

REPUBLICQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA  
RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MENTOURI-CONSTANTINE

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N d'ordre :

Série :



THESE

Présentée pour obtenir le Diplôme de Magister

en Physique

THEME

QUELQUES RESULTATS POUR LES SYSTEMES A  
PETIT NOMBRE DE CORPS

Option

Physique Théorique

Par

**BOUDJEMAA Kheir-Eddine**

Devant le Jury

Président :

Rapporteur :

Examineurs :

L. GUECHI

S. R. ZOZOU

F. BENAMIRA

S. HASSANI

M.C. Univ. Mentouri-Constantine

M.C. Univ. Mentouri-Constantine

C.C. Univ. Mentouri-Constantine

D.R. C.R.N.A , ALGER

Soutenu le 10/11/2000

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

## *Dédicace*

Je dédie le fruit de mon travail à :

Mes chers parents ,  
Mes frères et mes sœurs ,  
Ma sœur Soumaira ,  
Et à mes amis Lazhar , Farid , Bachir , Djalal ,  
Ilies , M<sup>ed</sup> Sadek , Mourad , Lotfi , Kamel , ... .

*Kheir-Eddine*

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Rappels</b>	<b>6</b>
2.1	Les lois d'échelle . . . . .	6
2.2	Théorème de Feynman-Hellmann [3] . . . . .	9
2.3	Théorèmes de l'hyperviriel . . . . .	10
2.4	La règle de Schwinger . . . . .	14
2.5	Généralisation pour $N$ corps . . . . .	16
2.6	Liaison entre potentiels en loi de puissance singuliers et réguliers à l'origine . . . . .	18
<b>3</b>	<b>Nouvelle classe de fonctions d'onde d'essai</b>	<b>24</b>
3.1	La méthode variationnelle . . . . .	24
3.2	Nouvelle classe de fonctions d'onde d'essai . . . . .	26
3.2.1	Le niveau fondamental . . . . .	27
3.2.2	Les niveaux excités . . . . .	35
3.2.3	Applications . . . . .	38
<b>4</b>	<b>Développement systématique sur des Gaussiennes</b>	<b>40</b>
4.1	L'oscillateur harmonique à trois corps . . . . .	41
4.2	Développement systématique sur des Gaussiennes . . . . .	44
4.2.1	L'Hamiltonien . . . . .	46
4.2.2	Les corrélations à courte portée . . . . .	53

<b>5</b>	<b>Bornes inférieures optimales pour des Hamiltoniens à <math>N</math> corps</b>	<b>64</b>
5.1	Introduction . . . . .	64
5.2	Ancienne borne inférieure optimale . . . . .	67
5.2.1	Choix des $y_{ij,k}$ . . . . .	67
5.2.2	Configurations $((N - 1) \times m, 1 \times M)$ . . . . .	73
5.2.3	Configurations $(n \times m, n' \times M)$ . . . . .	74
5.2.4	L'oscillateur harmonique à $N$ corps . . . . .	76
5.3	Nouvelle borne inférieure optimale . . . . .	79
5.3.1	Choix des $y_{ij,k}$ . . . . .	79
5.3.2	Configurations $((N - 1) \times m, 1 \times M)$ . . . . .	85
5.3.3	Configurations $(n \times m, n' \times M)$ . . . . .	86
5.3.4	$N$ particules dans un puits de potentiel . . . . .	88
5.4	Conclusion . . . . .	90
<b>6</b>	<b>Borne inférieure optimale pour des Systèmes à 5 corps</b>	<b>92</b>
6.1	Ancienne borne inférieure . . . . .	92
6.1.1	Formes explicites et domaine de positivité des $a_{ij}$ . . . . .	95
6.2	Nouvelle borne inférieure . . . . .	97
6.2.1	Formes explicites et domaine de positivité des $a_{ij}$ . . . . .	101
<b>7</b>	<b>Applications Physiques des bornes inférieures optimales</b>	<b>106</b>
7.1	Systèmes $(e^-, e^-, \dots, e^-, e^+, e^+, \dots, e^+)$ . . . . .	106
7.2	Conditions suffisantes d'inexistence de systèmes borroméens à cinq corps [20] . . . . .	111
7.2.1	Configuration $(4 \times m, 1 \times M)$ . . . . .	112
7.2.2	Configuration $(3 \times m, 2 \times M)$ . . . . .	116
<b>8</b>	<b>Conclusion</b>	<b>121</b>
<b>A</b>	<b>Les transformations orthogonales</b>	<b>125</b>
<b>B</b>	<b>La méthode de Multhopp</b>	<b>129</b>

# Chapitre 1

## Introduction

Les systèmes à petit nombre de corps constituent un chapitre important de la physique . Une caractéristique remarquable de ces systèmes est leur pluridisciplinarité . En effet , les systèmes à petit nombre de corps apparaissent dans divers domaines de la physique : En physique nucléaire, en physique atomique et moléculaire , en physique du solide , en physique des particules , ... . Du coup , les techniques applicables dans un domaine peuvent être transposées dans un autre avec des échanges interdisciplinaires extrêmement fructueux . Le cadre de l'étude de systèmes à petit nombre de corps est principalement la mécanique quantique non-relativiste et les recherches se font principalement selon deux axes

- Résolution numérique de l'équation de Schrödinger .
- Obtention de résultats exacts .

Dans le premier axe , on s'attache à développer et à mettre en œuvre des techniques de résolution approximative de l'équation de Schrödinger à  $N$  corps . Parmi ces méthodes , citons le développement sur des harmoniques hypersphériques , les équations de Faddeev [1] , le développement systématique sur des Gaussiennes corrélées [2] , ... .

Concernant le deuxième axe , on cherche à dériver des résultats rigoureux . Comme exemples, citons les théorèmes de Feynman-Hellmann , les règles d'échelle , les théorèmes de l'hyperviriel dont le théorème du viriel et la règle de Schwinger généralisée sont des exemples , les limites inférieures pour les énergies des états fondamentaux , ... .

Le travail exposé dans cette thèse est une somme de contributions aux deux axes de recherche ci-dessus mentionnés . Plus précisément les chapitres 3 et 4 sont une contribution au premier

axe et les chapitres 5 , 6 et 7 constituent une contribution au deuxième axe . La thèse est organisée comme suit :

Le chapitre 1 est une courte introduction au sujet . Au chapitre 2 , on a rappelé des résultats exacts connus dont on fera un usage intensif par la suite , tels les règles d'échelle , le théorème du viriel et la règle de Schwinger .

Dans le chapitre 3 , on propose une nouvelle classe de fonctions d'onde d'essai pour des systèmes à deux corps interagissant par des forces invariantes par translation et par rotation. La nouvelle classe de fonctions d'onde d'essai a comme point de départ les résultats exacts pour les potentiels Coulombien et harmonique . La méthode est ensuite appliquée aux mésons lourds considérés comme des systèmes *quark-antiquark* interagissant par des potentiels en loi de puissance .

Le chapitre 4 a trait au développement systématique sur une base de Gaussiennes corrélées. Plus précisément , nous nous proposons de dériver les expressions analytiques exactes des éléments de matrice de diverses observables entre deux Gaussiennes corrélées . Nous avons en particulier considéré les observables énergie cinétique , énergie potentielle et corrélations à courte portée calculées directement et via la règle de Schwinger généralisée . Ce travail a son importance parce qu'il est toujours bon de limiter les calculs numériques au strict minimum qui, grâce aux résultats de ce chapitre 4 , consisteront uniquement à minimiser sur les paramètres de poids et de portée des Gaussiennes corrélées . Nous appliquerons les résultats de ce chapitre dans le cas le plus simple non trivial , à savoir le cas d'un système à trois corps en adoptant pour fonction d'onde d'essai une Gaussienne . Il est bon de noter que la méthode du développement systématique sur des Gaussiennes corrélées est par essence une méthode variationnelle et fournit par conséquent des bornes supérieures exactes pour les énergies des états fondamentaux de systèmes à  $N$  corps.

L'objectif des chapitres 5 , 6 et 7 est en quelque sorte complémentaire de celui des chapitres 3 et 4 , car on s'intéresse alors à la dérivation de bornes inférieures exactes pour les énergies des états fondamentaux de systèmes à  $N$  corps .

Au chapitre 5 nous présentons une méthode qui permet d'obtenir des bornes inférieures pour les énergies des états fondamentaux de systèmes non-relativistes avec un nombre quelconque de particules  $N$  interagissant par des forces à deux corps invariantes par translation . A chaque

borne inférieure est associée une décomposition du terme d'énergie cinétique qui permet de mettre l'Hamiltonien du système sous la forme d'une somme de  $N(N-1)/2$  Hamiltoniens à deux corps et d'un terme dont la valeur moyenne est nulle dans tout état invariant par translation . L'application du principe variationnel permet alors de dériver l'expression d'une borne inférieure pour l'énergie de l'état fondamental du système à  $N$  corps en termes d'énergies d'états fondamentaux de systèmes fictifs à deux corps . Nous considérons deux décompositions menant à deux bornes inférieures différentes . Une caractéristique essentielle de ces décompositions est qu'elles dépendent de paramètres , ce qui se traduit par des bornes inférieures dépendant de ces mêmes paramètres . Bien sûr , dans chaque cas , la meilleure de ces bornes est obtenue en maximisant sur les paramètres impliqués , d'où la justification de la terminologie employée borne inférieure optimale . La borne inférieure optimale correspondant à une des décompositions de l'énergie cinétique sera appelée ancienne borne inférieure optimale et la borne inférieure correspondant à l'autre décomposition sera appelée nouvelle borne inférieure optimale , l'appellation étant justifiée par l'ordre chronologique d'obtention des deux bornes .

Au chapitre 6 , le cas de systèmes à cinq corps est considéré en détail , spécialement pour certaines configurations de masses .

Le chapitre 7 est dévolu aux applications physiques des deux décompositions du terme d'énergie cinétique et des bornes inférieures optimales correspondantes . Nous considérons deux types d'applications . Comme premier type d'applications nous dériverons des bornes inférieures optimales pour les énergies des états fondamentaux de molécules positroniums  $(e^-e^+)^n$  . Le deuxième groupe d'application a trait à la dérivation de bornes inférieures pour l'existence de systèmes borroméens à cinq corps .

Finalement , le chapitre 8 est dévolu aux conclusions .

## Chapitre 2

### Rappels

Nous allons présenter dans ce chapitre quelques théorèmes et résultats exacts qui seront utilisés par la suite . Nous allons considérer tour à tour les lois d'échelle , le théorème de Feynman-Hellmann , les théorèmes de l'hyperviriel dont le théorème du viriel et la règle de Schwinger généralisée sont des cas particuliers .

#### 2.1 Les lois d'échelle

Considérons une particule de masse  $m$  dans un potentiel en loi de puissance

$$V(r) = \lambda r^\nu \quad ,$$

où  $\lambda$  et  $\nu$  sont des nombres réels de même signe , ou un système de  $N$  particules de masses  $m_i \quad i=1, 2, \dots, N$  interagissant par des forces à deux corps en loi de puissance , c'est-à-dire ,

$$V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) = \lambda_{ij} r_{ij}^\nu \quad i < j = 1, 2, \dots, N \quad ,$$

où les nombres réels  $\lambda_{ij}$  sont tous de même signe , le même signe que le nombre réel  $\nu$  .

Lorsque on multiplie toutes les masses  $m_i \quad i=1, 2, \dots, N$  par un même facteur  $\alpha$  réel positif , et (ou) lorsque on multiplie toutes les constantes de couplage  $\lambda_{ij} \quad i < j = 1, 2, \dots, N$  par un même facteur  $\gamma$  réel positif , l'énergie et autres observables du système se transforment de manière très précise . Ces lois de transformation sont dénommées , pour des raisons évidentes des lois



d'échelle. Ces lois d'échelle ont été d'ailleurs l'une des raisons ayant poussé à l'utilisation des potentiels en loi de puissance dans l'étude de la spectroscopie hadronique dans le cadre des modèles de potentiel . Donnons la démonstration de ces lois d'échelle dans le cas d'un système à deux corps de masse réduite  $\mu$  .

L'équation de Schrödinger radiale réduite décrivant le mouvement relatif d'un système de deux particules de masses  $m_1$  et  $m_2$  interagissant par un potentiel invariant par translation et par rotation , c'est-à-dire , par un potentiel  $V(\lambda, r)$  , où  $r$  est la distance relative des deux particules  $r = \|\vec{r}_2 - \vec{r}_1\|$  et où  $\lambda$  est un paramètre , s'écrit (on travaille dans un système d'unités où  $\hbar$  vaut 1)

$$\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} U(r) + \left( E - V(\lambda, r) - \frac{\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} \right) U(r) = 0 \quad , \quad (2.1)$$

où  $\mu := \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  est la masse réduite du système ,  $\ell$  le nombre quantique orbital et  $U(r)$  la fonction d'onde radiale réduite satisfaisant à la propriété  $U(r=0)=0$  et liée à la fonction d'onde  $\Psi(\vec{r})$  via la relation

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{U(r)}{r} Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad , \quad (2.2)$$

où les  $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$   $\ell=0, 1, \dots$  ,  $m=-\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell$  sont les harmoniques sphériques et  $E$  est une valeur propre de l'Hamiltonien du système .

Multiplions maintenant la masse réduite  $\mu$  par un facteur  $\alpha$  et la constante  $\lambda$  par un autre facteur  $\gamma$  , et posons  $\mu' := \alpha\mu$  et  $\lambda' := \gamma\lambda$  . L'équation de Schrödinger avec les nouveaux paramètres  $\mu'$  et  $\lambda'$  s'écrit

$$\frac{1}{2\mu'} \frac{d^2}{dr^2} W(r) + \left( E' - V(\lambda', r) - \frac{\ell(\ell+1)}{2\mu' r^2} \right) W(r) = 0 \quad , \quad (2.3)$$

où  $W(r)$  est la fonction d'onde radiale réduite .

Remplaçons  $\mu$  par  $\mu'/\alpha$  et  $\lambda$  par  $\lambda'/\gamma$  dans (2.1) et faisons le changement de variables  $R = \theta r$  , où  $\theta$  est un paramètre sans dimension qu'on fixera plus tard à notre convenance . L'équation (2.1) prend alors la forme

$$\frac{1}{2\mu'} \frac{d^2}{dR^2} U(R/\theta) + \left( \alpha^{-1}\theta^{-2} E - \alpha^{-1}\theta^{-2} V(\lambda'/\gamma, R/\theta) - \frac{\ell(\ell+1)}{2\mu' R^2} \right) U(R/\theta) = 0 \quad . \quad (2.4)$$

Si on veut que les deux équations (2.3) et (2.4) soient identiques , il est nécessaire de satisfaire à la relation

$$\alpha^{-1}\theta^{-2}E - \alpha^{-1}\theta^{-2}V(\lambda'/\gamma, R/\theta) = E' - V(\lambda', R) \quad , \quad (2.5)$$

laquelle n'admet pas généralement de solutions . Autrement dit , il n'existe de valeurs de  $\theta$  qui satisfont à (2.5) que pour certaines formes très particulières du potentiel  $V(\lambda, r)$  . Plus explicitement , on montre que (2.5) n'admet de solutions en  $\theta$  que pour des potentiels en loi de puissance ou logarithmique .

Pour des potentiels en loi de puissance  $V(\lambda, r) = \lambda r^\nu$ , (2.5) donne

$$\theta = (\alpha\gamma)^{\frac{-1}{2+\nu}} \quad (2.6)$$

et

$$E_{\mu', \lambda'} = \alpha^{\frac{-\nu}{2+\nu}} \gamma^{\frac{2}{2+\nu}} E_{\mu, \lambda} \quad . \quad (2.7)$$

On peut montrer que la fonction d'onde se transforme en

$$\Psi_{\mu', \lambda'}(\vec{r}') = (\alpha\gamma)^{\frac{3}{2(2+\nu)}} \Psi_{\mu, \lambda}\left((\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\nu}} \vec{r}'\right) \quad . \quad (2.8)$$

Pour obtenir (2.8) , on utilise le fait que  $W(r)$  et  $U(r/\theta)$  sont proportionnelles ainsi que la condition de normalisation pour  $\Psi_{\mu', \lambda'}(\vec{r}')$  et  $\Psi_{\mu, \lambda}(\vec{r})$  .

Dans le cas du potentiel logarithmique

$$V(\lambda, r) = \lambda \log\left(\frac{r}{r_0}\right) \quad ,$$

où  $r_0$  est un paramètre qui a la dimension d'une longueur . L'équation (2.5) se réduit dans ce cas à

$$\theta = (\gamma\alpha)^{-1/2}$$

et

$$\gamma E - \frac{\lambda'}{2} \ln(\gamma\alpha) = E' \quad .$$

D'où les lois d'échelle pour le potentiel logarithmique [1]

$$E_{\mu',\lambda'} = \gamma \left( E_{\mu,\lambda} - \frac{\lambda'}{2} \ln(\gamma\alpha) \right) \quad (2.9)$$

et

$$\Psi_{\mu',\lambda'}(\vec{r}') = (\gamma\alpha)^{\frac{3}{4}} \Psi_{\mu,\lambda} \left( (\gamma\alpha)^{1/2} \vec{r}' \right) \quad (2.10)$$

La relation (2.10) peut être obtenue à partir de (2.8) en prenant la limite  $\nu \rightarrow 0$ . Ceci n'est pas guère surprenant, car le potentiel logarithmique peut être considéré, à une constante près, comme la limite d'un potentiel en loi de puissance avec un exposant  $\nu$  tendant vers zéro par valeurs positives et une constante de couplage  $\lambda$  tendant vers l'infini tel que  $\lambda\nu$  soit une constante.

## 2.2 Théorème de Feynman-Hellmann [3]

Considérons un système décrit par un Hamiltonien  $H$  dépendant d'un paramètre quelconque  $\alpha$ , qui peut être par exemple une constante de couplage ou une masse réduite. L'équation aux valeurs propres s'écrit

$$H(\alpha) |\Psi(\alpha)\rangle = E(\alpha) |\Psi(\alpha)\rangle \quad ,$$

où  $|\Psi(\alpha)\rangle$  est un état propre normalisé,  $\langle \Psi(\alpha) | \Psi(\alpha) \rangle = 1$ , de  $H$  et  $E(\alpha)$  est l'énergie propre correspondante. Nous avons

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} E(\alpha) &= \frac{\partial}{\partial \alpha} (\langle \Psi(\alpha) | H(\alpha) | \Psi(\alpha) \rangle) \\ &= \langle \Psi(\alpha) | \left( \frac{\partial}{\partial \alpha} H(\alpha) \right) | \Psi(\alpha) \rangle + E(\alpha) \frac{\partial}{\partial \alpha} (\langle \Psi(\alpha) | \Psi(\alpha) \rangle) \\ &= \langle \Psi(\alpha) | \left( \frac{\partial}{\partial \alpha} H(\alpha) \right) | \Psi(\alpha) \rangle \quad , \end{aligned} \quad (2.11)$$

où nous avons utilisé le fait que  $|\Psi(\alpha)\rangle$  est normalisé et par conséquent  $\langle \Psi(\alpha) | \Psi(\alpha) \rangle$  est indépendant de  $\alpha$ .

Dans le cas d'un système décrit par l'Hamiltonien

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r) \quad ,$$

où le potentiel  $V(r)$  est indépendant de la masse  $\mu$ , on obtient en utilisant l'équation (2.11), avec  $\alpha=\mu$

$$\frac{\partial}{\partial \mu} E(\mu) = \langle \Psi | \left( \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{\vec{p}^2}{2\mu} \right) | \Psi \rangle = -\frac{1}{\mu} \langle \Psi | \frac{\vec{p}^2}{2\mu} | \Psi \rangle \quad .$$

Comme  $\vec{p}^2$  est un opérateur défini positif, on en déduit que

$$\frac{\partial}{\partial \mu} E(\mu) < 0 \quad . \quad (2.12)$$

Ce résultat stipule que les niveaux d'énergie du système sont de plus en plus profonds au fur et à mesure que la masse  $\mu$  augmente.

### 2.3 Théorèmes de l'hyperviriel

Considérons un système décrit par un Hamiltonien  $H$ , dans un état propre  $|\varphi_n\rangle$  de  $H$  d'énergie  $E_n$ . La valeur moyenne du commutateur  $\langle [H, A] \rangle_{\varphi_n}$  est nulle pour n'importe quel opérateur  $A$

$$\langle [H, A] \rangle_{\varphi_n} = 0 \quad . \quad (2.13)$$

Chaque choix de  $A$  mène à ce qu'on appelle un théorème de l'hyperviriel.

Considérons quelques théorèmes de l'hyperviriel dans le cas d'un système formé d'une seule particule de masse  $m$  soumise à un potentiel central  $V(r)$ , décrit par l'Hamiltonien  $H$

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) \quad . \quad (2.14)$$

$H$  peut aussi bien décrire le mouvement relatif d'un système de deux particules interagissant via un potentiel invariant par translation et par rotation, auquel cas  $m$  désigne la masse réduite du système et  $\vec{p}$  et  $\vec{r}$  désignent l'impulsion et la position relative des deux particules.

Considérons divers choix pour l'opérateur  $A$

i)

$$A = A(r)$$

(  $A$  est une fonction uniquement de la coordonnée radiale ) . (2.13) se simplifie en

$$\langle [\vec{p}^2, A(r)] \rangle_{\varphi} = 0 \quad , \quad (2.15)$$

où  $\varphi$  est une fonction propre de  $H$  .

En utilisant le résultat

$$p_j f(r) = \frac{\hbar}{i} \nabla_j f(r) = \frac{\hbar}{i} \frac{r_j}{r} f'(r) \quad ,$$

où  $p_j$  et  $r_j$  désignent respectivement la  $j^{eme}$  composante de l'impulsion et de la position de la particule , (2.15) peut être mise sous la forme

$$\left\langle \sum_{i=1}^3 \left[ p_i \frac{r_i}{r} A'(r) + \frac{r_i}{r} A'(r) p_i \right] \right\rangle_{\varphi} = 0 \quad .$$

Pour

$$A(r) = r^a \quad (a \neq -1) \quad , \quad (2.16)$$

l'expression précédente se simplifie en

$$\left\langle r^{a-1} \frac{d}{dr} \right\rangle_{\varphi} = -\frac{(a+1)}{2} \langle r^{a-2} \rangle_{\varphi} \quad . \quad (2.17)$$

ii)

$$A = r^b \vec{r} \cdot \vec{p} = r^b \sum_{i=1}^3 r_i p_i \quad , \quad (2.18)$$

avec ( $b \neq -1$ ) . (2.13) s'écrit alors comme

$$\frac{1}{2m} \left\langle \sum_{i=1}^3 [\vec{p}^2, r^b r_i p_i] \right\rangle_{\varphi} + \left\langle \sum_{i=1}^3 [V(r), r^b r_i p_i] \right\rangle_{\varphi} = 0 \quad . \quad (2.19)$$

Calculons tour à tour les deux commutateurs intervenant dans le membre de gauche de

(2.19) . Nous avons pour le premier commutateur

$$\left[ \vec{p}^2, r^b \sum_{j=1}^3 r_j p_j \right] = i\hbar 2br^{b-2} \left( \vec{L}^2 - \frac{b+1}{b} r^2 \vec{p}^2 + i\hbar \frac{(b-1)}{2} \sum_{j=1}^3 r_j p_j \right) ,$$

où  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$  est le moment cinétique orbital du système . Pour obtenir la relation précédente, nous avons fait usage de l'identité

$$\vec{L}^2 = (\vec{r} \times \vec{p})^2 = r^2 \vec{p}^2 + 2i\hbar \sum_{j=1}^3 r_j p_j - \sum_{i,j=1}^3 r_i r_j p_i p_j \quad . \quad (2.20)$$

Le calcul du deuxième commutateur donne

$$\left[ V(r), r^b \sum_{i=1}^3 r_i p_i \right] = i\hbar r^{b+1} \frac{d}{dr} V(r) \quad .$$

Il s'ensuit que [4]

$$\left( 2b\ell(\ell+1) - \frac{b(b^2-1)}{2} \right) \frac{\hbar^2}{2m} \langle r^{b-2} \rangle_{\varphi} - 2(b+1) \langle r^b (E - V) \rangle_{\varphi} + \langle r^{b+1} V' \rangle_{\varphi} = 0 \quad , \quad (2.21)$$

où nous avons aussi utilisé le résultat (2.17) .

Dans des unités où  $\frac{\hbar^2}{2m}=1$  et pour un potentiel en loi de puissance  $V(r) = \lambda r^{\nu}$ , l'expression précédente se simplifie en

$$E = \frac{b(4\ell(\ell+1) - (b^2-1)) \langle r^{b-2} \rangle_{\varphi} + 2\lambda(2(b+1) + \nu) \langle r^{b+\nu} \rangle_{\varphi}}{4(b+1) \langle r^b \rangle_{\varphi}} \quad , \quad (2.22)$$

où  $E$  désigne l'énergie propre associée à l'état  $|\varphi\rangle$  .

Dans le cas d'un potentiel Coulombien ,  $\nu = -1$  , et pour  $b = n$  entier , (2.22) se réduit à la relation de Kramers [5] bien connue en Physique Atomique et qui est une relation de récurrence liant les valeurs moyennes des diverses puissances de  $r$

$$\langle r^n \rangle_{\varphi} = \frac{n(4\ell(\ell+1) - (n^2-1)) \langle r^{n-2} \rangle_{\varphi} - 2(2n+1) \langle r^{n-1} \rangle_{\varphi}}{4(n+1)E} \quad . \quad (2.23)$$

Pour  $b=0$ , la relation (2.19) se simplifie en

$$\langle T \rangle_{\varphi} = \frac{1}{2} \langle rV' \rangle_{\varphi} .$$

Si on remarque que  $rV'$  n'est autre que la dérivée radiale du potentiel

$$rV' = \vec{r} \cdot \vec{\nabla} V ,$$

alors  $\langle T \rangle_{\varphi} = \frac{1}{2} \langle rV' \rangle_{\varphi}$  peut se mettre sous la forme

$$\langle T \rangle_{\varphi} = \frac{1}{2} \left\langle \vec{r} \cdot \vec{\nabla} V(r) \right\rangle_{\varphi} , \quad (2.24)$$

qui n'est rien d'autre que le théorème bien connu du viriel . Le théorème de viriel est donc un cas particulier des théorèmes de l'hyperviriel , ce qui motive l'appellation de ces derniers .

Pour des potentiels en loi de puissance  $V(r) = \lambda r^{\nu}$

$$\vec{r} \cdot \vec{\nabla} V(r) = \nu \lambda r^{\nu} = \nu V(r) ,$$

et par conséquent (2.24) se réduit dans ce cas à une relation entre les énergies cinétique et potentielle

$$\langle T \rangle_{\varphi} = \frac{\nu}{2} \langle V \rangle_{\varphi} , \quad (2.25)$$

où  $\langle T \rangle_{\varphi}$  et  $\langle V \rangle_{\varphi}$  désignent respectivement la valeur moyenne de l'énergie cinétique et la valeur moyenne de l'énergie potentielle dans l'état  $\varphi$  . Si on utilise le fait que  $E = \langle T \rangle_{\varphi} + \langle V \rangle_{\varphi}$  pour un état propre  $\varphi$  de  $H$  d'énergie  $E$  , on peut exprimer  $E$  en fonction de l'énergie cinétique seule ou de l'énergie potentielle seule

$$E = \frac{(2 + \nu)}{2} \langle V \rangle_{\varphi} = \frac{(2 + \nu)}{\nu} \langle T \rangle_{\varphi} . \quad (2.26)$$

## 2.4 La règle de Schwinger

Dans la section précédente on a exclu dans (2.16) et (2.18) les cas  $a = -1$  et  $b = -1$ , qu'on va étudier dans cette section. Considérons le théorème de l'hyperviriel pour  $A(r) = \frac{1}{r}$ .

En utilisant l'expression de  $H$  (2.14),  $\langle [H, \frac{1}{r}] \rangle_\varphi = 0$  se réduit à

$$\left\langle \left[ \vec{p}^2, \frac{1}{r} \right] \right\rangle_\varphi = 0 .$$

Nous avons

$$\begin{aligned} \left[ \vec{p}^2, \frac{1}{r} \right] &= -i\hbar \sum_{j=1}^3 \left( p_j \left( \nabla_j \frac{1}{r} \right) + \left( \nabla_j \frac{1}{r} \right) p_j \right) \\ &= \left( -\hbar^2 \Delta \frac{1}{r} + 2i\hbar \sum_{j=1}^3 \frac{r_j}{r^3} p_j \right) . \end{aligned}$$

Mais

$$\Delta \left( \frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta^3(\vec{r}) . \quad (2.27)$$

Il s'ensuit que

$$\left\langle \sum_{j=1}^3 \frac{r_j}{r^3} p_j \right\rangle_\varphi = 2i\pi\hbar \langle \delta^3(\vec{r}) \rangle_\varphi . \quad (2.28)$$

Considérons maintenant le théorème de l'hyperviriel pour  $b = -1$ , c'est-à-dire  $A = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^3 r_j p_j$ .

Nous avons

$$\left\langle \left[ \frac{\vec{p}^2}{2m}, \frac{1}{r} \sum_{j=1}^3 r_j p_j \right] \right\rangle_\varphi + \left\langle \left[ V(r), \frac{1}{r} \sum_{j=1}^3 r_j p_j \right] \right\rangle_\varphi = 0 . \quad (2.29)$$

D'autre part

$$\left[ \frac{\vec{p}^2}{2m}, \frac{1}{r} \sum_{j=1}^3 r_j p_j \right] = \frac{-i\hbar}{2m} \left( \frac{2}{r} \vec{p}^2 - 2 \sum_{j,k=1}^3 \frac{r_j r_k}{r^3} p_k p_j + 2i\hbar \sum_{j=1}^3 \frac{r_j}{r^3} p_j - i\hbar \left( \Delta \frac{1}{r} \right) \sum_{j=1}^3 r_j p_j \right) .$$

En faisant usage des relations (2.27) et (2.28) ainsi que de l'identité (2.20), la valeur moyenne de l'expression précédente peut se mettre sous la forme

$$\left\langle \left[ \frac{\vec{p}^2}{2m}, \frac{1}{r} \sum_{j=1}^3 r_j p_j \right] \right\rangle_\varphi = \frac{-2i\hbar}{2m} \left\langle \left( \frac{\vec{L}^2}{r^3} + 2\pi\hbar^2 \delta^3(\vec{r}) + 2\pi\hbar^2 \delta^3(\vec{r}) \sum_{j=1}^3 r_j p_j \right) \right\rangle_\varphi .$$



Il est clair que le troisième terme entre parenthèses du membre de droite donne une contribution nulle . Donc

$$\left\langle \left[ \frac{\vec{p}^2}{2m}, \frac{1}{r} \sum_{j=1}^3 r_j p_j \right] \right\rangle_{\varphi} = \frac{-2i\hbar}{2m} \left\langle \left( \frac{\vec{L}^2}{r^3} + 2\pi\hbar^2 \delta^3(\vec{r}) \right) \right\rangle_{\varphi} . \quad (2.30)$$

D'autre part , le deuxième terme du membre de gauche de (2.29) peut se mettre sous la forme

$$\left\langle \left[ V, \frac{1}{r} \sum_{j=1}^3 r_j p_j \right] \right\rangle_{\varphi} = i\hbar \left\langle \frac{1}{r} \sum_{j=1}^3 r_j \nabla_j V(r) \right\rangle_{\varphi} . \quad (2.31)$$

En reportant (2.30) et (2.31) dans (2.29) , on obtient une relation très intéressante

$$\langle \delta^3(\vec{r}) \rangle_{\varphi} = \frac{2m}{4\pi} \left( \frac{1}{\hbar^2} \left\langle \frac{1}{r} \sum_{i=1}^3 r_i \nabla_i V(r) \right\rangle_{\varphi} - \left\langle \frac{2\vec{L}^2}{2mr^3} \right\rangle_{\varphi} \right) ,$$

ou dans des unités où  $\hbar = 1$

$$\langle \delta^3(\vec{r}) \rangle_{\varphi} = \frac{m}{2\pi} \left\langle \frac{1}{r} \vec{r} \cdot \vec{\nabla} V(r) - \frac{\vec{L}^2}{mr^3} \right\rangle_{\varphi} . \quad (2.32)$$

Dans le cas où on ne dispose que d'une approximation de  $\varphi$  , il s'avère plus judicieux d'utiliser le membre de droite de (2.32) pour évaluer la probabilité  $|\varphi(0)|^2$  de présence à l'origine que de procéder à un calcul direct . Ceci est particulièrement vrai pour la méthode variationnelle où l'approximation de la fonction d'onde à l'origine peut être entachée d'une grande erreur , alors que la fonction d'onde exacte est en moyenne bien reproduite par l'approximation variationnelle. Le tableau 1 illustre ce fait .

On peut également dériver la relation (2.32) en utilisant comme opérateur  $A$  l'opérateur  $\frac{\partial}{\partial r}$  [6] .

La relation (2.32) est une généralisation de la relation

$$\langle \delta^3(\vec{r}) \rangle_{\varphi} = \frac{m}{2\pi} \left\langle \frac{d}{dr} V(r) \right\rangle_{\varphi} , \quad (2.33)$$

valable pour un moment orbital nul et connue dans la littérature sous le nom de " règle de Schwinger " .

## 2.5 Généralisation pour $N$ corps

Les deux théorèmes (2.24) et (2.32) correspondent à des systèmes à une particule (dans un espace à trois dimensions) ou plus généralement à des systèmes à deux particules interagissant par un potentiel qui ne dépend que de la distance relative entre les deux particules . Dans ce dernier cas , il faut juste remplacer la masse  $m$  par la masse réduite  $\mu$  .  $r$  et  $\vec{\mathcal{L}}$  désignent alors respectivement la distance relative  $\|\vec{r}_2 - \vec{r}_1\|$  entre les deux particules et leur moment cinétique orbital .

Les deux théorèmes sus-cités peuvent être généralisés pour les systèmes avec un nombre  $N$  quelconque de particules . Pour la règle de Schwinger il suffit de procéder aux changements suivants :

$$\begin{aligned} m &\rightarrow \mu_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} \\ r &\rightarrow r_{ij} = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\| \\ \vec{\nabla} &\rightarrow \vec{\nabla}_{ij} \\ \vec{\mathcal{L}} &\rightarrow \vec{\mathcal{L}}_{ij} = \vec{r}_{ij} \times \vec{p}_{ij} \\ V(r) &\rightarrow V_{tot} = \sum_{k < l}^N V^{(kl)}(r_{kl}) \quad . \end{aligned}$$

La règle de Schwinger généralisée [2] prend alors la forme

$$\langle \delta^3(\vec{r}_{ij}) \rangle_{\varphi} = \frac{\mu_{ij}}{2\pi} \left\langle \frac{1}{r_{ij}} \vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla}_{ij} V - \frac{\vec{\mathcal{L}}_{ij}^2}{\mu_{ij} r_{ij}^3} \right\rangle_{\varphi} , \quad (2.34)$$

où  $\langle \delta^3(\vec{r}_{ij}) \rangle_{\varphi}$  dénote la probabilité pour que les deux particules  $i$  et  $j$  se trouvent au même point .

Généralisons maintenant le théorème du viriel (2.24) en procédant selon ce qui suit . Dans le repère du centre de masse d'un système de  $N$  particules interagissant par des potentiels à deux corps dépendant seulement de la distance relative  $r_{ij}$  , l'énergie cinétique et l'énergie potentielle du système s'écrivent respectivement

$$T = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{2\mu_i} \vec{p}_{x_i}^2$$

et

$$V_{tot} = \sum_{i < j}^N V^{(ij)}(r_{ij}) \quad ,$$

où  $\mu_i$  représente la masse correspondant à la  $i^{ème}$  coordonnée de Jacobi  $\vec{x}_i$  ,  $\vec{p}_{x_i}$  étant le moment conjugué correspondant . A chaque pair  $\{i, j\}$  on associe une matrice unicolonne  $d_{ij}$   $((N-1) \times 1)$  dont les éléments sont définis par

$$\vec{r}_j - \vec{r}_i := \vec{r}_{ij} = \sum_{k=1}^{N-1} \vec{x}_k d_{ij}^k \quad i < j = 1, 2, \dots, N \quad . \quad (2.35)$$

Donc l'élément  $d_{ij}^k$  occupant la  $k^{ème}$  ligne de la matrice  $d_{ij}$  est la composante de  $\vec{r}_{ij}$  sur la coordonnée de Jacobi  $\vec{x}_k$  . Calculons maintenant le commutateur  $[H, A]$  avec

$$A = \sum_{j=1}^{N-1} \vec{x}_j \cdot \vec{p}_{x_j} \quad .$$

Nous avons

$$\begin{aligned} [H, \vec{x}_j \cdot \vec{p}_{x_j}] &= \sum_k^{N-1} \frac{1}{2\mu_k} [p_k^2, \vec{x}_j \cdot \vec{p}_{x_j}] + \sum_{k < l=1}^N [V^{(kl)}(r_{kl}), \vec{x}_j \cdot \vec{p}_{x_j}] \\ &= -\frac{i\hbar}{\mu_j} \vec{p}_{x_j}^2 + i\hbar \sum_{k < l=1}^N \vec{x}_j \cdot \vec{\nabla}_j V^{(kl)}(r_{kl}) \quad , \end{aligned}$$

où  $\vec{\nabla}_j$  est le gradient pour la coordonnée de Jacobi  $\vec{x}_j$  . Le théorème de l'hypermoment (2.13) pour l'expression précédente de  $A$  donne

$$\sum_{j=1}^{N-1} \left\langle -\frac{1}{\mu_j} \vec{p}_{x_j}^2 + \sum_{k < l=1}^N \vec{x}_j \cdot \vec{\nabla}_j V^{(kl)}(r_{kl}) \right\rangle_{\varphi} = 0 \quad .$$

En utilisant la définition (2.35) ,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{k < l=1}^N \vec{x}_j \cdot \vec{\nabla}_j V^{(kl)}(r_{kl}) &= \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{k < l=1}^N \frac{1}{r_{kl}} d_{kl}^j \vec{x}_j \cdot \vec{r}_{kl} \frac{d}{dr_{kl}} V^{(kl)}(r_{kl}) \\ &= \sum_{k < l=1}^N r_{kl} \frac{d}{dr_{kl}} V^{(kl)}(r_{kl}) \quad , \end{aligned}$$

d'où l'expression du théorème du viriel pour les systèmes à  $N$  corps

$$\langle T \rangle_{\varphi} = \frac{1}{2} \sum_{k < l=1}^N \left\langle r_{kl} \frac{d}{dr_{kl}} V^{(kl)}(r_{kl}) \right\rangle_{\varphi} , \quad (2.36)$$

où on a noté  $T = \sum_{j=1}^{N-1} \frac{1}{2\mu_j} \vec{p}_{x_j}^2$  .

Prenons le cas particulier où toutes les particules interagissent par le même potentiel

$$V^{(kl)}(r_{kl}) = V(r_{kl}) ,$$

et supposons de plus que le potentiel  $V(r_{kl})$  est en loi de puissance  $V(r_{kl}) = \lambda r_{kl}^{\nu}$  . On trouve alors la même relation que pour le système à deux corps

$$\langle T \rangle_{\varphi} = \frac{\nu}{2} \langle V_{tot} \rangle_{\varphi} . \quad (2.37)$$

Remarque

Le théorème du viriel est satisfait par les fonctions d'onde exactes d'un système de particules. On montre que si la classe des fonctions d'onde d'essai utilisée dans une approche variationnelle est globalement invariante sous les transformations d'échelle , alors le théorème du viriel est satisfait par l'approximation variationnelle de la fonction d'onde exacte . Cette propriété est très utile dans les calculs variationnels . Elle peut être utilisée pour diminuer le nombre de paramètres variationnels d'une unité .

## 2.6 Liaison entre potentiels en loi de puissance singuliers et réguliers à l'origine

Considérons les potentiels en loi de puissance

$$V(r) = \lambda r^{\nu} , \quad \text{sign}(\lambda) = \text{sign}(\nu) . \quad (2.38)$$

On montre qu'à chaque potentiel en loi de puissance singulier à l'origine ( $V(0)$  infini) correspond un autre potentiel en loi de puissance régulier à l'origine ( $V(0)$  fini) [7] . Donnons en une

démonstration .

Dans ce qui suit on s'intéresse à la fonction d'onde radiale réduite pour un système à deux corps . Considérons un potentiel en loi de puissance singulier à l'origine (2.38) avec  $-2 < \nu < 0$ .

L'équation de Schrödinger radiale réduite correspondante s'écrit

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} U(r) + [E - \lambda r^\nu - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2}] U(r) = 0 \quad .$$

Faisons le changement de variables suivant

$$r = u^s \quad .$$

Il vient que

$$dr = s u^{s-1} du = s r^{\frac{s-1}{s}} du \quad ,$$

d'où

$$\frac{d}{dr} U(r) = \frac{1}{s} r^{\frac{1-s}{s}} \frac{d}{du} U(u^s) \quad .$$

Alors

$$\frac{d^2}{dr^2} \Phi(u) = \frac{(1-s)}{s^2} u^{1-2s} \frac{d}{du} \Phi(u) + \frac{1}{s^2} u^{2-2s} \frac{d^2}{du^2} \Phi(u) \quad ,$$

avec

$$\Phi(u) = U(u^s) \quad .$$

On peut éliminer le terme en  $\frac{d}{du}$  dans le membre de droite de l'expression précédente si on fait le changement de fonction  $\Phi(u) = u^p W(u)$  et si on choisit  $p = \frac{s-1}{2}$  . L'équation de Schrödinger radiale réduite prend alors la forme

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{du^2} W(u) + [E u^{2s-2} s^2 - \lambda s^2 u^{2s-2+sv} - \frac{\hbar^2 s^2 \ell(\ell+1) - \frac{1-s^2}{4}}{u^2}] W(u) = 0 \quad .$$

Ecrivons que  $W(u)$  est la fonction d'onde radiale réduite d'un système de même masse réduite  $\mu$  que précédemment , avec un potentiel  $V'(r) = \lambda' r^{\nu'}$  , une énergie  $E'$  et un nombre quantique

orbital  $\ell'$  . Donc

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{du^2} W(u) + [E' - \lambda' u^{\nu'} - \frac{\hbar^2 \ell' (\ell' + 1)}{2\mu u^2}] W(u) = 0 \quad .$$

En identifiant ces deux dernières équations , on aboutit à

$$-\lambda s^2 u^{2s-2+s\nu} = E' \Rightarrow 2s - 2 + s\nu = 0 \quad , \quad (2.39)$$

$$Eu^{2s-2}s^2 = -\lambda' u^{\nu'} \Rightarrow 2s - 2 - \nu' = 0 \quad (2.40)$$

et

$$\ell' (\ell' + 1) = s^2 \ell (\ell + 1) - \frac{1 - s^2}{4} \quad , \quad (2.41)$$

ce qui donne

$$s = \frac{2 + \nu'}{2} = -\frac{\nu'}{\nu} \quad (2.42)$$

$$(2 + \nu') (\nu + 2) = 4 \quad (2.43)$$

$$E' = -\lambda \left( \frac{\nu'}{\nu} \right)^2 \quad (2.44)$$

et

$$\lambda' = -E \left( \frac{\nu'}{\nu} \right)^2 \quad . \quad (2.45)$$

En utilisant (2.42) , (2.41) se simplifie en

$$\left( \ell' + \frac{1}{2} \right)^2 = \left( \frac{\nu'}{\nu} \right)^2 \left( \ell + \frac{1}{2} \right)^2 \quad . \quad (2.46)$$

Comme  $\frac{1}{2+\nu} > \frac{1}{2}$  pour  $-2 > \nu > 0$  , la relation (2.43) montre que  $2 + \nu' > 2$  et par conséquent  $\nu' > 0$  . Il s'ensuit donc qu'à un potentiel singulier à l'origine  $-2 > \nu > 0$  correspond un potentiel régulier à l'origine  $\nu' > 0$  . De plus la relation (2.45) montre que  $\lambda'$  et  $E$  sont de signes opposés . Comme  $E$  est nécessairement négatif pour des potentiels singuliers à l'origine ,  $\lambda'$  est positif , comme il se doit . Nous avons donc établi la correspondance , ci-dessus mentionnée , entre potentiels en loi de puissance singuliers et réguliers à l'origine .

Utilisons maintenant les lois d'échelle (section 1.1) . On a d'après (2.7)

$$E'_{\lambda'} = E'_1 (\lambda')^{\frac{2}{2+\nu'}} ,$$

où  $E'_1 = E'_{\lambda'=1}$  et  $\lambda'$  doit être compris comme  $\frac{\lambda'}{|\lambda'=1|}$  . Nous avons en utilisant (2.45) et (2.43)

$$E'_{\lambda'} = E'_1 (\lambda')^{\frac{2}{2+\nu'}} = E'_1 (-E_1)^{\frac{2}{2+\nu'}} (-\lambda) \left( -\frac{\nu'}{2+\nu'} \right)^{\frac{4}{2+\nu'}} . \quad (2.47)$$

Il faut remarquer que pour obtenir l'expression précédente pour  $E'_{\lambda'}$  , on a utilisé les lois d'échelle pour le potentiel en loi de puissance singulier à l'origine

$$E_\lambda = \left( \frac{\lambda}{|\lambda=-1|} \right)^{\frac{2}{2+\nu}} E_{\lambda=-1} = (-\lambda)^{\frac{2}{2+\nu}} E_1 ,$$

où  $E_1$  désigne par convention  $E|_{\lambda=-1}$  . En identifiant les deux expressions de  $E'_{\lambda'}$  , (2.47) et (2.41) , on tire la relation liant les énergies propres correspondant aux deux potentiels singulier et régulier à l'origine se correspondant

$$E'_1 = (-E_1)^{\frac{-2}{2+\nu'}} \left( -\frac{\nu'}{2+\nu'} \right)^{\frac{2\nu'}{2+\nu'}} = (-E_1)^{-\frac{2+\nu}{2}} \left( \frac{2+\nu}{2} \right)^\nu , \quad (2.48)$$

où on a fait usage de la relation (2.43) .

#### Cas particulier

Examinons le cas des ondes "s" , c'est-à-dire le cas  $\ell = 0$  . L'équation (2.46) se réduit alors à

$$\ell' (\ell' + 1) = \frac{\nu'}{16} (4 + \nu') , \quad (2.49)$$

et les fonctions d'onde radiales réduites sont liées dans ce cas par la relation

$$U(u) = u^{-\nu/4} W \left( u^{-\nu/\nu'} \right) , \quad (2.50)$$

où on a fait usage des relations (2.42) et (2.43) ainsi que de la définition de  $W$  en fonction de  $U$   $U(u^s) = u^{\frac{s-1}{2}} W(u)$  .

On peut toujours mettre  $W(u)$  sous la forme

$$W(u) = u^{\ell'+1} \varphi(u) \quad ,$$

avec

$$\lim_{u \rightarrow 0} \varphi(u) = cte \quad ,$$

pour respecter le comportement à l'origine de la fonction d'onde . Alors

$$U(u) = u^{-\frac{1}{4}\nu - \frac{\nu}{\nu'}(\ell'+1)} \varphi\left(u^{-\frac{\nu}{\nu'}}\right) \quad .$$

De (2.39) , (2.40) et (2.46) on tire que

$$-\frac{1}{4}\nu - \frac{\nu}{\nu'}(\ell'+1) = \ell + 1 \quad .$$

Il en résulte la relation

$$U(u) = u^{\ell+1} \varphi\left(u^{-\frac{\nu}{\nu'}}\right) \quad . \quad (2.51)$$

Par conséquent  $U(u)$  vérifie aussi le comportement de la fonction d'onde à l'origine car  $\frac{\nu}{\nu'} < 0$ .

#### Application

En particulier le potentiel Coulombien est lié à celui de l'oscillateur harmonique . En effet , le couple  $(\nu, \nu') = (-1, 2)$  vérifie bien la relation (2.43) . D'autre part , on sait que la fonction d'onde radiale réduite du niveau fondamental du potentiel Coulombien pour l'onde  $\ell=0$  (qui est aussi la fonction d'onde radiale réduite du niveau fondamental du potentiel Coulombien , car le niveau fondamental de ce dernier correspond à  $\ell=0$  ) , pour un système de masse réduite  $1/2$  , une constante de couplage  $-1$  et dans un système d'unité où  $\hbar$  vaut 1 , est donnée par

$$U(r) \propto r e^{-r/2} \quad .$$

L'équation (2.49) donne alors  $\ell' = 1/2$  . Donc à partir des relations (2.48) , et (2.50) , on peut déterminer l'énergie du niveau fondamental et la fonction d'onde correspondante d'un système de deux particules interagissant par le potentiel de l'oscillateur harmonique pour "un nombre



quantique orbital"  $\ell' = 1/2$

$$E'_{\mu=1/2, \ell'=1/2} = 4 \quad ,$$

$$W_{\ell'=1/2}(r) \propto r^{3/2} e^{-r^2/2} \quad .$$

Nous avons vérifié l'exactitude de ces deux résultats aussi bien analytiquement (on peut en effet montrer que  $W_{\ell'=1/2}(r) \propto r^{3/2} e^{-r^2/2}$  est solution de l'équation de Schrödinger radiale réduite pour l'oscillateur harmonique avec  $\ell=1/2$  et 4 comme valeur propre ) que numériquement .

## Chapitre 3

# Nouvelle classe de fonctions d'onde d'essai

L'équation de Schrödinger n'est résolvable exactement que pour un nombre très limité de cas . D'où la nécessité de recourir à des méthodes de résolution approximatives : La méthode variationnelle [5] , la méthode de perturbation [8], l'approximation semi-classique (BKW) [4],[9], [5],... .

### 3.1 La méthode variationnelle

Le but de cette section est de présenter la méthode variationnelle [5], qui est une méthode d'approximation très utilisée .

Considérons un système d'Hamiltonien  $H$  . Supposons pour simplifier que le spectre d'énergie est discret . Notons par  $E_0, E_1, \dots, E_i, \dots$  les valeurs propres de  $H$  pris dans un ordre croissant. Par conséquent ,  $E_0, E_1, \dots, E_i, \dots$  désignent respectivement les énergies du niveau fondamental, du premier niveau excité , ..., du  $i^{eme}$  niveau excité , ... du système . Notons par  $|\varphi_{i,\alpha}\rangle$  les états propres orthonormés de  $H$

$$H |\varphi_{i,\alpha}\rangle = E_i |\varphi_{i,\alpha}\rangle \quad , \quad (3.1)$$

$$\langle \varphi_{i,\alpha} | \varphi_{i',\alpha'} \rangle = \delta_{i,i'} \delta_{\alpha,\alpha'} \quad , \quad (3.2)$$

où l'indice supplémentaire  $\alpha = 1, 2, \dots, g_i$  permet de distinguer les états propres indépendants

normalisés de  $H$ , qui sont pris orthogonaux, correspondant à la même énergie propre  $E_i$ .  $g_i$  désigne donc la dégénérescence du niveau d'énergie  $E_i$ .

Comme  $H$  est une observable, les états propres  $|\varphi_{i,\alpha}\rangle$   $i=0, 1, \dots$   $\alpha=1, 2, \dots, g_i$  constituent une base de l'espace de Hilbert, d'où la relation de fermeture

$$\sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} |\varphi_{i,\alpha}\rangle \langle \varphi_{i,\alpha}| = I$$

et par conséquent, un état quelconque  $|\Psi\rangle$  du système, c'est-à-dire un vecteur de l'espace de Hilbert, peut être développé sur les  $|\varphi_{i,\alpha}\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=0} \sum_{\alpha=1}^{g_i} c_{i,\alpha} |\varphi_{i,\alpha}\rangle \quad ,$$

où

$$c_{i,\alpha} = \langle \varphi_{i,\alpha} | \Psi \rangle \quad .$$

Nous avons en utilisant les relations (3.1) et (3.2) et le fait que  $E_i \geq E_0 \quad \forall i=0, 1, \dots$

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_{i=0} \sum_{\alpha=1}^{g_i} E_i |c_{i,\alpha}|^2 \geq E_0 \sum_{i=0} \sum_{\alpha=1}^{g_i} |c_{i,\alpha}|^2 = E_0 \langle \Psi | \Psi \rangle \quad .$$

Donc

$$E_0 \leq \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad . \quad (3.3)$$

Autrement dit, la valeur moyenne de l'Hamiltonien dans un état quelconque  $|\Psi\rangle$  est toujours supérieure à l'énergie du niveau fondamental. Le résultat (3.3) est à la base de la méthode variationnelle.

Une utilisation possible du résultat (3.3) consiste à prendre une fonction d'onde, dépendant d'un certain nombre  $n$  de paramètres  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ , appelée "fonction d'onde d'essai", à évaluer la valeur moyenne de l'Hamiltonien pour cette fonction d'onde d'essai. On obtient alors une famille de bornes supérieures pour  $E_0$ , une borne, notée  $E(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ , pour chaque jeu de paramètres  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ . Le jeu de paramètres  $\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0$  tel que

$$E(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0) = \min_{\lambda_1, \dots, \lambda_n} \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (3.4)$$

mène à la valeur la plus proche de  $E_0$ , c'est-à-dire à la meilleure approximation pour l'énergie du niveau fondamental.  $E(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0)$  est appelée approximation variationnelle de  $E_0$ . Bien sûr  $E(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0)$  reste toujours au dessus de  $E_0$

$$E_0 \lesssim \frac{\langle \Psi(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0) | H | \Psi(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0) \rangle}{\langle \Psi(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0) | \Psi(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0) \rangle} \quad (3.5)$$

Pour le premier état excité, si on veut avoir l'analogie de (3.3), il faut choisir la fonction d'onde d'essai  $|\Psi'(\lambda'_1, \dots, \lambda'_n)\rangle$  de sorte qu'elle soit orthogonale à  $|\varphi_0\rangle$ , l'état fondamental du système. En effet le même raisonnement que pour le niveau fondamental mène dans ce cas à l'inégalité

$$E_1 \leq \frac{\langle \Psi'(\lambda'_1, \dots, \lambda'_n) | H | \Psi'(\lambda'_1, \dots, \lambda'_n) \rangle}{\langle \Psi'(\lambda'_1, \dots, \lambda'_n) | \Psi'(\lambda'_1, \dots, \lambda'_n) \rangle} \quad (3.6)$$

à condition que

$$|\Psi'(\lambda'_1, \dots, \lambda'_n)\rangle \perp |\varphi_0\rangle \quad (3.7)$$

et la meilleure approximation correspond de nouveau aux valeurs de  $\lambda'_i$  qui minimisent le membre de droite de (3.6).

On a également des relations analogues à (3.3) et à (3.6) pour les autres niveaux excités. La difficulté du traitement des niveaux excités tient au fait que les vecteurs d'état du niveau fondamental et des niveaux excités ne sont pas connus exactement.

### 3.2 Nouvelle classe de fonctions d'onde d'essai

Dans cette section on va appliquer la méthode variationnelle pour des systèmes à deux corps interagissant par un potentiel central en nous basant pour choisir la fonction d'onde d'essai sur les fonctions d'onde connues exactes des potentiels Coulombien et harmonique.

L'équation de Schrödinger radiale réduite pour un potentiel central  $V(r)$  s'écrit, en unités où  $\hbar$  vaut 1,

$$\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} U(r) + \left( E - V(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} \right) U(r) = 0 \quad (3.8)$$

où  $U(r)$  est la fonction d'onde radiale réduite liée à la fonction d'onde  $\Psi(\vec{r})$  via la relation (2.2).

Dans ce qui suit on s'intéresse seulement à la fonction d'onde radiale réduite  $U(r)$ , que l'on appellera par la suite simplement fonction d'onde, et on se restreint à deux observables, l'énergie et les corrélations à très courte portée. On traitera en détail le niveau fondamental et on passera en revue les niveaux excités.

### 3.2.1 Le niveau fondamental

#### L'énergie

Les fonctions d'onde des niveaux fondamentaux ( $n_r = \ell = 0$ ) pour un potentiel Coulombien et pour un potentiel harmonique sont respectivement de la forme

$$U(r) \propto r e^{-ar}$$

et

$$U(r) \propto r e^{-a'r^2},$$

où les constantes  $a$  et  $a'$  qui ont respectivement les dimensions de l'inverse d'une longueur et de l'inverse d'une longueur carrée sont des fonctions bien définies de la masse réduite du système et de la constante de couplage dans chaque cas.

Au lieu de choisir comme fonction d'onde d'essai l'une de ces deux fonctions, ce qui se fait souvent dans la littérature, on va prendre une forme qui concilie simultanément les deux formes précédentes, à savoir

$$U_c(r) \propto r e^{-ar^c}, \quad (3.9)$$

où les paramètres  $a$  et  $c$  seront considérés comme des paramètres variationnels.

Considérons des potentiels en loi de puissance  $V(r) = \lambda r^\mu$ . On peut tirer profit des lois d'échelle pour fixer  $\mu$  à  $1/2$ . Les valeurs moyennes des énergies cinétique et potentielle sont alors données respectivement par

$$\langle T \rangle = (c+1) a^{\frac{2}{c}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{c}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{c}\right)} 4^{-\frac{c+1}{c}}$$

et

$$\langle V \rangle = \lambda (2a)^{-\frac{\nu}{c}} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+3}{c}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{c}\right)}$$

Le théorème du viriel , qui est satisfait au minimum , car la fonction d'onde d'essai (3.9) est invariante d'échelle , nous permet d'exprimer l'un des paramètres  $a$  ou  $c$  en fonction de l'autre. Par exemple ,

$$a = \left( \frac{\nu\lambda}{(c+1)} \right)^{\frac{c}{\nu+2}} 2^{\frac{c-\nu-2}{\nu+2}} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+3}{c}\right)^{\frac{c}{\nu+2}}}{\Gamma\left(\frac{1}{c}\right)^{\frac{c}{\nu+2}}} \quad (3.10)$$

D'où l'expression de l'énergie dépendant seulement du paramètre  $c$

$$E(c) := \left( (c+1) \left( \frac{2\nu\lambda}{(c+1)} \right)^{\frac{2}{\nu+2}} \frac{1}{4} + \lambda \left( \frac{2\nu\lambda}{(c+1)} \right)^{\frac{-\nu}{\nu+2}} \right) \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+3}{c}\right)^{\frac{2}{\nu+2}}}{\Gamma\left(\frac{1}{c}\right)^{\frac{-\nu}{\nu+2}} \Gamma\left(\frac{3}{c}\right)} \quad (3.11)$$

Quand on minimise  $E(c)$  (3.11) par rapport au paramètre  $c$  pour un potentiel donné , on trouve des valeurs très proches des valeurs exactes obtenues par des méthodes numériques , telle la méthode de multihopp (voir annexe B) .

A titre de comparaison , nous avons aussi comparé nos résultats avec ceux obtenus par un développement systématique sur des Gaussiennes , méthode qui fera l'objet du chapitre suivant, où la fonction d'onde d'essai est prise de la forme

$$G_g(r) \propto r \left( e^{-a_1 r^2} + b_2 e^{-a_2 r^2} + \dots + b_g e^{-a_g r^2} \right) \quad , \quad (3.12)$$

où les paramètres de portée  $a_i$  et de poids  $b_i$  seront considérés comme des paramètres variationnels.  $g$  qui dénote le nombre de Gaussiennes utilisées est appelé nombre de générations.

Dans le tableau 1 , nous avons reporté les valeurs approximatives des énergies des états fondamentaux , pour certaines valeurs de  $\nu$  , obtenues à partir de (3.12) pour  $g=1$  et  $g=2$  et à partir de (3.9) (en minimisant (3.11) par rapport à  $c$ ) . Nous avons également reporté les énergies exactes correspondantes .

	$\nu = -1$	$\nu = -1/2$	$\nu = 0.1$	$\nu = 1$
$E_{g=1}$	-0.2122	-0.4253	1.2381	2.3448
$E_{g=2}$	-0.2429	-0.4366	1.23587	2.33825
$E_c$	-0.2500	-0.43801	1.23575	2.33825
$E_{exact}$	-0.2500	-0.43804	1.23573	2.33811

Tableau [1] .

On remarque que les valeurs obtenues en utilisant la fonction d'onde d'essai (3.9) coïncident pratiquement avec les valeurs exactes et sont nettement meilleurs que celles obtenues à partir de (3.12) pour  $g=1$  et  $g=2$  .

On peut aussi comparer les courbes des fonctions d'onde correspondantes . On a tracé les courbes représentatives des fonctions  $F_{g=1}(r) := G_{g=1}(r)/r$  ,  $F_{g=2}(r) := G_{g=2}(r)/r$  et  $R_c(r) := U_c(r)/r$  , ainsi que celle de la fonction d'onde radiale exacte  $R(r)$  respectivement en bleu , en rouge , en noir et en pointillé et on a considéré quatre puissances différentes  $\nu = -1$ ,  $\nu = -1/2$  ,  $\nu = 0.1$  et  $\nu = 1$  .

Potentiel Coulombien  $\nu = -1$

$$F_{g=1}(r) = \frac{1}{2.886} \exp\left(-\frac{2}{9\pi}r^2\right)$$

$$F_{g=2}(r) = \frac{1}{3.303} (\exp(-0.333r^2) + 0.7258 \exp(-0.05r^2))$$

$$R_c(r) = \frac{\sqrt{2}}{2} \exp(-r/2)$$

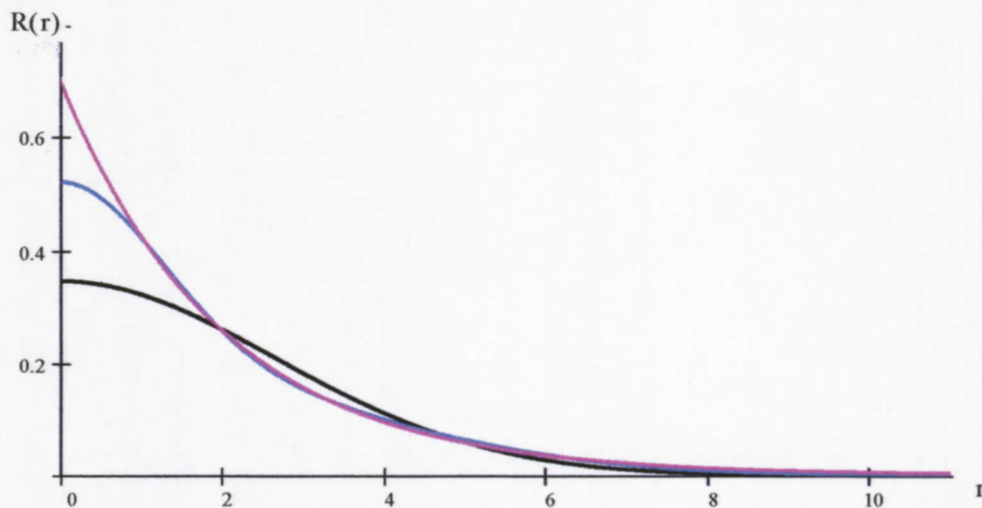


Figure 1

Potentiel avec  $\nu = -1/2$

$$F_{g=1}(r) = \frac{1}{3.905} \exp(-0.0473r^2)$$

$$F_{g=2}(r) = \frac{1}{6.581} (\exp(-0.0324r^2) + 1.165 \exp(-0.1537r^2))$$

$$R_c(r) = \frac{1}{2.587} \exp(-0.2303r^{1.237})$$

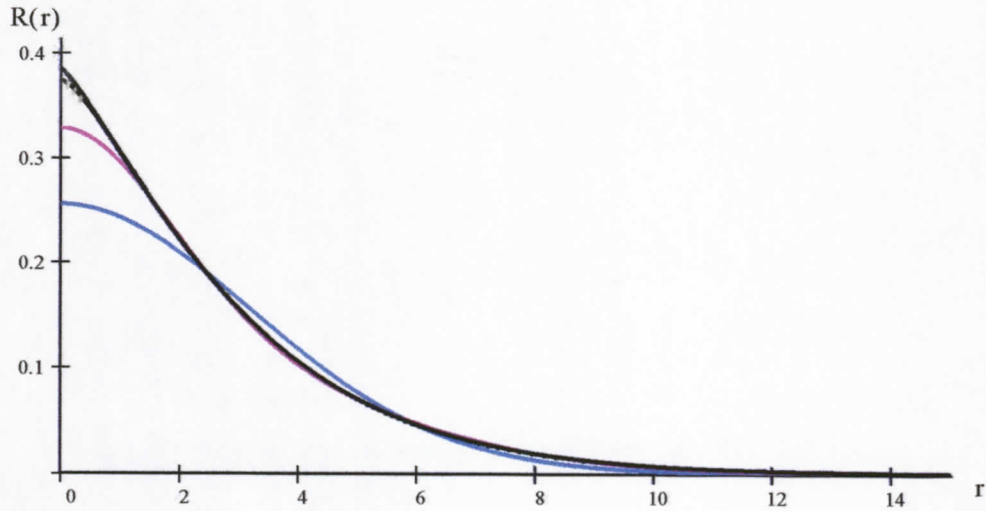


Figure 2

Potentiel de Martin  $\nu = 0.1$

$$F_{g=1}(r) = \frac{1}{7.527} \exp(-0.0197r^2)$$

$$F_{g=2}(r) = \frac{1}{13.067} (\exp(-0.046r^2) + \exp(-0.014r^2))$$

$$R_c(r) = \frac{1}{5.922} \exp(-0.07344r^{1.4674})$$

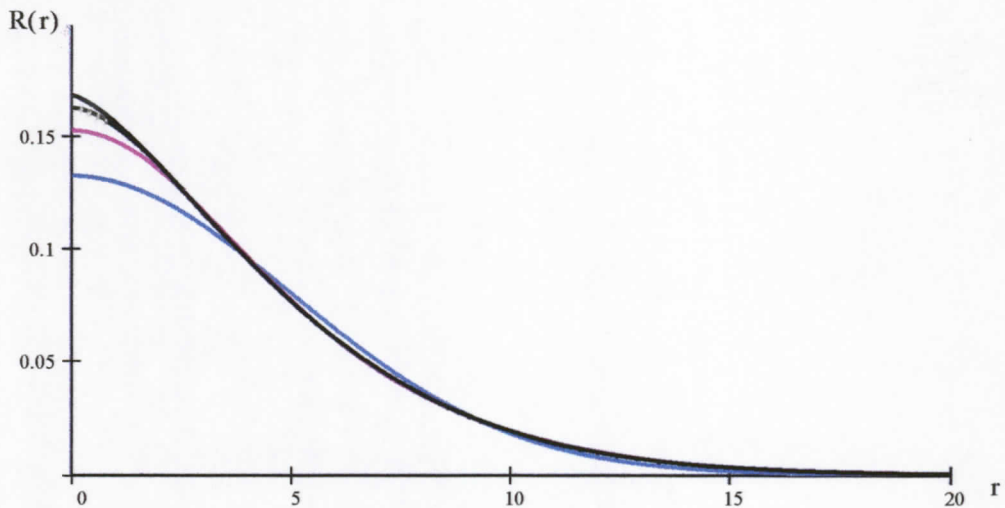


Figure 3



Potentiel linéaire  $\nu = 1$

$$F_{g=1}(r) = \frac{1}{1.084} \exp(-0.261r^2)$$

$$F_{g=2}(r) = \frac{1}{1.611} (\exp(-0.2144r^2) + 0.588 \exp(-0.500r^2))$$

$$R_c(r) = \frac{1}{0.9814} \exp(-0.3502r^{1.747})$$

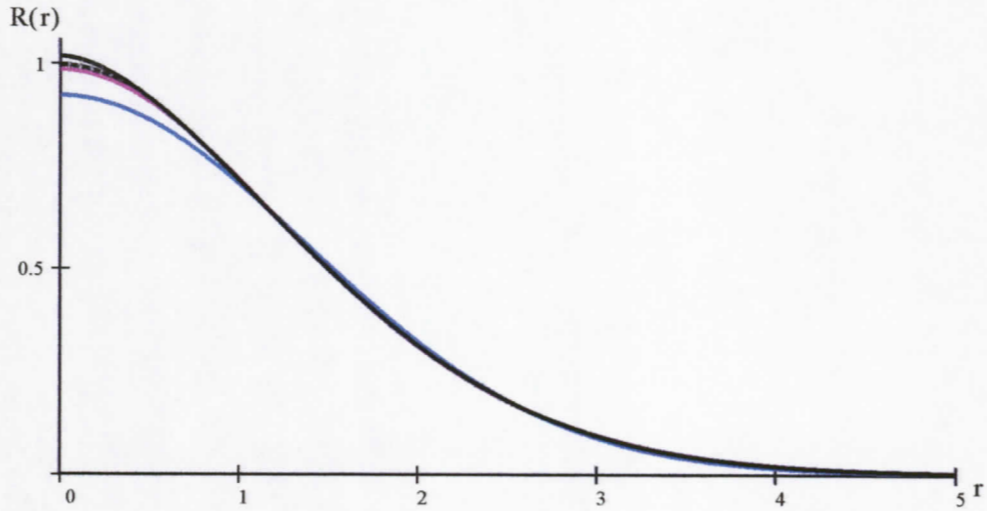


Figure 4

### Les corrélations à courte portée

La largeur de désintégration leptonique des mésons est une observable intéressante en Physique des Particules . Elle dépend directement de la quantité  $|\Psi(0)|^2$  qui n'est que la valeur moyenne du delta de Dirac  $\delta(\vec{r})$  évaluée dans l'état  $|\Psi\rangle$  .

Les figures 1 , 2 , 3 et 4 montre que les fonctions d'onde approximatives constituent une bonne approximation de la fonction d'onde exacte sauf au voisinage de l'origine . Ceci est une caractéristique générale des calculs variationnels . Il s'avère que , dans de tel calcul , la fonction d'onde est bien approximée sur tout l'espace sauf à l'origine . La quantité  $|\Psi(0)|^2$  est alors mal approximée si on l'évalue par un calcul direct . En remplaçant le calcul de  $|\Psi(0)|^2$  par celui d'une intégrale impliquant la fonction d'onde sur tout l'espace , le théorème de Schwinger (2.32) permet d'améliorer la situation .

Utilisons la fonction d'onde d'essai (3.9) avec le paramètre  $a$  fixé par (3.10) et  $c$  obtenu par minimisation de l'expression (3.11) . Calculons la quantité  $|\Psi(0)|^2$  directement et en utilisant la règle de Schwinger (2.32) .

Le calcul direct donne

$$\begin{aligned} |\Psi(0)|^2 &= \frac{1}{4\pi} \lim_{r \rightarrow 0} \left| \frac{U(r)}{r} \right|^2 \cong |\Psi_c(0)|^2 = \frac{1}{4\pi} \lim_{r \rightarrow 0} \left| \frac{U_c(r)}{r} \right|^2 \\ &= \frac{c}{4\pi} \frac{(2a)^{\frac{3}{c}}}{\Gamma\left(\frac{3}{c}\right)} \end{aligned}$$

En utilisant la règle de Schwinger qui se simplifie pour les ondes "s" en

$$|\Psi(0)|^2 = \langle \delta^3(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{4\pi} \left\langle \frac{d}{dr} V(r) \right\rangle, \quad (3.13)$$

et en tenant compte de la relation

$$\langle V'(r) \rangle = \nu\lambda \frac{\int_0^\infty r^{\nu+1} e^{-ar^c} dr}{\int_0^\infty r^2 e^{-ar^c} dr} = \nu\lambda a^{-\frac{\nu+1}{c}} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+2}{c}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{c}\right)},$$

on obtient

$$|\Psi(0)|^2 \cong \frac{\nu\lambda}{4\pi} (2a)^{-\frac{\nu+1}{c}} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+2}{c}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{c}\right)} \quad (3.14)$$

Les résultats obtenus sont regroupés dans le tableau 2, où on a aussi reporté les valeurs obtenues par un calcul direct et par la règle de Schwinger en adoptant pour fonction d'onde d'essai  $G_g(r)$  (3.12) pour  $g=1$  et  $2$ . On a également reporté les valeurs exactes. Nous avons considéré trois valeurs différentes pour l'exposant  $\nu$  du potentiel en loi de puissance, à savoir  $\nu = -1, -1/2$  et  $1$

$\nu$	-1	-1/2	1
$ \Psi_{g=1}(0) _{direct}^2$	0.00955	0.00522	0.06772
$ \Psi_{g=1}(0) _{Schw}^2$	0.02251	0.00937	0.07958
$ \Psi_{g=2}(0) _{direct}^2$	0.02172	0.00861	0.07732
$ \Psi_{g=2}(0) _{Schw}^2$	0.03385	0.01086	0.07958
$ \Psi_c(0) _{direct}^2$	0.03979	0.01189	0.08262
$ \Psi_c(0) _{Schw}^2$	0.03979	0.01126	0.07958
$ \Psi_{exact}(0) ^2$	0.03979	0.01123	0.07958

Tableau [2].

## Comportement de la fonction d'onde

D'après les résultats numériques obtenus dans les tableaux 1 et 2 , on peut dire que la fonction d'onde d'essai  $U_c(r)$  est très proche de la fonction d'onde exacte . A chaque potentiel en loi de puissance  $V(r)=\text{sign}(\nu) r^\nu$  correspond une valeur  $c_0$  de  $c$  obtenue par minimisation de l'énergie (3.11) . L'ensemble des points  $(\nu, c_0)$  constitue une courbe dans le plan  $(\nu, c)$

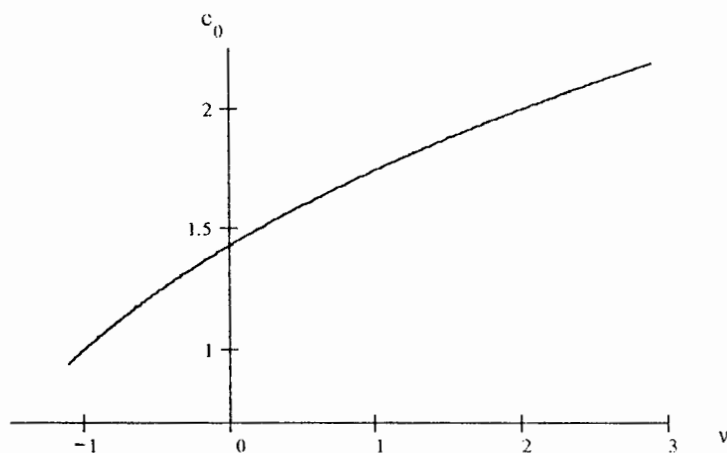


Figure 5 : Représentation graphique  $c_0=c_0(\nu)$ .

De même , on peut tracer la courbe qui représente l'énergie minimisée  $E_0$  en fonction de  $\nu$

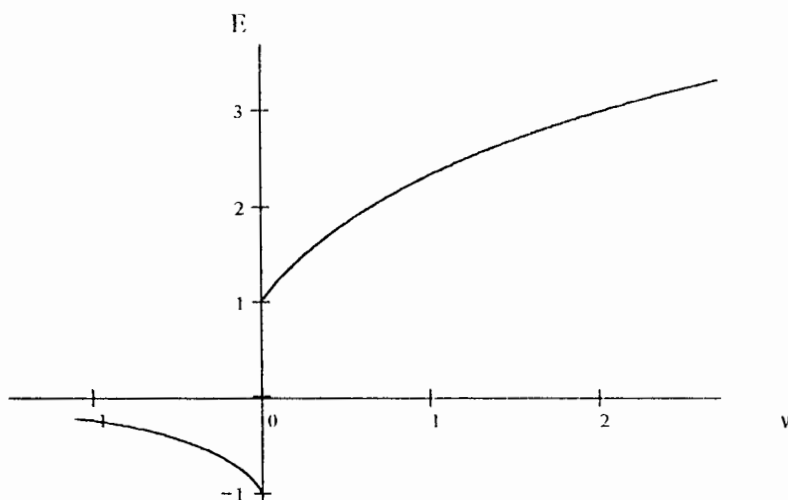


Figure 6 : Représentation graphique  $E_0=E(\nu)$  .

En remarque que la courbe  $c_0=c_0(\nu)$  est continue et quasiment linéaire .  $c_0(\nu)$  peut donc être approximée par une fonction linéaire de  $\nu$   $c_{lin}(\nu)$  qui coïncide évidemment avec  $c_{lin}(\nu)$

pour  $\nu=-1$  et  $\nu=2$ , c'est-à-dire dans les deux cas particuliers des potentiels Coulombien et de l'oscillateur harmonique, c'est-à-dire  $c_{lin}(-1)=1$  et  $c_{lin}(2)=2$ , d'où l'expression de  $c_{lin}(\nu)$

$$c_{lin}(\nu) = \frac{4+\nu}{3} .$$

En adoptant  $c_{lin}(\nu)$  à la place de  $c_0(\nu)$  obtenue par minimisation de (3.11), on obtient des résultats très proches de ceux obtenus précédemment (par minimisation de (3.11)).

#### Remarque

On peut vérifier la correspondance entre les potentiels en loi de puissance singuliers à l'origine et les potentiels en loi de puissance réguliers à l'origine en supposant que l'exposant  $c$  dans la partie exponentielle de la fonction d'onde d'essai (3.9) ne dépend ni de l'excitation radiale  $n_r$  ni de l'excitation orbitale  $\ell$ , ce qui est vérifié pour les potentiels Coulombien et harmonique.

Soient  $V'(r)$  un potentiel régulier à l'origine

$$V'(r) = \lambda' r^{\nu'} \quad \text{sign}(\nu') = \text{sign}(\lambda') > 0$$

et  $V(r)$  un potentiel singulier à l'origine

$$V(r) = \lambda r^{\nu} \quad \text{sign}(\nu) = \text{sign}(\lambda) < 0$$

en correspondance (section 2.6).

Dans le but d'approximer le niveau fondamental des Hamiltoniens

$$H' = \frac{p^2}{2m} + V'(r)$$

et

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) ,$$

on prend comme fonction d'onde d'essai (3.9). Soient  $(a_0, c_0)$  et  $(a'_0, c'_0)$  les valeurs des paramètres variationnels  $(a, c)$  correspondant à l'approximation variationnelle pour  $H$  et  $H'$  respectivement. En remplaçant les fonctions d'onde radiales réduites  $U(r)$  et  $U'(r)$  dans la relation (2.51) par la fonction d'onde d'essai (3.9) avec les paramètres  $(a, c)$  et  $(a', c')$  respectivement, on

obtient une relation entre  $c$  et  $c'$

$$c = c' \frac{2}{2 + \nu'} \quad . \quad (3.15)$$

Si on prend pour  $c'$  la valeur  $c'_0$  correspondant à l'approximation variationnelle pour le potentiel régulier , on obtient pour  $c$  la valeur  $\tilde{c}_0$

$$\tilde{c}_0 = c'_0 \frac{2}{2 + \nu'} \quad . \quad (3.16)$$

Il s'avère que  $\tilde{c}_0$  et  $c_0$  sont très proches . Par exemple pour  $(\nu', \nu) = (1, -2/3)$  ,  $c'_0 = 1.7472$  . La relation (3.16) donne  $\tilde{c}_0 = 1.165$  à comparer avec  $c_0 = 1.164$  obtenu par minimisation de (3.11) .

### 3.2.2 Les niveaux excités

Pour calculer variationnellement l'énergie d'un niveau excité il faut connaître exactement les fonctions d'onde des niveaux inférieurs , ce qui n'est généralement pas le cas . Présentons une méthode qui peut donner de bonnes approximations pour les énergies des états excités .

#### Le premier niveau excité radial

Nous allons de nouveau nous baser sur les cas des potentiels Coulombien et harmonique pour faire le choix des fonctions d'ondes approximatives pour les niveaux excités .

Pour le premier niveau excité radial , les fonctions d'ondes radiales réduites exactes pour les potentiels Coulombien et harmonique sont données respectivement par

$$U(r) \propto r(r-b)e^{-ar}$$

et

$$U(r) \propto r(r^2 - b^2)e^{-ar^2} \quad .$$

Prenons pour approximation de la fonction d'onde dans le cas général une forme qui concilie les deux formes précédentes

$$U(r) \propto r(r^c - b^c)e^{-ar^c} \quad . \quad (3.17)$$

Le paramètre  $a$  sera fixé en imposant le théorème du viriel et on prendra pour le paramètre  $c$  la valeur obtenue pour le niveau fondamental . Pour fixer  $b$  on utilise le résultat général

$$U(b_i) = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n_r \quad ,$$

où les  $b_i$  désignent les noeuds de la fonction d'onde radiale réduite autres que zéro [12] , ce qui donne en utilisant l'équation de Schrödinger (3.8)

$$\frac{d^2}{dr^2} U(r) |_{r=b_i} = 0 \quad . \quad (3.18)$$

En appliquant ce résultat général à notre cas particulier , on obtient

$$b^c = \frac{1+c}{2ca} \quad .$$

Notons que la procédure pour fixer les paramètres  $a$  ,  $b$  et  $c$  fait que notre approximation n'est pas de nature variationnelle .

### Généralisation aux autres niveaux excités

Une généralisation de l'approximation de la fonction d'onde radiale réduite pour le premier niveau excité radialement aux autres niveaux excités est la suivante :

$$U_{n_r, \ell}(r) \propto r^{\ell+1} \left( \prod_{i=1}^{n_r} (r^c - b_i^c) \right) e^{-ar^c} \quad . \quad (3.19)$$

On remarque que  $U_{n_r, \ell}(r)$  a le bon comportement à l'origine (en  $r^{\ell+1}$ ) et possède comme il ce doit  $n_r$  noeuds. Les paramètres  $a$  ,  $c$  et  $b_i$   $i = 1, 2, \dots, n_r$  seront fixés comme suit : On prendra pour  $c$  la valeur correspondant à l'état fondamental et qui aura été déterminé auparavant , le  $a$  et les  $b_i$  seront fixés en imposant le théorème du viriel et en appliquant  $n_r$  fois l'équation (3.18), ce qui donne  $n_r + 1$  équations pour  $n_r + 1$  inconnus .

Remarquons que dans le cas des potentiels Coulombien et harmonique , on obtient évidemment les résultats exacts , car on sait d'avance que dans ces cas les fonctions d'onde radiales réduites sont bien de la forme (3.19) .

Le tableau suivant regroupe quelques résultats numériques pour des potentiels en loi de puissance  $V(r) = \text{sign}(\nu)r^\nu$  obtenus en utilisant comme fonction d'onde approximative la fonction (3.19). On dénote par  $E_{n_r, \ell}$  l'énergie du niveau caractérisé par l'excitation radiale  $n_r$  et par l'excitation orbitale  $\ell$ . Les résultats exacts sont indiqués entre parenthèses. Par résultats exacts, on entend les résultats obtenus en faisant une résolution numérique de l'équation de Schrödinger. On a utilisé pour ce faire la méthode de Multhopp [1] qui sera exposée dans l'annexe B.

$E_{n_r, \ell}$	$\nu = -1$	$\nu = -1/2$	$\nu = 0.1$	$\nu = 1$	$\nu = 2$
$E_{1,0}$	(-0.06250)	-0.26309 (-0.26320)	1.3337 (1.3347)	4.089 (4.088)	(7)
$E_{0,1}$	(-0.06250)	-0.286603 (-0.286611)	1.30719 (1.30718)	3.36134 (3.36125)	(5)
$E_{1,1}$	(-0.02778)	-0.209764 (-0.209800)	1.37315 (1.37310)	4.88513 (4.88450)	(9)
$E_{0,2}$	(-0.02778)	-0.221503 (-0.221506)	1.354032 (1.354027)	4.24824 (4.24818)	(7)
$E_{1,2}$	(-0.01563)	-0.176805 (-0.176817)	1.40399 (1.40395)	5.6301 (5.6297)	(11)
$E_{0,3}$	(-0.01563)	-0.184004 (-0.184005)	1.38924 (1.38923)	5.05097 (5.05093)	(9)
$E_{1,3}$	(-0.01000)	-0.154235 (-0.154239)	1.42980 (1.42963)	6.3324 (6.3321)	(13)
$E_{2,0}$	(-0.02778)	-0.19749 (-0.19756)	1.3924 (1.3906)	5.5213 (5.5206)	(11)
$E_{2,1}$	(-0.01563)	-0.16937 (-0.16942)	1.4188 (1.4187)	6.2090 (6.2076)	(13)

Tableau [3].

### 3.2.3 Applications

Les mésons et plus particulièrement les quarkonias lourds sont les sujets principaux de l'application des modèles de potentiel dans le cadre d'une cinématique non-relativiste [10]. À côté des potentiels inspirés de la QCD avec un confinement linéaire aux larges distances et la liberté asymptotique aux petites distances [11], on utilise également des potentiels phénoménologiques avec des paramètres libres, fixés de telle façon à avoir le meilleur accord possible avec les données expérimentales.

L'un des potentiels les plus utilisés pour étudier les familles  $J/\psi (c\bar{c})$  et  $\Upsilon (b\bar{b})$  et également la famille  $\phi (s\bar{s})$  est le potentiel de Martin [7]

$$V(r) = -8.064 \text{ GeV} + (6.898 \text{ GeV}) (r \cdot 1 \text{ GeV})^{0.1} \quad , \quad (3.20)$$

avec les valeurs des masses proposées par Martin [13]

$$m_b = 5.174 \text{ GeV} \quad , \quad m_c = 1.8 \text{ GeV} \quad \text{et} \quad m_s = 0.518 \text{ GeV} . \quad (3.21)$$

En faisant usage des lois d'échelle, on obtient pour les masses des mésons l'expression suivante ou formule de masse :

$$M(E_{1/2}, m_q, m_{q'}) = \left( (m_q + m_{q'}) - 8.064 + E_{1/2} \left( \frac{2m_q m_{q'}}{m_q + m_{q'}} \right)^{\frac{-1}{21}} (6.898)^{\frac{20}{21}} \right) \text{ GeV} \quad , \quad (3.22)$$

où  $m_q$  et  $m_{q'}$  désignent respectivement les masses du quark et de l'antiquark constituant le méson  $q\bar{q}'$ ,  $E_{1/2}$  dénote l'énergie du niveau fondamental d'un système de masse réduite  $\mu = 1/2$  pour un potentiel  $V(r) = r^{0.1}$ .

Comparons les résultats obtenus en utilisant la formule de masse (3.22) avec les données expérimentales des masses [14],[15].



système de quarks	l'état	valeurs théoriques		valeurs expérimentales
		exacts	approximées	
$c\bar{c}$	1s	3.0966	3.0965	3.097
	1p	3.534	3.534	3.415 → 3.556
	2s	3.702	3.696	3.686
$b\bar{b}$	1s	9.4738	9.4739	9.460
	1p	9.889	9.890	9.859 → 9.913
	2s	10.050	10.044	10.02
$s\bar{s}$	1s	0.9945	0.9947	1.02
	1p	1.458	1.458	1.44
	2s	1.637	1.631	1.65

Tableau [4] .

## Chapitre 4

# Développement systématique sur des Gaussiennes

Les problèmes à  $N$  corps sont très compliqués . Déjà le plus simple d'entre eux , à savoir le problème à un corps dans un potentiel central ou le problème à deux corps dans le cas d'une interaction invariante par translation et par rotation , n'est résolvable exactement que pour un nombre de cas très limité . La complexité du problème est une fonction rapidement croissante avec le nombre de particules  $N$  . Même la résolution numérique , très simple pour le cas à un ou à deux corps dans les conditions ci-dessus mentionnées , se complique considérablement à fur et à mesure que le nombre de particules augmente et requiert des moyens de calcul considérables.

Un cas où on dispose de la solution exacte est celui où les particules du système interagissent via des forces harmoniques à deux corps . En effet , l'énergie potentielle est dans ce cas une forme quadratique des coordonnées de Jacobi . En outre , un choix approprié de ces dernières permet de mettre l'énergie cinétique sous une forme diagonale avec le même coefficient pour chacune des coordonnées de Jacobi . Une transformation orthogonale sur ces dernières permet de diagonaliser l'énergie potentielle tout en gardant la forme initiale de l'énergie cinétique . L'Hamiltonien s'écrit alors comme une somme de  $(N - 1)$  oscillateurs harmoniques indépendants, un oscillateur par coordonnée de Jacobi . Il s'ensuit que le problème considéré est exactement résolvable.

Illustrons le traitement décrit ci-dessus dans le cas le plus simple non trivial , à savoir pour un système composé de trois particules .

## 4.1 L'oscillateur harmonique à trois corps

L'Hamiltonien d'un système de trois particules de masses  $m_1$ ,  $m_2$  et  $m_3$  interagissant par des forces harmoniques à deux corps  $V^{(ij)}(r_{ij}) = k_{ij}r_{ij}^2$  ( $i \neq j = 1, 2, 3$ ) s'écrit

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} + k_{12}r_{12}^2 + k_{13}r_{13}^2 + k_{23}r_{23}^2 \quad . \quad (4.1)$$

Introduisons la coordonnée du centre de masse  $\vec{R}$

$$\vec{R} = \frac{1}{m_1 + m_2 + m_3} (m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2 + m_3 \vec{r}_3) \quad , \quad (4.2)$$

et deux coordonnées de Jacobi  $\vec{\rho}$  et  $\vec{\lambda}$  définies par les relations

$$\vec{\rho} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad , \quad (4.3)$$

$$\vec{\lambda} = -\frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{r}_1 - \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{r}_2 + \vec{r}_3 \quad . \quad (4.4)$$

On peut inverser les relations (4.2), (4.3) et (4.4) pour tirer les coordonnées des particules  $\vec{r}_1$ ,  $\vec{r}_2$  et  $\vec{r}_3$  en fonction de  $\vec{R}$ ,  $\vec{\rho}$  et  $\vec{\lambda}$

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{\rho} - \frac{m_3}{m_1 + m_2 + m_3} \vec{\lambda} + \vec{R} \quad , \\ \vec{r}_2 &= -\frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{\rho} - \frac{m_3}{m_1 + m_2 + m_3} \vec{\lambda} + \vec{R} \quad , \\ \vec{r}_3 &= \frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2 + m_3} \vec{\lambda} + \vec{R} \quad . \end{aligned}$$

En introduisant les moments conjugués  $\vec{p}_R$ ,  $\vec{p}_\rho$  et  $\vec{p}_\lambda$  de  $\vec{R}$ ,  $\vec{\rho}$  et  $\vec{\lambda}$  respectivement, l'énergie cinétique  $T$  peut être réécrite comme

$$T = \frac{\vec{p}_R^2}{2M} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2M_\rho} + \frac{\vec{p}_\lambda^2}{2M_\lambda}$$

avec

$$M = m_1 + m_2 + m_3 \quad ,$$

$$M_\rho = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} ,$$

$$M_\lambda = \frac{m_3 (m_1 + m_2)}{m_1 + m_2 + m_3} .$$

On en déduit l'expression de l'Hamiltonien relatif , c'est-à-dire l'Hamiltonien après soustraction du terme de centre de masse , qu'on désignera par le même symbole que l'Hamiltonien total

$$H = \frac{\vec{p}_\rho^2}{2M_\rho} + \frac{\vec{p}_\lambda^2}{2M_\lambda} + k_{12}\rho^2 + k_{13} \left( \frac{-m_2}{m_1 + m_2} \vec{\rho} + \vec{\lambda} \right)^2 + k_{23} \left( \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{\rho} + \vec{\lambda} \right)^2 .$$

Faisons les changements d'échelle

$$\vec{\rho} = \frac{1}{\sqrt{2M_\rho}} \vec{x} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{2M_\rho} \Delta_\rho = \Delta_x ,$$

$$\vec{\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2M_\lambda}} \vec{y} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{2M_\lambda} \Delta_\lambda = \Delta_y ,$$

ce qui permet d'exprimer l'Hamiltonien  $H$  en fonction de  $\vec{x}$  , de  $\vec{y}$  et de leurs moments conjugués  $\vec{p}_x$  et  $\vec{p}_y$

$$H = \vec{p}_x^2 + \vec{p}_y^2 + \left( \frac{k_{12} (m_1 + m_2)^2 + (k_{13} m_2^2 + k_{23} m_1^2)}{2M_\rho (m_1 + m_2)^2} \right) x^2 + \frac{(k_{13} + k_{23})}{2M_\lambda} y^2$$

$$+ \frac{(k_{23} m_1 - k_{13} m_2)}{(m_1 + m_2) \sqrt{M_\rho M_\lambda}} \vec{x} \cdot \vec{y} .$$

Sous une transformation orthogonale sur  $(\vec{x}, \vec{y})$  ( $(\vec{x}, \vec{y}) \rightarrow (\vec{x}', \vec{y}')$ ) , le terme d'énergie cinétique est invariant , tandis que le terme d'énergie potentielle est de nouveau une forme quadratique en les nouvelles coordonnées . On peut toujours faire le choix d'une transformation orthogonale de telle manière à diagonaliser le terme d'énergie potentielle . Ceci nous amène à la diagonalisation de la matrice suivante :

$$A := \begin{pmatrix} \frac{k_{12}(m_1+m_2)^2 + (k_{13}m_2^2 + k_{23}m_1^2)}{2m_1m_2(m_1+m_2)} & \frac{(k_{23}m_1 - k_{13}m_2)}{2(m_1+m_2)} \sqrt{\frac{m_1+m_2+m_3}{m_1m_2m_3}} \\ \frac{(k_{23}m_1 - k_{13}m_2)}{2(m_1+m_2)} \sqrt{\frac{m_1+m_2+m_3}{m_1m_2m_3}} & \frac{(k_{13} + k_{23})(m_1+m_2+m_3)}{2m_3(m_1+m_2)} \end{pmatrix} .$$

L'Hamiltonien du système est alors la somme de deux oscillateurs harmoniques indépendants

$$H = \vec{p}_{x'}^2 + \frac{(S_{(1,2)3} + S_{(1,3)2} + S_{(3,2)1} + \sqrt{L_{(1,2)3} + L_{(1,3)2} + L_{(3,2)1}})}{4m_1m_2m_3} x'^2 + \vec{p}_{y'}^2 + \frac{(S_{(1,2)3} + S_{(1,3)2} + S_{(3,2)1} - \sqrt{L_{(1,2)3} + L_{(1,3)2} + L_{(3,2)1}})}{4m_1m_2m_3} y'^2 ,$$

avec

$$S_{(i,j)l} = (m_i + m_j) m_l k_{ij}$$

et

$$L_{(i,j)l} = (m_i + m_j)^2 m_l^2 k_{ij}^2 + 2(m_i m_j - m_i m_l - m_j m_l - m_l^2) m_i m_j k_{il} k_{jl} .$$

Les énergies propres de  $H$  sont par conséquent les sommes des énergies propres de chacun des deux oscillateurs et les états propres correspondants sont les produits tensoriels des états propres de chacun des deux oscillateurs . En utilisant l'expression , connue , des énergies propres d'un oscillateur harmonique à trois dimensions , on en déduit les énergies propres de l'oscillateur harmonique à trois corps

$$E_{n,n'} = (2n + 3) \sqrt{\frac{(S_{(1,2)3} + S_{(1,3)2} + S_{(3,2)1} + \sqrt{L_{(1,2)3} + L_{(1,3)2} + L_{(3,2)1}})}{4m_1m_2m_3}} + (2n' + 3) \sqrt{\frac{(S_{(1,2)3} + S_{(1,3)2} + S_{(3,2)1} - \sqrt{L_{(1,2)3} + L_{(1,3)2} + L_{(3,2)1}})}{4m_1m_2m_3}} . \quad (4.5)$$

En particulier l'énergie du niveau fondamental de l'oscillateur harmonique à trois corps qui correspond à  $((n, n')=(0, 0))$  peut être mise sous la forme

$$E = 3 \sqrt{\frac{k_{12} + k_{13}}{2m_1} + \frac{k_{12} + k_{23}}{2m_2} + \frac{k_{13} + k_{23}}{2m_3} + \sqrt{(k_{12}k_{13} + k_{12}k_{23} + k_{13}k_{23}) \frac{(m_2 + m_3 + m_1)}{m_1m_2m_3}}} . \quad (4.6)$$

Dans le cas où les constantes de couplage sont toutes égales  $k_{12} = k_{13} = k_{23} = k$  , l'expression (4.6) se simplifie en

$$E = 3\sqrt{k \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} + \sqrt{3 \left( \frac{m_2 + m_3 + m_1}{m_1 m_2 m_3} \right)} \right)} . \quad (4.7)$$

Donnons la fonction d'onde du niveau fondamental dans le cas où toutes les constantes de couplage sont égales à 1 . Pour deux masses égales ( $m_1 = m_2 = m$ ) , nous avons une Gaussienne

$$\Psi(\rho, \lambda) \propto \exp \left( -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2m}} \vec{\rho}^2 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m + m_3}{2m_3 m}} \vec{\lambda}^2 \right) , \quad (4.8)$$

et pour trois masses différentes nous avons une Gaussienne corrélée

$$\Psi(\rho, \lambda) \propto e^{(-a \vec{\rho}^2 - b \vec{\lambda}^2 + c \vec{\rho} \vec{\lambda})} , \quad (4.9)$$

avec par exemple pour  $(m_1, m_2, m_3) = (1, 2, 3)$

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{9} \left( \sqrt{33 + 3\sqrt{13}} + \sqrt{33 - 3\sqrt{13}} \right) \\ b &= \frac{\sqrt{3}}{8} \left( \sqrt{11 + \sqrt{13}} (11 - 3\sqrt{13}) + \sqrt{11 - \sqrt{13}} (11 + 3\sqrt{13}) \right) \\ c &= \frac{\sqrt{3}}{6} \left( \sqrt{11 + \sqrt{13}} (\sqrt{13} - 3) - \sqrt{11 - \sqrt{13}} (\sqrt{13} + 3) \right) . \end{aligned}$$

Dans le cas le plus général la fonction d'onde du niveau fondamental est une Gaussienne en  $\vec{x}'$  et  $\vec{y}'$  , c'est-à-dire une Gaussienne corrélée en  $\vec{x}$  et  $\vec{y}$  . Comme  $\vec{x}$  et  $\vec{y}$  sont obtenus à partir de  $\vec{\rho}$  et  $\vec{\lambda}$  par des transformations d'échelle , la fonction d'onde du niveau fondamental est donc une Gaussienne corrélée en  $\vec{\rho}$  et  $\vec{\lambda}$  .

## 4.2 Développement systématique sur des Gaussiennes

L'Hamiltonien d'un système de  $N$  particules de masses  $m_1, \dots, m_N$  interagissant par des forces centrales à deux corps s'écrit

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i < j=1}^N V^{(ij)}(r_{ij}) .$$

En faisant un choix de coordonnées de Jacobi , l'Hamiltonien relatif peut se mettre sous la

forme

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\vec{p}_{x_i}^2}{2M_i} + \sum_{i < j=1}^N V^{(ij)}(r_{ij}\{\vec{x}_k\}) \quad , \quad (4.10)$$

où  $\vec{p}_{x_i}$  dénote le moment conjugué de la  $i^{eme}$  coordonnée de Jacobi  $\vec{x}_i$  et  $M_i$  est une masse "réduite" . Le potentiel  $V^{(ij)}(r_{ij}\{\vec{x}_k\})$  doit être bien entendu considéré comme une fonction des coordonnées de Jacobi  $\vec{x}_k$  .

La méthode de développement systématique sur des Gaussiennes corrélées , qui est l'une des méthodes les plus utilisées pour la résolution approximative de l'équation de Schrödinger pour des systèmes à petit nombre de corps , consiste à adopter

$$\Psi(\vec{x}_1 \dots \vec{x}_{N-1}) = \sum_{n=1}^g b_n \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} A_{ij}^n \vec{x}_i \cdot \vec{x}_j\right) \quad (4.11)$$

comme fonction d'onde d'essai .  $A^n$  est une matrice carrée de rang  $(N-1)$  réelle , symétrique et définie positive .  $g$  est appelé le nombre de générations . Les paramètres de poids  $b_n$  et les paramètres de portée  $A_{ij}^n$  seront déterminés par une procédure variationnelle .

Si on adopte la notation suivante :

$$\langle \vec{x}_1 \dots \vec{x}_{N-1} | m \rangle \equiv \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} A_{ij}^m \vec{x}_i \cdot \vec{x}_j\right) \quad , \quad (4.12)$$

(4.11) peut-être mise sous la forme

$$|\Psi\rangle = \sum_{m=1}^g b_m |m\rangle \quad . \quad (4.13)$$

La valeur moyenne d'une observable quelconque  $\Lambda$  évaluée dans l'état  $|\Psi\rangle$  , (4.13), sera donné par l'expression

$$\langle \Lambda \rangle_{\Psi} = \frac{\sum_{m,n=1}^g b_n b_m \langle n | \Lambda | m \rangle}{\sum_{m,n=1}^g b_n b_m \langle n | m \rangle} \quad . \quad (4.14)$$

Donc le calcul de la valeur moyenne d'une observable se ramène à celui des éléments de matrice de l'observable en question entre deux Gaussiennes corrélées et à l'évaluation des recouvrements de Gaussiennes . Nous allons considérer dans ce qui suit deux observables parmi les plus intéressantes , à savoir l'Hamiltonien et les corrélations à courte portée . Nous donnerons également l'expression du recouvrement de deux Gaussiennes  $\langle n | m \rangle$  comme cas particulier des éléments

de matrice de l'énergie potentielle .

#### 4.2.1 L'Hamiltonien

Le calcul des éléments de matrice de l'Hamiltonien du système entre deux Gaussiennes corrélées  $\langle n | H | m \rangle$  , se ramène au calcul des éléments de matrice des termes d'énergie cinétique et des terme d'énergie potentielle entre deux Gaussiennes corrélées

$$\langle n | \frac{\vec{p}_{x_i}^2}{2M_i} | m \rangle \quad i=1, 2, \dots, N-1 \quad \text{et} \quad \langle n | V^{(ij)}(r_{ij}\{\vec{x}_k\}) | m \rangle \quad i < j=1, 2, \dots, N .$$

Considérons successivement les termes d'énergie potentielle et d'énergie cinétique .

##### L'énergie potentielle

Notre problème se ramène à calculer l'élément de matrice d'une fonction quelconque  $f(\vec{r}_{ij})$  de la variable  $\vec{r}_{ij}$   $i < j=1, 2, \dots, N$  entre deux Gaussiennes corrélées  $\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle$  . Nous avons

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = \int \dots \int d^3 \vec{x}_1 \dots d^3 \vec{x}_{N-1} f(\vec{r}_{ij}) e^{-\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^{N-1} (A_{kl}^n + A_{kl}^m) \vec{x}_k \cdot \vec{x}_l} .$$

En posant

$$A_{kl} = \frac{1}{2} (A_{kl}^n + A_{kl}^m) ,$$

l'expression précédente peut être mise sous la forme

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = \int \dots \int d^3 \vec{x}_1 \dots d^3 \vec{x}_{N-1} f(\vec{r}_{ij}) e^{-\sum_{k,l=1}^{N-1} A_{kl} \vec{x}_k \cdot \vec{x}_l} .$$

Faisons sur  $A$  une transformation orthogonale  $R$

$$R^T R = R R^T = I ,$$

de telle manière à la ramener à sa forme diagonale , qu'on désignera par  $\tilde{A}$  . Nous avons donc

$$\tilde{A} = R A R^T . \tag{4.15}$$



On peut aussi inversement exprimer  $A$  en fonction de  $\tilde{A}$ ,

$$A = R^T \tilde{A} R \quad .$$

L'argument de l'exponentiel intervenant dans l'expression de  $\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle$  peut alors se mettre sous la forme

$$\begin{aligned} \sum_{k,l}^{N-1} A_{kl} \vec{x}_k \cdot \vec{x}_l &= \sum_{k,l,n,m}^{N-1} R_{km}^T \tilde{A}_{mn} R_{nl} \vec{x}_k \cdot \vec{x}_l \\ &= \sum_{n,m}^{N-1} \tilde{A}_{mn} \vec{y}_m \cdot \vec{y}_n = \sum_n^{N-1} \tilde{A}_{nn} \vec{y}_n^2 \quad , \end{aligned} \quad (4.16)$$

où on a introduit de nouvelles coordonnées de Jacobi  $\{\vec{y}_k\}$  liées aux anciennes coordonnées de Jacobi  $\{\vec{x}_k\}$  par les relations

$$\vec{y}_k = R_{kl} \vec{x}_l \quad , \quad (4.17)$$

c'est-à-dire que les  $\{\vec{x}_k\}$  et les  $\{\vec{y}_k\}$  sont liées par une transformation orthogonale, celle qui a ramené  $A$  à sa forme diagonale  $\tilde{A}$ . Pour obtenir (4.16), on a également utilisé le fait que  $\tilde{A}$  est une matrice diagonale.

On peut d'autre part remarquer que l'élément d'intégration  $d^3 \vec{x}_1 \dots d^3 \vec{x}_{N-1}$  est invariant sous une transformation orthogonale. Donc

$$d^3 \vec{x}_1 \dots d^3 \vec{x}_{N-1} = d^3 \vec{y}_1 \dots d^3 \vec{y}_{N-1}$$

et  $\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle$  peut se mettre sous la forme

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = \int \dots \int d^3 \vec{y}_1 \dots d^3 \vec{y}_{N-1} f(\vec{r}_{ij}) e^{-\sum_{k=1}^{N-1} \tilde{A}_{kk} \vec{y}_k^2} \quad ,$$

où  $\vec{r}_{ij}$  doit être maintenant considéré comme une fonction des  $\vec{y}_k$ . Comme

$$\vec{r}_{ij} = \sum_{k=1}^{N-1} d_{ij}^k \vec{x}_k$$

où les  $d_{ij}^k$  sont par définition les composantes des  $\vec{r}_{ij}$  sur les  $\vec{x}_k$ ,

$$\vec{r}_{ij} = \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^{N-1} d_{ij}^k R_{kl}^T \vec{y}_l .$$

Faisons maintenant sur les  $\{\vec{y}_l\}$  une transformation d'échelle

$$\vec{Z}_l = (\tilde{A}_{ll})^{1/2} \vec{y}_l , \quad (4.18)$$

ce qui permet de réécrire  $\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle$  sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle &= \left( \tilde{A}_{11} \dots \tilde{A}_{N-1, N-1} \right)^{-3/2} \int \dots \int d^3 \vec{Z}_1 \dots d^3 \vec{Z}_{N-1} f(\vec{r}_{ij}) e^{-\sum_{k=1}^{N-1} \vec{Z}_k^2} \\ &= (\Delta)^{-3/2} \int \dots \int d^3 \vec{Z}_1 \dots d^3 \vec{Z}_{N-1} f(\vec{r}_{ij}) e^{-\sum_{k=1}^{N-1} \vec{Z}_k^2} , \end{aligned}$$

où

$$\Delta := \left( \tilde{A}_{11} \dots \tilde{A}_{N-1, N-1} \right)$$

est le déterminant de la matrice  $A$ .  $\vec{r}_{ij}$  dans l'expression précédente doit être cette fois-ci considéré comme une fonction des  $\{\vec{Z}_k\}$

$$\vec{r}_{ij} = \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^{N-1} d_{ij}^k R_{kl}^T (\tilde{A}_{ll})^{-1/2} \vec{Z}_l .$$

Il est toujours possible de faire une transformation orthogonale sur les  $\vec{Z}_k$  ( $\{\vec{Z}_k\} \rightarrow \{\vec{W}_k\}$ ) de telle manière que  $\vec{r}_{ij}$  soit proportionnel à  $\vec{W}_1$ . Il est clair que le facteur de proportionnalité est

$$\begin{aligned} \left[ \sum_{k,n=1}^{N-1} \sum_{l,m=1}^{N-1} (d_{ij}^k R_{kl}^T (\tilde{A}_{ll})^{-1/2}) (d_{ij}^n R_{nm}^T (\tilde{A}_{mm})^{-1/2}) \right]^{1/2} &= \left[ \sum_{k,n=1}^{N-1} \sum_{l=1}^{N-1} d_{ij}^k R_{kl}^T (\tilde{A}_{ll})^{-1} R_{ln} d_{ij}^n \right]^{1/2} \\ &= [d_{ij}^T A^{-1} d_{ij}]^{1/2} , \end{aligned}$$

où on a tenu compte du fait que

$$R^T \tilde{A}^{-1} R = A^{-1} .$$

Comme les transformations orthogonales laissent invariants  $d^3 \vec{Z}_1 \dots d^3 \vec{Z}_{N-1}$  et  $\sum_{k=1}^{N-1} \vec{Z}_k^2$ ,

alors

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = (\Delta)^{-3/2} \int \dots \int d^3 \vec{W}_1 \dots d^3 \vec{W}_{N-1} f\left(\sqrt{d_{ij}^T A^{-1} d_{ij}} \vec{W}_1\right) e^{-\sum_{k=1}^{N-1} \vec{W}_k^2} .$$

L'intégration sur  $\vec{W}_2, \vec{W}_3, \dots, \vec{W}_{N-1}$  est immédiate, si on utilise le résultat

$$\int d^3 \vec{W} e^{-\vec{W}^2} = \pi^{3/2} .$$

Donc

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = (\Delta)^{-3/2} (\pi)^{3(N-2)/2} \int d^3 \vec{W}'_1 f\left((d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{1/2} \vec{W}'_1\right) e^{-\vec{W}'_1{}^2} , \quad (4.19)$$

qu'on peut aussi réécrire comme

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = (\Delta)^{-3/2} (\pi)^{3(N-2)/2} (d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{-3/2} \int d^3 \vec{W}'_1 f(\vec{W}'_1) e^{-(d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{-1} \vec{W}'_1{}^2} \quad (4.20)$$

si on fait le changement de variables

$$\vec{W}'_1 = (d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{1/2} \vec{W}_1 .$$

A partir de (4.19), on déduit le recouvrement de deux Gaussiennes en posant  $f(\vec{r}_{ij})=1$ , ce qui donne

$$\langle n | m \rangle = (\pi^{N-1} / \Delta)^{3/2} . \quad (4.21)$$

On peut utiliser cette expression de  $\langle n | m \rangle$  pour réécrire  $\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle$  sous la forme suivante :

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = \langle n | m \rangle \pi^{-3/2} \int d^3 \vec{W}'_1 f\left((d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{1/2} \vec{W}'_1\right) e^{-\vec{W}'_1{}^2} . \quad (4.22)$$

Pour un potentiel en loi de puissance

$$V = V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) = \lambda_{ij} r_{ij}^{-\nu} , \quad (4.23)$$

l'expression (4.22) se réduit à

$$\langle n | \lambda_{ij} r_{ij}^\nu | m \rangle = \langle n | m \rangle \pi^{-3/2} \lambda_{ij} (d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{\nu/2} \int d^3 \vec{W}_1 W_1^\nu e^{-\vec{W}_1^2} .$$

En utilisant le résultat

$$\int d^3 \vec{W}_1 W_1^\nu e^{-\vec{W}_1^2} = 4\pi \int_0^\infty dW_1 W_1^{\nu+2} e^{-W_1^2} = 2\pi \Gamma\left(\frac{\nu+3}{2}\right) \quad \text{pour } \nu > -3 , \quad (4.24)$$

on obtient finalement

$$\langle n | \lambda_{ij} r_{ij}^\nu | m \rangle = \langle n | m \rangle \frac{2\lambda_{ij}}{\sqrt{\pi}} (d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{\nu/2} \Gamma\left(\frac{\nu+3}{2}\right) ,$$

qui peut être réécrite comme

$$\langle n | \lambda_{ij} r_{ij}^\nu | m \rangle = \langle n | m \rangle \frac{2\lambda_{ij}}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{\nu+3}{2}\right) \gamma_{ij,ij}^{\nu/2} \quad (4.25)$$

si on introduit la notation

$$\gamma_{ij,kl} = d_{ij}^T A^{-1} d_{kl} . \quad (4.26)$$

### Le terme cinétique

Calculons l'élément de matrice  $\langle n | \frac{\vec{p}_k^2}{2M_k} | m \rangle$ . Nous avons

$$\langle n | \frac{\vec{p}_k^2}{2M_k} | m \rangle = \frac{1}{2M_k} (\langle n | \vec{p}_k \rangle (\vec{p}_k | m)) .$$

En utilisant la relation de définition des Gaussiennes corrélées (4.12), on obtient

$$\vec{p}_k | m \rangle = i\hbar \sum_{p=1}^{N-1} A_{kp}^m \vec{x}_p | m \rangle .$$

Il s'ensuit que

$$\langle n | \frac{\vec{p}_k^2}{2M_k} | m \rangle = \frac{\hbar^2}{2M_k} \sum_{q,p=1}^{N-1} A_{kq}^n A_{kp}^m \langle n | \vec{x}_q \cdot \vec{x}_p | m \rangle . \quad (4.27)$$

Donc on est ramené au calcul des éléments de matrice de  $\vec{x}_q \cdot \vec{x}_p$

$$\langle n | \vec{x}_q \cdot \vec{x}_p | m \rangle = \int \cdots \int d^3 \vec{x}_1 \dots d^3 \vec{x}_{N-1} (\vec{x}_q \cdot \vec{x}_p) e^{-\sum_{i,j=1}^{N-1} A_{ij} \vec{x}_i \cdot \vec{x}_j} , \quad (4.28)$$

qui en terme des  $\vec{y}_k$ , (4.17), prend la forme suivante :

$$\langle n | \vec{x}_q \cdot \vec{x}_p | m \rangle = \sum_{i,j=1}^{N-1} R_{qi}^{-1} R_{pj}^{-1} \int \cdots \int d^3 \vec{y}_1 \dots d^3 \vec{y}_{N-1} (\vec{y}_i \cdot \vec{y}_j) e^{-\sum_{k=1}^{N-1} \tilde{A}_{kk} \vec{y}_k^2} .$$

L'intégrale figurant dans le membre de droite de l'expression précédente est nulle pour  $i \neq j$ , car on a alors à intégrer une fonction impaire en  $\vec{y}_i$  (et en  $\vec{y}_j$ ). Donc

$$\langle n | \vec{x}_q \cdot \vec{x}_p | m \rangle = \sum_{j=1}^{N-1} R_{qj}^{-1} R_{pj}^{-1} \int \cdots \int d^3 \vec{y}_1 \dots d^3 \vec{y}_{N-1} \vec{y}_j^2 e^{-\sum_{k=1}^{N-1} \tilde{A}_{kk} \vec{y}_k^2} .$$

En faisant usage du résultat

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \vec{x}^2 e^{-a \vec{x}^2} d^3 \vec{x} = \frac{3}{2a} \left( \frac{\pi}{a} \right)^{3/2} ,$$

pour  $a > 0$ , on aboutit à

$$\begin{aligned} \langle n | \vec{x}_q \cdot \vec{x}_p | m \rangle &= \frac{3}{2} \left( \frac{\pi}{\Delta} \right)^{3/2} \pi^{\frac{3(N-2)}{2}} \sum_{j=1}^{N-1} \frac{R_{qj}^{-1} R_{pj}^{-1}}{\tilde{A}_{jj}} \\ &= \frac{3}{2} \left( \frac{\pi}{\Delta} \right)^{3/2} \pi^{\frac{3(N-2)}{2}} A_{qp}^{-1} \\ &= \frac{3}{2} \langle n | m \rangle A_{qp}^{-1} . \end{aligned}$$

Finalement, en reportant dans l'expression (4.27), on obtient

$$\langle n | \frac{\vec{p}_k^2}{2M_k} | m \rangle = \frac{3}{2} \langle n | m \rangle \frac{h^2}{2M_k} \sum_{q,p=1}^{N-1} A_{kq}^n A_{qp}^{-1} A_{kp}^m , \quad (4.29)$$

d'où l'expression de l'élément de matrice de l'énergie cinétique entre deux Gaussiennes corrélées

$$\langle n | T | m \rangle = \frac{3}{2} \langle n | m \rangle \sum_{k=1}^{N-1} \frac{h^2}{2M_k} [A^n A^{-1} A^m]_{kk} . \quad (4.30)$$

Dans le cas particulier d'un système de masses réduites toutes égales  $M_k = M$  ( $k=1, 2, \dots, N-1$ ),

l'expression précédente se simplifie en

$$\langle n|T|m\rangle = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{2M} \langle n|m\rangle \text{tr} [A^n A^{-1} A^m] \quad (4.31)$$

Remarquons que dans un système d'unités où  $\frac{\hbar^2}{2M} = 1$ , on retrouve le résultat de la référence [2].

Appliquons nos résultats au calcul de la valeur moyenne de l'énergie pour une seule génération de Gaussiennes. Dans le cas d'un potentiel en loi de puissance (4.23), nous avons

$$E = \frac{3}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\hbar^2}{2M_k} A_{kk} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{\nu+3}{2}\right) \sum_{i<j=1}^N \lambda_{ij} \gamma_{ij,ij}^{\nu/2} \quad (4.32)$$

Dans le cas à trois corps, avec  $\lambda_{ij} = \frac{1}{2} \text{sign}(\nu)$  (indépendant de  $(i, j)$ ) la minimisation de l'expression précédente de  $E$  pour différentes valeurs de  $\nu$  donnent les résultats consignés dans le tableau 5, où on a indiqué également entre parenthèses les résultats exacts [1]. La comparaison des résultats exacts et approximatifs montre que l'approximation d'une seule Gaussienne constitue déjà une bonne approximation du résultat exact, spécialement pour les potentiels confinants ( $\nu > 0$ ). On vérifie également qu'on retrouve le résultat exact pour le potentiel harmonique comme il se doit.

$(m_1, m_2, m_3)$	$\nu = -1$	$\nu = 0.1$	$\nu = 1$	$\nu = 2$	$\nu = 3$
$(1, 1, 0.2)$	-0.1232	1.9480	4.9498	7.5730	9.7638
	(-0.1398)	(1.9452)	(4.9392)	(7.5730)	(9.7389)
$(1, 1, 5)$	-0.3432	1.8512	3.4452	4.3729	5.0293
	(-0.3848)	(1.8436)	(3.4379)	(4.3729)	(5.0166)

Tableau [5].

## 4.2.2 Les corrélations à courte portée

### Calcul direct

On peut remarquer que  $\langle n | \delta^3(\vec{r}_{ij}) | m \rangle$  est de la forme  $\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle$  avec  $f(\vec{r}_{ij}) = \delta^3(\vec{r}_{ij})$ . En remplaçant  $f(\vec{r}_{ij})$  par  $\delta^3(\vec{r}_{ij})$  dans (4.20), on trouve

$$\langle n | \delta^3(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = \langle n | m \rangle \pi^{-3/2} \gamma_{ij,ij}^{-3/2} \quad . \quad (4.33)$$

### Calcul par la formule de Schwinger généralisée

Il est clair que la règle de Schwinger généralisée permet d'obtenir une meilleure approximation de la probabilité de présence de deux particules au même point. En effet, la règle de Schwinger fait intervenir la fonction d'onde en tous les points, alors que le calcul direct fait intervenir la fonction d'onde en un seul point. D'autre part, même si l'approximation de la fonction d'onde est satisfaisante en moyenne, elle peut être très mauvaise ponctuellement, d'où le résultat annoncé.

Le calcul via la règle de Schwinger généralisée nécessite la connaissance de deux types d'éléments de matrice, ceux du terme "centrifuge"  $\langle n | L_{ij}^2 / r_{ij}^3 | m \rangle$  et de la dérivée radiale du potentiel  $\langle n | \frac{1}{r_{ij}} \vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla}_{ij} V | m \rangle$ .

On peut sans perte de généralité se limiter au calcul pour  $(ij) = (1, 2)$ . Le calcul pour les autres paires devenant alors trivial à la lumière du calcul pour  $(ij) = (1, 2)$ .

On peut toujours choisir les coordonnées de Jacobi  $\{\vec{x}_k\}$  de telle manière que  $\vec{r}_{12}$  coïncide avec la première des coordonnées de Jacobi

$$\vec{r}_{12} = \vec{x}_1 \quad . \quad (4.34)$$

Calculons donc  $\langle n | L_1^2 / x_1^3 | m \rangle$  et  $\langle n | \frac{1}{x_1} \vec{x}_1 \cdot \vec{\nabla}_1 V | m \rangle$ .

## Le terme centrifuge

Nous avons

$$\begin{aligned}
 \langle n | \frac{L_1^2}{x_1^3} | m \rangle &= \int \cdots \int d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_{N-1} e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} \vec{x}_i A_{ij}^n \vec{x}_j} \frac{\vec{L}_1^2}{x_1^3} e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} \vec{x}_i A_{ij}^m \vec{x}_j} \\
 &= \int \cdots \int d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_{N-1} \vec{L}_1 \left( e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} \vec{x}_i A_{ij}^n \vec{x}_j} \frac{\vec{L}_1}{x_1^3} e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} \vec{x}_i A_{ij}^m \vec{x}_j} \right) \\
 &\quad - \int \cdots \int d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_{N-1} \left( \vec{L}_1 e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} \vec{x}_i A_{ij}^n \vec{x}_j} \right) \frac{1}{x_1^3} \left( \vec{L}_1 e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} \vec{x}_i A_{ij}^m \vec{x}_j} \right).
 \end{aligned}$$

Il est clair que le premier terme du membre de droite de la relation précédente est nul. Donc

$$\langle n | \frac{L_1^2}{x_1^3} | m \rangle = - \int \cdots \int d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_{N-1} \left( \vec{L}_1 e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} \vec{x}_i A_{ij}^n \vec{x}_j} \right) \frac{1}{x_1^3} \left( \vec{L}_1 e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} \vec{x}_i A_{ij}^m \vec{x}_j} \right).$$

Mais

$$\begin{aligned}
 \vec{L}_1 e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} \vec{x}_i A_{ij}^n \vec{x}_j} &= \frac{1}{i} \vec{x}_1 \times \left( \vec{\nabla}_1 e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} \vec{x}_i A_{ij}^n \vec{x}_j} \right) \\
 &= -\frac{1}{i} \sum_k^{N-1} A_{k1}^n (\vec{x}_1 \times \vec{x}_k) e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} \vec{x}_i A_{ij}^n \vec{x}_j} \\
 &= ih \sum_k^{N-1} A_{k1}^n (\vec{x}_1 \times \vec{x}_k) e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} \vec{x}_i A_{ij}^n \vec{x}_j}
 \end{aligned}$$

Il s'ensuit que

$$\langle n | \frac{L_1^2}{x_1^3} | m \rangle = h^2 \sum_{k,l}^{N-1} A_{k1}^n A_{l1}^m \int \cdots \int d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_{N-1} \frac{(\vec{x}_1 \times \vec{x}_k)(\vec{x}_1 \times \vec{x}_l)}{x_1^3} e^{-\sum_{i,j=1}^{N-1} \vec{x}_i A_{ij} \vec{x}_j}. \quad (4.35)$$

En passant aux variables  $\{\vec{Z}_k\}$ , (4.17) et (4.18), on peut mettre (4.35) sous la forme

$$\begin{aligned}
 \langle n | \frac{L_1^2}{x_1^3} | m \rangle &= h^2 (\Delta)^{-3/2} \sum_{k,l}^{N-1} A_{k1}^n A_{l1}^m \\
 &\quad \int \cdots \int d^3 \vec{Z}_1 \dots d^3 \vec{Z}_{N-1} \frac{(\vec{x}_1 \times \vec{x}_k)(\vec{x}_1 \times \vec{x}_l)}{x_1^3} e^{-\sum_{s=1}^{N-1} \vec{Z}_s^2}, \quad (4.36)
 \end{aligned}$$



où les  $\vec{x}_i$  ( $i=1,2,\dots,N-1$ ) doivent être considérées comme des fonction des  $\{\vec{Z}_n\}$

$$\vec{x}_i = \sum_n^{N-1} R_{in}^{-1} \frac{1}{\sqrt{\tilde{A}_{nn}}} \vec{Z}_n . \quad (4.37)$$

En utilisant la définition du produit vectoriel

$$(\vec{x}_1 \times \vec{x}_i)(\vec{x}_1 \times \vec{x}_j) = \sum_{l,m,n,p,s} \varepsilon_{lmn} \varepsilon_{lsp} (x_1^m x_i^n) (x_1^s x_j^p) , \quad (4.38)$$

où  $\varepsilon_{lmn}$  ( $l, m, n=1, 2, 3$ ) est le tenseur de Levi-Civita tridimensionnel totalement antisymétrique avec  $\varepsilon_{123}=1$ . Mais

$$\sum_{l=1}^3 \varepsilon_{lmn} \varepsilon_{lsp} = \delta_{ms} \delta_{np} - \delta_{mp} \delta_{ns} ,$$

où  $\delta_{ns}$  désigne le delta de Kronecker

$$\delta_{ns} = \begin{array}{cc} 1 & n = s \\ 0 & n \neq s \end{array} ,$$

ce qui donne

$$(\vec{x}_1 \times \vec{x}_i)(\vec{x}_1 \times \vec{x}_j) = x_1^2 (\vec{x}_j \cdot \vec{x}_i) - (\vec{x}_1 \cdot \vec{x}_i)(\vec{x}_1 \cdot \vec{x}_j) . \quad (4.39)$$

Si on reporte (4.39) dans (4.36) on aboutit à

$$\langle n | \frac{L_1^2}{x_1^3} | m \rangle = h^2 (\Delta)^{-3/2} \sum_{k,l}^{N-1} A_{k1}^n A_{l1}^m \int \dots \int d^3 \vec{Z}_1 \dots d^3 \vec{Z}_{N-1} \frac{x_1^2 (\vec{x}_k \cdot \vec{x}_l) - (\vec{x}_1 \cdot \vec{x}_l)(\vec{x}_1 \cdot \vec{x}_k)}{x_1^3} e^{-\sum_{s=1}^{N-1} \vec{Z}_s^2} .$$

Définissons  $\vec{T}_1$ ,  $\vec{T}_2$  et  $\vec{T}_3$  par

$$\begin{aligned} \vec{T}_1 &:= A_{11}^{1/2} \vec{x}_1 = A_{11}^{1/2} \sum_n^{N-1} R_{1n}^{-1} \frac{1}{\sqrt{\tilde{A}_{nn}}} \vec{Z}_n , \\ \vec{T}_2 &:= A_{ll}^{1/2} \vec{x}_l = A_{ll}^{1/2} \sum_n^{N-1} R_{ln}^{-1} \frac{1}{\sqrt{\tilde{A}_{nn}}} \vec{Z}_n , \\ \vec{T}_3 &:= A_{kk}^{1/2} \vec{x}_k = A_{kk}^{1/2} \sum_n^{N-1} R_{kn}^{-1} \frac{1}{\sqrt{\tilde{A}_{nn}}} \vec{Z}_n . \end{aligned} \quad (4.40)$$

L'expression de  $\langle n | \frac{L_1^2}{x_1^3} | m \rangle$  prend alors la forme

$$\langle n | \frac{L_1^2}{x_1^3} | m \rangle = h^2 (\Delta)^{-3/2} \sum_{k,l}^{N-1} A_{k1}^n A_{l1}^m \sqrt{\frac{A_{kk} A_{ll}}{A_{11}}} \int \dots \int d^3 \vec{Z}_1 \dots d^3 \vec{Z}_{N-1} \frac{T_1^2 (\vec{T}_2 \cdot \vec{T}_3) - (\vec{T}_1 \cdot \vec{T}_2) (\vec{T}_1 \cdot \vec{T}_3)}{T_1^3} e^{-\sum_{s=1}^{N-1} \vec{Z}_s^2} .$$

Soit une transformation orthogonale des  $\{\vec{Z}_i\}$  ( $\{\vec{Z}_i\} \rightarrow \{\vec{Z}'_j\}$ ) . Il est clair qu'il n'existe pas une telle transformation telle que  $\vec{Z}'_1 = \vec{T}_1$  ,  $\vec{Z}'_2 = \vec{T}_2$  et  $\vec{Z}'_3 = \vec{T}_3$  mais une transformation orthogonale telle que

$$\vec{Z}'_1 = \vec{T}_1 \quad , \quad (4.41)$$

$$\vec{Z}'_2 = b (\vec{T}_1 + x \vec{T}_2) \quad (4.42)$$

et

$$\vec{Z}'_3 = c (\vec{T}_1 + y \vec{T}_2 + z \vec{T}_3) \quad (4.43)$$

est possible .

Un calcul direct mais assez compliqué , exposé en annexe A , permet de fixer  $x$  ,  $y$  ,  $z$  ,  $b$  et  $c$ . On obtient , tous calculs faits ,

$$x = \frac{-A_{l1}}{A_u^{1/2} A_{11}^{1/2}} \quad , \quad (4.44)$$

$$y = -\frac{A_u^{-1/2}}{A_{11}^{-1/2}} \left( \frac{A_{11}^{-1} A_{lk}^{-1} - A_{ll}^{-1} A_{lk}^{-1}}{A_{ll}^{-1} A_{lk}^{-1} - A_{lk}^{-1} A_{ll}^{-1}} \right) \quad , \quad (4.45)$$

$$z = \frac{A_{kk}^{-1/2}}{A_{11}^{-1/2}} \left( \frac{A_{ll}^{-2} - A_{11}^{-1} A_{ll}^{-1}}{A_{ll}^{-1} A_{k1}^{-1} - A_{lk}^{-1} A_{ll}^{-1}} \right) \quad (4.46)$$

et

$$b = \frac{1}{\sqrt{x^2 - 1}} \quad ,$$

$$c = \frac{1}{\sqrt{-1 - y^2 + z^2 + 2\frac{y}{x}}} .$$

Donc

$$\vec{Z}'_1 = \vec{T}'_1, \quad (4.47)$$

$$\vec{Z}'_2 = \frac{1}{\sqrt{x^2-1}} \left( \vec{T}'_1 + x \vec{T}'_2 \right) \quad (4.48)$$

et

$$\vec{Z}'_3 = \frac{1}{\sqrt{-1-y^2+z^2+2\frac{y}{x}}} \left( \vec{T}'_1 + y \vec{T}'_2 + z \vec{T}'_3 \right), \quad (4.49)$$

avec  $x$ ,  $y$  et  $z$  donnés par (4.44), (4.45) et (4.46).

On peut inverser les relations précédentes pour exprimer  $\vec{T}'_1$ ,  $\vec{T}'_2$  et  $\vec{T}'_3$  en fonction de  $\vec{Z}'_1$ ,  $\vec{Z}'_2$  et  $\vec{Z}'_3$

$$\begin{aligned} \vec{T}'_1 &= \vec{Z}'_1, \\ \vec{T}'_2 &= -\frac{1}{x} \vec{Z}'_1 + \frac{\sqrt{x^2-1}}{x} \vec{Z}'_2 \end{aligned}$$

et

$$\vec{T}'_3 = \frac{y-x}{zx} \vec{Z}'_1 - \frac{y\sqrt{x^2-1}}{zx} \vec{Z}'_2 + \frac{\sqrt{-1-y^2+z^2+2\frac{y}{x}}}{z} \vec{Z}'_3.$$

En faisant usage des expressions précédentes pour  $\vec{T}'_1$ ,  $\vec{T}'_2$  et  $\vec{T}'_3$ , on obtient

$$\begin{aligned} \frac{T_1^2(\vec{T}'_2, \vec{T}'_3) - (\vec{T}'_1, \vec{T}'_2)(\vec{T}'_1, \vec{T}'_3)}{T_1^3} &= y \frac{x^2-1}{x^2 z Z_1^3} \left( (\vec{Z}'_2, \vec{Z}'_1)^2 - Z_1^2 Z_2^2 \right) \\ &\quad + \frac{\sqrt{x^2-1}}{x} \frac{\sqrt{-1-y^2+z^2+2\frac{y}{x}}}{z Z_1^3} \left( Z_1^2 (\vec{Z}'_2, \vec{Z}'_3) - (\vec{Z}'_3, \vec{Z}'_1) (\vec{Z}'_2, \vec{Z}'_1) \right). \end{aligned}$$

Calculons d'abord l'intégrale de l'expression

$$\frac{1}{Z_1^3} \left( Z_1^2 (\vec{Z}'_2, \vec{Z}'_3) - (\vec{Z}'_3, \vec{Z}'_1) (\vec{Z}'_2, \vec{Z}'_1) \right) e^{-\sum_{s=1}^{N-1} \vec{Z}'_s{}^2}. \quad (4.50)$$

Nous avons d'une part

$$\int \dots \int d^3 \vec{Z}'_1 \dots d^3 \vec{Z}'_{N-1} Z_1^{-1} (\vec{Z}'_2, \vec{Z}'_3) e^{-\sum_{s=1}^{N-1} \vec{Z}'_s{}^2} = C \iint d^3 \vec{Z}'_2 d^3 \vec{Z}'_3 (\vec{Z}'_2, \vec{Z}'_3) e^{-\vec{Z}'_2{}^2 - \vec{Z}'_3{}^2},$$

où  $C$  est une constante venant de l'intégration sur  $\vec{Z}'_1, \vec{Z}'_2, \dots, \vec{Z}'_{N-1}$ . En passant aux coordonnées sphériques et en prenant l'axe polaire pour  $\vec{Z}'_3$  selon  $\vec{Z}'_2$  (on intègre d'abord sur  $\vec{Z}'_3$  à  $\vec{Z}'_2$  fixé et on intègre ensuite sur  $\vec{Z}'_2$ ), on peut montrer que

$$\iint d^3 \vec{Z}'_2 d^3 \vec{Z}'_3 \left( \vec{Z}'_2 \cdot \vec{Z}'_3 \right) e^{-\vec{Z}'_2{}^2 - \vec{Z}'_3{}^2} = 8\pi^2 \iint dZ'_2 dZ'_3 Z_2^{3l} Z_3^{3l} e^{-Z_2'^2 - Z_3'^2} \int_{-1}^1 u du .$$

Comme  $\int_{-1}^1 u du = 0$ , il en résulte que

$$\iint d^3 \vec{Z}'_2 d^3 \vec{Z}'_3 \left( \vec{Z}'_2 \cdot \vec{Z}'_3 \right) e^{-\vec{Z}'_2{}^2 - \vec{Z}'_3{}^2} = 0 .$$

De la même manière, on peut montrer que l'intégrale du deuxième terme de (4.50) s'annule. Il s'ensuit que

$$\begin{aligned} \langle n | \frac{L_1^2}{x_1^3} | m \rangle &= (\Delta)^{-3/2} \sum_{i,j}^{N-1} A_{i1}^n A_{j1}^m \sqrt{\frac{A_{ii} A_{jj}}{A_{11}}} y \frac{x^2 - 1}{x^2 z} \pi^{\frac{3(N-3)}{2}} \\ &\iint d\vec{Z}'_1 d\vec{Z}'_2 \frac{1}{Z_1^3} \left( \left( \vec{Z}'_2 \cdot \vec{Z}'_1 \right)^2 - Z_1'^2 Z_2'^2 \right) e^{-\vec{Z}'_1{}^2 - \vec{Z}'_2{}^2} . \end{aligned}$$

En passant aux coordonnées sphériques pour  $\vec{Z}'_2$  et  $\vec{Z}'_1$  et en prenant l'axe polaire d'une des coordonnées  $\vec{Z}'_1$  ( $\vec{Z}'_2$ ) selon  $\vec{Z}'_2$  ( $\vec{Z}'_1$ ) pour  $\vec{Z}'_2$  ( $\vec{Z}'_1$ ) fixé, on obtient

$$\begin{aligned} &\iint d\vec{Z}'_1 d\vec{Z}'_2 \frac{1}{Z_1^3} \left( \left( \vec{Z}'_2 \cdot \vec{Z}'_1 \right)^2 - Z_1'^2 Z_2'^2 \right) e^{-\vec{Z}'_1{}^2 - \vec{Z}'_2{}^2} = \\ &8\pi^2 \int_0^\infty dZ'_1 dZ'_2 \int_{-1}^1 du \frac{1}{Z_1} Z_2'^2 \left( Z_2'^2 Z_1'^2 u^2 - Z_1'^2 Z_2'^2 \right) e^{-Z_1'^2 - Z_2'^2} = -2\pi^{5/2} . \end{aligned}$$

Il en résulte une expression pour  $\langle n | \frac{L_1^2}{x_1^3} | m \rangle$

$$\langle n | \frac{L_1^2}{x_1^3} | m \rangle = -2(\Delta)^{-3/2} \sum_{i,j}^{N-1} A_{j1}^m A_{i1}^n \sqrt{\frac{A_{ii} A_{jj}}{A_{11}}} y \frac{x^2 - 1}{x^2 z} (\pi)^{(3N-4)/2} .$$

En remplaçant  $x$ ,  $y$  et  $z$  par leurs expressions explicites (4.44), (4.45) et (4.46) respectivement et en faisant usage de (4.21) on aboutit à

$$\langle n | \frac{L_1^2}{x_1^3} | m \rangle = \frac{2}{\sqrt{\pi}} A_{11}^{3/2} \langle n | m \rangle \sum_{i,j}^{N-1} A_{j1}^m A_{i1}^n \left( A_{11}^{-1} A_{ij}^{-1} - A_{1i}^{-1} A_{1j}^{-1} \right) . \quad (4.51)$$

Sachant que

$$\left( A_{11}^{-1} A_{ij}^{-1} - A_{1i}^{-1} A_{1j}^{-1} \right) = \begin{vmatrix} A_{11}^{-1} & A_{1i}^{-1} \\ A_{1j}^{-1} & A_{ij}^{-1} \end{vmatrix} = (-1)^{1+i} (-1)^{1+j} \frac{B_{ij}}{\Delta} ,$$

où  $B_{ij}$  dénote le déterminant mineur de la matrice  $A^{-1}$ , obtenu en supprimant la 1<sup>ère</sup> et la  $i^{\text{ème}}$  ligne, et la 1<sup>ère</sup> et la  $j^{\text{ème}}$  colonne [16]. En utilisant la définition (4.26), on peut mettre (4.51) sous une forme plus simple

$$\langle n | \frac{L_1^2}{x_1^3} | m \rangle = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \gamma_{12,12}^{-3/2} \frac{1}{\Delta} \langle n | m \rangle \sum_{i \neq 1, j \neq 1} (-1)^{i+j} A_{1i}^n B_{ij} A_{j1}^m , \quad (4.52)$$

où  $i=1$  et  $j=1$  sont exclus de la sommation car donnant des contributions nulles comme on le voit directement sur (4.35).

#### La dérivée radiale du potentiel

Pour le terme  $\langle n | \frac{1}{x_1} \vec{x}_1 \cdot \vec{\nabla}_1 V | m \rangle$ , en tenant compte du fait que  $\vec{d}_{ij} := \vec{r}_{ij} = \sum_{k=1}^{N-1} d_{ij}^k \vec{x}_k$ , on a

$$\langle n | \frac{1}{x_1} \vec{x}_1 \cdot \vec{\nabla}_1 V | m \rangle = \sum_{i < j=1}^N d_{ij}^1 \langle n | \frac{\vec{x}_1 \cdot \vec{d}_{ij}}{x_1 d_{ij}} V^{(ij)} | m \rangle , \quad (4.53)$$

où  $V^{(ij)}$  dénote la dérivation du potentiel d'interaction  $V^{(ij)}$  des deux particules  $i$  et  $j$  par rapport à  $d_{ij}$ .

En passant aux coordonnées  $\{\vec{Z}_k\}$ , (4.17) et (4.18)

$$d_{ij}^1 \langle n | \frac{\vec{x}_1 \cdot \vec{d}_{ij}}{x_1 d_{ij}} V^{(ij)} | m \rangle = d_{ij}^1 (\Delta)^{-3/2} \int d\vec{Z}_1 \dots d\vec{Z}_{n-1} \frac{\vec{x}_1 \cdot \vec{d}_{ij}}{x_1 d_{ij}} V^{(ij)} e^{-\sum_{k=1}^{N-1} \vec{Z}_k^2} . \quad (4.54)$$

Il n'est pas possible de faire une transformation orthogonale sur les coordonnées de Jacobi  $\{\vec{Z}_k\}$  ( $\{\vec{Z}_k\} \rightarrow \{\vec{W}_l\}$ ) de telle manière que

$$\vec{W}_1 = \alpha \vec{x}_1$$

et

$$\vec{W}_2 = \beta \vec{d}_{ij} ,$$

où  $\alpha$  et  $\beta$  sont des constantes de proportionnalité . Mais il est possible de trouver une telle transformation de telle sorte que

$$\vec{W}_1 = \gamma_{11}^{-1/2} \vec{x}_1$$

et

$$\vec{W}_2 = a \vec{x}_1 + b \vec{d}_{ij}$$

Un calcul direct permet de déterminer  $a$  et  $b$

$$a = -\frac{1}{\sqrt{\delta}} \frac{\gamma_{12,ij}}{\sqrt{\gamma_{12,12}}},$$

$$b = \frac{1}{\sqrt{\delta}} \sqrt{\gamma_{12,12}},$$

où  $\delta = \gamma_{12,12} \gamma_{ij,ij} - \gamma_{12,ij}^2$  . Donc

$$\vec{W}_1 = \gamma_{12,12}^{-1/2} \vec{x}_1 \quad (4.55)$$

$$\vec{W}_2 = \frac{1}{\sqrt{\delta}} \left( -\frac{\gamma_{12,ij}}{\sqrt{\gamma_{12,12}}} \vec{x}_1 + \sqrt{\gamma_{12,12}} \vec{d}_{ij} \right) \quad (4.56)$$

On peut inverser (4.55) et (4.56) pour exprimer  $\vec{x}_1$  et  $\vec{d}_{ij}$  en fonction de  $\vec{W}_1$  et  $\vec{W}_2$

$$\vec{x}_1 = \gamma_{12,12}^{1/2} \vec{W}_1$$

$$\vec{d}_{ij} = \frac{1}{\sqrt{\gamma_{12,12}}} \left( \gamma_{12,ij} \vec{W}_1 + \sqrt{\delta} \vec{W}_2 \right)$$

L'expression (4.54) se transforme alors en

$$d_{ij}^1 \langle n | \frac{\vec{x}_1 \cdot \vec{d}_{ij}}{x_1 d_{ij}} V^{(ij)} | m \rangle = d_{ij}^1 (\Delta)^{-3/2} \int d^3 \vec{W}_1 \dots d^3 \vec{W}_{N-1} \frac{\vec{x}_1 \cdot \vec{d}_{ij}}{x_1 d_{ij}} V^{(ij)} e^{-\sum_{k=1}^{N-1} \vec{W}_k^2} .$$

L'intégration sur les variables  $\vec{W}_3, \dots, \vec{W}_{N-1}$  est immédiate et donne

$$d_{ij}^1 \langle n | \frac{\vec{x}_1 \cdot \vec{d}_{ij}}{x_1 d_{ij}} V^{(ij)} | m \rangle = d_{ij}^1 (\Delta)^{-3/2} \pi^{\frac{3(N-3)}{2}} \int d^3 \vec{W}_1 d^3 \vec{W}_2 \frac{\vec{x}_1 \cdot \vec{d}_{ij}}{x_1 d_{ij}} V^{(ij)} e^{-\vec{W}_1^2 - \vec{W}_2^2} .$$

En utilisant l'expression (4.21) du recouvrement des Gaussiennes on arrive à

$$d_{ij}^1 \langle n | \frac{\vec{x}_1 \cdot \vec{d}_{ij}}{x_1 d_{ij}} V^{(ij)} | m \rangle = d_{ij}^1 \pi^{-3} \langle n | m \rangle \int d^3 \vec{W}_1 d^3 \vec{W}_2 \frac{\vec{x}_1 \cdot \vec{d}_{ij}}{x_1 d_{ij}} V^{(ij)} e^{-\vec{W}_1^2 - \vec{W}_2^2} \quad (4.57)$$

Faisons maintenant le changement de variables  $(\vec{W}_1, \vec{W}_2) \rightarrow (\vec{x}_1, \vec{d}_{ij})$ . On a

$$d^3 \vec{W}_1 d^3 \vec{W}_2 = \begin{vmatrix} \gamma_{12,12}^{-1/2} & 0 \\ -\frac{\gamma_{12,ij}}{\sqrt{\gamma_{11}}} \frac{1}{\sqrt{\delta}} & \frac{\sqrt{\gamma_{12,12}}}{\sqrt{\delta}} \end{vmatrix}^3 d^3 \vec{x}_1 d^3 (\vec{d}_{ij}) = \delta^{-3/2} d^3 \vec{x}_1 d^3 (\vec{d}_{ij})$$

et

$$-\vec{W}_1^2 - \vec{W}_2^2 = -\frac{\gamma_{ij,ij}}{\delta} \vec{x}_1^2 - \frac{\gamma_{12,12}}{\delta} \vec{d}_{ij}^2 + 2 \frac{\gamma_{12,ij}}{\delta} \vec{d}_{ij} \cdot \vec{x}_1$$

Reportons ces deux expressions dans (4.57), où pour simplifier les notations on a remplacé  $\vec{x}_1$  par  $\vec{x}$  et  $\vec{d}_{ij}$  par  $\vec{y}$ . On obtient alors

$$d_{ij}^1 \langle n | \frac{\vec{x}_1 \cdot \vec{d}_{ij}}{x_1 d_{ij}} V^{(ij)} | m \rangle = \pi^{-3} \delta^{-3/2} \langle n | m \rangle d_{ij}^1 \int \int d\vec{x} d\vec{y} \frac{\vec{x} \cdot \vec{y}}{xy} V'(y) e^{(-\frac{\gamma_{ij,ij}}{\delta} x^2 - \frac{\gamma_{12,12}}{\delta} y^2 + 2 \frac{\gamma_{12,ij}}{\delta} \vec{x} \cdot \vec{y})}$$

Posons

$$\frac{\gamma_{ij,ij}}{\delta} =: a, \quad \frac{\gamma_{12,12}}{\delta} =: c \quad \text{et} \quad \frac{\gamma_{12,ij}}{\delta} =: b$$

On peut remarquer que

$$(\vec{y} \cdot \vec{x}) e^{(-ax^2 - cy^2 + 2b\vec{y} \cdot \vec{x})} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial b} e^{(-ax^2 - cy^2 + 2b\vec{y} \cdot \vec{x})}$$

Donc

$$d_{ij}^1 \langle n | \frac{\vec{x}_1 \cdot \vec{d}_{ij}}{x_1 d_{ij}} V^{(ij)} | m \rangle = \frac{1}{2} \pi^{-3} \delta^{-3/2} \langle n | m \rangle d_{ij}^1 \frac{\partial}{\partial b} \left\{ \int \int d\vec{x} d\vec{y} \frac{V'(y)}{xy} e^{(-ax^2 - cy^2 + 2b\vec{y} \cdot \vec{x})} \right\}$$

En passant aux coordonnées sphériques de  $\vec{x}$  et de  $\vec{y}$  et en prenant l'axe polaire de  $\vec{x}$  selon  $\vec{y}$  pour  $\vec{y}$  fixé

$$\int \int d\vec{x} d\vec{y} \frac{V'(y)}{xy} e^{(-ax^2 - cy^2 + 2b\vec{y} \cdot \vec{x})} = 8\pi^2 \int_0^\infty dy \int_0^\infty dx \int_{-1}^1 du V(y) xy e^{(-ax^2 - cy^2 + 2bxyu)} .$$

Intégrons successivement sur  $u$  et sur  $x$ . On obtient

$$\begin{aligned} \int \int d\vec{x} d\vec{y} \frac{V'(y)}{xy} e^{(-ax^2 - cy^2 + 2b\vec{y} \cdot \vec{x})} &= 4\pi^2 \int_0^\infty dy dx V'(y) \frac{e^{(-ax^2 - cy^2 + 2bxy)} - e^{(-ax^2 - cy^2 - 2bxy)}}{b} \\ &= 4\pi^2 \int_0^\infty dy V'(y) \sqrt{\pi} \frac{e^{-y^2 \frac{ca-b^2}{a}}}{b\sqrt{a}} \operatorname{erf} \left( y \frac{b}{\sqrt{a}} \right) , \end{aligned}$$

où on a utilisé la relation

$$\int_0^\infty \left( e^{(-ax^2 - cy^2 + 2bxy)} - e^{(-ax^2 - cy^2 - 2bxy)} \right) dx = \sqrt{\pi} \frac{e^{-y^2 \frac{ca-b^2}{a}}}{\sqrt{a}} \operatorname{erf} \left( y \frac{b}{\sqrt{a}} \right) \quad a > 0 ,$$

où  $\operatorname{erf}$  est la fonction erreur .

On obtient finalement l'expression générale de l'élément de matrice de la dérivée radiale du potentiel

$$d_{ij}^1 \langle n | \frac{\vec{x}_1 \cdot \vec{d}_{ij}}{x_1 d_{ij}} V^{(ij)} | m \rangle = d_{ij}^1 \frac{2}{\sqrt{\pi} \sqrt{a}} \delta^{-3/2} \langle n | m \rangle \frac{\partial}{\partial b} \left[ \frac{1}{b} \int_0^\infty V'(y) \operatorname{erf} \left( y \frac{b}{\sqrt{a}} \right) e^{-y^2 \frac{ca-b^2}{a}} dy \right] . \quad (4.58)$$

Cette relation ne peut être calculée analytiquement que pour des cas particuliers de potentiels. Donnons quelques exemples de ces cas particuliers, où on a remplacé  $a$ ,  $b$  et  $c$  par leurs expressions explicites dans chaque cas

\* Potentiel Coulombien  $V(y) = -y^{-1}$

$$d_{ij}^1 \langle n | \frac{\vec{x}_1 \cdot \vec{d}_{ij}}{x_1 d_{ij}} V^{(ij)} | m \rangle = -d_{ij}^1 \frac{4}{\pi} \frac{\sqrt{\delta}}{\gamma_{12,ij}^2} \left[ \frac{\gamma_{12,ij}}{\gamma_{ij,ij}} - \frac{\gamma_{12,12}}{\sqrt{\delta}} \arctan \frac{\gamma_{12,ij}}{\sqrt{\delta}} \right] . \quad (4.59)$$

\* Potentiel harmonique  $V(y) = \frac{1}{2}y^2$

$$d_{ij}^1 \langle n | \frac{\vec{x}_1 \cdot \vec{d}_{ij}}{x_1 d_{ij}} V^{(ij)} | m \rangle = d_{ij}^1 \langle n | m \rangle \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\gamma_{12,ij}}{\sqrt{\gamma_{12,12}}} . \quad (4.60)$$



\* Potentiel linéaire  $V(y) = y$

$$d_{ij}^1 \langle n | \frac{\vec{x}_1 \cdot \vec{d}_{ij}}{x_1 d_{ij}} V^{(ij)} | m \rangle = d_{ij}^1 \frac{2}{\pi} \langle n | m \rangle \left[ \frac{\sqrt{\delta}}{\gamma_{12,ij}} - \frac{\gamma_{ij,ij} \gamma_{12,12} - 2\gamma_{12,ij}^2}{\gamma_{12,ij}^2} \arctan \frac{\gamma_{12,ij}}{\sqrt{\delta}} \right] . \quad (4.61)$$

Le tableau suivant regroupe les résultats du calcul direct  $\langle n | \delta^3(\vec{r}_{ij}^+) | m \rangle$  et par l'intermédiaire de la règle de Schwinger généralisée dans le cas d'un système à trois corps interagissant par un potentiel linéaire  $V(r)=r$  pour une génération de Gaussiennes  $g=1$ . On a considéré trois configurations de masses  $m_1=m_2=1$  et  $m_3=1, 0.2$  et  $5$  successivement. On a aussi reporté les résultats exactes [1].

$m$	$E_{var}$	$E_{exact}$	$\delta_{12}^{direct}$	$\delta_{12}^{Schw}$	$\delta_{12}^{exact}$	$\delta_{13}^{direct}$	$\delta_{13}^{Schw}$	$\delta_{13}^{exact}$
1	3.871	3.863	0.0507	0.0571	0.0569	0.0507	0.0571	0.0569
0.2	4.950	4.939	0.0461	0.0524	0.0523	0.0184	0.0219	0.0206
5	3.445	3.438	0.0534	0.0602	0.0598	0.0842	0.1051	0.0949

Tableau [6].

L'application de la règle de Schwinger généralisée permet d'améliorer substantiellement la situation par rapport au calcul direct. On peut même considérer que le résultat obtenu par l'application de la règle de Schwinger constitue dans certains cas une bonne estimation du résultat exact.

## Chapitre 5

# Bornes inférieures optimales pour des Hamiltoniens à $N$ corps

### 5.1 Introduction

Les méthodes variationnelles, dont un exemple est le développement systématique sur des Gaussiennes exposé au chapitre 4, appliquées à des systèmes à  $N$  corps, fournissent des bornes supérieures pour les énergies des états fondamentaux de tels systèmes. Il serait bon d'obtenir également des bornes inférieures pour les énergies des états fondamentaux de systèmes à  $N$  corps, de façon à avoir un encadrement des énergies des états fondamentaux de ces systèmes.

Nous nous intéressons dans ce chapitre précisément à la dérivation de bornes inférieures pour les énergies des états fondamentaux de systèmes à  $N$  corps dans le cas d'une cinématique non-relativiste et de forces à deux corps invariantes par translation, ce qui correspond à des systèmes décrits par des Hamiltoniens  $H$  de la forme

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 + \sum_{i < j=1}^N V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \quad , \quad (5.1)$$

où  $m_i$ ,  $\vec{r}_i$  et  $\vec{p}_i$  désignent respectivement la masse, la position et l'impulsion de la  $i^{\text{ème}}$  particule.  $\vec{r}_{ij} := \vec{r}_i - \vec{r}_j$   $i \neq j = 1, 2, \dots, N$ . Il est à noter que le potentiel  $V^{(ij)}(\vec{r}_{ij})$  dont dérive la force à deux corps peut dépendre de la paire  $\{i, j\}$ .

Notre point de départ sera la décomposition suivante

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 = \left( \sum_{j=1}^N b_j \vec{p}_j \right) \left( \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) + \sum_{i<j=1}^N a_{ij} \vec{p}_{ij}^2 \quad (5.2)$$

de la partie cinétique de l'Hamiltonien  $H$ , faisant intervenir les paramètres  $b_j$   $j = 1, 2, \dots, N$  et les paramètres nécessairement positifs  $a_{ij}$   $i < j = 1, 2, \dots, N$ .  $\vec{p}_{ij}$  est une combinaison linéaire des diverses impulsions  $\vec{p}_k$

$$\vec{p}_{ij} = \sum_{k=1}^N y_{ij,k} \vec{p}_k \quad , \quad (5.3)$$

avec les coefficients de la combinaison linéaire  $y_{ij,k}$  choisis tel que  $\vec{r}_{ij}$  et  $\vec{p}_{ij}$  soient des variables conjuguées l'une de l'autre, c'est-à-dire satisfaisant aux relations de commutation canoniques

$$[r_{ij,k}, p_{ij,\ell}] = i\hbar \delta_{k\ell} \quad k, \ell = 1, 2, 3 \quad , \quad (5.4)$$

où  $r_{ij,k}$  et  $p_{ij,\ell}$  désignent respectivement la  $k^{\text{ème}}$  composante de  $\vec{r}_{ij}$  et la  $\ell^{\text{ème}}$  composante de  $\vec{p}_{ij}$ . Il est à remarquer que les paramètres  $b_j$ ,  $a_{ij}$  et  $y_{ij,k}$  sont contraints par des relations obtenues en identifiant les deux membres de (5.2). Plus précisément, l'identification des deux membres de (5.2) fournit  $N + \frac{N(N-1)}{2}$  contraintes. Si on remarque que les  $b_j$  sont au nombre de  $N$  et que les  $a_{ij}$  sont en nombre  $\frac{N(N-1)}{2}$ , les contraintes peuvent permettre d'exprimer les  $b_j$  et les  $a_{ij}$  en terme des  $y_{ij,k}$ . Dorénavant, les  $a_{ij}$  et les  $b_j$  seront considérés comme des fonctions des  $y_{ij,k}$ .

A la décomposition (5.2) de l'énergie cinétique correspond la décomposition suivante de l'Hamiltonien du système

$$H = \left( \sum_{j=1}^N b_j \vec{p}_j \right) \left( \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) + \sum_{i<j=1}^N \left( a_{ij} \vec{p}_{ij}^2 + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \right) \quad . \quad (5.5)$$

Désignons par  $|\Psi\rangle$  l'état fondamental normalisé du système et  $E$  l'énergie correspondante. Nous avons

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \langle \Psi | \left( \sum_{j=1}^N b_j \vec{p}_j \right) \left( \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle + \sum_{i<j=1}^N \langle \Psi | \left( a_{ij} \vec{p}_{ij}^2 + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \right) | \Psi \rangle \quad . \quad (5.6)$$

Comme  $|\Psi\rangle$  est invariant par translation

$$\left( \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) |\Psi\rangle = \vec{0} \quad , \quad (5.7)$$

la contribution du premier terme dans le membre de droite de (5.6) est donc nulle . Il en résulte que

$$E = \sum_{i<j=1}^N \langle \Psi | \left( a_{ij} \vec{p}_{ij}^2 + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \right) | \Psi \rangle \quad . \quad (5.8)$$

Mais en vertu du principe variationnel

$$\langle \Psi | \left( a_{ij} \vec{p}_{ij}^2 + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \right) | \Psi \rangle \geq E_{ij}^{(2)} [a_{ij} (\{y_{kl,m}\})] \quad , \quad (5.9)$$

où  $E_{ij}^{(2)} [a_{ij} (\{y_{kl,m}\})]$  désigne l'énergie du niveau fondamental de l'Hamiltonien à deux particules  $H_{ij}^{(2)} [a_{ij} (\{y_{kl,m}\})]$

$$H_{ij}^{(2)} [a_{ij} (\{y_{kl,m}\})] = a_{ij} \vec{p}_{ij}^2 + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \quad . \quad (5.10)$$

Il s'ensuit que

$$E \geq \sum_{i<j=1}^N E_{ij}^{(2)} [a_{ij} (\{y_{kl,m}\})] \quad . \quad (5.11)$$

Donc nous obtenons une famille de bornes inférieures pour  $E$  , une borne inférieure

$$\sum_{i<j=1}^N E_{ij}^{(2)} [a_{ij} (\{y_{kl,m}\})] \quad (5.12)$$

pour chaque jeu de paramètres  $\{y_{kl,m}\}$  . La meilleure de ces bornes est évidemment celle qui maximise (5.12) .  $\max_{\{y_{kl,m}\}} \sum_{i<j=1}^N E_{ij}^{(2)} [a_{ij} (\{y_{kl,m}\})]$  est appelée borne inférieure optimale pour l'énergie du niveau fondamental du système à  $N$  corps . Il vaut la peine de noter qu'il s'agit d'une maximisation avec contraintes . Seuls les jeux de paramètres  $\{y_{kl,m}\}$  tels que tous les  $a_{ij}$  soient positifs sont permis . Donc la maximisation doit être précédée d'une délimitation préalable du domaine des  $\{y_{kl,m}\}$  tel que tous les  $a_{ij}$  soient simultanément positifs .

Notons que plusieurs choix des  $\{y_{kl,m}\}$  satisfaisant à (5.4) sont possibles . Nous allons ci-après considérer deux possibilités pour les  $\{y_{kl,m}\}$  menant à deux bornes inférieures optimales différentes baptisées "ancienne borne inférieure optimale" et "nouvelle borne inférieure optimale" .

## 5.2 Ancienne borne inférieure optimale

### 5.2.1 Choix des $y_{ij,k}$

Un choix possible des paramètres  $y_{ij,k}$  est le suivant

$$\begin{aligned} y_{ij,k} &= 0 && \text{pour } k \neq i, k \neq j \\ y_{ij,k} &= \frac{1}{1+x_{ij}} && \text{pour } k = i \\ y_{ij,k} &= \frac{-x_{ij}}{1+x_{ij}} && \text{pour } k = j \end{aligned} \quad (5.13)$$

Il est en effet facile de vérifier que  $\vec{p}'_{ij} = \frac{\vec{p}_i - x_{ij} \vec{p}_j}{1+x_{ij}}$  est vraiment un moment conjugué de  $\vec{r}_{ij}$ .

La décomposition du terme d'énergie cinétique se réduit dans ce cas à

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 = \left( \sum_{j=1}^N b_j \vec{p}_j \right) \left( \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) + \sum_{i<j=1}^N \frac{a_{ij}}{(1+x_{ij})^2} (\vec{p}_i - x_{ij} \vec{p}_j)^2, \quad (5.14)$$

et la décomposition de l'Hamiltonien correspondant à

$$H = \left( \sum_{j=1}^N b_j \vec{p}_j \right) \left( \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) + \sum_{i<j=1}^N \left[ \frac{a_{ij}}{(1+x_{ij})^2} (\vec{p}_i - x_{ij} \vec{p}_j)^2 + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \right]. \quad (5.15)$$

La borne inférieure optimale est obtenue pour ce choix des  $y_{ij,k}$  en maximisant

$\sum_{i<j=1}^N E_{ij}^{(2)} [a_{ij}(\{x_{kl}\})]$  sur les paramètres  $x_{kl}$  qui sont au nombre de  $\frac{N(N-1)}{2}$  (c'est-à-dire le nombre de paires distinctes pour le système de  $N$  particules)

$$E \geq \max_{\{x_{kl}\}} \sum_{i<j=1}^N E_{ij}^{(2)} [a_{ij}(\{x_{kl}\})] \quad (5.16)$$

On appellera  $\max_{\{x_{kl}\}} \sum_{i<j=1}^N E_{ij}^{(2)} [a_{ij}(\{x_{kl}\})]$  "ancienne borne inférieure optimale". Lorsque

$\sum_{i<j=1}^N E_{ij}^{(2)} [a_{ij}(\{x_{kl}\})]$  aura atteint son maximum par rapport aux  $\{x_{kl}\}$ , toutes les dérivées partielles par rapport aux  $\{x_{kl}\}$  doivent s'annuler, c'est-à-dire

$$\sum_{i<j=1}^N \frac{\partial E_{ij}^{(2)}}{\partial a_{ij}} \frac{\partial a_{ij}}{\partial x_{kl}} = 0 \quad k < l = 1, 2, \dots, N \quad (5.17)$$

Comme les  $\frac{\partial E_{ij}^{(2)}}{\partial a_{ij}}$  ne sont pas tous nuls, le déterminant du Jacobien est nécessairement nul, c'est-à-dire

$$\det \left| \frac{\partial a_{ij}}{\partial x_{kl}} \right| = 0 \quad (5.18)$$

Cette relation stipule qu'au maximum les paramètres  $x_{kl}$  satisfont à une relation indépendante du potentiel considéré. On peut en tirer parti en imposant cette relation avant d'optimiser sur les paramètres  $x_{kl}$ , ce qui permet de réduire leur nombre d'une unité. Mais insistons sur le fait que la condition du Jacobien n'est pas à proprement parler une contrainte. Pour preuve, on peut l'ignorer, maximiser sur tous les paramètres  $x_{kl}$  et la vérifier numériquement pour les valeurs correspondantes au maximum.

Pour expliciter la condition (5.18), nous avons besoin d'exprimer les  $a_{ij}$  en termes des  $x_{kl}$ . L'identification des deux membres de (5.14) donne  $\frac{N}{2}(N+1)$  contraintes,  $N$  contraintes venant de l'identification des coefficients des termes en  $\overrightarrow{p}_i^2$

$$b_i + \sum_{i>j=1}^N a_{ji} \frac{x_{ji}^2}{(1+x_{ji})^2} + \sum_{i<j=1}^N a_{ij} \frac{1}{(1+x_{ij})^2} = \frac{1}{2m_i} \quad (5.19)$$

et  $\frac{N}{2}(N-1)$  contraintes venant de l'identification des coefficients des termes en  $\overrightarrow{p}_i \cdot \overrightarrow{p}_j$  ( $i < j$ )

$$b_i + b_j - a_{ij} \frac{2x_{ij}}{(1+x_{ij})^2} = 0 \quad (5.20)$$

En combinant les contraintes précédentes (5.19) et (5.20), on obtient un système de  $\frac{N}{2}(N-1)$  équations linéaires pour les  $a_{ij}$  avec les  $\frac{N}{2}(N-1)$   $x_{ij}$  comme paramètres

$$\sum_{k<l=1}^N \mathbf{N}_{ij,kl} a_{kl} = \frac{1}{2m_i} + \frac{1}{2m_j} \quad (5.21)$$

avec

$$\mathbf{N}_{ij,kl} := \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{si } k=i \text{ et } l=j \\ \frac{1}{(1+x_{kl})^2} & \text{si } k=j \text{ et } l>j \text{ ou } k=i, l>i \text{ et } l \neq j \\ \frac{x_{kl}^2}{(1+x_{kl})^2} & \text{si } l=i \text{ et } k<i \text{ ou } l=j, k<j \text{ et } k \neq i \\ 0 & \text{autrement} \end{array} \right\} \quad (5.22)$$

qu'on peut écrire sous forme matricielle comme

$$\mathbf{C} \times \mathbf{A} = \boldsymbol{\alpha} \quad , \quad (5.23)$$

où  $\mathbf{C}$  est une matrice carrée , de rang  $\frac{1}{2}N(N-1)$  , avec  $\mathbf{C}_{11}=\mathbf{N}_{12,12}$  ,  $\mathbf{C}_{12}=\mathbf{N}_{12,13}$  , ... ,  $\mathbf{C}_{21}=\mathbf{N}_{13,12}$  , ... .  $\mathbf{A}$  et  $\boldsymbol{\alpha}$  sont des matrices unicolones avec  $\frac{1}{2}N(N-1)$  lignes définies respectivement par

$$\mathbf{A} := \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ \vdots \\ a_{N-1,N} \end{pmatrix} \quad , \quad (5.24)$$

et

$$\boldsymbol{\alpha} := \begin{pmatrix} \alpha_{12} \\ \alpha_{13} \\ \vdots \\ \alpha_{N-1,N} \end{pmatrix} \quad , \quad (5.25)$$

où

$$\alpha_{ij} := \frac{1}{2m_i} + \frac{1}{2m_j} \quad . \quad (5.26)$$

En inversant  $\mathbf{C}$  , on peut exprimer les  $a_{ij}$  en fonction des  $m_n$  et des paramètres  $x_{kl}$

$$\mathbf{A} = \mathbf{C}^{-1} \boldsymbol{\alpha} \quad . \quad (5.27)$$

En dérivant l'équation (5.23) par rapport aux  $x_{kl}$  , on obtient

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x_{kl}} \mathbf{A} + \mathbf{C} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_{kl}} = 0 \quad , \quad (5.28)$$

d'où

$$\mathbf{C} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_{kl}} = -\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x_{kl}} \mathbf{A} \quad , \quad (5.29)$$

ou bien encore

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_{kl}} = -\mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x_{kl}} \mathbf{A} \quad . \quad (5.30)$$

Mais la matrice  $\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x_{kl}}$  a toutes ses colonnes nulles sauf celle qui correspond à  $(kl)$ . En d'autres termes, la matrice  $\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x_{12}}$  a toutes ses colonnes nulles sauf la première,  $\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x_{13}}$  a toutes ses colonnes nulles sauf la deuxième, ... . On en déduit que  $\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x_{kl}} \mathbf{A}$  est le produit de  $a_{kl}$  par la colonne non nulle de la matrice  $\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x_{kl}}$ . Soit la matrice carrée  $\mathbf{B}$  définie par

$$\mathbf{B}_{ij,kl} := \frac{\partial \mathbf{A}_{ij}}{\partial x_{kl}} = \frac{\partial a_{ij}}{\partial x_{kl}}, \quad (5.31)$$

où le couple  $(ij)$  correspond à l'indice de ligne et le couple  $(kl)$  à l'indice de colonne.  $\mathbf{B}$  est le produit de deux matrices carrées  $-\mathbf{C}^{-1}$  et  $\mathbf{M}'$  dont la colonne  $(kl)$  est le produit de la colonne non nulle de  $\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x_{kl}}$  par  $a_{kl}$ .  $\det \mathbf{B}=0$  est satisfait si  $\det \mathbf{M}'=0$ . Soit  $\mathbf{M}$  la matrice carrée dont la colonne  $(kl)$  est la colonne non nulle de  $\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x_{kl}}$ . Il est clair, en utilisant les propriétés des déterminants que

$$\det \mathbf{M}' = \left( \prod_{k < l=1}^N a_{kl} \right) \det \mathbf{M},$$

et par conséquent  $\det \mathbf{B}=0$  est satisfait si

$$\det \mathbf{M} = 0. \quad (5.32)$$

(5.32) donne une relation entre les  $x_{kl}$  correspondant au maximum de  $\sum_{i < j=1}^N E_{ij}^{(2)} [a_{ij}(\{x_{kl}\})]$ .

Lorsque le système présente des symétries, le problème se simplifie considérablement. Par exemple, dans le cas d'interactions à deux corps ne dépendant que des masses des particules constituant la paire, c'est-à-dire

$$V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) = V_{m_i m_j}(\vec{r}_{ij}), \quad (5.33)$$

où  $m_i$  et  $m_j$  désignent respectivement les masses des particules  $i$  et  $j$  formant la paire de particules, nous avons les simplifications suivantes selon les configurations de masses considérées.

#### *Configurations $(m, m, \dots, m)$*

Comme toutes les masses sont égales, les interactions à deux corps sont indépendantes de la paire de particules considérée,  $V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) = V_{mm}(\vec{r}_{ij})$ , et le système est par conséquent invariant dans toute permutation des particules. On a dans ce cas tous les  $a_{ij}$  égaux et également



tous les  $b_i$  ainsi que tous les  $x_{ij}$ , c'est-à-dire

$$a_{12} = a_{13} = \dots = a_{N-1,N} = a_{mm} \quad , \quad (5.34)$$

$$b_1 = b_2 = \dots = b_N = b_m \quad (5.35)$$

et

$$x_{12} = x_{13} = \dots = x_{N-1,N} = 1 \quad . \quad (5.36)$$

Dans ce cas on n'a pas donc de paramètres à ajuster et tous les  $a_{ij}$  sont identiques .

*n masses égales ( $n < N$ )*

On peut , sans perte de généralité , numéroter les particules de même masse  $m$  de 1 à  $n$

$$m_1 = m_2 = \dots = m_n = m \quad .$$

Comme le système est invariant par permutation des particules de même masse , on a les relations suivantes

$$\begin{aligned} a_{12} &= a_{13} = \dots = a_{n-1,n} \quad , \\ a_{1k} &= a_{2k} = \dots = a_{nk} \quad k > n \quad , \\ b_1 &= b_2 = \dots = b_n = b \end{aligned} \quad (5.37)$$

et

$$\begin{aligned} x_{12} &= x_{13} = \dots = x_{n-1,n} = 1 \quad , \\ x_{1k} &= x_{2k} = \dots = x_{nk} = x_k \quad k > n \quad , \end{aligned} \quad (5.38)$$

c'est-à-dire que nous avons  $N - n$  paramètres indépendants  $x_k$  et

$$1 + N - n + (N - n)(N - n - 1)/2 = 1 + \frac{1}{2}(N - n)(N - n + 1)$$

$a_{ij}$  distincts .

*Configurations ( $m, m, \dots, m, \dots, M, M, \dots, M$ )*

Dans le cas où les particules se présentent en deux ensembles de  $n$  et  $N - n$  particules , un premier ensemble caractérisé par une masse  $m$  et un deuxième ensemble caractérisé par une

masse  $M$  , on peut prendre

$$\begin{aligned} m_1 &= m_2 = \dots = m_n = m & (n < N) , \\ m_{n+1} &= m_{n+2} = \dots = m_N = M . \end{aligned}$$

Comme le système est invariant dans toute permutation de particules d'un même ensemble , nous avons les relations

$$\begin{aligned} a_{ij} &= a_{mm} & i < j = 1, \dots, n , \\ a_{ij} &= a_{mM} & i \leq n \text{ et } j > n , \\ a_{ij} &= a_{MM} & i < j = n + 1, \dots, N , \end{aligned} \tag{5.39}$$

$$\begin{aligned} b_i &= b_m & i = 1, \dots, n , \\ b_i &= b_M & i = n + 1, \dots, N \end{aligned} \tag{5.40}$$

et

$$\begin{aligned} x_{ij} &= 1 & i, j \leq n \text{ ou } i, j > n , \\ x_{ij} &= x & i \leq n \text{ et } j > n . \end{aligned} \tag{5.41}$$

On a donc un seul paramètre indépendant  $x$  et trois  $a_{ij}$  distincts . Dans la suite , on va noter de telles configurations de masses par

$$(n \times m, n' \times M) , \tag{5.42}$$

où  $n$  et  $n'$  dénotent respectivement les nombres de particules du système de masse  $m$  et de masse  $M$  . Bien entendu  $n + n' = N$  , le nombre total des particules du système . On conviendra que les particules de masse  $m$  seront numérotées de 1 à  $n$  et que les particules de masses  $M$  seront numérotées de  $n + 1$  à  $N$  .

On se restreint dans toute la suite à des forces à deux corps ne pouvant dépendre que des masses des particules constituant la paire de particules considérée .

Considérons maintenant, en détail, à tour de rôle les deux configurations  $((N - 1) \times m, 1 \times M)$  et  $(n \times m, n' \times M)$  .

## 5.2.2 Configurations $((N - 1) \times m, 1 \times M)$

Rappelons qu'un système ayant la configuration de masses  $((N - 1) \times m, 1 \times M)$  est un système composé de  $N - 1$  particules de masses égales à  $m$  et d'une particule de masse  $M$ . En identifiant les deux membres de (5.14) et en tenant compte des simplifications apportées par la symétrie du problème (voir section 5.2.1), on obtient les relations suivantes

$$b_m + \frac{(N - 2)}{4} a_{mm} + \frac{1}{(1 + x)^2} a_{mM} = \frac{1}{2m} \quad , \quad (5.43)$$

$$b_M + (N - 1) \frac{x^2}{(1 + x)^2} a_{mM} = \frac{1}{2M} \quad , \quad (5.44)$$

$$b_m + b_M - \frac{2x}{(1 + x)^2} a_{mM} = 0 \quad (5.45)$$

et

$$2b_m - \frac{1}{2} a_{mm} = 0 \quad . \quad (5.46)$$

En combinant les équations (5.43) à (5.46), on peut exprimer  $a_{mm}$  et  $a_{mM}$  en fonction du paramètre  $x$

$$a_{mm}(x) = 2 \frac{(2 + xN - x) xM - m}{(xN - x + 1)^2 mM} \quad , \quad (5.47)$$

$$a_{mM}(x) = \frac{1}{2} (1 + x)^2 \frac{M + (N - 1)m}{(xN - x + 1)^2 mM} \quad . \quad (5.48)$$

A titre d'exemple, considérons le cas d'une interaction à deux corps décrite par un potentiel en loi de puissance

$$V_{mm}(r_{ij}) = \lambda_{mm} r_{ij}^{\nu_{mm}} \quad i < j \neq N \quad , \quad (5.49)$$

où le réel  $\lambda_{mm}$  a le signe de  $\nu_{mm}$ , et

$$V_{mM}(r_{iN}) = \lambda_{mM} r_{iN}^{\nu_{mM}} \quad i \neq N \quad , \quad (5.50)$$

où le réel  $\lambda_{mM}$  a le même signe que  $\nu_{mM}$ .

L'inégalité (5.11) se réduit dans ce cas à

$$E \geq E_{\text{ancienne}} \quad , \quad (5.51)$$

où

$$E_{\text{ancienne}} = \max_x \left[ |\lambda_{mm}|^{\frac{2}{2+\nu_{mm}}} (a_{mm}(x))^{\frac{\nu_{mm}}{\nu_{mm}+2}} E^{(2)}(\nu_{mm}, \mu=1/2) \frac{(N-1)(N-2)}{2} \right. \\ \left. + |\lambda_{mM}|^{\frac{2}{2+\nu_{mM}}} (a_{mM}(x))^{\frac{\nu_{mM}}{\nu_{mM}+2}} E^{(2)}(\nu_{mM}, \mu=1/2) (N-1) \right] \quad , \quad (5.52)$$

où  $E^{(2)}(\nu, \mu)$  désigne l'énergie du niveau fondamental de l'Hamiltonien à deux corps  $H^{(2)}$

$$H^{(2)} = \frac{1}{2\mu} \vec{p}^2 + \text{sign}(\nu) r^\nu \quad . \quad (5.53)$$

Pour obtenir (5.52) , on a fait usage des lois d'échelle (voir chapitre 2 , section 1) .

### 5.2.3 Configurations $(n \times m, n' \times M)$

En identifiant les deux membres de (5.14) , on obtient un système de cinq équations

$$b_m + \frac{(n-1)}{4} a_{mm} + \frac{n'}{(1+x)^2} a_{mM} = \frac{1}{2m} \quad , \quad (5.54)$$

$$b_M + \frac{(n'-1)}{4} a_{MM} + \frac{nx^2}{(1+x)^2} a_{mM} = \frac{1}{2M} \quad , \quad (5.55)$$

$$2b_m - \frac{a_{mm}}{2} = 0 \quad , \quad (5.56)$$

$$b_m + b_M - \frac{2x}{(1+x)^2} a_{mM} = 0 \quad (5.57)$$

et

$$2b_M - \frac{a_{MM}}{2} = 0 \quad , \quad (5.58)$$

où on a tenu compte des simplifications apportées par la symétrie du problème . On peut considérer que (5.54) à (5.58) constituent un système de cinq équations linéaires à cinq inconnues  $(b_m, b_M, a_{mm}, a_{mM}, a_{MM})$  avec un paramètre  $x$  . La résolution de ce système permet d'exprimer les cinq inconnues en fonction du paramètre  $x$  . En particulier , on obtient tous calculs faits ,

pour  $a_{mm}$  ,  $a_{mM}$  et  $a_{MM}$  les expressions suivantes

$$a_{mm}(x) = 2 \frac{(x^2 n + 2xn) M - n' m}{(n' + xn)^2 mM} , \quad (5.59)$$

$$a_{mM}(x) = \frac{1}{2} (1+x)^2 \frac{n' M + mn}{(n' + xn)^2 mM} , \quad (5.60)$$

$$a_{MM}(x) = 2 \frac{-x^2 n M + (2xn + n') m}{(n' + xn)^2 mM} . \quad (5.61)$$

Considérons à titre d'exemple de nouveau le cas de forces à deux corps dérivant d'un potentiel en loi de puissance

$$V^{(ij)}(r_{ij}) = V_{mm}(r_{ij}) = \lambda_{mm} r_{ij}^{\nu_{mm}} \quad i < j \leq n , \quad (5.62)$$

$$V^{(ij)}(r_{ij}) = V_{mM}(r_{ij}) = \lambda_{mM} r_{ij}^{\nu_{mM}} \quad i \leq n , j > n , \quad (5.63)$$

$$V^{(ij)}(r_{ij}) = V_{MM}(r_{ij}) = \lambda_{MM} r_{ij}^{\nu_{MM}} \quad n < i < j \leq N , \quad (5.64)$$

où les réels  $\lambda_{mm}$  ,  $\lambda_{mM}$  et  $\lambda_{MM}$  ont les signes de  $\nu_{mm}$  ,  $\nu_{mM}$  et  $\nu_{MM}$  respectivement . (5.11)

prend alors la forme

$$E \geq E_{\text{ancienne}} , \quad (5.65)$$

où

$$\begin{aligned} E_{\text{ancienne}} = & \max_x \left[ |\lambda_{mm}|^{\frac{2}{2+\nu_{mm}}} (a_{mm}(x))^{\frac{\nu_{mm}}{\nu_{mm}+2}} L^{(2)}(\nu_{mm}, \mu=1/2) \times \frac{n(n-1)}{2} \right. \\ & + |\lambda_{mM}|^{\frac{2}{2+\nu_{mM}}} (a_{mM}(x))^{\frac{\nu_{mM}}{\nu_{mM}+2}} L^{(2)}(\nu_{mM}, \mu=1/2) \times mn' \\ & \left. + |\lambda_{MM}|^{\frac{2}{2+\nu_{MM}}} (a_{MM}(x))^{\frac{\nu_{MM}}{\nu_{MM}+2}} L^{(2)}(\nu_{MM}, \mu=1/2) \times \frac{n'(n'-1)}{2} \right] , \quad (5.66) \end{aligned}$$

où  $a_{mm}$  ,  $a_{mM}$  et  $a_{MM}$  sont donnés par (5.59) , (5.60) et (5.61) respectivement et  $E^{(2)}(\nu, \mu)$  désigne de nouveau l'énergie de l'état fondamental de l'Hamiltonien à deux corps  $H^{(2)}$  (5.53) .

Pour apprécier pleinement la qualité de l'ancienne borne inférieure optimale (5.66) , il faut en principe disposer de résultats de calculs numériques qui demandent des moyens de calculs considérables et qui ne sont malheureusement pas à notre disposition . Pour cela on va se contenter de la comparaison dans le cas de forces harmoniques où on dispose de la solution exacte . Ceci nous amène à l'étude de l'oscillateur harmonique à  $N$  corps .

### 5.2.4 L'oscillateur harmonique à $N$ corps

Considérons un système de  $N$  particules interagissant par des forces harmoniques à deux corps de même intensité pour toutes les paires de particules, c'est-à-dire un système décrit par un Hamiltonien de la forme

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 + \sum_{i < j=1}^N \lambda r_{ij}^2 \quad , \quad (5.67)$$

où on a pris, sans perte de généralité, l'intensité  $\lambda$ ,  $V^{(ij)}(r_{ij}) = \lambda r_{ij}^2$ , égale à 1.

On considérera dans une première étape quelques cas particuliers de configurations  $(n \times m, n' \times M)$ . On dérivra les résultats exacts dans ces cas particuliers et on tentera de généraliser pour une configuration quelconque  $(n \times m, n' \times M)$ .

#### Configurations $(2 \times m, 1 \times M)$ et $(1 \times m, 2 \times M)$

Le calcul de la section 1 du chapitre 4 montre que l'énergie de l'état fondamental est donnée par l'expression suivante

$$E = 3 \left( \sqrt{\frac{3}{2m}} + \sqrt{\frac{M+2m}{2Mm}} + 0\sqrt{\frac{3}{2M}} \right) \quad , \quad (5.68)$$

pour la configuration  $(2 \times m, 1 \times M)$ , et pour la configuration  $(1 \times m, 2 \times M)$  en échangeant  $m$  et  $M$  dans l'expression précédente de  $E$ , c'est-à-dire

$$E = 3 \left( 0\sqrt{\frac{3}{2m}} + \sqrt{\frac{2M+m}{2mM}} + \sqrt{\frac{3}{2M}} \right) \quad . \quad (5.69)$$

#### Configuration $(2 \times m, 2 \times M)$

On prend comme coordonnées de Jacobi

$$\begin{aligned} \vec{\rho} &= \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad , \\ \vec{\lambda} &= \vec{r}_1 + \vec{r}_2 - \vec{r}_3 - \vec{r}_4 \quad , \\ \vec{\sigma} &= \vec{r}_3 - \vec{r}_4 \quad , \\ \vec{R} &= \frac{1}{2M+2m} (m(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) + M(\vec{r}_3 + \vec{r}_4)) \quad . \end{aligned} \quad (5.70)$$

Exprimé en termes des coordonnées de Jacobi , l'Hamiltonien relatif , qu'on désignera par le même symbole que l'Hamiltonien  $H$  , apparaît comme la somme de trois oscillateurs harmoniques découplés

$$H = \left[ \frac{1}{m} \vec{p}_\rho^2 + 2\rho^2 \right] + \left[ \frac{(M+m)}{mM} \vec{p}_\lambda^2 + \lambda^2 \right] + \left[ \frac{1}{M} \vec{p}_\sigma^2 + 2\sigma^2 \right] , \quad (5.71)$$

d'où on tire l'expression de l'énergie du niveau fondamental du système

$$E = 3 \left( \sqrt{\frac{4}{2m}} + \sqrt{\frac{(2M+2m)}{2mM}} + \sqrt{\frac{4}{2M}} \right) . \quad (5.72)$$

### Configurations $(3 \times m, 2 \times M)$ et $(2 \times m, 3 \times M)$

Considérons la configuration  $(3 \times m, 2 \times M)$  et faisons le choix suivant des coordonnées de Jacobi

$$\begin{aligned} \vec{\rho} &= \vec{r}_1 - \vec{r}_2 , \\ \vec{\lambda} &= \frac{1}{\sqrt{3}} (-\vec{r}_1 - \vec{r}_2 + 2\vec{r}_3) , \\ \vec{\sigma} &= \vec{r}_4 - \vec{r}_5 , \\ \vec{\eta} &= \frac{1}{2M+3m} ((\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3) - \frac{3}{2}(\vec{r}_4 + \vec{r}_5)) , \\ \vec{R} &= \frac{1}{2M+3m} (M(\vec{r}_4 + \vec{r}_5) + m(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3)) . \end{aligned} \quad (5.73)$$

l'Hamiltonien relatif , qu'on désignera de nouveau par le même symbole que l'Hamiltonien  $H$ , se réduit à une somme de quatre oscillateurs harmoniques découplés

$$H = \left[ \frac{1}{m} \vec{p}_\rho^2 + \frac{5}{2}\rho^2 \right] + \left[ \frac{1}{m} \vec{p}_\lambda^2 + \frac{5}{2}\lambda^2 \right] + \left[ \frac{3(2M+3m)}{4mM} \vec{p}_\sigma^2 + \frac{2}{3}\sigma^2 \right] + \left[ \frac{1}{M} \vec{p}_\eta^2 + \frac{5}{2}\eta^2 \right] . \quad (5.74)$$

On en déduit l'énergie du niveau fondamental de  $H$

$$E = 3 \left( 2\sqrt{\frac{5}{2m}} + \sqrt{\frac{(2M+3m)}{2Mm}} + \sqrt{\frac{5}{2M}} \right) . \quad (5.75)$$

Il est évident que l'expression de l'énergie de l'état fondamental pour la configuration

$(2 \times m, 3 \times M)$  peut être déduite de (5.75) en permutant  $m$  et  $M$ , ce qui donne

$$E = 3 \left( \sqrt{\frac{5}{2m}} + \sqrt{\frac{(3M + 2m)}{2Mm}} + 2\sqrt{\frac{5}{2M}} \right) \quad (5.76)$$

### Généralisation

On remarque que toutes les expressions précédentes de l'énergie du niveau fondamental pour les différentes configurations considérées peuvent être dérivées d'une relation générale

$$E = 3 \left( (n-1) \sqrt{\frac{n+n'}{2m}} + \sqrt{\frac{n'M + nm}{2Mm}} + (n'-1) \sqrt{\frac{n+n'}{2M}} \right) \quad (5.77)$$

qu'on supposera valable pour toute valeur de  $n$  et  $n'$ . Cette conjecture n'est pas prise en défaut pour toutes les configurations qu'on a pu considérées.

La comparaison des énergies exactes avec les anciennes bornes inférieures optimales correspondantes dans le cas de forces harmoniques à deux corps montre que la saturation (c'est-à-dire l'égalité de l'énergie exacte et de l'ancienne borne inférieure optimale), n'est obtenue que pour certaines configurations de masses. Plus précisément, la saturation n'est obtenue que lorsque un des deux sous-ensembles constituant le système ne comprend qu'une seule particule, c'est-à-dire dans le cas de configurations du type  $(1 \times m, n' \times M)$  et  $(n \times m, 1 \times M)$ . Le tableau 7 illustre ce point. Nous avons pris  $m = 1$  et  $M = 5$  et considéré différentes valeurs de  $n$  et  $N$ . Ceci nous amène à adopter d'autres formes pour les  $y_{ij,k}$  entrant dans la définition des  $\vec{p}_{ij}$  (5.3). Dans la section suivante on considérera la forme la plus générale des  $y_{ij,k}$  compatible avec les relations de commutation canoniques (5.4). La borne inférieure optimale correspondante sera appelée "nouvelle borne inférieure optimale".

	$E$	$N = 3$	$N = 4$	$N = 5$	$N = 6$
$n = 1$	$E_{\text{ancienne}}$	4.7896	7.5895	10.711	14.133
	$E_{\text{exacte}}$	4.7896	7.5895	10.711	14.133
$n = 2$	$E_{\text{ancienne}}$	6.1842	9.4099	12.879	16.599
	$E_{\text{exacte}}$	6.1842	9.4263	12.898	16.617

Tableau [7].



## 5.3 Nouvelle borne inférieure optimale

### 5.3.1 Choix des $y_{ij,k}$

Au lieu de travailler avec les  $y_{ij,k}$ , on va travailler avec les  $x_{ij,k}$  liés aux  $y_{ij,k}$  par les relations

$$y_{ij,k} = \frac{x_{ij,k}}{2} \quad i < j = 1, \dots, N \quad k = 1, \dots, N. \quad (5.78)$$

La partie cinétique de l'Hamiltonien du système s'écrit dans ce cas

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 = \left( \sum_{j=1}^N b_j \vec{p}_j \right) \left( \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) + \sum_{i < j=1}^N \frac{a_{ij}}{4} \left( \sum_{k=1}^N x_{ij,k} \vec{p}_k \right)^2. \quad (5.79)$$

On peut sans perte de généralité fixer  $x_{ij,i}$  à 1 par une redéfinition de  $a_{ij}$  et des  $x_{ij,k}$   $k=1, \dots, N$ ,  $k \neq i$ . Ensuite en imposant les relations de commutation canoniques (5.4), on aboutit à  $x_{ij,j} = -1$ . La décomposition de l'Hamiltonien correspondant à (5.79) est

$$H = \left( \sum_{j=1}^N b_j \vec{p}_j \right) \left( \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) + \sum_{i < j=1}^N \left[ \frac{a_{ij}}{4} \left( \sum_{k=1}^N x_{ij,k} \vec{p}_k \right)^2 + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \right]. \quad (5.80)$$

Nous avons

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \langle \Psi | \left( \sum_{j=1}^N b_j \vec{p}_j \right) \left( \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle + \sum_{i < j=1}^N \langle \Psi | \left( \frac{a_{ij}}{4} \left( \sum_{k=1}^N x_{ij,k} \vec{p}_k \right)^2 + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \right) | \Psi \rangle,$$

où  $|\Psi\rangle$  et  $E$  désignent respectivement l'état fondamental du système et l'énergie correspondante.

La borne inférieure optimale est obtenue pour ce choix des  $y_{ij,k}$ , c'est-à-dire des  $x_{ij,k}$ , en maximisant  $\sum_{i < j=1}^N E_{ij}^{(2)} [a_{ij}(\{x_{kl,m}\})]$  sur les paramètres  $x_{kl,m}$ , qui sont au nombre de  $\frac{N(N-1)(N-2)}{2}$

$$E \geq \max_{\{x_{kl,m}\}} \sum_{i < j=1}^N E_{ij}^{(2)} [a_{ij}(\{x_{kl,m}\})]. \quad (5.81)$$

On appellera  $\max_{\{x_{kl,m}\}} \sum_{i < j=1}^N E_{ij}^{(2)} [a_{ij}(\{x_{kl,m}\})]$  " nouvelle borne inférieure optimale ". Lorsque

$\sum_{i < j=1}^N E_{ij}^{(2)} [a_{ij}(\{x_{kl,m}\})]$  aura atteint son maximum par rapport aux  $\{x_{kl,m}\}$ , toutes les dérivées

partielles par rapport aux  $\{x_{kl,m}\}$  doivent s'annuler, c'est-à-dire

$$\sum_{i < j = 1}^N \frac{\partial L_{ij}^{(2)}}{\partial a_{ij}} \frac{\partial a_{ij}}{\partial x_{kl,m}} = 0 \quad m \neq k, m \neq l \text{ et } k < l = 1, 2, \dots, N \quad (5.82)$$

Comme les  $\frac{\partial L_{ij}^{(2)}}{\partial a_{ij}}$  ne sont pas tous nuls, la matrice rectangulaire  $\tilde{\mathbf{B}} \quad \frac{N(N-1)}{2} \times \frac{N(N-1)(N-2)}{2}$  d'élément de matrice  $\frac{\partial A_{ij}}{\partial x_{kl,m}}$  où  $ij$  correspond à l'indice de ligne et  $kl, m$  correspond à l'indice de colonne,  $\tilde{\mathbf{B}}_{11} = \frac{\partial A_{12}}{\partial x_{12,3}}, \tilde{\mathbf{B}}_{12} = \frac{\partial A_{12}}{\partial x_{12,4}}, \tilde{\mathbf{B}}_{13} = \frac{\partial A_{12}}{\partial x_{12,5}}, \dots, \tilde{\mathbf{B}}_{1 \frac{N(N-1)(N-2)}{2}} = \frac{\partial A_{12}}{\partial x_{N-1, N, N-2}}, \tilde{\mathbf{B}}_{21} = \frac{\partial A_{13}}{\partial x_{12,3}}, \dots, \tilde{\mathbf{B}}_{2 \frac{N(N-1)(N-2)}{2}} = \frac{\partial A_{13}}{\partial x_{N-1, N, N-2}}, \dots, \tilde{\mathbf{B}}_{\frac{N(N-1)}{2} 1} = \frac{\partial A_{N-1, N}}{\partial x_{12,3}}, \dots, \tilde{\mathbf{B}}_{\frac{N(N-1)}{2} \frac{N(N-1)(N-2)}{2}} = \frac{\partial A_{N-1, N}}{\partial x_{N-1, N, N-2}}$  doit être de rang  $(\frac{N(N-1)}{2} - 1)$  au plus, c'est-à-dire que toute matrice carrée  $(\frac{N(N-1)}{2} \times \frac{N(N-1)}{2})$  extraite de la matrice  $\tilde{\mathbf{B}}$  en sélectionnant  $\frac{N(N-1)}{2}$  colonnes doit être de déterminant nul.

Cherchons maintenant les expressions explicites des  $a_{ij}$  en fonction des  $x_{kl,m}$ . L'identification des deux membres de (5.79) donne

$$b_k + \sum_{i < j = 1}^N \frac{x_{ij,k}^2}{4} a_{ij} = \frac{1}{2m_k} \quad (5.83)$$

pour les termes en  $\vec{p}_k^2$  et

$$b_k + b_l + \sum_{i < j = 1}^N \frac{x_{ij,k} x_{ij,l}}{2} a_{ij} = 0 \quad (5.84)$$

pour les termes en  $\vec{p}_k \cdot \vec{p}_l \quad k \neq l$ . En combinant les deux relations précédentes on obtient un système de  $N(N-1)/2$  équations linéaires pour les  $N(N-1)/2$   $a_{ij}$  avec  $N(N-1)(N-2)/2$  paramètres  $x_{ij,k}$

$$\sum_{k < l = 1}^N \tilde{\mathbf{N}}_{ij,kl} a_{kl} = \frac{1}{2m_i} + \frac{1}{2m_j} \quad (5.85)$$

avec

$$\tilde{\mathbf{N}}_{ij,kl} = \left( \frac{x_{ij,k} - x_{ij,l}}{2} \right)^2 \quad (5.86)$$

qu'on peut écrire sous forme matricielle comme

$$\tilde{\mathbf{C}} \times \mathbf{A} = \boldsymbol{\alpha} \quad (5.87)$$

où  $\tilde{\mathbf{C}}$  est une matrice carrée de rang  $N(N-1)/2$ , avec  $\tilde{\mathbf{C}}_{11}=\tilde{\mathbf{N}}_{12,12}$ ,  $\tilde{\mathbf{C}}_{12}=\tilde{\mathbf{N}}_{12,13}$ , ...,  $\tilde{\mathbf{C}}_{21}=\tilde{\mathbf{N}}_{13,12}$ , ...,  $\tilde{\mathbf{C}}_{\frac{N(N-1)}{2}\frac{N(N-1)}{2}}=\tilde{\mathbf{N}}_{(N-1)N,(N-1)N}$ , soit en utilisant (5.86)

$$\tilde{\mathbf{C}} := \frac{1}{4} \begin{pmatrix} (x_{12,1} - x_{12,2})^2 & (x_{13,1} - x_{13,2})^2 & \cdots & (x_{N-1N,1} - x_{N-1N,2})^2 \\ (x_{12,1} - x_{12,3})^2 & (x_{13,1} - x_{13,3})^2 & \cdots & (x_{N-1N,1} - x_{N-1N,3})^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (x_{12,N-1} - x_{12,N})^2 & (x_{13,N-1} - x_{13,N})^2 & \cdots & (x_{N-1N,N-1} - x_{N-1N,N})^2 \end{pmatrix}, \quad (5.88)$$

$\mathbf{A}$  et  $\boldsymbol{\alpha}$  sont les deux matrices unicolonnes avec  $N(N-1)/2$  lignes données respectivement par (5.24) et ((5.25),(5.26)).

L'équation matricielle (5.87) peut être inversée, ce qui donne les  $N(N-1)/2$   $a_{ij}$  en fonction des  $x_{kl,m}$ , qui sont au nombre  $N(N-1)(N-2)/2$ ,

$$\mathbf{A} = \tilde{\mathbf{C}}^{-1} \boldsymbol{\alpha} \quad (5.89)$$

En dérivant l'équation (5.87) par rapport aux  $x_{kl,m}$  ( $m \neq k$  et  $m \neq l$ ), on obtient en procédant de la même manière que dans la section 5.2

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_{kl,m}} = -\tilde{\mathbf{C}}^{-1} \frac{\partial \tilde{\mathbf{C}}}{\partial x_{kl,m}} \mathbf{A} \quad (5.90)$$

La colonne de la matrice  $\tilde{\mathbf{C}}$  correspondant à  $(kl)$  ne dépend que des  $x_{kl,m}$ . De plus, en tenant compte du fait que  $x_{kl,k} = -x_{kl,l} = 1$ , la colonne de la matrice  $\tilde{\mathbf{C}}$  correspondant à  $(kl)$  fait intervenir seulement  $(N-2)$  paramètres  $x_{kl,m}$   $m \neq k, m \neq l, m=1, 2, \dots, N$ . Par conséquent, la matrice  $\frac{\partial \tilde{\mathbf{C}}}{\partial x_{kl,m}}$  a toutes ses colonnes nulles sauf celle qui correspond à  $(kl)$ . Autrement dit, les matrices  $\frac{\partial \tilde{\mathbf{C}}}{\partial x_{12,3}}, \frac{\partial \tilde{\mathbf{C}}}{\partial x_{12,4}}, \dots, \frac{\partial \tilde{\mathbf{C}}}{\partial x_{12,N}}$  ont seulement leurs premières colonnes non nulles,  $\frac{\partial \tilde{\mathbf{C}}}{\partial x_{13,2}}, \frac{\partial \tilde{\mathbf{C}}}{\partial x_{13,4}}, \dots, \frac{\partial \tilde{\mathbf{C}}}{\partial x_{13,N}}$  ont seulement leurs deuxièmes colonnes non nulles, ... . On en déduit que  $\frac{\partial \tilde{\mathbf{C}}}{\partial x_{kl,m}} \mathbf{A}$  est le produit de  $a_{kl}$  par la colonne non nulle de la matrice  $\frac{\partial \tilde{\mathbf{C}}}{\partial x_{kl,m}}$ .

La relation (5.90) montre que la matrice  $\tilde{\mathbf{B}}$  est le produit d'une matrice carrée  $-\tilde{\mathbf{C}}^{-1}$  de dimension  $\frac{N(N-1)}{2} \times \frac{N(N-1)}{2}$  par une matrice rectangulaire  $\tilde{\mathbf{M}}'$  de dimension  $\frac{N(N-1)}{2} \times \frac{N(N-1)(N-2)}{2}$ ,

$$\tilde{\mathbf{B}} = -\tilde{\mathbf{C}}^{-1} \times \tilde{\mathbf{M}}' \quad ,$$

dont la première colonne est le produit de  $a_{12}$  par la colonne non nulle de  $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_{12,3}}$ , la deuxième colonne est le produit de  $a_{12}$  par la colonne non nulle de  $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_{12,4}}$ , ..., la  $(N-2)^{eme}$  colonne est le produit de  $a_{12}$  par la colonne non nulle de  $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_{12,N}}$ , la  $(N-1)^{eme}$  colonne est le produit de  $a_{13}$  par la colonne non nulle de  $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_{13,2}}$ , ..., la  $(2(N-2))^{eme}$  colonne est le produit de  $a_{13}$  par la colonne non nulle de  $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_{13,N}}$ , ..., la  $\left(\left(\frac{N(N-1)}{2} - 1\right)(N-2) + 1\right)^{eme}$  colonne est le produit de  $a_{N-1 N}$  par la colonne non nulle de  $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_{N-1 N,1}}$ , ..., la  $\left(\frac{N(N-1)}{2}(N-2)\right)^{eme}$  colonne est le produit de  $a_{N-1 N}$  par la colonne non nulle de  $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_{N-1 N, N-2}}$ .

$\tilde{B}$  est de rang  $\frac{N(N-1)}{2} - 1$  au plus, si  $\tilde{M}'$  l'est, c'est-à-dire, si toute matrice carrée  $\frac{N(N-1)}{2} \times \frac{N(N-1)}{2}$  extraite de  $\tilde{M}'$  est nécessairement de déterminant nul. En utilisant les propriétés des déterminants, chaque déterminant d'une matrice carrée  $\frac{N(N-1)}{2} \times \frac{N(N-1)}{2}$  extraite de la matrice rectangulaire  $\tilde{M}'$  se présente sous la forme d'un produit de  $\frac{N(N-1)}{2}$  facteurs  $a_{ij}$ , non nécessairement tous différents, par le déterminant d'une matrice carrée  $\frac{N(N-1)}{2} \times \frac{N(N-1)}{2}$  extraite d'une matrice rectangulaire  $\frac{N(N-1)}{2} \times \frac{N(N-1)(N-2)}{2}$   $\tilde{M}$  dont la première colonne est la colonne non nulle de la matrice  $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_{12,3}}$ , la deuxième colonne est la colonne non nulle de la matrice  $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_{12,4}}$ , ..., la  $(N-2)^{eme}$  colonne est la colonne non nulle de la matrice  $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_{12,N}}$ , la  $(N-1)^{eme}$  colonne est la colonne non nulle de la matrice  $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_{13,2}}$ , ..., la  $(2(N-2))^{eme}$  colonne est la colonne non nulle de la matrice  $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_{13,N}}$ , ..., la  $\left(\frac{N(N-1)(N-2)}{2} - (N-3)\right)^{eme}$  colonne est la colonne non nulle de la matrice  $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_{N-1 N,1}}$ , ..., la  $\left(\frac{N(N-1)(N-2)}{2}\right)^{eme}$  colonne est la colonne non nulle de la matrice  $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_{N-1 N, N-2}}$ . On peut noter que la matrice  $\tilde{M}$  est obtenue à partir de la matrice  $\tilde{M}'$  en posant formellement tous les  $a_{ij}$  égaux à 1. Donc  $\tilde{M}'$  est de rang  $\left(\frac{N(N-1)}{2} - 1\right)$  au plus si  $\tilde{M}$  l'est. Cela signifie que tous les déterminants des matrices carrées extraites de la matrice  $\tilde{M}$  en sélectionnant  $\frac{N(N-1)}{2}$  colonnes sont nuls. Il vaut la peine de remarquer que d'une matrice rectangulaire  $D$   $n \times n'$  ( $n' > n$ ), on peut extraire  $\frac{n!}{n!(n'-n)!}$  matrices carrées  $n \times n$  à des permutations près des colonnes. Donc si la matrice  $D$  est de rang  $n-1$  au plus, les  $\frac{n!}{n!(n'-n)!}$  matrices carrées  $n \times n$  extraites de la matrice  $D$  doivent être toutes de déterminant nul, ce qui semble indiquer qu'on a un nombre égal de contraintes. Mais on peut montrer qu'on a en fait seulement  $n' - n + 1$  conditions indépendantes. On peut tenir compte de ces relations entre les  $x_{kl,m}$  dès le départ, ce qui permet de diminuer le nombre de ces derniers de  $\frac{N(N-1)(N-2)}{2}$  à  $\frac{(N+1)(N-2)}{2}$ . Ceci facilite considérablement la maximisation de  $\sum_{i < j = 1}^N L_{ij}^{(2)} [a_{ij} (\{x_{kl,m}\})]$ .

Il vaut la peine de souligner que les  $\frac{N(N-1)(N-2)}{2} - \frac{N(N-1)}{2} + 1 = \frac{N(N-1)(N-3)}{2} + 1$  relations

entre les  $x_{kl,m}$  ne sont pas à proprement parler des contraintes . On peut les ignorer et optimiser sur tous les paramètres  $x_{kl,m}$  , ce qui rend inévitablement le problème d'optimisation beaucoup plus difficile , et vérifier à posteriori qu'on a bien les  $\frac{N(N-1)(N-3)}{2} + 1$  relations entre les  $x_{kl,m}^0$  correspondant au maximum.

Lorsque le système présente des symétries , le problème se simplifie considérablement . Par exemple , dans le cas d'interactions à deux corps ne dépendant que des masses des particules constituant la paire de particules (5.33) , nous avons les simplifications suivantes selon les configurations de masses considérées .

*Configurations (m, m, ..., m)*

Le système est invariant dans toute permutation des particules , qui sont toutes de même masse . On obtient donc

$$a_{ij} = a \quad i < j = 1, \dots, N \quad , \quad (5.91)$$

$$b_i = b \quad i = 1, \dots, N \quad (5.92)$$

et

$$x_{ij,k} = 0 \quad k=1, \dots, N \quad , \quad k \neq i \quad \text{et} \quad k \neq j \quad . \quad (5.93)$$

Dans ce cas on a pas de paramètres à ajuster et les deux bornes inférieures optimales ancienne et nouvelle mènent au même résultat .

*Configurations (m, m, ..., m, M)*

On peut toujours , sans perte de généralité , numéroter les particules de même masse  $m$  de 1 à  $N - 1$  et la particule unique de masse  $M$  par  $N$  , c'est-à-dire

$$\begin{aligned} m_1 &= m_2 = \dots = m_{N-1} = m \quad , \\ m_N &= M \quad . \end{aligned}$$

Comme le système est invariant dans toute permutation des  $N - 1$  particules de même masse

$m$ , on a les relations suivantes

$$\begin{aligned} a_{12} = a_{13} = \dots = a_{N-2, N-1} = a_{mm} \quad , \\ a_{iN} = a_{mM} \quad i < N \quad , \\ b_1 = b_2 = \dots = b_{N-1} = b \quad , \end{aligned} \quad (5.94)$$

et

$$\begin{aligned} x_{ij,k} = 0 \quad i < j < N, k \neq i, k \neq j \quad , \\ x_{iN,k} = \ell \quad i < N, k \neq i, k \neq N \quad . \end{aligned} \quad (5.95)$$

On a donc un seul paramètre variationnel  $\ell$  et deux valeurs distinctes  $a_{mm}$  et  $a_{mM}$  des  $a_{ij}$ .

### Configurations $(n \times m, n' \times M)$

Rappelons qu'un système ayant la configuration  $(n \times m, n' \times M)$  est un système composé de  $N$  particules se présentant en deux ensembles de  $n$  et  $n' = N - n$  particules caractérisés par deux masses  $m$  et  $M$  respectivement. Autrement dit,

$$\begin{aligned} m_1 = m_2 = \dots = m_n = m \quad , \\ M_{n+1} = M_{n+2} = \dots = M_N = M \quad . \end{aligned}$$

Le système reste toujours invariant dans toute permutation des particules de même masse, ce qui donne dans ce cas

$$\begin{aligned} a_{12} = a_{13} = \dots = a_{n-1, n} = a_{mm} \quad , \\ a_{ij} = a_{mM} \quad i \leq n \text{ et } j > n \quad , \\ a_{n+1, n+2} = a_{n+1, n+3} = \dots = a_{N-1, N} = a_{MM} \quad , \end{aligned} \quad (5.96)$$

$$\begin{aligned} b_1 = b_2 = \dots = b_n = b_m \quad , \\ b_{n+1} = b_{n+2} = \dots = b_N = b_M \quad , \end{aligned} \quad (5.97)$$

et

$$\begin{aligned} x_{ij,k} = 0 \quad i < j \leq n, k \neq i, j \text{ ou } j > i > n, k \neq i, j \quad , \\ x_{ij,k} = \ell \quad i \leq n, j > n, k \leq n, k \neq i \quad , \\ x_{ij,k} = p \quad i \leq n, j > n, k > n, k \neq j \quad . \end{aligned} \quad (5.98)$$

Nous avons donc dans ce cas deux paramètres  $\ell$  et  $p$  et trois  $a_{ij}$  distincts :  $a_{mm}$  ,  $a_{mM}$  et  $a_{MM}$ . On peut remarquer en particulier qu'on a ici un paramètre de plus comparativement au cas de l'ancienne borne inférieure optimale pour la même configuration de masses , ce qui laisse supposer que la nouvelle borne inférieure optimale sera supérieure (meilleure) de l'ancienne borne inférieure optimale .

On se restreint dans toute la suite à des forces à deux corps ne pouvant dépendre que des masses des particules constituant la paire de particules considérée .

Considérons maintenant, en détail, à tour de rôle les deux configurations  $((N - 1) \times m, 1 \times M)$  et  $(n \times m, n' \times M)$  . On considérera aussi le cas de  $N$  particules dans un puits de potentiel , qui est en fait un cas particulier de la configuration  $(N \times m, 1 \times M)$  dans la limite  $M \rightarrow \infty$  .

### 5.3.2 Configurations $((N - 1) \times m, 1 \times M)$

En identifiant les deux membres de (5.79) en tenant compte des simplifications apportées par la symétrie du problème ((5.94) et (5.95)) , on obtient les quatre équations suivantes

$$b + \frac{(N-2)}{4}a_{mm} + \frac{1}{4}a_{mM} + \frac{(N-2)}{4}\ell^2 a_{mM} = \frac{1}{2m} \quad , \quad (5.99)$$

$$b_N + \frac{(N-1)}{4}a_{mM} = \frac{1}{2M} \quad , \quad (5.100)$$

$$2b - \frac{1}{2}a_{mm} + \ell a_{mM} + \frac{(N-3)}{2}\ell^2 a_{mM} = 0 \quad (5.101)$$

et

$$b + b_N - \frac{1}{2}a_{mM} - \frac{(N-2)}{2}\ell a_{mM} = 0 \quad . \quad (5.102)$$

Les équations (5.99) à (5.102) peuvent être considérées comme un système d'équations linéaires à 4 inconnues  $a_{mm}$  ,  $a_{mM}$  ,  $b$  et  $b_N$  avec un paramètre  $\ell$  . La résolution de ce système est triviale et donne pour  $a_{mm}$  et  $a_{mM}$  les expressions suivantes en fonction du paramètre  $\ell$

$$a_{mm}(\ell) = 2 \frac{(\ell+1)(\ell N - 3\ell + 1 + N)M - (\ell-1)^2 m}{(\ell N + N - 2\ell)^2 m M} \quad , \quad (5.103)$$

$$a_{mM}(\ell) = 2 \frac{M + (N-1)m}{(\ell N + N - 2\ell)^2 m M} \quad . \quad (5.104)$$

### Remarque

Pour des configurations de masses où on a le même nombre de paramètres variationnels pour l'ancienne et la nouvelle décomposition de l'énergie cinétique correspondant à l'ancienne et la nouvelle borne inférieure optimale respectivement, les deux bornes fournissent des résultats identiques. Cette propriété est valable pour les systèmes à trois corps et ce indépendamment de la configuration de masses considérée [9]. Ceci est également le cas pour des configurations du type  $((N-1) \times m, 1 \times M)$  où on a un seul paramètre aussi bien pour l'ancienne que pour la nouvelle décomposition. On peut d'ailleurs montrer que les paramètres correspondant à l'ancienne et la nouvelle décomposition, notés  $x$  et  $\ell$  respectivement sont liés par la relation

$$\ell = \frac{x-1}{1+x}, \quad (5.105)$$

obtenue en identifiant les expressions de  $a_{mm}$  et  $a_{mM}$  pour les deux cas

$$a_{mm}^{\text{ancienne}}(x) = a_{mm}^{\text{nouvelle}}(\ell),$$

$$a_{mM}^{\text{ancienne}}(x) = a_{mM}^{\text{nouvelle}}(\ell).$$

### 5.3.3 Configurations $(n \times m, n' \times M)$

Considérons un système de particules correspondant à une configuration de masses du type  $(n \times m, n' \times M)$ . En identifiant les deux membres de (5.79) dans ce cas particulier, on obtient le système d'équations

$$b_m + \frac{1}{4}(n-1)a_{mm} + \frac{n'}{4}(\ell^2(n-1)+1)a_{mM} = \frac{1}{2m}, \quad (5.106)$$

$$b_M + \frac{n}{4}(p^2(n'-1)+1)a_{mM} + \frac{1}{4}(n'-1)a_{MM} = \frac{1}{2M}, \quad (5.107)$$

$$2b_m - \frac{1}{2}a_{mm} + \left(\ell + \frac{\ell^2}{2}(n-2)\right)n'a_{mM} = 0, \quad (5.108)$$

$$b_m + b_M + \frac{1}{2}((n'-1)p - 1 - \ell(n-1) + p\ell(n-1)(n'-1))a_{mM} = 0 \quad (5.109)$$



et

$$2b_M + n \left( \frac{p}{2} (n' - 2) - 1 \right) p a_{mM} - \frac{a_{MM}}{2} = 0 \quad , \quad (5.110)$$

où on a tenu compte des simplifications apportées par la symétrie du problème ((5.96) à (5.98)).

On peut donc exprimer  $a_{mm}$  ,  $a_{mM}$  et  $a_{MM}$  en fonction des deux paramètres  $\ell$  et  $p$  , soit

$$a_{mm}(\ell, p) = 2 \frac{(-n p n' + p n + n + 2n' - 2\ell n' + n \ell n') (-p n' + p + 1 + \ell n') M - (\ell - 1)^2 n' m}{(n' + n - \ell n' + n \ell n' - n p n' + p n)^2 m M} \quad , \quad (5.111)$$

$$a_{mM}(\ell, p) = 2 \frac{n' M + n m}{(n' + n - \ell n' + n \ell n' - n p n' + p n)^2 m M} \quad , \quad (5.112)$$

$$a_{MM}(\ell, p) = 2 \frac{(-\ell + 1 + n \ell - p n) (n \ell n' - \ell n' + 2p n - n p n' + 2n + n') m - n (p + 1)^2 M}{(n' + n - \ell n' + n \ell n' - n p n' + p n)^2 m M} \quad . \quad (5.113)$$

Considérons à titre d'exemple de nouveau le cas de forces à deux corps dérivant d'un potentiel en loi de puissance (5.33) . La nouvelle borne inférieure optimale pour cette configuration de masses a comme expression

$$\begin{aligned} & \max_{\ell, p} [ |\lambda_{mm}|^{\frac{2}{2+\nu_{mm}}} (a_{mm}(\ell, p))^{\frac{\nu_{mm}}{\nu_{mm}+2}} I_2^{(2)}(\nu_{mm}, \mu=1/2) \frac{1}{2} n (n-1) \\ & + |\lambda_{mM}|^{\frac{2}{2+\nu_{mM}}} (a_{mM}(\ell, p))^{\frac{\nu_{mM}}{\nu_{mM}+2}} I_2^{(2)}(\nu_{mM}, \mu=1/2) n n' \\ & + |\lambda_{MM}|^{\frac{2}{2+\nu_{MM}}} (a_{MM}(\ell, p))^{\frac{\nu_{MM}}{\nu_{MM}+2}} I_2^{(2)}(\nu_{MM}, \mu=1/2) \frac{1}{2} n' (n'-1) ] \quad . \quad (5.114) \end{aligned}$$

Dans le cas de la configuration de masses  $(n \times m, n' \times M)$  pour  $n, n' > 1$  , nous avons prévu que la nouvelle borne inférieure optimale donne des résultats meilleurs que ceux fournis par l'ancienne borne inférieure optimale , sur la base que nous avons deux paramètres variationnels pour la première et un seul paramètre pour la deuxième . Nos prévisions sont amplement confirmés par les résultats de nos calculs numériques . La nouvelle borne inférieure optimale donne toujours des valeurs supérieures à celles fournies par l'ancienne borne inférieure optimale, donc plus proches des résultats exacts . En particulier la nouvelle borne inférieure optimale est saturée dans le cas d'interactions harmoniques , ce qui n'est pas le cas de l'ancienne borne inférieure optimale . Le tableau 8 illustre ce point . Nous y'avons reporté les valeurs de la nouvelle et de l'ancienne bornes inférieures optimales baptisées respectivement  $E_{\text{nouvelle}}$  et  $E_{\text{ancienne}}$  , pour

la configuration  $(n \times m, n \times M)$  avec  $m=1$ ,  $M=5$  et pour différentes valeurs de  $n$ ,  $n=2, 3, 4, 5$  et différentes valeurs de  $\nu$ ,  $\nu = 2, 1, -1/2, -1$  avec  $|\lambda_{mm}|=|\lambda_{mM}|=|\lambda_{MM}|=1$ .

$n$	$E$	$\nu = 2$	$\nu = 1$	$\nu = -1/2$	$\nu = -1$
2	$E_{\text{nouvelle}}$	9.4263	9.0700	-4.1160	-5.896
	$E_{\text{ancienne}}$	9.4098	9.0585	-4.1296	-6.021
3	$E_{\text{nouvelle}}$	19.064	19.668	-11.890	-22.813
	$E_{\text{ancienne}}$	19.024	19.637	-11.935	-23.345
4	$E_{\text{nouvelle}}$	30.696	33.255	-24.527	-57.54
	$E_{\text{ancienne}}$	30.627	33.199	-24.623	-58.92
5	$E_{\text{nouvelle}}$	44.028	49.528	-42.557	-116.45
	$E_{\text{ancienne}}$	43.926	49.446	-42.726	-119.28

Tableau [8].

### 5.3.4 $N$ particules dans un puits de potentiel

Considérons un système de  $N + 1$  particules, dont l'une d'elles qu'on numérottera  $N + 1$  a une masse  $M$  beaucoup plus grande que celles de toutes les autres particules du système. Le centre de masse du système est alors pratiquement confondu avec la particule de masse  $M$ . Cette propriété est d'autant mieux réalisée que  $M$  est d'autant plus grand, et à la limite  $M \rightarrow \infty$ , le centre de masse du système se confond exactement avec la particule de masse  $M$ . Tout se passe alors comme si on a un système de  $N$  particules plongées dans un puits de potentiel  $V(r_i)$

$$V(\vec{r}_i) = V^{(i, N+1)}(\vec{r}_{i, N+1}) \quad (5.115)$$

Dans le cas où toutes les  $N$  particules du système autre que la particule de masse  $M$ , ont une masse unique  $m$ , ce problème se réduit à celui d'une configuration  $(N \times m, 1 \times M)$  dans la limite  $M \rightarrow \infty$ . Comme l'ancienne et la nouvelle bornes inférieures optimales sont équivalentes pour ce type de configurations, on peut utiliser au choix les résultats des section 5.2.2 ou 5.3.2. En utilisant par exemple 5.2.2 en remplaçant  $N$  par  $N+1$  et en faisant tendre  $M$  vers l'infini,

on obtient

$$a_{mm}(x) = 2 \frac{2x + x^2 N}{(Nx + 1)^2 m} , \quad (5.116)$$

$$a_{mM}(x) = \frac{1}{2} \frac{(1+x)^2}{(Nx + 1)^2 m} . \quad (5.117)$$

Par conséquent , la borne inférieure optimale pour l'énergie du niveau fondamental d'un système de  $N$  particules interagissant par des forces à deux corps dérivant d'un potentiel en loi de puissance  $V^{(ij)}(r_{ij}) = \lambda_{mm} r_{ij}^{\nu_{mm}}$  ,  $sign(\lambda_{mm}) = sign(\nu_{mm})$  et plongées dans un puits de potentiel  $V(r_i) = \lambda r_i^\nu$  ,  $sign(\lambda) = sign(\nu)$  sera donnée par

$$\begin{aligned} & \max_x \left[ N \frac{N-1}{2} |\lambda_{mm}|^{\frac{2}{2+\nu_{mm}}} \left( 2 \frac{2x + x^2 N}{(Nx + 1)^2 m} \right)^{\frac{\nu_{mm}}{\nu_{mm} + 2}} E^{(2)}(\nu_{mm}, \mu=1/2) \right. \\ & \left. + N |\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}} \left( \frac{1}{2} \frac{(1+x)^2}{(Nx + 1)^2 m} \right)^{\frac{\nu}{\nu+2}} E^{(2)}(\nu, \mu=1/2) \right] , \end{aligned} \quad (5.118)$$

où  $E^{(2)}(\nu, \mu)$  désigne de nouveau l'énergie du niveau fondamental de l'Hamiltonien à deux corps  $H^{(2)}$  donné par (5.53) .

Le tableau 9 regroupe quelques résultats numériques de la borne inférieure optimale pour l'énergie du niveau fondamental d'un système de  $N$  particules de même masse  $m = 1$  , plongées dans un puits de potentiel en loi de puissance  $V(r) = sign(\nu) r^\nu$  qu'on a pris le même que celui qui décrit l'interaction à deux corps entre les  $N$  particules , c'est-à-dire  $\lambda = \lambda_{mm}$  et  $\nu = \nu_{mm}$  . Nous avons pris quatre formes de potentiel correspondant à quatre valeurs différentes de  $\nu$  ,  $\nu = 1, 2, -1/2, -1$  , et avons considéré quatre valeurs pour  $N$  ,  $N = 2, 4, 7, 9$

$N$	2	4	7	9
$\nu = 1$	5.2141	15.544	38.541	58.211
$\nu = 2$	5.7955	16.351	38.121	55.787
$\nu = -1/2$	-1.7783	-6.6365	-20.963	-35.826
$\nu = -1$	-1.8712	-8.7691	-35.218	-68.004

Tableau [9] .

Pour l'oscillateur harmonique les valeurs obtenues coïncident avec les valeurs exactes des niveaux fondamentaux données par

$$E = \frac{3}{2} (N - 1) \sqrt{(2N + 2)} + \frac{3}{2} \sqrt{2} , \quad (5.119)$$

qui est obtenue à partir de (5.77) en posant  $m=1$  , en faisant tendre  $M$  vers l'infini , en changeant  $n$  en  $N$  et en posant  $n'$  égale à 1 .

Prenons un autre exemple où on a un système de  $N$  particules de même masse  $m$  interagissant par un potentiel de Martin  $V(r)=r^{0.1}$  , mais dans ce cas plongées dans un puits de potentiel Coulombien  $V(r)=-1/r$  . Le tableau 10 regroupe des résultats numériques correspondant à cet exemple . On a considéré quatre valeurs pour  $N$  ,  $N=2, 4, 7, 9$  et trois valeurs différentes de  $m$  ,  $m=1, 2, 5$  car contrairement à l'exemple précédent on ne dispose plus de lois d'échelles car dans ce cas  $\nu \neq \nu_{mm}$  .

$N$	2	4	7	9
$m = 1$	0.05419	4.2981	18.426	32.972
$m = 2$	-1.0148	1.8980	13.581	26.218
$m = 5$	-4.1002	-4.6060	1.3555	9.7980

Tableau [10] .

## 5.4 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre une méthode pour obtenir des bornes inférieures optimales pour l'énergie du niveau fondamental d'un système à  $N$  corps , pour  $N$  quelconque. Nous avons considéré deux bornes inférieures qu'on a baptisées ancienne et nouvelle bornes inférieures optimales et avons traité le problème en détail pour certaines configurations de masses , à savoir les configurations  $(n \times m, n' \times M)$  . La nouvelle borne inférieure optimale s'avère meilleure ou au moins aussi bonne , selon les configurations de masses considérées , que l'ancienne borne inférieure optimale .

En combinant notre borne inférieure optimale à des calculs variationnels , tels le développement systématique sur des Gaussiennes , exposé au chapitre 4 , nous pouvons obtenir un encadrement de l'énergie du niveau fondamental du système à  $N$  corps . Pour illustrer ceci , nous avons considéré un système de trois particules interagissant par un potentiel de Martin  $V(r) = r^{0.1}$  . On a pris pour simplifier les deux premières particules de même masse  $m_1 = m_2 = 1$  et la troisième particule avec une masse variable  $m_3$  . Dans ce cas l'énergie du niveau fondamental  $E$  de ce système est une fonction de  $m_3$  . On peut alors tracer dans le plan  $(E, m_3)$  les deux courbes représentant la borne inférieure optimale et la borne supérieure obtenue en utilisant une Gaussienne comme fonction d'onde d'essai . La courbe représentant la borne supérieure est tracée en rouge et celle représentant la borne inférieure est tracée en bleu. Les valeurs exactes de l'énergie du niveau fondamental pour les différentes valeurs de  $m_3$  sont nécessairement dans la zone hachurée de la figure 7 .

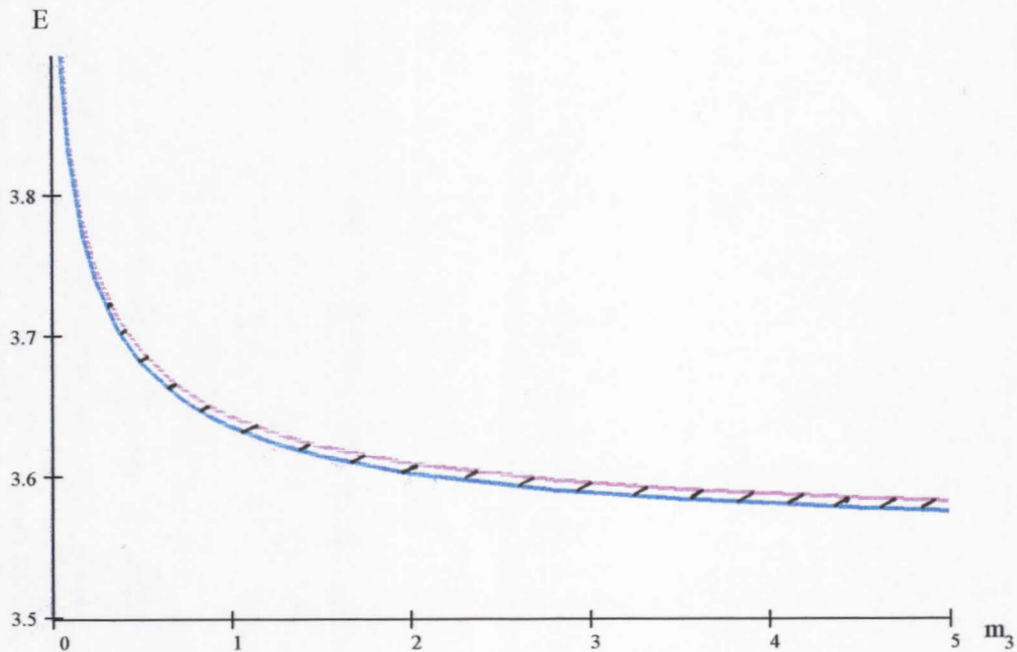


Figure 7 .

La nouvelle borne inférieure optimale est bien détaillée dans les références [17] et [18] pour le cas à trois corps et dans les références [9] et [19] pour le cas à quatre corps . Nous allons à notre tour étudier en détail les deux bornes inférieures optimales ancienne et nouvelle dans le cas des systèmes à cinq corps .

## Chapitre 6

# Borne inférieure optimale pour des Systèmes à 5 corps

### 6.1 Ancienne borne inférieure

La décomposition du terme d'énergie cinétique correspondant à l'ancienne borne inférieure optimale s'écrit dans le cas d'un système à 5 corps comme

$$\begin{aligned} T^{(5)} &= \frac{1}{2m_1} \vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m_2} \vec{p}_2^2 + \frac{1}{2m_3} \vec{p}_3^2 + \frac{1}{2m_4} \vec{p}_4^2 + \frac{1}{2m_5} \vec{p}_5^2 \\ &= (b_1 \vec{p}_1 + b_2 \vec{p}_2 + b_3 \vec{p}_3 + b_4 \vec{p}_4 + b_5 \vec{p}_5) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4 + \vec{p}_5) \\ &\quad + a_{12} \frac{1}{(1+x_{12})^2} (\vec{p}_1 - x_{12} \vec{p}_2)^2 + a_{13} \frac{1}{(1+x_{13})^2} (\vec{p}_1 - x_{13} \vec{p}_3)^2 \\ &\quad + a_{14} \frac{1}{(1+x_{14})^2} (\vec{p}_1 - x_{14} \vec{p}_4)^2 + a_{15} \frac{1}{(1+x_{15})^2} (\vec{p}_1 - x_{15} \vec{p}_5)^2 \\ &\quad + a_{23} \frac{1}{(1+x_{23})^2} (\vec{p}_2 - x_{23} \vec{p}_3)^2 + a_{24} \frac{1}{(1+x_{24})^2} (\vec{p}_2 - x_{24} \vec{p}_4)^2 \\ &\quad + a_{25} \frac{1}{(1+x_{25})^2} (\vec{p}_2 - x_{25} \vec{p}_5)^2 + a_{34} \frac{1}{(1+x_{34})^2} (\vec{p}_3 - x_{34} \vec{p}_4)^2 \\ &\quad + a_{35} \frac{1}{(1+x_{35})^2} (\vec{p}_3 - x_{35} \vec{p}_5)^2 + a_{45} \frac{1}{(1+x_{45})^2} (\vec{p}_4 - x_{45} \vec{p}_5)^2 . \end{aligned} \quad (6.1)$$

En identifiant les deux membres de (6.1) , nous obtenons l'équation matricielle (5.23) donnant les  $a_{ij}$  en fonction des masses  $m_i$  et des paramètres  $x_{ij}$  avec

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ \vdots \\ a_{23} \\ \vdots \\ a_{45} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_{12} \\ \alpha_{13} \\ \vdots \\ \alpha_{23} \\ \vdots \\ \alpha_{45} \end{pmatrix}$$

et

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{(1+x_{13})^2} & \frac{1}{(1+x_{14})^2} & \frac{1}{(1+x_{15})^2} & \frac{1}{(1+x_{23})^2} & \frac{1}{(1+x_{24})^2} & \frac{1}{(1+x_{25})^2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{(1+x_{12})^2} & 1 & \frac{1}{(1+x_{14})^2} & \frac{1}{(1+x_{15})^2} & \frac{x_{23}^2}{(1+x_{23})^2} & 0 & 0 & \frac{1}{(1+x_{34})^2} & \frac{1}{(1+x_{35})^2} & 0 \\ \frac{1}{(1+x_{12})^2} & \frac{1}{(1+x_{13})^2} & 1 & \frac{1}{(1+x_{15})^2} & 0 & \frac{x_{24}^2}{(1+x_{24})^2} & 0 & \frac{x_{34}^2}{(1+x_{34})^2} & 0 & \frac{1}{(1+x_{45})^2} \\ \frac{1}{(1+x_{12})^2} & \frac{1}{(1+x_{13})^2} & \frac{1}{(1+x_{14})^2} & 1 & 0 & 0 & \frac{x_{25}^2}{(1+x_{25})^2} & 0 & \frac{x_{35}^2}{(1+x_{35})^2} & \frac{x_{45}^2}{(1+x_{45})^2} \\ \frac{x_{12}^2}{(1+x_{12})^2} & \frac{x_{13}^2}{(1+x_{13})^2} & 0 & 0 & 1 & \frac{1}{(1+x_{24})^2} & \frac{1}{(1+x_{25})^2} & \frac{1}{(1+x_{34})^2} & \frac{1}{(1+x_{35})^2} & 0 \\ \frac{x_{12}^2}{(1+x_{12})^2} & 0 & \frac{x_{14}^2}{(1+x_{14})^2} & 0 & \frac{1}{(1+x_{23})^2} & 1 & \frac{1}{(1+x_{25})^2} & \frac{x_{34}^2}{(1+x_{34})^2} & 0 & \frac{1}{(1+x_{45})^2} \\ \frac{x_{12}^2}{(1+x_{12})^2} & 0 & 0 & \frac{x_{15}^2}{(1+x_{15})^2} & \frac{1}{(1+x_{23})^2} & \frac{1}{(1+x_{24})^2} & 1 & 0 & \frac{x_{35}^2}{(1+x_{35})^2} & \frac{x_{45}^2}{(1+x_{45})^2} \\ 0 & \frac{x_{13}^2}{(1+x_{13})^2} & \frac{x_{14}^2}{(1+x_{14})^2} & 0 & \frac{x_{23}^2}{(1+x_{23})^2} & \frac{x_{24}^2}{(1+x_{24})^2} & 0 & 1 & \frac{1}{(1+x_{35})^2} & \frac{1}{(1+x_{45})^2} \\ 0 & \frac{x_{13}^2}{(1+x_{13})^2} & 0 & \frac{x_{15}^2}{(1+x_{15})^2} & \frac{x_{23}^2}{(1+x_{23})^2} & 0 & \frac{x_{25}^2}{(1+x_{25})^2} & \frac{1}{(1+x_{34})^2} & 1 & \frac{x_{45}^2}{(1+x_{45})^2} \\ 0 & 0 & \frac{x_{14}^2}{(1+x_{14})^2} & \frac{x_{15}^2}{(1+x_{15})^2} & 0 & \frac{x_{24}^2}{(1+x_{24})^2} & \frac{x_{25}^2}{(1+x_{25})^2} & \frac{x_{34}^2}{(1+x_{34})^2} & \frac{x_{35}^2}{(1+x_{35})^2} & 1 \end{pmatrix}$$

Lorsque l'ancienne borne inférieure de l'énergie du niveau fondamental du système aura atteint son maximum , toutes ses dérivées partielles par rapport aux  $x_{ij}$  s'annulent , se qui

signifie que la matrice  $\mathbf{M}$ , définie au chapitre 5 section 2, qui a dans ce cas la forme

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-2}{(1+x_{13})^3} & \frac{-2}{(1+x_{14})^3} & \frac{-2}{(1+x_{15})^3} & \frac{-2}{(1+x_{23})^3} & \frac{-2}{(1+x_{24})^3} & \frac{-2}{(1+x_{25})^3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-2}{(1+x_{12})^3} & 0 & \frac{-2}{(1+x_{14})^3} & \frac{-2}{(1+x_{15})^3} & \frac{2x_{23}}{(1+x_{23})^3} & 0 & 0 & \frac{-2}{(1+x_{34})^3} & \frac{-2}{(1+x_{35})^3} & 0 \\ \frac{-2}{(1+x_{12})^3} & \frac{-2}{(1+x_{13})^3} & 0 & \frac{-2}{(1+x_{15})^3} & 0 & \frac{2x_{24}}{(1+x_{24})^3} & 0 & \frac{2x_{34}}{(1+x_{34})^3} & 0 & \frac{-2}{(1+x_{45})^3} \\ \frac{-2}{(1+x_{12})^3} & \frac{-2}{(1+x_{13})^3} & \frac{-2}{(1+x_{14})^3} & 0 & 0 & 0 & \frac{2x_{25}}{(1+x_{25})^3} & 0 & \frac{2x_{35}}{(1+x_{35})^3} & \frac{2x_{45}}{(1+x_{45})^3} \\ \frac{2x_{12}}{(1+x_{12})^3} & \frac{2x_{13}}{(1+x_{13})^3} & 0 & 0 & 0 & \frac{-2}{(1+x_{24})^3} & \frac{-2}{(1+x_{25})^3} & \frac{-2}{(1+x_{34})^3} & \frac{-2}{(1+x_{35})^3} & 0 \\ \frac{2x_{12}}{(1+x_{12})^3} & 0 & \frac{2x_{14}}{(1+x_{14})^3} & 0 & \frac{-2}{(1+x_{23})^3} & 0 & \frac{-2}{(1+x_{25})^3} & \frac{2x_{34}}{(1+x_{34})^3} & 0 & \frac{-2}{(1+x_{45})^3} \\ \frac{2x_{12}}{(1+x_{12})^3} & 0 & 0 & \frac{2x_{15}}{(1+x_{15})^3} & \frac{-2}{(1+x_{23})^3} & \frac{-2}{(1+x_{24})^3} & 0 & 0 & \frac{2x_{35}}{(1+x_{35})^3} & \frac{2x_{45}}{(1+x_{45})^3} \\ 0 & \frac{2x_{13}}{(1+x_{13})^3} & \frac{2x_{14}}{(1+x_{14})^3} & 0 & \frac{2x_{23}}{(1+x_{23})^3} & \frac{2x_{24}}{(1+x_{24})^3} & 0 & 0 & \frac{-2}{(1+x_{35})^3} & \frac{-2}{(1+x_{45})^3} \\ 0 & \frac{2x_{13}}{(1+x_{13})^3} & 0 & \frac{2x_{15}}{(1+x_{15})^3} & \frac{2x_{23}}{(1+x_{23})^3} & 0 & \frac{2x_{25}}{(1+x_{25})^3} & \frac{-2}{(1+x_{34})^3} & 0 & \frac{2x_{45}}{(1+x_{45})^3} \\ 0 & 0 & \frac{2x_{14}}{(1+x_{14})^3} & \frac{2x_{15}}{(1+x_{15})^3} & 0 & \frac{2x_{24}}{(1+x_{24})^3} & \frac{2x_{25}}{(1+x_{25})^3} & \frac{2x_{34}}{(1+x_{34})^3} & \frac{2x_{35}}{(1+x_{35})^3} & 0 \end{pmatrix}$$

est de rang 9 au plus, ce qui signifie que  $\det \mathbf{M} = 0$ , ou en utilisant l'expression de  $\mathbf{M}$  et en faisant usage des propriétés des déterminants

$$\det \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & -1 & x_{23} & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & -1 & 0 & x_{24} & 0 & x_{34} & 0 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & x_{25} & 0 & x_{35} & x_{45} \\ x_{12} & x_{13} & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ x_{12} & 0 & x_{14} & 0 & -1 & 0 & -1 & x_{34} & 0 & -1 \\ x_{12} & 0 & 0 & x_{15} & -1 & -1 & 0 & 0 & x_{35} & x_{45} \\ 0 & x_{13} & x_{14} & 0 & x_{23} & x_{24} & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & x_{13} & 0 & x_{15} & x_{23} & 0 & x_{25} & -1 & 0 & x_{45} \\ 0 & 0 & x_{14} & x_{15} & 0 & x_{24} & x_{25} & x_{34} & x_{35} & 0 \end{pmatrix} = 0$$



Cette équation nous donne une relation entre les paramètres  $x_{ij}$ , ce qui permet d'éliminer l'un des paramètres, et par conséquent de réduire d'une unité le nombre de paramètres variationnels.

### 6.1.1 Formes explicites et domaine de positivité des $a_{ij}$

#### Configuration $(4 \times m, 1 \times M)$

Les deux expressions (5.47) et (5.48) se réduisent pour  $N = 5$  à

$$a_{mm}(x) = 2 \frac{2xM(1+2x) - m}{(4x+1)^2 mM}, \quad (6.2)$$

$$a_{mM}(x) = \frac{1}{2} (1+x)^2 \frac{M+4m}{(4x+1)^2 mM}. \quad (6.3)$$

L'expression (6.3) montre que  $a_{mM}$  est positif indépendamment de la valeur de  $x$ . D'autre part, d'après l'expression (6.2), la condition  $a_{mm}$  positif se traduit par

$$x(1+2x) - \frac{m}{2M} \geq 0. \quad (6.4)$$

On en déduit le domaine de positivité des  $a_{ij}$  pour l'ancienne borne inférieure optimale dans le cas de la configuration  $(4 \times m, 1 \times M)$

$$x \leq \frac{1}{4} \left( -1 - \sqrt{1 + \frac{4m}{M}} \right) \quad \text{ou} \quad x \geq \frac{1}{4} \left( -1 + \sqrt{1 + \frac{4m}{M}} \right). \quad (6.5)$$

#### Configuration $(3 \times m, 2 \times M)$

Les expressions (5.59), (5.60) et (5.61) donnent pour  $N = 5$

$$a_{mm}(x) = 2 \frac{3x(x+2)M - 2m}{(2+3x)^2 mM}, \quad (6.6)$$

$$a_{mM}(x) = \frac{1}{2} (1+x)^2 \frac{2M+3m}{(2+3x)^2 mM}, \quad (6.7)$$

$$a_{MM}(x) = 2 \frac{-3x^2M + (6x+2)m}{(2+3x)^2 mM}. \quad (6.8)$$

L'expression (6.7) montre que  $a_{mM}$  est positif indépendamment de la valeur de  $x$  et les conditions  $a_{mm}$  et  $a_{MM}$  positifs donnent, en utilisant (6.6) et (6.8) respectivement, les deux

contraintes

$$3x(x+2)M - 2m \geq 0 \quad (6.9)$$

et

$$-3x^2M + (6x+2)m \geq 0 \quad (6.10)$$

En ajoutant terme à terme (6.9) et (6.10) on arrive à la conclusion que  $x$  est nécessairement positif ou nul

$$x \geq 0 \quad (6.11)$$

L'inégalité (6.9) admet comme solutions positives ou nulles ( $x \geq 0$ )

$$x \geq -1 + \sqrt{1 + \frac{2m}{3M}} \quad (6.12)$$

D'autre part l'inégalité (6.10) admet la solutions

$$\left(1 - \sqrt{\left(\frac{m}{M}\right)^2 + 2\frac{m}{M}}\right) \leq x \leq \left(1 + \sqrt{\left(\frac{m}{M}\right)^2 + 2\frac{m}{M}}\right) \quad (6.13)$$

Les valeurs acceptables de  $x$ , c'est-à-dire celles rendant  $a_{mm}$ ,  $a_{mM}$  et  $a_{MM}$  simultanément positifs, sont celles appartenant à l'intersection des deux domaines (6.12) et (6.13). Ce domaine n'est jamais vide car

$$1 + \sqrt{y^2 + 2y} - \left(-1 + \sqrt{1 + \frac{2}{3}y}\right) > 0 \quad \forall y \quad ,$$

ce qui implique que

$$1 + \sqrt{\left(\frac{m}{M}\right)^2 + 2\frac{m}{M}} > -1 + \sqrt{1 + \frac{2m}{3M}}$$

indépendamment de la valeur du rapport  $\frac{m}{M}$ .

Il s'ensuit le domaine de variation permis pour  $x$

$$x \in [\max(a, b), c] \quad , \quad (6.14)$$

où on a posé

$$a : = \left( -1 + \sqrt{1 + \frac{2m}{3M}} \right) , \quad (6.15)$$

$$b : = \left( 1 - \sqrt{\left(\frac{m}{M}\right)^2 + 2\frac{m}{M}} \right) , \quad (6.16)$$

$$c : = \left( 1 + \sqrt{\left(\frac{m}{M}\right)^2 + 2\frac{m}{M}} \right) . \quad (6.17)$$

## 6.2 Nouvelle borne inférieure

La nouvelle décomposition du terme d'énergie cinétique correspondant à la nouvelle borne inférieure optimale s'écrit dans le cas d'un système à 5 corps comme

$$\begin{aligned} T^{(5)} &= \frac{1}{2m_1} \vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m_2} \vec{p}_2^2 + \frac{1}{2m_3} \vec{p}_3^2 + \frac{1}{2m_4} \vec{p}_4^2 + \frac{1}{2m_5} \vec{p}_5^2 \\ &= (b_1 \vec{p}_1 + b_2 \vec{p}_2 + b_3 \vec{p}_3 + b_4 \vec{p}_4 + b_5 \vec{p}_5) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4 + \vec{p}_5) \\ &\quad + \frac{a_1}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + c_3 \vec{p}_3 + c_4 \vec{p}_4 + c_5 \vec{p}_5)^2 \\ &\quad + \frac{a_2}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_3 + d_2 \vec{p}_2 + d_4 \vec{p}_4 + d_5 \vec{p}_5)^2 \\ &\quad + \frac{a_3}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_4 + f_2 \vec{p}_2 + f_3 \vec{p}_3 + f_5 \vec{p}_5)^2 \\ &\quad + \frac{a_4}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_5 + g_2 \vec{p}_2 + g_3 \vec{p}_3 + g_4 \vec{p}_4)^2 \\ &\quad + \frac{a_5}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3 + h_1 \vec{p}_1 + h_4 \vec{p}_4 + h_5 \vec{p}_5)^2 \\ &\quad + \frac{a_6}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_4 + j_1 \vec{p}_1 + j_3 \vec{p}_3 + j_5 \vec{p}_5)^2 \\ &\quad + \frac{a_7}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_5 + k_1 \vec{p}_1 + k_3 \vec{p}_3 + k_4 \vec{p}_4)^2 \\ &\quad + \frac{a_8}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_4 + l_1 \vec{p}_1 + l_2 \vec{p}_2 + l_5 \vec{p}_5)^2 \\ &\quad + \frac{a_9}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_5 + n_1 \vec{p}_1 + n_2 \vec{p}_2 + n_4 \vec{p}_4)^2 \\ &\quad + \frac{a_{10}}{4} (\vec{p}_4 - \vec{p}_5 + e_1 \vec{p}_1 + e_2 \vec{p}_2 + e_3 \vec{p}_3)^2 . \end{aligned} \quad (6.18)$$

En identifiant les différents termes en  $\vec{p}_i^2$  et en  $\vec{p}_i \cdot \vec{p}_j$ , nous serons capable d'éliminer les

$b_i$  et d'écrire les  $a_{ij}$  en fonction des paramètres  $c_3, c_4, c_5, d_2, \dots, n_1, n_2, \dots$  sous la forme matricielle (5.87) avec

$$\tilde{C} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{(1-d_2)^2}{4} & \frac{(1-f_2)^2}{4} & \frac{(1-g_2)^2}{4} & \frac{(h_1-1)^2}{4} & \frac{(j_1-1)^2}{4} & \frac{(k_1-1)^2}{4} & \frac{(l_1-l_2)^2}{4} & \frac{(n_1-n_2)^2}{4} & \frac{(e_1-e_2)^2}{4} \\ \frac{(1-c_3)^2}{4} & 1 & \frac{(1-f_3)^2}{4} & \frac{(1-g_3)^2}{4} & \frac{(h_1+1)^2}{4} & \frac{(j_1-f_3)^2}{4} & \frac{(k_1-k_3)^2}{4} & \frac{(l_1-1)^2}{4} & \frac{(n_1-1)^2}{4} & \frac{(e_1-e_3)^2}{4} \\ \frac{(1-c_4)^2}{4} & \frac{(1-d_4)^2}{4} & 1 & \frac{(1-g_4)^2}{4} & \frac{(h_1-h_4)^2}{4} & \frac{(j_1+1)^2}{4} & \frac{(k_1-k_4)^2}{4} & \frac{(l_1+1)^2}{4} & \frac{(n_1-n_4)^2}{4} & \frac{(e_1-1)^2}{4} \\ \frac{(1-c_5)^2}{4} & \frac{(1-d_5)^2}{4} & \frac{(1-f_5)^2}{4} & 1 & \frac{(h_1-h_5)^2}{4} & \frac{(j_1-f_5)^2}{4} & \frac{(k_1+1)^2}{4} & \frac{(l_1-l_5)^2}{4} & \frac{(n_1+1)^2}{4} & \frac{(e_1+1)^2}{4} \\ \frac{(1+c_3)^2}{4} & \frac{(d_2+1)^2}{4} & \frac{(f_2-f_3)^2}{4} & \frac{(g_2-g_3)^2}{4} & 1 & \frac{(1-f_3)^2}{4} & \frac{(1-k_3)^2}{4} & \frac{(l_2+1)^2}{4} & \frac{(n_2-1)^2}{4} & \frac{(e_2-e_3)^2}{4} \\ \frac{(1+c_4)^2}{4} & \frac{(d_2-d_4)^2}{4} & \frac{(f_2+1)^2}{4} & \frac{(g_2-g_4)^2}{4} & \frac{(1-h_4)^2}{4} & 1 & \frac{(1-k_4)^2}{4} & \frac{(l_2+1)^2}{4} & \frac{(n_2-n_4)^2}{4} & \frac{(e_2-1)^2}{4} \\ \frac{(1+c_5)^2}{4} & \frac{(d_2-d_5)^2}{4} & \frac{(f_2-f_5)^2}{4} & \frac{(g_2+1)^2}{4} & \frac{(1-h_5)^2}{4} & \frac{(1-f_5)^2}{4} & 1 & \frac{(l_2-l_5)^2}{4} & \frac{(n_2+1)^2}{4} & \frac{(e_2+1)^2}{4} \\ \frac{(c_3-c_4)^2}{4} & \frac{(1+d_4)^2}{4} & \frac{(f_3+1)^2}{4} & \frac{(g_3-g_4)^2}{4} & \frac{(1+h_4)^2}{4} & \frac{(j_3+1)^2}{4} & \frac{(k_3-k_4)^2}{4} & 1 & \frac{(1-n_4)^2}{4} & \frac{(e_3-1)^2}{4} \\ \frac{(c_3-c_5)^2}{4} & \frac{(1+d_5)^2}{4} & \frac{(f_3-f_5)^2}{4} & \frac{(g_3+1)^2}{4} & \frac{(1+h_5)^2}{4} & \frac{(j_3-f_5)^2}{4} & \frac{(k_3+1)^2}{4} & \frac{(1-l_5)^2}{4} & 1 & \frac{(e_3+1)^2}{4} \\ \frac{(c_4-c_5)^2}{4} & \frac{(d_4-d_5)^2}{4} & \frac{(1+f_5)^2}{4} & \frac{(g_4+1)^2}{4} & \frac{(h_4-h_5)^2}{4} & \frac{(1+j_5)^2}{4} & \frac{(k_4+1)^2}{4} & \frac{(1+l_5)^2}{4} & \frac{(n_4+1)^2}{4} & 1 \end{pmatrix}$$

Lorsque la nouvelle borne inférieure du niveau fondamental du système aura atteint son maximum, toutes ses dérivées partielles par rapport aux  $x_{i,j,k}$ , c'est-à-dire par rapport à  $c_3, c_4, c_5, d_2, \dots, n_1, n_2, \dots$ , s'annulent (5.82). La matrice  $\tilde{M}$ , définie au chapitre 5, section 3, se réduit dans ce cas particulier à une matrice  $(10 \times 30)$  donnée par



Comme toujours d'après la section 5.3 , la matrice  $\widetilde{M}$  doit être de rang 9 au plus . Cette condition donne 21 relations liant les paramètres  $c_3, c_4, c_5, d_2, \dots, n_1, n_2, \dots$  au maximum de la nouvelle borne inférieure . Nous avons pu obtenir 16 de ces 21 relations . Nous avons donc pu , à l'état actuel de nos recherches , exprimer 16 des paramètres  $c_3, c_4, c_5, d_2, \dots, n_1, n_2, \dots$  en fonction des 14 paramètres restants  $d_2, d_5, f_2, f_3, f_5, g_2, h_1, h_5, j_1, k_1, k_3, l_1, n_1$  et  $e_1$

$$c_4 = \frac{j_1 - f_2}{-1 + j_1 f_2} \quad , \quad (6.19)$$

$$d_4 = \frac{l_1 - f_3}{f_3 l_1 - 1} \quad , \quad (6.20)$$

$$l_2 = \frac{l_1 f_2 + d_2 f_3 l_1 + f_2 - d_2}{f_3 + 1} \quad , \quad (6.21)$$

$$l_5 = \frac{d_5 f_3 l_1 - d_5 + f_5 l_1 + f_5}{f_3 + 1} \quad , \quad (6.22)$$

$$g_4 = \frac{f_5 + e_1}{f_5 e_1 + 1} \quad , \quad (6.23)$$

$$e_2 = \frac{e_1 f_2 - f_2 + f_5 g_2 e_1 + g_2}{1 + f_5} \quad , \quad (6.24)$$

$$c_3 = \frac{j_1 f_2 l_1 + j_1 f_2 + j_1 d_2 f_3 l_1 - l_1 - j_1 f_3 l_1 + d_2 f_3 l_1 - f_3 l_1 - d_2 - j_1 d_2 + j_1}{j_1 f_2 l_1 + j_1 f_2 - l_1 - 1} \quad , \quad (6.25)$$

$$h_4 = \frac{-f_3 l_1 + l_1 h_1 f_2 + h_1 d_2 f_3 l_1 + l_1 f_2 - h_1 d_2 - h_1 f_3 - h_1 - f_3 + h_1 f_2 + f_2}{f_3 l_1 + d_2 f_3 l_1 - 1 - d_2} \quad , \quad (6.26)$$

$$j_3 = \frac{-l_1 + d_2 f_3 l_1 + j_1 d_2 f_3 l_1 + j_1 f_2 l_1 + j_1 f_3 - d_2 + f_3 + j_1 - d_2 j_1 + j_1 f_2}{(l_1 + 1)(f_2 + 1)} \quad , \quad (6.27)$$

$$j_5 = \frac{f_5 g_2 e_1 + j_1 f_5 g_2 e_1 - f_5 - f_5 j_1 + g_2 - e_1 - j_1 f_2 + j_1 g_2 + j_1 e_1 f_2 - j_1}{(f_2 + 1)(e_1 - 1)} \quad , \quad (6.28)$$

$$k_4 = \frac{k_1 f_5 g_2 p_1 + k_1 p_1 f_2 + p_1 f_2 - f_5 p_1 + k_1 f_5 - f_2 + f_5 + k_1 g_2 + k_1 - k_1 f_2}{f_5 p_1 + f_5 g_2 p_1 + 1 + g_2} \quad , \quad (6.29)$$

$$n_4 = \frac{f_3 - n_1 f_3 + f_3 l_1 + n_1 d_5 f_3 l_1 - l_1 f_5 + n_1 f_5 - n_1 d_5 - f_5 + n_1 l_1 f_5 - n_1}{f_3 l_1 + d_5 f_3 l_1 - d_5 - 1} \quad , \quad (6.30)$$

$$g_3 = \frac{f_5 e_1 + f_5 e_1 l_1 + d_5 - d_5 f_3 l_1 - e_1 f_3 l_1 + e_1 + f_3 l_1 + l_1 - d_5 e_1 + d_5 e_1 f_3 l_1}{f_5 e_1 + f_5 e_1 l_1 + l_1 + 1} \quad , \quad (6.31)$$

$$e_3 = \frac{f_3 e_1 - d_5 f_3 l_1 - f_3 + d_5 e_1 f_3 l_1 + l_1 + d_5 - d_5 e_1 + f_5 e_1 + f_5 e_1 l_1 + e_1}{l_1 + f_5 l_1 + 1 + f_5} \quad (6.32)$$

et

$$c_5 = \frac{-j_1 + j_1 e_2 - j_5 e_1 + j_5 e_2 f_2 + f_2 + e_2 - e_1 f_2 - e_1 + j_5 e_2 - j_5 e_1 f_2}{-j_1 f_2 + p_2 j_1 f_2 + 1 - p_2} \quad , \quad (6.33)$$

$$n_2 = \frac{-g_2 n_1 k_3 + g_3 - n_1 - k_3 + g_3 k_1 + k_1 - g_2 - g_2 n_1 - n_1 k_3 - g_2 k_3}{g_3 + k_1 + 1 + g_3 k_1} \quad . \quad (6.34)$$

Les relations (6.19) à (6.34) permettent donc de diminuer le nombre de paramètres variationnels , ce qui facilite la recherche du maximum .

### 6.2.1 Formes explicites et domaine de positivité des $a_{ij}$

**Configuration**  $(4 \times m, 1 \times M)$

Nous avons , en remplaçant  $N$  par 5 dans les deux expressions (5.103) et (5.104) , valables pour la nouvelle borne inférieure optimale

$$a_{mm}(\ell) = 2 \frac{(\ell + 1)(2\ell + 6)M - (\ell - 1)^2 m}{(3\ell + 5)^2 mM} , \quad (6.35)$$

$$a_{mM}(\ell) = 2 \frac{M + 4m}{(3\ell + 5)^2 mM} . \quad (6.36)$$

Il est clair , d'après (6.36) , que  $a_{mM}$  est positif . La relation (6.35) montre que la condition  $a_{mm}$  positif se traduit par l'inégalité

$$(m - 2M)\ell^2 - 2\ell(m + 4M) - 6M + m \leq 0 , \quad (6.37)$$

ou

$$\ell^2(x - 2) - 2\ell(x + 4) - 6 + x \leq 0 , \quad (6.38)$$

si on pose

$$x := \frac{m}{M} . \quad (6.39)$$

Réolvons l'inégalité (6.38) avec  $\ell$  inconnue , en fonction du rapport des masses  $x$  . Nous pouvons distinguer deux cas :

a)  $x - 2 = 0$  qui correspond à  $m = 2M$  .

Dans ce cas (6.38) se réduit à une inégalité du 1<sup>er</sup> ordre

$$-12\ell - 4 \leq 0 ,$$

c'est-à-dire

$$\ell \geq -1/3 .$$

a)  $x - 2 \neq 0$  , c'est-à-dire  $m \neq 2M$  .

Dans ce cas (6.38) se réduit à une inégalité du 2<sup>ème</sup> ordre . Le polynôme du deuxième ordre

$$\ell^2 (x - 2) - 2\ell(x + 4) - 6 + x$$

a un discriminant réduit

$$\Delta' = (x + 4)^2 - (x - 2)(x - 6) = 16x + 4$$

toujours positif ( $x > 0$ ) , et par conséquent deux racines distinctes  $\ell_1$  et  $\ell_2$  données par

$$\ell_1 = \frac{(x + 4) + 2\sqrt{4x + 1}}{(x - 2)} , \quad (6.40)$$

$$\ell_2 = \frac{(x + 4) - 2\sqrt{4x + 1}}{(x - 2)} . \quad (6.41)$$

Ceci nous conduit à distinguer deux cas selon que  $(x - 2)$  est positif ou négatif :

i)  $x - 2 < 0$  , c'est-à-dire  $m < 2M$

(6.38) est alors satisfaite pour  $\ell$  en dehors des racines  $\ell_1 < \ell_2$

$$\ell \leq \ell_1 \quad \text{ou} \quad \ell \geq \ell_2 . \quad (6.42)$$

ii)  $x - 2 > 0$  , c'est-à-dire  $m > 2M$  .

(6.38) est alors satisfaite pour  $\ell$  à l'intérieur des racines  $\ell_1 > \ell_2$

$$\ell_2 \leq \ell \leq \ell_1 . \quad (6.43)$$

Donc en résumé le domaine de positivité des  $a_{ij}$  est

$$\ell \geq -1/3 \quad \text{pour} \quad m = 2M , \quad (6.44)$$

$$\ell \leq \ell_1 \quad \text{ou} \quad \ell \geq \ell_2 \quad \text{pour} \quad m < 2M , \quad (6.45)$$

$$\ell_2 \leq \ell \leq \ell_1 \quad \text{pour} \quad m > 2M , \quad (6.46)$$

avec  $\ell_1$  et  $\ell_2$  données respectivement par (6.40) et (6.41) .



**Configuration**  $(3 \times m, 2 \times M)$

En remplaçant  $n$  par 3 et  $n'$  par 2 dans (5.111), (5.112) et (5.113), les expressions de  $a_{mm}$ ,  $a_{mM}$  et  $a_{MM}$  se réduisent respectivement à

$$a_{mm} = 2 \frac{(2\ell + 1 - p)(2\ell + 7 - 3p)M - 2(\ell - 1)^2 m}{(4\ell + 5 - 3p)^2 m M} , \quad (6.47)$$

$$a_{mM} = 2 \frac{2M + 3m}{(4\ell + 5 - 3p)^2 m M} , \quad (6.48)$$

$$a_{MM} = 2 \frac{-3(1+p)^2 M + 4(2+\ell)(2\ell+1-3p)m}{(4\ell+5-3p)^2 m M} . \quad (6.49)$$

On remarque, d'après (6.48), que  $a_{mM}$  est toujours positif. On est ramené donc à l'étude de la positivité de  $a_{mm}$  et de  $a_{MM}$ . Les conditions  $a_{mm}$  et  $a_{MM}$  positifs se traduisent par les deux inégalités

$$(2\ell + 1 - p)(2\ell + 7 - 3p) - 2(\ell - 1)^2 x \geq 0 , \quad (6.50)$$

$$-3(1+p)^2 + 4(2+\ell)(2\ell+1-3p)x \geq 0 , \quad (6.51)$$

où on a posé  $x := \frac{m}{M}$ . Le polynôme du deuxième degré en  $p$  intervenant dans le membre de gauche de (6.50) admet deux racines  $p_1$  et  $p_2$

$$p_1(\ell) = \frac{1}{3} \left( (4\ell + 5) - (\ell - 1) \sqrt{2(3x + 2)} \right) , \quad (6.52)$$

$$p_2(\ell) = \frac{1}{3} \left( (4\ell + 5) + (\ell - 1) \sqrt{2(3x + 2)} \right) . \quad (6.53)$$

L'inégalité (6.50) est donc vérifiée dans deux domaines qui sont :

$$p \geq p_1 \quad \text{et} \quad p \geq p_2$$

ou

$$p \leq p_1 \quad \text{et} \quad p \leq p_2 .$$

De même le polynôme du deuxième degré en  $p$  intervenant dans le membre de gauche de (6.51)

admet deux racines  $p'_1$  et  $p'_2$

$$p'_1(\ell) = \frac{-1}{3} \left( 3(2x\ell + 1 + 4x) - 2(2 + \ell) \sqrt{3x(3x + 2)} \right) , \quad (6.54)$$

$$p'_2(\ell) = \frac{-1}{3} \left( 3(2x\ell + 1 + 4x) + 2(2 + \ell) \sqrt{3x(3x + 2)} \right) . \quad (6.55)$$

Donc l'inégalité (6.51) est également vérifiée dans deux domaines

$$p \geq p'_1 \quad \text{et} \quad p \leq p'_2$$

ou

$$p \leq p'_1 \quad \text{et} \quad p \geq p'_2 .$$

On a donc quatre cas de figures pour satisfaire aux contraintes ( $a_{ij} \geq 0$ )

1)

$$p \geq p_1 , p \geq p_2 , p \geq p'_1 \text{ et } p \leq p'_2 . \quad (6.56)$$

2)

$$p \geq p_1 , p \geq p_2 , p \leq p'_1 \text{ et } p \geq p'_2 . \quad (6.57)$$

3)

$$p \leq p_1 , p \leq p_2 , p \geq p'_1 \text{ et } p \leq p'_2 . \quad (6.58)$$

4)

$$p \leq p_1 , p \leq p_2 , p \leq p'_1 \text{ et } p \geq p'_2 . \quad (6.59)$$

En fait les contraintes sont impossibles à satisfaire dans les cas 2) et 3) , équations (6.57) et (6.58) respectivement . Autrement dit , il n'existe pas de couples  $(p, \ell)$  pour lesquels (6.57) et (6.58) soient satisfaites . On peut se convaincre par une méthode graphique que seules les contraintes des deux cas 1) et 4) donnent lieu à des domaines non vides dans le plan  $(p, \ell)$  . Lorsque  $x$  varie , c'est-à-dire lorsque le rapport des masses  $m$  et  $M$  varie , le point  $(p^0(x), \ell^0(x))$  du plan  $(p, \ell)$  qui correspond à la nouvelle borne inférieure optimale varie . Pour  $x=1$  , la symétrie du système impose  $p=\ell=0$  , point situé dans la région du plan  $(p, \ell)$  définie par (6.59), c'est-à-dire dans le domaine 4) . Par raison de continuité , le point  $(p^0(x), \ell^0(x))$  ne peut sortir

du domaine 4) lorsque  $x$  varie .

Le tableau 11 regroupe quelques résultats numériques pour les deux bornes inférieures optimales , ancienne  $E_{\text{ancienne}}$  et nouvelle  $E_{\text{nouvelle}}$  , du niveau fondamental de systèmes à 5 corps interagissant par des forces à deux corps dérivant de potentiels en loi de puissance  $V(r)=\text{sign}(\nu)r^\nu$  pour la configuration  $(3 \times m, 2 \times M)$  . Nous avons considéré cinq formes de potentiels correspondant à 5 valeurs de  $\nu$  ,  $\nu=2, 1, 0.1, -1/2$  et  $-1$ , pour quatre valeurs de  $M$ ,  $M=0.2, 1, 2, 5$  , avec  $m$  fixé à 1 . Dans le cas de masses égales on a reporté une seule valeur car les deux bornes sont alors équivalentes .

$M$	$E$	$\nu = 2$	$\nu = 1$	$\nu = 0.1$	$\nu = -1/2$	$\nu = -1$
0.2	$E_{\text{ancienne}}$	28.840	22.630	12.285	-4.6012	-2.9885
	$E_{\text{nouvelle}}$	28.799	22.605	12.283	-4.6137	-3.0413
1	$E_{\text{ancienne}}$	18.974	17.227	11.830	-5.9446	-6.2500
	$E_{\text{nouvelle}}$					
2	$E_{\text{ancienne}}$	16.810	15.876	11.691	-6.4636	-8.0578
	$E_{\text{nouvelle}}$	16.808	15.875	11.691	-6.4645	-8.0647
5	$E_{\text{ancienne}}$	15.029	14.685	11.554	-7.0464	-10.596
	$E_{\text{nouvelle}}$	14.997	14.662	11.551	-7.0718	-10.834

Tableau [11] .

## Chapitre 7

# Applications Physiques des bornes inférieures optimales

Comme son nom l'indique , ce chapitre est consacré aux applications physiques des bornes inférieures optimales et des décompositions correspondantes du terme d'énergie cinétique qui ont fait l'objet des chapitres cinq et six . Nous commencerons par la dérivation des bornes inférieures optimales pour les énergies des états fondamentaux de systèmes formés d'un nombre quelconque d'électrons  $e^-$  et de positrons  $e^+$  , systèmes qu'on notera  $(e^-, e^-, \dots, e^-, e^+, e^+, \dots, e^+)$  . Dans une deuxième étape , nous allons nous concentrer plus spécialement sur les systèmes à cinq corps. Nous établirons des conditions suffisantes d'inexistence de systèmes borroméens à cinq corps et ce pour quelques configurations de masses .

### 7.1 Systèmes $(e^-, e^-, \dots, e^-, e^+, e^+, \dots, e^+)$

L'*électron* et le *positron* sont des particules conjuguées de charge l'une de l'autre . En particulier , elles ont une même masse mais deux charges électriques opposées . Les interactions Coulombiennes *électron-électron* et *positron-positron* répulsives sont donc différentes de l'interaction Coulombienne *électron-positron* qui est attractive . On satisfait donc aux conditions d'application des résultats des sections 5.2.3 et 5.3.3 , et on a par conséquent affaire à des configurations du type  $(n \times m, n' \times m)$  .

Considérons le cas particulier où les nombres d'*électrons* et de *positrons* sont les mêmes ,

c'est-à-dire  $n'=n$  . Dans de tels cas , on parle de molécules positroniums qu'on désigne par  $(e^+e^-)^n$  .

On peut sans perte de généralité numérotter les *électrons* de 1 à  $n$  et les *positrons* de  $n+1$  à  $2n$  . En négligeant toutes les interactions à part les interactions électrostatiques , le système sera décrit par l'Hamiltonien  $H$  donné par

$$H = \sum_{i=1}^{2n} \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{i<j=1}^n \frac{q^2}{r_{ij}} + \sum_{i<j=n+1}^{2n} \frac{q^2}{r_{ij}} - \sum_{i=1}^n \sum_{j=n+1}^{2n} \frac{q^2}{r_{ij}} , \quad (7.1)$$

avec  $q^2=e^2/4\pi\epsilon_0$  , où  $e$  et  $\epsilon_0$  désignent respectivement la charge électrique de l'*électron* et la permittivité du vide et  $m$  désignant la masse de l'*électron* .

Soit  $|\Psi\rangle$  l'état fondamental du système et  $E$  l'énergie correspondante . En utilisant la décomposition (5.2) de l'Hamiltonien  $H$  , nous obtenons

$$\begin{aligned} E &= \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \langle \Psi | \left( \sum_{j=1}^N b_j \vec{p}_j \right) \left( \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle \\ &+ \sum_{i<j=1}^n \langle \Psi | \left( a_{ij} \vec{p}_{ij}^2 + \frac{q^2}{r_{ij}} \right) | \Psi \rangle + \sum_{i<j=n+1}^{2n} \langle \Psi | \left( a_{ij} \vec{p}_{ij}^2 + \frac{q^2}{r_{ij}} \right) | \Psi \rangle \\ &+ \sum_{i=1}^n \sum_{j=n+1}^{2n} \langle \Psi | \left( a_{ij} \vec{p}_{ij}^2 - \frac{q^2}{r_{ij}} \right) | \Psi \rangle . \end{aligned} \quad (7.2)$$

$|\Psi\rangle$  étant invariant par translation ,  $\left( \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle = \vec{0}$  et le premier terme du membre de droite de (7.2) est par conséquent nul .

D'autre part , les paramètres  $a_{ij}$  jouent le rôle de l'inverse d'une masse et doivent nécessairement être positifs . Donc les opérateurs  $\left( a_{ij} \vec{p}_{ij}^2 + \frac{q^2}{r_{ij}} \right)$  sont définis positifs et par conséquent ont des valeurs moyennes positives dans n'importe quel état . En particulier

$$\langle \Psi | \left( a_{ij} \vec{p}_{ij}^2 + \frac{q^2}{r_{ij}} \right) | \Psi \rangle \geq 0 . \quad (7.3)$$

Donc

$$E \geq \sum_{i=1}^n \sum_{j=n+1}^{2n} \langle \Psi | \left( a_{ij} \vec{p}_{ij}^2 - \frac{q^2}{r_{ij}} \right) | \Psi \rangle . \quad (7.4)$$

Or , d'après le principe variationnel

$$\langle \Psi | \left( a_{ij} \vec{p}_{ij}^2 - \frac{q^2}{r_{ij}} \right) | \Psi \rangle \geq \frac{-1}{4} \frac{q^4}{a_{ij}} , \quad (7.5)$$

où on a fait usage des lois d'échelle pour le potentiel Coulombien ( $\nu = -1$ ) en tenant compte du fait que  $E^{(2)}(\nu = -1, \mu = 1/2) = -1/4$  dans des unités où  $\hbar$  vaut 1 , où  $E^{(2)}(\nu, \mu)$  désigne l'énergie de l'état fondamental de l'Hamiltonien à deux corps (5.53) . Nous avons donc

$$E \geq \sum_{i=1}^n \sum_{j=n+1}^{2n} \frac{-1}{4} \frac{q^4}{a_{ij}} . \quad (7.6)$$

Comme le système est invariant par permutation des *électrons* et par permutation des *positrons* nous avons les simplifications suivantes

$$\begin{aligned} a_{ij} &= a_{e^-e^-} & i < j \leq n , \\ a_{ij} &= a_{e^-e^+} & i \leq n \text{ et } n < j \leq 2n , \\ a_{ij} &= a_{e^+e^+} & n < i < j \leq 2n \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} b_i &= b_{e^-} & i \leq n , \\ b_i &= b_{e^+} & n < j \leq 2n . \end{aligned}$$

Il s'ensuit que

$$E \geq \frac{-1}{4} \frac{q^4}{a_{e^-e^+}} n^2 , \quad (7.7)$$

où  $n^2$  désigne le nombre de paires *électron-positron* .

Nous avons pour la décomposition correspondante à l'ancienne borne inférieure optimale , en remplaçant  $M$  par  $m$  et  $n'$  par  $n$  dans les expressions de  $a_{mm}$  (5.59) ,  $a_{mM}$  (5.60) et  $a_{MM}$  (5.61)

$$a_{e^-e^-}(x) = \frac{2x^2 + 2x - 1}{n(1+x)^2 m} , \quad (7.8)$$

$$a_{e^-e^+}(x) = \frac{1}{nm} , \quad (7.9)$$

$$a_{e^+e^+}(x) = -\frac{2x^2 - 2x - 1}{n(1+x)^2 m} . \quad (7.10)$$

De plus , comme les deux interactions Coulombiennes *électron-électron* et *positron-positron* sont identiques , le système est donc invariant par permutation de l'ensemble des *électrons* avec l'ensemble des *positrons* . Il en résulte que le paramètre  $x$  est obligatoirement égal à 1 . Il s'ensuit qu'on ne dispose pas dans ce cas de paramètres variationnels , ce qui signifie que le problème de maximisation ne se pose plus , et les expressions (7.8) à (7.10) se simplifient en

$$a_{e^-e^-} = a_{e^-e^+} = a_{e^+e^+} = \frac{1}{nm} . \quad (7.11)$$

Par conséquent , l'ancienne borne inférieure optimale  $E^{\text{ancienne}}$  sera donnée par

$$E^{\text{ancienne}} = \frac{-q^4 m}{4} n^3 . \quad (7.12)$$

Pour la nouvelle borne inférieure optimale , les  $a_{e^-e^-}$  ,  $a_{e^+e^+}$  et  $a_{e^-e^+}$  , obtenus respectivement à partir des expressions ((5.111),(5.112),(5.113)) pour  $a_{mm}$  ,  $a_{MM}$  et  $a_{mM}$  en remplaçant  $M$  par  $m$  , dépendent de deux paramètres  $\ell$  et  $p$  . De plus , comme les deux interactions Coulombiennes *électron-électron* et *positron-positron* sont identiques , le système est donc invariant dans une permutation globale des  $n$  *électrons* avec les  $n$  *positrons* , ce qui se traduit par la relation suivante entre les deux paramètres  $p$  et  $\ell$

$$p = -\ell . \quad (7.13)$$

$a_{e^-e^-}$  ,  $a_{e^+e^+}$  et  $a_{e^-e^+}$  s'expriment alors en fonction d'un seul paramètre ,  $\ell$  par exemple

$$a_{e^-e^-}(\ell) = a_{e^+e^+}(\ell) = \frac{(2n^2 - 4n + 1)\ell^2 + 2(2n - 1)\ell + 1}{n(1 - \ell + \ell n)^2 m} \quad (7.14)$$

et

$$a_{e^-e^+}(\ell) = \frac{4n}{(2n - 2\ell n + 2n^2\ell)^2 m} . \quad (7.15)$$

La nouvelle borne inférieure optimale sera obtenue en maximisant le membre de droite de

(7.7)

$$E \geq \max_{\ell} \left( \frac{-1}{4} \frac{q^4}{a_{e^+e^-}(\ell)} n^2 \right) , \quad (7.16)$$

ou encore en remplaçant  $a_{e^+e^-}$  par son expression explicite (7.15)

$$E \geq E^{\text{nouvelle}} , \quad (7.17)$$

avec

$$E^{\text{nouvelle}} = \max_{\ell} \left[ -\frac{n^3}{4} ((n-1)\ell + 1)^2 m q^4 \right] . \quad (7.18)$$

Il est clair que si on ne tient pas compte des contraintes de positivité des  $a_{ij}$

$$\max_{\ell} \left( -\frac{n^3}{4} ((n-1)\ell + 1)^2 m q^4 \right) = 0$$

et ce maximum correspond à  $\ell = \frac{1}{1-n}$  ( $n > 1$ ). Cette valeur de  $\ell$  mène à des valeurs négatives pour  $a_{e^-e^-}$  et  $a_{e^+e^+}$  et est donc inacceptable. Mais l'expression à maximiser dans le membre de droite de (7.18) est une forme quadratique en  $\ell$ , donc la valeur de  $\ell$  correspondant à  $E^{\text{nouvelle}}$  tout en gardant  $a_{e^-e^-}$  et  $a_{e^+e^+}$  positifs est nécessairement l'une des extrémités du domaine de positivité de ces derniers. Pour que  $a_{e^-e^-}$  et  $a_{e^+e^+}$  soient simultanément positifs, le paramètre  $\ell$  doit vérifier l'inégalité suivante

$$((2n^2 - 4n + 1)\ell^2 + (4n - 2)\ell + 1) \geq 0 . \quad (7.19)$$

Le polynôme du deuxième degré en  $\ell$  intervenant dans le membre de gauche de l'inégalité précédente admet deux racines  $\ell_1$  et  $\ell_2$  données respectivement par

$$\begin{aligned} \ell_1 &= \frac{1 - 2n + \sqrt{2n}}{(2n^2 - 4n + 1)} , \\ \ell_2 &= \frac{1 - 2n - \sqrt{2n}}{2n^2 - 4n + 1} . \end{aligned}$$

Nous avons donc d'après la discussion qui précède

$$E^{\text{nouvelle}} = \max \{ E(\ell_1), E(\ell_2) \} ,$$



avec

$$E(\ell_1) = -\frac{1}{4(2n-2+\sqrt{2})^2} n^5 m q^4, \quad (7.20)$$

$$E(\ell_2) = -\frac{(1-\sqrt{2}+\sqrt{2}n)^2}{4(2n^2-4n+1)^2} n^5 m q^4. \quad (7.21)$$

On peut vérifier que  $E(\ell_1)$  est toujours supérieure à  $E(\ell_2)$  pour toute valeur entière positive de  $n$ . Donc la nouvelle borne inférieure optimale pour l'énergie du système  $(e^-e^+)^n$  sera donnée par

$$E^{\text{nouvelle}} = -\frac{1}{4(2n-2+\sqrt{2})^2} n^5 m q^4. \quad (7.22)$$

$E^{\text{nouvelle}}$  s'avère toujours meilleure que  $E^{\text{ancienne}}$ . Le tableau 12 illustre ce fait. On y'a reporté les valeurs numériques de  $E^{\text{ancienne}}$  et  $E^{\text{nouvelle}}$  données respectivement par (7.18) et (7.22) pour différentes valeurs de  $n$  dans des unités où  $h=m=|q|=1$ .

$n$	2	3	4	5	6
$E_{\text{nouvelle}}$	-1.37258	-4.14482	-9.31408	-17.6300	-29.8424
$E_{\text{ancienne}}$	-2.00000	-6.75000	-16.0000	-31.2500	-54.0000

Tableau [12].

## 7.2 Conditions suffisantes d'inexistence de systèmes borroméens à cinq corps [20]

Dans toute la suite, on va considérer un système formé de cinq particules interagissant par des forces à deux corps et décrit par l'Hamiltonien  $H$

$$H = \sum_{i=1}^5 \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 + \sum_{i<j=1}^5 g_{ij} v_{ij}(\vec{r}_{ij}). \quad (7.23)$$

Il est clair que si  $v_{ij}$  est un puits de potentiel, le système à deux corps décrit par l'Hamiltonien

tonien

$$H_{ij}^{(2)} = \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 + \frac{1}{2m_j} \vec{p}_j^2 + g_{ij} v_{ij}(\vec{r}_{ij})$$

sera d'autant plus lié que la constante de couplage  $g_{ij}$  est grande . Il existe donc , pour certaines classes de potentiels , ce qui est le cas par exemple des potentiels à courte portée de la physique nucléaire , une valeur minimale  $g_{ij(\min)}$  de  $g_{ij}$  telle que pour toute valeur de  $g_{ij}$  inférieure à  $g_{ij(\min)}$  , le système à deux corps n'est plus lié . On se restreindra dans toute la suite à de telles classes de potentiels . On peut , sans perte de généralité, redéfinir les potentiels  $v_{ij}(\vec{r}_{ij})$  tel que  $g_{ij(\min)}=1$  . Dans ce cas pour toute valeur de  $g_{ij}$  inférieure à 1 , le système à deux corps n'est plus lié . Autrement dit ,  $g_{ij}=1$  est la valeur minimale de la constante de couplage nécessaire pour lier le système à deux corps de masse réduite  $\mu = m_i m_j / (m_i + m_j)$  .

Notre but dans cette section sera d'obtenir des limites sur les constantes de couplage pour lier un système composé de 5 particules sans qu'aucun de ses sous-systèmes ne soit lié . De tels systèmes sont appelés systèmes borroméens et reçoivent une grande attention aussi bien sur le plan expérimental que sur le plan théorique . Nous allons considérer tour à tour les deux configurations de masses  $(4 \times m, 1 \times M)$  et  $(3 \times m, 2 \times M)$  .

### 7.2.1 Configuration $(4 \times m, 1 \times M)$

En posant

$$g_{12} = g_{13} = g_{14} = g_{23} = g_{24} = g_{34} = g_{mm} \quad ,$$

$$g_{15} = g_{25} = g_{35} = g_{45} = g_{mM} \quad ,$$

$$v_{12} = v_{13} = v_{14} = v_{23} = v_{24} = v_{34} = v_{mm} \quad ,$$

$$v_{15} = v_{25} = v_{35} = v_{45} = v_{mM} \quad ,$$

l'Hamiltonien  $H$  prend dans ce cas la forme

$$H = \sum_{i=1}^4 \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{\vec{p}_5^2}{2M} + g_{mm} \sum_{i<j=1}^4 v_{mm}(\vec{r}_{ij}) + g_{mM} \sum_{i=1}^4 v_{mM}(\vec{r}_{i5}) \quad .$$

La décomposition de la partie cinétique du système à 5 corps correspondant à la nouvelle borne inférieure optimale s'écrit

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^5 \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} &= (b\vec{p}_1 + b\vec{p}_2 + b\vec{p}_3 + b\vec{p}_4 + b'\vec{p}_5) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4 + \vec{p}_5) \\
&+ \frac{a_{mm}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 + \frac{a_{mm}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_3)^2 + \frac{a_{mm}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_4)^2 \\
&+ \frac{a_{mm}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3)^2 + \frac{a_{mm}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_4)^2 + \frac{a_{mm}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2 \\
&+ \frac{a_{mM}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_5 + \ell\vec{p}_2 + \ell\vec{p}_3 + \ell\vec{p}_4)^2 + \frac{a_{mM}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_5 + \ell\vec{p}_1 + \ell\vec{p}_3 + \ell\vec{p}_4)^2 \\
&+ \frac{a_{mM}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_5 + \ell\vec{p}_1 + \ell\vec{p}_2 + \ell\vec{p}_4)^2 + \frac{a_{mM}}{4} (\vec{p}_4 - \vec{p}_5 + \ell\vec{p}_1 + \ell\vec{p}_2 + \ell\vec{p}_3)^2,
\end{aligned}$$

avec

$$a_{mm} = -2 \frac{-6M - 2\ell^2 M - 8\ell M + \ell^2 m - 2\ell m + m}{(3\ell + 5)^2 mM}, \quad (7.24)$$

$$a_{mM} = 2 \frac{M + 4m}{(3\ell + 5)^2 mM}. \quad (7.25)$$

En désignant toujours par  $|\Psi\rangle$  l'état fondamental de l'Hamiltonien  $H$  et par  $E$  l'énergie correspondante

$$\begin{aligned}
E &= \langle \Psi | \frac{a_{mm}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 + g_{mm} v_{mm}(\vec{r}_{12}) | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{a_{mm}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_3)^2 + g_{mm} v_{mm}(\vec{r}_{13}) | \Psi \rangle \\
&+ \langle \Psi | \frac{a_{mm}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_4)^2 + g_{mm} v_{mm}(\vec{r}_{14}) | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{a_{mm}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3)^2 + g_{mm} v_{mm}(\vec{r}_{23}) | \Psi \rangle \\
&+ \langle \Psi | \frac{a_{mm}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_4)^2 + g_{mm} v_{mm}(\vec{r}_{24}) | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{a_{mm}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2 + g_{mm} v_{mm}(\vec{r}_{34}) | \Psi \rangle \\
&+ \langle \Psi | \frac{a_{mM}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_5 + \ell\vec{p}_2 + \ell\vec{p}_3 + \ell\vec{p}_4)^2 + g_{mM} v_{mM}(\vec{r}_{15}) | \Psi \rangle \\
&+ \langle \Psi | \frac{a_{mM}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_5 + \ell\vec{p}_1 + \ell\vec{p}_3 + \ell\vec{p}_4)^2 + g_{mM} v_{mM}(\vec{r}_{25}) | \Psi \rangle \\
&+ \langle \Psi | \frac{a_{mM}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_5 + \ell\vec{p}_1 + \ell\vec{p}_2 + \ell\vec{p}_4)^2 + g_{mM} v_{mM}(\vec{r}_{35}) | \Psi \rangle \\
&+ \langle \Psi | \frac{a_{mM}}{4} (\vec{p}_4 - \vec{p}_5 + \ell\vec{p}_1 + \ell\vec{p}_2 + \ell\vec{p}_3)^2 + g_{mM} v_{mM}(\vec{r}_{45}) | \Psi \rangle.
\end{aligned} \quad (7.26)$$

Pour obtenir  $E$  négative, l'une au moins des valeurs moyennes du second membre de (7.26) doit être négative. Ce qui signifie aussi que si les valeurs moyennes du second membre de (7.26) sont toutes positives, alors  $E$  est forcément positive et par conséquent le système à cinq corps n'est même pas lié, et donc à fortiori non borroméen.

Or , d'après le principe variationnel

$$\begin{aligned} & \langle \Psi | a_{mm} \frac{1}{4} (\vec{p}_i - \vec{p}_j)^2 + g_{mm} v_{mm}(\vec{r}_{ij}) | \Psi \rangle \\ = & ma_{mm} \langle \Psi | \frac{1}{m} \left( \frac{\vec{p}_i - \vec{p}_j}{2} \right)^2 + \frac{g_{mm}}{ma_{mm}} v_{mm}(\vec{r}_{ij}) | \Psi \rangle \geq ma_{mm} E^{(2)} \left( m, \frac{g_{mm}}{ma_{mm}} \right) \end{aligned}$$

pour  $i, j \neq 5$  et

$$\begin{aligned} & \langle \Psi | a_{mM} \frac{1}{4} (\vec{p}_i - \vec{p}_5 + \ell \vec{p}_j + \ell \vec{p}_k + \ell \vec{p}_n)^2 + g_{mM} v_{mM}(\vec{r}_{i5}) | \Psi \rangle \\ = & \frac{2mM}{m+M} a_{mM} \langle \Psi | \frac{m+M}{2mM} \left( \frac{\vec{p}_i - \vec{p}_5 + \ell \vec{p}_j + \ell \vec{p}_k + \ell \vec{p}_n}{2} \right)^2 \\ & + \frac{m+M}{2mM a_{mM}} g_{mM} v_{mM}(\vec{r}_{i5}) | \Psi \rangle \geq \frac{2mM}{m+M} a_{mM} E^{(2)'} \left( \frac{2mM}{m+M}, \frac{m+M}{2mM a_{mM}} g_{mM} \right) , \end{aligned}$$

pour  $(i, j, k, n) = (1, 2, 3, 4)$  à une permutation près , avec  $E^{(2)}(\mu, \lambda)$  et  $E^{(2)' }(\mu, \lambda)$  désignant respectivement les énergies des états fondamentaux des Hamiltoniens à deux corps

$$H^{(2)} = \frac{1}{\mu} \vec{p}^2 + \lambda v_{mm}(\vec{r}) \quad (7.27)$$

et

$$H^{(2)'} = \frac{1}{\mu} \vec{p}^2 + \lambda v_{mM}(\vec{r}) . \quad (7.28)$$

Une condition suffisante pour que le second membre de (7.26) soit positif est que  $E^{(2)} \left( m, \frac{g_{mm}}{ma_{mm}} \right)$  et  $E^{(2)' } \left( \frac{2mM}{m+M}, \frac{m+M}{2mM a_{mM}} g_{mM} \right)$  soient simultanément positives , ce qui signifie que les Hamiltoniens correspondants n'admettent pas d'états liés , c'est-à-dire en utilisant les normalisations adoptées ci-dessus

$$\begin{aligned} \frac{1}{ma_{mm}} g_{mm} & \leq 1 , \\ \frac{m+M}{2mM a_{mM}} g_{mM} & \leq 1 , \end{aligned}$$

ou en utilisant les expressions explicites de  $a_{mm}$  et  $a_{mM}$  ((7.24),(7.25))

$$g_{mm} \leq \frac{1}{2} - 2 \frac{(\ell-1)^2}{(3\ell+5)^2} \frac{(M+4m)}{4M} ,$$

$$g_{mM} \leq \frac{4(M+4m)}{m+M} \frac{1}{(3\ell+5)^2} .$$

Posons

$$h := \frac{1}{2} - 2 \frac{(\ell-1)^2}{(3\ell+5)^2} \frac{(M+4m)}{4M} \quad (7.29)$$

et

$$k := \frac{4(M+4m)}{m+M} \frac{1}{(3\ell+5)^2} . \quad (7.30)$$

De (7.30) on tire

$$\ell = -\frac{5}{3} \pm \frac{1}{3} \sqrt{\frac{4(M+4m)}{(m+M)k}} . \quad (7.31)$$

En reportant (7.31) dans (7.29) on obtient

$$h_{\pm}(k) = -\frac{8}{9} \frac{m+M}{M} k + \frac{4M-2m}{9M} \pm \frac{4}{9M} \sqrt{(M+4m)(m+M)k} ,$$

ou en posant  $x := \frac{m}{M}$

$$h_{\pm}(k) = -\frac{8}{9} (x+1)k - \frac{2}{9} (x-2) \pm \frac{4}{9} \sqrt{(4x+1)(x+1)k} .$$

On remarque que  $h_+(k)$  est toujours supérieure à  $h_-(k)$  pour toutes les valeurs de  $x$  et de  $k$ . Par conséquent, la courbe représentative de  $h_+(k)$  avec  $k > 0$  et  $h_+ > 0$  définit une limite inférieure pour la liaison du système à 5 corps sans la liaison des sous-systèmes.

Nous avons

$$\frac{\partial}{\partial k} h_+(k) = \frac{2(x+1)}{9} \left( \sqrt{\left( \frac{4x+1}{(x+1)k} \right)} - 4 \right) .$$

Et par conséquent

$$\frac{\partial}{\partial k} h_+(k) \geq 0 \quad \text{si } 0 \leq k \leq \frac{4x+1}{16(x+1)}$$

et

$$\frac{\partial}{\partial k} h_+(k) \leq 0 \quad \text{si } k \geq \frac{4x+1}{16(x+1)} .$$

Il s'ensuit que la valeur maximale de  $h_+$  correspond à  $k = \frac{4x+1}{16(x+1)}$  et vaut  $1/2$ . Ce qui signifie que le domaine d'inexistence de systèmes borroméens à cinq corps est toujours non vide.

Nous avons donc obtenu une limite inférieure pour l'existence de systèmes borroméens à cinq corps . Précisons ceci sur l'exemple  $x = 0.1$  . Sur la figure 8 on a tracé la courbe  $h_+(k)$  en rouge et également la courbe  $h_-(k)$  en bleu .

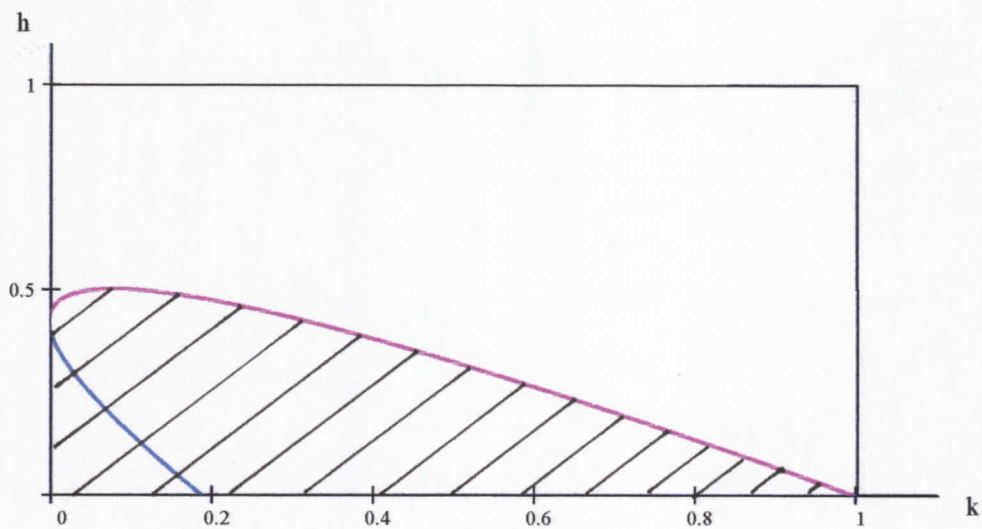


Figure 8

La zone hachurée correspond à des valeurs pour le couple de constantes de couplage  $(g_{mm}, g_{mM})$ ,  $(g_{mm} = k, g_{mM} = h)$  , pour lesquelles le système à cinq corps n'est même pas lié , et donc à fortiori non borroméen .

### 7.2.2 Configuration $(3 \times m, 2 \times M)$

Posons

$$g_{12} = g_{13} = g_{23} = g_{mm}$$

$$g_{14} = g_{15} = g_{24} = g_{25} = g_{34} = g_{35} = g_{mM}$$

$$g_{45} = g_{MM}$$

et

$$v_{12} = v_{13} = v_{23} = v_{mm}$$

$$v_{14} = v_{15} = v_{24} = v_{25} = v_{34} = v_{35} = v_{mM}$$

$$v_{45} = v_{MM} .$$

L'Hamiltonien  $H$  (7.23) prend dans ce cas la forme

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2m} \vec{p}_i^2 + \sum_{i=4}^5 \frac{1}{2M} \vec{p}_i^2 + g_{mm} [v_{mm}(\vec{r}_{12}) + v_{mm}(\vec{r}_{13}) + v_{mm}(\vec{r}_{23})] \\
& + g_{mM} [v_{mM}(\vec{r}_{14}) + v_{mM}(\vec{r}_{15}) + v_{mM}(\vec{r}_{24}) \\
& + v_{mM}(\vec{r}_{25}) + v_{mM}(\vec{r}_{34}) + v_{mM}(\vec{r}_{35})] \\
& + g_{MM} v_{MM}(\vec{r}_{45}) .
\end{aligned}$$

En utilisant les résultats de la section 6.2.1

$$\begin{aligned}
E = & \langle \Psi | a_{mm} \frac{1}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 + g_{mm} v_{mm}(\vec{r}_{12}) | \Psi \rangle \\
& + \langle \Psi | a_{mm} \frac{1}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_3)^2 + g_{mm} v_{mm}(\vec{r}_{13}) | \Psi \rangle \\
& + \langle \Psi | a_{mm} \frac{1}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3)^2 + g_{mm} v_{mm}(\vec{r}_{23}) | \Psi \rangle \\
& + \langle \Psi | a_{mM} \frac{1}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_4 + \ell \vec{p}_2 + \ell \vec{p}_3 + p \vec{p}_5)^2 + g_{mM} v_{mM}(\vec{r}_{14}) | \Psi \rangle \\
& + \langle \Psi | a_{mM} \frac{1}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_4 + \ell \vec{p}_1 + \ell \vec{p}_3 + p \vec{p}_5)^2 + g_{mM} v_{mM}(\vec{r}_{24}) | \Psi \rangle \\
& + \langle \Psi | a_{mM} \frac{1}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_4 + \ell \vec{p}_1 + \ell \vec{p}_2 + p \vec{p}_5)^2 + g_{mM} v_{mM}(\vec{r}_{34}) | \Psi \rangle \\
& + \langle \Psi | a_{mM} \frac{1}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_5 + \ell \vec{p}_2 + \ell \vec{p}_3 + p \vec{p}_4)^2 + g_{mM} v_{mM}(\vec{r}_{15}) | \Psi \rangle \\
& + \langle \Psi | a_{mM} \frac{1}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_5 + \ell \vec{p}_1 + \ell \vec{p}_3 + p \vec{p}_4)^2 + g_{mM} v_{mM}(\vec{r}_{25}) | \Psi \rangle \\
& + \langle \Psi | a_{mM} \frac{1}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_5 + \ell \vec{p}_1 + \ell \vec{p}_2 + p \vec{p}_4)^2 + g_{mM} v_{mM}(\vec{r}_{35}) | \Psi \rangle \\
& + \langle \Psi | a_{MM} \frac{1}{4} (\vec{p}_4 - \vec{p}_5)^2 + g_{MM} v_{MM}(\vec{r}_{45}) | \Psi \rangle , \tag{7.32}
\end{aligned}$$

avec

$$a_{mm} = 2 \frac{(2\ell + 1 - p)(2\ell + 7 - 3p)M - 2(\ell - 1)^2 m}{(4\ell + 5 - 3p)^2 m M} , \tag{7.33}$$

$$a_{mM} = 2 \frac{2M + 3m}{(4\ell + 5 - 3p)^2 m M} , \tag{7.34}$$

$$a_{MM} = 2 \frac{-3(1 + p)^2 M + 4(2 + \ell)(2\ell + 1 - 3p)m}{(4\ell + 5 - 3p)^2 m M} . \tag{7.35}$$

$E$  est forcément positive si tous les termes du second membre de (7.32) le sont . Mais en

vertu du principe variationnel

$$\begin{aligned} & \langle \Psi | a_{mm} \frac{1}{4} (\vec{p}_i - \vec{p}_j)^2 + g_{mm} v_{mm}(\vec{r}_{ij}) | \Psi \rangle \\ &= m a_{mm} \langle \Psi | \frac{1}{m} \left( \frac{\vec{p}_i - \vec{p}_j}{2} \right)^2 + \frac{g_{mm}}{m a_{mm}} v_{mm}(\vec{r}_{ij}) | \Psi \rangle \geq m a_{mm} E^{(2)} \left( m, \frac{g_{mm}}{m a_{mm}} \right), \end{aligned}$$

pour  $(i \neq j) = 1, 2, 3$ ,

$$\begin{aligned} & \langle \Psi | a_{mM} \frac{1}{4} (\vec{p}_i - \vec{p}_j + \ell \vec{p}_q + \ell \vec{p}_k + p \vec{p}_n)^2 + g_{mM} v_{mM}(\vec{r}_{ij}) | \Psi \rangle \\ &= \frac{2mM}{m+M} a_{mM} \langle \Psi | \frac{m+M}{2mM} \left( \frac{\vec{p}_i - \vec{p}_j + \ell \vec{p}_q + \ell \vec{p}_k + p \vec{p}_n}{2} \right)^2 \\ & \quad + \frac{m+M}{2mM a_{mM}} g_{mM} v_{mM}(\vec{r}_{ij}) | \Psi \rangle \geq \frac{2mM}{m+M} a_{mM} E^{(2)'} \left( \frac{2mM}{m+M}, \frac{m+M}{2mM a_{mM}} g_{mM} \right), \end{aligned}$$

pour  $(i, q, k) = (1, 2, 3)$ ,  $(j, n) = (4, 5)$  à une permutation près, et

$$\begin{aligned} & \langle \Psi | a_{MM} \frac{1}{4} (\vec{p}_4 - \vec{p}_5)^2 + g_{MM} v_{MM}(\vec{r}_{45}) | \Psi \rangle \\ &= M a_{MM} \langle \Psi | \frac{1}{M} \left( \frac{\vec{p}_4 - \vec{p}_5}{2} \right)^2 + \frac{g_{MM}}{M a_{MM}} v_{MM}(\vec{r}_{45}) | \Psi \rangle \geq M a_{MM} E^{(2)''} \left( M, \frac{g_{MM}}{M a_{MM}} \right), \end{aligned}$$

où  $E^{(2)}(\mu, \lambda)$ ,  $E^{(2)'}(\mu, \lambda)$  et  $E^{(2)''}(\mu, \lambda)$  désignent respectivement les énergies des états fondamentaux des Hamiltoniens à deux corps (7.27), (7.28) et

$$H^{(2)''} = \frac{1}{\mu} \vec{p}^2 + \lambda v_{MM}(\vec{r}) \quad (7.36)$$

Il s'ensuit qu'une condition suffisante pour que le second membre de (7.32) soit positif est que  $E^{(2)}\left(m, \frac{g_{mm}}{m a_{mm}}\right)$ ,  $E^{(2)'}\left(\frac{2mM}{m+M}, \frac{m+M}{2mM a_{mM}} g_{mM}\right)$  et  $E^{(2)''}\left(M, \frac{g_{MM}}{M a_{MM}}\right)$  soient simultanément positives, ce qui, en utilisant les normalisations adoptées, se traduit par

$$\begin{aligned} \frac{1}{m a_{mm}} g_{mm} &\leq 1, \\ \frac{m+M}{2mM a_{mM}} g_{mM} &\leq 1 \end{aligned}$$

et

$$\frac{1}{M a_{MM}} g_{MM} \leq 1.$$



Posons

$$\tilde{g}_{mm} := ma_{mm} = \frac{2}{3} - \frac{4}{3} \frac{(\ell - 1)^2}{(4\ell + 5 - 3p)^2} \frac{(2M + 3m)}{M}, \quad (7.37)$$

$$\tilde{g}_{mM} := \frac{2mM}{m + M} a_{mM} = \frac{4}{(4\ell + 5 - 3p)^2} \frac{2M + 3m}{(m + M)} \quad (7.38)$$

et

$$\tilde{g}_{MM} := Ma_{MM} = 1 - \frac{3(1 + p)^2}{(4\ell + 5 - 3p)^2} \frac{(2M + 3m)}{m}, \quad (7.39)$$

où on a utilisé les expressions explicites de  $a_{mm}$ ,  $a_{mM}$  et de  $a_{MM}$  ((7.33)-(7.35)).

(7.38) donne

$$(4\ell + 5 - 3p)^2 = \frac{4}{\tilde{g}_{mM}} \frac{2M + 3m}{(m + M)}, \quad (7.40)$$

ou encore

$$\sqrt{\tilde{g}_{mM}} = \varepsilon_1 \frac{2}{(4\ell + 5 - 3p)} \sqrt{\frac{2M + 3m}{(m + M)}}, \quad (7.41)$$

où  $\varepsilon_1 = \pm 1$ . En reportant (7.40) dans (7.37) et (7.39) on tire les valeurs de  $\ell$  et  $p$  en fonction de  $\tilde{g}_{mm}$ ,  $\tilde{g}_{mM}$  et  $\tilde{g}_{MM}$

$$\ell = 1 + \varepsilon_2 \sqrt{\frac{M}{(m + M)} \frac{(2 - 3\tilde{g}_{mm})}{\tilde{g}_{mM}}}, \quad (7.42)$$

$$p = -1 + \varepsilon_3 \sqrt{\frac{4}{3} \frac{(1 - \tilde{g}_{MM})}{\tilde{g}_{mM}} \frac{m}{(m + M)}}, \quad (7.43)$$

avec  $\varepsilon_2, \varepsilon_3 = \pm 1$ . En remplaçant  $\ell$  et  $p$  dans (7.41) par leurs expressions (7.42) et (7.43), on obtient

$$\sqrt{\tilde{g}_{mM}} = \frac{\varepsilon_1}{6} \sqrt{\frac{2M + 3m}{(m + M)}} - \frac{\varepsilon_2}{3} \sqrt{\frac{M(2 - 3\tilde{g}_{mm})}{(m + M)}} + \frac{\varepsilon_3}{4} \sqrt{\frac{4m(1 - \tilde{g}_{MM})}{3(m + M)}},$$

ou en posant  $x := \frac{m}{M}$

$$\sqrt{\tilde{g}_{mM}} = \frac{\varepsilon_1}{6} \sqrt{\frac{2 + 3x}{x + 1}} - \frac{\varepsilon_2}{3} \sqrt{\frac{(2 - 3\tilde{g}_{mm})}{x + 1}} + \frac{\varepsilon_3}{4} \sqrt{\frac{4x(1 - \tilde{g}_{MM})}{3(x + 1)}},$$

avec  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3 = \pm 1$ .

Le jeu de paramètres  $(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3) = (-1, +1, -1)$  est exclu car  $\sqrt{\tilde{g}_{mM}}$  est alors nécessairement

négative . D'autre par , on peut montrer que  $\sqrt{\tilde{g}_{mM}}$  correspondant au jeu de paramètres  $(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3)=(1, -1, 1)$  est toujours supérieure a toutes les  $\sqrt{\tilde{g}_{mM}}$  correspondant aux autres jeux de paramètres  $(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3)$  . Il en résulte que c'est la courbe représentative de

$$\sqrt{\tilde{g}_{mM}} = \frac{1}{6}\sqrt{\frac{2+3x}{x+1}} + \frac{1}{3}\sqrt{\frac{(2-3\tilde{g}_{mm})}{x+1}} + \frac{1}{4}\sqrt{\frac{4x(1-\tilde{g}_{MM})}{3(x+1)}}$$

qui définit une limite inférieure pour l'obtention de systèmes liés à 5 corps sans qu'aucun de leurs sous-systèmes ne le soit , c'est-à-dire pour l'obtention de systèmes borroméens à cinq corps.

## Chapitre 8

# Conclusion

Dans cette thèse , nous avons réalisé un certain nombre de travaux , tous situés dans le domaine des systèmes à petit nombre de corps .

Nous avons commencé , au chapitre 2 , par dériver certains lois et théorèmes utilisés par la suite . Nous avons en particulier dérivé les lois d'échelle pour des potentiels en loi de puissance

$$V(\vec{r}) = \text{sign}(\nu) r^\nu$$

ou logarithmiques

$$V(\lambda, \vec{r}) = \lambda \log\left(\frac{r}{r_0}\right) ,$$

le théorème du viriel et la règle de Schwinger . Tout ceci dans le cas d'une seule particule dans un champ de force central ou d'un système de deux particules interagissant par un potentiel invariant par translation et par rotation . Nous avons ensuite généralisé ces résultats pour un nombre quelconque de particules .

Au chapitre 3 , nous avons proposé une nouvelle classe de fonctions d'onde d'essai pour des systèmes à deux corps interagissant par des forces dérivées de potentiels invariants par translation et par rotation . Les fonctions d'onde d'essai proposées ont comme point de départ les résultats exacts connus dans les deux cas des potentiels Coulombien et harmonique . Nous avons ensuite appliqué la méthode à des mésons lourds vus comme des systèmes *quark-antiquark* dans le cadre des modèles de potentiel avec un potentiel phénoménologique en loi de puissance. Les énergies approximatives ainsi obtenues sont très voisines des résultats numériques exacts et

montrent par conséquent l'efficacité de la méthode .

Dans le chapitre 4 , nous avons dérivé en détail les expressions analytiques exactes des éléments de matrice de diverses observables entre deux Gaussiennes corrélées . Nous avons considéré les observables énergie cinétique , énergie potentielle et corrélation à courte portée ainsi que les opérateurs intervenant dans l'expression de la règle de Schwinger généralisée . Ces expressions analytiques permettent de réduire les calculs numériques dans le cas du développement systématique sur des Gaussiennes généralisées à la seule détermination des paramètres variationnels de poids et de portée . Ceci est très intéressant , car on a toujours avantage à réduire le calcul numérique au maximum . Nous avons ensuite appliqué les résultats du chapitre 4 dans le cas le plus simple non trivial possible , à savoir un système à trois corps approximé par une seule Gaussienne .

Dans le chapitre 5 , nous avons commencé d'abord par présenter une méthode d'obtention de bornes inférieures pour les énergies des états fondamentaux de systèmes à  $N$  corps , régis par une cinématique non-relativiste et interagissant par des forces à deux corps dérivées de potentiels invariants par translation . A chaque borne inférieure est associée une décomposition du terme d'énergie cinétique , auquel correspond une décomposition de l'Hamiltonien du système qui prend la forme de la somme d'un terme dont la valeur moyenne dans un état invariant par translation est nulle et de  $N(N - 1)/2$  (le nombre de paires du système à  $N$  corps) Hamiltoniens à deux corps . En tenant compte de l'invariance par translation et en appliquant le principe variationnel , nous obtenons une borne inférieure pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à  $N$  corps . Nous avons considéré deux décompositions du terme d'énergie cinétique et obtenu par conséquent deux bornes inférieures . Une caractéristique remarquable de ces décompositions est qu'elles dépendent de paramètres , ce qui mène à des bornes inférieures qui dépendent elles aussi de ces mêmes paramètres . Donc en fait , pour chaque décomposition on obtient toute une série de bornes inférieures , une borne inférieure pour chaque jeu de paramètres . La meilleure des bornes inférieures dans chaque série est celle qui correspond aux valeurs des paramètres maximisant la borne inférieure . Implicitement, c'est de cette borne dont on parle , d'où la terminologie de borne inférieure optimale . On a dérivé deux bornes inférieures optimales , l'une baptisée ancienne borne inférieure optimale et l'autre nouvelle borne inférieure optimale , appellation justifiée par leur ordre d'apparition chrono-

gique . Il s'avère que la nouvelle borne inférieure est toujours meilleure ou au moins aussi bonne que l'ancienne borne inférieure . Une explication plausible de la supériorité de la nouvelle borne inférieure optimale vis-à-vis de l'ancienne borne inférieure optimale réside dans le nombre de paramètres impliqués,  $N(N-1)(N-2)/2$  et  $N(N-1)/2$  paramètres pour la nouvelle borne et l'ancienne borne respectivement . Nous avons dans ce chapitre dérivé quelques caractéristiques générales de ces deux bornes . En particulier , les valeurs des paramètres correspondant aux bornes inférieures optimales obéissent à certaines relations indépendantes de la forme du potentiel d'interaction . Dans le cas de l'ancienne borne inférieure optimale on a une seule relation entre les paramètres tandis que dans le cas de la nouvelle borne inférieure optimale on a (au plus)  $N(N-1)(N-3)/2 + 1$  relations . Ces relations ne sont pas à proprement parler des contraintes. Pour preuve , on peut ignorer les relations entre les paramètres au maximum, maximiser sur tous les paramètres et vérifier à la fin que ces relations sont bien satisfaites, numériquement , au maximum . Cependant , vu la complexité rapidement croissante des problèmes d'optimisation non linéaire , on a avantage à tenir compte de ces relations dès le départ, ce qui simplifie considérablement le problème d'optimisation . Il vaut la peine de signaler la particularité du cas à trois corps  $N = 3$  , auquel cas les nombres de paramètres intervenant dans les deux décompositions ancienne et nouvelle est le même . Il en est également de même des nombres de relations au maximum . Il n'est donc pas surprenant que dans ce cas particulier  $N = 3$  , les deux bornes inférieures optimales s'avèrent aussi bonne l'une que l'autre . En fait, on peut montrer que les deux décompositions du terme d'énergie cinétique sont équivalentes dans ce cas . Nous avons conclu que la nouvelle borne inférieure optimale est saturée dans le cas de forces harmoniques indépendamment de la configuration de masses considérée et des constantes de couplage . Ceci n'est pas le cas de l'ancienne borne inférieure optimale où , à part le cas  $N = 3$  , la saturation n'est obtenue que pour des configurations de masses du type  $((N-1) \times m, 1 \times M)$  . On a montré que les deux bornes inférieures ancienne et nouvelle sont alors équivalentes pour ce type de configurations . On a considéré en détail le cas des configurations de masses  $(n \times m, n' \times M)$  et on a traité les systèmes de  $N$  particules de masses toutes égales à  $m$  plongées dans un puits de potentiel comme des configurations  $(N \times m, 1 \times M)$  dans la limite  $M$  tendant vers l'infini .

Dans le chapitre 6 , les deux bornes inférieures optimales sont considérées en détail dans

le cas des systèmes à cinq corps . On s'est attaché en particulier à obtenir les relations entre les valeurs des paramètres correspondant aux bornes inférieures optimales . On s'est également attaché à la dérivation des expressions des coefficients  $a_{ij}$  , jouant le rôle de masses inverses pour les systèmes fictifs à deux corps , et à la détermination de leur domaine de positivité (domaine des paramètres tel que tous les  $a_{ij}$  soient positifs) dans les deux configurations  $(4 \times m, 1 \times M)$  et  $(3 \times m, 2 \times M)$  .

Enfin , au chapitre 7 , Comme application physique des deux décompositions du terme d'énergie cinétique et des bornes inférieures optimales correspondantes ancienne et nouvelle , nous avons obtenu des bornes inférieures pour les énergies des états fondamentaux des molécules positroniums  $(e^-e^+)^n$  et avons dérivé des conditions suffisantes pour l'inexistence de systèmes borroméens à cinq corps et ce pour les configurations de masses  $(4 \times m, 1 \times M)$  et  $(3 \times m, 2 \times M)$  .

## Annexe A

# Les transformations orthogonales

Nous allons donner dans cet appendice un critère pour reconnaître une transformation orthogonale et faire usage de ce critère pour donner quelques éclaircissements sur le calcul du terme centrifuge de la section 2.2. du chapitre 4 .

Commençons d'abord par caractériser une transformation orthogonale . Considérons deux  $N$ -uplets de vecteurs  $(\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_N)$  et  $(\vec{w}_1, \dots, \vec{w}_N)$  liés par une transformation linéaire définie par une matrice carrée  $N \times N$   $A$  , c'est-à-dire

$$\vec{w}_j = \sum_{k=1}^N A_{jk} \vec{v}_k \quad . \quad (\text{A.1})$$

Nous pouvons donner un critère pour décider s'il s'agit d'une transformation orthogonale ou non . Faisons comme si les  $N$  vecteurs  $\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_N$  sont orthonormalisés , c'est-à-dire

$$\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j = \delta_{ij} \quad i, j=1, \dots, N \quad (\text{A.2})$$

et montrons alors que la transformation définie par la matrice carrée  $N \times N$   $A$  est alors orthogonale , c'est-à-dire  $AA^T = A^T A = I$  , si et seulement si les  $N$  vecteurs  $\vec{w}_1, \dots, \vec{w}_N$  , liés aux vecteurs  $\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_N$  par (A.1) sont orthonormalisés . En effet

$$\begin{aligned} \vec{w}_i \cdot \vec{w}_j &= \sum_{k=1}^N A_{ik} \vec{v}_k \cdot \sum_{\ell=1}^N A_{j\ell} \vec{v}_\ell = \sum_{k,\ell=1}^N A_{ik} A_{j\ell} \vec{v}_k \cdot \vec{v}_\ell \\ &= \sum_{k,\ell=1}^N A_{ik} A_{j\ell} \delta_{k\ell} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{k=1}^N A_{ik} A_{jk} \\
&= \sum_{k=1}^N A_{ik} A_{kj}^T = (AA^T)_{ij} \quad .
\end{aligned}$$

Donc les  $\vec{w}_i$  sont orthonormalisés si et seulement si la transformation définie par la matrice  $A$  est orthogonale . Nous pouvons , ce que nous allons faire plus bas , construire des transformations orthogonales en utilisant ce critère .

Construisons une transformation orthogonale entre  $(\vec{Z}_1, \vec{Z}_2, \vec{Z}_3)$  et  $(\vec{Z}'_1, \vec{Z}'_2, \vec{Z}'_3)$  telle que

$$\vec{Z}'_1 = \vec{T}_1 \quad (\text{A.3})$$

$$\vec{Z}'_2 = b(\vec{T}_1 + x\vec{T}_2) \quad (\text{A.4})$$

$$\vec{Z}'_3 = c(\vec{T}_1 + y\vec{T}_2 + z\vec{T}_3) \quad , \quad (\text{A.5})$$

où  $\vec{T}_1$  ,  $\vec{T}_2$  et  $\vec{T}_3$  sont donnés en fonction de  $\vec{Z}_1$  ,  $\vec{Z}_2$  et  $\vec{Z}_3$  par les relations (4.40) . Appliquons le critère d'orthogonalité dérivé plus haut . Remarquons tout d'abord que le choix  $\vec{Z}'_1 = \vec{T}_1$  est permis car on peut facilement vérifier , en utilisant l'expression de  $\vec{T}_1$  , que  $\vec{T}_1^2 = 1$  si on suppose  $\vec{Z}_1$  ,  $\vec{Z}_2$  et  $\vec{Z}_3$  orthonormalisés . Attachons maintenant à déterminer les paramètres  $b$  ,  $c$  ,  $x$  ,  $y$  et  $z$  de telle manière qu'il s'agisse d'une transformation orthogonale .

Commençons par fixer  $x$  ,  $y$  et  $z$  en utilisant l'orthogonalité de  $\vec{Z}'_1$  ,  $\vec{Z}'_2$  et  $\vec{Z}'_3$  . Nous avons

$$\vec{Z}'_1 \cdot \vec{Z}'_2 = b(1 + x\vec{T}_1 \cdot \vec{T}_2) = 0 \quad , \quad (\text{A.6})$$

$$\vec{Z}'_1 \cdot \vec{Z}'_3 = c(1 + y\vec{T}_1 \cdot \vec{T}_2 + z\vec{T}_1 \cdot \vec{T}_3) = 0 \quad , \quad (\text{A.7})$$

$$\vec{Z}'_2 \cdot \vec{Z}'_3 = bc(1 + xy\vec{T}_2^2 + (x+y)\vec{T}_1 \cdot \vec{T}_2 + z\vec{T}_1 \cdot \vec{T}_3 + xz\vec{T}_2 \cdot \vec{T}_3) = 0 \quad , \quad (\text{A.8})$$

où on a utilisé le fait que  $\vec{T}_1^2 = 1$  .

Comme  $b \neq 0$  et  $c \neq 0$  , sinon  $\vec{Z}'_2$  et  $\vec{Z}'_3$  seraient nuls ,

$$\begin{aligned}
1 + x\vec{T}_1 \cdot \vec{T}_2 &= 0 \quad , \\
1 + y\vec{T}_1 \cdot \vec{T}_2 + z\vec{T}_1 \cdot \vec{T}_3 &= 0 \quad , \\
1 + xy\vec{T}_2^2 + (x+y)\vec{T}_1 \cdot \vec{T}_2 + z\vec{T}_1 \cdot \vec{T}_3 + xz\vec{T}_2 \cdot \vec{T}_3 &= 0 \quad ,
\end{aligned} \quad (\text{A.9})$$



soit un système de trois équations à trois inconnues  $x$ ,  $y$  et  $z$ . En utilisant les expressions explicites (4.40) de  $\vec{T}_1$ ,  $\vec{T}_2$  et  $\vec{T}_3$  en fonction de  $\vec{Z}_1$ ,  $\vec{Z}_2$  et  $\vec{Z}_3$  supposés orthonormalisés, on obtient

$$\vec{T}_1 \cdot \vec{T}_2 = \frac{A_u^{1/2} A_{11}^{1/2}}{A_{l1}} , \quad (\text{A.10})$$

$$\vec{T}_1 \cdot \vec{T}_3 = \frac{A_{kk}^{1/2} A_{11}^{1/2}}{A_{k1}} , \quad (\text{A.11})$$

$$\vec{T}_2 \cdot \vec{T}_3 = \frac{A_u^{1/2} A_{kk}^{1/2}}{A_{lk}} \quad (\text{A.12})$$

et

$$T_2^2 = T_3^2 = 1 \quad . \quad (\text{A.13})$$

Les équations (A.9) se réduisent alors à

$$1 + x \frac{A_u^{1/2} A_{11}^{1/2}}{A_{l1}} = 0 , \quad (\text{A.14})$$

$$1 + y \frac{A_u^{1/2} A_{11}^{1/2}}{A_{l1}} + z \frac{A_{kk}^{1/2} A_{11}^{1/2}}{A_{k1}} = 0 , \quad (\text{A.15})$$

$$1 + xy + (x + y) \frac{A_u^{1/2} A_{11}^{1/2}}{A_{l1}} + z \frac{A_{kk}^{1/2} A_{11}^{1/2}}{A_{k1}} + xz \frac{A_u^{1/2} A_{kk}^{1/2}}{A_{lk}} = 0 . \quad (\text{A.16})$$

Les deux équations (A.14) et (A.15) donnent respectivement

$$x = \frac{-A_{l1}}{A_{ii}^{1/2} A_{11}^{1/2}} , \quad (\text{A.17})$$

$$y = \frac{A_{l1}}{A_{ii}^{1/2} A_{11}^{1/2}} \left( -1 - z \frac{A_{jj}^{1/2} A_{11}^{1/2}}{A_{j1}} \right) . \quad (\text{A.18})$$

En reportant (A.17) et (A.18) dans (A.16), on peut tirer l'expression de  $z$

$$z = \frac{A_{k1} A_{lk}}{A_{11}^{1/2} A_{kk}^{1/2} A_{l1}} \left( \frac{A_{ll} A_{11} - A_{l1}^2}{A_{l1} A_{lk} - A_{k1} A_{ll}} \right) = \frac{A_{kk}^{-1/2}}{A_{11}^{-1/2}} \left( \frac{A_{ll}^{-2} - A_{11}^{-1} A_{ll}^{-1}}{A_{ll}^{-1} A_{k1}^{-1} - A_{lk}^{-1} A_{l1}^{-1}} \right) . \quad (\text{A.19})$$

En substituant à  $z$  son expression (A.19) dans (A.18), on obtient l'expression de  $y$

$$y = -\frac{\sqrt{A_{ll}}}{\sqrt{A_{11}}} \frac{A_{11}A_{lk} - A_{1l}A_{1k}}{A_{1l}A_{lk} - A_{1k}A_{1l}} = -\frac{A_{ll}^{-1/2} A_{11}^{-1} A_{lk}^{-1} - A_{1l}^{-1} A_{1k}^{-1}}{A_{11}^{-1/2} A_{1l}^{-1} A_{lk}^{-1} - A_{1k}^{-1} A_{1l}^{-1}} \quad (\text{A.20})$$

Les deux facteurs de proportionnalité  $b$  et  $c$  dans (A.4) et (A.5) seront obtenus en imposant la normalisation de  $\vec{Z}'_2$  et de  $\vec{Z}'_3$ . Nous avons

$$Z_2'^2 = b^2 (\vec{T}'_1 + x \vec{T}'_2)^2 = b^2 (x^2 - 1) = 1. \quad (\text{A.21})$$

$$Z_3'^2 = c^2 (\vec{T}'_1 + y \vec{T}'_2 + z \vec{T}'_3)^2 = c^2 \left( -1 - y^2 + z^2 + 2\frac{y}{x} \right) = 1, \quad (\text{A.22})$$

où on a tenu compte du fait que  $\vec{T}'_1 \cdot \vec{T}'_2 = \vec{T}'_2 \cdot \vec{T}'_3 = 1$  et utilisé les équations (A.9) pour déduire  $\vec{T}'_1 \cdot \vec{T}'_2$ ,  $\vec{T}'_1 \cdot \vec{T}'_3$  et  $\vec{T}'_2 \cdot \vec{T}'_3$  en fonction de  $x$ ,  $y$  et  $z$ . De (A.21) et (A.22) on tire  $b$  et  $c$

$$b = \frac{1}{\sqrt{x^2 - 1}},$$

$$c = \frac{1}{\sqrt{-1 - y^2 + z^2 + 2\frac{y}{x}}}.$$

## Annexe B

# La méthode de Multhopp

La méthode de Multhopp est une méthode de résolution numérique des équations différentielles aux valeurs propres telle que l'équation de Schrödinger radiale réduite

$$\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} U(r) + [E - V_{eff}(r)] U(r) = 0 \quad r \geq 0, \quad (\text{B.1})$$

où  $\mu$ ,  $U(r)$  et  $E$  désignent respectivement la masse réduite du système, la fonction d'onde radiale réduite et l'énergie correspondante.  $V_{eff}(r)$  est le potentiel effectif qui est la somme du potentiel d'interaction  $V(r)$  et du terme centrifuge  $\ell(\ell+1)/2\mu r^2$ .

Généralement la résolution numérique se base sur une division d'un domaine fini. Cependant, le domaine de définition de la fonction d'onde radiale réduite  $U(r)$  solution de l'équation (B.1) n'est pas borné ( $r \in [0, \infty[$ ), d'où la nécessité de construire une bijection de  $[0, \infty[$  sur un domaine borné. Un exemple d'une telle bijection est

$$r = r_0 \frac{x}{1-x} \quad (\text{B.2})$$

ou encore en inversant

$$x = \frac{r}{r+r_0}, \quad (\text{B.3})$$

où  $x \in [0, 1[$  est la nouvelle variable sans dimension et  $r_0$  est un paramètre de même dimension que  $r$  et qui doit être choisi de l'ordre de grandeur du rayon de la fonction d'onde (par exemple

le rayon de Bohr dans le cas du potentiel Coulombien) . Nous avons

$$\frac{d}{dr} = \frac{(x-1)^2}{r_0} \frac{d}{dx} ,$$

et par conséquent

$$\frac{d^2}{dr^2} = \frac{(x-1)^4}{r_0^2} \frac{d^2}{dx^2} + 2 \frac{(x-1)^3}{r_0^2} \frac{d}{dx} .$$

Dans le but d'éliminer le terme en  $\frac{d}{dx}$  , on va adopter le changement de fonction suivant

$$v(x) = \frac{\sqrt{r_0}}{(1-x)} U(r(x)) .$$

L'équation (B.1) s'écrit dans la nouvelle variable  $x$  et la nouvelle fonction  $v(x)$  comme

$$\frac{1}{2\mu} \frac{(1-x)^4}{r_0^2} \frac{d^2}{dx^2} v(x) + V_{eff}(r(x)) v(x) = E v(x) . \quad (B.4)$$

On remarque que  $v(0) = \lim_{x \rightarrow 1} v(x) = 0$  . Il s'ensuit qu'un développement en série de Fourier est possible

$$v(x) := \sum_{i=1}^N a_i \sin(i\pi x) ,$$

où les  $a_i$  sont les coefficients du développement . Pour  $N$  fini , on peut diviser le domaine de définition de  $v(x)$   $[0, 1[$  en  $N+1$  intervalles de même largeur  $h = \frac{1}{N+1}$  . Toutes les informations sur la fonction d'onde sont contenues dans les paramètres de poids  $a_i$  et les valeurs  $v_i$  de  $v(x)$  aux points  $x_i = (i+1)h$

$$v_j := \sum_{i=1}^N a_i \sin(i\pi x_j) . \quad (B.5)$$

En utilisant le fait que

$$\sum_{k=1}^N \sin\left(k \frac{\pi(j+1)}{N+1}\right) \sin\left(k \frac{\pi(i+1)}{N+1}\right) = \frac{N+1}{2} \delta_{ij} , \quad (B.6)$$

on peut inverser (B.5) pour obtenir les poids  $a_i$  en fonction des  $v_j$  et des  $x_j$

$$a_i = 2h \sum_{j=1}^N v_j \sin(i\pi x_j) .$$

Toujours en faisant usage de la relation (B.6) , l'équation (B.4) se simplifie en

$$\frac{1}{\mu} \frac{(x_i - 1)^4}{(N + 1) r_0^2} \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N k^2 \pi^2 \sin(k\pi x_i) \sin(k\pi x_j) v_j - \sum_{j=1}^N [E - V_{eff}(r(x_i))] \delta_{ij} v_j = 0 \quad ,$$

équation qui peut être réécrite comme une équation aux valeurs propres

$$\sum_{i=1}^N A_{ij} v_j = E v_i \quad , \quad (B.7)$$

avec

$$A_{ij} = \pi^2 h \frac{(1 - x_i)^4}{\mu r_0^2} \left( \sum_{k=1}^N k^2 \sin(k\pi x_i) \sin(k\pi x_j) \right) + \delta_{ij} V(r(x_i)) \quad . \quad (B.8)$$

Notons que la matrice  $A$  n'est pas symétrique . Néanmoins , nous pouvons ramener le problème aux valeurs propres (B.7) à celui du problème aux valeurs propres d'une matrice symétrique .

Pour ce faire , définissons un nouveau vecteur  $w$  d'éléments

$$w_j = \frac{1}{(x_j - 1)^2} v_j \quad .$$

En remplaçant  $v$  par son expression en terme de  $w$  , l'équation aux valeurs propres (B.7) se réduit à

$$\sum_{i=1}^N B_{ij} w_j = E w_i \quad , \quad (B.9)$$

où la matrice  $B$  est maintenant une matrice symétrique dont les éléments  $B_{ij}$  sont donnés par

$$B_{ij} = \frac{\pi^2 h}{\mu r_0^2} (1 - x_i)^2 (1 - x_j)^2 \left( \sum_{k=1}^N k^2 \sin(k\pi x_i) \sin(k\pi x_j) \right) + \delta_{ij} V(r(x_i)) \quad . \quad (B.10)$$

La diagonalisation de la matrice  $B$  donne des valeurs approximatives pour les énergies des  $N$  premiers niveaux et des vecteurs d'états correspondants . Il est bon de remarquer que les niveaux les plus bas sont les mieux approximés .

La valeur moyenne d'une observable  $K(r)$  dans l'état  $U^{(n)}(r)$  correspondant au  $n^{ieme}$  niveau excité s'écrit comme une somme discrète . En utilisant par exemple la méthode d'intégration

numérique de Simpson , on obtient en notant  $|n\rangle$  le vecteur  $w^{(n)}$  correspondant au  $n^{ieme}$  niveau

$$\langle n|K(r)|n\rangle = \left(I^{(n)}\right)^{-1} \frac{hr_0}{3} \left( 4 \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \left[w_{2j-2}^{(n)}\right]^2 K(r(x_{2j-2})) + 2 \sum_{j=2}^{(N+1)/2} \left[w_{2j-3}^{(n)}\right]^2 K(r(x_{2j-3})) \right), \quad (B.11)$$

avec  $N$  est obligatoirement impair et

$$I^{(n)} = \langle n|n\rangle = \frac{hr_0}{3} \left( 4 \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \left[w_{2j-2}^{(n)}\right]^2 + 2 \sum_{j=2}^{(N+1)/2} \left[w_{2j-3}^{(n)}\right]^2 \right)$$

est la norme du vecteur  $w^{(n)}$

Les corrélations à courte portée sont aussi des observables faisant intervenir la fonction d'onde en un seul point  $x=0$  . Sachant que

$$|\Psi_n(0)|^2 = \frac{1}{4\pi} \lim_{r \rightarrow 0} \left| \frac{U_n(r)}{r} \right|^2,$$

on obtient en termes de  $w^{(n)}(x)$

$$|\Psi_n(0)|^2 = \frac{1}{\langle n|n\rangle} \frac{1}{4\pi} \frac{1}{r_0^3} \lim_{x \rightarrow 0} \frac{(1-x)^4}{x^2} \left| w^{(n)}(x) \right|^2. \quad (B.12)$$

La valeur de  $x$  la plus proche de zéro est  $x_0=h$  . En remplaçant  $x$  par  $x_0$  dans l'équation (B.12), on obtient une approximation pour  $|\Psi_n(0)|^2$

$$|\Psi_n(0)|^2 \simeq \left(I^{(n)}\right)^{-1} \frac{1}{4\pi} \frac{1}{r_0^3} \frac{N^4}{(N+1)^2} \left| w_0^{(n)} \right|^2. \quad (B.13)$$

Il est clair que l'approximation (B.13) pour  $|\Psi_n(0)|^2$  est d'autant meilleure que  $h$  est d'autant plus petit , la limite  $h \rightarrow 0$  donnant la valeur exacte pour  $|\Psi_n(0)|^2$  . Autrement dit , en utilisant la relation liant le pas  $h$  au nombre de points de discrétisation  $N$  ,  $h = \frac{1}{N+1}$  , l'approximation pour  $|\Psi_n(0)|^2$  est d'autant meilleure que  $N$  est d'autant plus grand , ce qui rend la diagonalisation de la matrice carrée ( $N \times N$ )  $B$  d'autant plus ardue . On peut contourner cette difficulté en faisant appel à la règle de Schwinger (2.32) , ceci donne en utilisant la méthode d'intégration

numérique de Simpson

$$|\Psi_n(0)|^2 \simeq \frac{\mu}{2\pi} \left( I^{(n)} \right)^{-1} \frac{hr_0}{3} \left\{ 4 \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \left[ w_{2j-2}^{(n)} \right]^2 \left| \frac{d}{dr} V_{eff}(r) \right|_{r(x_{2j-2})} + 2 \sum_{j=2}^{(N+1)/2} \left[ w_{2j-3}^{(n)} \right]^2 \left| \frac{d}{dr} V_{eff}(r) \right|_{r(x_{2j-3})} \right\} \quad (B.14)$$

Si nous étudions le comportement des valeurs approximatives de  $|\Psi_n(0)|^2$  obtenues par un calcul direct et via la règle de Schwinger, en fonction du nombre de points de discrétisation  $N$ , nous remarquons une convergence plus rapide pour la règle de Schwinger que pour le calcul direct. Le tableau 13 illustre ceci dans un cas résoluble exactement, à savoir le cas d'un potentiel Coulombien  $V(r) = -r^{-1}$  au quel cas la valeur exacte de  $|\Psi(0)|^2$  vaut  $\frac{1}{8\pi} \simeq 0.03979$  pour le niveau fondamental. On a reporté dans le tableau 13 les valeurs approximatives de  $|\Psi(0)|^2$  obtenues par un calcul direct et par l'entremise de la règle de Schwinger pour différentes valeurs de  $N$  (on a pris  $r_0=1$ ).

$N$	30	100	400	$\infty$
$ \Psi_0(0) _{direct}^2$	0.03830	0.03932	0.03960	0.03979
$ \Psi_0(0) _{Schwin}^2$	0.03935	0.03965	0.03974	

Tableau [13].

# Bibliographie

- [1] J.-M. Richard, Phys. Rep. **212** (1992) 1 .
- [2] S. Fleck et J.-M. Richard, Few-Body Systems **19** (1995) 19 .
- [3] W. Thirring, *A Course in Mathematical Physics*, Vol. **3** (Springer Verlag, 1981) .
- [4] C.Quigg et J. L. Rosner, Phys. Rep. **56** (1979) 167 .
- [5] A. Galindo et P. Pascual, *Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, Madrid, 1989) .
- [6] J. Hiller, J. Sücher et G. Feinberg, Phys. Rev. **A18** (1978) 2399 .
- [7] C. Quigg, *Realizing the potential of quarkonium* , Fermilab-conf (1997)/266-T .
- [8] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, *Mécanique Quantique* (Hermann, Paris, 1977).
- [9] B. Barkat, Thèse de magister, Université de Constantine (1999) .
- [10] A. Martin, Phys. Lett. **93B** (1980) 338 .
- [11] K. J. Miller and M. G. Olsson, Phys. Rev. **D25** (1982) 2383 .
- [12] A. Messiah, *Mécanique Quantique* (Dunod, Paris, 1972) .
- [13] A. Martin, Phys. Lett. **103B** (1981) 51 .
- [14] Review of particle physics, *Particles and Fields*, Phys. Rev. D54, 1, part 1 (July 1996) .
- [15] A. Martin, Phys. Lett. **100B** (1981) 511 .
- [16] F. R. Gantmacher, *Théorie des Matrices* (Dunod, Paris, 1966) .
- [17] J.-L. Basdevant, A. Martin, J.-M. Richard and T. T. Wu, Nucl. Phys. **B393** (1993) 111 .
- [18] A. Metatla, Thèse de magister, Université de Constantine (1997) .
- [19] A. Benslama, A. Metatla, Bachkhaznadji, S. R. Zouzou, A. Krikeb, J.-L.Basdevant, J.-M. Richard and T. T. Wu, *Optimized Lower Bound for Four-Body Hamiltonians*, Few-Body Systems **24** (1998) 39 .



[20] Pour des travaux antérieurs sur les systèmes borroméens dans le même esprit que nos travaux , voir :

J.-M. Richard and S. Fleck, Phys. Rev. Lett. **73** (1994) 1461 .

J. Goy , J.-M. Richard and S. Fleck, Phys. Rev. **A52** (1995) 3511 .

B. Barkat, Thèse de magister, Université de Constantine (1999) .

# بعض النتائج من اجل الجمل ذات عدد قليل من الجسيمات

## ملخص :

هذه الأطروحة عبارة عن مجموعتين من الأبحاث .  
المجموعة الأولى تشتمل على مساهمتين . قمنا باقتراح صنف جديد من دوال الإختبار الموجية من أجل جمل ذات جسيمين تتفاعل عبر كمونات صامدة إزاء الإنسحابات والورانات وطبقنا الطريقة في حالة الميزونات . من جهة أخرى اشتقنا العبارات التحليلية لعناصر مصفوفة ملاحظات مختلفة بين غوصيتين مترابطتين . يمكن استعمال هذه العبارات لتقليص الحسابات العددية في إطار طريقة النشر وفق غوصيات .

المجموعة الثانية من الأعمال تتعلق باشتقاق حدود سفلى محسنة من أجل طاقات الحالات الأساسية لجمل غير نسبية ذات "ن" جسيم ، تتفاعل عبر قوى ذات جسيمين صامدة إزاء الإنسحابات . عند أصل كل حد سفلي محسن ، هناك تحزئة لحد الطاقة الحركية . اعتبرنا تحزنتين وسيطيتين لحد الطاقة الحركية توذيان إلى حدّين سفليين محسّنين سمياً بالحدّ القديم والحدّ الجديد . قمنا أولاً باشتقاق الخصائص العامة من أجل "ن" كفي ثم عالجنا بالتفصيل حالة الجمل المكوّنة من خمسة جسيمات . الحدان السفليان المحسنان والتجزئتان المولفتان استعملت فيما بعد في تطبيقين فيزيائيين : لااشتقاق حدود سفلى من أجل طاقات الحالات الأساسية لجزيئات البوزيترونيوم وكذا لااشتقاق شروط كافية لعدم وجود بورومية ذات خمس جسيمات .

## كلمات المفاتيح :

دالة الإختبار الموجية ، الطريقة التعبيرية ، الميزونات ، الحدود السفلى المحسنة ، الحالات الأساسية ، جمل ذات عدد قليل من الجسيمات ، المسألة ذات خمسة جسيمات ، جزيئات البوزيترونيوم ، الجمل البورومية .

# Some results about few-body systems

## Abstract

This thesis gathers two sets of works .

The first set of works is the sum of two contributions . We have proposed a new class of trial wave functions for two-body systems interacting via translationally and rotationally invariant potentials and applied the method to the case of mesons . On the other hand , we have derived analytical expressions of matrix elements of various observables between two correlated Gaussians . These expressions may be used to reduce the numerical part in the systematic Gaussian expansion .

The second set of works deals with the derivation of optimized lower bounds for the ground state energies of non-relativistic  $N$ -body systems interacting via translationally invariant two-body forces . At the origin of each optimized lower bound , there is a parameter-dependent decomposition of the kinetic energy term . We have considered two such decompositions leading to two optimized lower bounds , baptized old and new bounds . The general features are derived for arbitrary  $N$  and the five-body case is treated in detail . The two optimized lower bounds and the kinetic energy decompositions behind them are then used in two physical applications : To derive lower bounds for the ground state energies of positronium molecules and to establish sufficient conditions of inexistence of five-body borromean systems.

## Key words :

Trial wave function , variational method , mesons , optimized lower bounds , ground states , few-body systems , the five-body problem , positronium molecules , borromean systems .

# Résumé

Cette thèse regroupe deux ensembles de travaux.

Le premier ensemble de travaux est la somme de deux contributions. Nous avons proposé d'une part une nouvelle classe de fonctions d'onde d'essai pour des systèmes à deux particules interagissant par des potentiels invariants par translation et par rotation et appliqué la méthode aux cas des mésons. Et d'autre part, nous avons dérivé les expressions analytiques des éléments de matrice de diverses observables entre deux Gaussiennes corrélées. Ces expressions pourront être utilisées pour réduire la part des calculs numériques dans le cas de développement systématique sur des Gaussiennes.

Le deuxième ensemble de travaux a trait à la dérivation de bornes inférieures optimales pour les énergies des états fondamentaux de systèmes à  $N$  corps non-relativistes interagissant par des forces à deux corps invariantes par translation. A la base de chaque classe de borne inférieure optimale, se trouve une décomposition paramétrisée du terme d'énergie cinétique. De ces décompositions, nous en avons considéré deux, menant à deux bornes inférieures optimales baptisées ancienne et nouvelle bornes. Les caractéristiques générales pour  $N$  quelconque sont dérivées et le cas à cinq corps est traité en détail. Les deux bornes inférieures optimales et les deux décompositions qui en sont à l'origine sont ensuite utilisées dans deux applications physiques : Pour dériver des bornes inférieures pour les énergies des états fondamentaux des molécules positroniums et pour dériver des conditions suffisantes d'inexistence de systèmes borroméens à cinq corps.

## Mots clefs :

Fonction d'onde d'essai, méthode variationnelle, mésons, bornes inférieures optimales, état fondamental, systèmes à petit nombre de corps, problème à cinq corps, molécules positroniums, systèmes borroméens.