

530.1 / 2

جامعة جيجل  
المكتبة المركزية  
TH-081



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



UNIVERSITE DE JIJEL  
FACULTE DES SCIENCES  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



N° d'ordre :

Série :

530.1 / 2

MEMOIRE

présenté pour obtenir le diplôme de  
MAGISTER

Spécialité : Physique

Option : Physique Théorique

par

Sami Boudieb

THEME

Méthode variationnelle de Feynman-Kleinert discrétisée  
pour l'oscillateur anharmonique et le puits double



Soutenu le : 28/06/2006

Devant le Jury :

Président : Kh. Nouicer  
Rapporteur : A. Bounames  
Examineurs : M. Bentaiba  
F. Benslama  
M. Merad

Prof. Univ. Jijel  
MC Univ. Jijel  
Prof. Univ. Blida  
Prof. UM. Constantine  
MC C.U. Oum el Bouaghi

# Remerciements

*Tous mes remerciements vont tout premièrement à Dieu tout puissant pour la volonté, la santé et la patience qu'il ma donnés pour terminer cette thèse de magister.*

*Je tiens à remercier tout particulièrement celui sans qui, ce mémoire n'aurait jamais vu le jour, à savoir mon encadreur Mr Abdelhafid Bounames maître de conférences à l'université de Jijel. Que ce soit pour la proposition du sujet, ou au niveau du déroulement du travail, ses avis furent toujours remarquables et pertinents.*

*Je remercie, Mr. Kh. Nouicer professeur à l'université de Jijel pour l'honneur qu'il ma fait en acceptant de présider le jury.*

*Je remercie, également et sincèrement Mr. M. Bentaiba Professeur à l'université de Blida, Mr. A. Benslama Professeur à l'université Mentouri de Constantine et Mr. M. Merad Maitre de conférences au centre universitaire de Oum el-Bouaghi, pour l'intérêt qu'ils ont bien voulu porté à ce travail en acceptant de le juger.*

*Je remercie, également tous les enseignants de la post graduation de physique mathématique. En particulier Mr. Kh. Nouicer, professeur à l'université de Jijel, Mr. T. Boujedaa, professeur à l'université de Jijel, Mr. A. Bounames, maître de conférences à l'université de Jijel, Mr. Maâmache professeur à l'université de Sétif, Professeur L. Chetouani de l'université Mentouri de Constantine, A. Lecheheb et F. Benamira maitres de conférences de l'université Mentouri de Constantine.*

*Tous mes remerciements, à ma famille qui a toujours confiance en moi, et m' a toujours soutenu, et très spécialement à mes parents pour leur grande patience dont ils ont fait preuve le long de ma vie, et surtout durant mes études.*

*Je remercie, encore tous mes collègues de la promotion 2003/2004, et ceux de la promotion qui nous a précédé 2002/2003. Que ce mémoire conserve le souvenir de leurs amitiés.*

*En fin, je remercie tous mes proches...*

*Tous mes amis...*

*Et tous ceux qui m'ont connu.*

# Table des matières

Introduction générale	5
<b>1 Méthode variationnelle de Feynman-Kleinert</b>	<b>8</b>
1.1 Formulation intégrale de chemin	8
1.2 Méthode variationnelle de Feynman-Kleinert (F-K)	10
<b>2 Oscillateurs Anharmoniques</b>	<b>18</b>
2.1 Calcul Variationnel	19
2.1.1 Potentiel anharmonique	21
2.1.2 Potentiel puits double	22
2.2 Approche variationnelle pour les états excités	23
2.3 Amélioration systématique de l'approximation F-K	26
2.4 Application du développement variationnel perturbatif	28
2.5 Calcul des cumulants	30
2.6 L'oscillateur anharmonique à $T > 0$	33
2.7 Evaluation des intégrales de Feynman à $T = 0$	35
<b>3 Méthode Variationnelle de Feynman-Kleinert discrétisée</b>	<b>39</b>
3.1 Introduction	39
3.2 Méthode Variationnelle de Feynman-Kleinert discrétisée au premier ordre	40
3.2.1 Courbes et Discussion	40
3.3 Méthode Variationnelle de Feynman-Kleinert discrétisée au deuxième ordre	42
3.4 Méthode Variationnelle de Feynman-Kleinert discrétisée au troisième ordre	
3.4.1 Courbes et Discussion	44
Conclusion	48
Bibliographie	49
Annexe : Diagrammes de Feynman	50

# Introduction générale

L'intégrale de chemin offre un point de vue alternatif sur la mécanique quantique, et qui est devenu un outil essentiel à la compréhension de la théorie quantique des champs et ses applications, qui vont de la physique des interactions fondamentales, à la mécanique statistique des transitions de phase, ou aux propriétés des gaz quantiques[1].

L'histoire de l'intégrale de chemin a commencé avec les articles de Feynman [2] qui a formulé l'évolution quantique en terme de somme sur un ensemble de trajectoires pondérées par  $\exp(\frac{iS}{\hbar})$ , où  $S$  est l'action classique.

Du point de vue mathématique, l'intégrale de chemin liée à l'évolution quantique est souvent difficile à définir parce que  $\exp(\frac{iS}{\hbar})$  est de module unité pour tout chemin et donc la contribution variable des chemins est un phénomène d'interférence. Kac [3] remarqua que si l'on remplaçait l'opérateur d'évolution  $\exp(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar})$  par l'opérateur densité (opérateur statistique)  $\exp(-\beta\hat{H})$ , et donc l'équation de Schrödinger par une équation de type diffusion ou de la chaleur, on obtenait une intégrale de chemin avec une mesure positive, généralisant l'intégrale de Wiener, bien plus facile à définir rigoureusement. Cette méthode a été poursuivie par de nombreux auteurs qui consiste à définir l'intégrale de chemin correspondant à l'évolution quantique par prolongement analytique sur la variable de temps [4]. La version en temps imaginaire de l'intégrale de chemin (Feynman-Kac) permet d'étudier l'effet tunnel dans l'approximation semi-classique.

Dans ce travail, nous utiliserons l'intégrale de chemin dans une formulation dite euclidienne. Ceci signifie que nous calculons les éléments de matrice de l'opérateur densité quantique à l'équilibre thermique  $\exp(-\beta\hat{H})$  où  $\hat{H}$  est l'hamiltonien quantique et  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , plutôt que l'opérateur d'évolution quantique  $\exp(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar})$ . Un avantage de la formulation euclidienne est qu'il est en général plus facile de définir rigoureusement l'intégrale de chemin représentant l'opérateur  $\exp(-\beta\hat{H})$  que  $\exp(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar})$ .

L'opérateur densité, dont la trace est la fonction de partition quantique

$$Z(\beta) = Tr(\exp(-\beta\hat{H})),$$

décrit l'évolution en temps imaginaire, et les expressions explicites obtenues peuvent être déduite aussi pour l'opérateur d'évolution en temps réel, par prolongement analytique  $\beta \rightarrow it/\hbar$  ce qui nous permet de faire le lien avec la mécanique statistique quantique et classique.

D'autre part, si  $\hat{H}$  est borné inférieurement, l'opérateur densité permet de déterminer l'énergie  $E_0$  de l'état fondamental d'un système quantique

$$E_0 = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left[ -\frac{1}{\beta} \log \left\{ Tr(\exp(-\beta\hat{H})) \right\} \right].$$

L'inconvénient principal de la formulation euclidienne de la mécanique quantique est que les expressions classiques ont des formes quelque peu inhabituelles puisque le temps est imaginaire. Nous parlerons d'action et de Lagrangien euclidiens, ainsi que de temps euclidien. Enfin, l'intégrale euclidienne est directement liée aux processus de diffusion, par exemple l'équation de Fokker-planck a la forme d'une équation de Schrödinger en temps imaginaire.

La plupart des intégrales de chemins ne peuvent pas être calculées analytiquement. Par conséquent, il est nécessaire de développer des méthodes d'approximations qui nous permettent d'approcher le résultat exact avec la bonne précision.

D'autre part, plusieurs méthodes et techniques ont été développées pour évaluer les intégrales de chemins dans les différentes représentations et dans les différents systèmes de coordonnées. Parmi ces méthodes on peut citer la méthode des perturbations, la méthode semi-classique et la méthode variationnelle. Actuellement ces développements sont limités essentiellement à retrouver les résultats déjà existants. Néanmoins dans certains cas, les intégrales de chemins ont permis de réaliser des progrès dans l'explication de nouveaux phénomènes physiques, par exemple le phénomène de dissipation dans les systèmes quantiques (modèle de Caldeira-Leggett [5]).

La version intégrale de chemin de la méthode variationnelle a été développée pour la première fois par Feynman [6] dans son livre intitulé "Statistical mechanics" et en 1986, Feynman et Kleinert ont amélioré cette méthode [7]. Ensuite, Kleinert a développé cette méthode d'une manière considérable jusqu'au troisième ordre pour différents systèmes physiques aussi bien pour les couplages faibles que pour les couplages forts [8]. D'autre part, on signale aussi que R. Giachetti and V. Tognetti ont développé une version de la méthode variationnelle [9]. Parmi les applications qui ont été traitées par la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert, on cite l'oscillateur anharmonique, le potentiel de Coulomb [8, 10], l'oscillateur anharmonique plus la distribution de Dirac [11], la classe des potentiels de Morse [12] et la classe des potentiels harmoniques [13] obtenues par la méthode de factorisation et enfin l'oscillateur anharmonique  $x^6$  [14].

Un simple modèle des systèmes pour le processus d'effet tunnel, est le potentiel puits double symétrique avec deux minima ( $x = \pm a$ ), où "a" représente la largeur du puits double. A la limite  $a \rightarrow \infty$ , et pour une fréquence  $\omega$  fixe, la hauteur du barrière devient infini et le système se décompose en somme de deux potentiels indépendants d'un oscillateur harmonique séparé l'un de l'autre [8].

Le chapitre 1, contient un rappel de la construction intégrale de chemin euclidien associée à l'opérateur densité  $\exp(-\beta\hat{H})$  pour les Hamiltoniens de la forme  $H = \frac{P^2}{2M} + V(x)$ . Ensuite, nous exposerons la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert (F-K).

Dans le chapitre 2, on refait les calculs de la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert appliquée à l'oscillateur anharmonique puis au puits double jusqu'au troisième ordre. Les dia-

grammes de Feynman ont été calculés en utilisant le logiciel de calcul formel "Maple".

Dans le chapitre 3, qui constitue l'objet de ce mémoire, nous utilisons les résultats de Kleinert exposés au chapitre 2 pour appliquer la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert discretisée au potentiel puits double. La discretisation de la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert consiste en la décomposition de l'axe du temps en  $(N + 1)$  intervalles. Tous les calculs obtenus, en utilisant le logiciel "Maple", au premier et au troisième ordre de l'approximation sont fonction de  $N$ . Les expressions des diagrammes de Feynman et les corrections sont très longues (voir Annexe). Les résultats obtenus pour la première fois sont présentés sous forme de courbes commentées. Pour tester la validité de ces résultats, nous passons à la limite continue et nous retrouvons les résultats du chapitre 2.

Enfin, nous terminons ce mémoire par une conclusion.

# Chapitre 1

## Méthode variationnelle de Feynman-Kleinert

### 1.1 Formulation intégrale de chemin

Considérons un système quantique en contact avec un bain thermique à la température  $T$ . Les grandeurs thermodynamiques qui caractérisent ce système sont déterminées à partir de la fonction de partition définie par

$$Z = \text{Tr} \left[ \exp(-\beta \hat{H}) \right] = \sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right), \quad (1.1)$$

où  $k_B$  est la constante de Boltzmann. Cette expression est le prolongement analytique de la fonction de partition quantique au temps imaginaire

$$t = i\tau = i\hbar\beta \quad \text{avec} \quad \beta = (k_B T)^{-1}.$$

Dans la base locale  $|x\rangle$  la trace d'une quantité en mécanique quantique correspond à une intégrale sur les positions

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x | \exp(-\beta \hat{H}) | x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x_{t_b} | x_{t_a}) |_{t_b - t_a = -i\hbar\beta}. \quad (1.2)$$

Si on décompose le facteur de Boltzmann  $\exp(-\beta \hat{H})$  en  $(N+1)$  facteurs  $\exp(-\epsilon \frac{\hat{H}}{\hbar})$  multipliés l'un par l'autre, avec  $\epsilon = \frac{\beta\hbar}{N+1}$ , on trouve la fonction de partition dans la représentation intégrale de chemin

$$Z = \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \langle x_{n+1} | \exp\left(-\epsilon \frac{\hat{H}}{\hbar}\right) | x_n \rangle \\ \times \langle x_n | \exp\left(-\epsilon \frac{\hat{H}}{\hbar}\right) | x_{n-1} \rangle \times \dots \times \langle x_1 | \exp\left(-\epsilon \frac{\hat{H}}{\hbar}\right) | x_0 \rangle. \quad (1.3)$$

Dans cette dernière équation on a utilisé la relation de fermeture  $N$  fois.

Alors

$$\langle x_n | \exp(-\varepsilon \frac{\hat{H}}{\hbar}) | x_{n-1} \rangle \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{ip_n}{\hbar}(x_n - x_{n-1}) - \varepsilon \frac{\hat{H}(p_n, x_n)}{\hbar}\right), \quad (1.4)$$

et on peut écrire

$$Z \approx \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] \exp(-\frac{A_e^N}{\hbar}), \quad (1.5)$$

où

$$A_e^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left[ -ip_n(x_n - x_{n-1}) + \varepsilon \hat{H}(p_n, x_n) \right]. \quad (1.6)$$

A la limite continue,  $\varepsilon \rightarrow 0$ , on a

$$A_e[p, x] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau [-ip(\tau)\dot{x}(\tau) + H(p(\tau), x(\tau))], \quad (1.7)$$

et

$$Z = \int Dx \int \frac{Dp}{2\pi\hbar} \exp(-\frac{A_e[p, x]}{\hbar}). \quad (1.8)$$

Dans la suite, on considère le cas d'un potentiel  $V(x)$  indépendant du temps. L'intégration sur les impulsions conduit à la représentation

$$Z = \int_{x(0)=x(\hbar\beta)} Dx(\tau) \exp\left(\frac{-1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2(\tau) + V(x(\tau)) \right]\right). \quad (1.9)$$

On peut obtenir une représentation équivalente en considérant le chemin moyen

$$\bar{x} = \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau x(\tau), \quad (1.10)$$

ensuite on somme sur tous les chemins périodiques vérifiant la condition ci-dessus avec  $\bar{x}$  fixe et enfin on intègre sur tous les points  $\bar{x}$ . On trouve

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \int_{\bar{x}} Dx(\tau) \exp\left(\frac{-1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2(\tau) + V(x(\tau)) \right]\right). \quad (1.11)$$



Il découle de cette représentation que seules les trajectoires périodiques de période  $\beta$  contribuent à l'intégrale de chemin.

A la limite hautes températures,  $\hbar\beta \rightarrow 0$ , les chemins qui sont loin du point initial donnent une contribution négligeable à l'intégrale de chemin à cause de la très grande valeur de l'énergie cinétique.

On écrit alors,

$$V(x(\tau)) \approx V(x(0)) \approx V(\bar{x}), \quad (1.12)$$

ce qui donne

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \exp(-\beta V(\bar{x})) \int_{\bar{x}} Dx \exp\left(\frac{-1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2\right]\right), \quad (1.13)$$

en utilisant le propagateur de la particule libre, on obtient la fonction de partition classique suivante

$$Z = \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \exp(-\beta V(\bar{x})). \quad (1.14)$$

## 1.2 Méthode variationnelle de Feynman-Kleinert (F-K)

La périodicité des chemins

$$x(\tau) = x(\tau + \hbar\beta), \quad (1.15)$$

est mise en évidence si on développe chaque chemin en une série de Fourier [8]

$$x(\tau) = x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (x_m \exp(i\omega_m \tau) + x_m^* \exp(-i\omega_m \tau)), \quad (1.16)$$

où  $\omega_m$  la fréquence de Matsubara [8] donnée par la formule

$$\omega_m = \frac{2\pi m}{\hbar\beta}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (1.17)$$

et  $x_0$  est un point qui contribue avec la fréquence  $\omega_0 = 0$ .

En fonction des composantes  $x_m$ , la mesure d'intégration  $\oint Dx(\tau)$  est donnée par la formule

[8]

$$\oint Dx(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\left[\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}\right]^{\frac{1}{2}}} \prod_{m=1}^{\infty} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d \operatorname{Re} x_m d \operatorname{Im} x_m}{\left(\frac{\pi}{\beta M \omega^2}\right)} \right], \quad (1.18)$$

et la fonction de partition s'écrit alors sous la forme [8]

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\left[\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}\right]^{\frac{1}{2}}} \prod_{m=1}^{\infty} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\text{Re } x_m d\text{Im } x_m}{\left(\frac{\pi}{\beta M \omega_m^2}\right)} \right] \times \exp \left[ -M\beta \sum_{m=1}^{\infty} \omega_m^2 |x_m|^2 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau V(x(\tau)) \right] \quad (1.19)$$

Le but ultime est de pouvoir effectuer les intégrations sur les composantes  $x_m$  pour des  $m \neq 0$  et réduire ainsi la fonction de partition à une forme similaire à celle de la fonction de partition classique où le potentiel classique sera remplacé par un potentiel classique effectif

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\left[\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}\right]^{\frac{1}{2}}} \exp(-\beta V_{eff.cl}(x_0)). \quad (1.20)$$

Cette opération est généralement difficile sauf pour les potentiels quadratiques.

Pour contourner cette difficulté on fait appel en général aux méthodes d'approximations. Nous connaissons déjà les développements perturbatifs et semi classique qui sont biaisés par des graves problèmes de divergence pour toute valeur de la constante de couplage.

La méthode la plus efficace et qui converge rapidement (d'ailleurs de manière exponentielle) est la méthode variationnelle proposée par Feynman et développée par Kleinert [8].

L'idée principale dans cette approche est d'utiliser l'action de l'oscillateur harmonique de fréquence  $\Omega(x_0)$  centré au point  $x_0$  comme action d'essai.

L'action euclidienne dans ce cas est donnée par la formule

$$A_{\Omega}^{x_0} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 + \Omega^2(x_0) \frac{(x - x_0)^2}{2} \right]. \quad (1.21)$$

## Approche Variationnelle

D'une manière générale la fonction de partition classique effective d'un système est donnée

par la formule

$$\begin{aligned}
Z &= \exp\left(\frac{-F}{k_B T}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}} \prod_{m=1}^{\infty} \left[ \int \frac{dx_m^{\text{Re}} dx_m^{\text{Im}}}{\left(\frac{\pi k_B T}{M\omega_m^2}\right)} \right] \\
&\times \exp \left\{ \frac{-M}{k_B T} \sum_{m=1}^{\infty} \omega_m^2 |x_m|^2 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\frac{\hbar}{k_B T}} d\tau V \left( x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (x_m \exp(-i\omega_m \tau) + cc) \right) \right\} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}} \exp \left\{ \frac{-V_{\text{eff}}(x_0)}{k_B T} \right\}, \tag{1.22}
\end{aligned}$$

où  $V_{\text{eff}}(x_0)$  est le potentiel effectif qui dépend de la position moyenne  $x_0$  donnée par

$$x_0 = \frac{k_B T}{\hbar} \int_0^{\frac{\hbar}{k_B T}} d\tau x(\tau), \tag{1.23}$$

et  $\tau \in [0, \frac{1}{k_B T}]$  est le temps imaginaire.

### Le facteur de Boltzmann

Pour un oscillateur harmonique, on peut écrire

$$\begin{aligned}
&\exp \left\{ \frac{-M}{k_B T} \sum_{m=1}^{\infty} \omega_m^2 |x_m|^2 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\frac{\hbar}{k_B T}} d\tau V \left( x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (x_m \exp(-i\omega_m \tau) + cc) \right) \right\} \\
&= \exp \left\{ \frac{-M}{k_B T} \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \omega^2) |x_m|^2 \exp \left\{ \left( \frac{-m}{2k_B T} \right) \omega^2 x_0^2 \right\} \right\}, \tag{1.24}
\end{aligned}$$

ce qui donne une fonction de partition de la forme

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}} \prod_{m=1}^{\infty} \left[ \frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \omega^2} \right] \exp \left\{ -\left( \frac{M}{2k_B T} \right) \omega^2 x_0^2 \right\}, \tag{1.25}$$

et d'après la formule [8]

$$\prod_{m=1}^{\infty} \left[ \frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \omega^2} \right] = \frac{\frac{\hbar\omega}{2k_B T}}{\sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)}, \tag{1.26}$$

on trouve

$$V_{eff,Cl}(x_0) = k_B T \log \left[ \frac{\sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)}{\frac{\hbar\omega}{2k_B T}} \right] + V(x_0)$$

$$V_{eff,Cl}(x_0) = -k_B T \log \left( \frac{\hbar\omega}{k_B T} \right) + \frac{\hbar\omega}{2} + k_B T \log \left( 1 - \exp\left\{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right\} \right) + V(x_0). \quad (1.27)$$

A basse température ( $T \rightarrow 0$ ), on trouve

$$V_{eff,Cl}(x_0) \rightarrow \frac{\hbar\omega}{2} + V(x_0), \quad (1.28)$$

et

$$Z \rightarrow \exp\left\{\frac{-\hbar\omega}{2k_B T}\right\} \frac{\hbar\omega}{k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}} \exp\left(\frac{-M\omega^2 x_0^2}{2k_B T}\right)$$

$$= \exp\left(\frac{-\hbar\omega}{2k_B T}\right), \quad (1.29)$$

où  $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$  est l'énergie du niveau fondamental de l'oscillateur harmonique.

### Fonction de partition

Il n'est pas facile en mécanique quantique d'obtenir une forme exacte de  $V_{eff,Cl}(x_0)$  associé à un potentiel  $V(x)$  quelconque, mais il est possible de trouver une approximation à  $V_{eff,Cl}(x_0)$

Soit un ensemble d'oscillateurs, centrés autour du point  $x_0$ , qui décrit le chemin moyen et qui a une seule fréquence  $\Omega^2(x_0)$ .

Posons d'abord

$$Z_1 = \exp\left(-\frac{F_1}{k_B T}\right)$$

$$= \int Dx(\tau) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\frac{\hbar}{k_B T}} d\tau \frac{M}{2} (\dot{x}^2 + \Omega^2(x_0)(x - x_0)^2)\right) \exp\left(-\frac{L_1(x_0)}{k_B T}\right), \quad (1.30)$$

où  $F_1$  est l'énergie libre approximée au premier ordre.

après intégration sur  $x_m^{re}$  et  $x_m^{im}$  on trouve

$$Z_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}} \frac{\hbar\Omega(x_0)/2k_B T}{\sinh\left(\frac{\hbar\Omega(x_0)}{2k_B T}\right)} \exp\left(-\frac{L_1(x_0)}{k_B T}\right)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}} \exp\left(-\frac{W_1(x_0)}{k_B T}\right), \quad (1.31)$$

où

$$W_1(x_0) = k_B T \frac{\sinh\left(\frac{\hbar\Omega(x_0)}{2k_B T}\right)}{\frac{\hbar\Omega(x_0)}{2k_B T}} + L_1(x_0). \quad (1.32)$$

Notre but est d'essayer de calculer les deux fonctions d'essais :  $\Omega^2(x_0)$  et  $L_1(x_0)$ .

$W_1(x_0)$  est la borne supérieure optimale de  $V_{eff}(x_0)$  dans un large intervalle de température  $T$

$$W_1(x_0) = \max(V_{eff}(x_0)), \quad (1.33)$$

dans ce cas on a

$$Z_1 < Z \rightarrow F_1 > F, \quad (1.34)$$

d'où

$$W_1(x_0) \geq V_{eff,cl}(x_0). \quad (1.35)$$

Donc on peut écrire

$$Z = \int Dx \exp\left(\frac{-A}{\hbar}\right) = \int Dx \exp\left(\frac{-A_1}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{-1}{\hbar}(A - A_1)\right), \quad (1.36)$$

où  $A$  est l'action classique et  $A_1$  l'action approximée au premier ordre.

D'autre part, on peut écrire

$$Z = Z_1 \left\langle \exp\left(\frac{-1}{\hbar}(A - A_1)\right) \right\rangle_1, \quad (1.37)$$

où

$$\langle f(x) \rangle_1 = Z_1^{-1} \int Dx \exp\left(\frac{-A_1}{\hbar}\right) f(x). \quad (1.38)$$

D'après la relation de convexité on a

$$\langle \exp(f(x)) \rangle \geq \exp(\langle f(x) \rangle), \quad (1.39)$$

et pour une fonctionnelle quelconque on a l'inégalité de Jensen-Peierls [8]

$$\int D\mu(x) \exp(f(x)) \geq \exp\left(\int D\mu(x) \exp(f(x))\right), \quad (1.40)$$

où

$$\int D\mu(x) = 1. \quad (1.41)$$

Posons

$$D\mu(x) \equiv Z_1^{-1} Dx \exp\left(\frac{-A_1}{\hbar}\right), \quad (1.42)$$

donc

$$Z \geq Z_1 \exp\left(\frac{-1}{\hbar} \langle A - A_1 \rangle_1\right), \quad (1.43)$$

et sachant que

$$F = -k_B T \log Z, \quad (1.44)$$

d'où

$$F \leq F_1 + \frac{k_B T}{\hbar} \langle A - A_1 \rangle_1. \quad (1.45)$$

Finalement

$$F \leq F_1 + \frac{k_B T}{\hbar} \int_0^{\frac{\hbar}{k_B T}} d\tau \left\langle V(x(\tau)) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0)(x(\tau) - x_0)^2 - L_1(x_0) \right\rangle_1. \quad (1.46)$$

En considérant la transformation de Fourier du potentiel

$$V(x(\tau)) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp(ikx(\tau)) \tilde{V}(k), \quad (1.47)$$

on trouve

$$\begin{aligned} \langle V(x) \rangle_1 &= Z_1^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}} \prod_{m=1}^{\infty} \left[ \int \frac{dx_m^{\text{Re}} dx_m^{\text{Im}}}{\frac{\pi k_B T}{M\omega_m^2}} \right] \\ &\times \exp\left(\frac{-M}{k_B T} \sum_{m=1}^{\infty} \omega_m^2 |x_m|^2 - \frac{L_1(x_0)}{k_B T}\right) \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{V}(k) \exp ik \left( x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (x_m \exp\{-i\omega_m \tau\} + cc) \right) \\ &= Z_1^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}} \frac{\frac{\hbar\Omega(x_0)}{2k_B T}}{\sinh\left(\frac{\hbar\Omega(x_0)}{2k_B T}\right)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{V}(k) \exp\left(ikx_0 - \frac{k^2}{2} a^2(x_0)\right), \end{aligned} \quad (1.48)$$

où

$$a^2(x_0) = \frac{2k_B T}{M} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)}, \quad (1.49)$$

qui représente la largeur des fluctuations autour du chemin moyen.

Et comme

$$\tilde{V}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(-ikx) V(x), \quad (1.50)$$

donc, on trouve que le potentiel convolué, est donnée sous la forme

$$V_{a^2(x_0)}(x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx'_0}{\sqrt{2\pi a^2(x_0)}} \exp\left\{-\frac{(x'_0 - x_0)^2}{2a^2(x_0)}\right\} V(x'_0), \quad (1.51)$$

d'où

$$\langle V(\tau) \rangle_1 = Z_1^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}} \frac{\frac{\hbar\Omega(x_0)}{2k_B T}}{\sinh\left(\frac{\hbar\Omega(x_0)}{2k_B T}\right)} V_{a^2(x_0)}(x_0) \exp\{-\beta L_1(x_0)\}. \quad (1.52)$$

D'autre part on a

$$(x - x_0)_{a^2}^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx'}{\sqrt{2\pi a^2}} \exp\left\{-\frac{(x' - x)^2}{2a^2}\right\} (x' - x_0)^2 = a^2(x_0). \quad (1.53)$$

Finalement

$$\begin{aligned} & \left\langle V(x(\tau)) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0)(x(\tau) - x_0)^2 - L_1(x_0) \right\rangle_1 \\ &= Z_1^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}} \frac{\frac{\hbar\Omega(x_0)}{2k_B T}}{\sinh\left(\frac{\hbar\Omega(x_0)}{2k_B T}\right)} \left[ V_{a^2(x_0)} - \frac{M}{2} \Omega^2 a^2(x_0) - L_1(x_0) \right] \times \exp\{-\beta L_1(x_0)\}. \end{aligned} \quad (1.54)$$

Si on choisit

$$L_1(x_0) = V_{a^2(x_0)} - \frac{M}{2} \Omega^2 a^2(x_0), \quad (1.55)$$

on trouve

$$F_1 = -k_B T \log Z_1 = -k_B T \text{Log} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}} \exp\left\{-\frac{W_1(x_0)}{k_B T}\right\}, \quad (1.56)$$

où

$$W_1(x_0) = k_B \log \left[ \frac{\sinh\left(\frac{\hbar\Omega}{2k_B T}\right)}{\frac{\hbar\Omega}{2k_B T}} \right] + V_{a^2(x_0)} - \frac{M}{2} \Omega^2 a^2(x_0), \quad (1.57)$$

donc

$$F \leq F_1 \rightarrow \exp\{-\beta V_{eff.cl}(x_0)\} \geq \exp\{-\beta W_1(x_0)\}. \quad (1.58)$$

D'autre part

$$\begin{aligned} a^2(x_0) &= \frac{2k_B T}{M} \frac{\partial \log \prod_{m=1}^{\infty} \left[ \frac{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)}{\omega_m^2} \right]}{\partial \Omega^2(x_0)} = \frac{k_B T}{\Omega M} \frac{\partial}{\partial \Omega} \log \left[ \frac{\sinh\left(\frac{\hbar\Omega}{2k_B T}\right)}{\frac{\hbar\Omega}{2k_B T}} \right] \\ a^2(x_0) &= \frac{k_B T}{\Omega^2 M} \left[ \frac{\hbar\Omega}{2k_B T} \coth\left(\frac{\hbar\Omega}{2k_B T}\right) - 1 \right]. \end{aligned} \quad (1.59)$$

Maintenant minimisons  $W_1$  par rapport à  $a^2$

$$\frac{\partial W_1(x)}{\partial a^2(x)} = 0, \quad (1.60)$$

on trouve une valeur de  $a^2$  optimale.

Ensuite calculons la fréquence optimale, en utilisant la formule

$$\Omega^2(x_0) = \frac{2}{M} \frac{\partial V_{a^2}(x_0)}{\partial a^2(x_0)}, \quad (1.61)$$

où  $V_{a^2}(x_0)$  est donné par la formule

$$V_{a^2}(x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{V}(k) \exp(ikx_0 - \frac{a^2(x_0)k^2}{2}). \quad (1.62)$$

Finalement insérons le  $a^2$  et l'  $\Omega^2(x_0)$  optimales dans (1.57) pour trouver l'approximation au premier ordre du potentiel effectif classique  $V_{eff.cl}(x_0)$ .

On peut utiliser une autre formule pour calculer la fréquence optimale

$$\Omega^2(x_0) = \frac{1}{M} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} V_{a^2}(x_0) \right]_{a^2=a^2(x_0)} \quad (1.63)$$

Pour vérifier la validité de l'approximation  $W_1$ , on considère les deux cas particuliers suivants :

A haute température ( $T \rightarrow \infty$ ), on a

$$W_1(x_0) \underset{T \rightarrow \infty}{\equiv} V(x_0), \quad (1.64)$$

et  $V_{eff.cl}(x_0)$  a une forme exacte.

A basse température ( $T \rightarrow 0$ ), on a

$$\lim_{T \rightarrow 0} W_1(x_0) = \frac{1}{2} [\hbar \Omega(x_0) - M \Omega^2(x_0) a^2(x_0)] + V_{a^2}(x_0), \quad (1.65)$$

où

$$\lim_{T \rightarrow 0} a^2(x_0) = \frac{\hbar}{2M\Omega(x_0)}, \quad (1.66)$$

donc

$$\lim_{T \rightarrow 0} W_1(x_0) = \frac{3}{4} \hbar \Omega(x_0) + V_{a^2}(x_0) = \frac{3}{8} \frac{\hbar^2}{M a^2(x_0)} + V_{a^2}(x_0). \quad (1.67)$$

A basse température, on a

$$\lim_{T \rightarrow 0} F_1 = W_1(0) = E_1, \quad (1.68)$$

et si  $W_1(x_0)$  a une forme quadratique on a

$$\lim_{T \rightarrow 0} F_1 = E_0 = \frac{\hbar \omega}{2}, \quad (1.69)$$

où  $E_1$  est l'énergie, à l'approximation d'ordre un, d'une particule dans un potentiel anharmonique.



## Chapitre 2

# Oscillateurs Anharmoniques

Dans ce chapitre, on va appliquer la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert pour calculer les corrections au premier ordre et au troisième ordre de l'oscillateur anharmonique et le puits double. Les diagrammes de Feynman ont été calculés en utilisant le logiciel de calcul formel "Maple".

Supposons qu'on a une particule plongée dans un potentiel anharmonique de la forme

$$V(x) = \frac{M}{2}\omega^2 x^2 + gx^4, \quad (2.1)$$

où  $g$  est la constante de couplage.

On distingue deux cas :

- Si  $\omega^2 > 0$  on a un oscillateur anharmonique.
- Si  $\omega^2 < 0$  on a un puits double.

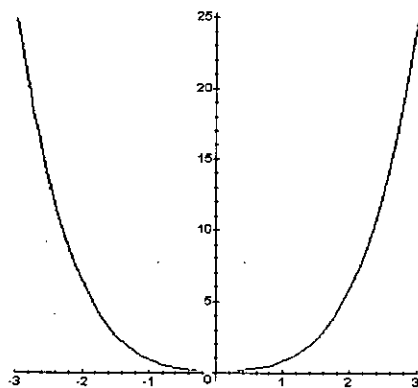


Fig. 1- Potentiel anharmonique  $\omega^2 > 0$

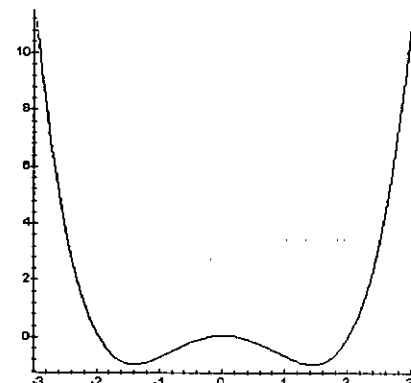


Fig. 2- Potentiel puits double  $\omega^2 < 0$

## 2.1 Calcul Variationnel

### Action

Soit un oscillateur anharmonique décrit par l'Hamiltonien

$$H = \frac{M}{2}(\dot{x}^2 + \omega^2 x^2) + \frac{g}{4}x^4, \quad (2.2)$$

où  $M$  est la masse du particule et  $\omega$  est la fréquence.

Pour simplifier les calculs on prend  $M = \omega = 1$ , dans ce cas l'action est donnée par la formule

$$S(x, \dot{x}) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left( \frac{\dot{x}^2}{2} + \frac{x^2}{2} + g \frac{x^4}{4} \right), \quad (2.3)$$

le potentiel convolué (smeared) est donné par

$$\begin{aligned} V_{a^2}(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx'}{\sqrt{2\pi a^2}} \exp\left(-\frac{x' - x}{2a^2}\right) \left[ \frac{x'^2}{2} + g \frac{x'^4}{4} \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx'}{\sqrt{2\pi a^2}} \exp\left(-\frac{x' - x}{2a^2}\right) \left\{ \frac{x^2}{2} + x(x' - x) + \frac{(x' - x)^2}{2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{g}{4} [(x^4 + 4x^3(x' - x) + 6x^2(x' - x)^2 + 4x(x' - x)^3 + (x' - x)^4)] \right\}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

où

$$a^2(x) = \frac{2}{M\beta} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_m^2 + \Omega^2(x)}, \quad (2.5)$$

est la largeur de fluctuation locale et  $\Omega(t)$  la fréquence donnée par

$$\Omega^2(t) = \frac{1}{M} V''(x_{cl}(t)) = \frac{2}{M} \frac{\partial V_{a^2}(x(t))}{\partial a^2(x(t))}. \quad (2.6)$$

Pour calculer l'expression de  $V_{a^2}(x)$  on utilise la formule

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx'}{\sqrt{2\pi a^2}} \exp\left(-\frac{(x' - x)^2}{2a^2}\right) (x' - x)^n = \begin{cases} n!! & \text{si } n \text{ pair} \\ 0 & \text{si } n \text{ impair} \end{cases}, \quad (2.7)$$

d'où

$$V_{a^2}(x) = \frac{x^2}{2} + g \frac{x^4}{4} + \frac{a^2}{2} + \frac{3}{2} g x^2 a^2 + \frac{3g}{4} a^4, \quad (2.8)$$

et

$$\Omega^2(x) = 1 + 3g x^2 + 3g a^2, \quad (2.9)$$

enfin

$$\begin{aligned}
 a^2(x) &= \frac{2}{M\beta} \frac{\partial}{\partial \Omega^2} \log \prod_{m=1}^{\infty} \frac{\omega_m^2 + \Omega^2(x)}{\omega_m^2} \\
 &= \frac{1}{M\beta} \frac{1}{\Omega} \log \frac{\sinh\left(\frac{\beta\hbar\Omega(x)}{2}\right)}{\frac{\beta\hbar\Omega(x)}{2}} \\
 &= \frac{1}{M\beta\Omega^2(x)} \left( \frac{\beta\hbar\Omega(x)}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\Omega(x)}{2}\right) - 1 \right). \tag{2.10}
 \end{aligned}$$

A haute température ( $T \rightarrow \infty$ ), la fonction de partition prend la forme

$$Z \sim Z_{cl} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp(-\beta H(p, x)). \tag{2.11}$$

Matrice densité

On définit la matrice densité par la relation

$$\rho(x_a) \equiv Z^{-1} \langle x_a | \exp(-\beta \hat{H}) | x_a \rangle, \tag{2.12}$$

avec

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1. \tag{2.13}$$

Si  $\Psi_n(x)$  sont les fonctions propres de  $\hat{H}$ , on peut écrire

$$\rho(x_a) = \frac{\sum_n |\Psi_n(x)|^2 \exp(-\beta E_n)}{\sum_n \exp(-\beta E_n)}. \tag{2.14}$$

Dans les deux cas limites de basse et haute température on a :

- A basse température ( $T \rightarrow 0$ ) :  $\rho(x_a) \approx |\Psi_0(x_a)|^2$ .
- A haute température ( $T \rightarrow \infty$ ) :  $\rho(x_a) \approx Z_{cl}^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp(-\beta H(p, x_a))$ .

Si  $\tau_b - \tau_a = \hbar\beta$ , dans ce cas on peut écrire

$$Z \approx \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \langle x | \exp(-\varepsilon \hat{H}/\hbar) | x \rangle, \tag{2.15}$$

où

$$\langle x | \exp(-\varepsilon \frac{\hat{H}}{\hbar}) | x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left(-\frac{\varepsilon H(p_n, x)}{\hbar}\right). \tag{2.16}$$

Application

Soit

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2M} + V(x), \quad (2.17)$$

utilisons l'intégrale Gaussienne, on trouve

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{-p^2}{2M}\right) = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{M}\right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (2.18)$$

d'où

$$Z_{cl} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{M}\right)^{\frac{1}{2}}} \exp(-\beta V(x)), \quad (2.19)$$

et quand  $T \rightarrow \infty$ , on a

$$\rho(x) \rightarrow \rho_{cl}(x) = Z_{cl}^{-1} \left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{M}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp(-\beta V(x)). \quad (2.20)$$

### 2.1.1 Potentiel anharmonique

Pour l'oscillateur anharmonique  $\omega^2 > 0$ , on prend par exemple  $\omega^2 = 1$ , le potentiel convolué s'écrit sous la forme

$$V_{a^2}(x_0) = \frac{x_0^2}{2} + \frac{gx_0^4}{4} + \frac{a^2}{2} + \frac{3}{2}gx_0^2a^2 + \frac{3g}{4}a^4, \quad (2.21)$$

et

$$\Omega^2(x_0) = 1 + 3gx_0^2 + 3ga^2(x_0), \quad (2.22)$$

d'autre part, on a

$$a^2(x_0) = \frac{1}{\beta\Omega^2} \left[ \frac{\beta\Omega(x_0)}{2} \coth\left(\frac{\beta\Omega(x_0)}{2}\right) - 1 \right]. \quad (2.23)$$

Utilisons l'itération et partons de  $\Omega(x_0) = 0$ , qu'on substitue dans l'équation (2.23) qui donne  $a^2(x_0) = \frac{\beta}{12}$ . Substituons ensuite  $a^2(x_0) = \frac{\beta}{12}$  dans l'équation (2.22) pour trouver la nouvelle fréquence  $\Omega^2(x_0)$  et ainsi de suite. On trouve que l'itération converge rapidement, et on obtient alors  $a^2(x_0)$  et  $\Omega^2(x_0)$  désirées.

En substituant  $a^2(x_0)$  et  $\Omega^2(x_0)$  finales dans les équations (2.21), (1.57), on obtient l'expressions optimisée de  $W_1(x)$

$$W_1(x_0) = \frac{1}{\beta} \log \frac{\sinh\left(\frac{\hbar\beta\Omega(x_0)}{2}\right)}{\frac{\hbar\beta\Omega(x_0)}{2}} + V_{a^2}(x_0) - \frac{M}{2}\Omega^2(x_0)a^2(x_0). \quad (2.24)$$

Finalement, l'énergie libre est donnée par la formule

$$F_1 = -k_B T \log \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}} \exp \left\{ -\frac{W_1(x_0)}{k_B T} \right\}. \quad (2.25)$$

L'énergie libre classique de l'oscillateur anharmonique est donnée par la formule

$$F_{cl} = -k_B T \log \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}} \exp \left\{ \frac{-V_{cl}(x_0)}{k_B T} \right\}, \quad (2.26)$$

où

$$V_{cl}(x_0) = \frac{M\omega^2}{2} x_0^2 + \frac{g}{4} x_0^4. \quad (2.27)$$

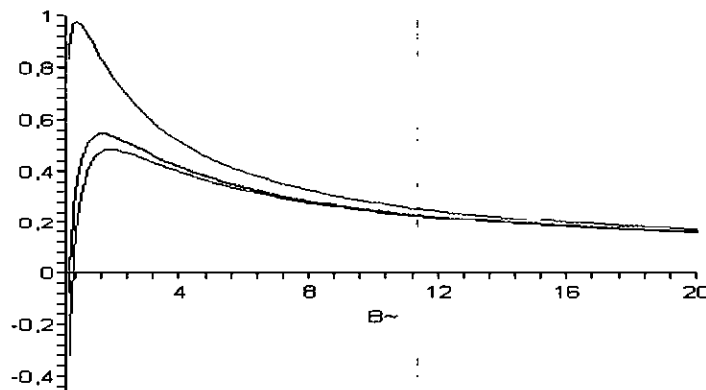


Fig.3- L'énergie libre classique de l'oscillateur anharmonique en fonction de  $\beta$ . Le rouge pour  $g = 2$ . Le bleu pour  $g = 4$ . Le vert pour  $g = 40$ .

### 2.1.2 Potentiel puits double

Le potentiel puits double correspond à une fréquence  $\omega^2 < 0$ , on prend par exemple  $\omega^2 = -1$ , on a

$$V(x) = -\frac{x^2}{2} + \frac{g}{4} x^4 + \frac{1}{4g}. \quad (2.28)$$

L'addition de la constante  $\frac{1}{4g}$  permet de contrôler le comportement des quantités physiques à la limite  $g \rightarrow 0$ .

Dans ce cas la fréquence d'essai est donnée sous la forme

$$\Omega^2(x_0) = -1 + 3gx_0^2 + 3ga^2(x_0), \quad (2.29)$$

et pour  $\Omega^2 \in (-\frac{4\pi^2}{\beta^2}, 0)$ , on a

$$a^2(x) = \frac{1}{\beta\Omega^2} \left[ \frac{\beta |\Omega(x_0)|}{2} \cot \left( \frac{\beta |\Omega(x_0)|}{2} \right) - 1 \right]. \quad (2.30)$$

Dans ce cas la fréquence d'essai  $\Omega(x)$  peut être imaginaire et on ne peut pas utiliser l'itération pour trouver  $a^2(x)$  et  $\Omega^2(x)$ . Pour cela, on va chercher le zéro de l'équation

$$f(\Omega^2(x_0)) \equiv a^2(x_0) - \frac{1}{3g}(1 + \Omega^2(x_0) - 3gx_0^2), \quad (2.31)$$

où  $a^2(x_0)$  sera calculé de l'équation (2.30).

Notons qu'à  $T = 0$ , la constante de couplage  $g$  est supérieure à  $g_c$  qui est une valeur critique égale à 0.3629[8].

$$g > g_c = 0.3629. \quad (2.32)$$

Mais pour  $g \leq g_c$  on trouve que  $x_m = \frac{\sqrt{1-3ga^2}}{g}$ , donc l'équation (2.29) devient

$$\Omega^2(x_m) = 2 - 6ga^2(x_m). \quad (2.33)$$

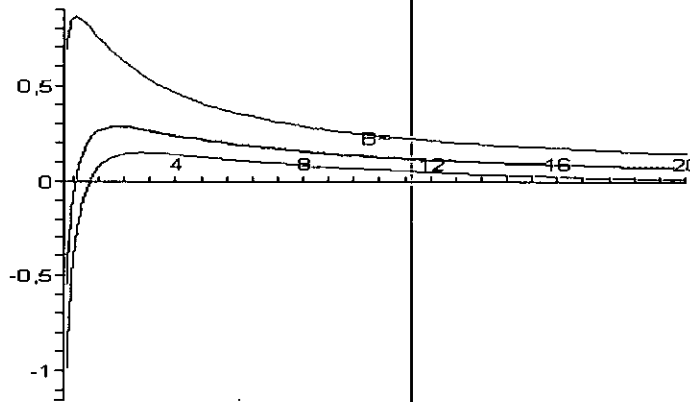


Fig. 4- L'énergie libre classique du puits double  $F_{cd}^{dw}$  en fonction de  $\beta$ .

Le rouge pour  $g = 2$ , Le bleu pour  $g = 4$ , Le vert pour  $g = 40$ .

## 2.2 Approche variationnelle pour les états excités

Pour le moment nous avons donnée la forme de  $W_1(x_0)$  qui est l'approximation au premier ordre de  $V_{eff,d}(x_0)$  d'un oscillateur anharmonique dans son état fondamental, c'est à dire non

excité. Cette approximation est basée sur l'utilisation d'une Gaussienne comme fonction d'essai. La question que nous allons nous poser maintenant est : pouvons nous utiliser la même approximation dans le cas des états excités ?

### L'action de l'oscillateur anharmonique

Considérons l'action de l'oscillateur anharmonique

$$A[x] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left( \frac{M}{2} \dot{x}^2 + \frac{M\omega^2}{2} x^2 + \frac{1}{4} g x^4 \right). \quad (2.34)$$

Posons

$$A[x] = A_{\Omega}^{x_0} + A_{int}^{x_0}, \quad (2.35)$$

où  $A_{\Omega}^{x_0}$  est l'action d'essai centrée au point  $x_0$ , donnée par la formule

$$A_{\Omega}^{x_0} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau M \left[ \frac{1}{2} \dot{x}^2 + \frac{\Omega^2}{2} (x - x_0)^2 \right], \quad (2.36)$$

et  $A_{int}^{x_0}$  est l'action d'interaction, donnée par la formule

$$A_{int}^{x_0} = \int_0^{\beta} d\tau \left[ M \frac{\omega^2 - \Omega^2}{2} (x - x_0)^2 + \frac{g}{4} x^4 \right]. \quad (2.37)$$

Supposons que  $\Psi_{\Omega}^{(n)}(x - x_0)$  sont les fonctions d'ondes propres de l'Hamiltonien  $H$  du système.

Soit la fonction de partition du système

$$\begin{aligned} Z_{\Omega}^{(n)}(x_0) &\equiv \int dx_b dx_a \Psi_{\Omega}^{*(n)}(x_b) (x_b \tau_b / \tau_a x_a) \Psi_{\Omega}^{(n)}(x_a) \\ &= \int dx_b dx_a \Psi_{\Omega}^{*(n)}(x_b) \left( \int_{(x_a, 0) \rightarrow (x_b, \hbar\beta)} Dx \exp \left( \frac{-A}{\hbar} \right) \right) \Psi_{\Omega}^{(n)}(x_a), \end{aligned} \quad (2.38)$$

On voit qu'à  $T \rightarrow 0$ , une optimisation sur  $x_0$  et  $\Omega(x_0)$  nous permet de trouver les énergies des états excités  $E^{(n)}$  suivant la formule

$$Z^{(n)} \approx \exp(-\beta E^{(n)}), \quad (2.39)$$

où  $Z^{(n)}$  est la fonction de partition du système pour un état excité.

La fonction de partition totale de l'oscillateur anharmonique pour les états excités est

donnée sous la forme

$$Z^{(n)} \approx Z_{\Omega}^{(n)} \exp\left(\left\langle -\frac{A_{int}^{x_0}}{\hbar} \right\rangle_{\Omega}^{(n)}\right), \quad (2.40)$$

où  $Z_{\Omega}^{(n)}$  est la fonction de partition qui représente la contribution du  $n^{\text{ème}}$  état excité de l'oscillateur anharmonique, elle est donnée par l'expression

$$Z_{\Omega}^{(n)} = \exp\left\{-\beta \hbar \Omega \left(n + \frac{1}{2}\right)\right\}. \quad (2.41)$$

### Remarques

1) On note que dans l'équation (2.40) le 2<sup>ème</sup> membre n'est pas nécessairement égal au 1<sup>er</sup> membre, d'après l'inégalité de Jensen-Peierls.

2) La bonne position qui donne une action très précise de l'équation (2.34) est bien  $x = x_0 = 0$ .

3) D'après la remarque précédente et d'après l'équation (??), on peut écrire le résultat suivant

$$\langle x^{2k} \rangle_{\Omega}^{(n)} = \frac{\hbar^k}{(M\Omega)^k} \eta_{2k}; \quad k \in N, \quad (2.42)$$

où

$$\begin{aligned} k = 1, & \quad \eta_2 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \\ k = 2, & \quad \eta_4 = \frac{3}{2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right) \\ k = 3, & \quad \eta_6 = \frac{5}{4} \left(2n^3 + 3n^2 + 4n + \frac{3}{2}\right) \\ k = 4, & \quad \eta_8 = \frac{1}{16} (70n^4 + 140n^3 + 344n^2 + 280n + 105). \end{aligned} \quad (2.43)$$

et

$$\langle x^{2k+1} \rangle_{\Omega}^{(n)} = 0; \quad k \in N. \quad (2.44)$$

Maintenant insérons (2.37) dans (2.40), on trouve  $Z^{(n)}$

$$Z^{(n)} \approx \exp\left\{-\beta \left[ \frac{1}{2} (\Omega^2 + \omega^2) \frac{\hbar \eta_2}{\Omega} + \frac{g}{4} \frac{\hbar^2 \eta_4}{M^2 \Omega^2} \right]\right\}. \quad (2.45)$$

Finalement les énergies des états excités sont données par la formule

$$W^{(n)} = \hbar \left[ \frac{1}{2} \left(\Omega + \frac{\omega^2}{\Omega}\right) \eta_2 + \frac{g'}{4} \frac{\omega^2}{\Omega^2} \eta_4 \right], \quad (2.46)$$

où

$$g' \equiv \frac{g \hbar}{M^2 \omega^3}.$$

L'optimisation de  $W^{(n)}$  sur la fréquence  $\Omega$  donne

$$\Omega = \Omega_1^{(n)} = \begin{cases} \frac{2\omega}{\sqrt{3}} \cosh\left[\frac{1}{3} \operatorname{arc} \cosh\left(\frac{g}{g^{(n)}}\right)\right] & \text{pour } g > g^{(n)} \\ \frac{2\omega}{\sqrt{3}} \cos\left[\frac{1}{3} \arccos\left(\frac{g}{g^{(n)}}\right)\right] & \text{pour } g < g^{(n)} \end{cases}, \quad (2.47)$$



où

$$g^{(n)} \equiv \frac{2\eta_2\omega^3}{3\sqrt{3}\eta_4}. \quad (2.48)$$

Dans le cas des grandes valeurs de  $g^{(n)}$ , les fréquences  $\Omega^{(n)}$  se comportent comme  $(\frac{3}{2}gn)^{\frac{1}{3}}$ , et on a

$$W^{(n)} = E_{app}^{(n)} \rightarrow \hbar\kappa(gn^4)^{\frac{1}{3}}, \quad (2.49)$$

où la constante  $\kappa$  est donnée par

$$\kappa = \frac{1}{2}\left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{1}{3}} + \frac{3}{8}\left(\frac{2}{3}\right)^{\frac{2}{3}} \approx 0.858536. \quad (2.50)$$

### Fréquence et énergie optimales des états excités

D'après les équations (2.47) et (2.49) et pour un couplage fort on peut définir la fréquence et l'énergie optimale des états excités de l'oscillateur anharmonique respectivement par les formules

$$\Omega_1^{(n)} = 6^{\frac{1}{3}}\left(\frac{\rho g}{4}\right)^{\frac{1}{3}}\left[1 + \frac{1}{9}\left(\frac{3}{4}\right)^{\frac{1}{3}}\frac{1}{\left(\frac{\rho g}{4}\right)^{\frac{2}{3}}} + \dots\right], \quad (2.51)$$

$$E_1^{(n)} = (2n+1)\left(\frac{3}{4}\right)^{\frac{1}{3}}\left(\frac{\rho g}{4}\right)^{\frac{1}{3}}\left[1 + \frac{6^{\frac{1}{3}}}{9}\frac{1}{\left(\frac{\rho g}{4}\right)^{\frac{2}{3}}} + \dots\right], \quad (2.52)$$

où

$$\rho \equiv \frac{4\eta_4}{6\eta_2} = \frac{n^2 + n + \frac{1}{2}}{n + \frac{1}{2}}. \quad (2.53)$$

Finalement la fonction de partition approximée et l'énergie libre de l'oscillateur anharmonique pour les états excités sont données respectivement par les formules

$$Z \approx \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta E_{app}^{(n)}), \quad (2.54)$$

$$F_1 = -\frac{1}{\beta} \log(Z). \quad (2.55)$$

## 2.3 Amélioration systématique de l'approximation F-K

### Développement variationnel perturbatif

Pour obtenir une amélioration systématique de l'approche variationnelle en mécanique quantique, nous faisons un développement en puissance de l'action au voisinage du point  $x = x_0 = \bar{x}$ .

## Calcul de l'action

Posons

$$A = V(x_0) + A_{\Omega}^{x_0} + A_{int}^{x_0}, \quad (2.56)$$

où  $A_{\Omega}^{x_0}$  l'action d'essai pour une fluctuation  $\delta x(\tau)$ , au voisinage du point  $x = x_0$ , est donnée par la formule

$$A_{\Omega}^{x_0} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{M}{2} \{ [\delta\dot{x}(\tau)]^2 + \Omega^2(x_0) [\delta x(\tau)]^2 \}, \quad (2.57)$$

$$\delta x(\tau) \equiv x(\tau) - x_0, \quad (2.58)$$

et  $A_{int}^{x_0}$  l'action d'interaction est donnée par la formule

$$A_{int}^{x_0} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{g_2}{2!} [\delta x(\tau)]^2 + \frac{g_3}{3!} [\delta x(\tau)]^3 + \frac{g_4}{4!} [\delta x(\tau)]^4 + \dots \right\}, \quad (2.59)$$

où

$$g_i(x_0) = V^{(i)}(x_0) - \Omega^2 \delta_{i2}, \quad (2.60)$$

est la constante de couplage qui dépend de la position  $x_0$ , et

$$V^{(i)}(x_0) \equiv \frac{d^i V(x_0)}{dx_0^i}. \quad (2.61)$$

Dans le cas d'un oscillateur anharmonique, les constantes de couplages  $g_i(x_0)$ , s'écrivent

$$\begin{aligned} g_2(x_0) &= M[\omega^2 - \Omega^2(x_0)] + 3gx_0^2, \\ g_3(x_0) &= 6gx_0, \\ g_4(x_0) &= 6g. \end{aligned} \quad (2.62)$$

Introduisons maintenant le paramètre

$$r^2 = \frac{2M(\Omega^2 - \omega^2)}{g}, \quad (2.63)$$

qui a la dimension d'un carré de la longueur d'onde.

Donc, on peut écrire

$$g_2(x_0) = g \left( \frac{-r^2}{2} + 3x_0^2 \right). \quad (2.64)$$

Avec la décomposition (2.56), l'approximation au premier ordre du potentiel effectif clas-

sique de F-K peut s'écrire sous la forme

$$W_1(x_0) = V(x_0) + F_\Omega^{x_0} + \frac{1}{\hbar\beta} \langle A_{int}^{x_0} \rangle_{\Omega} \quad (2.65)$$

Pour généraliser cette formule, on remplace l'énergie libre locale  $F_\Omega^{x_0}$ , par  $F_\Omega^{x_0} + \Delta F^{x_0}$  où  $\Delta F^{x_0}$  représente une correction pour l'énergie libre.

Une forme plus exacte du potentiel classique effectif est donnée par la formule

$$\begin{aligned} V^{eff,cl}(x_0) = & V(x_0) + F_\Omega^{x_0} + \frac{1}{\hbar\beta} \langle A_{int}^{x_0} \rangle_{\Omega} - \frac{1}{2! \hbar^2 \beta} \langle A_{int}^{x_0^2} \rangle_{\Omega,c} \\ & + \frac{1}{3! \hbar^3 \beta} \langle A_{int}^{x_0^3} \rangle_{\Omega,c} + \dots, \end{aligned} \quad (2.66)$$

où

$$\begin{aligned} \langle A_{int}^{x_0^2} \rangle_{\Omega,c} &\equiv \langle A_{int}^{x_0^2} \rangle_{\Omega} - \langle A_{int}^{x_0} \rangle_{\Omega}^2 \\ \langle A_{int}^{x_0^3} \rangle_{\Omega,c} &\equiv \langle A_{int}^{x_0^3} \rangle_{\Omega} - 3 \langle A_{int}^{x_0^2} \rangle_{\Omega} \langle A_{int}^{x_0} \rangle_{\Omega} + 2 \langle A_{int}^{x_0} \rangle_{\Omega}^3, \end{aligned} \quad (2.67)$$

et  $\langle A_{int}^{x_0} \rangle_{\Omega,c}$  est l'action connecté.

#### Remarques

- 1) Une sommation jusqu'à l'infini de l'équation (2.66) donne une indépendance de  $V^{eff,cl}(x_0)$  par rapport à  $\Omega(x_0)$ .
- 2) Pour une bonne approximation, on utilise

$$W_3(x_0) = V(x_0) + F_\Omega^{x_0} + \frac{1}{\hbar\beta} \langle A_{int}^{x_0} \rangle_{\Omega} - \frac{1}{2\hbar^2\beta} \langle A_{int}^{x_0^2} \rangle_{\Omega,c} + \frac{1}{6\hbar^3\beta} \langle A_{int}^{x_0^3} \rangle_{\Omega,c}, \quad (2.68)$$

et pour trouver  $W_N(x_0)$  optimal, on utilise la fomule suivante

$$\frac{\partial W_N(x_0)}{\partial \Omega(x_0)} = 0. \quad (2.69)$$

Cette dernière équation donne un  $\Omega_N(x_0)$  optimale qui s'aplle la fréquence de moindre dépendance.

## 2.4 Application du développement variationnel perturbatif

D'après tout ce qui précède nous remarquons que l'approximation au troisième ordre  $W_3(x_0)$  est meilleure que celle du premier ordre  $W_1(x_0)$ . Dans ce paragraphe nous illustrons la performance du développement variationnel perturbatif pour le cas d'un oscillateur anharmonique.

Nous allons montrer que ce développement converge rapidement vers des résultats exacts pour toutes les valeurs de la constante de couplage  $g$  contrairement aux autres méthodes de perturbation ordinaires qui divergent pour des petites valeurs de  $g$  arbitraires.

### L'oscillateur anharmonique à $T = 0$

A basse température, c.à.d  $T = 0$ , le point  $x_0 = 0$  est le point optimal qui contribue dans le calcul et on a

$$\delta x(\tau) \equiv x(\tau), \quad (2.70)$$

donc on peut écrire

$$A_{int} = \frac{g}{4} \int_0^{\hbar\beta} d\tau (-r^2 x^2 + x^4), \quad (2.71)$$

où  $r^2$  sera calculé de l'équation

$$\omega \rightarrow \tilde{\Omega} \equiv \sqrt{\Omega^2 - \frac{gr^2}{2M}}. \quad (2.72)$$

L'énergie libre qui correspond à l'approximation du troisième ordre est donnée par la formule

$$F = \frac{\hbar\tilde{\Omega}}{2} + \frac{g}{4}3a^4 - \left(\frac{g}{4}\right)^2 42a^8 \frac{1}{\hbar\tilde{\Omega}} + \left(\frac{g}{4}\right)^3 4 \times 333a^{12} \left(\frac{1}{\hbar\tilde{\Omega}}\right)^2, \quad (2.73)$$

où

$$a^2 = \frac{\hbar}{2M\tilde{\Omega}}. \quad (2.74)$$

Faisons un développement de  $F$  en puissance de  $g$  jusqu'au troisième ordre, on trouve

$$\begin{aligned} W_3^\Omega = & \frac{\hbar\Omega}{2} + \frac{g(3a^4 - r^2a^2)}{4} - \frac{g^2}{\hbar\Omega} \left( \frac{21a^8}{8} - \frac{3a^6r^2}{4} + \frac{a^4r^4}{16} \right) \\ & + \frac{g^3}{(\hbar\Omega)^2} \left( \frac{333a^{12}}{16} - \frac{105a^{10}r^2}{16} + \frac{3a^8r^4}{4} - \frac{a^6r^6}{32} \right). \end{aligned} \quad (2.75)$$

Finalement minimisons  $W_3$  par rapport à  $\Omega$ ; on trouve l'énergie approximée au troisième ordre  $E_3(g)$ .

#### Remarques

1) Tronquons l'expansion de (2.68) au dixième ordre sur  $g$ , on trouve une approximation du deuxième ordre  $W_2(x_0)$ .

2) Il n'existe pas de valeur de  $\Omega$  qui minimise  $W_2(x_0)$  à cause des signes alternés des hautes puissances de  $a$ , et par conséquent les signes alternés des hautes puissances de  $\frac{1}{\Omega}$ , dans l'équation (2.75).

3) A cause des signes alternés des hautes puissances en  $\frac{1}{\Omega}$  dans l'équation (2.75), l'approximation  $W_2^{(g)}$  se comporte comme  $(-1)^{n-1}g^n\left(\frac{1}{\Omega}\right)^{3n-1}$  quand  $\Omega$  tend vers 0.

4) A cause des signes alternés des hautes puissances en  $\frac{1}{\Omega}$  dans l'équation (2.75), l'approximation  $W_2^{(n)}(x_0) \rightarrow \infty$  quand  $\Omega$  est très grand.

$$\lim_{\Omega} W_2^{(n)}(x_0) = \begin{cases} (-1)^{n-1} g^n \left(\frac{1}{\Omega}\right)^{3n-1} & \text{quand } \Omega \rightarrow 0 \\ \infty & \text{quand } \Omega \rightarrow \infty \end{cases} \quad (2.76)$$

En conclusion, seules les approximations impaires qui ont un minimum par rapport à  $\Omega$  qui contribuent dans les calculs.

## 2.5 Calcul des cumulants

Soit un système harmonique perturbé par un potentiel anharmonique  $V(x)$  qui joue le rôle d'une interaction. Pour des potentiels  $V(x)$  suffisamment lisses, il est toujours possible de faire un développement de la fonction de partition en série de puissance par rapport à  $V(x)$ .

en utilisant l'intégrale de chemin euclidien, la fonction de partition d'un système harmonique perturbé par  $V(x)$  est donnée sous la forme

$$Z = \int Dx \exp \left\{ \frac{-1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 + M \frac{\omega^2}{2} x^2 + V(x) \right] \right\}. \quad (2.77)$$

Faisons un développement de l'exponentielle en série de puissance par rapport à  $V(x)$  [8], donc l'équation(2.77) devient

$$\begin{aligned} Z = \int Dx & \left[ 1 - \frac{1}{\hbar} \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau V(x(\tau)) + \frac{1}{2! \hbar^2} \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau_2 V(x(\tau_2)) \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau_1 V(x(\tau_1)) \right. \\ & \left. - \frac{1}{3! \hbar^3} \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau_3 V(x(\tau_3)) \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau_2 V(x(\tau_2)) \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau_1 V(x(\tau_1)) + \dots \right] \\ & \times \exp \left\{ \frac{-1}{\hbar} \int_{\tau_a}^{\tau_b} dt \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 + M \frac{\omega^2}{2} x^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.78)$$

Posons maintenant

$$A_{int,e} \equiv \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau V(x(\tau)), \quad (2.79)$$

ensuite utilisons la formule

$$\langle \dots \rangle_{\omega} \equiv \frac{1}{Z_{\omega}} \int Dx \dots \exp \left\{ \frac{-1}{\hbar} \int_{\tau_a}^{\tau_b} dt \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 + M \frac{\omega^2}{2} x^2 \right] \right\}, \quad (2.80)$$

où

$$Z_\omega = 2 \sinh\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right) \quad (2.81)$$

on trouve que

$$Z = Z_\omega \left(1 - \frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_\omega + \frac{1}{2! \hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_\omega - \frac{1}{3! \hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_\omega + \dots\right). \quad (2.82)$$

Regroupons les facteurs en serie de l'exponentielle, on trouve finalement

$$Z = Z_\omega \exp\left(1 - \frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_\omega + \frac{1}{2! \hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c} - \frac{1}{3! \hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_{\omega,c} + \dots\right). \quad (2.83)$$

avec

$$\begin{aligned} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c} &\equiv \langle A_{int,e}^2 \rangle_\omega - \langle A_{int,e} \rangle_\omega^2 = \langle [A_{int,e} - \langle A_{int,e} \rangle_\omega]^2 \rangle_\omega \\ \langle A_{int,e}^3 \rangle_{\omega,c} &\equiv \langle A_{int,e}^3 \rangle_\omega - 3 \langle A_{int,e}^2 \rangle_\omega \langle A_{int,e} \rangle_\omega + 2 \langle A_{int,e} \rangle_\omega^3 = \langle [A_{int,e} - \langle A_{int,e} \rangle_\omega]^3 \rangle_\omega, \end{aligned} \quad (2.84)$$

où  $\langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c}$  et  $\langle A_{int,e}^3 \rangle_{\omega,c}$ , les cumulants, qui contribuent directement dans l'énergie libre

$$F = \frac{-1}{\beta} \log(Z). \quad (2.85)$$

$Z$  est la fonction de partition donnée par (2.83). La correction sur l'énergie libre est donné par la formule

$$\Delta F = F - F_\omega = \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_\omega - \frac{1}{2! \hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c} + \frac{1}{3! \hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_{\omega,c} + \dots \right\}, \quad (2.86)$$

avec

$$F_\omega = \frac{1}{\beta} \log \left[ 2 \sinh\left(\frac{\hbar \beta \omega}{2}\right) \right]. \quad (2.87)$$

Finalement, l'énergie libre de l'oscillateur anharmonique est donnée par la formule

$$\beta F = \beta F_\omega + \frac{1}{\hbar} \langle A_{int,e} \rangle_\omega - \frac{1}{2! \hbar^2} \langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c} + \frac{1}{3! \hbar^3} \langle A_{int,e}^3 \rangle_{\omega,c} + \dots \quad (2.88)$$

Pour trouver la forme exacte de l'énergie libre  $F$ , on écrit les cumulants sous forme d'intégrales

$$\langle A_{int,e} \rangle = \frac{g}{4} \int_0^{\hbar \beta} d\tau G^{(4)}(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4) = 3 \frac{g}{4} \int_0^{\hbar \beta} d\tau G^{(2)}(\tau_1, \tau_2), \quad (2.89)$$

où  $G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)$  et  $G^{(4)}(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4)$  sont les fonctions de corrélation à deux et à quatre points respectivement.

$$\begin{aligned}
\langle A_{int,e}^2 \rangle_{\omega,c} &= \left(\frac{g}{4}\right)^2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \langle x^4(\tau_2) x^4(\tau_1) \rangle_{\omega} \\
&= \left(\frac{g}{4}\right)^2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \{ 72G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) G^{(2)}(\tau_2, \tau_1)^2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) \\
&\quad + 24G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^4 + 9G^{(2)}(\tau_2, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1)^2 \}, \tag{2.90}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle A_{int,e}^3 \rangle_{\omega,c} &= \left(\frac{g}{4}\right)^3 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \langle x^4(\tau_3) x^4(\tau_2) x^4(\tau_1) \rangle_{\omega} \\
&= \left(\frac{g}{4}\right)^3 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \{ 2592G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) G^{(2)}(\tau_3, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_1)^2 G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) \\
&\quad + 1728G^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G^{(2)}(\tau_2, \tau_3) G^{(2)}(\tau_3, \tau_1) G^{(2)}(\tau_1, \tau_1) G^{(2)}(\tau_2, \tau_2) G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) \\
&\quad + 3456G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^4 G^{(2)}(\tau_3, \tau_3) + 1728G^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 G^{(2)}(\tau_3, \tau_1)^2 \}. \tag{2.91}
\end{aligned}$$

## 2.6 L'oscillateur anharmonique à $T > 0$

Considérons maintenant un oscillateur anharmonique à la température finie  $T$ . On peut écrire l'approximation  $W_3^\Omega(x_0)$  de (2.75) sous forme de boucles (diagrammes de Feynman)

$$\begin{aligned}
 W_3^\Omega(x_0) = & \frac{1}{\beta} \left\{ -\frac{1}{2} \text{ (circle) } + \left( \frac{1}{2} \text{ (circle with dot) } + \frac{1}{8} \text{ (two circles) } \right) \right. \\
 & -\frac{1}{2!} \left[ \frac{1}{2} \text{ (circle with two dots) } + \frac{1}{2} \text{ (two circles) } + \frac{1}{8} \text{ (three circles) } \right. \\
 & \left. \left. + \frac{1}{24} \text{ (circle with three dots) } + \frac{1}{6} \text{ (circle with horizontal line) } \right] + \frac{1}{3!} \left[ \text{ (circle with four dots) } \right. \\
 & + 3 \left( \frac{1}{4} \text{ (two circles) } + \frac{1}{2} \text{ (circle with two dots) } \right) + 3 \left( \frac{1}{4} \text{ (three circles) } \right. \\
 & \left. \left. + \frac{1}{6} \text{ (circle with three dots) } + \frac{1}{4} \text{ (circle with horizontal line) } + \frac{1}{2} \text{ (circle with dot) } \right) \right. \\
 & + \left( \frac{3}{16} \text{ (four circles) } + \frac{1}{8} \text{ (circle with four dots) } + \frac{1}{4} \text{ (circle with horizontal line) } \right. \\
 & \left. \left. + \frac{1}{8} \text{ (circle with triangle) } + \frac{3}{4} \text{ (circle with triangle) } + \frac{3}{4} \text{ (circle with dot) } \right) \right] \left. \right\} \quad (2.92)
 \end{aligned}$$

En puissance de  $a$ ,  $W_3^\Omega(x_0)$  s'écrit

$$\begin{aligned}
 W_3^\Omega(x_0) = & V(x_0) + F_\Omega^{x_0} + \left( \frac{g_2}{2} a^2 + \frac{g_4}{8} a^4 \right) - \frac{1}{2\hbar\Omega} \left[ \frac{g_2^2}{2} a^4 + \frac{g_2 g_4}{2} a^4 a^2 \right. \\
 & + \frac{g_4^2}{8} a_2^4 a^4 + \frac{g_4^2}{24} a_2^8 + \frac{g_3^2}{6} a_2^6 \left. \right] + \frac{1}{6\hbar^2 \Omega^2} \left[ g_2^3 a_3^6 + 3 \left( \frac{g_2^2 g_4}{4} (a_2^4)^2 + \frac{g_2^2 g_4}{2} a_3^6 a^2 \right) \right. \\
 & + 3 \left( \frac{g_2 g_4^2}{4} (a_2^4)^2 a^2 + \frac{g_2 g_4^2}{4} a_3^6 a^4 + \frac{g_2 g_4^2}{6} a_3^{10} + \frac{g_2 g_3^2}{2} a_3^8 \right) + \left( \frac{3g_4^3}{16} (a_2^4 a^2)^2 + \frac{g_4^3}{8} a_3^6 a^6 \right. \\
 & \left. \left. + \frac{g_4^3}{4} a_3^{10} a^2 + \frac{g_4^3}{8} a_3^{12} + \frac{3g_3^2 g_4}{4} a_3^{10} + \frac{3g_3^2 g_4}{4} a_3^8 a^2 \right) \right], \quad (2.93)
 \end{aligned}$$

les constantes  $g_2, g_3$  et  $g_4$  sont définies dans (2.62), et en calculant l'intégrale

$$Z_3 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{\frac{2\pi\beta\hbar^2}{M}}} \exp(-\beta W_3(x_0)), \quad (2.94)$$

on trouve l'énergie libre approximée au troisième ordre

$$F_3 = -\frac{1}{\beta} \ln Z_3. \quad (2.95)$$



Les boucles précédentes sont définies par les intégrales suivantes

$$\begin{aligned}
 a^2 &\equiv \frac{1}{\hbar\beta} \quad \text{[Diagram: circle with one dot]} = \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau G_{\omega^2}^{(2)}(\tau, \tau), \\
 a_2^4 &\equiv \frac{\omega}{\hbar\beta} \quad \text{[Diagram: circle with two dots]} = \frac{\omega}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2, \\
 a_3^6 &\equiv \frac{\omega^2}{\hbar\beta} \quad \text{[Diagram: circle with three dots]} = \frac{\omega^2}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_2, \tau_3) G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_3, \tau_1), \\
 a_2^8 &\equiv \frac{\omega}{\hbar\beta} \quad \text{[Diagram: circle with two dots and a horizontal line]} = \frac{\omega}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G_{\omega^2}^{(4)}(\tau_1, \tau_2)^4, \\
 a_3^{10} &\equiv \frac{\omega^2}{\hbar\beta} \quad \text{[Diagram: circle with three dots and a horizontal line]} = \frac{\omega^2}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_2, \tau_3) G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_3, \tau_1)^3, \\
 a_3^{12} &= \frac{\omega^2}{\hbar\beta} \quad \text{[Diagram: circle with three dots and a triangle]} = \frac{\omega^2}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_3, \tau_1)^2, \\
 a_2^6 &\equiv \frac{\omega}{\hbar\beta} \quad \text{[Diagram: circle with two dots and a horizontal line]} = \frac{\omega}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^3, \\
 a_3^8 &\equiv \frac{\omega^2}{\hbar\beta} \quad \text{[Diagram: circle with three dots and a horizontal line]} = \frac{\omega^2}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_2, \tau_3) G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_3, \tau_1)^2, \\
 a_{3'}^{10} &\equiv \frac{\omega^2}{\hbar\beta} \quad \text{[Diagram: circle with three dots and a triangle]} = \frac{\omega^2}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_3, \tau_1)^2.
 \end{aligned}$$

A la limite  $T \rightarrow 0$ , l'approximation  $W_3^\Omega(x_0)$  prend une forme simple

$$\begin{aligned}
 W_3^\Omega(x_0) &= V(x_0) + \frac{\hbar\lambda(x_0)}{2} + \frac{g_2}{2} a^2 + \frac{g_4}{8} a^4 \\
 &\quad - \frac{1}{2\hbar\Omega} \left[ \frac{g_2^2}{2} a^4 + \frac{g_2 g_4}{2} a^6 + \frac{g_3^2}{6} \frac{2}{3} a^4 + \frac{g_4^2}{24} \frac{7}{2} a^8 \right] \\
 &\quad + \frac{1}{6\hbar^2 \Omega^2} \left[ g_2^3 \frac{3}{2} a^6 + g_2 g_3^2 \frac{4}{3} a^8 + g_2^2 g_4 3 a^8 + g_3^2 g_4 \frac{13}{3} a^{10} \right. \\
 &\quad \left. + g_2 g_4^2 \frac{35}{16} a^{10} + g_4^3 \frac{37}{64} a^{12} \right]. \tag{2.96}
 \end{aligned}$$

## 2.7 Evaluation des intégrales de Feynman à $T=0$

Pour calculer les intégrales de Feynman à  $T = 0$ , on utilise la fonction de corrélation suivante (avec  $M = 1$ )

$$G_{\omega^2}^{(2)}(\tau, \tau') = \frac{1}{2\omega} \frac{\cosh(\omega |\tau - \tau'| - \omega \frac{\hbar\beta}{2})}{\sinh(\omega \frac{\hbar\beta}{2})} - \frac{1}{\hbar\beta\omega^2}, \quad (2.97)$$

Pour calculer les intégrales triples, on utilise la propriété suivante

$$\begin{aligned} & \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 f(|\tau_1 - \tau_2|, |\tau_2 - \tau_3|, |\tau_3 - \tau_1|) \\ &= \hbar\beta \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 f(|\tau_1 - \tau_2|, |\tau_2|, |\tau_1|) \\ &= \hbar\beta \left( \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 f(\tau_2 - \tau_1, \tau_2, \tau_1) \right) \\ &+ \hbar\beta \left( \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 f(\tau_1 - \tau_2, \tau_2, \tau_1) \right). \end{aligned} \quad (2.98)$$

En utilisant le logiciel de calcul formel "Maple", on obtient les résultats suivants (on pose  $x \equiv \omega \hbar\beta$ )

$$a^2 \equiv \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau G_{\omega^2}^{(2)}(\tau, \tau) = \frac{\hbar}{\omega x} \left( \frac{x}{2} \coth \frac{x}{2} - 1 \right)$$

$$a_2^4 \equiv \frac{\omega}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 = \left( \frac{\hbar}{\omega} \right)^2 \frac{1}{8x} \frac{1}{\sinh^2(\frac{x}{2})} (4 + x^2 - 4 \cosh x + x \sinh x)$$

$$\begin{aligned} a_3^6 &\equiv \frac{\omega^2}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_2, \tau_3) G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_3, \tau_1) \\ &= \left( \frac{\hbar}{\omega} \right)^3 \frac{1}{64x} \frac{1}{\sinh^3(\frac{x}{2})} \left( -3x \cosh \frac{x}{2} + 2x^3 \cosh \frac{x}{2} + 3 \cosh \frac{3x}{2} + 48 \sinh \frac{x}{2} \right. \\ &\left. + 6x^2 \sinh \frac{x}{2} - 16 \sinh \frac{3x}{2} \right) \end{aligned}$$

$$a_2^8 \equiv \frac{\omega}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G_{\omega^2}^{(4)}(\tau_1, \tau_2)^4 = \left(\frac{\hbar}{\omega}\right)^4 \frac{1}{768x^3} \frac{1}{\sinh^4\left(\frac{x}{2}\right)} (-864 + 18x^4 + 1152 \cosh x$$

$$+ 32x^2 \cosh x - 288 \cosh 2x - 32x^2 \cosh 2x - 288x \sinh x + 24x^3 \sinh x + 144x \sinh 2x$$

$$+ 3x^3 \sinh 2x)$$

$$a_3^{10} \equiv \frac{\omega^2}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_2, \tau_3) G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_3, \tau_1)^3$$

$$= \left(\frac{\hbar}{\omega}\right)^5 \frac{1}{4096x^3} \frac{1}{\sinh^5\left(\frac{x}{2}\right)} (672x \cosh \frac{x}{2} - 8x^3 \cosh \frac{x}{2} + 24x^5 \cosh \frac{x}{2} - 1008x \cosh \frac{3x}{2}$$

$$+ 3x^3 \cosh \frac{3x}{2} + 336x \cosh \frac{5x}{2} + 5x^3 \cosh \frac{5x}{2} - 7680 \sinh \frac{x}{2} - 352x^2 \sinh \frac{x}{2}$$

$$+ 72x^4 \sinh \frac{x}{2} + 3840 \sinh \frac{3x}{2} + 224x^2 \sinh \frac{3x}{2} + 12x^4 \sinh \frac{3x}{2} - 768 \sinh \frac{5x}{2}$$

$$- 64x^2 \sinh \frac{5x}{2})$$

$$a_3^{12} \equiv \frac{\omega^2}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^2 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_3, \tau_1)^2$$

$$= \left(\frac{\hbar}{\omega}\right)^6 \frac{1}{491526x^4} \frac{1}{\sinh^6\left(\frac{x}{2}\right)} (-107520 - 7360x^2 + 624x^4 + 96x^6 + 161280 \cosh x$$

$$+ 12000x^2 \cosh x - 777x^4 \cosh x + 24x^6 \cosh x - 64512 \cosh 2x - 5952x^2 \cosh 2x$$

$$+ 144x^4 \cosh 2x + 10752 \cosh 3x - 28800x \sinh x + 1312x^2 \cosh 3x + 9x^4 \cosh 3x$$

$$+ 1120x^3 \sinh x + 324x^5 \sinh x + 23040x \sinh 2x - 320x^3 \sinh 2x - 5760x \sinh 3x$$

$$- 160x^3 \sinh 3x)$$

$$\begin{aligned}
a_2^6 &\equiv \frac{\omega}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_1, \tau_2)^3 \\
&= \left(\frac{\hbar}{\omega}\right)^3 \frac{1}{24x^2} \frac{1}{\sinh^2\left(\frac{x}{2}\right)} (-24 - 4x^2 + 24 \cosh x + x^2 \cosh x - 9x \sinh x) \\
a_3^8 &\equiv \frac{\omega^2}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_2, \tau_3) G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_3, \tau_1)^2, \\
&= \left(\frac{\hbar}{\omega}\right)^4 \frac{1}{288x^2} \frac{1}{\sinh^3\left(\frac{x}{2}\right)} (45x \cosh \frac{x}{2} - 6x^3 \cosh \frac{x}{2} - 45x \cosh \frac{3x}{2} - 432 \sinh \frac{x}{2} \\
&\quad - 54x^2 \sinh \frac{x}{2} + 144 \sinh \frac{3x}{2} + 4x^2 \sinh \frac{3x}{2}) \\
a_{3'}^{10} &\equiv \frac{\omega^2}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_1, \tau_2) G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_2, \tau_3)^2 G_{\omega^2}^{(2)}(\tau_3, \tau_1)^2 \\
&= \left(\frac{\hbar}{\omega}\right)^5 \frac{1}{2304x^3} \frac{1}{\sinh^4\left(\frac{x}{2}\right)} (-3456 - 414x^2 - 6x^4 + 4608 \cosh x + 496x^2 \cosh x \\
&\quad - 1152 \cosh 2x - 82x^2 \cosh 2x - 1008x \sinh x - 16x^3 \sinh x + 504x \sinh 2x \\
&\quad + 5x^3 \sinh 2x). \tag{2.99}
\end{aligned}$$

### Consequences

1) Les paramètres  $a_m^n$ , qui dépendent de la température, sont formés par le nombre de vertexes  $m$  et le nombre de lignes  $\frac{n}{2}$  pour chaque diagramme associé, ils ont une dimension d'une longueur à la puissance  $n$ , et ils s'écrivent comme  $(\frac{\hbar}{\omega})^{\frac{n}{2}}$  multiplié par une fonction qui dépend d'une variable sans dimension  $x \equiv \beta\hbar\omega$

$$a_m^n = \left(\frac{\hbar}{\omega}\right)^{\frac{n}{2}} \alpha_m^n(x), \tag{2.100}$$

où

$$\alpha_m^n(x) = x^{m-1+\frac{n}{2}} \times \text{const.} \tag{2.101}$$

2) A basse température,  $T \rightarrow 0$ , les intégrales de (2.99) deviennent

$$\begin{aligned}
a_2^4 &\rightarrow a^4, & a_3^6 &\rightarrow \frac{3}{2}a^6, & a_2^8 &\rightarrow \frac{1}{2}a^8, & a_3^{10} &\rightarrow \frac{5}{8}a^{10}, \\
a_3^{12} &\rightarrow \frac{3}{8}a^{12}, & a_2^6 &\rightarrow \frac{2}{3}a^6, & a_3^8 &\rightarrow \frac{8}{9}a^8, & a_{3'}^{10} &\rightarrow \frac{5}{9}a^{10}.
\end{aligned} \tag{2.102}$$

Remarques

1) On a l'équivalence entre la fonction de corrélation  $G_{\Omega}^{x_0}$  et la largeur de fluctuation  $a^2$

$$\langle \delta x(\tau) \delta x(\tau') \rangle_{\Omega}^{x_0} = G_{\Omega}^{x_0}(\tau - \tau') = a^2(\tau - \tau', x_0). \quad (2.103)$$

2) A basses températures,  $x \rightarrow \infty$ , les facteurs  $\alpha_V^{2L}$  qui dépend de  $x$  converge respectivement aux constantes

$$\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{16}, \frac{1}{32}, \frac{5}{(8 \cdot 2^5)}, \frac{3}{(8 \cdot 2^6)}, \frac{1}{12}, \frac{1}{18}, \frac{5}{(9 \cdot 2^5)}.$$

3) A hautes températures,  $x \rightarrow 0$ , les intégrales de Feynman

$$\hbar \beta \left( \frac{1}{\omega} \right)^{V-1} a_V^{2L}, \quad (2.104)$$

diverges comme  $\beta^V \left( \frac{1}{\beta} \right)^L$ , où  $L$  désigne line et  $V$  vertex.

# Chapitre 3

## Méthode Variationnelle de Feynman-Kleinert discrétisée



### 3.1 Introduction

Les principaux résultats de ce chapitre sont obtenus pour la première fois et constituent l'objet de ce mémoire. Nous exploitons les résultats de Kleinert exposés au chapitre précédent pour appliquer la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert discrétisée au potentiel puits double. Les corrections au premier et au troisième ordre, et les diagrammes de Feynman sont calculés en utilisant le logiciel "Maple". Les résultats obtenus sont présentés sous forme de courbes commentées. A la fin, on passe à la limite continue et on retrouve les résultats du chapitre 2.

La méthode Variationnelle de Feynman-Kleinert discrétisée [8] est basée sur la décomposition de l'axe du temps imaginaires  $\tau$  en  $(N + 1)$  points, posons

$$\tau_n = n\epsilon, \quad n = 0, 1 \dots N + 1. \quad (3.1)$$

Le seul changement qu'on va faire, dans les résultats du chapitre précédent, est de remplacer  $\omega_m^2$  par  $\Omega_m \bar{\Omega}_m$ .

$$\omega_m^2 \rightarrow \Omega_m \bar{\Omega}_m = \frac{1}{\epsilon^2} [2 - 2 \cos(\epsilon \omega_m)], \quad (3.2)$$

dans ce cas la largeur de fluctuation  $a^2(x_0)$  prend la forme

$$\begin{aligned}
 a^2(x_0) &= \frac{2}{M\beta} \frac{\partial}{\partial \Omega^2(x_0)} \log \prod_{m=1}^N [\Omega_m \bar{\Omega}_m + \Omega^2(x_0)] \\
 &= \frac{1}{M\beta} \frac{1}{\Omega} \frac{\partial}{\partial \Omega} \log \frac{\sinh\left(\frac{\hbar\beta\Omega_N(x_0)}{2}\right)}{\frac{\hbar\beta\Omega(x_0)}{2}} \\
 &= \frac{1}{M\beta\Omega^2(x_0)} \left[ \frac{\hbar\beta\Omega(x_0)}{2} \coth \frac{\hbar\beta\Omega_N(x_0)}{2} \frac{1}{\cosh\left(\frac{\epsilon\Omega_N(x_0)}{2}\right)} - 1 \right], \quad (3.3)
 \end{aligned}$$

où  $\Omega_N(x_0)$  est définie par

$$\sinh \left[ \frac{\epsilon\Omega_N(x_0)}{2} \right] \equiv \frac{\epsilon\Omega(x_0)}{2}. \quad (3.4)$$

## 3.2 Méthode Variationnelle de Feynman-Kleinert discrétisée au premier ordre

D'après les équations précédentes, le potentiel approximé au premier ordre  $W_1(x_0)$  prend la forme suivante

$$W_1(x_0) = \frac{1}{\beta} \log \frac{\sinh\left(\frac{\hbar\beta\Omega_N(x_0)}{2}\right)}{\frac{\hbar\beta\Omega(x_0)}{2}} + V_{a^2}(x_0) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0). \quad (3.5)$$

Utilisons la méthode d'itération pour déterminer une valeur  $\Omega_1(x_0)$  optimale, qu'on substitue dans (3.5) pour trouver l'expression de l'approximation au premier ordre  $W_1(x_0)$  du puits double

$$W_1^\Omega = V(x_0) + F_\Omega^{x_0} + \left( \frac{g_2}{2} a^2 + \frac{g_4}{8} a^4 \right), \quad (3.6)$$

où  $a^2$  est la largeur de fluctuation qui dépend de  $N$ .

### 3.2.1 Courbes et Discussion

On se limite dans notre étude aux cas  $N = 1$  et  $N = 63$  : on trace  $W_1(x_0)$  pour  $N = 1$  et  $N = 63$  en fonction de  $x_0$  ( $x_0 = -3.3$ ), avec  $g = 0.4$ , et  $\beta = 20$  (basse température).

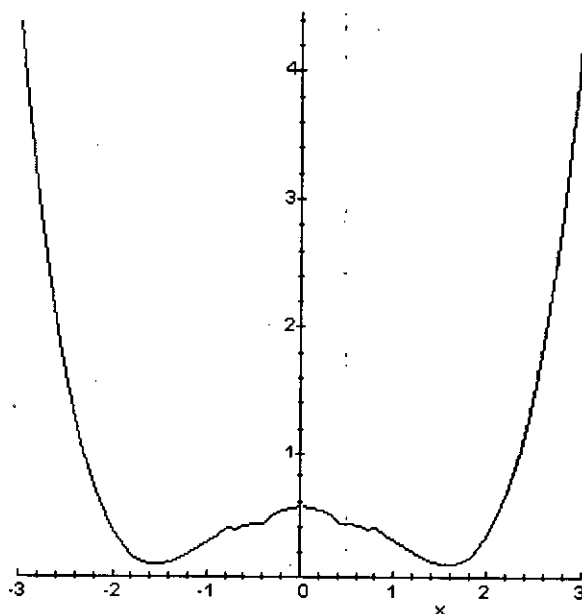


Fig. 5- Potentiel classique effectif au premier ordre  $W_1(x_0)$  du puits double pour  $N = 1, g = 0.4$  et  $\beta = 20$ .

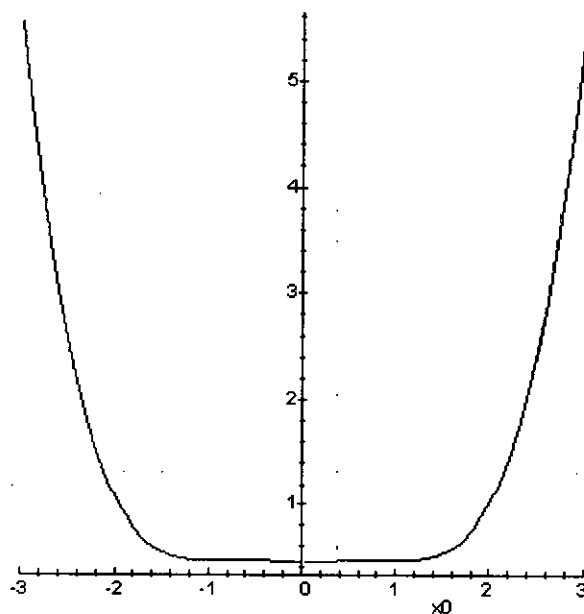


Fig. 6 - Potentiel classique effectif au premier ordre  $W_1(x_0)$  du puits double pour  $N = 63, g = 0.4$  et  $\beta = 20$ .



### 3.3 Méthode Variationnelle de Feynman-Kleinert discrétisée au deuxième ordre 41

Il est intéressant de comparer ces deux courbes avec les courbes exactes obtenues à partir de la simulation de Monte Carlo. Pour  $N = 1$ , la coïncidence est plus au moins exacte. Pour les petites valeurs de  $N$  la coïncidence est bonne au voisinage et à l'extérieur des minima du potentiel. Pour les grandes valeurs de  $N$ , le potentiel effectif classique exact a des oscillations qui ne sont reproduites par l'approximation [8].

### 3.3 Méthode Variationnelle de Feynman-Kleinert discrétisée au deuxième ordre

Passons maintenant au calcul du potentiel approximé au deuxième ordre  $W_2(x_0)$ . D'abord tronquons le développement perturbatif (2.68) au deuxième ordre par rapport  $g$ , on trouve l'approximation  $W_2(x_0)$

$$W_2^\Omega = V(x_0) + F_\Omega^{x_0} + \left(\frac{g_2}{2}a^2 + \frac{g_4}{8}a^4\right) - \frac{1}{2\hbar\Omega} \left[ \frac{g_2^2}{2}a_2^4 + \frac{g_2g_4}{2}a_2^4a^2 + \frac{g_4^2}{8}a_2^4a^4 + \frac{g_4^2}{24}a_2^8 + \frac{g_3^2}{6}a_2^6 \right]. \quad (3.7)$$

Ensuite minimisons  $W_2(x_0)$  par rapport à  $\Omega$ . Il n'existe pas de valeur de  $\Omega$  qui minimise  $W_2(x_0)$  à cause des signes alternés des hautes puissances de  $a$ . L'approximation  $W_2^{(n)}(x_0)$  se comporte de deux manières différentes

$$\lim_{\Omega} W_2^{(n)}(x_0) = \begin{cases} (-1)^{n-1} g^n \left(\frac{1}{\Omega}\right)^{3n-1} & \text{quand } \Omega \rightarrow 0 \\ \infty & \text{quand } \Omega \rightarrow \infty \end{cases} \quad (3.8)$$

Donc on ne peut pas utiliser l'approximation du deuxième ordre  $W_2^{(n)}(x_0)$  pour calculer les valeurs des énergies. Et par conséquent, on peut dire que seulement les approximations impaires, qui ont un minimum par rapport à  $\Omega$ , qui contribuent dans les calculs [8].

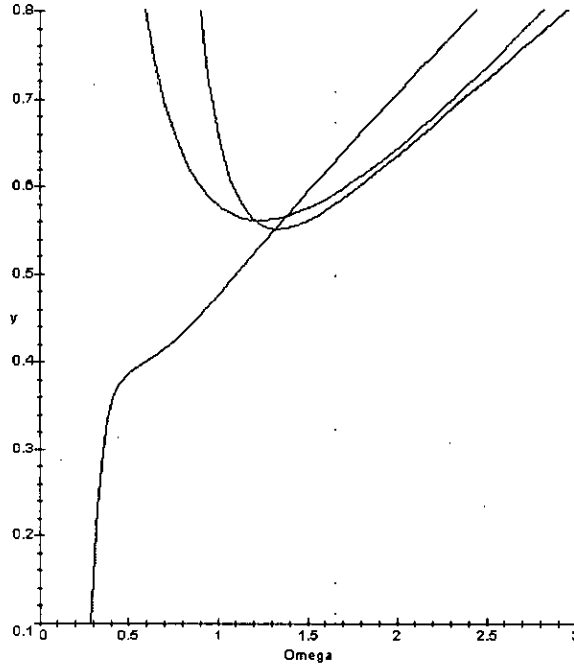


Fig. 7-  $W_{1,2,3}^{\Omega}$  en fonction de  $\Omega$  à  $T = 0$ . ici  $g = 0.4$ .

Le rouge pour  $W_1$ . Le bleu pour  $W_2$ . Le vert pour  $W_3$ .

### 3.4 Méthode Variationnelle de Feynman-Kleinert discrétisée au troisième ordre

Utilisons la méthode d'itération pour déterminer une valeur  $\Omega_3(x_0)$  optimale, qu'on substitue dans (2.93) pour trouver l'expression de l'approximation au troisième ordre  $W_3(x_0)$  du puits double. Ensuite, utilisons les équations (3.4) et (3.3) pour calculer les largeurs de fluctuation du chapitre précédent, qu'on substitue dans l'équation (2.93) pour trouver le potentiel effectif au troisième ordre  $W_3(x_0)$  du puits double qui dépend de  $N$

$$\begin{aligned}
 W_3^{\Omega} = & V(x_0) + F_{\Omega}^{x_0} + \left(\frac{g_2}{2}a^2 + \frac{g_4}{8}a^4\right) - \frac{1}{2\hbar\Omega} \left[\frac{g_2^2}{2}a_2^4 + \frac{g_2g_4}{2}a_2^4a^2 + \frac{g_4^2}{8}a_2^4a^4\right. \\
 & + \frac{g_4^2}{24}a_2^8 + \frac{g_3^2}{6}a_2^6] + \frac{1}{6\hbar^2\Omega^2} \left[g_2^3a_3^6 + 3\left(\frac{g_2^2g_4}{4}(a_2^4)^2 + \frac{g_2^2g_4}{2}a_3^6a^2\right) + 3\left(\frac{g_2g_4^2}{4}(a_2^4)^2a^2\right.\right. \\
 & + \frac{g_2}{4}a_3^6a^4 + \frac{g_2g_4^2}{6}a_3^{10} + \frac{g_2g_3^2}{2}a_3^8) + \left(\frac{3g_4^3}{16}(a_2^4a^2)^2 + \frac{g_4^3}{8}a_3^6a^6 + \frac{g_4^3}{4}a_3^{10}a^2 + \frac{g_4^3}{8}a_3^{12}\right. \\
 & \left. \left. + \frac{3g_3^2g_4}{4}a_3^{10} + \frac{3g_3^2g_4}{4}a_3^8a^2\right)\right]. \tag{3.9}
 \end{aligned}$$

Les constantes  $g_2, g_3$  et  $g_4$  sont définies dans (2.62).

L'expression de  $W_3^\Omega$  s'écrit sous forme de boucles (diagrammes de Feynman) comme suit

$$\begin{aligned}
 W_3^\Omega = & \frac{1}{\beta} \left\{ -\frac{1}{2} \text{ (circle) } + \left( \frac{1}{2} \text{ (circle with dot) } + \frac{1}{8} \text{ (two circles) } \right) \right. \\
 & -\frac{1}{2!} \left[ \frac{1}{2} \text{ (circle with two dots) } + \frac{1}{2} \text{ (two circles) } + \frac{1}{8} \text{ (three circles) } \right. \\
 & \left. \left. + \frac{1}{24} \text{ (circle with three dots) } + \frac{1}{6} \text{ (circle with four dots) } \right] + \frac{1}{3!} \left[ \text{ (circle with five dots) } \right. \\
 & \left. + 3 \left( \frac{1}{4} \text{ (two circles) } + \frac{1}{2} \text{ (two circles) } \right) + 3 \left( \frac{1}{4} \text{ (three circles) } \right) \right. \\
 & \left. + \frac{1}{6} \text{ (circle with three dots) } + \frac{1}{4} \text{ (two circles) } + \frac{1}{2} \text{ (circle with four dots) } \right) \\
 & + \left( \frac{3}{16} \text{ (three circles) } + \frac{1}{8} \text{ (circle with two dots) } + \frac{1}{4} \text{ (circle with five dots) } \right. \\
 & \left. + \frac{1}{8} \text{ (circle with four dots) } + \frac{3}{4} \text{ (circle with three dots) } + \frac{3}{4} \text{ (circle with four dots) } \right) \left. \right\}
 \end{aligned}$$

Les expressions explicites des largeurs de fluctuation sont calculées en utilisant maple et données en annexe à la fin de ce mémoire

### 3.4.1 Courbes et Discussion

Pour une meilleure illustration, on trace d'abord  $W_3(x_0)$  pour  $N = 1$  et  $N = 63$  en fonction de  $x_0$  ( $x_0 = -3..3$ ), avec  $g = 0.4$  et  $\beta = 20$  (basse température). Ensuite, on regroupe dans la figure 10 plusieurs courbes pour différentes valeurs de  $N = 1, 3, 7, 15, 31$  et  $63$ , avec  $g = 0.4$  et  $\beta = 20$ .

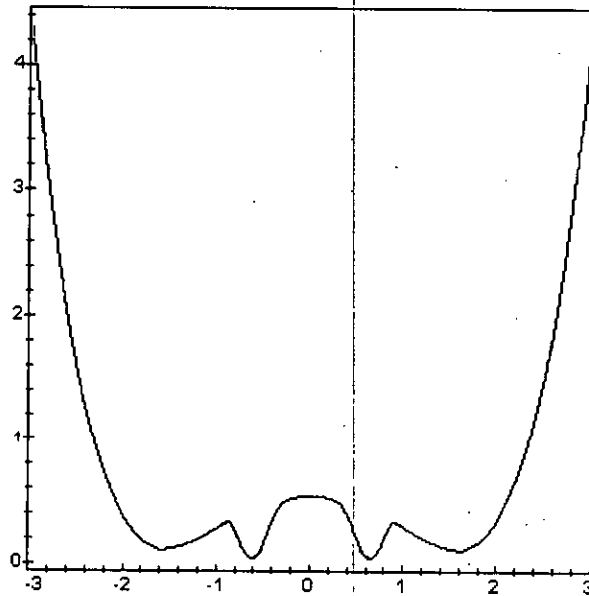


Fig. 8- Potentiel effectif au troisième ordre  $W_3(x_0)$  du puits double pour  $N = 1$ ,  $g = 0.4$  et  $\beta = 20$ .

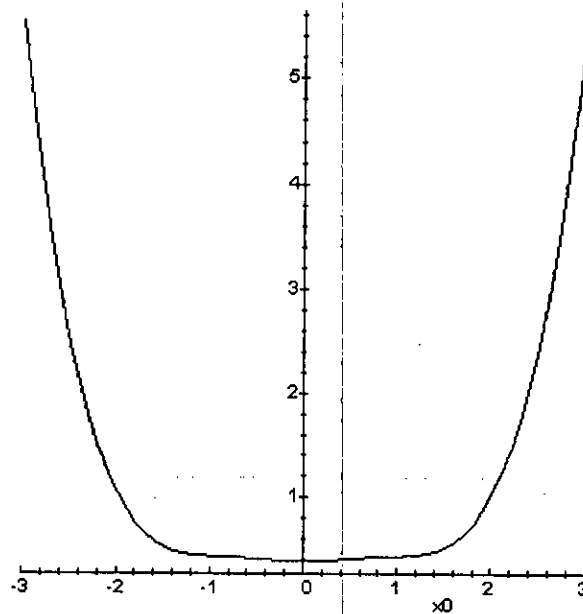


Fig. 9- Potentiel effectif au troisième ordre  $W_3(x_0)$  du puits double pour  $N = 63$ ,  $g = 0.4$  et  $\beta = 20$ .

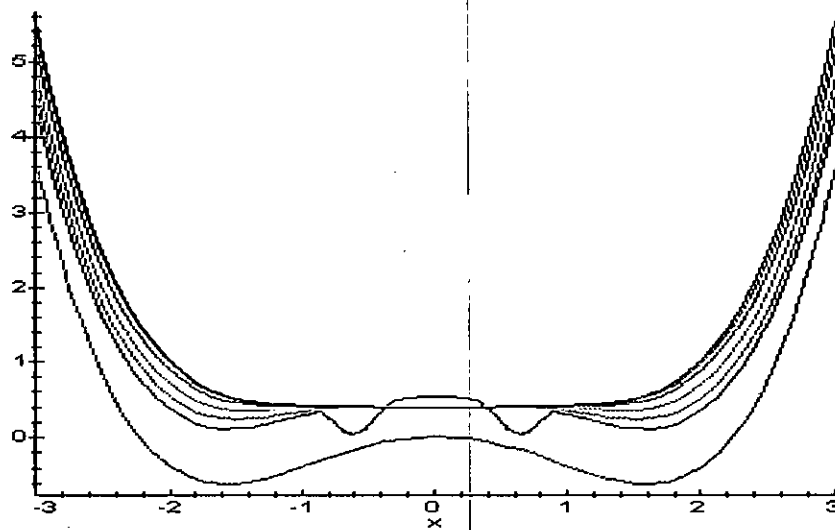


Fig.10 - Potentiel effectif au troisième ordre  $W_3(x_0)$  du puits double

Le rouge, pour  $N = 1$ . Le bleu, pour  $N = 3$ . Le vert, pour  $N = 7$ . Le jaune, pour  $N = 15$ .  
Le violet, pour  $N = 31$  et L'orange, pour  $N = 63$ . Le maron concerne  $V(x)$  du puits double.

Ici  $g = 0.4$ ,  $\beta = 20$ .

- Comparons les courbes du potentiel effectif au troisième ordre  $W_3(x_0)$  du puits double par rapport à celles de  $W_1(x_0)$  : Pour  $N = 1$ , La coincidence des courbes du potentiel effectif au troisième ordre  $W_3(x_0)$  du puits double est meilleure que celles de  $W_1(x_0)$ . Pour les petites valeurs de  $N$  la coincidence est bonne à l'extérieur des minima du potentiel. Pour les grandes valeurs de  $N$ , le potentiel effectif classique a des oscillations qui ne sont pas reproduites par l'approximation.

- A la limite continue,  $\epsilon \rightarrow 0$ , on retrouve les équations des largeurs de fluctuation et le potentiel effectif  $W_3(x_0)$  du deuxième chapitre .

- A la limite des basses températures,  $T \rightarrow 0$ , on obtient les expressions des largeurs de fluctuation (2.102) du chapitre deux.

## Conclusion

Dans ce travail, nous avons introduit la formulation intégrale de chemin euclidien pour un système quantique en contact avec un bain thermique à la température  $T$ . Les grandeurs thermodynamiques qui caractérisent ce système sont déterminées à partir de la fonction de partition  $Z$ , qui est l'équivalent du propagateur en utilisant un temps imaginaire. Ensuite, on a réduit la fonction de partition à une forme similaire à celle de la fonction de partition classique où le potentiel classique est remplacé par un potentiel classique effectif. Il existe plusieurs méthodes d'approximations [8] pour évaluer cette fonction de partition. Nous connaissons déjà les développements perturbatifs et semi classique qui sont biaisés par des graves problèmes de divergence pour toute valeur de la constante de couplage. La méthode la plus efficace et qui converge rapidement (d'ailleurs de manière exponentielle) est la méthode variationnelle qui a été proposée par Feynman et développée par Kleinert. L'idée principale dans cette approche est d'utiliser l'action de l'oscillateur harmonique de fréquence  $\Omega(x_0)$  qui est centré au point  $x_0$  comme action d'essai [8].

Il n'est pas facile en mécanique quantique d'obtenir une forme exacte à  $V_{eff,cl}(x_0)$  qui correspond à un potentiel  $V(x)$  quelconque, mais il n'est pas difficile de trouver une approximation à  $V_{eff,cl}(x_0)$ . Pour trouver une forme approximée de  $V_{eff,cl}(x_0)$  on utilise la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert (F-K).

Le deuxième chapitre concerne l'étude des oscillateurs anharmoniques. En utilisant la méthode variationnelle de F-K, on calcule l'énergie libre pour le potentiel anharmonique ( $\omega^2 = 1$ ) et le puits double ( $\omega^2 = -1$ ) au premier et au troisième ordre. Les résultats obtenus sont présentés sous forme de courbes commentées. Ensuite, on applique la méthode pour les états excités. L'application du développement variationnel perturbatif pour le cas de l'oscillateur anharmonique, à basse température ( $T = 0$ ) et à haute température ( $T > 0$ ), a été introduit sous la forme de boucles de diagrammes de Feynman. La remarque la plus intéressante dans cette étude est que les corrections paires du potentiel effectif classique n'ont pas un minimum par rapport à  $\Omega$  et par conséquent leurs contributions sont nulles dans l'approximation. Enfin, on évalue les boucles des diagrammes de Feynman à  $T = 0$ .

Dans le chapitre 3, qui constitue l'objet de ce mémoire, nous avons exploité les résultats exposés au chapitre 2 pour appliquer la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert sous forme discretisée au puits double. La discretisation de la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert consiste en la décomposition de l'axe du temps en  $(N + 1)$  intervalles. Tous les calculs obtenus, en utilisant le logiciel "Maple", sont fonction de  $N$  au premier et au troisième ordre de l'approximation. Les expressions des diagrammes de Feynman et les corrections sont très longues. Les résultats obtenus sont présentés sous forme de courbes commentées. Pour  $N = 1$ , la coïncidence des courbes du potentiel effectif au 3ème ordre du puits double est meilleure que celles du premier ordre. Pour les grandes valeurs de  $N$ , le potentiel effectif classique a des oscillations qui

ne sont pas reproduites par l'approximation. Pour tester la validité de ces résultats, on passe à la limite continue et on retrouve les résultats du chapitre précédent.

Pour conclure ce travail, on peut dire que la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert est l'une des méthodes d'approximation les plus efficace aussi bien pour les couplages faibles que pour les couplages forts. Les résultats obtenus par cette méthode sont très proches des résultats obtenus à partir de l'équation de Schrödinger [8]



# Bibliographie

- [1] J. Zinn-Justin, *Intégrale de Chemin en Mécanique Quantique : Introduction*, EDP-Sciences, 2003, Paris.
- [2] R. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20** (1948) 267 ; *Phys. Rev.* **80** (1950) 440.
- [3] M. Kac, *Trans. Amer. Math. Soc.* **65**, (1949) 1 ; M. Kac, *Probability and Related Topics in Physical Sciences*, Chap.4, Interscience, New York, 1959.
- [4] E. Nelson, *J. Math. Phys.* **5**, (1964) 332.
- [5] A.O. Caldeira and A.J. Leggett, *Phys. Rev.* **A31**, 1059 (1985).
- [6] R.P. Feynman, *Statistical Mechanics*, Benjamin, Reading, 1972.
- [7] R.P. Feynman and Kleinert, *Phys. Rev. A* **34** (1986) 5080.
- [8] H. Kleinert, *Path integral in quantum mechanics, Statistics and polymer physics*, 2nd Edition, 2004, World Scientific, Singapore.
- [9] R. Giachetti and V. Tognetti, *Phys. Rev. Lett.* **55**, (1985) 912 ; *Int. J. Magn. Mater.* **54-57**, (1986) 861.  
R. Giachetti, V. Tognetti, and R. Vaia, *Phys. Rev. B* **33**, (1986) 7647 .
- [10] Kh. Nouicer and L. Chetouani, *Acta Physica Slovaca*, **49**, (1999) 309.
- [11] W. Janke and B.K. Cheng, *Phys. Lett. A* **129**, (1988) 140.
- [12] M. Bentaiba, L. Chetouani and T.F. Hammann, *Phys. Lett. A* **189**, (1994) 433.
- [13] M. Bentaiba, L. Chetouani and T.F. Hammann, *Z. Naturforsch.* **47a**, (1992) 1013.
- [14] S. Srivastava and Vishwamittar, *Phys. Rev. A* **44**, 8006, (1991).

ANNEXE : Diagrammes de Feynman

$$a^2 = \coth\left(\frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}\right) \Omega^{-1} \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4}} - \frac{1}{x \Omega}$$

$$\begin{aligned} a_2^4 = & -1/2 \left[ -e^{4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 - 2 x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) e^{4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \right. \\ & - 4 x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) e^{2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\ & + 4 x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) e^{2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\ & + 4 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x + 4 e^{4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x \\ & \left. - 8 e^{2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x \right. \\ & \left. + x^2 - 2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)}{\epsilon \Omega} \right] \\ & \times \epsilon x^{-2} \Omega^{-1} \left( e^{2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} - 1 \right)^{-2} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{-1} (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^{-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_3^6 = & 1/8 \left[ 3e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^3 - 3e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^3 \right. \\
& + 8 \frac{x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2}}{\epsilon^2 \Omega^2} + 24 x^2 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \\
& - 24 e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& - 8 e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& - 24 \frac{x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} + 3 x^3 \\
& + 72 x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 24 e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 72 x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 8 e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^5 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 12 e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^4 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 72 e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \\
& + 24 e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 8 e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^5 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& - 72 e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} - 24 e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \\
& \left. - 12 x^4 e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} - 3 e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^3 \right] \\
& \times \epsilon^2 x^{-3} \Omega^{-1} (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^{-2} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{-3/2} \left( e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} - 1 \right)^{-3}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_2^8 = & 1/12 \left[ -3x^4 - 48e^{\frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} x \right. \\
& - 72 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^2 e^{\frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} + 72 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^2 e^{2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} \\
& - 16 e^{\frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^3 \\
& - 48 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 e^{\frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 72 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 12 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 48 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 12 \frac{(\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \\
& + 144 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^3 e^{\frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 288 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^3 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 144 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^3 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 72 x^5 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 36 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^2 + 192 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} x \\
& + 288 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^3 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} + 192 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} x \\
& - 128 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^3 - 288 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} x \\
& - 128 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^3 + 3 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 \\
& + 24 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 - 24 x^4 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} - 36 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^2 \\
& \left. - 16 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^3 - 48 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} x \right] \\
& \times \epsilon x^{-4} \Omega^{-3} (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^{-1} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{-2} \left( e^{2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} - 1 \right)^{-4}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_3^{10} = & -\frac{1}{96} \left[ -15 x^5 - 15 e^{10 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^5 - 105 e^8 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 \right. \\
& + 120 e^6 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 + 120 e^4 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 \\
& - 105 e^2 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 - 396 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^3 \\
& - 672 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} x^2 - 128 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^4 \\
& + 1188 e^8 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^3 - 792 e^4 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^3 \\
& - 896 e^2 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^4 + 3360 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} x^2 e^2 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \\
& + 896 e^8 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^4 - 6720 e^4 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} x^2 \\
& + 672 e^{10} \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} x^2 - 3328 e^6 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^4 \\
& - 3360 e^8 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} x^2 + 1188 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^3 e^2 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \\
& - 792 e^6 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^3 + 6720 e^6 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} x^2 \\
& + 128 e^{10} \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^4 + 3328 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^4 e^4 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \\
& - 396 e^{10} \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^3 \\
& - 480 x^2 (\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{5/2} e^8 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& - 960 x^2 (\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{5/2} e^4 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 32 \frac{(\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^4 \text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \\
& + 72 e^2 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^6 \text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 144 \frac{(\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} x^3 \text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \\
& + 480 \frac{(\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 x^2 \text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \\
& - 96 \frac{x^2 (\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{5/2}}{\epsilon^2 \Omega^2} \\
& - 1728 x^4 (\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} e^6 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 288 x^5 (\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) e^4 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 288 x^5 (\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) e^6 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 1728 x^4 (\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} e^4 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 2400 e^8 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 x^2 \text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 384 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^5 e^4 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 288 x^5 (\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) e^8 \frac{\text{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \epsilon^{-2} \Omega^{-2}
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
a_3^{12} = & -\frac{1}{96} \left[ -9x^6 - 17280 e^8 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \right. \\
& - 1152 e^{12} \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 + 8520 e^8 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \\
& - 3456 e^{10} \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^3 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} + 3248 e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \\
& - 648 e^8 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^7 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 1440 e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^3 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& - 1440 x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^3 e^8 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& - 96 e^{12} \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^3 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 9 e^8 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^6 + 9 e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^6 - 144 e^2 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^6 \\
& - 144 e^{10} \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^6 + 288 e^6 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^6 - 9 e^{12} \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^6 \\
& - 864 x^3 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} - 1152 x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 - 328 x^4 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \\
& - 4320 e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^3 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} - 17280 e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \\
& + 3456 e^2 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^3 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} - 13600 e^6 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \\
& - 1504 e^2 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} + 1504 e^{10} \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \\
& - 1392 e^2 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) - 3248 e^8 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \\
& + 23040 e^6 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 + 6912 e^{10} \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \\
& + 6912 e^2 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 + 80 e^{12} \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \\
& - 328 e^{12} \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \\
& - 13824 e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 2304 e^6 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^6 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& - 576 e^{10} \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 648 e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^7 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 96 \frac{x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^3}{\epsilon^2 \Omega^2} \\
& - 96 e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^8 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& - 96 e^8 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^8 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 576 \frac{x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{5/2}}{\epsilon \Omega} \\
& + 576 e^{10} \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^3 \epsilon^{-2} \Omega^{-2}
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& -768 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^8 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} + 144 \frac{x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2}{\epsilon \Omega} \\
& + 8640 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{5/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 11520 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{5/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 13824 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 8520 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) + 4320 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^3 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \\
& - 1392 e^{10} \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) + 864 e^{12} \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^3 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \\
& - 3456 e^{10} \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{5/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 576 e^{12} \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{5/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 144 e^{12} \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 3456 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& - 768 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& - 4224 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 576 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& - 1152 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^6 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 8640 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{5/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 720 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 4224 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 576 e^{10} \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 3456 e^{10} \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 1920 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^6 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 80 x^5 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \\
& - 3840 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^6 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 2112 e^{10} \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 1920 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^6 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 1536 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-2} \Omega^{-2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -3456 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{5/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 2112 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& - 576 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 3456 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 720 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 576 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^3 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 768 e^{10} \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 2304 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& - 1152 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^6 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 2304 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 20736 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 1920 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^3 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& + 1536 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& \times \epsilon^2 x^{-6} \Omega^{-4} (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^{-2} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{-3} \left( e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} - 1 \right)^{-6}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_2^6 = & 1/3 \left[ 9 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x - 9/2 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^2 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \right. \\
& + x^3 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} - 3 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 10 x^3 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} - 18 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x \\
& - 18 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^3 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& + 6 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& \left. - 3 \frac{(\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} + 9 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x + x^3 + 9/2 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^2 \right] \\
& \epsilon x^{-3} \Omega^{-2} \left( e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} - 1 \right)^{-2} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{-3/2} (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^{-1}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_3^8 = & -1/18 \left[ -4x^4 + 72e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \right. \\
& -288e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& -252e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^4 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& +18e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& +432e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& +126e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^4 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& +72e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^4 - 32e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^4 - 32e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^4 \\
& -4e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^4 - \frac{63}{2} x^3 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} - 90x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \\
& -18e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& +126e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^4 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& -288e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& -18 \frac{x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2}{\epsilon^2 \Omega^2} \\
& +72e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& +9 \frac{x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)}{\epsilon \Omega} \\
& +36e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^5 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& -24e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^5 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& +72e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& -18e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& +24e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^5 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} + 63e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^3 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \\
& +360e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) - 90e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \\
& + \frac{63}{2} e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^3 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} - 63e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^3 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \\
& +360e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) - 540e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \\
& -108e^{\frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-2} \Omega^{-2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +72 \frac{x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2}}{\epsilon \Omega} \\
& -36 e^{2 \frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^5 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& -36 e^{2 \frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^4 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& -36 e^{6 \frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^4 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& +72 e^{4 \frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^4 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& -9 e^{8 \frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \Big] \\
& \times \epsilon^2 x^{-4} \Omega^{-2} (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^{-2} \left( e^{2 \frac{\pi \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega}} - 1 \right)^{-4} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{-2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_3^{10} = & 1/36 \left[ 5x^5 + 144e^2 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^4 (\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega))^2 (\epsilon^2\Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-2}\Omega^{-2} \right. \\
& - 432e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^4 (\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega))^2 (\epsilon^2\Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-2}\Omega^{-2} \\
& - 1800e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega) (\epsilon^2\Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-1}\Omega^{-1} \\
& + 144e^8 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^5 (\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega))^2 (\epsilon^2\Omega^2 + 4) \epsilon^{-2}\Omega^{-2} \\
& + 432e^6 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^4 (\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega))^2 (\epsilon^2\Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-2}\Omega^{-2} \\
& - 144e^6 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^6 (\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega))^2 \sqrt{\epsilon^2\Omega^2 + 4} \epsilon^{-2}\Omega^{-2} \\
& + 144e^2 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^5 (\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega))^2 (\epsilon^2\Omega^2 + 4) \epsilon^{-2}\Omega^{-2} \\
& - 144e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^5 (\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega))^2 (\epsilon^2\Omega^2 + 4) \epsilon^{-2}\Omega^{-2} \\
& + 144e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^6 (\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega))^2 \sqrt{\epsilon^2\Omega^2 + 4} \epsilon^{-2}\Omega^{-2} \\
& - 144e^8 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^4 (\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega))^2 (\epsilon^2\Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-2}\Omega^{-2} \\
& - 1440e^2 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} (\epsilon^2\Omega^2 + 4)^{3/2} x^2 - 850e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} \sqrt{\epsilon^2\Omega^2 + 4} x^4 \\
& - 2880e^6 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} (\epsilon^2\Omega^2 + 4)^{3/2} x^2 + 162e^{10} \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} (\epsilon^2\Omega^2 + 4) x^3 \\
& - 486e^2 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} (\epsilon^2\Omega^2 + 4) x^3 + 324e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} (\epsilon^2\Omega^2 + 4) x^3 \\
& + 1440e^8 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} (\epsilon^2\Omega^2 + 4)^{3/2} x^2 - 41e^{10} \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} \sqrt{\epsilon^2\Omega^2 + 4} x^4 \\
& + 264e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^5 \operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega) \sqrt{\epsilon^2\Omega^2 + 4} \epsilon^{-1}\Omega^{-1} \\
& - 144e^6 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^5 (\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega))^2 (\epsilon^2\Omega^2 + 4) \epsilon^{-2}\Omega^{-2} \\
& + 36 \frac{x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega))^2 (\epsilon^2\Omega^2 + 4)^{5/2}}{\epsilon^2\Omega^2} - 36 \frac{x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega) (\epsilon^2\Omega^2 + 4)^{3/2}}{\epsilon\Omega} \\
& - 360e^6 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega))^2 (\epsilon^2\Omega^2 + 4)^{5/2} \epsilon^{-2}\Omega^{-2} \\
& + 180e^8 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega))^2 (\epsilon^2\Omega^2 + 4)^{5/2} \epsilon^{-2}\Omega^{-2} \\
& + 108e^2 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega) (\epsilon^2\Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-1}\Omega^{-1} \\
& - 264e^2 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^5 \operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega) \sqrt{\epsilon^2\Omega^2 + 4} \epsilon^{-1}\Omega^{-1} \\
& - 648e^2 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^4 \operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega) (\epsilon^2\Omega^2 + 4) \epsilon^{-1}\Omega^{-1} \\
& + 900e^2 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega) (\epsilon^2\Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-1}\Omega^{-1} \\
& + 99e^8 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^5 + 5e^{10} \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^5 + 99e^2 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^5 \\
& - 104e^6 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^5 - 104e^4 \frac{\operatorname{arcsinh}(1/2\epsilon\Omega)}{\epsilon\Omega} x^5 + 288 (\epsilon^2\Omega^2 + 4)^{3/2} x^2 \\
& + 41 \sqrt{\epsilon^2\Omega^2 + 4} x^4 + 162 (\epsilon^2\Omega^2 + 4) x^3
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +1800 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& +108 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& +1944 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& +648 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& -264 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& +180 e^{10} \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& -72 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& -72 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& +264 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^5 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& -36 e^{10} \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^3 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& -1944 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^4 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& +120 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^6 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& -180 \frac{x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2}{\epsilon \Omega} \\
& -900 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^2 \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& -120 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^6 \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega) \epsilon^{-1} \Omega^{-1} \\
& -180 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{5/2} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& +360 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{5/2} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& -288 e^{10} \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} x^2 + 324 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^3 \\
& -215 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^4 + 850 e^6 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^4 \\
& -486 e^8 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4) x^3 + 215 e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} \sqrt{\epsilon^2 \Omega^2 + 4} x^4 \\
& +2880 e^4 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{3/2} x^2 \\
& -36 e^{10} \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} x^2 (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^2 (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{5/2} \epsilon^{-2} \Omega^{-2} \\
& \times \epsilon^2 x^{-5} \Omega^{-3} (\operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega))^{-2} (\epsilon^2 \Omega^2 + 4)^{-5/2} \left( e^2 \frac{x \operatorname{arcsinh}(1/2 \epsilon \Omega)}{\epsilon \Omega} - 1 \right)^{-5}
\end{aligned}$$

## ملخص

قمنا بإعطاء علاقات تقريبية من الرتبة الأولى والرتبة الثالثة للكمون الفعال, وهذا باستعمال طريقة تقريبية تسمى "الطريقة التغيرية لفانينمن- كلينرت". هذه الطريقة تتركز أساسا على استعمال تكاملات الطريقة الاقليدية, التي طورها حديثا فانينمن في كتابه "الميكانيكا الستاتيسيتيكي", بالاستعانة بالتقريبات في درجات الحرارة المنخفضة. استعمال هذه الطريقة التقريبية تسمح لنا بحساب دالة التوزيع لهزاز لا توافقي في درجات الحرارة المنخفضة و المرتفعة. ثم إيجاد علاقات تقريبية من الرتبة الأولى و الثالثة للطاقة الحرة. الهدف من عملنا هذا هو اعادة الحسابات السابقة باستعمال الطريقة التغيرية لفانينمن- كلينرت المتقطعة التي تعتمد على تقسيم محور الزمن إلى (ن+1) جزء.

## Résumé

Nous avons donné des formules approximées du potentiel effectif au premier et au troisième ordre, par l'utilisation d'une méthode approximative nommée "méthode variationnelle de Feynman - Kleinert". Cette approche est basée sur l'utilisation des intégrales de chemin Euclidien, qui sont développées récemment par Feynman dans son livre "statistical mechanics", à l'aide des approximations à basse température. L'utilisation de cette approche variationnelle, nous permet de calculer la fonction de partition d'un oscillateur anharmonique à basse comme à haute température.

Et de trouver dans un deuxième lieu les formules approximées de l'énergie libre au premier et au troisième ordre.

Le but de notre travail, et de refaire les calculs précédents, on utilisons la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert discrétisé qui est basée sur la décomposition de l'axe de temps à (N+1) parties.

## Summary

We give the approximates formulas of the effective classical potential in the first and third order. With the utilisation of an approximate method "variational method of Feynman - Kleinert". This approximation was based on the used of the Euclidean path integrals developed early by Feynman in his textbook on "statistical mechanics", improving greatly the accuracy at low temperatures. The use of the variational approximate, we permit the calculation of the partition function of anharmonic oscillator in low and high temperatures. End find in the second one the approximates formulas of free energy in the first and third order.

Our work, is based on comparison between this method generally, and the same method but discretisely, which is based on the discretisation of the time axis for (N+1) discrete points.