

GENERALISATION DE LA METHODE VARIATIONNELLE DE KLEINERT A LA FAMILLE DE POTENTIELS $V(x) = \sum_i C_i x^{2i}$

Reçu le 17/04/2000 – Accepté le 08/11/2000

Résumé

La méthode variationnelle de Feynman-Kleinert a été initialement conçue pour le calcul des grandeurs de la physique statistique. Son développement par Kleinert a permis de déterminer le spectre d'énergie d'un système soumis à un potentiel $V(x) = x^2 + \lambda x^4$. Nous nous proposons dans ce travail de généraliser la méthode de Kleinert au cas de la famille de potentiel du type $V(x) = \sum_i C_i x^{2i}$. Cette classe de potentiels comprend notamment les potentiels doublement anharmoniques et celui de Varshni. Les résultats ainsi obtenus sont confrontés à ceux donnés par la littérature, et seront utilisés pour le calcul de l'énergie libre de Helmutz. Cette dernière sera comparée à celle donnée par la méthode de Feynman-Kleinert directe.

Mots clés: Mécanique quantique, oscillateurs anharmoniques, méthode variationnelle, énergie libre.

Abstract

The Kleinert variational method is applied to the potential $V(x) = \sum_i C_i x^{2i}$. The approximate energy spectrum and the free energies are obtained via the harmonic oscillator wave function at low temperatures. Our results are in good agreement with those given by literature.

Key words: Quantum mechanics, anharmonic oscillator, variational method, free energy.

A. GRIGAHCENE

Laboratoire d'Astronomie
C.R.A.A.G., B.P. 63 Bouzaréah
16340 Alger, Algérie

A. CHOUCHAOU

A. DIAF

Laboratoire de Physique Théorique
Institut de Physique, U.S.T.H.B.
B.P. 32, El Alia, Bab-Ezzouar
16111 Alger, Algérie

En mécanique quantique et mécanique quantique statistique, il se trouve que les potentiels dont l'équation de Schrödinger trouve une solution exacte sont rares. En effet, les potentiels de forme générale ne trouvent pas toujours une solution exacte. On a alors développé plusieurs méthodes de résolution approchée, généralement basées sur le principe perturbatif ou variationnel. Dans ce travail, nous nous proposons d'appliquer à une certaine classe de potentiels, une méthode variationnelle proposée par Kleinert [1], pour la détermination des énergies des états excités. Nous comparerons nos résultats à ceux donnés par la littérature.

Ces résultats seront utilisés pour la détermination de l'énergie libre d'un système soumis à ce type de potentiels; cette dernière sera enfin comparée à celle donnée par la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert [1, 2].

APPROXIMATION VARIATIONNELLE DE FEYNMAN-KLEINERT

Il existe une approximation dite de Feynman-Kleinert [2] permettant de trouver une limite supérieure optimale à l'énergie libre d'un système soumis à un potentiel donné. Considérons un potentiel du type:

$$V(x) = \sum_i C_i x^{2i} \quad (1)$$

Le potentiel " entaché d'erreur " [2] qui lui correspond, sera de la forme:

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

$$= \sum_i C_i \frac{1}{\sqrt{2\pi a^2(x_0)}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx'_0 (x'_0)^{2i} \exp \left[-\frac{(x'_0 - x_0)^2}{2a^2(x_0)} \right]$$

ملخص

استعملت في البداية، طريقة Feynman-Kleinert لتحديد مقادير الفيزيائية الإحصائية. استطاع Kleinert فيما بعد تطبيقها لتحديد طيف الطاقة لجملة فيزيائية خاضعة لكمون من النوع $V(x) = x^2 + \lambda x^4$. نحاول في هذا المقال تعميم طريقة Kleinert لصنف الكمونات المعرفة بالعلاقة $V(x) = \sum_i C_i x^{2i}$. وأدى حساب مقادير فيزيائية كالطاقة الحرة لـ Helmutz وطيف الطاقة للجملة المدروسة إلى نتائج جد مرضية.

الكلمات المفتاحية: الميكانيك الكوانتي، الطاقة الحرة، طريقة Feynman-Kleinert.

Après intégration, l'équation (2) devient [8]:

$$V_{a^2(x_0)}(x_0) = \sum_i C_i (2i)! (x_0)^{2i} \sum_k^i \frac{1}{(2(i-k))! i!} \left(-\frac{2a^2(x_0)}{x_0^2} \right)^k \quad (3)$$

avec:

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

La fréquence $\Omega^2(x_0)$ qui correspond à une énergie libre optimale est donnée par:

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

Dans notre cas:

$$\Omega^2(x_0) = \frac{2}{M} \sum_i C_i (2i)! (x_0)^{2i} \sum_{k=1}^i \frac{2^k k}{(2(i-k))! i!} \frac{a^{2(k-1)}(x_0)}{(x_0)^{2k}} \quad (4)$$

Le potentiel effectif classique sera donné, quant à lui, par:

$$W_1(x_0) = \frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{\sinh \left(\frac{1}{2} \beta \Omega \right)}{\left(\frac{1}{2} \beta \Omega \right)} \right] - \frac{\Omega^2(x_0) a^2(x_0)}{2} + V_{a^2(x_0)}(x_0) \quad (5)$$

Ceci nous permettra de trouver une limite supérieure F_1 à l'énergie libre de Helmholtz F :

$$F_1 = -\frac{1}{\beta} \ln Z_1 \quad (6)$$

$$\text{où: } Z_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta}} \exp(-\beta W_1(x_0)) \quad (7)$$

Dans les cas des potentiels doublement anharmoniques et de Varshni, l'évolution de l'écart W entre les potentiels effectifs classiques W_1 et le potentiel classique V_{Cl} ainsi que l'évolution de l'énergie libre approchée en fonction de la température ont été étudiées et représentées sur les figures (1-4).

DETERMINATION DE L'ENERGIE DES ETATS EXCITES PAR LA METHODE VARIATIONNELLE DE KLEINERT

La formulation quantique de la fonction de partition nous permet d'obtenir aux basses températures, l'énergie de l'état fondamental à partir de l'énergie libre du système.

Dans le but de généraliser la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert, pour la détermination des grandeurs statistiques, Kleinert propose une méthode basée [2, 3] elle aussi sur un principe variationnel pour la détermination de tout le spectre d'énergie du système.

Pour un potentiel $V(x)$ de type oscillateur anharmonique, il est possible de déterminer l'énergie de ses états excités par le calcul d'une valeur moyenne optimisée entre les fonctions d'ondes des états excités de l'oscillateur harmonique.

Soit A l'action du système considéré:

$$A[x] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{M}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right) \quad (8)$$

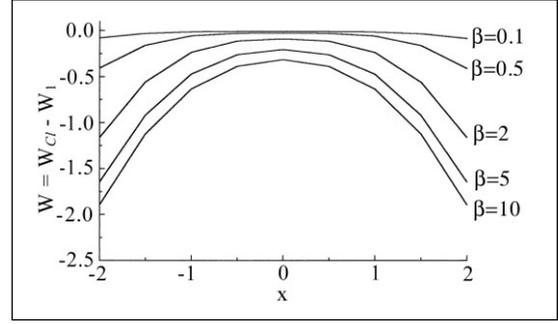


Figure 1: Représentation de la différence entre le potentiel classique et le potentiel effectif classique pour l'oscillateur anharmonique, $(\alpha, \beta) = (0.2, 0.2)$.

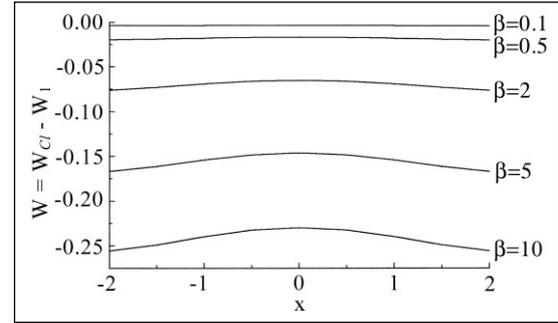


Figure 2: Représentation de la différence entre le potentiel classique et le potentiel effectif classique pour l'oscillateur anharmonique de Varshni, $(\lambda, g) = (0.05, -0.205)$.

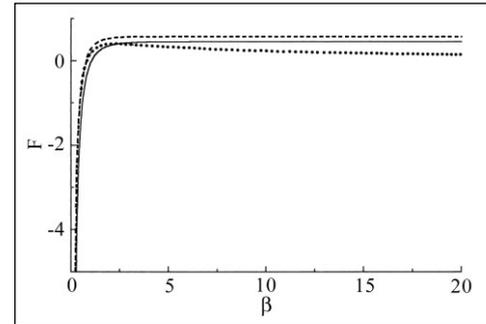


Figure 3: Représentation de l'énergie libre pour l'oscillateur doublement anharmonique, où (—) représente l'énergie libre calculée à partir du spectre trouvé, (----) l'énergie libre de Feynman - Kleinert et (.....) l'énergie libre classique, pour $(\alpha, \beta) = (0.2, 0.2)$.

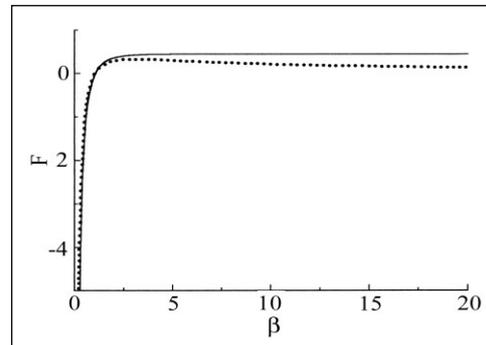


Figure 4: Représentation de l'énergie libre pour l'oscillateur anharmonique de Varshni, avec $(\lambda, g) = (0.05, -0.205)$, (même légende que la figure 3).

Nous scindons A en deux parties $A_{\Omega}^{x_0}$ et $A_{int}^{x_0}$, avec:

$$A_{\Omega}^{x_0}[x] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{M}{2} \dot{x}^2 + \frac{M}{2} \Omega^2 (x - x_0)^2 \right) \quad (9)$$

Cette action centrée autour de x_0 sera dite d'essai. La partie restante:

$$A_{int}^{x_0}[x] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(-\frac{M}{2} \Omega^2 (x - x_0)^2 + V(x) \right) \quad (10)$$

est à traiter comme interaction.

L'énergie du $n^{ième}$ état excité sera donnée par:

$$\begin{aligned} E_n &= \langle n | A | n \rangle \\ &= \langle n | A_{\Omega_{op}}^{x_0} | n \rangle + \langle n | A_{int}^{x_0} | n \rangle \end{aligned} \quad (11)$$

La parité de la classe de potentiels donnée par l'équation (1) fait que la plus grande contribution à la valeur de l'énergie provient du terme correspondant à x_0 nul.

Il vient alors:

$$E_n = \hbar\Omega_{op} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \langle n | A_{int}^{x_0} | n \rangle \quad (12)$$

La forme explicite de l'expression (12) fait intervenir le terme $\langle x^{2i} \rangle_{\Omega_{op}}^n$, ce dernier est donné par [2]:

$$\langle x^{2i} \rangle_{\Omega_{op}}^n = \frac{\hbar^i}{(M\Omega_{op})^i} n_{2i} \quad (13)$$

où les coefficients n_{2i} ont été calculés jusqu'aux grandes valeurs de i [4].

L'équation (11) devient, alors:

$$E_n = \left(\frac{\hbar\Omega_{op}}{2} \right) n_2 + \sum_{i=1}^N C_i \frac{\hbar^i}{(M\Omega_{op})^i} n_{2i} \quad (14)$$

La valeur de Ω_{op} s'obtient numériquement à partir de la résolution de l'équation:

$$\frac{\partial E_n}{\partial \Omega_{op}} = 0 \quad (15)$$

On tire par conséquent l'énergie libre approchée:

$$F_{E_n} = -\frac{1}{\beta} \ln(Z_{app}) \quad (16)$$

avec $Z_{app} = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta E_n)$, la fonction de partition approchée.

APPLICATIONS

Nous déterminons par cette méthode, le spectre d'énergie de deux potentiels, que nous confronterons aux résultats donnés par la littérature. Les spectres de ces potentiels seront utilisés pour le calcul de l'énergie libre des systèmes soumis à ces potentiels; cette dernière sera comparée à celle donnée par la méthode de Feynman-

Kleinert. Notons que dans tout ce qui suit nous avons posé $\hbar = M = 1$.

Les deux potentiels choisis se ramènent tous deux à la famille de potentiels:

$$V(x) = \sum_i C_i x^{2i}$$

Première application: Potentiel doublement anharmonique

Il est de la forme:

$$V(x) = \frac{1}{2} x^2 + \frac{1}{4} \alpha x^4 + \frac{1}{6} \beta x^6 \quad (17)$$

Les résultats relatifs à celui-ci seront consignés pour différentes valeurs du couple (α, β) dans le tableau 1.

α	β	n	E_n	Autres travaux [5]	
-0.1	1	2	4.001186	3.97504	
		10	29.63538	30.86	
		10	22.01836	22.27	
0.2	0.2	2	3.346264	3.3366	
		4	7.011749	7.0612	
		10	22.01836	22.27	
	1	2	4.150220	4.13	
		4	9.132680	9.21	
		10	30.35395	31.4	
2	1	2	4.896419	4.8887	
		10	34.219412	34.8	
		10	48.249851	48.88	
10	2	2	7.050462	7.0509	
		10	48.249851	48.88	
		10	7.960187	7.947	
	10	10	58.658332	58.96	
		100	1000	21.283591	21.190
		10	168.66798	164.7997	
1000	1000	2	31.346408	31.37977	
		10	221.66419	224.8	

Tableau 1: Spectre des énergies relatif au potentiel doublement anharmonique.

Deuxième application: Potentiel de Varshni

$$V(x) = \frac{1}{2} \left(x^2 + \frac{\lambda x^2}{1 + gx^2} \right) \quad (18)$$

C'est un potentiel largement utilisé en Physique des Lasers [6]. Les résultats obtenus pour différentes valeurs du couple (λ, g) sont donnés dans le tableau 2.

g	λ	n	E_n	Autres travaux
0.05	-0.205	0	0.900016	0.9000 [7]
		2	4.554697	4.5554 [7]
		5	10.18386	10.1791 [7]
0.1	-0.42	0	0.7994	0.8000 [7]
		2	4.246201	4.2016 [7]
		0.1	0	1.043153
	0.5	2	5.175392	5.18109 [6]
		0	1.203073	1.20303 [6]
		2	5.861016	5.8715 [6]
0.2	0.72	0	1.267191	1.2533 [7]
		2	6.329300	6.0068 [7]

Tableau 2: Spectre des énergies relatif au potentiel de Varshni.

DISCUSSION

Bien qu'elle soit basée sur un raisonnement simple, la méthode présentée dans cet article conduit, en effet, à la résolution d'une équation algébrique dont les résultats se comparent favorablement à ceux donnés par la littérature.

En général, pour les O.A.H., les résultats obtenus ne s'écartent des résultats exacts que pour les couplages forts, car, dans ces cas, assimiler les fonctions d'ondes du système anharmonique à celles de l'O.H., n'est plus valable (voir tableau 1).

Comme il est montré dans le dernier tableau, l'utilisation de cette approche pour déterminer le spectre d'un système soumis à un potentiel de formes assez compliquées, tel celui de Varshni, ne donne de bons résultats que pour les petites valeurs de n et les faibles couplages (Tab. 2). Ceci est dû en fait, à la nécessité de développer ces potentiels en série de Taylor pour pouvoir leur appliquer la méthode. Pour les grandes valeurs des paramètres de couplage, les calculs convergent rapidement vers les résultats escomptés dans le cas où un grand nombre de termes du développement est pris en compte. Néanmoins, pour les formes de potentiels où le développement en série est valable, la méthode donne d'assez bons résultats.

Il est à souligner, d'autre part, que le calcul de l'énergie libre via le spectre des énergies obtenu, est tout à fait satisfaisant, et donne des valeurs comparables, parfois même identiques à celles obtenues par la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert. Ceci est prévisible, du moment que les deux approximations sont dominées autour de la température zéro par la même énergie optimale E_0 .

Par contre pour les densités de particules, les résultats sont moins bon, car, pour cette grandeur, on a introduit des approximations à deux niveaux. On a approché l'énergie de différents états excités en premier, puis utiliser les fonctions d'ondes de l'O.H. comme fonctions propres dans le calcul de $\rho(x)$, ce qui affecte l'exactitude de nos résultats.

D'autre part, l'étude de l'écart (voir figures 1, 2) entre les potentiels classique et effectif classique obtenu à partir de la M.V.F.K., en fonction de la température, révèle une diminution progressive des effets quantiques, au fur et à mesure que le paramètre β diminue (*i.e.* la température augmente). Ce qui est en accord avec la réalité physique.

REFERENCES

- [1]- Kleinert H., "Systematic corrections to the variational calculation of the effective classical potential", *Phys. Lett. A*, Vol. 173, N°(4,5), (1992), pp. 332-342.
- [2]- Kleinert H., "Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics", (World Scientific, Singapore, (1995), pp. 262-267.
- [3]- Feynman R.P., Kleinert H., "Effective classical partition function", *Phys. Rev. A*, Vol. 34, N°6, (1986), pp. 5080-5084.
- [4]- Grigahcène A., Thèse de Magister, U.S.T.H.B., Alger, (1999), unpublished.
- [5]- Srivastava S. and Vishwamittar, "Energies of oscillators with mixed quartic and sextic anharmonicities", *Molec. Phys.*, Vol. 72, N°6, (1991), pp. 1285-1297.
- [6]- Mitra A.K., "On the interaction of the type $\lambda x^2/(1 + gx^2)$ ", *J. Math. Phys.* Vol. 19, N°10, (1978), pp.2018-2022.
- [7]- Pinaki Roy, Rajkumar Roychoudhury and Varshni Y.P., *J.Phys. A: Math. Gen.*, Vol. 21, N°4, (1988), p.1589.
- [8]- Gradshteyn I.S. and Ryzhik I.M., Table of Integrals, Series and Products, Academic Press Inc., New York, (1980). □