THESE de DOCTORAT de L'UNIVERSITE PARIS 6

Spécialité :

PHYSIQUE

présentée

par M. Michel CAFFAREL

pour obtenir le titre de **DOCTEUR DE L'UNIVERSITE PARIS 6**

Sujet de la thèse :

Méthodes d'intégration fonctionnelle et méthodes Monte Carlo pour le traitement de problèmes quantiques. Applications en physique atomique et moléculaire .

soutenue le 27 MARS 1987

devant le jury composé de :

M . M. Allavena
M . P. Claverie
M . J.P. Daudey
M . J.C. Le Guillou
M . D. Levesque
M . J.W. Moskovitz

ERRATA

Chapitre 1

- pages 34-35: quelques erreurs dans la démonstration. Une version corrigée est donnée dans les deux pages qui suivent.

Chapitre 2

- problème de notation: les sous-sections II.1 ,II.2 ,II.3 II.4 et II.5 du chapitre 2 sont parfois désignées par: II.A II.B, II.C, II.D et II.E (pages 64,65,79,80,84,87,91 et 92) tandis que les sous-sections VII.1 VII.2 et VII.3 du chapitre 1 sont parfois désignées par VII.A VII.B et VII.C (pages 78 et 84).

- page 80 ,deuxième ligne à partir du haut, il faut lire:

$$\langle \psi | f \varphi_0^{(0)} \rangle = \langle \psi | g \varphi_0^{(0)} \rangle = 0$$

et non:

$$\langle \psi | f \varphi_0^{\prime(0)} \rangle = \langle \psi | g \varphi_0^{(0)} \rangle$$

$\varepsilon_i = \tau_i / n$ and the following usual Trotter formula has been used:

$$e^{A+B} = \lim_{n \to +\infty} \left[e^{A/n} e^{B/n} \right]^n \tag{IV.8}$$

Introducing the spectral resolution of operator X, namely

$$\int dx \, |x\rangle\langle x| = \mathbb{1} \tag{IV.9}$$

between each operator we get:

$$I_{A_1 \ldots A_q}(t) = \lim_{n \to +\infty} \int \prod_{j=1}^{q+1} \prod_{i=0}^{2n} dX_i^{(j)} \langle f \varphi_0^{(0)} | X_0^{(1)} \rangle \prod_{j=1}^{q} \prod_{i=0}^{2n-2,2} \langle X_i^{(j)} | e^{\varepsilon_j R^{(0)}} | X_{i+1}^{(j)} \rangle \langle X_{i+1}^{(j)} | e^{-\varepsilon_j V_p} | X_{i+2}^{(j)} \rangle$$

$$\times \langle X_{2n}^{(j)} | A_j | X_0^{(j+1)} \rangle \prod_{i=0}^{2n-2,2} \langle X_i^{(q+1)} | e^{\varepsilon_{q+1} R^{(0)}} | X_{i+1}^{(q+1)} \rangle \langle X_{i+1}^{(q+1)} | e^{-\varepsilon_{q+1} V_p} | X_{i+2}^{(q+1)} \rangle \langle X_{2n}^{(q+1)} | g \varphi_0^{(0)} \rangle$$

where $\prod_i^{n,m}$ means $\prod_i^{n}$ with steps of size m.

Using relations:

$$\langle X_{i+1}^{(k)} | e^{-\varepsilon_k V_p} | X_{i+2}^{(k)} \rangle = \delta(X_{i+1}^{(k)} - X_{i+2}^{(k)}) \, e^{-\varepsilon_k V_p (X_{i+2}^{(k)})} \tag{IV.10a}$$

$$\langle X_i^{(k)} | e^{\varepsilon_k R^{(0)}} | X_{i+1}^{(k)} \rangle = \frac{\varphi_0^{(0)}(X_i^{(k)})}{\varphi_0^{(0)}(X_{i+1}^{(k)})} \, p^{(0)}(X_i^{(k)}] X_{i+1}^{(k)}, \varepsilon_k) \tag{IV.10b}$$

where relation (IV.10b) results from eqs (III.6) and (II.5b), and after integrating over variables $X_{2i+1}^{(j)}$ we obtain:

$$I_{A_1 \ldots A_q}(t) = \lim_{n \to +\infty} \int \prod_{j=1}^{q+1} \prod_{i=0}^{m} dX_{2i}^{(j)} f(X_0^{(1)}) \, \varphi_0^{(0)2}(X_0^{(1)}) \prod_{j=1}^{q} \prod_{i=0}^{2n-2,2} p^{(0)}(X_i^{(j)}] X_{i+2}^{(j)}, \varepsilon_j) \, \frac{\varphi_0^{(0)}(X_0^{(j+1)})}{\varphi_0^{(0)}(X_{2n}^{(j)})}$$

$$\times e^{-\varepsilon_j V_p (X_{i+2}^{(j)})} \langle X_{2n}^{(j)} | A_j | X_0^{(j+1)} \rangle \prod_{i=0}^{2n-2,2} p^{(0)}(X_i^{(q+1)}] X_{i+2}^{(q+1)}, \varepsilon_{q+1}) \frac{1}{\varphi_0^{(0)}(X_{2n}^{(q+1)})} e^{-\varepsilon_{q+1} V_p (X_{i+2}^{(q+1)})} \langle X_{2n}^{(q+1)} | g \varphi_0^{(0)} \rangle$$

We consider scalar multiplicative operators A_i such that:

$$\langle x | A_i | y \rangle = \delta(x-y)\, A_i(x) \qquad \text{(IV.11)}$$

According to (II.10) we get:

$$I_{A_1 \ldots A_q}(t) = \lim_{n\to+\infty} \int \prod_{j=1}^{q+1}\prod_{i=0}^{n} dX_{2i}^{(j)}\, f(X_0^{(1)})\, P_{n+1}^{(0)}\left(X_0^{(1)}, -t/2; X_2^{(1)}, -t/2+\varepsilon_1; \ldots; X_{2n}^{(1)}, -\tfrac{t}{2}+n\varepsilon_1\right) A_1(X_{2n}^{(1)})\, \delta(X_{2n}^{(1)} - X_0^{(2)})$$

$$\vdots$$

$$\frac{1}{\varphi_0^{(0)2}(X_0^{(j)})}\, P_{n+1}^{(0)}\left(X_0^{(j)}, -t/2+n(\varepsilon_1+\cdots+\varepsilon_{j-1}); \ldots; X_{2n}^{(j)}, -t/2+n(\varepsilon_1+\cdots+\varepsilon_j)\right) A_j(X_{2n}^{(j)})\, \delta(X_{2n}^{(j)} - X_0^{(j+1)})$$

$$\vdots$$

$$\frac{1}{\varphi_0^{(0)2}(X_0^{(q+1)})}\, P_{n+1}^{(0)}\left(X_0^{(q+1)}, -t/2+n(\varepsilon_1+\cdots+\varepsilon_q); \ldots\right) g(X_{2n}^{(q+1)}) \prod_{j=1}^{q+1}\prod_{i=0}^{2n-2,2} e^{-\varepsilon_j V_p(X_{i+2}^{(j)})}$$

Now, we integrate over $X_{2n}^{(j)}$ for j=1 to q and after the change of notation $X_{2i}^{(j)} \to X_i^{(j)}$ for j=1 to q+1 we get:

$$= \lim_{n\to+\infty} \int \prod_{j=1}^{q+1}\prod_{i=0}^{n-1} dX_i^{(j)}\, dX_n^{(q+1)}\, f(X_0^{(1)})\, g(X_n^{(q+1)}) \prod_{i=1}^{q} A_i(X_0^{(i+1)}) \prod_{j=1}^{q+1}\prod_{i=0}^{n-2} e^{-\varepsilon_j V_p(X_{i+1}^{(j)})}\, e^{-\varepsilon_{q+1} V_p(X_n^{(q+1)})}$$

$$\times P_{n(q+1)+1}^{(0)}\left(X_0^{(1)}, -t/2; \ldots; X_0^{(2)}, t_1; \ldots; X_0^{(i)}, t_{i-1}; \ldots; X_0^{(q+1)}, t_q; \ldots; X_n^{(q+1)}, t/2\right)$$

$$= \lim_{n\to+\infty} \int f(X_0^{(1)})\, g(X_n^{(q+1)}) \prod_{i=1}^{q} A_i(X_0^{(i+1)}) \prod_{j=1}^{q+1}\prod_{i=0}^{n-2} e^{-\varepsilon_j V_p(X_{i+1}^{(j)})}\, e^{-\varepsilon_{q+1} V_p(X_n^{(q+1)})}$$

$$\times P_{n(q+1)+1}^{(0)}\left(X_0^{(1)}, -t/2; \ldots; X_n^{(q+1)}, t/2\right) \prod_{j=1}^{q+1}\prod_{i=0}^{n-1} dX_i^{(j)}\, dX_n^{(q+1)} \qquad \text{(IV.12)}$$