

REPUBLIQUE ALGERINNE 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



THESE

Présentée pour l'obtention du grade de Docteur

EN PHYSIQUE

Spécialité : PHYSIQUE THEORIQUE

Par :

BOUKABCHA Hocine

SUJET

**Sur quelques applications du formalisme de FEYNMAN
en physique des basses énergies.**

Soutenu publiquement le 19/05/2012 devant le jury composé de:

M. Youcef BOUDOUMA	Professeur (à l'USTHB)	Président
M. Ahmed CHOUCHAOUI	Professeur (à l'U.S.T.H.B.)	Directeur de thèse
M. Mohamed MOULAY	Directeur de recherche (COMENA)	Examineur
M. Mustapha BENTAIBA	Professeur (U. Blida)	Examineur
M. Salah BOUKRAA	Professeur (U. Blida)	Examineur

Résumé

Nous nous proposons dans le présent travail de résoudre, dans le cadre des intégrales de Feynman, quelques problèmes de la mécanique quantique. Les potentiels choisis sont souvent utilisés comme modèles mathématiques dans la description de certains phénomènes apparaissant aussi bien en physique qu'en chimie.

Dans la première partie de notre travail, nous nous sommes intéressés à la détermination des énergies des états excités d'un système de trois particules de même masse, soumises à un potentiel quadratique. Les résultats obtenus se comparent favorablement à ceux obtenus par d'autres méthodes. La seconde partie concerne le calcul, par la méthode variationnelle et perturbative de Kleinert, de l'énergie de l'état fondamental d'un système physique à trois corps, décrit par un potentiel complexe à symétrie PT. Nos résultats sont également très satisfaisants. Enfin, nous avons déterminé, par un calcul analytique exact, l'expression du propagateur relatif à un système physique décrit par un lagrangien comportant un terme accélération. Le point fort dans ce travail, est le calcul du déterminant d'une matrice pentadiagonale de dimension infinie, sans passer par un changement d'espace de configuration.

REMERCIEMENTS

Au terme de ce modeste travail, nous tenons à exprimer notre profonde et nos vifs remerciements:

Tout d'abord, je remercie ALLAH, le tout puissant, pour m'avoir donné assez de force et de patience pour mener à terme ce travail.

A notre promoteur M^r CHOUCHAOUI Ahmed, pour sa disponibilité et l'aide précieuse qu'il nous a offert pour l'élaboration de ce modeste travail.

Aux président de jury M Youcef BOUDOUMA et membres du jury, M Mohamed MOULAY, M Mustapha BENTAIBA et M Salah BOUKRAA pour avoir accepté de juger notre travail.

Mes remerciements s'adressent également à ma famille, à mes amis et à mes collègues enseignants de l'Université de Khemis Milliana qui m'ont soutenu et encouragé durant la préparation de cette thèse.



Table des matières

Introduction	4
1 Construction du propagateur de Feynman	8
1.1 Principe de superposition : expérience de Young	8
1.2 L'idée de Feynman	10
1.3 Intégrales de Feynman en coordonnées cartésiennes et dans l'espace des phases, par le produit de Lie-Trotter	15
1.4 Application à l'oscillateur harmonique	18
1.4.1 Calcul du spectre des énergies	20
1.4.2 Recherche des fonctions d'onde	21
2 Calcul du spectre des énergies d'un potentiel à trois corps, par la méthode variationnelle de Kleinert	23
2.1 Introduction	23
2.2 Le choix du système de coordonnées dans l'étude d'un problème à trois corps	24
2.3 Application de la méthode d'approximation de Feynman-Kleinert au problème à trois corps	24
2.4 Résolution du problème par la méthode des potentiels quasi-exactements solubles (Q.E.S)	27
2.5 Résultats et discussions	31

3 Etude par la méthode variationnelle et perturbative de Kleinert,	
d'un système de trois corps soumis à un potentiel complexe à symétrie PT	33
3.1 Introduction	33
3.2 Méthode mathématique	34
3.3 L'énergie de l'état fondamental d'un système à trois particules soumises à un potentiel complexe à symétrie PT	39
3.4 Résultats et discussions	43
4 Calcul du propagateur relatif à un lagrangien comportant un terme accélération	45
4.1 Introduction	45
4.2 Calcul de la phase φ du propagateur	46
4.3 Calcul classique de la phase φ	51
4.4 Calcul de la constante de normalisation du propagateur	52
4.5 Cas particuliers	56
4.5.1 Cas du lagrangien $L = \frac{1}{2}K\ddot{x}^2 + \frac{1}{2}M\dot{x}^2$	56
4.5.2 Cas du lagrangien $L = \frac{1}{2}K\ddot{x}^2$	56
4.6 Conclusion	56
conclusion générale	56

Liste des tableaux

2.1	Energies E_{n_x, n_y} pour quelques valeurs des nombres quantiques n_x et n_y . Nous avons posé $\hbar = M = 1$	32
3.1	Energie de l'état fondamental du potentiel (3.20), pour différentes valeurs des paramètres A_i	44

Introduction générale

L'un des faits les plus remarquables de ces dernières décennies, est l'essor qu'ont connu les sciences ; notamment la physique qui joue un rôle primordial dans la description et la compréhension des phénomènes naturels.

Jusqu'à 1880, la physique a atteint un état de maturité assez encourageant où la plupart des phénomènes connus pouvaient s'expliquer par la mécanique Newtonienne, la théorie de l'électromagnétisme de Maxwell, la thermodynamique et la mécanique statistique de Boltzmann. Néanmoins quelques observations expérimentales demeuraient inexpliquées ; comme la forme des spectres des solides et des gaz. Une série de découvertes remarquables au cours de la fin du 19ème siècle, est venue encore, remettre en question les bases de la physique classique : L'effet photoélectrique, le rayonnement du corps noir et l'effet Compton. Ces découvertes ont poussé les physiciens à développer de nouvelles théories susceptibles de donner une explication à ces phénomènes.

Après de généreux efforts consentis par des équipes de recherche dirigées par des scientifiques de renom tels Planck, De Broglie et Einstein, la physique a fait de grands pas dans le monde de ce qui était à l'époque considéré comme inconnu. C'est grâce à ces avancées que Schrödinger a pu, en 1925, publier une série d'articles scientifiques annonçant ainsi, l'avènement d'un formalisme nouveau de la physique mathématique, capable d'expliquer avec la rigueur voulue, ce que la recherche expérimentale continuait à dévoiler. Cette nouvelle physique appelée mécanique quantique, avait deux variantes : le formalisme différentiel de Schrödinger et la formulation matri-

cielle de Heisenberg. Ces deux points de vue exigent la connaissance de l'hamiltonien du système physique étudié, et ne concernent que les cas non-relativistes.

Une décennie après, le brillant physicien R.P Feynman, a pu exploiter les résultats obtenus par le célèbre physicien anglais Dirac, pour proposer une formulation lagrangienne et fonctionnelle de la mécanique quantique. Cette nouvelle théorie a l'avantage de traiter les deux cas : relativiste et non-relativiste. Feynman s'est tout d'abord, limité à traiter, dans le cadre de son formalisme, des problèmes simples comme l'oscillateur harmonique, la particule libre [1, 2] et les systèmes décrits par des lagrangiens de forme quadratique. Sa tentative de l'appliquer au problème de l'atome d'hydrogène, a été un échec. C'est son dauphin, H. Kleinert [3] qui a pu, une quarantaine d'années après, en collaboration avec le chercheur turc I. Duru [3], venir à bout de ce problème qui a longtemps nargué les physiciens théoriciens. Encouragés par cette avancée importante, les spécialistes du domaine ont réussi petit à petit à étendre ce formalisme à de nombreux potentiels phénoménologiques tels les potentiels de Poshl-Teller, Hulthen, Rosen Morse, Scarf , Maining-Rosen [4, 5, 6, 7, 8], etc.

Plusieurs techniques de calcul faisant appel à la méthode des images, l'algèbre des matrices [9] et la théorie des groupes ont vu alors, le jour. Ces artifices de calcul ont permis à notre équipe de recherche de résoudre les problèmes de la particule confinée dans un secteur, du potentiel de Bargman et des lagrangiens comportant une accélération. En effet, c'est en faisant appel aux propriétés du groupe $SO(3)$ que nous avons pu déterminer le spectre des énergies relatif au potentiel de Bargman [10]. La formulation lagrangienne de la théorie de Feynman a également facilité le passage au cas relativiste [11, 12, 13, 14] et à la théorie des champs [15, 22, 16]. De plus, l'analogie formelle existant entre les intégrales de Feynman d'une part, et celle de Wiener [17] d'autre part, a permis d'étendre le champs d'application de ce formalisme à la physique statistique [22, 18]. Nous pouvons en effet, pour un système physique donné, calculer à partir du propagateur de Feynman, la fonction de partition quantique, l'énergie libre, les fonctions d'onde et le spectre des énergies

correspondant.

Malgré les résultats encourageants obtenus grace à l'introduction des transformations espace-temps, certains cas restaient jusqu'à présent insolubles. Il a fallu, alors, développer des méthodes de calcul capables d'approcher au mieux les résultats exacts. Nous pouvons citer parmi ces techniques, celle de Feynman-Kleinert [22]. Cette dernière permet une évaluation approchée de la fonction de partition de la statistique quantique par une fonction de partition d'essai de forme classique.

Une méthode variationnelle basée sur un calcul perturbatif [22] a permis, récemment, d'améliorer de manière sensible les performances de la méthode initiée par Feynman et Kleinert.

Notre équipe a pu pour sa part, appliquer ce formalisme à l'étude du problème à trois corps [19, 20] en utilisant les transformations de Jacobi.

Enfin, ce formalisme trouve une large application dans des domaines comme la géophysique et les sciences financières [22].

Nous nous proposons dans le présent travail de résoudre, dans le cadre des intégrales de Feynman, certains problèmes de la mécanique quantique. Les potentiels choisis sont souvent utilisés comme modèles mathématiques dans la description de phénomènes apparaissant aussi bien en physique qu'en chimie.

Le manuscrit comporte quatre chapitres précédés par une introduction générale dans laquelle nous avons donné un aperçu sur le contexte dans lequel est apparu ce formalisme, ainsi que les principales phases par lesquelles il est passé.

Dans le premier chapitre, nous rappellerons brièvement comment Feynman a pu construire son propagateur à partir de son expérience de pensée, inspirée de celle de Young. Nous calculerons dans le deuxième chapitre, les énergies des états excités d'un système de trois particules de même masse, soumises à un potentiel quadratique. Le troisième chapitre sera consacré à la détermination, par la méthode variationnelle et perturbative de Kleinert, de l'énergie de l'état fondamental d'un système physique à trois corps, décrit par un potentiel complexe à symétrie PT.

Nous déterminerons, dans le quatrième chapitre, par un calcul analytique exact,

l'expression du propagateur relatif à un système physique décrit par un lagrangien comportant un terme accélération. Le point fort dans ce travail, est le calcul du déterminant d'une matrice pentadiagonale de dimension infinie, sans passer par un changement d'espace de configuration.

Enfin nous achèverons cette thèse par une conclusion dans laquelle sera discuté l'ensemble de nos travaux.

Chapitre 1

Construction du propagateur de Feynman

1.1 Principe de superposition : expérience de Young

Considérons l'expérience de Young schématisée par la figure ci-dessous. Entre la source lumineuse S , émettrice de lumière monochromatique, et l'écran d'observation (E) on place un écran mince (P) percé de deux fentes fines S_1 et S_2 parallèles et équidistantes de S .

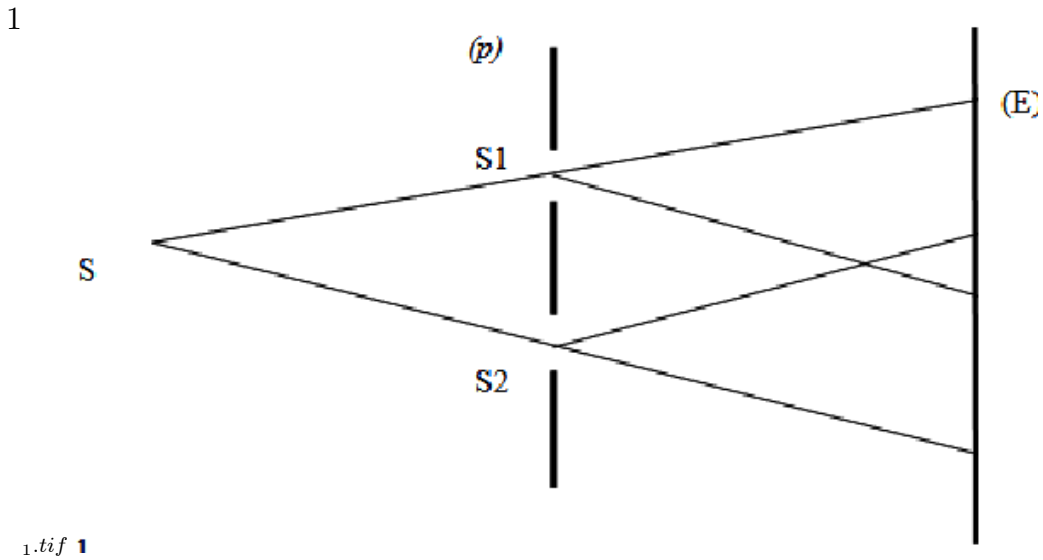


FIG. 1-1 – Expérience de Young

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 des deux, on applique la relation suivante :

$$I_G = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \quad (1.1)$$

I_G est l'intensité globale de l'onde monochromatique, alors que I_1 et I_2 sont respectivement les intensités relatives aux deux fentes (1) et (2).

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.

1.2 L'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 :

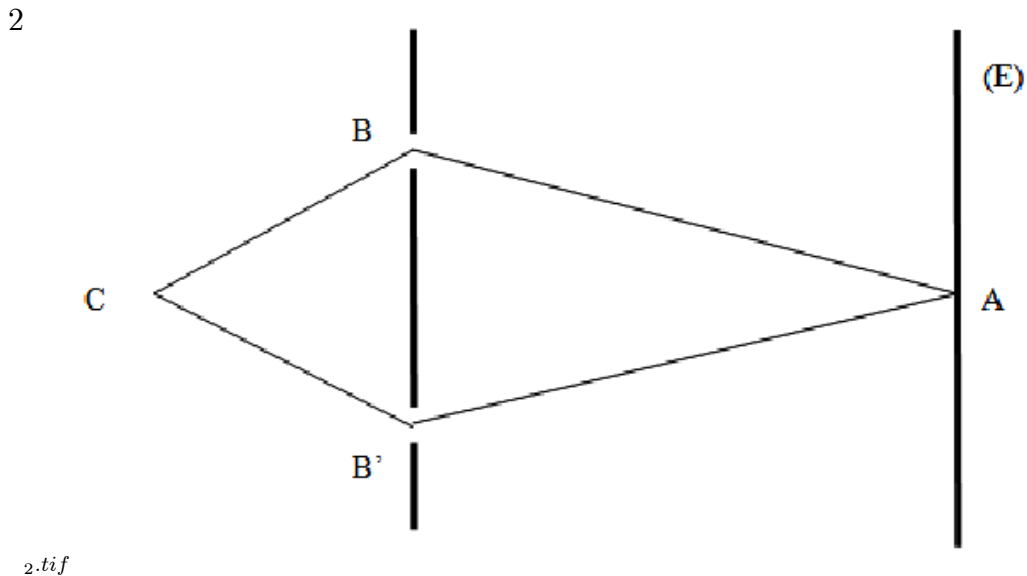


FIG. 1-2 – Expérience de Young

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 :

$$\Phi_{CBA} = \Phi_{CB} \Phi_{BA} \quad (1.2)$$

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 :

$$P = |\Phi_{CBA} + \Phi_{CB'A}|^2 \quad (1.3)$$

Nous constatons qu'il existe une ressemblance 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,

$$P \neq P_{CBA} + P_{CB'A} \quad (1.4)$$

avec

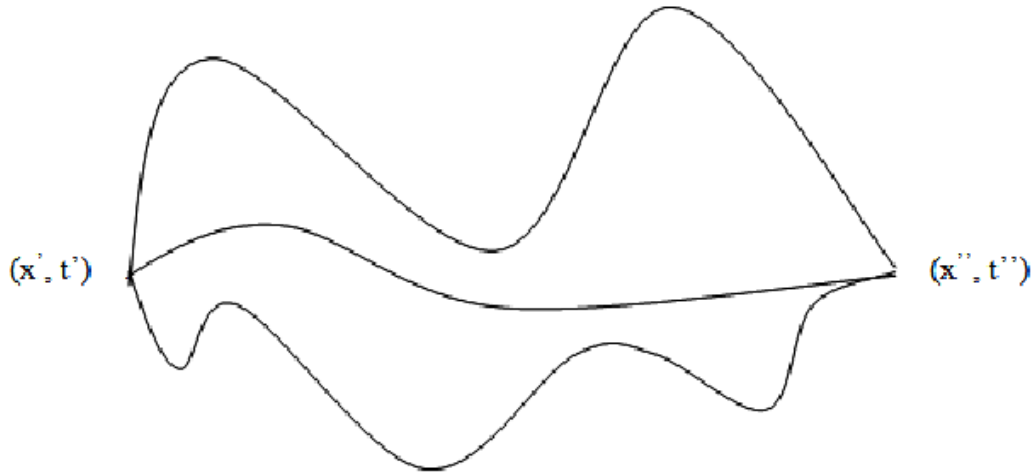
$$P_{CBA} = |\Phi_{CBA}|^2 \quad (1.5)$$

et

$$P_{CB'A} = |\Phi_{CB'A}|^2$$

Feynman a étendu ces résultats au cas d'une particule se déplaçant d'un point espace temps (x, t) à un autre point (x', t') , figure 1-3, dans l'intervalle de temps $[t, t']$.

3



3.tif

FIG. 1-3 –

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

$$K(x', t'; x, t) = \sum_{\substack{\text{sur tous les chemins} \\ \text{possibles } x(t)}} \Phi(x(t)) \quad (1.6)$$

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 de largeur ε .

Nous utiliserons désormais, la notation suivante :

$$x_j = x(t_j), t_j = t' + j \varepsilon \text{ où } j = 0, \dots, N; \quad x' = x(t') \text{ et } \ddot{x} = x(t'')$$

La fonctionnelle $\Phi(x(t))$ sera dès lors, remplacée par la fonction $\Phi(\dot{x}, x_1, x_2, x_3, \dots, x_{N-1}, \ddot{x})$.

En exploitant le résultat de Dirac, selon lequel le propagateur $K(\ddot{x}, t''; x', t')$ tend vers le terme $\exp(iS/\hbar)$ quand t'' devient très voisin de t' , nous permet alors d'écrire :

$$K(\ddot{x}, t' + \varepsilon; x', t') = \left[\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{M}{2\varepsilon^2} (\ddot{x} - \dot{x})^2 - V(\dot{x}) \right] \right\} \quad (1.7)$$

avec $t'' - t' = N\varepsilon$:

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.

$$\Psi(x_2, t_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_2, t_2; x_1, t_1) \Psi(x_1, t_1) dx_1 \quad (1.8)$$

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'équation (1.8) devient :

$$\Psi(x_2, t_1 + \varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_2, t_1 + \varepsilon; x_1, t_1) \Psi(x_1, t_1) dx_1 \quad (1.9)$$

La décomposition de l'intervalle de temps $[t', t'']$ en N intervalles de temps tous égaux, nous permet à partir de l'équation (1.9) d'exprimer le propagateur global sous la forme :

$$K(\ddot{x}, t''; x', t') = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \int \dots \int K(x_N, x_{N-1}; \varepsilon) \prod_{k=1}^{N-1} K(x_k, x_{k-1}; \varepsilon) dx_k \quad (1.10)$$

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

$$K(\ddot{x}, \ddot{t}; x', t') = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \int \cdots \int \left[\prod_{k=1}^{N-1} \frac{dx_k}{\left(\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{-1/2}} \right] \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N S(x_k, x_{k-1}; \varepsilon)\right] \quad (1.11)$$

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

$$S(x_k, x_{k-1}; \varepsilon) = M(x_k - x_{k-1})^2/2\varepsilon - \varepsilon V(x_k) \quad (1.12)$$

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

$$K(\ddot{x}, \ddot{t}; x', t') = \int \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(x(t))\right].D(x(t)) \quad (1.13)$$

$S(x(t))$ est l'action évaluée entre les deux extrémités communes à tous les chemins possibles pour la particule. Le symbole $D(x(t))$ 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 q et \dot{q} , l'action du système se réduit à l'action classique, et les effets quantiques sont pris en compte dans la constante de normalisation calculée à partir de la formule de Van Vleck-Pauli-Morette [2].

1.3 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,

$$K(x, t; x_0, t_0) = \langle x | \exp(-iT H / \hbar) | x_0 \rangle \quad (1.14)$$

avec $T = t - t_0$

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

$$H = p^2 / 2M + V(x) \quad (1.15)$$

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

Il est possible de mettre le propagateur (1.14) 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 [21, 22].

$$e^{-\frac{i}{\hbar}HT} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \exp\left[\frac{-iT}{2\hbar MN} p^2\right] \exp\left[-\frac{iT}{\hbar N} V(x)\right] \right\}^N \quad (1.16)$$

L'équation (1.16) peut être réécrite grâce à ce produit comme :

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle x \left| \left\{ \exp\left[\frac{-iT}{2\hbar MN} p^2\right] \exp\left[-\frac{iT}{\hbar N} V(x)\right] \right\}^N \right| x_0 \right\rangle \quad (1.17)$$

En injectant (N-1) fois la relation de fermeture $\int |x_j\rangle dx_j \langle x_j| = 1$ entre les N

nouveaux opérateurs, l'équation (1.17) prendra dès lors la forme suivante :

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \dots \int \prod_{j=1}^N \left(\exp \left[-\frac{iT}{\hbar N} V(x) \right] \left\langle x_j \left| \exp \left[\frac{-iT}{2\hbar MN} p^2 \right] \right| x_{j-1} \right\rangle \right) \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \quad (1.18)$$

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

$$\left\langle x_j \left| \exp \left[\frac{-iT}{2\hbar MN} p^2 \right] \right| x_{j-1} \right\rangle = \int \left\langle x_j \left| \exp \left[\frac{-iT}{2\hbar MN} p^2 \right] \right| p_j \right\rangle \langle p_j | x_{j-1} \rangle dp_j. \quad (1.19)$$

Connaissant l'expression des fonctions propres de l'opérateur P , l'équation (1.19) devient :

$$\left\langle x_j \left| \exp \left[\frac{-iT}{2\hbar MN} p^2 \right] \right| x_{j-1} \right\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[\left(\frac{T}{2MN} p_j^2 \right) - p_j (x_j - x_{j-1}) \right] \right\} dp_j \quad (1.20)$$

Après intégration sur la variable p_j , il vient :

$$\left\langle x_j \left| \exp \left[\frac{-iT}{2\hbar MN} p^2 \right] \right| x_{j-1} \right\rangle = \left[\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{iM}{2\hbar\varepsilon} (x_j - x_{j-1})^2 \right] \quad (1.21)$$

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

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \dots \int \prod_{j=1}^N \left[\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\sum_{j=1}^N \frac{M}{2\varepsilon} (x_j - x_{j-1})^2 - \varepsilon V(x) \right] \right\} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \quad (1.22)$$

Nous prouvons exprimer en outre, le terme $\prod_{j=1}^N e^{\omega_j}$ comme $\exp \left(\sum_{j=1}^N \omega_j \right)$ et le propagateur (1.22) prendra alors, la forme familière ci-après :

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{\frac{N}{2}} \int \dots \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\sum_{j=1}^N \frac{M}{2\varepsilon} (x_j - x_{j-1})^2 - \varepsilon V(x_j) \right] \right\} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \quad (1.23)$$

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 $\langle x_j | \exp[\frac{-i}{2\hbar m \varepsilon} p^2] | x_{j-1} \rangle$ par sa formulation intégrale (1.20) il vient alors :

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^N \int \dots \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N [p_j (x_j - x_{j-1}) - \varepsilon (p_j^2 + V(x_j))] \right\} \prod_{j=1}^N dp_j \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \quad (1.24)$$

Nous reconnaissons dans l'argument de l'exponentielle, le terme H_j :

$$H_j = \frac{P_j^2}{2M} + V(x_j) \quad (1.25)$$

Nous pouvons également réécrire l'équation (1.24) sous une forme condensée, en utilisant les variables continues $x(t)$ et $p(t)$. Il vient,

$$K(x, t; x_0, t_0) = \int \dots \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t (p\dot{x} - H(x, p)) dt \right\} \mathfrak{D}x(t) \mathfrak{D}p(t) \quad (1.26)$$

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

1.4 Application à l'oscillateur harmonique

Nous avons choisi comme exemple, le calcul de spectre des énergies et les fonctions d'ondes correspondantes pour un oscillateur harmonique. Notre choix a été dicté par le rôle que joue ce potentiel dans la modalisation mathématique de nombreux phénomènes de la physique. Le calcul quantique de son propagateur a été fait par de nombreux auteurs.

$$K_{O.H}(\ddot{x}, \ddot{t}; x', t') = \left[\frac{Mw}{2i\pi\hbar \sin wT} \right]^{\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{Mw}{2\hbar \sin wT} ((x'^2 + \ddot{x}^2) \cos wT - 2x'\ddot{x}) \right] \quad (1.27)$$

où w est la pulsation de l'oscillateur, et T était la largeur l'intervalle de temps considéré ($T = \ddot{t} - t'$).

Ce potentiel de forme quadratique en x et \dot{x} . Il est alors possible de faire un calcul classique pour retrouver l'expression du propagateur quantique. En effet, l'équation de lagrange pour ce système physique s'écrit comme :

$$\ddot{x}_d + w^2 x_d = 0 \quad (1.28)$$

sa solution est de la forme :

$$x_d(t) = A \sin wt + B \cos wt \quad (1.29)$$

en tenant compte des conditions sur $x_d(t)$,

$$x_d(t') = x' \text{ et } x_d(\ddot{t}') = \dot{x}' \quad (1.30)$$

il vient :

$$x_d(t) = \frac{\ddot{x} \cos wt' - x' \cos w\ddot{t}}{\sin wT} \sin wt + \frac{x' \sin w\ddot{t} - \ddot{x} \sin wt'}{\sin wT} \cos wt \quad (1.31)$$

l'action classique correspondante est :

$$S_{cl} = \int_{t'}^{\ddot{t}} L(x, \dot{x}) dt \quad (1.32)$$

où $L = \frac{M}{2}\dot{x}^2 - \frac{1}{2}Mw^2x^2$

nous pouvons montrer aisément que cette action se réduit à :

$$S_{cl} = \frac{Mw}{2 \sin wT} [\dot{x}_{cl}'' \ddot{x}_{cl} - \dot{x}'_{cl} x'_{cl}]$$

nous obtenons après remplacement,

$$S_{cl} = \frac{Mw}{2\hbar \sin wT} ((x'^2 + \ddot{x}^2) \cos wT - 2x'\ddot{x}) \quad (1.33)$$

la constante de normalisation du propagateur est donnée par la formule de Van-Vleck-Pauli-Morette :

$$A = \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial x' \partial \ddot{x}}}$$

ou encore,

$$A = \sqrt{\frac{Mw}{2i\pi\hbar \sin wT}}$$

et le propagateur devient :

$$K(\ddot{x}, \ddot{t}; x', t') = \sqrt{\frac{Mw}{2i\pi\hbar \sin wT}} \exp\left(\frac{i Mw}{2\hbar^2 \sin wT} ((x'^2 + \ddot{x}^2) \cos wT - 2x'\ddot{x})\right) \quad (1.34)$$

Nous remarquons que les propagateurs classique et quantique sont identiques dans le cas de l'oscillateur harmonique pur.

1.4.1 Calcul du spectre des énergies

Partons de la définition du propagateur .

$$K(\ddot{x}, \ddot{t} ; x', t') = \langle \ddot{x} | \exp(-iT H / \hbar) | x' \rangle$$

en injectant la relation des fermetures relatives aux états propres de l'hamiltonien H du système .

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \text{ et } \sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \quad (1.35)$$

il vient

$$K(\ddot{x}, \ddot{t} ; x', t') = \sum_n \psi_n(\ddot{x}) \psi_n^*(x') \exp(-iT E_n / \hbar) \quad (1.36)$$

Si nous posons $\ddot{x}=x' = x$ dans l'expression du propagateur, et nous intégrons sur la variable x , il vient :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} K(x, \ddot{t} ; x, t') dx = \sum_n \exp(-iT E_n / \hbar) \quad (1.37)$$

En calculant une seconde fois, l'intégrale ci-dessus, avec $K(\ddot{x}, \ddot{t} ; x', t')$ donné par l'équation (1.34), il vient,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-iT E_n / \hbar) = \frac{1}{2i \sin\left(\frac{\omega T}{2}\right)}$$

ou encore,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-iT E_n / \hbar) = \frac{1}{\exp\left(\frac{i\omega T}{2}\right) - \exp\left(-\frac{i\omega T}{2}\right)} \quad (1.38)$$

nous savons d'autre part, que :

$$\frac{1}{1 - \exp(-iwT)} = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-inwT) \quad (1.39)$$

nous obtenons alors,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-iT E_n / \hbar) = \exp\left(-\frac{iwT}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-inwT) \quad (1.40)$$

d'où,

$$E_n = \hbar w \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (1.41)$$

C'est le résultat que nous obtenons habituellement par la mécanique quantique ondulatoire.

1.4.2 Recherche des fonctions d'onde

Posons $\ddot{t} = T$ et $t' = 0$, et remplaçons $\sin wT$ et $\cos wT$ par leur équivalent exponentiel,

$$K(\ddot{x}, T; x', 0) = \sqrt{\frac{Mw}{\hbar\pi}} \exp\left(-\frac{iwT}{2}\right) (1 - \exp(-2iwT))^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{Mw}{\hbar} \left[-\frac{1 - \exp(-2iwT)}{2(1 - \exp(-2iwT))} (x'^2 + \ddot{x}^2) + 2x'\ddot{x} \frac{\exp(-2iwT)}{(1 - \exp(-2iwT))}\right]\right\} \quad (1.42)$$

en utilisant les développements suivants :

$$(1 - x)^{-1/2} = 1 + \frac{x}{2} + \dots; \quad (1 - x)^{-1} = 1 + x + \dots$$

nous obtenons :

$$\begin{aligned}
K(\ddot{x}, T ; x', 0) &= \sqrt{\frac{Mw}{\hbar\pi}} \exp\left(-\frac{Mw}{2\hbar}(x'^2 + \ddot{x}^2)\right) \exp\left(-\frac{iwT}{2}\right) \\
&+ \sqrt{\frac{Mw}{\hbar\pi}} \frac{2Mw}{\hbar} x' \ddot{x} \exp\left(-\frac{Mw}{2\hbar}(x'^2 + \ddot{x}^2)\right) \exp\left(-\frac{3iwT}{2}\right) \\
&+ \frac{1}{2x'^2} \sqrt{\frac{Mw}{\hbar\pi}} \left(\frac{2Mw\ddot{x}^2}{\hbar} - 1\right) \left(\frac{2Mwx'^2}{\hbar} - 1\right) \\
&\exp\left(-\frac{Mw}{2\hbar}(x'^2 + \ddot{x}^2)\right) \exp\left(-\frac{5iwT}{2}\right) + \dots
\end{aligned} \tag{1.43}$$

sachant que

$$K(\ddot{x}, T ; x', 0) = \sum_n \psi_n(\ddot{x}) \psi_n^*(x') \exp(-iT E_n / \hbar)$$

nous pouvons tirer par identification,

$$\psi_0(x) = \left(\frac{Mw}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{Mw}{2\hbar}x^2\right)$$

$$\psi_1(x) = \left(\frac{Mw}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2Mw}{\hbar}} x \exp\left(-\frac{Mw}{2\hbar}x^2\right)$$

$$\psi_2(x) = \left(\frac{Mw}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2Mw}{\hbar}x^2 - 1\right) \exp\left(-\frac{Mw}{2\hbar}x^2\right)$$

Si nous tenons compte des ordres élevés de développement, nous obtiendrons sans difficulté les fonctions d'onde pour $n = 3, 4, \dots$

Ces fonctions d'onde coïncident avec celles qu'on obtient via la mécanique quantique standard, et par d'autres techniques de calcul.

$$\psi_n(\ddot{x}) = \left(\frac{Mw}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} H_n \left(\sqrt{\frac{Mw}{\hbar}} x\right) \exp\left(-\frac{Mw}{2\hbar}x^2\right) \tag{1.44}$$

où les $H_n(x)$ sont les polynômes d'Hermite.

Chapitre 2

Calcul du spectre des énergies d'un potentiel à trois corps, par la méthode variationnelle de Kleinert

2.1 Introduction

Le formalisme de Feynman qui constitue une formulation intégrale de la mécanique quantique, connaît pratiquement les mêmes difficultés que connaissent les autres formalismes de la M.Q. Ces difficultés résident dans la résolution de problèmes où interviennent des potentiels phénoménologiques de formes compliquées. Une panoplie de méthodes d'approximation plus ou moins performantes ont été proposées à cet effet. Nous appliquerons, ici, une méthode approchée développée par Kleinert, pour calculer le spectre des énergies d'un système physique comportant trois particules de même masse.

2.2 Le choix du système de coordonnées dans l'étude

d'un problème à trois corps

Considérons le cas de trois particules de même masse M en interaction. Le potentiel les décrivant, est donné par :

$$V(x_1, x_2, x_3) = \sum_{i=1}^3 \left(A_{2i} (x_1 - x_2)^{2i} + B_{2i} [(x_2 - x_3) + (x_1 - x_3)]^{2i} \right) \quad (2.1)$$

Le passage aux coordonnées de Jacobi [19] :

$$\begin{aligned} R &= \frac{1}{3} (x_1 + x_2 + x_3) \\ x &= \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 - x_2) \\ y &= \frac{1}{\sqrt{6}} (x_1 + x_2 - 2x_3) \end{aligned} \quad (2.2)$$

nous permet de réécrire le potentiel précédent (2.1), sous la forme suivante :

$$V(x, y) = \sum_{i=1}^3 (\alpha_{2i} x^{2i} + \beta_{2i} y^{2i}) \quad (2.3)$$

où $\alpha_{2i} = 2^i A_{2i}$ et $\beta_{2i} = 2^i B_{2i}$

2.3 Application de la méthode d'approximation de Feynman-Kleinert au problème à trois corps

Kleinert [23, 22] a proposé une méthode basée sur un principe variationnel pour la détermination de tout le spectre d'énergie du système. Pour un potentiel de type oscillateur anharmonique, il est possible de déterminer l'énergie de ses états excités, par le calcul d'une valeur moyenne optimisée en utilisant comme fonctions d'essai celles de l'oscillateur harmonique.

Soit A l'action du système considéré

$$A[x] = \int_0^{\hbar\beta} \left(\frac{1}{2} M \dot{x}^2 + \frac{1}{2} M \dot{y}^2 + V(x, y) \right) d\tau \quad (2.4)$$

où $\beta = \frac{1}{k_B T}$

séparons cette action en deux parties $A_{\Omega_x, \Omega_y}^{x_0, y_0}$ et $A_{int}^{x_0, y_0}$:

$$\text{où} \quad A_{\Omega_x, \Omega_y}^{x_0, y_0} = \int_0^{\hbar\beta} \frac{1}{2} \left(M \dot{x}^2 + M \dot{y}^2 + \Omega_x^2 (x - x_0)^2 + \Omega_y^2 (y - y_0)^2 \right) d\tau \quad (2.5)$$

est l'action centrée autour de couple (x_0, y_0) ,

$$\text{et} \quad A_{int}^{x_0, y_0} = \int_0^{\hbar\beta} \left(-\frac{1}{2} \Omega_x^2 (x - x_0)^2 - \frac{1}{2} \Omega_y^2 (y - y_0)^2 + V(x, y) \right) d\tau \quad (2.6)$$

L'énergie de n-ème état excité s'écrira comme :

$$E_{n_x, n_y} = \langle n_x \ n_y | A | n_x \ n_y \rangle = \langle n_x \ n_y | A_{\Omega_x, \Omega_y}^{x_0, y_0} | n_x \ n_y \rangle + \langle n_x \ n_y | A_{int}^{x_0, y_0} | n_x \ n_y \rangle \quad (2.7)$$

Parmi les valeurs des pulsations Ω_x et Ω_y nous choisirons celles qui rendent l'énergie E_{n_x, n_y} optimale, soient $\Omega_{x \ opt}$ et $\Omega_{y \ opt}$ ces valeurs.

De plus, la forme analytique de la classe de potentiels donnée par (2.3) fait que la plus grande contribution à la valeur d'énergie provient du terme correspondant au couple (x_0, y_0) nul. Il vient alors,

$$E_{n_x, n_y} = \hbar \Omega_{x \ opt} \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar \Omega_{y \ opt} \left(n_y + \frac{1}{2} \right) + \langle n_x \ n_y | A_{int}^{x_0, y_0} | n_x \ n_y \rangle \quad (2.8)$$

La contribution des termes non-couplés du potentiel, sont faciles à traiter. La seule difficulté peut provenir des termes couplés. Nous avons pour surmonter cette difficulté, utilisé un traitement perturbatif dont la validité exige que le terme couplé soit petit devant les autres termes ; ceci nous permet de l'écrire comme le produit de deux termes indépendants. Il en découle :

$$\langle n_x n_y | x^2 y^2 | n_x n_y \rangle \simeq \langle n_x | x^2 | n_x \rangle \langle n_y | y^2 | n_y \rangle \quad (2.9)$$

Les valeurs moyennes apparaissant dans l'expression précédente sont données par [22] :

$$\langle x^{2i} \rangle_{\Omega_x}^{(n_x)} = \frac{\hbar^i}{(M \Omega_x)^i} n_x 2i \quad (2.10)$$

et

$$\langle y^{2i} \rangle_{\Omega_y}^{(n_y)} = \frac{\hbar^i}{(M \Omega_y)^i} n_y 2i \quad (2.11)$$

où les coefficients n_{2i} ont été calculés jusqu'aux grandes valeurs de i [24].

L'équation (2.8) devient alors :

$$E_{n_x, n_y} = \hbar \Omega_x \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar \Omega_y \left(n_y + \frac{1}{2} \right) + \sum_{i=1}^3 \left(\alpha_{2i} \frac{\hbar^i}{(M \Omega_x)^i} n_x 2i + \beta_{2i} \frac{\hbar^i}{(M \Omega_y)^i} n_y 2i \right) \quad (2.12)$$

Les valeurs de $\Omega_x \text{ opt}$ et $\Omega_y \text{ opt}$ s'obtiennent numériquement à partir de la résolution des équations :

$$\frac{\partial E_{n_x, n_y}}{\partial \Omega_x} = 0 \quad (2.13)$$

et

$$\frac{\partial E_{n_x, n_y}}{\partial \Omega_y} = 0 \quad (2.14)$$

Quant à l'énergie libre approchée, à une température donnée T , elle sera donnée par :

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln(Z_{app}) \quad (2.15)$$

où

$$Z_{app} = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta E_{n_x, n_y}) \quad (2.16)$$

est la fonction de partition approchée, β étant l'inverse de la température donné par : $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

2.4 Résolution du problème par la méthode des potentiels quasi-exactement solubles (Q.E.S)

L'équation de Schrodinger qui gouverne la dynamique du système est (pour $M = \hbar = 1$) :

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_3^2} + V(x_1, x_2, x_3) \psi(x_1, x_2, x_3) = E \psi(x_1, x_2, x_3) \quad (2.17)$$

en utilisant les coordonnées de Jacobi (R, x, y) relatives aux à x_1, x_2, x_3 , et en travaillant dans le système du centre de masse, l'équation (2.17) devient :

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + V(x, y) \Psi(x, y) = E \Psi(x, y) \quad (2.18)$$

où le potentiel $V(x, y)$ a été défini précédemment.

Il est clair que l'équation (2.18) n'admet pas toujours des solutions exactes. Il est toutefois possible d'obtenir de bonnes estimations pour l'énergie E en utilisant des méthodes d'approximation comme la méthode de Ritz pour ne citer que la plus connue d'entre elles. La méthode de Ritz nous servira comme test pour apprécier la

qualité des résultats que nous allons obtenir par la méthode des potentiels Q.E.S, En effet, la technique des potentiels quasi-exactement solubles conduit à des fonctions d'onde et à des énergies exactes pourvu que les paramètres a_{2i} et b_{2i} vérifient certaines contraintes.

Choisissons par l'équation (2.18) une fonction d'onde d'essai de la forme :

$$\Psi_{n_x, n_y} = N \exp(f(x) + g(y)) \quad (2.19)$$

où

$$f(x) = -\alpha_1 x^4 + \beta x^2 + n_x \ln x \quad (2.20)$$

$$g(y) = -\alpha_2 y^4 + \phi y^2 + n_y \ln y \quad (2.21)$$

et N étant la constante de normalisation de Ψ_{n_x, n_y} .

Il est facile de voir que :

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi_{n_x, n_y}}{\partial x^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi_{n_x, n_y}}{\partial y^2} = -\frac{1}{2} \left[(f')^2 + f'' + (g')^2 + g'' \right] \Psi_{n_x, n_y} \quad (2.22)$$

Le membre de droite de l'équation ci-dessus, s'identifie au terme $[E - V(x, y)] \Psi_{n_x, n_y}$ apparaissant dans l'équation (2.18), et s'écrit :

$$\begin{aligned} & -\frac{n_y(n_y - 1)}{2y^2} - \frac{n_x(n_x - 1)}{2x^2} - \phi(1 + 2n_y) - \beta(1 + 2n_x) \\ & + (4\alpha_1 n_x + 6\alpha_1 - 2\beta^2) x^2 + 8\alpha_1 \beta x^4 - 8\alpha_1^2 x^6 \\ & + (4\alpha_2 n_y + 6\alpha_2 - 2\phi^2) y^2 + 8\alpha_2 \phi y^4 - 8\alpha_2^2 y^6 \end{aligned} \quad (2.23)$$

En comparant les équations (2.18) et (2.23), nous arrivons aux contraintes suivantes :

$$\begin{aligned}
 b_4 + 8\phi\alpha_2 &= 0 & a_4 + 8\beta\alpha_1 &= 0 \\
 b_6 - 8\alpha_2^2 &= 0; & a_6 - 8\alpha_1^2 &= 0 \\
 b_2 + 6\alpha_2 + 4n_y\alpha_2 - 2\phi^2 &= 0; & a_2 + 6\alpha_1 + 4n_x\alpha_1 - 2\beta^2 &= 0
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

Nous remarquons que les paramètres a_4, b_4, a_6 et b_6 sont libres alors que les deux paramètres restants, a_2 et b_2 dépendent des paramètres libres et des nombres quantiques n_x et n_y . Les paramètres apparaissant dans l'expression de la fonction d'essai Ψ_{n_x, n_y} sont donnés par :

$$\alpha_1 = \sqrt{\frac{a_6}{8}}; \quad \alpha_2 = \sqrt{\frac{b_6}{8}}; \quad \beta = \frac{-a_4}{\sqrt{8a_6}}; \quad \phi = \frac{-b_4}{\sqrt{8b_6}} \tag{2.25}$$

Les signes de β et ϕ assurent la normalisation de la fonction d'onde $\Psi_{n_x, n_y}(x, y)$.

L'étude de certaines grandeurs physiques comme la densité de particules, exige la connaissance exacte de la fonction d'onde à basses températures; ainsi la détermination de la constante de normalisation devient indispensable. Cette dernière est donnée par :

$$N_{0,0} = \frac{1}{2} \left(\frac{|\beta\phi|}{\alpha_1\alpha_2} \right)^{1/4} \sqrt{K_{1/4} \left(\frac{\beta^2}{4\alpha_1} \right) K_{1/4} \left(\frac{\phi^2}{4\alpha_2} \right)} \tag{2.26}$$

où $K_{1/4}(z)$ est la fonction de Kummer

Nous pouvons également identifier l'expression de l'énergie à partir de l'équation (2.23) :

$$E_{n_x, n_y} = -\beta(1 + 2n_x) - \phi(1 + 2n_y) \tag{2.27}$$

Cette forme pour l'énergie provient du fait que la forme du potentiel $V(x, y)$ est symétrique en x et y .

Lorsque les paramètres a_{2i} et b_{2i} sont quelconques et ne vérifient pas les conditions des équations (2.24), l'énergie E_{n_x, n_y} peut être obtenue à partir d'un traitement perturbatif du problème, en décomposant le potentiel $V(x, y)$ en une somme d'un

potentiel Q.E.S et d'un terme qui sera considéré comme une perturbation.

$$\begin{aligned}
 V(x, y) = & a_2 x^2 + (a_4)_{QES} x^4 + a_6 x^6 + b_2 y^2 + (b_4)_{QES} y^4 + b_6 y^6 \\
 & + \left((a_4)_{QES} - a_4 \right) x^4 + \left((b_4)_{QES} - b_4 \right) y^4
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

où $(a_4)_{Q.E.S}$ et $(b_4)_{Q.E.S}$ sont données par :

$$\begin{aligned}
 (a_4)_{QES} &= 8\alpha_1 \sqrt{\frac{1}{2} [a_2 + \alpha_1 (6 + 4n_x)]} \\
 (a_4)_{QES} &= 8\alpha_2 \sqrt{\frac{1}{2} [b_2 + \alpha_2 (6 + 4n_y)]}
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

L'énergie du système devient alors,

$$E_{n_x, n_y} = (E_{n_x, n_y})_{QES} + \Delta E_{n_x, n_y} \tag{2.30}$$

où $\Delta E_{n_x, n_y}$ et E_{n_x, n_y} représente respectivement la contribution des termes $(a_4 - (a_4)_{Q.E.S}) x^4$ et $(b_4 - (b_4)_{Q.E.S}) y^4$. La correction $\Delta E_{n_x, n_y}$ est donnée par :

$$\begin{aligned}
 \Delta E_{n_x, n_y} = & \frac{(a_4 - (a_4)_{QES}) \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 \varphi_{n_x}^*(x) \varphi_{n_x}(x) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{n_x}^*(x) \varphi_{n_x}(x) dx} \\
 & + \frac{(b_4 - (b_4)_{QES}) \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 \rho_{n_y}^*(y) \rho_{n_y}(y) dy}{\int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{n_y}^*(y) \rho_{n_y}(y) dy}
 \end{aligned} \tag{2.31}$$

où $\Psi_{n_x, n_y}(x, y) = \Phi_{n_x}(x) \rho_{n_y}(y)$ l'intégration de l'équation ci-dessus donne :

$$\Delta E_{n_x, n_y} = (a_4 - (a_4)_{QES}) I/J + (b_4 - (b_4)_{QES}) K/L$$

avec

$$I = (4\alpha_1)^{-\frac{2n_x+5}{4}} \Gamma\left(n_x + \frac{5}{2}\right) \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha_1}\right) D_{-n_x-\frac{5}{2}}\left(\frac{-\beta}{\sqrt{\alpha_1}}\right) \quad (2.33)$$

$$J = (4\alpha_1)^{-\frac{2n_x+1}{4}} \Gamma\left(n_x + \frac{1}{2}\right) \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha_1}\right) D_{-n_x-\frac{1}{2}}\left(\frac{-\beta}{\sqrt{\alpha_1}}\right) \quad (2.34)$$

$$K = (4\alpha_2)^{-\frac{2n_y+5}{4}} \Gamma\left(n_y + \frac{5}{2}\right) \exp\left(\frac{\phi^2}{4\alpha_2}\right) D_{-n_y-\frac{5}{2}}\left(\frac{-\phi}{\sqrt{\alpha_2}}\right) \quad (2.35)$$

$$L = (4\alpha_2)^{-\frac{2n_y+1}{4}} \Gamma\left(n_y + \frac{1}{2}\right) \exp\left(\frac{\phi^2}{4\alpha_2}\right) D_{-n_y-\frac{1}{2}}\left(\frac{-\phi}{\sqrt{\alpha_2}}\right) \quad (2.36)$$

où $\Gamma(z)$ est la fonction d'Euler. Les $D_\nu(x)$ sont quant à elles, les fonctions paraboliques cylindriques de Weber.

2.5 Résultats et discussions

Nous avons calculé par la méthode d'approximation de Feynman-Kleinert, et pour différentes valeurs des paramètres α_i et β_i , l'énergie des états excités et celle de l'état fondamental pour le potentiel donné par l'équation (2.3). Ces résultats sont consignés avec ceux donnés par littérature, dans le tableau ci-dessous. Nous constatons que nos résultats sont en parfaite adéquation avec ceux publiés par d'autres auteurs utilisant la méthode des potentiels QES [25]. Nous rappelons que cette technique donne des résultats très satisfaisants dans le cas où la contribution du terme couplé $x^p y^q$ est faible par rapport à celles des autres termes du potentiel $V(x, y)$.

a_2	a_4	a_6	b_2	b_4	b_6	E_{n_x, n_y}	$(E_{n_x, n_y})_{Ritz}$	$(E_{n_x, n_y})_{QES}$	(n_x, n_y)
1	1	0.1	0.5	1	0.1	1.7836	1.7837	1.7698	(0, 0)
1	1	0.1	0.5	1	0.1	3.8069	3.8069	3.7749	(0, 1)
1	1	0.1	0.5	1	0.1	3.9905	3.9905	3.9606	(1, 0)
1	1	0.1	0.5	1	0.1	6.0137	6.0138	5.9657	(1, 1)
1	2.5	0.5	1	3.5	0.8	2.4171	2.4171	2.3805	(0, 0)
1	2.5	0.5	1	3.5	0.8	5.5035	5.5036	5.4314	(1, 0)
1	2.5	0.5	1	3.5	0.8	5.2274	5.2275	5.1612	(0, 1)
1	2.5	0.5	1	3.5	0.8	8.3139	8.3139	8.2122	(1, 1)
0.5	3.2	1	0.4	3.6	1.2	2.3631	2.3631	2.3077	(0, 0)
0.5	3.2	1	0.4	3.6	1.2	5.3980	5.3980	5.3093	(1, 0)
0.5	3.2	1	0.4	3.6	1.2	5.3081	5.3031	5.2216	(0, 1)
0.5	3.2	1	0.4	3.6	1.2	8.3430	8.3430	8.2232	(1, 1)
0.5	0.2	0.1	0.4	0.6	0.2	1.4195	1.4195	1.4203	(0, 0)
0.5	0.2	0.1	0.4	0.6	0.2	2.9776	2.9776	3.0342	(1, 0)
0.5	0.2	0.1	0.4	0.6	0.2	4.8455	4.8455	4.9186	(0, 1)
5	0.1	0.001	4	0.2	0.002	3.0212	3.0213	3.0212	(1, 1)
5	0.1	0.001	4	0.2	0.002	5.9222	5.9222	5.9219	(0, 0)
5	0.1	0.001	4	0.2	0.002	6.2133	6.2134	6.2134	(1, 0)
5	0.1	0.001	4	0.2	0.002	9.1143	9.1143	9.1140	(0, 1)

TAB. 2.1 – Energies E_{n_x, n_y} pour quelques valeurs des nombres quantiques n_x et n_y . Nous avons posé $\hbar = M = 1$.

Chapitre 3

Etude par la méthode variationnelle et perturbative de Kleinert, d'un système de trois corps soumis à un potentiel complexe à symétrie PT

3.1 Introduction

De nombreuses méthodes de calcul ont été utilisées pour déterminer le spectre des énergies de potentiels complexes [26, 35]. Zafar [36] a suggéré un ansatz pour montrer que les énergies des états d'un potentiel complexe à symétrie PT, possède un spectre réel et positif. La méthode perturbative de Rayleigh-Schrödinger a été utilisée [37] dans le calcul de l'énergie de l'état fondamental d'un système physique décrit par un Hamiltonien cubique et complexe de la forme $H = p^2 + x^2 + igx^3$. Dans un autre travail, les niveaux d'énergie relatives aux potentiels complexes de

Hénon-Heiles, ont été calculés à un ordre de perturbation élevé [38].

Dans le formalisme des intégrales de Feynman [1], Il existe une méthode variationnelle appelée méthode de Feynman-Kleinert [23], qui présente des ressemblances formelles avec certaines méthodes de calcul appliquées dans le formalisme de Schrödinger. Kleinert [39, 22] a introduit dans cette méthode, des corrections afin de la rendre plus performante. Cette technique qui s'appuie sur un développement de la matrice densité sur la base des fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique, conduit à des résultats très satisfaisants dans le cas des potentiels anharmoniques [22].

Nous voulons montrer dans cette étude, qu'il est possible d'utiliser la technique de Feynman-Kleinert dans le but de calculer, avec une bonne précision, l'énergie de l'état fondamental relative à un système à trois particules, de même masse, soumises à un potentiel complexe à symétrie PT [24].

3.2 Méthode mathématique

Considérons la fonction de partition d'une particule de masse M , se mouvant dans un potentiel $V(x)$ à une température finie T .

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} e^{-\beta V_{eff,cl}(x)} \quad (3.1)$$

où le potentiel effectif classique $V_{eff,cl}$ rend compte de toutes les fluctuations quantiques [22] autour de la position moyenne \bar{x} dans l'intervalle de température $[0, \beta]$.

$$\bar{x} = \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} x(\tau) d\tau$$

avec $\tau = it$ et $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B étant la constante de Boltzmann.

Cette fonction de partition peut s'écrire, en outre, comme [22] :

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \int D(x) \delta(\bar{x} - x_0) \exp\left[-\frac{A[x]}{\hbar}\right] \quad (3.2)$$

où $A[x, y]$ est l'action euclidienne de la particule.

$$A[x] = \int_0^{\hbar\beta} \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2 + V[x(\tau)] \right] d\tau \quad (3.3)$$

En identifiant (3.1) à (3.3), nous obtenons :

$$V_{eff,cl}(x_0) = -\frac{1}{\beta} \ln \left(\int D(x) \delta(\bar{x} - x_0) \exp\left[-\frac{A[x]}{\hbar}\right] \right) \quad (3.4)$$

Il est cependant, impossible de calculer exactement $V_{eff,cl}$ pour n'importe quelle forme de $V(x)$. Nous pouvons en revanche, trouver une approximation au $N^{ième}$ ordre, $W_N(x_0)$, au potentiel $V_{eff,cl}(x_0)$. La fonction de partition correspondante Z_N est donnée par :

$$Z_N = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} e^{-\beta W_N(x_0)} \quad (3.5)$$

La meilleure approximation pour W_N est obtenue en décomposant l'action euclidienne $A[x]$ en une somme de deux termes :

$$A[x] = A^{\Omega, x_m}[x] + A_{int}[x] \quad (3.6)$$

$A^{\Omega, x_m}[x]$ étant une action d'essai, et $A_{int}[x]$ sera considérée comme une interaction. Elles sont données par :

$$A^{\Omega, x_m} [x] = \int_0^{\hbar\beta} \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2 + \frac{M}{2} \Omega^2 (x - x_m)^2 \right] d\tau \quad (3.7)$$

et

$$A_{int} [x] = \int_0^{\hbar\beta} \left[V(x) - \frac{M}{2} \Omega^2 (x - x_m)^2 \right] d\tau \quad (3.8)$$

où x_m dépend des extrémités x_a et x_b .

Considérons la matrice densité donnée par :

$$\rho(x_b, x_a) = \frac{1}{Z} \tilde{\rho}(x_b, x_a) \quad (3.9)$$

avec

$$\tilde{\rho}(x_b, x_a) = \int_{(x_a, 0) \rightsquigarrow (x_b, \hbar\beta)} D(x) \exp \left[-\frac{A[x]}{\hbar} \right] \quad (3.10)$$

en remplaçant $A[x]$ par son expression (3.6), et en développant (3.10) en termes de $A_{int}[x]$, nous obtenons :

$$\tilde{\rho}(x_b, x_a) = \tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a) \left[1 - \frac{1}{\hbar} \langle A_{int}[x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} + \frac{1}{2\hbar^2} \langle A_{int}^2[x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} - \dots \right] \quad (3.11)$$

où $\tilde{\rho}_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)$ est la densité relative à l'action d'essai $A^{\Omega, x_m}[x]$.

Les différentes valeurs moyennes apparaissant dans l'équation ci-dessus, ont été déjà calculées par Kleinert et al [39], et sont données par :

$$\langle A_{int}^n [x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega, x_m} = \frac{1}{\rho_0^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)} \prod_{l=1}^n \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau_l \int_{-\infty}^{+\infty} dz_l V_{int}(z_l + x_m) \right] \quad (3.12)$$

$$\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{n+1} \det a^2}} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{k, l=0}^n z_k a_{kl}^{-2} z_l \right)$$

a^2 étant une matrice carrée symétrique d'ordre $(n+1)$. Ses éléments s'obtiennent à partir des fonctions de Green $G^{\Omega, p}(\tau, \tau')$ de l'oscillateur harmonique [39, 22] :

$$a^2(\tau, \tau') \equiv \frac{\hbar}{M} G^{\Omega, p}(\tau, \tau') = \frac{\hbar}{2M\Omega} \frac{\cosh(\Omega(|\tau - \tau'| - \hbar\beta/2))}{\sinh(\hbar\beta\Omega/2)} \quad (3.13)$$

elle représente la largeur des fluctuations.

$\tilde{\rho}(x_b, x_a)$ peut s'écrire comme une série tronquée d'ordre N , en termes des cumulants $\langle A_{int}^n [x] \rangle_{x_b, x_a, c}^{\Omega, x_m}$.

$$\tilde{\rho}_N(x_b, x_a) = \tilde{\rho}_0(x_b, x_a) \exp \left[\sum_{n=1}^N \frac{(-1)^n}{n! \hbar^n} \langle A_{int}^n [x] \rangle_{x_b, x_a, c}^{\Omega, x_m} \right] \quad (3.14)$$

où le cumulant $\langle A_{int}^n [x] \rangle_{x_b, x_a, c}^{\Omega, x_m}$ est donné par :

$$\langle A_{int}^n [x] \rangle_{x_b, x_a, c}^{\Omega, x_m} = \langle A_{int}^n [x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega} - \left(\langle A_{int} [x] \rangle_{x_b, x_a}^{\Omega} \right)^n \quad (3.15)$$

L'expression ci-dessus dépend explicitement des deux paramètres Ω et x_m . En utilisant l'analogie avec la physique statistique classique,

$$\tilde{\rho}_{cl}(x) = (2\pi\hbar^2\beta/M)^{1/2} \exp[-\beta V(x)] \quad (3.16)$$

nous pouvons écrire une expression similaire pour $\tilde{\rho}(x_b, x_a)$:

$$\tilde{\rho}(x_b, x_a) = (2\pi\hbar^2\beta/M)^{1/2} \exp[-\beta V_{eff,cl}(x)] \quad (3.17)$$

nous pouvons ainsi obtenir pour le potentiel $V_{eff,cl}$, une approximation à l'ordre N à partir des équations (3.14) et (3.17).

$$\begin{aligned} W_N^{\Omega, x_m} = & \frac{1}{2\beta} \ln \left(\frac{\sinh(\hbar\beta\Omega)}{\hbar\beta\Omega} \right) - \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^N \frac{(-1)^n}{n!\hbar^n} \langle A_{int}^n[x] \rangle_{x_b, x_a, c}^{\Omega, x_m} \quad (3.18) \\ & + \frac{M\Omega}{2\hbar\beta \sinh(\hbar\beta\Omega)} \{ (\tilde{x}_b^2 + \tilde{x}_a^2) \coth(\hbar\beta\Omega) - 2\tilde{x}_b\tilde{x}_a \} \end{aligned}$$

avec

$$\tilde{x}(\tau) = x(\tau) - x_m \quad (3.19)$$

L'optimisation de $W_N^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)$ par rapport à Ω^2 et x_m ,

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

conduit aux valeurs optimales Ω_{opt}^2 et $x_{m\ opt}$ qui nous donnent la meilleure approximation pour $V_{eff,cl}(x_0)$ et par conséquent, une bonne estimation de l'énergie de l'état fondamental.

3.3 L'énergie de l'état fondamental d'un système à trois particules soumises à un potentiel complexe à symétrie PT

Le problème à N corps apparait dans divers domaines de la physique, et le cas le moins difficile à traiter analytiquement est celui de trois corps [40, 41, 19].

Considérons un système à trois particules soumises à un potentiel complexe à symétrie PT . Il a été maintes fois vérifié numériquement, que le spectre des énergies pour ce type de potentiels est réel et positif [26, 38].

Notons que l'opérateur de parité P , noté souvent π , agit comme : $\pi|p\rangle = |-p\rangle$ et $\pi|x\rangle = |-x\rangle$, alors que l'opérateur renversement du sens du temps agit quant à lui, comme :

$$T : p \longrightarrow -p, T : x \longrightarrow -x \text{ et } T : i \longrightarrow -i..$$

Choisissons pour illustrer notre étude, un potentiel de la forme :

$$V(x_1, x_2, x_3) = A_1 [(x_2 - x_3) + (x_1 - x_3)]^2 + A_2 (x_2 - x_1)^2$$

$$A_5 (x_2 - x_1)^{4m} + iA_3 (x_2 - x_1)^{2m-1} + iA_4 (x_2 - x_1)^{2m+1} \quad (3.20)$$

où m est un paramètre positif.

Le travail dans le centre de masse, et le choix des coordonnées de Jacobi,

$$R = \frac{1}{3}(x_1 + x_2 + x_3)$$

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2)$$

$$y = \frac{1}{\sqrt{6}}(x_1 + x_2 - 2x_3)$$

nous permettent de mettre le potentiel de départ sous une forme séparable :

$$V(x, y) = 6A_1 y^2 + 2A_2 x^2 + iB_3 x^{2m-1} + iB_4 x^{2m+1} + B_5 x^{4m} \quad (3.21)$$

avec $B_3 = A_3 2^{m-1/2}$, $B_4 = A_4 2^{m+1/2}$ et $B_5 = A_5 2^m$.

Ce dernier admet pour énergie de l'état fondamental,

$$E_0 = \sqrt{3A_1} + E_{0x}$$

Le terme E_{0x} est la contribution en énergie, du potentiel partiel :

$$V(x) = 2A_2x^2 + iB_3x^{2m-1} + iB_4x^{2m+1} + B_5x^{4m} \quad (3.22)$$

L'étude du cas $m = 1$, nous permettra de confirmer que l'énergie relative à un potentiel complexe à symétrie PT est effectivement réelle et positive. En effet, en posant $m = 1$,

le potentiel $V(x)$ devient :

$$V(x) = 2A_2x^2 + iB_3x + iB_4x^3 + B_5x^4 \quad (3.23)$$

En posant $\hbar = M = 1$, la méthode corrigée de Feynman-Kleinert nous permet de calculer l'approximant au second ordre du potentiel effectif classique $W_N^{\Omega, x_m}(x_b, x_a)$:

$$\begin{aligned} W_2^{\Omega, x_m}(x_a, x_a) &= \frac{1}{2\beta} \ln \left(\frac{\sinh(\beta\Omega)}{\beta\Omega} \right) + \frac{\Omega}{\beta \sinh(\beta\Omega)} x_a^2 \tanh(\beta\Omega/2) \\ &+ \frac{1}{\beta} \langle A_{int}[x] \rangle_{x_a, x_a}^{\Omega} - \frac{1}{2\beta} \langle A_{int}^2[x] \rangle_{x_a, x_a, c}^{\Omega} \end{aligned} \quad (3.24)$$

où

$$\langle A_{int}^2[x] \rangle_{x_a, x_a, c}^{\Omega, x_m} = \langle A_{int}^2[x] \rangle_{x_a, x_a}^{\Omega} - \left(\langle A_{int}[x] \rangle_{x_a, x_a}^{\Omega} \right)^2 \quad (3.25)$$

et avec

$$\langle A_{int}[x] \rangle_{x_b, x_a}^\Omega = \beta \left[\begin{array}{l} g_0 + (1/2) C_\beta^1 g_1 H_1(x) + (1/8) C_\beta^2 g_2 H_2(x) \\ + (1/48) C_\beta^3 g_3 H_3(x) + (1/384) C_\beta^4 g_4 H_4(x) \end{array} \right] \quad (3.26)$$

$H_n(x)$ étant le polynome d'Hermite d'ordre n , et les g_n sont des paramètres donnés par :

$$\begin{aligned} g_0 &= 2A_2 a_{00}^4 + 2A_2 x_m^2 + IB_3 x_m + 3IB_4 x_m a_{00}^4 + IB_4 x_m^3 + 3B_5 a_{00}^8 + 6B_5 x_m^2 a_{00}^4 \\ &\quad + B_5 x_m^4 - (1/2) \Omega^2 a_{00}^4 \\ g_1 &= 3I\sqrt{2}B_4 a_{00}^6 + 12\sqrt{2}B_5 x_m a_{00}^6 + 4\sqrt{2}A_2 x_m a_{00}^2 + I\sqrt{2}B_3 a_{00}^2 \\ &\quad + 3I\sqrt{2}B_4 x_m^2 a_{00}^2 + 4\sqrt{2}B_5 x_m^3 a_{00}^2 \\ g_2 &= 24B_5 a_{00}^8 + 8A_2 a_{00}^2 + 12IB_4 x_m a_{00}^4 - 2\Omega^2 a_{00}^4 + 24B_5 x_m^2 a_{00}^2 \\ g_3 &= 12I\sqrt{2}B_4 a_{00}^6 + 48\sqrt{2}B_5 x_m a_{00}^6 \\ g_4 &= 96B_5 a_{00}^8 \end{aligned}$$

alors que les coefficients C_β^n s'écrivent comme :

$$C_\beta^m = \frac{1}{2^n \cosh^n(\beta\Omega/2)} \sum_{k=1}^N C_k^m \frac{\sinh(\beta\Omega(n/2 - k))}{\beta\Omega(n/2 - k)}, \quad (3.27)$$

aux basses températures ($\beta \rightarrow \infty$), les C_β^n deviennent :

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} C_\beta^m = \begin{cases} 1 & n = 0 \\ \frac{2}{n\beta\Omega} & n > 0 \end{cases}$$

Le calcul des cumulants $\langle A_{int}[x] \rangle_{x_b, x_a}^\Omega$ est relativement simple par rapport à celui de $\langle A_{int}^2[x] \rangle_{x_b, x_a}^\Omega$. Les calculs nous donnent :

$$\begin{aligned}
\langle A_{int}^2 [x] \rangle_{x_b, x_a}^\Omega &= \int_0^{h\beta} d\tau_1 \int_0^{h\beta} d\tau_2 \{ A^2 [I_{22}(\tau_1, \tau_2) - I_2(\tau_1) I_2(\tau_2)] \\
&- B_3^2 [I_{11}(\tau_1, \tau_2) - I_1(\tau_1) I_1(\tau_2)] - B_4^2 [I_{33}(\tau_1, \tau_2) - I_3(\tau_1) I_3(\tau_2)] \\
&+ B_5^2 [I_{44}(\tau_1, \tau_2) - I_4(\tau_1) I_4(\tau_2)] - 2B_3 B_4 [I_{13}(\tau_1, \tau_2) - I_1(\tau_1) I_3(\tau_2)] \\
&+ 2IAB_4 [I_{23}(\tau_1, \tau_2) - I_2(\tau_1) I_3(\tau_2)] + 2IB_3 B_5 [I_{14}(\tau_1, \tau_2) - I_1(\tau_1) I_4(\tau_2)] \\
&+ 2AB_5 [I_{24}(\tau_1, \tau_2) - I_2(\tau_1) I_4(\tau_2)] + 2IB_4 B_5 [I_{34}(\tau_1, \tau_2) - I_3(\tau_1) I_4(\tau_2)] \\
&+ 2IB_3 A [I_{12}(\tau_1, \tau_2) - I_1(\tau_1) I_2(\tau_2)] \}
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Le coefficient A , les termes $I_m(\tau_k)$ et $I_{mn}(\tau_1, \tau_2)$ apparaissant dans l'équation (3.28) sont donnés par :

$$A = \frac{1}{2} (4A_2 - \Omega^2),$$

$$I_m(\tau_k) = (a_{00}^4 - a_{0k}^4)^m \frac{\partial^m}{\partial j^m} \exp \left[\frac{j^2 + 2x_a a_{0k} j}{2a_{00}^2 (a_{00}^4 - a_{0k}^4)} \right]_{j=0}, \quad k = 1 \text{ et } 2 \tag{3.29}$$

et

$$\begin{aligned}
I_{mn}(\tau_1, \tau_2) &= (-\det(a^2))^{m+n} \frac{\partial^m}{\partial j_1^m} \frac{\partial^n}{\partial j_2^n} \exp \left[\frac{F(j_1, j_2)}{2a_{00}^2 \det(a^2)} \right]_{j_1=j_2=0} \tag{3.30} \\
\text{avec } \det(a^2) &= a_{00}^6 + 2a_{01}^2 a_{02}^2 a_{12}^2 - a_{00}^2 (a_{01}^4 + a_{02}^4 + a_{12}^4)
\end{aligned}$$

où les fonctions génératrices $F(j_1, j_2)$ s'écrivent :

$$\begin{aligned}
F(j_1, j_2) &= a_{00}^4 (j_1^2 + j_2^2) - 2a_{00}^6 (a_{01}^2 j_1 + a_{02}^2 j_2) x_a \tag{3.31} \\
&+ 2a_{00}^2 (a_{12}^2 j_1 j_2 + (a_{01}^4 + a_{02}^4 + a_{12}^4) (a_{01}^2 j_1 + a_{02}^2 j_2) x_a) \\
&- (a_{01}^2 j_1 + a_{02}^2 j_2) (a_{01}^2 j_1 + a_{02}^2 j_2 + 4a_{01}^2 a_{02}^2 a_{12}^2 x_a)
\end{aligned}$$

La forme finale de $W_2^\Omega(x_a)$ nous permet d'arriver successivement à la densité $\tilde{\rho}_2^\Omega(x_a)$, à la fonction de partition Z_2 et enfin à l'énergie de l'état fondamental E_0 :

$$\tilde{\rho}_2^\Omega(x_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} \exp[-\beta W_2^\Omega(x_a)], \quad (3.32)$$

$$Z_2 = \int dx_a \tilde{\rho}_2^\Omega(x_a), \quad (3.33)$$

$$\text{et } E_0 = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{\beta} \ln Z_2 \right) \quad (3.34)$$

3.4 Résultats et discussions

L'énergie de l'état fondamental relative au potentiel PT symétrique (3.20) a été évaluée via la méthode corrigée de Feynman-Kleinert, pour différentes valeurs des paramètres A_i . Les résultats obtenus sont consignés dans le tableau 2, et comparés à ceux obtenus exactement par la méthode des potentiels Q.E.S [42, 43, 44, 25]. Notons que cette méthode nous permet d'évaluer exactement les énergies en imposant des conditions aux paramètres du potentiel étudié.

Nos résultats sont en bon accord avec les résultats exacts. Ceci s'explique par le fait que les corrections introduites dans notre travail, ont une forte influence sur le potentiel effectif classique W_N^{Ω, x_m} et par conséquent, sur l'énergie E_0 de l'état du fondamental, aux basses températures. Le fait que la variation ΔE_0 soit proportionnelle à $\Delta W_N^{\Omega, x_m}$, les mêmes effets seront plus prononcés sur la densité $\rho(x)$ et sur la fonction de partition Z , où les variations $\Delta \rho$ et ΔZ varient exponentiellement en fonction de $\Delta W_N^{\Omega, x_m}$.

$$\Delta \rho \sim \exp(-\beta \Delta W_N^\Omega) \text{ et } \Delta Z \sim \exp(-\beta \Delta W_N^\Omega).$$

A_2	A_1	A_3	A_4	E_{method}	E_{QES}
0.2	0.05	-0.031623	-0.00125	0.313122	0.31623
1	0.01	-0.01414	-0.00005	0.702614	0.70711
5	0.5	-1.58114	-0.125	1.568689	1.58114
10	3	-13.41641	-4.5	2.208198	2.23606
10^3	10	-447.2136	-50	22.34119	22.3606
10^4	30	-4242.6407	-450	70.69306	70.71068
10^5	200	-89442.72	$-2 \cdot 10^4$	223.5310	223.6068

TAB. 3.1 – Energie de l'état fondamental du potentiel (3.20), pour différentes valeurs des paramètres A_i

Chapitre 4

Calcul du propagateur relatif à un lagrangien comportant un terme accélération

4.1 Introduction

Le formalisme des intégrales fonctionnelles de Feynman constitue actuellement un outil puissant dans la résolution de problèmes posés dans divers domaines de la physique. Depuis 1948, année qui a connu l'avènement de cette troisième formulation de la mécanique quantique, de nombreuses techniques de calcul ont vu le jour. Nous pouvons citer parmi les plus connues, les transformations espace temps introduites pour la première fois en 1979 par Duru et Kleinert [3] dans la résolution du problème de l'atome d'hydrogène, l'approche polygonale [45], les méthodes faisant appel à la théorie des groupes [10], les méthodes variationnelles perturbatives, et non perturbatives [20], appliquées en physique statistique. Cette panoplie de techniques a rendu possible, l'étude théorique de nombreux systèmes quantiques multidimensionnels [22] dans une large gamme de systèmes de coordonnées [46].

Nous nous proposons dans ce chapitre, de calculer dans le cas unidimensionnel,

le propagateur relatif à un Lagrangien comportant un terme accélération. Ce type de problème apparaît dans l'étude du mouvement brownien et dans la modélisation de certains phénomènes de la physique biomédicale [47]. Nous considérons dans cette étude, un lagrangien relativement général par rapport à celui traité en 1993 par A. Chouchaoui [9] ; il est de la forme :

$$L = \frac{1}{2}K\ddot{x}^2 + \frac{1}{2}M\dot{x}^2 - \frac{1}{2}k x^2 \quad (4.1)$$

Le propagateur relatif à ce lagrangien sera mis sous la forme suivante :

$$K(x_b, v_b, \tau_b; x_a, v_a, \tau_a) = Cste \exp(-\varphi) \quad (4.2)$$

où nous avons posé $\hbar = 1$. *Cste* et φ sont respectivement, la constante de normalisation et la phase du propagateur.

Nous considérons dans notre étude que le temps est imaginaire pour que nos résultats puissent avoir une application directe en statistique quantique.

4.2 Calcul de la phase φ du propagateur

Après discrétisation de l'intervalle de temps $[\tau_a, \tau_b]$ en N intervalles de temps infinitésimaux tous de largeur ε , l'action partielle, S_N , relative au lagrangien L , dans l'intervalle de temps $\tau_b - \tau_a = N\varepsilon$ aura pour expression :

$$S_N = \varepsilon \sum_{j=1}^N \frac{K}{2} \left[\frac{x_{j+1} - 2x_j + x_{j-1}}{\varepsilon^2} \right]^2 + \varepsilon \sum_{j=1}^N \frac{M}{2} \left[\frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon} \right]^2 - \varepsilon \sum_{j=1}^N \frac{k}{2} x_j^2 \quad (4.3)$$

alors que le propagateur s'écrira comme :

$$\begin{aligned} K(x_b, v_b, \tau_b; x_a, v_a, \tau_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} A_N \int \cdots \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j e^{-S_N} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} (x_b, v_b, \tau_b / x_a, v_a, \tau_a) \end{aligned}$$

où A_N est une constante de normalisation, et $x_j = x(\tau_j)$ est la position de la particule à l'instant τ_j . Les coordonnées des points de départ et d'arrivée sont respectivement $x_a = x(\tau_0)$ et $x_b = x(\tau_N)$.

Après développement de S_N , et réarrangement de ses termes, il vient :

$$S_N = (x_0^2 + x_N^2) \left(\frac{K}{2} \varepsilon^{-3} + \frac{M}{2} \varepsilon^{-1} - \frac{k}{2} \right) + X^t P X - 2X^t Y \quad (4.4)$$

où X^t est le vecteur transposé du vecteur X de composantes x_i , ($i = 1, \dots, N-1$), et P est une matrice pentadiagonale d'ordre $N-1$ dont les éléments sont donnés par :

$$\begin{aligned} P_{11} &= P_{N-1, N-1} = \frac{5K}{2\varepsilon^3} + \frac{M}{2\varepsilon} - \frac{k}{2} \\ P_{j,j} &= 3K \varepsilon^{-3} + M \varepsilon^{-1} - \frac{k}{2} \quad 2 \leq j \leq N-2 \\ P_{j,j+1} &= P_{j+1,j} = -2K \varepsilon^{-3} - \frac{M}{2} \varepsilon^{-1} \\ P_{j,j+2} &= P_{j+2,j} = \frac{K}{2} \varepsilon^{-3} \end{aligned}$$

Les composantes du vecteur Y , sont :

$$\begin{aligned} Y_1 &= \left(K \varepsilon^{-3} + \frac{M}{2} \varepsilon^{-1} \right) x_0, & Y_2 &= \left(-\frac{K}{2} \varepsilon^{-3} x_0 \right) \\ Y_{N-2} &= -\frac{K}{2} \varepsilon^{-3} x_N, & Y_{N-1} &= \left(K \varepsilon^{-3} + \frac{M}{2} \varepsilon^{-1} \right) x_N \\ Y_j &= 0 & 3 \leq j \leq N-3 \end{aligned}$$

Il est facile de voir que le propagateur partiel K_N peut s'écrire comme :

$$K_N = \lim_{N \rightarrow \infty} A_N \int \cdots \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \exp \left(\left[(x_0^2 + x_N^2) \left(\frac{K}{2} \varepsilon^{-3} + \frac{m}{2} \varepsilon^{-1} - \frac{k}{2} \right) + X^t P X - 2X^t Y \right] \right) \quad (4.5)$$

L'intégrale ci-dessus se calcule aisément via la relation de Montroll [9]

$$\int \cdots \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \exp (- [X^t P X - 2X^t Y]) = \frac{[\pi]^{(N-1)/2}}{[Det P]^{1/2}} \exp (Y^t P^{-1} Y) \quad (4.6)$$

l'équation (4.5) devient :

$$K_N = A_N \frac{[\pi]^{(N-1)/2}}{[Det P]^{1/2}} \exp \left(\left[(x_0^2 + x_N^2) \left(\frac{K}{2} \varepsilon^{-3} + \frac{M}{2} \varepsilon^{-1} - \frac{k}{2} \right) + Y^t P^{-1} Y \right] \right) \quad (4.7)$$

Définissons un vecteur U à $(N - 1)$ composantes, tel que :

$$Y = P.U \quad (4.8)$$

avec $U(\tau_0) = x_0$ et $U(\tau_N) = x_N$. Ainsi, $Y^t P^{-1} Y$ se transforme en $Y^t U$ et l'argument de l'exponentielle en :

$$\begin{aligned} \varphi_N &= \left\{ (x_0^2 + x_N^2) \left(\frac{K}{2} \varepsilon^{-3} + \frac{M}{2} \varepsilon^{-1} - \frac{k}{2} \right) + u_1 Y_1 + u_2 Y_2 + u_{N-2} Y_{N-2} + u_{N-1} Y_{N-1} \right\} \\ &= \left\{ \begin{array}{l} \frac{K}{2} \varepsilon^{-3} (u_N^2 + u_{N-2} u_N - 2u_{N-1} u_N) + \frac{M}{2} \varepsilon^{-1} (u_N^2 - u_{N-1} u_N) \\ + \frac{K}{2} \varepsilon^{-3} (u_0^2 + u_2 u_0 - 2u_1 u_0) + \frac{M}{2} \varepsilon^{-1} (u_0^2 - u_1 u_0) - \varepsilon \frac{k}{2} (x_0^2 + x_N^2) \end{array} \right\} \end{aligned}$$

à la limite $N \rightarrow \infty$ ou $\varepsilon \rightarrow 0$, cet argument devient :

$$\varphi = \lim_{N \rightarrow \infty} \varphi_N = \left\{ \frac{K}{2} (\dot{u}_N \ddot{u}_N - \dot{u}_0 \ddot{u}_0 - u_N \ddot{u}_N + u_0 \ddot{u}_0) + \frac{M}{2} (\dot{u}_N u_N - \dot{u}_0 u_0) \right\} \quad (4.9)$$

Le calcul exact de cet argument passe par la détermination de $u(\tau)$ et de ses dérivées. Pour ce faire, écrivons la relation $Y = P.U$ au $k^{\text{ième}}$ ordre,

$$u_{k+2} P_{k+2,k} + u_{k+1} P_{k+1,k} + u_k P_{k,k} + u_{k-1} P_{k-1,k} + u_{k-2} P_{k-2,k} = Y_k \quad (4.10)$$

pour ϵ tendant vers *zéro*, l'équation ci-dessus se réduit à :

$$K u^{(4)} - M u^{(2)} - k u = 0 \quad (4.11)$$

sa solution est de la forme :

$$u(\tau) = \alpha_1 e^{-\omega_1 \tau} + \alpha_2 e^{\omega_1 \tau} + \alpha_3 e^{\omega_2 \tau} + \alpha_4 e^{-\omega_2 \tau} \quad (4.12)$$

où $\omega_1 = \frac{\sqrt{2}}{2K} \sqrt{(K(M - \sqrt{M^2 + 4K.k}))}$ et $\omega_2 = \frac{\sqrt{2}}{2K} \sqrt{(K(M + \sqrt{M^2 + 4K.k}))}$.

Les conditions sur la fonction $u(\tau)$ mènent au système d'équations suivant :

$$\begin{aligned} \alpha_1 e^{-\omega_1 \tau_a} + \alpha_2 e^{\omega_1 \tau_a} + \alpha_3 e^{\omega_2 \tau_a} + \alpha_4 e^{-\omega_2 \tau_a} &= x_a \\ \alpha_1 e^{-\omega_1 \tau_b} + \alpha_2 e^{\omega_1 \tau_b} + \alpha_3 e^{\omega_2 \tau_b} + \alpha_4 e^{-\omega_2 \tau_b} &= x_b \\ -\alpha_1 \omega_1 e^{-\omega_1 \tau_a} + \alpha_2 \omega_1 e^{\omega_1 \tau_a} + \alpha_3 \omega_2 e^{\omega_2 \tau_a} - \alpha_4 \omega_2 e^{-\omega_2 \tau_a} &= v_a \\ -\alpha_1 \omega_1 e^{-\omega_1 \tau_b} + \alpha_2 \omega_1 e^{\omega_1 \tau_b} + \alpha_3 \omega_2 e^{\omega_2 \tau_b} - \alpha_4 \omega_2 e^{-\omega_2 \tau_b} &= v_b \end{aligned}$$

sa résolution nous donne les constantes $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ et α_4 .

$$\alpha_1 = \frac{e^{\omega_1 \tau_a}}{\alpha} \left\{ \begin{array}{l} e^{\omega_1 \beta} [2\omega_2 v_b - 2x_b \omega_1 \omega_2 - 2\omega_2 v_a C_2 + 2x_a \omega_1 \omega_2 C_2 - 2x_a \omega_2^2 S_2 + 2\omega_1 v_a S_2] \\ + [2\omega_2 v_a - 2x_a \omega_1 \omega_2 - 2\omega_2 v_b C_2 + 2x_b \omega_1 \omega_2 C_2 + 2x_a \omega_2^2 S_2 - 2\omega_1 v_a S_2] \end{array} \right\}$$

$$\alpha_2 = \frac{e^{-\omega_1 \tau_a}}{\alpha} \left\{ \begin{array}{l} e^{-\omega_1 \beta} [2\omega_2 v_b + 2x_b \omega_1 \omega_2 - 2\omega_2 v_a C_2 - 2x_a \omega_1 \omega_2 C_2 - 2x_a \omega_2^2 S_2 - 2\omega_1 v_a S_2] \\ + [2\omega_2 v_a + 2x_a \omega_1 \omega_2 - 2\omega_2 v_b C_2 - 2x_b \omega_1 \omega_2 C_2 + 2x_b \omega_2^2 S_2 + 2\omega_1 v_b S_2] \end{array} \right\}$$

$$\alpha_3 = \frac{e^{-\omega_2 \tau_b}}{\alpha} \left\{ \begin{array}{l} e^{-\omega_2 \beta} [2\omega_1 v_b + 2x_b \omega_1 \omega_2 - 2\omega_1 v_a C_1 - 2x_a \omega_1 \omega_2 C_1 - 2x_a \omega_1^2 S_1 - 2\omega_2 v_a S_1] \\ + [2\omega_1 v_a + 2x_a \omega_1 \omega_2 - 2\omega_1 v_b C_1 - 2x_b \omega_1 \omega_2 C_1 + 2x_b \omega_1^2 S_1 + 2\omega_2 v_b S_1] \end{array} \right\}$$

$$\alpha_4 = \frac{e^{\omega_2 \tau_b}}{\alpha} \left\{ \begin{array}{l} e^{\omega_2 \beta} [2\omega_1 v_b - 2x_b \omega_1 \omega_2 - 2\omega_1 v_a C_1 + 2x_a \omega_1 \omega_2 C_1 - 2x_a \omega_1^2 S_1 + 2\omega_2 v_a S_1] \\ + [2\omega_1 v_a - 2x_a \omega_1 \omega_2 - 2\omega_1 v_b C_1 + 2x_b \omega_1 \omega_2 C_1 + 2x_b \omega_1^2 S_1 - 2\omega_2 v_b S_1] \end{array} \right\}$$

avec $S_1 = \sinh(\omega_1 \beta)$, $S_2 = \sinh(\omega_2 \beta)$, $C_1 = \cosh(\omega_1 \beta)$, $C_2 = \cosh(\omega_2 \beta)$,
 $\beta = \tau_b - \tau_a$, $\tau_a = \tau_0$, et $\tau_b = \tau_N$

$$\text{et} \quad \alpha = 4 [(\omega_1^2 + \omega_2^2) S_1 S_2 - 2\omega_1 \omega_2 (C_1 C_2 - 1)]$$

Ainsi, nous obtenons après remplacement de chaque terme par son expression dans l'équation (4.9), une expression longue et compliquée pour la phase φ . Nous nous contentons ici, de la donner pour les deux cas spéciaux suivants :

a) ω_1 et ω_2 tendant vers la même pulsation ω ,

$$\varphi_1 = \left\{ \frac{\omega}{S^2 - \omega^2 \beta^2} \left[\begin{array}{l} (SC - \omega\beta)(v_b^2 + v_a^2) - 2(S - C\omega\beta)v_b v_a - \omega(S^2 + \omega^2 \beta^2)(v_b x_b - v_a x_a) + \\ 2\omega S(v_b x_a - v_a x_b) + \omega^2(SC + \omega\beta)(x_b^2 + v_a^2) - 2\omega^2(S + C\omega\beta)v_b x_a \end{array} \right] \right\} \quad (4.13)$$

b) $\omega_1 \rightarrow 0$ et $\omega_2 = \omega$ ce qui correspond à une énergie potentielle nulle ($k = 0$).

$$\varphi_2 = \left\{ \frac{\omega}{2S\beta\omega^2(1-\rho)} \left[\begin{array}{l} ((2\omega Sx_b - \rho\omega\beta Sv_b)(S - \omega\beta) + (2\omega Sx_a - \rho\omega\beta Sv_a)(S - \omega\beta)) - \\ ((\omega^2\rho\beta x_b - 2v_b)(S - \omega\beta)(C - 1) + (\omega^2\rho\beta x_a - 2v_a)(S - \omega\beta)(C - 1)) \end{array} \right] \right\} \quad (4.14)$$

4.3 Calcul classique de la phase φ

Les résultats précédents peuvent être retrouvés via un traitement classique. En effet, Il est possible de montrer que pour la forme quadratique du lagrangien étudié, la phase φ est identique à l'action classique S_{cl} .

Soit γ le chemin physique décrit par les positions \bar{x} et correspondant à l'action S . Considérons maintenant, un chemin γ' très voisin de γ , dont les positions s'écrivent :

$$x = \bar{x} + \xi \quad (4.15)$$

où ξ est une variation infinitésimale de la position. La variation du lagrangien entre ces deux chemins voisins, s'écrit dans notre cas comme :

$$\delta L = K x^{(2)}\xi^{(2)} + M x^{(1)}\xi^{(1)} - k \xi x \quad (4.16)$$

ceci correspond à la variation δS de l'action,

$$\delta S = \int_{\tau_a}^{\tau_b} (K x^{(2)}\xi^{(2)} + M x^{(1)}\xi^{(1)} - k \xi x) d\tau \quad (4.17)$$

Le principe de moindre action, $\delta S = 0$, conduit à l'équation :

$$K x^{(4)} - M x^{(2)} - k x = 0 \quad (4.18)$$

Notons que cette équation est identique à l'équation (4.11) donnant $u(t)$. Si x_{cl}

est solution de l'équation ci-dessus, l'action du système,

$$S_{cl} = \int_{\tau_a}^{\tau_b} \left(\frac{1}{2} K \dot{x}_{cl}^2 + \frac{1}{2} M \dot{x}_{cl}^2 - \frac{1}{2} k x_{cl}^2 \right) d\tau \quad (4.19)$$

aura pour expression :

$$S_{cl} = \frac{K}{2} (x_b^{(2)} x_b^{(1)} - x_a^{(2)} x_a^{(1)} + x_a^{(3)} x_a - x_b^{(3)} x_b) + \frac{M}{2} (x_b^{(1)} x_b - x_a^{(1)} x_a) \quad (4.20)$$

nous pouvons remarquer que cette expression est identique à celle de l'action φ obtenue par un calcul quantique. Le calcul de la phase φ , quantiquement, est souvent difficile à réaliser. Ainsi, il est préférable dans le cas d'un lagrangien de forme quadratique en $x^{(2)}$, $x^{(1)}$ et x , de calculer l'action classiquement.

4.4 Calcul de la constante de normalisation du propagateur

La détermination de la constante de normalisation, exige le calcul du déterminant de la matrice pentadiagonale P . Cette tâche qui est loin d'être aisée, exige beaucoup d'adresse et de dextérité. L'absence du terme " énergie potentielle" dans l'expression du lagrangien, a permis à A. Chouchaoui et al [9] de passer par un changement d'espace de configuration, d'une matrice pentadiagonale à une matrice tridiagonale relativement facile à manier. Dans notre étude, le terme " énergie potentielle" existe et le passage à une matrice tridiagonale est par conséquent, très difficile à réaliser.

Ecrivons tout d'abord, une relation de récurrence [48] entre les déterminants de différents ordres de la matrice pentadiagonale P .

$$H_j = C (H_{j-1} - 2A^2 H_{j-3} + A^4 H_{j-5}) + A^2 (H_{j-1} + 2A^2 H_{j-3} - A^4 H_{j-5}) - B^2 (H_{j-2} - 2A H_{j-3} + A^2 H_{j-4}) \quad (4.21)$$

où $A = \frac{K}{2} \varepsilon^{-3}$, $B = 2K \varepsilon^{-3} - \frac{M}{2} \varepsilon^{-1}$ et $C = 3K \varepsilon^{-3} + M \varepsilon^{-1} - \frac{k}{2}$.

posons $H_j = A^j \Psi_{j+2}$, l'équation (4.21) devient :

$$\psi_{j+2} = \frac{C}{A} (\psi_{j+1} - 2\psi_{j-1} + \psi_{j-3}) + (\psi_j + \psi_{j-2} - \psi_{j-4}) - \frac{B^2}{A^2} (\psi_j - 2\psi_{j-1} + \psi_{j-2})$$

avec,

$$\frac{B^2}{A^2} = 16 + \frac{M^2}{K^2} \varepsilon^4 + \frac{8M}{K} \varepsilon^2$$

$$\text{et } \frac{C}{A} = 6 + \frac{2M}{K} - \frac{k}{K} \varepsilon^3$$

en réarrangeant les termes de l'équation ci-dessus et en faisant tendre ε vers zéro, il vient :

$$\Psi^{(6)} + 2 \lambda^2 \Psi^{(4)} - \gamma \Psi^{(2)} = 0 \quad (4.22)$$

avec $\lambda^2 = \frac{M}{K}$ et $\gamma = \left(\frac{M^2}{K^2} - \frac{k}{K} \right)$.

Cette équation admet comme solution générale,

$$\psi(\tau) = C'_1 + C'_2 \tau + C'_3 \exp(-w_1 \tau) + C'_4 \exp(w_1 \tau) + C_5 \exp(-w_2 \tau) + C_6 \exp(w_2 \tau)$$

où w_1 et w_2 sont données par :

$$\omega_1 = \frac{\sqrt{2}}{2K} \sqrt{\left(K \left(m - \sqrt{m^2 + 4K.k} \right) \right)}$$

et .

$$\omega_2 = \frac{\sqrt{2}}{2K} \sqrt{\left(K \left(m + \sqrt{m^2 + 4K.k} \right) \right)}$$

en utilisant les conditions sur le déterminant H_j ,

$$H_0 = H_{-1} = H_{-2} = 0$$

la fonction $\psi(\tau)$ doit vérifier alors, les conditions suivantes :

$$\psi_0 = \psi_1 = \psi_2 = 0 \text{ où } \psi_i = \psi(\tau_i)$$

Les relations ci-dessus nous permettent d'évaluer $\psi(\tau)$, $\psi^{(1)}(\tau)$ et $\psi^{(2)}(\tau)$ à l'origine. Nous obtenons après calcul,

$$\psi(0) = \psi^{(1)}(0) = \psi^{(2)}(0) = 0.$$

D'autre part, le calcul des déterminants H_j aux ordres 1, 2, 3 et 4, nous permet de montrer que :

$$\psi^{(3)}(0) = \psi^{(5)}(0) = \psi^{(6)}(0) = 0 \text{ et } \psi^{(4)}(0) \neq 0.$$

Ces conditions nous permettent de calculer les constantes C_i et d'arriver à la forme suivante pour $\Psi(\tau)$.

$$\Psi(\tau) = (-2 w_1^2 (1 - \cosh(w_2 \tau)) + 2 w_2^2 (1 - \cosh(w_1 \tau)) / (w_1^2 w_2^2 (w_2^2 - w_1^2))$$

cette expression peut également s'écrire comme :

$$\Psi(\tau) = \frac{(w_1^2 + w_2^2) \sinh(w_1 \tau) \sinh(w_2 \tau) - 2w_1 w_2 (\cosh(w_1 \tau) \cosh(w_2 \tau) - 1)}{w_1 w_2 (w_2^2 - w_1^2)^2}$$

comme le déterminant de la matrice P s'écrit en fonction de $\psi(\tau)$,

$$\det P = A^N \psi_{N+2}$$

il vient,

$$\det P = A^N \frac{(w_1^2 + w_2^2) \sinh(w_1 \beta) \sinh(w_2 \beta) - 2w_1 w_2 (\cosh(w_1 \beta) \cosh(w_2 \beta) - 1)}{w_1 w_2 (w_2^2 - w_1^2)^2}$$

où β , w_1 et w_2 ont été définis précédemment.

sachant que la constante de normalisation du propagateur est donnée par :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} A_N \frac{[\pi]^{(N-1)/2}}{[Det P]^{1/2}} = \frac{1}{2\pi} \frac{\sqrt{w_1 w_2 (w_2^2 - w_1^2)^2}}{\sqrt{u}} \quad (4.23)$$

il vient finalement,

$$K(x_b, v_b, \tau_b; x_a, v_a, \tau_a) = \frac{1}{2\pi} \frac{\sqrt{w_1 w_2 (w_2^2 - w_1^2)^2}}{\sqrt{u}} \exp(-\varphi)$$

où $u = (w_1^2 + w_2^2) \sinh(w_1 \beta) \sinh(w_2 \beta) - 2w_1 w_2 (\cosh(w_1 \beta) \cosh(w_2 \beta) - 1)$

où l'argument φ est donné par l'équation (4.9).

4.5 Cas particuliers

4.5.1 Cas du lagrangien $L = \frac{1}{2}K\ddot{x}^2 + \frac{1}{2}M\dot{x}^2$.

Ceci correspond au cas où la constante k est nulle ($w_1 \rightarrow 0$ et $w_2 = w$). L'argument φ_2 du propagateur sera donné par l'équation (4.14),

alors que sa constante de normalisation s'obtient en calculant la limite de l'expression (4.23) lorsque $\omega_1 \rightarrow 0$.

Il vient alors,

$$K(x_b, v_b, \tau_b; x_a, v_a, \tau_a) = \frac{w^2}{2\pi\sqrt{w\beta S - 2(C-1)}} \exp(-\varphi_2)$$

cette expression est similaire à celle donnée dans la référence [9].

4.5.2 Cas du lagrangien $L = \frac{1}{2}K\ddot{x}^2$

Dans ce cas, $m = 0$ et $k = 0$, le propagateur s'identifie à la fonction de distribution relative à un mouvement brownien [1, 49].

4.6 Conclusion

Le propagateur relatif à un lagrangien donné par l'équation (4.1), a été calculé moyennant une méthode purement algébrique. L'expression obtenue est exactement identique à celle calculée par H. Kleinert [47]. Nous avons montré en outre, que pour $k = 0$, la forme obtenue est identique à celle calculée par A. Chouchaoui [9]. Enfin, pour $m = 0$, le propagateur s'identifie à la fonction de distribution décrivant un mouvement brownien.

Conclusion générale

Cette thèse comporte trois travaux sur l'application des intégrales de chemin de Feynman, dans la résolution de problèmes de la mécanique quantique non relativiste.

Le premier étant la généralisation de la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert au calcul du spectre des énergies d'un système physique à trois particules de même masse, en interaction. Nous avons tout d'abord ramené, en utilisant les coordonnées de Jacobi, ce problème à celui d'une particule se mouvant dans un potentiel bidimensionnel. L'énergie du nième état excité a été calculée à partir de la valeur moyenne de l'action du système, optimisée par rapport aux composantes, Ω_x et Ω_y , de la fréquence d'essai d'un oscillateur harmonique à deux dimensions. Nous avons obtenu pour quelques valeurs du couple (n_x, n_y) , des résultats qui sont en bon accord avec ceux donnés par la méthode variationnelle de Ritz et par la technique des potentiels Q.E.S. Cette méthode ne donne toutefois, de très bons résultats que lorsque les termes non couplés du potentiel étudié, sont prédominants par rapport aux termes couplés.

Le second travail, avait pour but le calcul de l'énergie de l'état fondamental d'un système physique à trois corps, soumis à un potentiel complexe à symétrie PT. La technique utilisée consiste tout d'abord, à mettre le potentiel de départ, via les coordonnées de Jacobi, sous une forme maniable. Une fois cette étape franchie, nous séparons l'action du système en deux parties : une première partie relative au potentiel d'essai, et une seconde, considérée comme interaction. Le potentiel effectif, $V_{eff, cl}$ correspondant sera approché par un potentiel effectif W_N , d'ordre N , obtenu

par un développement de la matrice densité sur la base des fonctions d'onde d'un oscillateur harmonique d'essai de fréquence Ω . Nous nous sommes contentés dans le développement de l'action, d'un nombre limité de termes à cause des difficultés qui surgissent dans le calcul des cumulants d'ordres supérieurs. La détermination du potentiel effectif approché nous a permis d'extraire plusieurs grandeurs physiques notamment l'énergie de l'état fondamental E_0 .

Cette méthode introduit en effet, des corrections sous forme de cumulants, qui nous permettent d'approcher au mieux, le potentiel effectif classique exact, et arriver par voie de conséquence, à une estimation meilleure de l'énergie E_0 . Ces mêmes effets améliorent sensiblement la qualité des résultats relatifs à la fonction de partition et à la fonction densité, aux basses températures.

Quant au troisième travail, il concerne la détermination de l'expression du propagateur relatif à un lagrangien comportant un terme accélération. Nous rencontrons ce type de lagrangien dans la modélisation mathématique de phénomènes physiques se produisant en biologie, et dans l'étude du mouvement brownien.

Nous avons développé l'action et rassemblé ses termes de manière à faire apparaître une matrice P , pentadiagonale et de dimension infinie. Le calcul de la phase φ du propagateur conduit à la résolution d'une équation différentielle du quatrième ordre, facile à réaliser. Cependant, la détermination de la constante de normalisation exige le calcul du déterminant de la matrice P qui est loin d'être une tâche facile. C'est en exploitant la relation de récurrence existant entre les déterminants de différents ordres, établie par J. Monterde et H. Ugai, que nous avons, par un changement de variable judicieux, pu ramener le calcul du déterminant de P à la résolution d'une équation différentielle du sixième ordre. Les conditions sur les déterminants d'ordres -2, -1, 0, 1, 2, 3 et 4 nous ont permis d'arriver à l'expression du déterminant de P , et arriver enfin, à l'expression de la constante de normalisation.

La méthode polygonale appliquée à la détermination analytique de l'expression d'un propagateur, est une technique élégante qui exige beaucoup de patience et de dextérité dans le développement des calculs. Cette méthode devient cependant,

lourde et difficile à appliquer lorsque le lagrangien comporte des dérivées d'ordres supérieurs de la variable position. Dans pareils cas, il est préférable de changer d'espace de configuration ou de faire appel aux méthodes basées sur un calcul approché.

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. Roepstroff, *Path integrals Approach to Quantum Physics*, (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1994).
- [16] Mark Swanson, *Path Integrals and Quantum Processes* (Academic Press, New York, 1992).
- [17] E. Nelson, *J. Math. Phys.* 5(1964) 332.
- [18] L. Chetouani, L. Guechi and T. F. Hammann, *Phys. Lett.A* 204 (1995) 79-8b.
- [19] A. Chouchaoui, *Annals of physics* 312 (2004) 431-440.
- [20] H. Boukabcha, A. Diaf and A. Chouchaoui, *Acta Physica Polonica B*, vol 40 (2009) 15-23.
- [21] A.O. Barut and I. H. Duru, *Phys. Rep.* 172 (1989)1.
- [22] H. Kleinert, *Path integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics and Financial Markets* (World Scientific, Singapore, 2004).
- [23] R. P. Feynman, H. Kleinert, *Phys. Rev. A* 34 (6) (1986) 5080.
- [24] A. Grigahcène, *Thèse de Magister*, USTHB, 1999.
- [25] F. Chafa et al., *Ann. Phys.* 322(2007) 1034-1042
- [26] C. M. Bender and S. Boettcher, *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) 5243.
- [27] M. Znojil, *Phys.Lett. A* **259** (1999) 220.
- [28] F. Fernandez, R. Gardiola, J. Ros and M. Znojil. *J. Phys. A* **31** (1998).
- [29] F. Pham and E. Delabaere, *Phys.Lett. A* **250** (1998) 29.
- [30] C. M. Bender, G.V. Dunne and P. N. Meisinger, *Phys. Lett. A* **252** (1999) 272.
- [31] B. Bagchi and R. Roychoudhury, *J. Phys. A : Math.Gen.* **33** (2000) L1-L3.
- [32] A. Mostafazadeh, *J. Math. Phys.* **43** (2002) 205.
- [33] C. M. Bender, S. Boettcher, H.F. Jones and P. N. Meisinger, *Phys.Lett. A* **291** (2001) 197.

-
- [34] K.C. Shin, *Comm. Math. Phys.* **229** (2002) 543
- [35] F. Cannata, G. Junker, J. Trost, *Phys.Lett. A* **246** (1998) 219.
- [36] A. Zafar, *Phys. Lett. A* **360** (2006) 238
- [37] C. M. Bender, G. V. Dunne, *J. Math. Phys.* **40** (1999) 4616.
- [38] C. M. Bender, G.V. Dunne and P. N. Meisinger and M. Simsek, *Phys. Lett. A* **281** (2001) 311.
- [39] M. Bachman, H. Kleinert and A. Pelster, *Phys. Rev.* **A 60** (1999) 3429.
- [40] J.M. Richard, *Phys Reports.* **212** (1992)1.
- [41] D.C Khandekar and al, *Physics Reports.* **137** (1986)115.
- [42] G. P. Flessas, *Phys. Lett. A* **81** (1981) 17.
- [43] A. De Souza Dutra, *Phys. Lett. A* **131** (1988) 319.
- [44] A. Chouchaoui and A. Diaf, *Annals of physics* **306** (2003)232
- [45] Bin Kang Cheng, *J.Math.Phys.*25(1984)1804.
- [46] C. Groshe, F. Steiner, *Handbook of Feynman Path Integrals*, Springer, Berlin, 1998.
- [47] H. Kleinert, *J. Math. Phys.*27 (1986) 3003.
- [48] J. Monterde and H. Ugail, *Computer Aided Geometric Design* **23** (2006) 208-225.
- [49] R.P Feynman, *Rev. Mod. Phys.* 20(1948) 367.