres impairs sont nuls, et ceux d'ordres pairs s'écrivent:

$$G^{(n)}(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n) = \sum_{pairs} G^{(2)}(\tau_{p(1)}, \tau_{p(2)}) \dots G^{(2)}(\tau_{p(n-1)}, \tau_{p(n)}) \quad (\text{IV -17})$$

Le terme d'ordre six s'écrit :

$$\langle x(\tau)^6 \rangle_\omega = \langle x(\tau_1)x(\tau_2)x(\tau_3)x(\tau_4)x(\tau_5)x(\tau_6) \rangle_\omega \quad (\text{IV -18})$$

$$= G^{(6)}(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6) \quad (\text{IV -19})$$

Pour calculer cette valeur moyenne, nous utiliserons la règle de Wick,

$$\begin{aligned} & \langle x(\tau_1)x(\tau_2)x(\tau_3)x(\tau_4)x(\tau_5)x(\tau_6) \rangle_\omega \\ &= \langle x(\tau_1)x(\tau_2) \rangle_\omega \langle x(\tau_3)x(\tau_4)x(\tau_5)x(\tau_6) \rangle_\omega \\ &+ \langle x(\tau_1)x(\tau_3) \rangle_\omega \langle x(\tau_2)x(\tau_4)x(\tau_5)x(\tau_6) \rangle_\omega \\ &+ \langle x(\tau_1)x(\tau_4) \rangle_\omega \langle x(\tau_2)x(\tau_3)x(\tau_5)x(\tau_6) \rangle_\omega \\ &+ \langle x(\tau_1)x(\tau_5) \rangle_\omega \langle x(\tau_2)x(\tau_3)x(\tau_4)x(\tau_6) \rangle_\omega \\ &+ \langle x(\tau_1)x(\tau_6) \rangle_\omega \langle x(\tau_2)x(\tau_3)x(\tau_4)x(\tau_5) \rangle_\omega \\ \\ &= \langle x(\tau_1)x(\tau_2) \rangle_\omega \{ \langle x(\tau_3)x(\tau_4) \rangle_\omega \langle x(\tau_5)x(\tau_6) \rangle_\omega \\ &+ \langle x(\tau_3)x(\tau_5) \rangle_\omega \langle x(\tau_4)x(\tau_6) \rangle_\omega + \langle x(\tau_3)x(\tau_6) \rangle_\omega \langle x(\tau_4)x(\tau_5) \rangle_\omega \} \\ &+ \langle x(\tau_1)x(\tau_3) \rangle_\omega \{ \langle x(\tau_2)x(\tau_4) \rangle_\omega \langle x(\tau_5)x(\tau_6) \rangle_\omega \\ &+ \langle x(\tau_2)x(\tau_5) \rangle_\omega \langle x(\tau_4)x(\tau_6) \rangle_\omega + \langle x(\tau_2)x(\tau_6) \rangle_\omega \langle x(\tau_4)x(\tau_5) \rangle_\omega \} \\ &+ \langle x(\tau_1)x(\tau_4) \rangle_\omega \{ \langle x(\tau_2)x(\tau_3) \rangle_\omega \langle x(\tau_5)x(\tau_6) \rangle_\omega \\ &+ \langle x(\tau_2)x(\tau_5) \rangle_\omega \langle x(\tau_3)x(\tau_6) \rangle_\omega + \langle x(\tau_2)x(\tau_6) \rangle_\omega \langle x(\tau_3)x(\tau_5) \rangle_\omega \} \\ &+ \langle x(\tau_1)x(\tau_5) \rangle_\omega \{ \langle x(\tau_2)x(\tau_3) \rangle_\omega \langle x(\tau_4)x(\tau_6) \rangle_\omega \\ &+ \langle x(\tau_2)x(\tau_4) \rangle_\omega \langle x(\tau_3)x(\tau_6) \rangle_\omega + \langle x(\tau_2)x(\tau_6) \rangle_\omega \langle x(\tau_3)x(\tau_4) \rangle_\omega \} \\ &+ \langle x(\tau_1)x(\tau_6) \rangle_\omega \{ \langle x(\tau_2)x(\tau_3) \rangle_\omega \langle x(\tau_4)x(\tau_5) \rangle_\omega \\ &+ \langle x(\tau_2)x(\tau_4) \rangle_\omega \langle x(\tau_3)x(\tau_5) \rangle_\omega + \langle x(\tau_2)x(\tau_5) \rangle_\omega \langle x(\tau_3)x(\tau_4) \rangle_\omega \} \end{aligned} \quad (\text{IV -20})$$

Dans notre cas $\tau_i = \tau \quad i=1, \dots, 6$

Il vient alors

$$\langle x(\tau)^6 \rangle_\omega = 15 \langle x(\tau)^2 \rangle_\omega^3 = 15 [G^{(2)}(\tau, \tau)]^3 \quad (\text{IV -21})$$

de même,

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

$$\langle x(\tau)^4 \rangle = 3 \langle x(\tau)^2 \rangle_\omega^2 = 3 [G^{(2)}(\tau, \tau)]^2 \quad (\text{IV -22})$$

et le cumuland correspondant à la perturbation sera donné par :

$$\langle A_{int,c} \rangle_{\omega,c} = \eta \int_0^{\hbar\beta} d\tau [G^{(2)}(\tau, \tau)] + 3\mu \int_0^{\hbar\beta} d\tau [G^{(2)}(\tau, \tau)]^2 + 15\gamma \int_0^{\hbar\beta} d\tau [G^{(2)}(\tau, \tau)]^3 \quad (\text{IV -23})$$

Aux basses températures, il devient:

$$\begin{aligned} \lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \langle A_{int,c} \rangle_{\omega,c} \\ = \eta \lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau [G^{(2)}(\tau, \tau)] + 3\mu \lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau [G^{(2)}(\tau, \tau)]^2 \\ + 15\gamma \lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau [G^{(2)}(\tau, \tau)]^3 \end{aligned} \quad (\text{IV -24})$$

Nous utiliserons, pour calculer ces intégrales, la fonction de Green aux basses températures ($\beta \rightarrow \infty$) donnée par:

$$G_e^p(\tau_1, \tau_2) = a^2 \exp(-\omega|\tau_1 - \tau_2|) \quad (\text{IV -19})$$

avec $a^2 = \frac{1}{2\omega}$ et $|\tau_i| \in [0, \hbar\beta]$

nous obtenons après calcul,

$$\begin{aligned} \lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau G^{(2)}(\tau, \tau) &= a^2 \\ \lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau G^{(2)}(\tau, \tau)^2 &= a^4 \\ \lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau G^{(2)}(\tau, \tau)^3 &= a^6 \end{aligned} \quad (\text{IV -20})$$

Ceci conduit à:

$$\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \langle A_{int,c} \rangle_{\omega,c} = \eta a^2 + 3\mu a^4 + 15\gamma a^6 \quad (\text{IV -21})$$

b- Cumulants d'ordre 2:

Calculons les cumulants d'ordre deux. Le terme d'interaction correspondant est:

$$\langle A_{int,e}^2 \rangle_\omega = \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \langle v_{int}(x(\tau_1)) v_{int}(x(\tau_2)) \rangle \quad (IV -22)$$

où

$$\begin{aligned} & \langle v_{int}(x(\tau_1)) \cdot v_{int}(x(\tau_2)) \rangle \\ &= \eta^2 \cdot B0 + \mu^2 \cdot B1 + \gamma^2 \cdot B2 - \alpha^2 \cdot B3 - \theta^2 \cdot B4 + \eta\mu \cdot (B5 + B6) \\ &+ \eta\gamma \cdot (B7 + B8) + \mu\gamma \cdot (B9 + B10) - \alpha\theta \cdot (B11 + B12) \end{aligned} \quad (IV -23)$$

les B_i ($i = 0, \dots, 12$) sont des valeurs moyennes données par:

$$\begin{aligned} B0 &= \langle x(\tau_1)^2 x(\tau_2)^2 \rangle \\ &= G(\tau_1, \tau_1) G(\tau_2, \tau_2) + 2G(\tau_1, \tau_2)^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B1 &= \langle x(\tau_1)^4 x(\tau_2)^4 \rangle \\ &= 9G(\tau_1, \tau_1)^2 G(\tau_2, \tau_2)^2 + 72G(\tau_1, \tau_1) G(\tau_1, \tau_2)^2 G(\tau_2, \tau_2) + 24G(\tau_1, \tau_2)^4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B2 &= \langle x(\tau_1)^6 x(\tau_2)^6 \rangle \\ &= 225G(\tau_1, \tau_1)^3 G(\tau_2, \tau_2)^3 + 4050G(\tau_1, \tau_1)^2 G(\tau_1, \tau_2)^2 G(\tau_2, \tau_2)^2 \\ &+ 5400G(\tau_1, \tau_1) G(\tau_1, \tau_2)^4 G(\tau_2, \tau_2) + 720G(\tau_1, \tau_2)^6 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B3 &= \langle x(\tau_1) x(\tau_2) \rangle \\ &= G(\tau_1, \tau_2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B4 &= \langle x(\tau_1)^3 x(\tau_2)^3 \rangle \\ &= 9G(\tau_1, \tau_1) G(\tau_1, \tau_2) G(\tau_2, \tau_2) + 6G(\tau_1, \tau_2)^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B5 &= \langle x(\tau_1)^4 x(\tau_2)^2 \rangle \\ &= 3G(\tau_1, \tau_1)^2 G(\tau_2, \tau_2) + 12G(\tau_1, \tau_2)^2 G(\tau_1, \tau_1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B6 &= \langle x(\tau_1)^2 x(\tau_2)^4 \rangle \\ &= 3G(\tau_1, \tau_1) G(\tau_2, \tau_2)^2 + 12G(\tau_1, \tau_2)^2 G(\tau_2, \tau_2) \end{aligned}$$

$$B7 = \langle x(\tau_1)^6 x(\tau_2)^2 \rangle$$

$$= 15G(\tau_1, \tau_1)^3 G(\tau_2, \tau_2) + 90G(\tau_1, \tau_2)^2 G(\tau_1, \tau_1)^2$$

$$\begin{aligned} B8 &= \langle x(\tau_1)^2 x(\tau_2)^6 \rangle \\ &= 15G(\tau_1, \tau_1) G(\tau_2, \tau_2)^3 + 90G(\tau_1, \tau_2)^2 G(\tau_2, \tau_2)^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B9 &= \langle x(\tau_1)^6 x(\tau_2)^4 \rangle \\ &= 45G(\tau_1, \tau_1)^3 G(\tau_2, \tau_2)^2 + 540G(\tau_1, \tau_1)^2 G(\tau_1, \tau_2)^2 G(\tau_2, \tau_2) + 360G(\tau_1, \tau_1) G(\tau_1, \tau_2)^4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B10 &= \langle x(\tau_1)^4 x(\tau_2)^6 \rangle \\ &= 45G(\tau_1, \tau_1)^2 G(\tau_2, \tau_2)^3 + 540G(\tau_1, \tau_1) G(\tau_1, \tau_2)^2 G(\tau_2, \tau_2)^2 + 360G(\tau_1, \tau_2)^4 G(\tau_2, \tau_2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B11 &= \langle x(\tau_1)^3 x(\tau_3) \rangle \\ &= 3G(\tau_1, \tau_1) G(\tau_1, \tau_2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B12 &= \langle x(\tau_1) x(\tau_2)^3 \rangle \\ &= 3G(\tau_1, \tau_2) G(\tau_2, \tau_2) \end{aligned}$$

(IV-24)

Le calcul du terme $\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \langle A_{int,e}^2 \rangle_\omega$, exige le calcul de la limite lorsque $\beta \rightarrow \infty$ des intégrales ci-dessous :

$$\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) = \frac{2}{\omega} a^2$$

$$\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 = \frac{1}{\omega} a^4$$

$$\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^4 = \frac{1}{2} \frac{1}{\omega} a^8$$

$$\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^6 = \frac{1}{3} \frac{1}{\omega} a^{12}$$

$$\begin{aligned}
\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) &= \frac{1}{\omega} a^8 \\
\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)^2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_2)^2 &= \frac{1}{\omega} a^{12} \\
\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^4 G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) &= \frac{1}{2} \frac{1}{\omega} a^{12}
\end{aligned}
\tag{IV-25}$$

Le calcul de $\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \langle A_{int,e}^2 \rangle_\omega$ donne enfin,

$$\begin{aligned}
\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \langle A_{int,e}^2 \rangle_\omega &= \eta^2 a^4 + 9\mu^2 a^8 + 225\gamma^2 a^{12} + 6\eta\mu a^6 + 30\eta\gamma a^8 + 90\mu\gamma a^{10} + 2\frac{\eta^2 a^4}{\omega} \\
&+ 84\frac{\mu^2 a^8}{\omega} + 6990\frac{\gamma^2 a^{12}}{\omega} - 2\frac{\alpha^2 a^2}{\omega} - 22\frac{\theta^2 a^6}{\omega} + 24\frac{\eta\mu a^6}{\omega} + 180\frac{\eta\gamma a^8}{\omega} \\
&+ 1440\frac{\mu\gamma a^{10}}{\omega} - 12\frac{\alpha\theta a^4}{\omega}
\end{aligned}
\tag{IV-26}$$

sachant que :

$$\langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c} = \langle A_{int,e}^2 \rangle_\omega - \langle A_{int,e} \rangle_\omega^2
\tag{IV-27}$$

il vient,

$$\begin{aligned}
\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c} &= \frac{1}{\omega} \{ 2\eta^2 a^4 + 84\mu^2 a^8 + 6990\gamma^2 a^{12} - 2\alpha^2 a^2 - 22\theta^2 a^6 + 24\eta\mu a^6 \\
&+ 180\eta\gamma a^8 + 1440\mu\gamma a^{10} - 12\alpha\theta a^4 \}
\end{aligned}
\tag{IV-28}$$

L'énergie de l'état fondamental s'écrira alors,

$$E_0 = \frac{\omega}{2} + \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_{\omega} - \frac{1}{2! \hbar^2} \langle A_{int}^2 \rangle_{\omega,c} \right\} \quad (IV-29)$$

Après substitution de chaque terme par son expression, nous obtenons finalement :

$$E_0 = \frac{\omega}{2} + \eta a^2 + 3\mu a^4 + 15\gamma a^6 + \frac{1}{\omega} \{ -\eta^2 a^4 - 42\mu^2 a^8 - 3495\gamma^2 a^{12} + \alpha^2 a^2 + 11\theta^2 a^6 - 12\eta\mu a^6 - 90\eta\gamma a^8 + 6\alpha\theta a^4 - 720\mu\gamma a^{10} \} \quad (IV-30)$$

4 - Résultats et discussions:

Nous avons consigné dans les tableaux ci-dessous, les valeurs de l'énergie de l'état fondamental du potentiel anharmonique quartique sextique PT-symétrique donné par :

$$V(x) = \frac{1}{2}\omega^2 x^2 + \eta x^2 + \mu x^4 + \gamma x^6 + i(\alpha x + \theta x^3) \quad (IV-31)$$

Pour différentes valeurs des paramètres $\eta, \mu, \gamma, \alpha$ et θ .

Ces résultats ont été obtenus via la méthode variationnelle de Ritz et celle de Kleinert incluant les corrections systématiques. La méthode converge rapidement dès le premier ordre pour lequel les valeurs des énergies E_{Ritz} et E_{corr} sont quasiment identiques.

μ	$E_{\text{ex}}^{(0)[19]}$	E_{Ritz}	$E_{\text{corr}}^{(1)}$	$E_{\text{corr}}^{(2)}$	$E_{\text{corr}}^{(2)}(\text{littér})^{[19]}$
0.1	0.559146	0.5603073712	0.5603073712	0.5591423147	0.559154219
0.5	0.696176	0.7016616429	0.7016616427	0.6962570874	0.696253632
0.8	0.765144	0.7727363594	0.7727363592	0.7652924530	0.765263697
0.9	0.785032	0.7932130657	0.7932130658	0.7852003617	0.785163494
1	0.803771	0.8125000000	0.8124999996	0.8039587691	0.803914053
10	1.50497	1.531250000	1.531249999	1.505838465	1.50549750
50	2.49971	2.547580400	2.547580400	2.501400904	2.50069963
100	3.13138	3.192444043	3.192444044	3.133571265	3.13265656
500	5.31989	5.425756047	5.425756047	5.323742646	5.32211709
1000	6.69422	6.827953313	6.827953316	6.699096093	6.69703286

Tableau 1: Energie de l'état fondamental de l'oscillateur anharmonique pour le cas

$$v_{in}(x) = \frac{1}{2}x^2 + \mu x^4.$$

α	γ	E _{Ritz}	E _{corr} ⁽¹⁾	E _{corr} ⁽²⁾
0.01	0.01	0.5163361704	0.5163361704	0.5154271710
	0.05	0.5599674080	0.5599674080	0.5545614237
	0.1	0.5964026759	0.5964026759	0.5890865048
	0.3	0.6851782885	0.6851782883	0.6675705129
	0.5	0.7420252394	0.7420252394	0.7195249091
	0.7	0.7856742013	0.7856742009	0.7596124557
	1.	0.8377971826	0.8377971827	0.8083557841
	5.	1.161458163	1.161458163	1.108583017
0.1	0.01	0.5163361704	0.5163361704	0.5192887220
	0.07	0.5760008840	0.5760008840	0.5689073631
	0.2	0.6474524624	0.6474524624	0.6347087477
	0.6	0.7650351109	0.7650351112	0.7415189906
	5	1.161458163	1.161458163	1.108908354
	15	1.486652425	1.486652424	1.413332688
1.	1	0.8377971826	0.8377971827	0.8765625902
	3	1.041349140	1.041349140	1.038183072
	5	1.161458163	1.161458163	1.141251646
	11	1.384656807	1.384656806	1.339812122
	25	1.674404483	1.674404483	1.604408821
10.	10.	1.355009282	1.355009281	1.378447846
	100.	2.331952336	2.331952334	2.332882121
	1000.	4.102878319	4.102878318	4.115767408

Tableau 2: Energie de l'état fondamental de l'oscillateur anharmonique sextique PT-

symétrique, pour le cas $v_{in}(x) = \frac{1}{2}x^2 + \gamma x^6 + i\alpha x$

θ	γ	E _{Ritz}	E _{corr} ⁽¹⁾	E _{corr} ⁽²⁾
0.01	0.01	0.5163361704	0.5163361704	0.5154675190
	0.05	0.5599674080	0.5599674080	0.5545684074
	0.3	0.6851782885	0.6851782883	0.6675659343
	0.7	0.7856742013	0.7856742009	0.7596076725
	1	0.8377971826	0.8377971827	0.8076541014
0.1	0.01	0.5163361704	0.5163361704	0.5214658011
	0.07	0.5760008840	0.5760008840	0.5713739128
	0.5	0.7420252394	0.7420252394	0.7599034558
	1	0.8377971826	0.8377971827	0.8451968770
	10	1.355009282	1.355009281	1.392348684
1.	1	0.8377971826	0.8377971827	0.8338724317
	10	1.355009282	1.355009281	1.393895672
	20	1.589220836	1.589220835	1.510839810
	50	1.973493505	1.973493504	2.042000255
10.	10.	1.355009282	1.355009281	1.362402002
	25.	1.674404483	1.674404483	1.685423823
	50.	1.973493505	1.973493504	1.935987781

Tableau 3: Energie de l'état fondamental de l'oscillateur anharmonique sextique

PT-symétrique, pour le cas $v_{in}(x) = \frac{1}{2}x^2 + \gamma x^6 + i\theta x^3$.

η	μ	γ	α	θ	E_{Ritz}	$E_{\text{corr}}^{(1)}$	$E_{\text{corr}}^{(2)}$
0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.2516154526	0.2516154525	0.2409565933
0.1	0.1	0.1	0.01	0.01	0.4918522759	0.4918522759	0.4748304062
0.25	0.1	0.1	0.01	0.01	0.5457009741	0.5457009741	0.5323160080
0.25	1	1	0.1	0.1	0.9148593300	0.9148593300	0.8863397542
0.5	10	1	1	0.1	1.559327867	1.559327869	1.555101460
1	0.5	10	0.1	5	1.441069054	1.441069055	1.459297960
10	5	15	3	0.5	2.567127039	2.567127039	2.449746859
100	10	10	1	0.1	7.114578452	7.114578454	7.116957533
100	100	100	10	1	22.39826237	22.39826236	22.39882401
1000	100	100	10	10	22.40012943	22.40012943	22.42515677

Tableau 4: Energie de l'état fondamental de l'oscillateur anharmonique sextique

PT-symétrique, pour le cas $v_{in}(x) = \eta x^2 + \mu x^4 + \gamma x^6 + i(\alpha x + \theta x^3)$

Cette technique conduit à des résultats très satisfaisants comparativement à ceux donnés par la méthode variationnelle standard du formalisme de Feynman.

Si cette technique apparaît à la fois simple et élégante du point de vue idée, elle nécessite cependant, beaucoup de patience et d'application dans le calcul des contractions intervenant dans les cumulants d'ordre deux. Le calcul de la contribution du terme de degré six, dans l'énergie, exige à lui seul un véritable travail de fourmi !! Le seul avantage, dans le cas des potentiels complexes à symétrie PT, réside dans le fait que les termes de degrés impairs, n'interviennent pas dans le calcul des cumulants du premier ordre. Ceci nous rend la tâche relativement facile. Par contre, le calcul des termes d'ordre deux, englobe la contribution de tous les termes ; ce qui nous rend les calculs très pénibles !! Il est utile de souligner que la quasi-totalité des contributions correspondent à x_0 nul.

Conclusion

Nous avons réalisé dans ce mémoire, plusieurs travaux. Le premier étant la généralisation de la méthode de Feynman-Kleinert au calcul du spectre des énergies d'un potentiel complexe PT-symétrique, dans les cas unidimensionnel, bidimensionnel et tridimensionnel. Cette méthode consiste à projeter la fonction de partition de la statistique quantique sur la base des fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique. Les valeurs moyennes obtenues seront à leur tour, optimisées par rapport aux composantes de la fréquence d'essai¹. Nous avons appliqué cette technique au calcul de quelques valeurs du spectre des énergies d'un potentiel complexe PT symétrique. Nos résultats se comparent favorablement à ceux obtenus par la méthode variationnelle de Ritz. Notons que cette méthode donne d'excellents résultats lorsque les termes couplés ont une intensité faible par rapport aux termes non couplés.

Nous avons également calculé par la méthode polygonale, le propagateur relatif à un lagrangien comportant un terme de friction réel ou complexe. Dans cette méthode, l'action du système est discrétisée puis mise sous forme matricielle. L'intégrale de Voltéra obtenue, est calculée en utilisant un résultat déjà établi par Montroll. Le calcul définitif de la phase du propagateur passe par la résolution d'une équation différentielle dont la solution a été exprimée en terme des fonctions de Green. La constante de normalisation correspondante, a été déterminée via la relation de récurrence existant entre les déterminants de différents ordres pour une matrice de dimension infinie. Par un changement de variable adéquat, cette relation de récurrence a été transformée en équation différentielle dont la solution nous conduit tout d'abord au déterminant de la matrice P tridiagonale, puis à l'expression de la constante de normalisation. Nous avons par la suite, intégré l'expression du propagateur sur un parcours fermé pour obtenir enfin, une expression de la fonction de partition de la mécanique quantique dont le développement nous conduit directement au spectre des énergies du système physique étudié. Nous avons pu remarquer alors, que le spectre des énergies du potentiel complexe PT symétrique que nous avons traité, admet un spectre des énergies réel et positif identique à celui de l'oscillateur harmonique forcé.

Le troisième point abordé dans ce mémoire, est le calcul de l'énergie de l'état fondamental d'un potentiel complexe PT symétrique, via la méthode de Kleinert corrigée. Cette technique de calcul ressemble, dans l'esprit, à la méthode des perturbations utilisée en mécanique quantique standard. Elle fait appel, en vérité, à la méthode variationnelle de Kleinert et au traitement perturbatif, par l'introduction de 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. Cette méthode de Kleinert corrigée conduit

à des résultats très satisfaisants comparativement à ceux donnés par les autres techniques d'approximation connues jusqu'à présent, dans le formalisme de Feynman.

Si de prime abord, la technique apparaît simple, elle nécessite néanmoins beaucoup de patience, de dextérité et d'application dans le calcul des cumulants d'ordre deux.

Son seul handicap réside dans le fait qu'il est pratiquement impossible d'étudier des potentiels anharmoniques faisant intervenir de hauts degrés d'anharmonicité. Dans pareils cas, il semble judicieux de chercher le changement de variable adéquat pour faire décroître le degré du potentiel étudié.

Nous avons quant à nous, calculé par cette méthode, l'énergie de l'état fondamental pour un potentiel anharmonique quartique sextique (de degré 6 !!) PT-symétrique comportant des termes complexes imaginaires de degrés impairs.

Les résultats obtenus en tenant compte des cumulants du premier et deuxième ordre, s'accordent parfaitement avec ceux donnés par la méthode de Ritz. L'erreur relative est en effet, insignifiante.

Bibliographie

- [1] :R.P. Feynman and A.R. Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals (Mc Graw Hill, New York, 1965).
- [2] : L. Schulman, Technics and Applications of Path Integration (Wiley, New York,1981).
- [3] : I.H. Duru and H. Kleinert, Phys. Lett. B 84(1979) 185 ; Fprtschr. Phys. 30 (1982) 401.
- [4] : H. Kleinert and I. Mustapic, J. Math. Phys. 33 (1992) 643.
- [5] : Namik Pak and I. Sokmen, Phys. Lett. A 103 (1984) 298.
- [6] : J. Cai, P. Cai and A. inomata, Phys. Rev A 34(6) (1986) 4621.
- [7] : D. C. Khandekar, S. V. Lawande and K. V. Bhagwat, Path integral Methods and Their Applications (World Scientific, Singapore, 1986).
- [8] : L. Chetouani, L. Guechi and T.F. Hammann, Phys. Lett.A 125 (1987) 277.
- [9] : A. Chouchaoui, L. Chetouani and T.F. Hammann, Fortshr. Phys 41 (1993) 3, 201-208.
- [10] : A. Diaf, A. Chouchaoui and R.J. Lombard, Annals of physics 317 (2005) 354-365.
- [11] : T.Ichinose and H. Tamura. Prog. Theor. Phys. Supp. 92 (1987) 144.
- [12] : T. Jacobson, J. Phys. A 17 (1984) 2433.
- [13] : T. Jacobson and L.S. Schulman, J, Phys A 17 (1984) 375.
- [14] : T. Boudjedaa, L, Chetouani, L, Guechi and T.F. hammann, Physica Scripta 46 (1992) 289.
- [15] : G. Roepstorff, path Integral Approach to Quantum Physics (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1994).
- [16] : H. Kleinert, Path integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics (World scientific, Singapore, 1990).
- [17] : Mark Swanson, Path Integrals and Quantum Processes (Academic Press, New York, 1992).
- [18] : E. Nelson, J. Math. Phys.5(1964) 332.
- [19] : H. Kleinert, Path integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics and Financial Markets (World scientific, Singapore, 2004).
- [20] : L. Chetouani, A. Chouchaoui and T.F. Hammann, Physics Letters A 204 (1995) 79-8b.
- [21] : A. Chouchaoui, Annals of Physics 312 (2004) 431-440.
- [22] : H. Boukabcha, A. Diaf and A. Chouchaoui. Acta Physica Polonica B, vol 40 (2009) 15-23
- [23] : Feynman's thesis: a new approach to quantum theory, World Scientific (2005)

- [24] : R.P. Feynman ; Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics, Review of Modern Physics 20 (1948) 267.
- [25] : John Archibald Wheeler & Richard P. Feynman ; Review of Modern Physics 17 (1945) 157.
- [26] : Julian Schwinger (ed); selected papers on quantum electrodynamics, Dover Publications, Inc. (1958).
- [27] : A. O. Barut and I. H. Duru, Phys. Rep. 172 (1989)1.
- [28] : D. C. Khandekar, S. V. Lawande and K. V. Bhagwat, Path integral Methods and Their Applications (World Scientific, Singapore, 1986).
- [29] : A.Chouchaoui. Le formalisme des intégrales de Feynman. Cours de post graduation, (USTHB).
- [30] : C. Grosche, F. Steiner, Handbook of Feynman path integral (Springer, 1998).
- [31] : H. Kleinert, Path integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics (World scientific, Singapore, 1995).
- [32] : B. K. Berger and C. N. Vogeli, Phys. Rev. 32 D (1989) 2477.
- [33] : R. P. Feynman and H. Kleinert, Phys. Rev. A 34 (1986) 5080.
- [34] : Davydov, Quantum Mechanics (Pergamon, 1978).
- [35] : R.P.Feynman, Statisticals mechanics (W.A.Benjamin, reading, 1972).
- [36] : A. Grigahcène, Thèse de magister, U.S.T.H.B, 1999.
- [37] : A.Diaf et A.Chouchaoui. Alg. Rev. Nucl. Sci, Vol.5, Nos.1&2(2003)1-12
- [38] : Tellez Arénas, T. D. de mécanique quantique, Masson, 1976.
- [39] : E. Belorizky, Cours de mécanique quantique, (Dunod, Paris, 1969).
- [40] : E. W. Montroll, Com. Pure App. Math. 5 (1952) 415.
- [41] : A. Diaf, Thèse de Magister,U.S.T.H.B, 2002.
- [42] : H.Kleinert, Phys Lett A 173 (1993) 332-342.
- [43] : H.Kleinert, Phys Lett B 280 (1992) 251.
- [44] : M.Bentaiba, Thèse de doctorat es-Sciences Physiques, Université de Blida, 1997.
- [45] : H. Boukabcha, Thèse de Magister,U.S.T.H.B, 2005.