

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

Université Mentouri-Constantine, Algérie
FACULTE DES SCIENCES EXACTES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N d'ordre:

Série:

THESE

Présentée pour obtenir le Diplôme de
Docteur en Sciences

Option

Physique Théorique

THEME

Bornes inférieures pour les systèmes à petit
nombre de corps

Par

Mr Boudjema Kheir-Eddine

Soutenue le : / /

Devant le Jury

Président	: L. GUECHI	Prof	Univ. Mentouri-Constantine
Rapporteur	: S. R. ZOZOU	Prof	Univ. Mentouri-Constantine
Examineurs	: A. AMGHAR	Prof	Univ. M'hamed Bougara-Boumerdès
	F. BENAMIRA	M.C	Univ. Mentouri-Constantine
	S. HASSANI	D. R	C.R.N.A. Alger
	N. ZENINE	D. R	C.R.N.A. Alger

Remerciements

Je remercie mon encadreur Mr. S. R. ZOUZOU pour son assistance, pour ses conseils, pour son suivi sans cesse et pour toute l'aide qu'il m'a apportée pour l'élaboration de cette thèse.

Je remercie aussi mon père pour toute l'aide morale et pour le soutien matériel qu'il m'a apporté.

Je remercie également Mr. L. GUECHI d'avoir accepté de présider le jury de cette thèse et Mrs A. AMGHAR, F. BENAMIRA, S. HASSANI et N. ZENINE d'avoir accepté d'en faire partie.

Table des matières

Remerciements	v
Introduction	1
1 Quelques résultats exacts, bornes supérieures et bornes inférieures	4
1.1 Résultats exacts	4
1.1.1 Les lois d'échelle	4
1.1.2 Théorème de Feynman-Hellmann	10
1.1.3 Théorèmes de l'hyperviriel	11
1.1.4 Principe variationnel de Ritz	15
1.1.5 Théorème de concavité	17
1.2 Développement systématique sur des gaussiennes corrélées	21
1.3 Bornes inférieures naïve et améliorée	29
1.3.1 Borne inférieure naïve	29
1.3.2 Borne inférieure améliorée	33
1.3.3 Comparaison des deux bornes inférieures naïve et améliorée	38
2 Borne inférieure optimisée	41
2.1 Motivation	41
2.2 Méthodologie	41
2.3 Contraintes Dynamiques Universelles	44
3 Les Contraintes Dynamiques Universelles pour $N \leq 5$	50
3.1 Système à 3 corps	51
3.2 Système à 4 corps	52
3.3 Comment le cas $N = 4$ peut servir à retrouver le cas $N = 3$	59

3.4	Système à 5 corps	60
3.4.1	Expression et condition de rang sur la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$	61
3.5	Comment le cas $N = 5$ peut servir à retrouver le cas $N = 4$	74
3.6	Adaptation de la technique lorsque le système possède des symétries	75
3.6.1	Système à 4 corps avec trois masses distinctes	76
3.6.2	Système à 5 corps avec trois masses distinctes	78
3.6.3	Système à 5 corps avec quatre masses distinctes	83
4	Les Contraintes Dynamiques Universelles pour $N > 5$	88
4.1	Comptage du nombre de contraintes dynamiques universelles	88
4.2	Système à 6 corps avec trois masses distinctes	92
4.2.1	Configuration $(4 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$	92
4.2.2	Configuration $(3 \times m_1, 2 \times m_2, 1 \times m_3)$	94
4.2.3	Configuration $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3)$	96
4.3	Comment le cas $N = 5$ permet d'obtenir partiellement les contraintes dynamiques universelles pour des systèmes avec $N > 5$	98
5	L'Oscillateur Harmonique	104
5.1	Méthodologie	104
5.2	Configuration $(N \times m)$	106
5.3	Configuration $((N - 1) \times m, 1 \times M)$	109
5.4	Configuration $(n \times m, n' \times M)$	113
5.5	Configuration $(n_1 \times m_1, n_2 \times m_2, n_3 \times m_3)$	118
6	Saturation des bornes inférieures optimisées	128
6.1	Configuration $(N \times m)$	129
6.2	Configuration $((N - 1) \times m, 1 \times M)$	130
6.3	Configuration $(n \times m, n' \times M)$	134
6.4	Système à N corps avec trois masses distinctes	139
7	Comparaison numérique des bornes inférieures	146
7.1	Système à cinq corps	147
7.1.1	Deux masses distinctes	147

7.1.2	Trois masses distinctes	149
7.2	Système à six corps	151
7.2.1	Deux masses distinctes	151
7.2.2	Trois masses distinctes	154
7.3	Système à sept corps	157
7.3.1	Deux masses distinctes	157
7.3.2	Trois masses distinctes	160
	Conclusion	170
	A La méthode de Multhopp	174

Introduction

Les systèmes à petit nombre de corps interviennent dans diverses branches de la physique telles que la physique nucléaire, la physique des particules, la physique atomique et moléculaire, la théorie quantique du solide et même en chimie quantique. Ceci donne lieu à des échanges interdisciplinaires extrêmement fructueux. En particulier, une méthode développée dans un contexte donné peut être adaptée à d'autres contextes.

Généralement le cadre de l'étude des systèmes à petit nombre de corps est la mécanique quantique non relativiste. Autrement dit, la dynamique de tels systèmes est gouvernée par l'équation de Schrödinger à N corps.

Le problème à N corps est difficile à résoudre. Même le problème à 1 corps pour un potentiel invariant par rotation ou le problème à 2 corps pour un potentiel invariant par translation et par rotation, ne sont solubles que pour des formes très particulières du potentiel. Dans tous les autres cas, on est obligé à recourir à des méthodes de résolution approximatives. A l'exception des systèmes à 1 corps et à 2 corps dans les conditions mentionnées ci-dessus, où la résolution numérique est exacte (au sens où on peut atteindre n'importe quel degré de précision fixé à l'avance), très vite les calculs deviennent énormes et requièrent des moyens de calcul considérables. Une alternative au développement des méthodes de résolution approchées de l'équation de Schrödinger est la dérivation de résultats exacts pour les systèmes à petit nombre de corps.

Cette thèse est essentiellement consacrée à une borne inférieure pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à N corps, baptisée borne inférieure optimisée parce que résultant d'une optimisation sur un certain nombre de paramètres libres. Cette borne s'est avérée d'une part meilleure que toutes les bornes inférieures développées jusqu'ici [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9] pour les systèmes à N corps et d'autre part est très proche de l'énergie exacte de l'état fondamental du système à N corps au point de constituer

une excellente approximation de ce dernier au même titre que des calculs variationnels très poussés, qui eux fournissent une borne supérieure [10, 11] pour l'énergie de l'état fondamental. Les deux bornes inférieure optimisée et supérieure sont très proches et donc très proches de l'énergie exacte de l'état fondamental qui est nécessairement encadré par les deux bornes, d'où l'intérêt de cette borne inférieure optimisée.

Le manuscrit de cette thèse est organisé comme suit :

Le chapitre 1 regroupe un certain nombre de résultats exacts déjà connus. Pour certains, nous avons donné des démonstrations. Pour les autres, nous avons plutôt présenté des applications. Nous avons ensuite présenté le principe variationnel de Ritz, dont on a fait un usage intensif par la suite, suivi par l'exposé d'une méthode de résolution approchée d'essence variationnelle de l'équation de Schrödinger, la méthode de développement systématique sur des gaussiennes corrélées. Finalement, nous avons exposé les bornes inférieures qui ont précédé la borne inférieure optimisée : les bornes inférieures naïve [1, 2, 3, 4, 5, 6] et améliorée [7, 8, 9] que nous avons comparées.

Le chapitre 2 est consacré à la dérivation de la borne inférieure optimisée. La méthodologie d'obtention d'une telle borne inférieure est exposée de manière détaillée [12]. L'accent est mis sur le fait que ces bornes inférieures résultent d'un processus d'optimisation impliquant un certain nombre de paramètres. On montre alors que les valeurs de ces paramètres correspondant à la borne inférieure optimisée satisfont un certain nombre de relations qui sont d'une part indépendantes de la forme du potentiel et d'autre part de nature dynamique, d'où l'appellation de contraintes dynamiques universelles. La méthode d'obtention de ces contraintes est ensuite exposée.

Dans le chapitre 3 nous avons appliqué la méthode exposée au chapitre précédent pour obtenir les contraintes dynamiques universelles dans le cas où celles-ci sont exactement calculables, à savoir pour $N = 3$ [21], $N = 4$ [23, 24, 25] et $N = 5$ [13]. Les relations du cas $N = 4$ avec le cas $N = 3$ et du cas $N = 5$ avec les cas $N = 3$ et $N = 4$ sont mises en lumière.

Le chapitre 4 est dévolu aux contraintes dynamiques universelles pour $N > 5$, auxquels cas ces contraintes ne peuvent être dérivées que pour certaines configurations spéciales de masse. Plusieurs propriétés des contraintes dynamiques universelles sont mises en évidence et trouvent des applications. En particulier, on montre comment on peut aller du simple au compliqué. Plus précisément, les contraintes dynamiques universelles obtenues

pour un système peuvent être utilisées pour obtenir une partie des contraintes dynamiques universelles pour des systèmes plus compliqués.

Le chapitre 5 traite l'oscillateur harmonique à N corps, qui est un système résolvable exactement pour $N \leq 5$ et quasi-exactement pour $N > 5$. Plusieurs configurations de masse sont considérées et le spectre de l'oscillateur correspondant est dérivé.

Dans le chapitre 6 on a donné une démonstration analytique exacte de la saturation des bornes inférieures optimisées dans le cas de forces harmoniques pour certaines configurations de masse mais pour un nombre quelconque N de corps [14].

Le chapitre 7 est consacré aux résultats numériques incluant à côté des résultats des calculs de la borne inférieure optimisée ceux des bornes inférieures naïve et améliorée. Les résultats de quelques calculs variationnels utilisant la méthode de développement systématique sur des gaussiennes corrélées [11] sont également présentés.

Le chapitre 7 est suivi d'une conclusion, où les résultats de notre travail sont consignés et les perspectives sont dressées.

Un appendice est joint pour présenter une méthode de résolution approximative de l'équation de Schrödinger à 1 corps pour un potentiel invariant par rotation ou à 2 corps pour un potentiel invariant par translation et par rotation, la méthode de Multhopp en loccurrence.

Chapitre 1

Quelques résultats exacts, bornes supérieures et bornes inférieures

Dans ce chapitre, on commencera par présenter quelques théorèmes et résultats exacts dont on fera usage par la suite. Nous allons considérer tour à tour les lois d'échelle [15, 29, 11], le théorème de Feynman-Hellmann [16, 17], les théorèmes de l'hyperviriel dont le théorème du viriel est un cas particuliers [11], et le théorème de concavité [17]. On introduira ensuite successivement le principe variationnel de Ritz [16], la méthode de développement systématique sur des gaussiennes corrélées [11]. On terminera par la présentation de deux bornes inférieures : les bornes inférieures dites naïve [1, 2, 3, 4, 5, 6] et améliorée [7, 8, 9].

1.1 Résultats exacts

1.1.1 Les lois d'échelle

Considérons un système de N particules obéissant à une cinématique non relativiste avec des interactions à deux corps en loi de puissance, c'est à dire décrit par un Hamiltonien H de la forme

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i<j=1}^N \lambda_{ij} r_{ij}^\beta, \quad (1.1)$$

où m_i , \vec{p}_i , \vec{r}_i ($i = 1, 2, \dots, N$) désignent respectivement la masse, l'impulsion et la position de la i ème particule. $r = \|\vec{r}_2 - \vec{r}_1\|$, λ_{ij} est une constante de couplage de même

signe que l'exposant β ($\beta > -2$) du potentiel en loi de puissance.

Soit maintenant un deuxième système de N particules en tout point identique au premier sauf que toutes les masses sont multipliées par un même facteur positif α et toutes les constantes de couplage sont multipliées par un même facteur également positif γ . Autrement dit, le deuxième système à N particules est décrit par l'Hamiltonien $H_{\alpha,\gamma}$ donné par

$$H_{\alpha,\gamma} = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2\alpha m_i} + \sum_{i<j=1}^N \gamma \lambda_{ij} r_{ij}^\beta. \quad (1.2)$$

Les équations aux valeurs propres pour H et $H_{\alpha,\gamma}$ s'écrivent respectivement comme

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (1.3)$$

et

$$H_{\alpha,\gamma} |\Psi_{\alpha,\gamma}\rangle = E_{\alpha,\gamma} |\Psi_{\alpha,\gamma}\rangle, \quad (1.4)$$

où E et $|\Psi\rangle$ désignent respectivement les valeurs propres et les vecteurs propres normalisés de H et où $E_{\alpha,\gamma}$ et $|\Psi_{\alpha,\gamma}\rangle$ désignent respectivement les valeurs propres et les vecteurs propres également normalisés de $H_{\alpha,\gamma}$.

Réécrivons $H_{\alpha,\gamma}$ en termes de nouvelles coordonnées \vec{r}'_i définies par

$$\vec{r}'_i = C \vec{r}_i, \quad (1.5)$$

où C est un paramètre sans dimension, qu'on fixera à notre convenance par la suite, et de leurs moments conjugués

$$\vec{p}'_i = \frac{1}{C} \vec{p}_i. \quad (1.6)$$

Nous avons

$$H_{\alpha,\gamma} = \sum_{i=1}^N \frac{C^2 \vec{p}'_i{}^2}{2\alpha m_i} + \sum_{i<j=1}^N C^{-\beta} \gamma \lambda_{ij} r'_{ij}{}^\beta. \quad (1.7)$$

Fixons maintenant le paramètre C de telle manière que l'expression de $H_{\alpha,\gamma}$ en termes des \vec{r}'_i et des \vec{p}'_i soit formellement identique à celle de H en termes des \vec{r}_i et des \vec{p}_i , à une constante près d . Ceci se traduit par deux exigences

$$\frac{C^2}{\alpha} = d \quad (1.8)$$

et

$$C^{-\beta}\gamma = d. \quad (1.9)$$

En combinant les deux relations précédentes, on obtient

$$\frac{C^2}{\alpha} = C^{-\beta}\gamma, \quad (1.10)$$

d'où

$$C^{2+\beta} = \alpha\gamma \quad (1.11)$$

et par conséquent

$$C = (\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}}. \quad (1.12)$$

En reportant dans la première relation, on obtient l'expression de d

$$d = \alpha^{\frac{-\beta}{2+\beta}} \gamma^{\frac{2}{2+\beta}}. \quad (1.13)$$

Donc dans les nouvelles coordonnées

$$H_{\alpha,\gamma} = \alpha^{\frac{-\beta}{2+\beta}} \gamma^{\frac{2}{2+\beta}} \left(\sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i<j=1}^N \lambda_{ij} r_{ij}^{! \beta} \right). \quad (1.14)$$

Il s'ensuit que les valeurs propres E de H et $E_{\alpha,\gamma}$ de $H_{\alpha,\gamma}$ sont liées par la relation

$$E_{\alpha,\gamma} = \alpha^{\frac{-\beta}{2+\beta}} \gamma^{\frac{2}{2+\beta}} E. \quad (1.15)$$

Concernant les fonctions d'onde, on peut dire que les $\Psi_{\alpha,\gamma}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ s'expriment, à une constante de normalisation près, de la même façon que les Ψ en termes des \vec{r}'_i . Autrement dit :

$$\Psi_{\alpha,\gamma}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = A\Psi(\vec{r}'_1, \dots, \vec{r}'_N) = A\Psi\left((\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{r}_1, \dots, (\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{r}_N\right), \quad (1.16)$$

où A est une constante de normalisation.

Pour exprimer la condition de normalisation, introduisons un ensemble de coordonnées de Jacobi $\vec{\xi}_1, \dots, \vec{\xi}_{N-1}$, consistant par exemple en la coordonnée relative des particules 1 et 2, la coordonnée relative de la troisième particule et du centre de masse des deux

particule 1 et 2, etc... Comme les masses du deuxième système sont liées aux masses du premier système par un facteur multiplicatif α , les coordonnées de Jacobi sont les mêmes pour les deux systèmes. En notant ces coordonnées de Jacobi $\vec{\xi}_1, \dots, \vec{\xi}_{N-1}$, on a

$$\begin{aligned}\vec{\xi}_1 &= \vec{r}_2 - \vec{r}_1, \\ \vec{\xi}_2 &= \vec{r}_3 - \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \\ &\vdots \\ \vec{\xi}_{N-1} &= \vec{r}_N - \frac{m_1 \vec{r}_1 + \dots + m_{N-1} \vec{r}_{N-1}}{m_1 + \dots + m_{N-1}}.\end{aligned}\tag{1.17}$$

Comme les deux systèmes sont invariants par translation, on peut éliminer le mouvement du centre de masse et les fonctions d'onde des deux systèmes s'expriment uniquement en termes de $\vec{\xi}_1, \dots, \vec{\xi}_{N-1}$. Donc

$$\begin{aligned}\Psi &= \Psi\left(\vec{\xi}_1, \dots, \vec{\xi}_{N-1}\right) \\ \Psi_{\alpha,\gamma} &= \Psi_{\alpha,\gamma}\left(\vec{\xi}_1, \dots, \vec{\xi}_{N-1}\right)\end{aligned}$$

et la relation (1.16) s'écrit alors comme

$$\Psi_{\alpha,\gamma}\left(\vec{\xi}_1, \dots, \vec{\xi}_{N-1}\right) = A \Psi\left((\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_1, \dots, (\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_{N-1}\right).\tag{1.18}$$

Le facteur de proportionnalité A est déterminé par la condition de normalisation

$$\int \left| \Psi_{\alpha,\gamma}\left(\vec{\xi}_1, \dots, \vec{\xi}_{N-1}\right) \right|^2 d\vec{\xi}_1 \dots d\vec{\xi}_{N-1} = 1.\tag{1.19}$$

En remplaçant $\Psi_{\alpha,\gamma}$ par son expression, (1.18), on obtient

$$|A|^2 \int \left| \Psi\left((\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_1, \dots, (\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_{N-1}\right) \right|^2 d\vec{\xi}_1 \dots d\vec{\xi}_{N-1} = 1.\tag{1.20}$$

En effectuant le changement de variables

$$\vec{\xi}'_1 = (\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_1, \dots, \vec{\xi}'_{N-1} = (\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_{N-1},\tag{1.21}$$

la relation précédente s'écrit comme

$$|A|^2 (\alpha\gamma)^{\frac{-3(N-1)}{2+\beta}} \int \left| \Psi \left(\vec{\xi}'_1, \dots, \vec{\xi}'_{N-1} \right) \right|^2 d\vec{\xi}'_1 \dots d\vec{\xi}'_{N-1} = 1. \quad (1.22)$$

Par hypothèse Ψ est normalisée, c'est à dire

$$\int \left| \Psi \left(\vec{\xi}_1, \dots, \vec{\xi}_{N-1} \right) \right|^2 d\vec{\xi}_1 \dots d\vec{\xi}_{N-1} = 1, \quad (1.23)$$

ce qui implique que

$$|A|^2 = (\alpha\gamma)^{\frac{3(N-1)}{2+\beta}} \quad (1.24)$$

ou

$$|A| = (\alpha\gamma)^{\frac{3(N-1)}{2(2+\beta)}}. \quad (1.25)$$

En faisant le choix d'un A réel et positif

$$\Psi_{\alpha,\gamma} \left(\vec{\xi}_1, \dots, \vec{\xi}_{N-1} \right) = (\alpha\gamma)^{\frac{3(N-1)}{2(2+\beta)}} \Psi \left((\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_1, \dots, (\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_{N-1} \right). \quad (1.26)$$

Pour être plus complet, établissons le lien entre les deux systèmes pour quelques observables :

1. Valeur moyenne du carré de l'impulsion de la i ème particule $\langle \vec{p}_i^2 \rangle$

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\alpha,\gamma} | \vec{p}_i^2 | \Psi_{\alpha,\gamma} \rangle &= (\alpha\gamma)^{\frac{3(N-1)}{2+\beta}} \\ &\times \int \Psi^* \left((\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_1, \dots, (\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_{N-1} \right) \vec{p}_i^2 \Psi \left((\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_1, \dots, (\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_{N-1} \right) d\vec{\xi}_1 \dots d\vec{\xi}_{N-1}. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Posons

$$\vec{\xi}'_i = (\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_i \quad i = 1, \dots, N-1, \quad (1.28)$$

ceci revient à multiplier toutes les coordonnées \vec{r}_i par le même facteur $(\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}}$

$$\vec{r}'_i = (\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{r}_i \quad i = 1, \dots, N, \quad (1.29)$$

dont les moments conjugués \vec{p}'_i sont obtenus à partir des \vec{p}_i en multipliant par le facteur inverse

$$\vec{p}'_i = (\alpha\gamma)^{\frac{-1}{2+\beta}} \vec{p}_i \quad i = 1, \dots, N. \quad (1.30)$$

Par conséquent

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{\alpha,\gamma} | \vec{p}_i^2 | \Psi_{\alpha,\gamma} \rangle &= (\alpha\gamma)^{\frac{3(N-1)}{2+\beta}} \\
&\times \left((\alpha\gamma)^{\frac{-1}{2+\beta}} \right)^{3(N-1)} \int \Psi \left(\vec{\xi}'_1, \dots, \vec{\xi}'_{N-1} \right) (\alpha\gamma)^{\frac{2}{2+\beta}} \vec{p}_i^2 \Psi \left(\vec{\xi}'_1, \dots, \vec{\xi}'_{N-1} \right) d\vec{\xi}'_1 \dots d\vec{\xi}'_{N-1} \\
&= (\alpha\gamma)^{\frac{2}{2+\beta}} \langle \Psi | \vec{p}_i^2 | \Psi \rangle.
\end{aligned} \tag{1.31}$$

Il s'ensuit que

$$\langle \Psi_{\alpha,\gamma} | \frac{\vec{p}_i^2}{2\alpha m_i} | \Psi_{\alpha,\gamma} \rangle = \frac{(\alpha\gamma)^{\frac{2}{2+\beta}}}{\alpha} \langle \Psi | \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} | \Psi \rangle = \alpha^{\frac{-\beta}{2+\beta}} \gamma^{\frac{2}{2+\beta}} \langle \Psi | \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} | \Psi \rangle, \tag{1.32}$$

et donc

$$\langle \Psi_{\alpha,\gamma} | \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2\alpha m_i} | \Psi_{\alpha,\gamma} \rangle = \alpha^{\frac{-\beta}{2+\beta}} \gamma^{\frac{2}{2+\beta}} \langle \Psi | \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} | \Psi \rangle. \tag{1.33}$$

L'énergie cinétique se comporte donc, comment il se doit, comme l'énergie E .

2. Valeur moyenne de la fonction $\delta(\vec{r}_{ij})$ qui est indispensable pour calculer les corrélations à courte portée

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{\alpha,\gamma} | \delta(\vec{r}_{ij}) | \Psi_{\alpha,\gamma} \rangle &= (\alpha\gamma)^{\frac{3(N-1)}{2+\beta}} \\
&\times \int \Psi^* \left((\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_1, \dots, (\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_{N-1} \right) \delta^3(\vec{r}_{ij}) \Psi \left((\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_1, \dots, (\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_{N-1} \right) d\vec{\xi}_1 \dots d\vec{\xi}_{N-1}.
\end{aligned} \tag{1.34}$$

Faisons également le même changement de variables que dans le cas précédent, ((1.29),(1.30)).

Il s'ensuit que

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{\alpha,\gamma} | \delta^3(\vec{r}_{ij}) | \Psi_{\alpha,\gamma} \rangle &= (\alpha\gamma)^{\frac{3(N-1)}{2+\beta}} \left((\alpha\gamma)^{\frac{-1}{2+\beta}} \right)^{3(N-1)} \\
&\times \int \Psi^* \left(\vec{\xi}'_1, \dots, \vec{\xi}'_{N-1} \right) \delta^3 \left((\alpha\gamma)^{\frac{-1}{2+\beta}} \vec{r}'_{ij} \right) \Psi \left(\vec{\xi}'_1, \dots, \vec{\xi}'_{N-1} \right) d\vec{\xi}'_1 \dots d\vec{\xi}'_{N-1} \\
&= \int \Psi^* \left(\vec{\xi}'_1, \dots, \vec{\xi}'_{N-1} \right) \delta^3 \left((\alpha\gamma)^{\frac{-1}{2+\beta}} \vec{r}'_{ij} \right) \Psi \left(\vec{\xi}'_1, \dots, \vec{\xi}'_{N-1} \right) d\vec{\xi}'_1 \dots d\vec{\xi}'_{N-1}.
\end{aligned} \tag{1.35}$$

En utilisant les propriétés du delta de Dirac

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x), \tag{1.36}$$

et donc à trois dimensions

$$\delta^3(a\vec{r}') = \frac{1}{|a|^3} \delta^3(\vec{r}'), \quad (1.37)$$

on obtient alors

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_{\alpha,\gamma} | \delta(\vec{r}'_{ij}) | \Psi_{\alpha,\gamma} \rangle \\ &= (\alpha\gamma)^{\frac{3}{2+\beta}} \int \Psi^* \left(\vec{\xi}'_1, \dots, \vec{\xi}'_{N-1} \right) \delta^3(\vec{r}'_{ij}) \Psi \left(\vec{\xi}'_1, \dots, \vec{\xi}'_{N-1} \right) d\vec{\xi}'_1 \dots d\vec{\xi}'_{N-1} \\ &= (\alpha\gamma)^{\frac{3}{2+\beta}} \langle \Psi | \delta(\vec{r}'_{ij}) | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (1.38)$$

3. Valeur moyenne d'une puissance de r_{ij} , $\langle r_{ij}^\nu \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\alpha,\gamma} | r_{ij}^\nu | \Psi_{\alpha,\gamma} \rangle &= (\alpha\gamma)^{\frac{3(N-1)}{2+\beta}} \\ &\times \int \Psi^* \left((\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_1, \dots, (\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_{N-1} \right) r_{ij}^\nu \Psi \left((\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_1, \dots, (\alpha\gamma)^{\frac{1}{2+\beta}} \vec{\xi}_{N-1} \right) d\vec{\xi}_1 \dots d\vec{\xi}_{N-1}. \end{aligned} \quad (1.39)$$

En utilisant de nouveau les variables $\vec{\xi}'_i$ et \vec{r}'_i définies par les équations ((1.28),(1.29)), on arrive à

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\alpha,\gamma} | r_{ij}^\nu | \Psi_{\alpha,\gamma} \rangle &= (\alpha\gamma)^{\frac{-\nu}{2+\beta}} \int \Psi^* \left(\vec{\xi}'_1, \dots, \vec{\xi}'_{N-1} \right) r_{ij}^\nu \Psi \left(\vec{\xi}'_1, \dots, \vec{\xi}'_{N-1} \right) d\vec{\xi}'_1 \dots d\vec{\xi}'_{N-1} \\ &= (\alpha\gamma)^{\frac{-\nu}{2+\beta}} \langle \Psi | r_{ij}^\nu | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (1.40)$$

1.1.2 Théorème de Feynman-Hellmann

Considérons un système décrit par un Hamiltonien H dépendant d'un paramètre quelconque α , qui peut être par exemple une constante de couplage ou une masse réduite.

L'équation aux valeurs propres s'écrit

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

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

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\alpha}E(\alpha) &= \frac{\partial}{\partial\alpha}(\langle\Psi(\alpha)|H(\alpha)|\Psi(\alpha)\rangle) \\ &= \langle\Psi(\alpha)|\left(\frac{\partial}{\partial\alpha}H(\alpha)\right)|\Psi(\alpha)\rangle + E(\alpha)\frac{\partial}{\partial\alpha}(\langle\Psi(\alpha)|\Psi(\alpha)\rangle) \\ &= \langle\Psi(\alpha)|\left(\frac{\partial}{\partial\alpha}H(\alpha)\right)|\Psi(\alpha)\rangle,\end{aligned}\tag{1.41}$$

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

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

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r),\tag{1.42}$$

où le potentiel $V(r)$ est indépendant de la masse μ , on obtient en utilisant l'équation (1.41) avec $\alpha=\mu$

$$\frac{\partial}{\partial\mu}E(\mu) = \langle\Psi|\left(\frac{\partial}{\partial\mu}\frac{\vec{p}^2}{2\mu}\right)|\Psi\rangle = -\frac{1}{\mu}\langle\Psi|\frac{\vec{p}^2}{2\mu}|\Psi\rangle.\tag{1.43}$$

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

$$\frac{\partial}{\partial\mu}E(\mu) < 0.\tag{1.44}$$

Ce résultat stipule que les niveaux d'énergie du système sont de plus en plus profonds au fur et à mesure que la masse μ augmente, ce qui est conforme à l'idée intuitive que l'inertie favorise la liaison.

1.1.3 Théorèmes de l'hypercerviel

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

$$\langle[H, A]\rangle_{\varphi} = 0.\tag{1.45}$$

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

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r). \quad (1.46)$$

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 respectivement l'impulsion et la position relative des deux particules.

Considérons divers choix pour l'opérateur A

i)

$$A = A(r), \quad (1.47)$$

c'est à dire que A est uniquement une fonction de la coordonnée radiale r . (1.45) se simplifie alors en

$$\langle [\vec{p}^2, A(r)] \rangle_\varphi = 0, \quad (1.48)$$

où φ est une fonction propre de H .

En utilisant le résultat

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

où p_j et r_j désignent respectivement les j ème composantes de l'impulsion et de la position de la particule, (1.48) peut être mise sous la forme

$$\left\langle \sum_{i=1}^3 \left[p_i \frac{r_i}{r} A'(r) + \frac{r_i}{r} A'(r) p_i \right] \right\rangle_\varphi = 0. \quad (1.49)$$

Pour

$$A(r) = r^a \quad (a \neq -1), \quad (1.50)$$

l'expression précédente se simplifie en

$$\left\langle r^{a-1} \frac{d}{dr} \right\rangle_{\varphi} = -\frac{(a+1)}{2} \langle r^{a-2} \rangle_{\varphi}. \quad (1.51)$$

ii)

$$A = r^b \vec{r} \cdot \vec{p} = r^b \sum_{i=1}^3 r_i p_i, \quad (1.52)$$

avec ($b \neq -1$). (1.45) s'écrit alors comme

$$\frac{1}{2m} \left\langle \sum_{i=1}^3 [\vec{p}^2, r^b r_i p_i] \right\rangle_{\varphi} + \left\langle \sum_{i=1}^3 [V(r), r^b r_i p_i] \right\rangle_{\varphi} = 0. \quad (1.53)$$

Calculons tour à tour les deux commutateurs intervenant dans le membre de gauche de (1.53). Nous avons pour le premier commutateur

$$\left[\vec{p}^2, r^b \sum_{i=1}^3 r_j p_j \right] = i\hbar 2br^{b-2} \left(\vec{\mathcal{L}}^2 - \frac{b+1}{b} \vec{r}^2 \vec{p}^2 + i\hbar \frac{(b-1)}{2} \sum_{j=1}^3 r_j p_j \right), \quad (1.54)$$

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

$$\vec{\mathcal{L}}^2 = (\vec{r} \times \vec{p})^2 = \vec{r}^2 \vec{p}^2 + 2i\hbar \sum_{j=1}^3 r_j p_j - \sum_{i,j=1}^3 r_i r_j p_i p_j. \quad (1.55)$$

Le calcul du deuxième commutateur donne

$$\left[V(r), r^b \sum_{i=1}^3 r_i p_i \right] = i\hbar r^{b+1} \frac{d}{dr} V(r). \quad (1.56)$$

Il s'ensuit que [15]

$$\left(2bl(\ell+1) - \frac{b(b^2-1)}{2} \right) \frac{\hbar^2}{2m} \langle r^{b-2} \rangle_{\varphi} - 2(b+1) \langle r^b (E - V) \rangle_{\varphi} + \langle r^{b+1} V' \rangle_{\varphi} = 0, \quad (1.57)$$

où nous avons aussi utilisé le résultat (1.51).

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

$$E = \frac{b(4\ell(\ell+1) - (b^2 - 1)) \langle r^{b-2} \rangle_\varphi + 2\lambda(2(b+1) + \nu) \langle r^{b+\nu} \rangle_\varphi}{4(b+1) \langle r^b \rangle_\varphi}, \quad (1.58)$$

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, (1.58) se réduit à la relation de Kramers [18] bien connue en physique atomique et qui est une relation de récurrence liant les valeurs moyennes des diverses puissances de r

$$\langle r^n \rangle_\varphi = \frac{n(4\ell(\ell+1) - (n^2 - 1)) \langle r^{n-2} \rangle_\varphi - 2\lambda(2n+1) \langle r^{n-1} \rangle_\varphi}{4(n+1)E}. \quad (1.59)$$

Pour $b = 0$, la relation (1.53) se simplifie en

$$\langle T \rangle_\varphi = \frac{1}{2} \langle rV' \rangle_\varphi, \quad (1.60)$$

où on a tenu compte des relations (1.29) et (1.30) dans le cas particulier $b = 0$. Si on remarque que rV' n'est autre que la dérivée radiale du potentiel

$$rV' = \vec{r} \cdot \vec{\nabla} V, \quad (1.61)$$

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

$$\langle T \rangle_\varphi = \frac{1}{2} \left\langle \vec{r} \cdot \vec{\nabla} V(r) \right\rangle_\varphi, \quad (1.62)$$

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

$$\vec{r} \cdot \vec{\nabla} V(r) = \nu \lambda r^\nu = \nu V(r), \quad (1.63)$$

et par conséquent (1.62) se réduit dans ce cas à une relation entre les énergies cinétique

et potentielle

$$\langle T \rangle_\varphi = \frac{\nu}{2} \langle V \rangle_\varphi, \quad (1.64)$$

où $\langle T \rangle_\varphi$ et $\langle V \rangle_\varphi$ désignent respectivement les valeurs moyennes des énergies cinétique et potentielle dans l'état $|\varphi\rangle$. Si on utilise le fait que $E = \langle T \rangle_\varphi + \langle V \rangle_\varphi$ pour un état propre $|\varphi\rangle$ de H d'énergie E , on peut exprimer E en fonction de l'énergie cinétique seule ou de l'énergie potentielle seule

$$E = \frac{(2 + \nu)}{2} \langle V \rangle_\varphi = \frac{(2 + \nu)}{\nu} \langle T \rangle_\varphi. \quad (1.65)$$

1.1.4 Principe variationnel de Ritz

Le but de cette section est de présenter la méthode variationnelle [18], qui est une méthode d'approximation largement utilisée.

Considérons un système d'Hamiltonien H . Supposons pour simplifier que le spectre d'énergie soit 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 ème niveau excité, ... du système. Notons par $|\varphi_{i,\alpha}\rangle$ les états propres orthonormés de H

$$H |\varphi_{i,\alpha}\rangle = E_i |\varphi_{i,\alpha}\rangle, \quad (1.66)$$

$$\langle \varphi_{i,\alpha} | \varphi_{i',\alpha'} \rangle = \delta_{i,i'} \delta_{\alpha,\alpha'}, \quad (1.67)$$

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

$$\sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} |\varphi_{i,\alpha}\rangle \langle \varphi_{i,\alpha}| = I \quad (1.68)$$

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 $|\varphi_{i,\alpha}\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} c_{i,\alpha} |\varphi_{i,\alpha}\rangle, \quad (1.69)$$

où

$$c_{i,\alpha} = \langle \varphi_{i,\alpha} | \Psi \rangle. \quad (1.70)$$

Nous avons en utilisant les relations (1.66) et (1.67) et le fait que $E_i \geq E_0 \quad \forall i = 0, 1, \dots$

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} E_i |c_{i,\alpha}|^2 \geq E_0 \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} |c_{i,\alpha}|^2 = E_0 \langle \Psi | \Psi \rangle. \quad (1.71)$$

Donc

$$E_0 \leq \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (1.72)$$

Autrement dit, la valeur moyenne de l'Hamiltonien dans un état quelconque $|\Psi\rangle$ est toujours supérieure ou égale à l'énergie de l'état fondamental et l'égalité ne se produit que si et seulement si $|\Psi\rangle$ est un état propre de H avec la valeur propre E_0 , c'est à dire si et seulement si $|\Psi\rangle$ est l'état fondamental de H . Le résultat (1.72) est à la base de la méthode variationnelle.

Une utilisation possible du résultat (1.72) 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 valeurs des paramètres $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. Le jeu de valeurs des paramètres $\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0$ tel que

$$E(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0) = \min_{\lambda_1, \dots, \lambda_n} \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (1.73)$$

conduit 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

$$E_0 \leq \frac{\langle \Psi(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0) | H | \Psi(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0) \rangle}{\langle \Psi(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0) | \Psi(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0) \rangle}. \quad (1.74)$$

Pour le premier état excité, si on veut avoir l'analogie de (1.72), 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

$$E_1 \leq \frac{\langle \Psi'(\lambda'_1, \dots, \lambda'_n) | H | \Psi'(\lambda'_1, \dots, \lambda'_n) \rangle}{\langle \Psi'(\lambda'_1, \dots, \lambda'_n) | \Psi'(\lambda'_1, \dots, \lambda'_n) \rangle}, \quad (1.75)$$

à condition que

$$|\Psi'(\lambda'_1, \dots, \lambda'_n)\rangle \perp |\varphi_0\rangle, \quad (1.76)$$

et la meilleure approximation correspond de nouveau aux valeurs des λ'_i qui minimisent le membre de droite de (1.75).

On a également des relations analogues à (1.72) et à (1.75) 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.

1.1.5 Théorème de concavité

Si un Hamiltonien H est une fonction affine d'un paramètre réel α , c'est à dire si l'Hamiltonien H s'exprime comme :

$$H(\alpha) = \alpha A + B, \quad (1.77)$$

où A et B sont tout comme H des opérateurs auto adjoints, alors le niveau fondamental $E(\alpha)$ de $H(\alpha)$ est une fonction concave de α . Autrement dit,

$$E\left(\sum_i \lambda_i \alpha_i\right) \geq \sum_i \lambda_i E(\alpha_i), \quad (1.78)$$

où les λ_i sont des poids, non négatifs, normalisés, c'est à dire satisfaisant aux relations

$$\sum_i \lambda_i = 1, \quad \lambda_i \geq 0 \quad (1.79)$$

Applications

1. Systèmes à deux corps invariants par translation.

L'Hamiltonien relatif s'écrit alors

$$H(\alpha) = \alpha \vec{p}^2 + V(\vec{r}), \quad (1.80)$$

où α^{-1} représente le double de la masse réduite du système. Si on suppose que $V(\vec{r})$ est indépendant des masses, alors $H(\alpha)$ est une fonction linéaire de α .

Considérons trois systèmes à deux corps (m, m) , (M, M) et (m, M) . Nous avons

$$\frac{1}{m} + \frac{1}{M} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{m} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{M} + \frac{1}{M} \right) \quad (1.81)$$

ou

$$\alpha(m, M) = \frac{1}{2} \alpha(m, m) + \frac{1}{2} \alpha(M, M). \quad (1.82)$$

Il s'ensuit que

$$E_0(m, M) \geq \frac{1}{2} E_0(m, m) + \frac{1}{2} E_0(M, M), \quad (1.83)$$

où E_0 désigne l'énergie de l'état fondamental. Donc l'énergie de l'état fondamental du système (m, M) est supérieure à la moyenne des énergies des états fondamentaux des deux systèmes (m, m) et (M, M) .

2. Si de plus l'énergie potentielle est invariante par rotation

$$V(\vec{r}) = V(r), \quad (1.84)$$

le résultat précédent peut être généralisé pour l'état fondamental de chaque excitation orbitale. En effet, on peut dans ce cas, en se plaçant dans un système de coordonnées sphériques, séparer la coordonnée radiale r des coordonnées angulaires

θ et φ , c'est à dire qu'on peut écrire la fonction d'onde sous la forme

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{U_\ell(r)}{r} Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (1.85)$$

où $U_\ell(r)$ est la fonction d'onde radiale réduite et $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ est une harmonique sphérique. En substituant dans l'équation de Schrödinger, on arrive à l'équation radiale réduite

$$H_{eff}(\ell) U_\ell(r) = E_\ell U_\ell(r) \quad (1.86)$$

avec

$$H_{eff}(\ell) = -\alpha \frac{d^2}{dr^2} + \alpha \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r), \quad (1.87)$$

c'est à dire à une équation de Schrödinger à une dimension pour chaque valeur de ℓ . Il s'ensuit que

$$E_{0,\ell}(m, M) \geq E_{0,\ell}(m, m) + E_{0,\ell}(m, M) \quad (1.88)$$

où cette fois-ci $E_{0,\ell}$ désigne l'énergie de l'état fondamental pour l'excitation orbitale ℓ .

3. Considérons maintenant quatre systèmes à deux corps liés par un même potentiel dont les masses réduites inverses notées $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ et λ_4 sont telles que

$$\lambda_1 > \lambda_3 > \lambda_4 > \lambda_2 \quad (1.89)$$

avec

$$\lambda_1 + \lambda_2 = \lambda_3 + \lambda_4, \quad (1.90)$$

ou

$$\lambda_1 - \lambda_3 = \lambda_4 - \lambda_2, \quad (1.91)$$

alors

$$E_0(\lambda_3) + E_0(\lambda_4) \geq E_0(\lambda_1) + E_0(\lambda_2). \quad (1.92)$$

Si de plus le potentiel est invariant par rotation, alors

$$E_{0,\ell}(\lambda_3) + E_{0,\ell}(\lambda_4) \geq E_{0,\ell}(\lambda_1) + E_{0,\ell}(\lambda_2), \quad (1.93)$$

où de nouveau $E_{0,\ell}$ désigne l'énergie de l'état fondamental pour l'excitation orbitale ℓ .

Démontrons cette relation. Nous avons

$$\lambda_3 = \frac{\lambda_3 - \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \lambda_1 + \frac{\lambda_1 - \lambda_3}{\lambda_1 - \lambda_2} \lambda_2, \quad (1.94)$$

$$\lambda_4 = \frac{\lambda_4 - \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \lambda_1 + \frac{\lambda_1 - \lambda_4}{\lambda_1 - \lambda_2} \lambda_2, \quad (1.95)$$

avec

$$\frac{\lambda_3 - \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2}, \frac{\lambda_1 - \lambda_3}{\lambda_1 - \lambda_2}, \frac{\lambda_4 - \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2}, \frac{\lambda_1 - \lambda_4}{\lambda_1 - \lambda_2} > 0 \quad (1.96)$$

et

$$\frac{\lambda_3 - \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} + \frac{\lambda_1 - \lambda_3}{\lambda_1 - \lambda_2} = 1, \quad \frac{\lambda_4 - \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} + \frac{\lambda_1 - \lambda_4}{\lambda_1 - \lambda_2} = 1. \quad (1.97)$$

Par conséquent

$$E_0(\lambda_3) \geq \frac{\lambda_3 - \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} E_0(\lambda_1) + \frac{\lambda_1 - \lambda_3}{\lambda_1 - \lambda_2} E_0(\lambda_2) \quad (1.98)$$

et

$$E_0(\lambda_4) \geq \frac{\lambda_4 - \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} E_0(\lambda_1) + \frac{\lambda_1 - \lambda_4}{\lambda_1 - \lambda_2} E_0(\lambda_2). \quad (1.99)$$

Il s'ensuit en ajoutant les deux relations précédentes membre à membre

$$E_0(\lambda_3) + E_0(\lambda_4) \geq \left(\frac{\lambda_3 - \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} + \frac{\lambda_4 - \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \right) E_0(\lambda_1) + \left(\frac{\lambda_1 - \lambda_3}{\lambda_1 - \lambda_2} + \frac{\lambda_1 - \lambda_4}{\lambda_1 - \lambda_2} \right) E_0(\lambda_2), \quad (1.100)$$

c'est à dire

$$E_0(\lambda_3) + E_0(\lambda_4) \geq E_0(\lambda_1) + E_0(\lambda_2). \quad (1.101)$$

1.2 Développement systématique sur des gaussiennes corrélées

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

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i<j=1}^N V_{ij}(r_{ij}). \quad (1.102)$$

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

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\vec{p}_{x_i}^2}{2M_i} + \sum_{i<j=1}^N V_{ij}(r_{ij}\{\vec{x}_k\}), \quad (1.103)$$

où \vec{p}_{x_i} dénote le moment conjugué de la i ème 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

$$\vec{r}_{ij} = \sum_{k=1}^{N-1} d_{ij}^k \vec{x}_k. \quad (1.104)$$

Les d_{ij}^k qui sont donc les coefficients du développement de \vec{r}_{ij} sur les \vec{x}_k peuvent être éventuellement considérés comme les éléments d'une matrice colonne $(N-1) \times 1$, notée d_{ij} .

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

$$\Psi(\vec{x}_1 \dots \vec{x}_{N-1}) = \sum_{n=1}^g b_n \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} A_{ij}^n \vec{x}_i \cdot \vec{x}_j\right) \quad (1.105)$$

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 :

$$\langle \vec{x}_1 \dots \vec{x}_{N-1} | m \rangle \equiv \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} A_{ij}^m \vec{x}_i \cdot \vec{x}_j\right), \quad (1.106)$$

(1.105) peut-être mise sous la forme

$$|\Psi\rangle = \sum_{m=1}^g b_m |m\rangle. \quad (1.107)$$

La valeur moyenne d'une observable quelconque Λ évaluée dans l'état $|\Psi\rangle$, (1.107), sera donnée par l'expression

$$\langle \Lambda \rangle_{\Psi} = \frac{\sum_{m,n=1}^g b_n^* b_m \langle n | \Lambda | m \rangle}{\sum_{m,n=1}^g b_n^* b_m \langle n | m \rangle}. \quad (1.108)$$

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 une observable parmi les plus intéressantes, à savoir l'Hamiltonien. 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.

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 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 au calcul de l'élément de matrice d'une fonction quelconque $f(\vec{r}_{ij})$ de la variable $\vec{r}_{ij} \quad i < j=1, 2, \dots, N$ entre deux gaussiennes corrélées $\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle$. Nous avons

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = \int \cdots \int d^3 \vec{x}_1 \cdots d^3 \vec{x}_{N-1} f(\vec{r}_{ij}) \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^{N-1} (A_{kl}^n + A_{kl}^m) \vec{x}_k \cdot \vec{x}_l \right). \quad (1.109)$$

En posant

$$A_{kl} = \frac{1}{2} (A_{kl}^n + A_{kl}^m), \quad (1.110)$$

l'expression précédente peut être mise sous la forme

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = \int \cdots \int d^3 \vec{x}_1 \cdots d^3 \vec{x}_{N-1} f(\vec{r}_{ij}) \exp \left(- \sum_{k,l=1}^{N-1} A_{kl} \vec{x}_k \cdot \vec{x}_l \right). \quad (1.111)$$

Effectuons une transformation orthogonale R ,

$$R^T R = R R^T = I, \quad (1.112)$$

sur A et choisissons la de telle manière à ramener A à sa forme diagonale, qu'on désignera par \tilde{A}

$$R A R^T = \tilde{A}. \quad (1.113)$$

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

$$A = R^T \tilde{A} R. \quad (1.114)$$

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

$$\sum_{k,l=1}^{N-1} A_{kl} \vec{x}_k \cdot \vec{x}_l = \sum_{k,l,n,m=1}^{N-1} R_{km}^T \tilde{A}_{mn} R_{nl} \vec{x}_k \cdot \vec{x}_l = \sum_{n,m=1}^{N-1} \tilde{A}_{mn} \vec{y}_m \cdot \vec{y}_n = \sum_{n=1}^{N-1} \tilde{A}_{nn} \vec{y}_n^2, \quad (1.115)$$

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

$$\vec{y}_k = \sum_{l=1}^{N-1} R_{kl} \vec{x}_l, \quad (1.116)$$

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 (1.115), on a également utilisé le fait que \tilde{A} est une matrice diagonale.

On peut d'autre part remarquer que l'élément d'intégration $d^3 \vec{x}_1 \cdots d^3 \vec{x}_{N-1}$ est inva-

riant 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 alors se mettre sous la forme

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = \int \dots \int d^3 \vec{y}_1 \dots d^3 \vec{y}_{N-1} f(\vec{r}_{ij}) \exp \left(- \sum_{k=1}^{N-1} \tilde{A}_{kk} \vec{y}_k^2 \right), \quad (1.117)$$

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

En inversant (1.116), on obtient les \vec{x}_k en termes des \vec{y}_l

$$\vec{x}_k = \sum_{l=1}^{N-1} R_{kl}^T \vec{y}_l. \quad (1.118)$$

En reportant alors dans (1.104), on arrive à

$$\vec{r}_{ij} = \sum_{l=1}^{N-1} \left(\sum_{k=1}^{N-1} d_{ij}^k R_{kl}^T \right) \vec{y}_l. \quad (1.119)$$

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

$$\vec{Z}_l = (\tilde{A}_{ll})^{1/2} \vec{y}_l. \quad (1.120)$$

Nous avons

$$\exp \left(- \sum_{k=1}^{N-1} \tilde{A}_{kk} \vec{y}_k^2 \right) = \exp \left(- \sum_{k=1}^{N-1} \vec{Z}_k^2 \right)$$

et

$$\begin{aligned} d^3 \vec{y}_1 \dots d^3 \vec{y}_{N-1} &= (\tilde{A}_{11})^{-3/2} d^3 \vec{Z}_1 \dots (\tilde{A}_{N-1, N-1})^{-3/2} d^3 \vec{Z}_{N-1} \\ &= (\Delta)^{-3/2} d^3 \vec{Z}_1 \dots d^3 \vec{Z}_{N-1} \end{aligned}$$

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

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = (\Delta)^{-3/2} \int \dots \int d^3 \vec{Z}_1 \dots d^3 \vec{Z}_{N-1} f(\vec{r}_{ij}) \exp \left(- \sum_{k=1}^{N-1} \vec{Z}_k^2 \right), \quad (1.121)$$

où Δ désigne le déterminant de la matrice A . Il est à noter que \vec{r}_{ij} dans l'expression

précédente doit être maintenant considéré comme une fonction des \vec{Z}_k

$$\vec{r}_{ij} = \sum_{l=1}^{N-1} \left(\sum_{k=1}^{N-1} d_{ij}^k R_{kl}^T \right) (\tilde{A}_{ll})^{-1/2} \vec{Z}_l. \quad (1.122)$$

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 qu'en tenant compte du fait que

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

le facteur de proportionnalité est

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

et il est facile de se convaincre qu'on peut toujours faire le choix du signe +.

Comme $d^3 \vec{Z}_1 \dots d^3 \vec{Z}_{N-1}$ et $\sum_{k=1}^{N-1} \vec{Z}_k^2$ sont invariants sous toute transformation orthogonale

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = (\Delta)^{-3/2} \int \dots \int d^3 \vec{W}_1 \dots d^3 \vec{W}_{N-1} f \left(\sqrt{d_{ij}^T A^{-1} d_{ij}} \vec{W}_1 \right) \exp \left(- \sum_{k=1}^{N-1} \vec{W}_k^2 \right). \quad (1.123)$$

Si on utilise le résultat

$$\int d^3 \vec{W} \exp \left(- \vec{W}^2 \right) = \pi^{3/2}.$$

L'intégration sur $\vec{W}_2, \vec{W}_3, \dots, \vec{W}_{N-1}$ est immédiate. Il s'ensuit que

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = (\Delta)^{-3/2} (\pi)^{3(N-2)/2} \int d^3 \vec{W}_1 f \left((d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{1/2} \vec{W}_1 \right) \exp \left(- \vec{W}_1^2 \right). \quad (1.124)$$

Si on fait le changement de variables

$$\vec{W}'_1 = (d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{1/2} \vec{W}_1, \quad (1.125)$$

$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle$ peut aussi être réécrit sous la forme

$$\begin{aligned} \langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle &= (\Delta)^{-3/2} (\pi)^{3(N-2)/2} (d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{-3/2} \\ &\times \int d^3 \vec{W}'_1 f(\vec{W}'_1) \exp\left(- (d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{-1} \vec{W}'_1{}^2\right). \end{aligned} \quad (1.126)$$

A partir de (1.124), on peut déduire le recouvrement de deux gaussiennes en posant $f(\vec{r}_{ij})=1$. On obtient :

$$\langle n | m \rangle = (\pi^{N-1}/\Delta)^{3/2}. \quad (1.127)$$

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

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = \langle n | m \rangle \pi^{-3/2} \int d^3 \vec{W}_1 f\left((d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{1/2} \vec{W}_1\right) \exp\left(-\vec{W}_1^2\right). \quad (1.128)$$

Pour un potentiel en loi de puissance

$$V = V_{ij}(\vec{r}_{ij}) = \lambda_{ij} r_{ij}^{\nu_{ij}}, \quad (1.129)$$

l'expression (1.128) se réduit à

$$\langle n | \lambda_{ij} r_{ij}^{\nu_{ij}} | m \rangle = \langle n | m \rangle \pi^{-3/2} \lambda_{ij} (d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{\nu_{ij}/2} \int d^3 \vec{W}_1 W_1^{\nu_{ij}} \exp\left(-\vec{W}_1^2\right). \quad (1.130)$$

En utilisant le résultat

$$\int d^3 \vec{W}_1 W_1^{\nu_{ij}} e^{-\vec{W}_1^2} = 4\pi \int_0^\infty dW_1 W_1^{\nu_{ij}+2} e^{-W_1^2} = 2\pi \Gamma\left(\frac{\nu_{ij}+3}{2}\right) \quad \text{pour } \nu_{ij} > -3, \quad (1.131)$$

on obtient finalement

$$\langle n | \lambda_{ij} r_{ij}^{\nu_{ij}} | m \rangle = \langle n | m \rangle \frac{2\lambda_{ij}}{\sqrt{\pi}} (d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{\nu_{ij}/2} \Gamma\left(\frac{\nu_{ij}+3}{2}\right), \quad (1.132)$$

qui peut être réécrit comme

$$\langle n | \lambda_{ij} r_{ij}^{\nu_{ij}} | m \rangle = \langle n | m \rangle \frac{2\lambda_{ij}}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{\nu_{ij}+3}{2}\right) \gamma_{ij,ij}^{\nu_{ij}/2} \quad (1.133)$$

si on introduit la notation

$$\gamma_{ij,kl} = d_{ij}^T A^{-1} d_{kl}. \quad (1.134)$$

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

$$\langle n | \frac{\vec{p}_k^2}{2M_k} | m \rangle = \frac{1}{2M_k} (\langle n | \vec{p}_k \rangle (\vec{p}_k | m \rangle)). \quad (1.135)$$

En utilisant la relation de définition des gaussiennes corrélées (1.106), on obtient

$$\vec{p}_k | m \rangle = i\hbar \sum_{p=1}^{N-1} A_{kp}^m \vec{x}_p | m \rangle. \quad (1.136)$$

Il s'ensuit que

$$\langle n | \frac{\vec{p}_k^2}{2M_k} | m \rangle = \frac{\hbar^2}{2M_k} \sum_{q,p=1}^{N-1} A_{kq}^n A_{kp}^m \langle n | \vec{x}_q \cdot \vec{x}_p | m \rangle. \quad (1.137)$$

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

$$\langle n | \vec{x}_q \cdot \vec{x}_p | m \rangle = \int \cdots \int d^3 \vec{x}_1 \cdots d^3 \vec{x}_{N-1} (\vec{x}_q \cdot \vec{x}_p) \exp \left(- \sum_{i,j=1}^{N-1} A_{ij} \vec{x}_i \cdot \vec{x}_j \right). \quad (1.138)$$

En termes des \vec{y}_k , (1.116), (1.138) prend la forme suivante :

$$\langle n | \vec{x}_q \cdot \vec{x}_p | m \rangle = \sum_{i,j=1}^{N-1} R_{qi}^{-1} R_{pj}^{-1} \int \cdots \int d^3 \vec{y}_1 \cdots d^3 \vec{y}_{N-1} (\vec{y}_i \cdot \vec{y}_j) \exp \left(- \sum_{k=1}^{N-1} \tilde{A}_{kk} \vec{y}_k^2 \right). \quad (1.139)$$

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

$$\langle n | \vec{x}_q \cdot \vec{x}_p | m \rangle = \sum_{j=1}^{N-1} R_{qj}^T R_{jp} \int \cdots \int d^3 \vec{y}_1 \cdots d^3 \vec{y}_{N-1} \vec{y}_j^2 \exp \left(- \sum_{k=1}^{N-1} \tilde{A}_{kk} \vec{y}_k^2 \right). \quad (1.140)$$

En faisant usage du résultat

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \vec{x}^2 \exp(-a \vec{x}^2) d^3 \vec{x} = \frac{3}{2a} \left(\frac{\pi}{a} \right)^{3/2}, \quad (1.141)$$

valable pour $a > 0$, on aboutit à

$$\begin{aligned}
\langle n | \vec{x}_q \cdot \vec{x}_p | m \rangle &= \frac{3}{2} \left(\frac{\pi}{\Delta} \right)^{3/2} \pi^{\frac{3(N-2)}{2}} \sum_{j=1}^{N-1} R_{qj}^T \tilde{A}_{jj}^{-1} R_{jp} \\
&= \frac{3}{2} \left(\frac{\pi}{\Delta} \right)^{3/2} \pi^{\frac{3(N-2)}{2}} A_{qp}^{-1} \\
&= \frac{3}{2} \langle n | m \rangle A_{qp}^{-1}.
\end{aligned} \tag{1.142}$$

Finalement, en reportant dans l'expression (1.137), on obtient

$$\begin{aligned}
\langle n | \frac{\vec{p}_k^2}{2M_k} | m \rangle &= \frac{3}{2} \langle n | m \rangle \frac{\hbar^2}{2M_k} \sum_{q,p=1}^{N-1} A_{kq}^n A_{qp}^{-1} A_{kp}^m, \\
&= \frac{3}{2} \langle n | m \rangle \frac{\hbar^2}{2M_k} (A^n A^{-1} A^m)_{kk},
\end{aligned} \tag{1.143}$$

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

$$\langle n | T | m \rangle = \frac{3}{2} \langle n | m \rangle \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\hbar^2}{2M_k} (A^n A^{-1} A^m)_{kk}. \tag{1.144}$$

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

$$\langle n | T | m \rangle = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{2M} \langle n | m \rangle \text{tr} (A^n A^{-1} A^m). \tag{1.145}$$

Remarquons que dans un système d'unités où $\frac{\hbar^2}{2M} = 1$, on retrouve le résultat de la référence [19].

Donnons à titre d'exemple la valeur moyenne de l'énergie pour une seule génération de gaussiennes dans le cas d'un potentiel en loi de puissance (1.129). Nous avons

$$E = \frac{3}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\hbar^2}{2M_k} A_{kk} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{i < j=1}^N \Gamma \left(\frac{\nu_{ij} + 3}{2} \right) \lambda_{ij} \gamma_{ij,ij}^{\nu_{ij}/2}. \tag{1.146}$$

On peut également considérer d'autres observables intéressantes, telles que les corrélations à courte portée. Le lecteur intéressé par plus de détails pourra consulter avec profit la référence [11].

1.3 Bornes inférieures naïve et améliorée

Dans cette section, nous allons présenter tour à tour les bornes inférieures naïve et améliorée.

Considérons un système de N particules obéissant à une cinématique non relativiste et interagissant par des forces à deux corps, c'est à dire décrit par un Hamiltonien H donné par

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i<j=1}^N V_{ij}(\vec{r}_{ij}), \quad (1.147)$$

où m_i , \vec{r}_i et \vec{p}_i désignent respectivement la masse, la position et l'impulsion de la i ème particule. $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$, $i < j = 1, \dots, N$, ($N > 2$). Le potentiel $V_{ij}(\vec{r}_{ij})$ de qui dérive la force à deux corps peut dépendre des deux particules impliquées.

1.3.1 Borne inférieure naïve

La borne inférieure naïve correspond à la décomposition suivante du terme d'énergie cinétique :

$$\sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} = \frac{1}{N-1} \sum_{i<j=1}^N \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \frac{\vec{p}_j^2}{2m_j} \right). \quad (1.148)$$

L'Hamiltonien H peut alors être réécrit comme une somme d'Hamiltoniens à deux corps $H_{ij}^{(2)}$

$$H = \sum_{i<j=1}^N H_{ij}^{(2)}$$

avec

$$H_{ij}^{(2)} = \frac{1}{N-1} \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \frac{\vec{p}_j^2}{2m_j} \right) + V_{ij}(\vec{r}_{ij}). \quad (1.149)$$

Soit $|\Psi\rangle$ l'état fondamental normalisé du système et E l'énergie correspondante, alors

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \langle \Psi | \sum_{i<j=1}^N H_{ij}^{(2)} | \Psi \rangle. \quad (1.150)$$

En vertu du principe variationnel

$$\langle \Psi | H_{ij}^{(2)} | \Psi \rangle \geq E_{ij}^{(2)}, \quad (1.151)$$

où $E_{ij}^{\prime(2)}$ désigne l'énergie de l'état fondamental de l'Hamiltonien à deux corps $H_{ij}^{\prime(2)}$, qui est la même que l'énergie de l'état fondamental $E_{ij}^{(2)}$ de l'Hamiltonien relatif à deux corps $H_{ij}^{(2)}$ obtenu en soustrayant de $H_{ij}^{\prime(2)}$ l'énergie cinétique du centre de masse

$$H_{ij}^{(2)} = \frac{\vec{p}_{ij}^2}{2\mu_{ij}} + V_{ij}(\vec{r}_{ij}), \quad i < j = 1, \dots, N, \quad (1.152)$$

où \vec{p}_{ij} est le moment conjugué de \vec{r}_{ij} et

$$\mu_{ij} = (N-1) \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}, \quad i < j = 1, \dots, N, \quad (1.153)$$

désigne la masse réduite du système formé de deux particules de masses $(N-1)m_i$ et $(N-1)m_j$. Donc

$$E_{ij}^{\prime(2)} = E_{ij}^{(2)}(\mu_{ij}). \quad (1.154)$$

Il s'ensuit que

$$E \geq \sum_{i < j=1}^N E_{ij}^{(2)}(\mu_{ij}). \quad (1.155)$$

$\sum_{i < j=1}^N E_{ij}^{(2)}(\mu_{ij})$ est appelée borne inférieure naïve et est notée $E_{naïve}$.

Considérons le cas particulier important d'un potentiel à deux corps en loi de puissance

$$V_{ij}(\vec{r}_{ij}) = \lambda_{ij} r_{ij}^{\nu_{ij}}, \quad (1.156)$$

où λ_{ij} , la constante de couplage, et ν_{ij} , l'exposant du potentiel en loi de puissance, sont de même signe. En vertu des lois d'échelle

$$E^{(2)}(a, \lambda, \nu) = (a_{ij})^{\frac{\nu}{2+\nu}} |\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}} E^{(2)}(1, 1, \nu) \quad (1.157)$$

où $E^{(2)}(a, \lambda, \nu)$ désigne l'énergie de l'état fondamental de l'Hamiltonien

$$H^{(2)} = a \vec{p}^2 + |\lambda| \text{signe}(\nu) r^\nu. \quad (1.158)$$

La borne inférieure naïve $E_{naïve}$ peut alors être mise sous la forme

$$E_{naïve} = \sum_{i < j=1}^N (2\mu_{ij})^{\frac{-v_{ij}}{2+v_{ij}}} |\lambda_{ij}|^{\frac{2}{2+v_{ij}}} E^{(2)}(1, 1, v_{ij}). \quad (1.159)$$

Considérons maintenant quelques configurations spéciales de masse, et faisons l'hypothèse que l'interaction entre deux particules ne peut dépendre que des masses de ces dernières.

Configuration ($N \times m$)

C'est le cas d'un système formé de masses toutes égales. Par conséquent

$$\mu_{ij} = (N - 1)m/2, \quad i < j = 1, \dots, N, \quad (1.160)$$

est indépendant de la paire considérée et il en est également de même pour $\lambda_{ij} = \lambda$ et $\nu_{ij} = \nu$. La borne naïve se simplifie alors en

$$E_{naïve} = \frac{N(N-1)}{2} ((N-1)m)^{\frac{-\nu}{2+\nu}} |\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}} E^{(2)}(1, 1, \nu). \quad (1.161)$$

Configuration ($n_1 \times m_1, n_2 \times m_2$)

C'est les cas d'un système à N corps formé de n_1 ($n_1 \leq N$) particules de masse m_1 et de n_2 ($n_2 = N - n_1$) particules de masse m_2 . Nous avons alors trois masses réduites différentes

$$\begin{aligned} \mu_{ij} &= \mu_{m_1 m_1} = (N - 1)m_1/2 && \text{pour } i < j = 1, \dots, n_1, \\ \mu_{ij} &= \mu_{m_2 m_2} = (N - 1)m_2/2 && \text{pour } i < j = n_1 + 1, \dots, N, \\ \mu_{ij} &= \mu_{m_1 m_2} = (N - 1) \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} && \text{pour } i = 1, \dots, n_1, \quad j = n_1 + 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (1.162)$$

trois constantes de couplage

$$\begin{aligned} \lambda_{ij} &= \lambda_{m_1 m_1} && \text{pour } i < j = 1, \dots, n_1, \\ \lambda_{ij} &= \lambda_{m_2 m_2} && \text{pour } i < j = n_1 + 1, \dots, N, \\ \lambda_{ij} &= \lambda_{m_1 m_2} && \text{pour } i = 1, \dots, n_1, \quad j = n_1 + 1, \dots, N \end{aligned} \quad (1.163)$$

et trois exposants

$$\begin{aligned}
\nu_{ij} &= \nu_{m_1 m_1} \quad \text{pour } i < j = 1, \dots, n_1, \\
\nu_{ij} &= \nu_{m_2 m_2} \quad \text{pour } i < j = n_1 + 1, \dots, N, \\
\nu_{ij} &= \nu_{m_1 m_2} \quad \text{pour } i = 1, \dots, n_1, \quad j = n_1 + 1, \dots, N.
\end{aligned} \tag{1.164}$$

L'expression générale de la borne naïve se réduit alors à

$$\begin{aligned}
E_{naïve} &= \frac{n_1(n_1-1)}{2} ((n_1-1)m_1)^{\frac{-\nu_{m_1 m_1}}{2+\nu_{m_1 m_1}}} |\lambda_{m_1 m_1}|^{\frac{2}{2+\nu_{m_1 m_1}}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_1 m_1}) \\
&+ \frac{n_2(n_2-1)}{2} ((n_2-1)m_2)^{\frac{-\nu_{m_2 m_2}}{2+\nu_{m_2 m_2}}} |\lambda_{m_2 m_2}|^{\frac{2}{2+\nu_{m_2 m_2}}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_2 m_2}) \\
&+ n_1 n_2 \left(2(N-1) \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \right)^{\frac{-\nu_{m_1 m_2}}{2+\nu_{m_1 m_2}}} |\lambda_{m_1 m_2}|^{\frac{2}{2+\nu_{m_1 m_2}}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_1 m_2}).
\end{aligned} \tag{1.165}$$

Dans le cas où $n_1 = N - 1$ et $n_2 = 1$, $E_{naïve}$ se réduit à

$$\begin{aligned}
E_{naïve} &= \frac{(N-1)(N-2)}{2} ((N-1)m_1)^{\frac{-\nu_{m_1 m_1}}{2+\nu_{m_1 m_1}}} |\lambda_{m_1 m_1}|^{\frac{2}{2+\nu_{m_1 m_1}}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_1 m_1}) \\
&+ (N-1) \left(2(N-1) \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \right)^{\frac{-\nu_{m_1 m_2}}{2+\nu_{m_1 m_2}}} |\lambda_{m_1 m_2}|^{\frac{2}{2+\nu_{m_1 m_2}}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_1 m_2}).
\end{aligned} \tag{1.166}$$

Configuration $(n_1 \times m_1, n_2 \times m_2, n_3 \times m_3)$

Ici nous considérons des systèmes où trois masses distinctes m_1 , m_2 et m_3 sont impliquées. Les particules de masses m_1 , m_2 et m_3 sont aux nombres de n_1 , n_2 et n_3 respectivement avec $n_1 + n_2 + n_3 = N$.

Dans ce cas nous avons 6 masses réduites, 6 exposants et 6 constantes de couplage

$$\begin{aligned}
\mu_{ij} &= \mu_{m_1 m_1} = (N-1) m_1 / 2 \quad \text{pour } i < j = 1, \dots, n_1, \\
\mu_{ij} &= \mu_{m_2 m_2} = (N-1) m_2 / 2 \quad \text{pour } i < j = n_1 + 1, \dots, n_1 + n_2, \\
\mu_{ij} &= \mu_{m_3 m_3} = (N-1) m_3 / 2 \quad \text{pour } i < j = n_1 + n_2 + 1, \dots, N, \\
\mu_{ij} &= \mu_{m_1 m_2} = (N-1) \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad \text{pour } i = 1, \dots, n_1, \quad j = n_1 + 1, \dots, n_1 + n_2, \\
\mu_{ij} &= \mu_{m_1 m_3} = (N-1) \frac{m_1 m_3}{m_1 + m_3} \quad \text{pour } i = 1, \dots, n_1, \quad j = n_1 + n_2 + 1, \dots, N, \\
\mu_{ij} &= \mu_{m_2 m_3} = (N-1) \frac{m_2 m_3}{m_2 + m_3} \quad \text{pour } i = n_1 + 1, \dots, n_1 + n_2, \quad j = n_1 + n_2 + 1, \dots, N,
\end{aligned} \tag{1.167}$$

$$\begin{aligned}
\nu_{ij} &= \nu_{m_1 m_1} \quad \text{pour } i < j = 1, \dots, n_1, \\
\nu_{ij} &= \nu_{m_2 m_2} \quad \text{pour } i < j = n_1 + 1, \dots, n_1 + n_2, \\
\nu_{ij} &= \nu_{m_3 m_3} \quad \text{pour } i < j = n_1 + n_2 + 1, \dots, N, \\
\nu_{ij} &= \nu_{m_1 m_2} \quad \text{pour } i = 1, \dots, n_1, \quad j = n_1 + 1, \dots, n_1 + n_2, \\
\nu_{ij} &= \nu_{m_1 m_3} \quad \text{pour } i = 1, \dots, n_1, \quad j = n_1 + n_2 + 1, \dots, N, \\
\nu_{ij} &= \nu_{m_2 m_3} \quad \text{pour } i = n_1 + 1, \dots, n_1 + n_2, \quad j = n_1 + n_2 + 1, \dots, N
\end{aligned} \tag{1.168}$$

et

$$\begin{aligned}
\lambda_{ij} &= \lambda_{m_1 m_1}, \quad \nu_{ij} = \nu_{m_1 m_1} \quad \text{pour } i < j = 1, \dots, n_1, \\
\lambda_{ij} &= \lambda_{m_2 m_2}, \quad \nu_{ij} = \nu_{m_2 m_2} \quad \text{pour } i < j = n_1 + 1, \dots, n_1 + n_2, \\
\lambda_{ij} &= \lambda_{m_3 m_3}, \quad \nu_{ij} = \nu_{m_3 m_3} \quad \text{pour } i < j = n_1 + n_2 + 1, \dots, N, \\
\lambda_{ij} &= \lambda_{m_1 m_2}, \quad \nu_{ij} = \nu_{m_1 m_2} \quad \text{pour } i = 1, \dots, n_1, \quad j = n_1 + 1, \dots, n_1 + n_2, \\
\lambda_{ij} &= \lambda_{m_1 m_3}, \quad \nu_{ij} = \nu_{m_1 m_3} \quad \text{pour } i = 1, \dots, n_1, \quad j = n_1 + n_2 + 1, \dots, N, \\
\lambda_{ij} &= \lambda_{m_2 m_3}, \quad \nu_{ij} = \nu_{m_2 m_3} \quad \text{pour } i = n_1 + 1, \dots, n_1 + n_2, \quad j = n_1 + n_2 + 1, \dots, N,
\end{aligned} \tag{1.169}$$

et la borne naïve se réduit alors à

$$\begin{aligned}
E_{naïve} &= \frac{n_1(n_1-1)}{2} ((n_1-1)m_1)^{\frac{-\nu_{m_1 m_1}}{2+\nu_{m_1 m_1}}} |\lambda_{m_1 m_1}|^{\frac{2}{2+\nu_{m_1 m_1}}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_1 m_1}) \\
&+ \frac{n_2(n_2-1)}{2} ((n_2-1)m_2)^{\frac{-\nu_{m_2 m_2}}{2+\nu_{m_2 m_2}}} |\lambda_{m_2 m_2}|^{\frac{2}{2+\nu_{m_2 m_2}}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_2 m_2}) \\
&+ \frac{n_3(n_3-1)}{2} ((n_3-1)m_3)^{\frac{-\nu_{m_3 m_3}}{2+\nu_{m_3 m_3}}} |\lambda_{m_3 m_3}|^{\frac{2}{2+\nu_{m_3 m_3}}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_3 m_3}) \\
&+ n_1 n_2 \left(2(N-1) \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \right)^{\frac{-\nu_{m_1 m_2}}{2+\nu_{m_1 m_2}}} |\lambda_{m_1 m_2}|^{\frac{2}{2+\nu_{m_1 m_2}}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_1 m_2}) \\
&+ n_1 n_3 \left(2(N-1) \frac{m_1 m_3}{m_1 + m_3} \right)^{\frac{-\nu_{m_1 m_3}}{2+\nu_{m_1 m_3}}} |\lambda_{m_1 m_3}|^{\frac{2}{2+\nu_{m_1 m_3}}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_1 m_3}) \\
&+ n_2 n_3 \left(2(N-1) \frac{m_2 m_3}{m_2 + m_3} \right)^{\frac{-\nu_{m_2 m_3}}{2+\nu_{m_2 m_3}}} |\lambda_{m_2 m_3}|^{\frac{2}{2+\nu_{m_2 m_3}}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_2 m_3}).
\end{aligned} \tag{1.170}$$

1.3.2 Borne inférieure améliorée

Un défaut de la borne inférieure naïve est que le mouvement du centre de masse n'est pas séparé de l'Hamiltonien H , ce qui se répercute forcément sur la qualité de la borne inférieure. Ceci a motivé le développement d'une autre borne : la borne inférieure améliorée qu'on va présenter dans ce qui suit.

La borne inférieure améliorée a comme point de départ la décomposition suivante du terme d'énergie cinétique :

$$T = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} = \frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2M} + \sum_{i<j=1}^N \left(\frac{(m_j \vec{p}_i - m_i \vec{p}_j)^2}{2m_i m_j M} \right) \quad (1.171)$$

où $\frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2M}$ désigne l'énergie cinétique du centre de masse ($M = \sum_{i=1}^N m_i$). L'Hamiltonien du système H peut alors être réécrit comme :

$$H = \frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2M} + \sum_{i<j=1}^N \tilde{H}_{ij}^{(2)}, \quad (1.172)$$

où $\tilde{H}_{ij}^{(2)}$ est un Hamiltonien à deux corps

$$\tilde{H}_{ij}^{(2)} = \frac{(m_j \vec{p}_i - m_i \vec{p}_j)^2}{2m_i m_j M} + V_{ij}(\vec{r}_{ij}) \quad i < j = 1, \dots, N. \quad (1.173)$$

Il est clair que

$$\vec{p}_{ij} := \frac{m_j \vec{p}_i - m_i \vec{p}_j}{m_i + m_j} \quad i < j = 1, \dots, N \quad (1.174)$$

est un moment conjugué de \vec{r}_{ij} et il est plus judicieux de réécrire $\tilde{H}_{ij}^{(2)}$ en faisant apparaître \vec{p}_{ij}

$$\tilde{H}_{ij}^{(2)} = \frac{\vec{p}_{ij}^2}{2\tilde{\mu}_{ij}} + V_{ij}(\vec{r}_{ij}) \quad (1.175)$$

avec

$$\tilde{\mu}_{ij} = \frac{m_i m_j M}{(m_i + m_j)^2} \quad i < j = 1, \dots, N. \quad (1.176)$$

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

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \langle \Psi | \frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2M} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \sum_{i<j=1}^N \tilde{H}_{ij}^{(2)} | \Psi \rangle. \quad (1.177)$$

Comme $|\Psi\rangle$ est invariant par translation, il en résulte que

$$\langle \Psi | \frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2M} | \Psi \rangle = 0 \quad (1.178)$$

et en vertu du principe variationnel

$$\langle \Psi | \tilde{H}_{ij}^{(2)} | \Psi \rangle \geq E_{ij}^{(2)}(\tilde{\mu}_{ij}), \quad (1.179)$$

où $E_{ij}^{(2)}(\tilde{\mu}_{ij})$ désigne l'énergie de l'état fondamental de l'Hamiltonien à deux corps $\tilde{H}_{ij}^{(2)}$.

Donc

$$E \geq \sum_{i < j=1}^N E_{ij}^{(2)}(\tilde{\mu}_{ij}). \quad (1.180)$$

On obtient donc de cette manière une borne inférieure baptisée borne inférieure améliorée et notée $E_{\text{améliorée}}$

$$E_{\text{améliorée}} = \sum_{i < j=1}^N E_{ij}^{(2)}(\tilde{\mu}_{ij}). \quad (1.181)$$

considérons le cas intéressant d'un potentiel à deux corps en loi de puissance

$$V_{ij}(\vec{r}_{ij}) = \lambda_{ij} r_{ij}^{\nu_{ij}}. \quad (1.182)$$

En faisant usage des lois d'échelle (1.157), on a dans ce cas :

$$E_{\text{améliorée}} = \sum_{i < j=1}^N \left(\frac{2m_i m_j M}{(m_i + m_j)^2} \right)^{\frac{-\nu_{ij}}{2+\nu_{ij}}} |\lambda_{ij}|^{\frac{2}{2+\nu_{ij}}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{ij}) \quad (1.183)$$

où $E^{(2)}(1, 1, \nu)$ désigne l'énergie de l'état fondamental de l'Hamiltonien $H^{(2)}$, équation (1.158), pour $a = 1$ et $|\lambda| = 1$.

Comme dans le cas de la borne inférieure naïve, considérons tour à tour les configurations de masse $(N \times m)$, $(n_1 \times m_1, n_2 \times m_2)$ et $(n_1 \times m_1, n_2 \times m_2, n_3 \times m_3)$ avec toujours les mêmes hypothèses sur les exposants ν_{ij} et les constantes de couplage λ_{ij} , à savoir que ν_{ij} et λ_{ij} dépendent uniquement des masses des deux particules impliquées.

Configuration $(N \times m)$

Nous avons une seule masse réduite

$$\tilde{\mu}_{ij} = \tilde{\mu} = \frac{m^2 M}{4m^2} = \frac{M}{4} = \frac{Nm}{4} \quad i < j = 1, \dots, N, \quad (1.184)$$

un seul exposant ν_{ij} et une seule constante de couplage λ_{ij}

$$\lambda_{ij} = \lambda, \quad \nu_{ij} = \nu \quad \text{pour } i < j = 1, \dots, N, \quad (1.185)$$

auquel cas la borne inférieure améliorée se réduit à

$$E_{\text{améliorée}} = \frac{N(N-1)}{2} \left(\frac{Nm}{2} \right)^{\frac{-\nu}{2+\nu}} |\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}} E^{(2)}(1, 1, \nu). \quad (1.186)$$

Configuration $(n_1 \times m_1, n_2 \times m_2)$

Nous avons alors deux masses réduites, trois valeurs pour les exposants et trois constantes de couplage différentes

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_{ij} = \tilde{\mu}_{m_1 m_1} &= \frac{(n_1 m_1 + (N - n_1) m_2)}{2} \quad \text{pour } i < j = 1, \dots, n_1 \\ \tilde{\mu}_{ij} = \tilde{\mu}_{m_2 m_2} &= \frac{(n_1 m_1 + (N - n_1) m_2)}{2} \quad \text{pour } i < j = n_1 + 1, \dots, N \\ \tilde{\mu}_{ij} = \tilde{\mu}_{m_1 m_2} &= \frac{2m_1 m_2 (n_1 m_1 + (N - n_1) m_2)}{(m_1 + m_2)^2} \quad \text{pour } i = 1, \dots, n_1, \quad j = n_1 + 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (1.187)$$

et

$$\begin{aligned} \lambda_{ij} = \lambda_{m_1 m_1}, \quad \nu_{ij} = \nu_{m_1 m_1} &\quad \text{pour } i < j = 1, \dots, n_1 \\ \lambda_{ij} = \lambda_{m_2 m_2}, \quad \nu_{ij} = \nu_{m_2 m_2} &\quad \text{pour } i < j = n_1 + 1, \dots, N \\ \lambda_{ij} = \lambda_{m_1 m_2}, \quad \nu_{ij} = \nu_{m_1 m_2} &\quad \text{pour } i = 1, \dots, n_1, \quad j = n_1 + 1, \dots, N \end{aligned} \quad (1.188)$$

et la borne inférieure améliorée se réduit alors à

$$\begin{aligned} E_{\text{améliorée}} &= \frac{n_1(n_1-1)}{2} \left(\frac{n_1 m_1 + (N - n_1) m_2}{2} \right)^{\frac{-\nu_{m_1 m_1}}{2+\nu_{m_1 m_1}}} |\lambda_{m_1 m_1}|^{\frac{2}{2+\nu_{m_1 m_1}}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_1 m_1}) \\ &+ \frac{n_2(n_2-1)}{2} \left(\frac{n_1 m_1 + (N - n_1) m_2}{2} \right)^{\frac{-\nu_{m_2 m_2}}{2+\nu_{m_2 m_2}}} |\lambda_{m_2 m_2}|^{\frac{2}{2+\nu_{m_2 m_2}}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_2 m_2}) \\ &+ n_1 n_2 \left(\frac{2m_1 m_2 (n_1 m_1 + (N - n_1) m_2)}{(m_1 + m_2)^2} \right)^{\frac{-\nu_{m_1 m_2}}{2+\nu_{m_1 m_2}}} |\lambda_{m_1 m_2}|^{\frac{2}{2+\nu_{m_1 m_2}}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_1 m_2}). \end{aligned} \quad (1.189)$$

Dans le cas où $n_1 = N - 1$ et $n_2 = 1$, $E_{\text{améliorée}}$ se simplifie d'avantage

$$\begin{aligned}
E_{\text{améliorée}} &= \frac{(N-1)(N-2)}{2} \left(\frac{(N-1)m_1+m_2}{2} \right)^{\frac{-\nu m_1 m_1}{2+\nu m_1 m_1}} |\lambda_{m_1 m_1}|^{\frac{2}{2+\nu m_1 m_1}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_1 m_1}) \\
&+ (N-1) \left(\frac{2m_1 m_2 ((N-1)m_1+m_2)}{(m_1+m_2)^2} \right)^{\frac{-\nu m_1 m_2}{2+\nu m_1 m_2}} |\lambda_{m_1 m_2}|^{\frac{2}{2+\nu m_1 m_2}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_1 m_2}).
\end{aligned} \tag{1.190}$$

Configuration $(n_1 \times m_1, n_2 \times m_2, n_3 \times m_3)$

Nous avons alors six masses réduites différentes

$$\begin{aligned}
\mu_{ij} = \mu_{m_1 m_1} &= \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{4} & \text{pour } i < j = 1, \dots, n_1, \\
\mu_{ij} = \mu_{m_2 m_2} &= \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{4} & \text{pour } i < j = n_1 + 1, \dots, n_1 + n_2, \\
\mu_{ij} = \mu_{m_3 m_3} &= \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{4} & \text{pour } i < j = n_1 + n_2 + 1, \dots, N, \\
\mu_{ij} = \mu_{m_1 m_2} &= \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{(m_1 + m_2)^2} m_1 m_2 & \text{pour } i = 1, \dots, n_1, \quad j = n_1 + 1, \dots, n_1 + n_2, \\
\mu_{ij} = \mu_{m_1 m_3} &= \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{(m_1 + m_3)^2} m_1 m_3 & \text{pour } i = 1, \dots, n_1, \quad j = n_1 + n_2 + 1, \dots, N, \\
\mu_{ij} = \mu_{m_2 m_3} &= \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{(m_2 + m_3)^2} m_2 m_3 & \text{pour } i = n_1 + 1, \dots, n_1 + n_2, \quad j = n_1 + n_2 + 1, \dots, N,
\end{aligned} \tag{1.191}$$

six valeurs différentes pour les exposants ν_{ij} , équation (1.168) et six constantes de couplage différentes λ_{ij} , équation (1.169). La borne inférieure améliorée se réduit alors à :

$$\begin{aligned}
E_{\text{améliorée}} &= \frac{n_1(n_1-1)}{2} \left(\frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{2} \right)^{\frac{-\nu m_1 m_1}{2+\nu m_1 m_1}} |\lambda_{m_1 m_1}|^{\frac{2}{2+\nu m_1 m_1}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_1 m_1}) \\
&+ \frac{n_2(n_2-1)}{2} \left(\frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{2} \right)^{\frac{-\nu m_2 m_2}{2+\nu m_2 m_2}} |\lambda_{m_2 m_2}|^{\frac{2}{2+\nu m_2 m_2}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_2 m_2}) \\
&+ \frac{n_3(n_3-1)}{2} \left(\frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{2} \right)^{\frac{-\nu m_3 m_3}{2+\nu m_3 m_3}} |\lambda_{m_3 m_3}|^{\frac{2}{2+\nu m_3 m_3}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_3 m_3}) \\
&+ n_1 n_2 \left(2m_1 m_2 \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{(m_1 + m_2)^2} \right)^{\frac{-\nu m_1 m_2}{2+\nu m_1 m_2}} |\lambda_{m_1 m_2}|^{\frac{2}{2+\nu m_1 m_2}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_1 m_2}) \\
&+ n_1 n_3 \left(2m_1 m_3 \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{(m_1 + m_3)^2} \right)^{\frac{-\nu m_1 m_3}{2+\nu m_1 m_3}} |\lambda_{m_1 m_3}|^{\frac{2}{2+\nu m_1 m_3}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_1 m_3}) \\
&+ n_2 n_3 \left(2m_2 m_3 \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{(m_2 + m_3)^2} \right)^{\frac{-\nu m_2 m_3}{2+\nu m_2 m_3}} |\lambda_{m_2 m_3}|^{\frac{2}{2+\nu m_2 m_3}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{m_2 m_3}).
\end{aligned} \tag{1.192}$$

1.3.3 Comparaison des deux bornes inférieures naïve et améliorée

En vérité l'objectif à l'origine de l'introduction de la borne inférieure améliorée, à savoir l'amélioration de la borne inférieure naïve n'est que partiellement atteint.

Contentons-nous de donner deux exemples : un exemple où la borne inférieure améliorée est supérieure à la borne naïve et un contre-exemple où c'est la borne inférieure naïve qui est meilleure que la borne inférieure améliorée.

Exemple 1 :

Considérons le cas de masses toutes égales $m_1 = \dots = m_N = m$, les deux bornes inférieures naïve et améliorée se réduisent alors respectivement à

$$E_{naïve} = \frac{N(N-1)}{2} E^{(2)}((N-1)m/2), \quad (1.193)$$

$$E_{améliorée} = \frac{N(N-1)}{2} E^{(2)}(Nm/4). \quad (1.194)$$

Il est clair que la masse réduite $Nm/4$ intervenant dans $E_{améliorée}$ est inférieure à $(N-1)m/2$ intervenant dans $E_{naïve}$. Mais d'après le théorème de Feynman-Hellmann appliqué à $H^{(2)} = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(\vec{r})$ avec μ comme paramètre, $E^{(2)}(\mu)$ est une fonction décroissante de μ et par conséquent

$$E^{(2)}(Nm/4) > E^{(2)}((N-1)m/2) \quad (1.195)$$

et

$$E_{améliorée} > E_{naïve}. \quad (1.196)$$

Exemple 2 :

Considérons la configuration de masse $((N-1) \times m_1, 1 \times m_2)$ auquel cas les bornes

naïve et améliorée se réduisent respectivement à

$$E_{naïve} = \frac{(N-1)(N-2)}{2} E^{(2)}((N-1)m_1/2) + (N-1) E^{(2)}\left(\frac{(N-1)m_1m_2}{m_1+m_2}\right). \quad (1.197)$$

et

$$E_{améliorée} = \frac{(N-1)(N-2)}{2} E^{(2)}\left(\frac{(N-1)m_1+m_2}{4}\right) + (N-1) E^{(2)}\left(\frac{m_1m_2((N-1)m_1+m_2)}{(m_1+m_2)^2}\right). \quad (1.198)$$

Si de plus le potentiel est en loi de puissance avec le même exposant ν et la même constante de couplage λ pour toutes les paires de particules, alors

$$E_{naïve} = |\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}} \left(\frac{(N-1)(N-2)}{2} ((N-1)m_1)^{\frac{-\nu}{2+\nu}} + (N-1) \left(2(N-1) \frac{m_1m_2}{m_1+m_2} \right)^{\frac{-\nu}{2+\nu}} \right) E^{(2)}(1, 1, \nu) \quad (1.199)$$

et

$$E_{améliorée} = |\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}} \left(\frac{(N-1)(N-2)}{2} \left(\frac{(N-1)m_1+m_2}{2} \right)^{\frac{-\nu}{2+\nu}} + (N-1) \left(\frac{2m_1m_2((N-1)m_1+m_2)}{(m_1+m_2)^2} \right)^{\frac{-\nu}{2+\nu}} \right) E^{(2)}(1, 1, \nu). \quad (1.200)$$

Considérons maintenant la limite $m_2 \rightarrow \infty$. Pour $-2 < \nu < 0$ et donc $\frac{-\nu}{2+\nu} > 0$, il est facile de se convaincre, si on garde à l'esprit que $E^{(2)}(1, 1, \nu)$ est négatif pour des puissances négatives de ν , que $E_{améliorée} \rightarrow -\infty$, tandis que

$$E_{naïve} \rightarrow |\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}} \left(\frac{(N-1)(N-2)}{2} ((N-1)m_1)^{\frac{-\nu}{2+\nu}} + (N-1) (2(N-1)m_1)^{\frac{-\nu}{2+\nu}} \right) E^{(2)}(1, 1, \nu) \quad (1.201)$$

reste finie. Par conséquent,

$$E_{naïve} > E_{améliorée}.$$

Autrement dit, la borne naïve est meilleure que la borne améliorée.

Pour $\nu > 0$

$$E_{\text{améliorée}} \rightarrow |\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}} (N-1) (2m_1)^{\frac{-\nu}{2+\nu}} E^{(2)}(1, 1, \nu) \quad (1.202)$$

et

$$\begin{aligned} E_{\text{naïve}} \rightarrow & |\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}} \left(\frac{(N-1)(N-2)}{2} ((N-1)m_1)^{\frac{-\nu}{2+\nu}} \right. \\ & \left. + (N-1)(2(N-1)m_1)^{\frac{-\nu}{2+\nu}} \right) E^{(2)}(1, 1, \nu), \end{aligned} \quad (1.203)$$

d'où

$$\begin{aligned} E_{\text{naïve}} - E_{\text{améliorée}} &= |\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}} (N-1)^{\frac{2}{2+\nu}} (2m_1)^{\frac{-\nu}{2+\nu}} \left((N-2) 2^{\frac{-2}{2+\nu}} + 1 - (N-1)^{\frac{\nu}{2+\nu}} \right) E^{(2)}(1, 1, \nu) \\ &= |\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}} m_1^{\frac{-\nu}{2+\nu}} f_N(\nu) E^{(2)}(1, 1, \nu), \end{aligned} \quad (1.204)$$

avec

$$f_N(\nu) := (N-1)^{\frac{2}{2+\nu}} \frac{(N-2)}{2} + (N-1)^{\frac{2}{2+\nu}} 2^{\frac{-\nu}{2+\nu}} - 2^{\frac{-\nu}{2+\nu}} (N-1). \quad (1.205)$$

On peut alors montrer que la fonction $f_N(\nu)$ est une fonction décroissante de ν , qui garde une valeur positive sur tout l'intervalle $\nu \in]0, +\infty[$ indépendamment de la valeur de N , avec $f_N(0) = (N-1)(N-2)/2$ et $\lim_{\nu \rightarrow +\infty} f_N(\nu) = 0$. Comme $E^{(2)}(1, 1, \nu)$ est forcément positif pour des valeurs positive de ν , il en résulte que

$$E_{\text{naïve}} > E_{\text{améliorée}}.$$

Chapitre 2

Borne inférieure optimisée

2.1 Motivation

L'objectif visé par le développement de la borne inférieure améliorée n'est pas complètement atteint ; La borne inférieure améliorée n'est pas toujours supérieure à la borne inférieure naïve. Dans certains cas, la borne améliorée est meilleure que la borne naïve, mais dans d'autres cas la situation est complètement bouleversée. Donc, aucune des deux bornes n'est meilleure que l'autre de manière absolue. Ceci nous a conduit à développer une nouvelle borne inférieure avec l'espoir qu'elle sera toujours supérieure aux deux bornes inférieures précédentes, les bornes naïve et améliorée.

2.2 Méthodologie

Notre point de départ sera la décomposition suivante

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 = \left(\sum_{j=1}^N b_j \vec{p}_j \right) \left(\sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) + \sum_{i<j=1}^N a_{ij} \vec{p}_{ij}^2, \quad (2.1)$$

de la partie cinétique de l'Hamiltonien

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 + \sum_{i<j=1}^N V_{ij}(\vec{r}_{ij}), \quad (2.2)$$

impliquant les paramètres b_j , $j = 1, \dots, N$, et les paramètres nécessairement positifs a_{ij} , $i < j = 1, 2, \dots, N$. \vec{p}_{ij} est une combinaison linéaire des différentes impulsions \vec{p}_k

$$\vec{p}_{ij} = \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} x_{ij,k} \vec{p}_k. \quad (2.3)$$

Le facteur $1/2$ dans l'expression de \vec{p}_{ij} est une question de convenance. Les coefficients $x_{ij,k}$ de la combinaison linéaire sont choisis de telle manière que \vec{r}_{ij} et \vec{p}_{ij} sont des variables conjuguées l'une de l'autre, c'est à dire satisfaisant aux relations de commutation canoniques

$$[r_{ij,k}, p_{ij,\ell}] = i\hbar \delta_{k,\ell} \quad k, \ell = 1, 2, 3, \quad (2.4)$$

où $r_{ij,k}$ et $p_{ij,\ell}$ représentent respectivement la k eme composante de \vec{r}_{ij} et la ℓ eme composante de \vec{p}_{ij} . En remplaçant les \vec{p}_{ij} par leurs expressions (2.3), l'équation (2.1) peut être réécrite comme

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 = \left(\sum_{j=1}^N b_j \vec{p}_j \right) \left(\sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) + \sum_{i < j=1}^N \frac{a_{ij}}{4} \left(\sum_{k=1}^N x_{ij,k} \vec{p}_k \right)^2. \quad (2.5)$$

On remarquera que les paramètres b_j , a_{ij} , et $x_{ij,k}$ sont contraints par des relations obtenues en identifiant les deux membres de l'équation (2.5). Plus précisément, l'identification du membre de gauche de l'équation (2.5) avec son membre de droite nous fournit $N + \frac{N(N-1)}{2}$ contraintes. Si on remarque que le nombre des b_j est de N et que le nombre des a_{ij} est de $\frac{N(N-1)}{2}$, ces contraintes peuvent être utilisées pour éliminer les b_j et les a_{ij} en faveur des $x_{ij,k}$. Dorénavant, les b_j et les a_{ij} seront considérés comme des fonctions implicites des $x_{ij,k}$. Nous pouvons, sans perte de généralité, prendre $x_{ij,i}$ égal à 1 par une redéfinition de a_{ij} et des $x_{ij,k}$ pour $k \neq i = 1, 2, \dots, N$. Ensuite, en imposant les relations de commutation canoniques, équation (2.4), on aboutit à $x_{ij,j} = -1$. La décomposition de l'Hamiltonien, (1.147), correspondant à (2.5) est

$$H = \left(\sum_{j=1}^N b_j \vec{p}_j \right) \left(\sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) + \sum_{i < j=1}^N \left(\frac{a_{ij}}{4} \left(\sum_{k=1}^N x_{ij,k} \vec{p}_k \right)^2 + V_{ij}(\vec{r}_{ij}) \right). \quad (2.6)$$

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

$$\begin{aligned} E &= \langle \Psi | H | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \left(\sum_{j=1}^N b_j \vec{p}_j \right) \left(\sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle + \sum_{i<j=1}^N \langle \Psi | \left(\frac{a_{ij}}{4} \left(\sum_{k=1}^N x_{ij,k} \vec{p}_k \right)^2 + V_{ij}(\vec{r}_{ij}) \right) | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Comme l'état fondamental $|\Psi\rangle$ est invariant par translation, alors

$$\left(\sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle = \vec{0}, \quad (2.8)$$

et par conséquent, la contribution du premier terme du membre de droite de l'équation (2.7) est nulle. Il en résulte que

$$E = \sum_{i<j=1}^N \langle \Psi | \left(\frac{a_{ij}}{4} \left(\sum_{k=1}^N x_{ij,k} \vec{p}_k \right)^2 + V_{ij}(\vec{r}_{ij}) \right) | \Psi \rangle. \quad (2.9)$$

Mais, en vertu du principe variationnel

$$\langle \Psi | \left(\frac{a_{ij}}{4} \left(\sum_{k=1}^N x_{ij,k} \vec{p}_k \right)^2 + V_{ij}(\vec{r}_{ij}) \right) | \Psi \rangle \geq E_{ij}^{(2)}[a_{ij}(x_{kl,m})], \quad (2.10)$$

où $E_{ij}^{(2)}[a_{ij}(x_{kl,m})]$ représente l'énergie de l'état fondamental du Hamiltonien à deux particules

$$H_{ij}^{(2)}[a_{ij}(x_{kl,m})] = \frac{a_{ij}}{4} \left(\sum_{k=1}^N x_{ij,k} \vec{p}_k \right)^2 + V_{ij}(\vec{r}_{ij}). \quad (2.11)$$

Il s'ensuit que

$$E \geq \sum_{i<j=1}^N E_{ij}^{(2)}[a_{ij}(x_{kl,m})]. \quad (2.12)$$

On obtient ainsi une famille de bornes inférieures pour E , une borne inférieure

$$\sum_{i<j=1}^N E_{ij}^{(2)}[a_{ij}(x_{kl,m})], \quad (2.13)$$

pour chaque jeu de valeurs des paramètres $x_{kl,m}$. La meilleure de ces bornes correspond évidemment aux valeurs des $x_{kl,m}$ qui maximisent $\sum_{i<j=1}^N E_{ij}^{(2)}[a_{ij}(x_{kl,m})]$.

$$E_{olb} := \max_{x_{kl,m}} \sum_{i<j=1}^N E_{ij}^{(2)}[a_{ij}(x_{kl,m})] \quad (2.14)$$

est appelée borne inférieure optimisée. Il faut noter que seules les valeurs des paramètres $x_{kl,m}$ tels que tous les a_{ij} soient simultanément positifs sont permises. La maximisation doit donc en principe être précédée par une délimitation préalable du domaine de positivité des a_{ij} .

2.3 Contraintes Dynamiques Universelles

Il est plus commode dans ce qui suit d'introduire les notations suivantes :

$$L_N = \frac{N(N-1)}{2}, \quad C_N = \frac{N(N-1)(N-2)}{2}, \quad R_N = \frac{N(N-1)}{2} - 1 = L_N - 1,$$

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

$$\sum_{i<j=1}^N \frac{\partial E_{ij}^{(2)}}{\partial a_{ij}} \frac{\partial a_{ij}}{\partial x_{kl,m}} = 0 \quad m \neq k, m \neq l, k < l = 1, 2, \dots, N. \quad (2.15)$$

Comme les $\frac{\partial E_{ij}^{(2)}}{\partial a_{ij}}$ ne sont pas tous nuls, la matrice rectangulaire $L_N \times C_N$ $\tilde{\mathbf{B}}$ d'éléments $\frac{\partial a_{ij}}{\partial x_{kl,m}}$, où ij et kl,m correspondent respectivement aux indices de ligne et de colonne, doit être de rang R_N au plus. Ceci signifie que toute matrice carrée $L_N \times L_N$ extraite de la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$, en sélectionnant L_N de ses colonnes, doit être de déterminant nul. En exigeant que la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$ soit de rang R_N au plus, on obtient $C_N - L_N + 1$ relations entre les valeurs des C_N paramètres $x_{ij,k}$ correspondant à la borne inférieure optimisée. Ces relations seront baptisées dans ce qui suit "Contraintes Dynamiques Universelles", universelles parce qu'elles ont la propriété d'être indépendantes de la forme particulière du potentiel, dynamiques puisqu'elles résultent de l'application d'un principe dynamique, à savoir le principe variationnel. Cherchons maintenant les expressions explicites des a_{ij}

en fonction des $x_{kl,m}$. L'identification des deux membres de l'équation (2.5) donne

$$b_k + \sum_{i < j=1}^N \frac{x_{ij,k}^2}{4} a_{ij} = \frac{1}{2m_k}, \quad (2.16)$$

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

$$b_k + b_l + \sum_{i < j=1}^N \frac{x_{ij,k} x_{ij,l}}{2} a_{ij} = 0, \quad (2.17)$$

pour les termes en $\vec{p}_k \cdot \vec{p}_l$ $k \neq l = 1, 2, \dots, N$. En combinant les équations (2.16) et (2.17), on obtient un système linéaire de L_N équations avec L_N inconnues a_{ij} et C_N paramètres $x_{ij,k}$

$$\sum_{k < l=1}^N \tilde{\mathbf{C}}_{ij,kl} a_{kl} = \frac{1}{2m_i} + \frac{1}{2m_j}, \quad (2.18)$$

avec

$$\tilde{\mathbf{C}}_{ij,kl} = \left(\frac{x_{kl,i} - x_{kl,j}}{2} \right)^2. \quad (2.19)$$

L'équation (2.18) peut être écrite sous forme matricielle comme

$$\tilde{\mathbf{D}} \mathbf{A} = \boldsymbol{\alpha}, \quad (2.20)$$

où $\tilde{\mathbf{D}}$ est une matrice carrée de dimension L_N , avec $\tilde{D}_{11} = \tilde{\mathbf{C}}_{12,12}$, $\tilde{D}_{12} = \tilde{\mathbf{C}}_{12,13}$, \dots , $\tilde{D}_{21} = \tilde{\mathbf{C}}_{13,12}$, \dots , $\tilde{D}_{\frac{N(N-1)}{2} \frac{N(N-1)}{2}} = \tilde{\mathbf{C}}_{N(N-1),N(N-1)}$, c'est à dire en utilisant l'équation (2.19)

$$\tilde{\mathbf{D}} := \frac{1}{4} \begin{pmatrix} (x_{12,1} - x_{12,2})^2 & (x_{13,1} - x_{13,2})^2 & \cdots & (x_{N-1,N,1} - x_{N-1,N,2})^2 \\ (x_{12,1} - x_{12,3})^2 & (x_{13,1} - x_{13,3})^2 & \cdots & (x_{N-1,N,1} - x_{N-1,N,3})^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (x_{12,N-1} - x_{12,N})^2 & (x_{13,N-1} - x_{13,N})^2 & \cdots & (x_{N-1,N,N-1} - x_{N-1,N,N})^2 \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

\mathbf{A} et $\boldsymbol{\alpha}$ dans l'équation (2.20) sont deux matrices colonne avec L_N lignes données par

$$\mathbf{A} := \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ \vdots \\ a_{N-1,N} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} := \begin{pmatrix} \alpha_{12} \\ \alpha_{13} \\ \vdots \\ \alpha_{N-1,N} \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

avec

$$\alpha_{ij} := \frac{1}{2m_i} + \frac{1}{2m_j}. \quad (2.23)$$

L'équation matricielle (2.20) peut être inversée, donnant ainsi les L_N a_{ij} comme fonctions des C_N $x_{kl,m}$.

$$\mathbf{A} = \tilde{\mathbf{D}}^{-1} \boldsymbol{\alpha}. \quad (2.24)$$

On n'a pas besoin de dire que l'inversion analytique de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ dans le cas le plus général, c'est à dire pour la configuration de masse la plus générale, n'est pas une tâche facile. Heureusement, comme nous le montrerons par la suite, nous n'avons pas besoin des expressions explicites des a_{ij} en termes des paramètres $x_{kl,m}$ pour avoir accès aux contraintes dynamiques universelles. En effet, en dérivant (2.20) par rapport aux $x_{kl,m}$, ($m \neq k$, $m \neq l$), on obtient, en tenant compte du fait que les α_{ij} ne dépendent pas des $x_{kl,m}$, et après avoir multiplié par $\tilde{\mathbf{D}}^{-1}$,

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_{kl,m}} = -\tilde{\mathbf{D}}^{-1} \frac{\partial \tilde{\mathbf{D}}}{\partial x_{kl,m}} \mathbf{A}. \quad (2.25)$$

Cette dernière équation montre que la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$ est l'opposé du produit de l'inverse d'une matrice $L_N \times L_N$ $\tilde{\mathbf{D}}$ par une matrice $L_N \times C_N$ $\tilde{\mathbf{M}}'$, c'est à dire

$$\tilde{\mathbf{B}} = -\tilde{\mathbf{D}}^{-1} \tilde{\mathbf{M}}'. \quad (2.26)$$

La matrice $\tilde{\mathbf{M}}'$ est construite de la manière suivante : Considérons l'unique colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ qui dépend d'un paramètre donné $x_{kl,m}$ $k < l = 1, 2, \dots, N$, $m \neq k$, $m \neq l$, $m = 1, 2, \dots, N$, prenons sa dérivé par rapport à $x_{kl,m}$ et multiplions le résultat par a_{kl} . La colonne ainsi obtenue n'est rien d'autre que la colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{M}}'$ correspondant à l'indice de colonne kl, m . L'équation (2.26) montre que la condition de rang sur la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$ est équivalente à la même condition de rang sur la matrice plus simple $\tilde{\mathbf{M}}'$. Nous pouvons même remplacer cette condition de rang sur $\tilde{\mathbf{M}}'$ par la même condition de rang sur une matrice encore plus simple. En effet, nous savons d'après les propriétés des déterminants que [20] lorsqu'une colonne d'une matrice carrée est multipliée par un facteur, le déterminant correspondant est multiplié par le même facteur. Donc, le déterminant d'une matrice quelconque $L_N \times L_N$ extraite de la matrice $\tilde{\mathbf{M}}'$ apparaît sous

la forme d'un produit de L_N facteurs a_{ij} , non nécessairement tous différents, par le déterminant de la même matrice en posant formellement tous les facteurs a_{ij} égaux à 1. Nous pouvons alors conclure que la condition de rang sur la matrice $\widetilde{\mathbf{B}}$ est équivalente à la même condition de rang sur la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$ obtenue à partir de la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}'$ en posant formellement tous les a_{ij} égaux à 1. Maintenant, nous sommes en mesure de donner une recette en trois étapes afin d'établir les contraintes dynamiques universelles :

Première étape : Construction de la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$

Prendre l'unique colonne de la matrice $\widetilde{\mathbf{D}}$ qui dépend d'un paramètre donné $x_{kl,m}$ puis la dériver par rapport à ce paramètre. Le résultat n'est rien d'autre que la colonne de la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$ correspondant à l'indice de colonne kl, m . En répétant le processus pour chaque indice kl, m , $k < l = 1, 2, \dots, N$, $m \neq k$, $m \neq l$, $m = 1, 2, \dots, N$ (on peut par exemple faire varier en premier lieu m , puis l , et finalement k), on construit la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$. Il vaut la peine de souligner que chaque colonne de la matrice $\widetilde{\mathbf{D}}$ donne naissance à $N - 2$ colonnes de la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$. Donc, les colonnes de la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$ viennent en blocs indexés par kl , chaque bloc étant composé de $N - 2$ colonnes et impliquant autant de paramètres $x_{kl,m}$, à savoir $N - 2$ paramètres avec kl donné et m variable.

Deuxième étape : Choix des paramètres indépendants.

Comme nous savons que le nombre des contraintes dynamiques universelles est de $C_N - R_N$. On peut tirer avantage de ces relations pour éliminer le même nombre de paramètres en faveur des paramètres restants qui sont considérés comme des paramètres indépendants. une multitude de choix de tels paramètres indépendants sont permis. Un choix que l'on a trouvé particulièrement intéressant consiste à prendre tous les paramètres, à l'exception de l'un d'entre eux, apparaissant dans trois blocs. Nous sommes alors face à deux situations possibles : Soit, le nombre de paramètres sélectionnés par cette méthode est égal au nombre des paramètres indépendants, comme c'est le cas pour $N = 3$ et $N = 4$, ou bien le nombre des paramètres choisis est inférieur au nombre de paramètres indépendants et nous devons compléter par d'autres paramètres pris hors des trois blocs choisis initialement. Cette dernière situation apparaît lorsque $N \geq 5$.

Troisième étape : Détermination des contraintes dynamiques universelles.

Choisir des matrices carrées $L_N \times L_N$ extraites de la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$ en sélectionnant L_N de ses colonnes. Pour chaque matrice choisie, calculer le déterminant correspondant, l'écrire

sous forme factorisé et l'égaliser à zéro. Résoudre alors pour les paramètres dépendants en terme des paramètres indépendants. Sélectionner la solution correcte en appliquant les deux critères suivants :

- La solution doit correspondre aux limites correctes lorsque le système présente des symétries, par exemple, tous les paramètres doivent être égaux à zéro dans le cas de masses toutes égales.
- Les paramètres choisis comme indépendants dans la deuxième étape doivent être traités par la suite comme tels dans le sens qu'une expression contenant seulement des paramètres indépendants ne peut jamais être mise égale à zéro. On peut désigner cette condition comme la condition de self-consistance.

Le nombre minimum de matrices à considérer dans cette étape est le même que le nombre de contraintes dynamiques universelles, c'est à dire $C_N - R_N$, mais on peut se trouver dans l'obligation de considérer des matrices additionnelles car les matrices choisies initialement peuvent ne pas exhiber toute l'information impliquée par la condition de rang. Ce point montre la grande importance du choix de matrices carrées dans cette étape. Un choix astucieux de ces matrices mène à une détermination rapide des contraintes dynamiques universelles. Disons que c'est simplement une question d'habileté.

Deux commentaires sur les contraintes dynamiques universelles sont dans l'ordre :

Premièrement, lorsque N augmente d'une unité, une autre difficulté qualitative apparaît dans le calcul des contraintes dynamiques. Pour dire les choses plus crûment, le cas à trois corps est plutôt un cas trivial comparé au cas à quatre corps. Ce dernier à son tour est un jeu d'enfant comparé au cas à cinq corps, et les cas $N \geq 6$ semblent être incalculables pour les configurations de masse les plus générales.

Deuxièmement, les contraintes dynamiques universelles ne sont pas de nature cinématique, nous pouvons par conséquent les ignorer, effectuer la procédure de maximisation sur tous les paramètres, et vérifier *à posteriori* que ces contraintes sont satisfaites au maximum. Néanmoins, les contraintes dynamiques universelles sont extrêmement importantes au moins pour des raisons pratiques. En effet, avec ces relations sous la main la procédure de maximisation peut être accomplie sur les paramètres indépendants plutôt que sur la totalité des paramètres variationnels ce qui simplifie considérablement le problème d'optimisation. C'est particulièrement clair si nous avons à l'esprit que nous traitons de problèmes d'optimisation non linéaires.

Les calculs explicites des contraintes dynamiques universelles seront abordés dans le chapitre 3 pour $N \leq 5$ et dans le chapitre 4 pour $N > 5$.

Chapitre 3

Les Contraintes Dynamiques

Universelles pour $N \leq 5$

Comme nous l'avons montré au chapitre 2, lorsque la borne inférieure optimisée est atteinte, les valeurs correspondantes des paramètres $x_{ij,k}$ satisfont à un certain nombre de relations qu'on obtient en imposant une condition de rang à la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$ obtenue à partir de la matrice $\widetilde{\mathbf{D}}$ en dérivant les colonnes de $\widetilde{\mathbf{D}}$ par rapport aux paramètres $x_{ij,k}$. Il en résulte alors $N(N-1)(N-2)/2 - N(N-1)/2 + 1$ relations entre les paramètres $x_{ij,k}$.

Le but de ce chapitre est de dériver ces relations appelées Contraintes Dynamiques Universelles dans le cas où on sait le faire de manière générale, à savoir pour $N = 3$ [21], $N = 4$ [23, 24, 25] et $N = 5$ [13] en appliquant la recette exposée au chapitre précédent. Le chapitre suivant sera consacré au cas $N > 5$, où on ne sait dériver totalement les Contraintes Dynamiques Universelles que pour certaines configurations de masse, et de manière partielle pour d'autres configurations de masse plus générales.

3.1 Système à 3 corps

Dans le cas d'un système à trois corps, la décomposition correspondante du terme d'énergie cinétique est la suivante

$$\begin{aligned}
T^{(3)} &= \frac{1}{2m_1} \vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m_2} \vec{p}_2^2 + \frac{1}{2m_3} \vec{p}_3^2 \\
&= (b_1 \vec{p}_1 + b_2 \vec{p}_2 + b_3 \vec{p}_3) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3) \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + c_3 \vec{p}_3)^2 + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_3 + d_2 \vec{p}_2)^2 + \frac{a_{23}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3 + f_1 \vec{p}_1)^2,
\end{aligned} \tag{3.1}$$

où nous avons fait le changement de notation suivant

$$c_3 := x_{12,3}, \quad d_2 := x_{13,2}, \quad f_1 := x_{23,1}. \tag{3.2}$$

La matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ se réduit dans ce cas à

$$\tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 4 & (d_2 - 1)^2 & (f_1 - 1)^2 \\ (c_3 - 1)^2 & 4 & (f_1 + 1)^2 \\ (c_3 + 1)^2 & (d_2 + 1)^2 & 4 \end{pmatrix}.$$

La matrice $\tilde{\mathbf{M}}$ correspondante est une matrice carrée 3×3 donnée par

$$\tilde{\mathbf{M}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & d_2 - 1 & f_1 - 1 \\ c_3 - 1 & 0 & f_1 + 1 \\ c_3 + 1 & d_2 + 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Lorsque la borne inférieure aura atteint son maximum, la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$ doit être de rang 2 au plus. Donc le déterminant de $\tilde{\mathbf{M}}$ doit être nul

$$\frac{1}{4} (-c_3 + d_2 - f_1 + c_3 d_2 f_1) = 0.$$

En choisissant c_3 et d_2 comme paramètres indépendants on retrouve la seule contrainte dynamique universelle pour le système à 3 corps

$$f_1 = \frac{d_2 - c_3}{1 - c_3 d_2}. \tag{3.3}$$

3.2 Système à 4 corps

Avec le changement de notation suivant :

$$\begin{aligned}
c_q &:= x_{12,q} \quad q = 3, 4, & d_q &:= x_{13,q} \quad q = 2, 4, \\
e_q &:= x_{14,q} \quad q = 2, 3, & f_q &:= x_{23,q} \quad q = 1, 4, \\
g_q &:= x_{24,q} \quad q = 1, 3, & h_q &:= x_{34,q} \quad q = 1, 2,
\end{aligned} \tag{3.4}$$

la décomposition du terme d'énergie cinétique correspondant à la borne inférieure optimisée pour le système à quatre corps s'écrit

$$\begin{aligned}
T^{(4)} &= \frac{1}{2m_1} \vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m_2} \vec{p}_2^2 + \frac{1}{2m_3} \vec{p}_3^2 + \frac{1}{2m_4} \vec{p}_4^2 \\
&= (b_1 \vec{p}_1 + b_2 \vec{p}_2 + b_3 \vec{p}_3 + b_4 \vec{p}_4) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4) \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + c_3 \vec{p}_3 + c_4 \vec{p}_4)^2 + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_3 + d_2 \vec{p}_2 + d_4 \vec{p}_4)^2 \\
&\quad + \frac{a_{14}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_4 + e_2 \vec{p}_2 + e_3 \vec{p}_3)^2 + \frac{a_{23}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3 + f_1 \vec{p}_1 + f_4 \vec{p}_4)^2 \\
&\quad + \frac{a_{24}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_4 + g_1 \vec{p}_1 + g_3 \vec{p}_3)^2 + \frac{a_{34}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_4 + h_1 \vec{p}_1 + h_2 \vec{p}_2)^2. \tag{3.5}
\end{aligned}$$

La matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ qui est dans ce cas une matrice 6×6 prend la forme

$$\tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 4 & (d_2 - 1)^2 & (e_2 - 1)^2 & (f_1 - 1)^2 & (g_1 - 1)^2 & (h_1 - h_2)^2 \\ (c_3 - 1)^2 & 4 & (e_3 - 1)^2 & (f_1 + 1)^2 & (g_1 - g_3)^2 & (h_1 - 1)^2 \\ (c_4 - 1)^2 & (d_4 - 1)^2 & 4 & (f_1 - f_4)^2 & (g_1 + 1)^2 & (h_1 + 1)^2 \\ (c_3 + 1)^2 & (d_2 + 1)^2 & (e_2 - e_3)^2 & 4 & (g_3 - 1)^2 & (h_2 - 1)^2 \\ (c_4 + 1)^2 & (d_2 - d_4)^2 & (e_2 + 1)^2 & (f_4 - 1)^2 & 4 & (h_2 + 1)^2 \\ (c_3 - c_4)^2 & (d_4 + 1)^2 & (e_3 + 1)^2 & (f_4 + 1)^2 & (g_3 + 1)^2 & 4 \end{pmatrix}.$$

Appliquons maintenant étape par étape la procédure décrite dans la section 2.3 pour dériver les contraintes dynamiques universelles.

Première étape

Chaque colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ va donner naissance à deux colonnes de la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$. En d'autres termes, la dérivation de la première colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ par rapport

à c_3 donne la première colonne de la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$, la dérivation de la première colonne de la matrice $\widetilde{\mathbf{D}}$ par rapport à c_4 donne la deuxième colonne de la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$, la dérivation de la deuxième colonne de la matrice $\widetilde{\mathbf{D}}$ par rapport à d_2 donne la troisième colonne de la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$, ...

La matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$ ainsi obtenue s'écrit comme

$$\widetilde{\mathbf{M}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & d_2 - 1 & 0 & e_2 - 1 & 0 \\ c_3 - 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_3 - 1 \\ 0 & c_4 - 1 & 0 & d_4 - 1 & 0 & 0 \\ c_3 + 1 & 0 & d_2 + 1 & 0 & e_2 - e_3 & e_3 - e_2 \\ 0 & c_4 + 1 & d_2 - d_4 & d_4 - d_2 & e_2 + 1 & 0 \\ c_3 - c_4 & c_4 - c_3 & 0 & d_4 + 1 & 0 & e_3 + 1 \\ \\ f_1 - 1 & 0 & g_1 - 1 & 0 & h_1 - h_2 & h_2 - h_1 \\ f_1 + 1 & 0 & g_1 - g_3 & g_3 - g_1 & h_1 - 1 & 0 \\ f_1 - f_4 & f_4 - f_1 & g_1 + 1 & 0 & h_1 + 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g_3 - 1 & 0 & h_2 - 1 \\ 0 & f_4 - 1 & 0 & 0 & 0 & h_2 + 1 \\ 0 & f_4 + 1 & 0 & g_3 + 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Deuxième étape : Choix des paramètres indépendants.

Il est plus commode de travailler avec la matrice $2\widetilde{\mathbf{M}}$ qu'avec la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$, sachant que deux matrices qui diffèrent simplement par un facteur multiplicatif sont de même rang. La matrice $2\widetilde{\mathbf{M}}$ se présente sous la forme de 6 blocs, chaque bloc consistant en une matrice rectangulaire 6×2 . Plus explicitement

$$2\widetilde{\mathbf{M}} = (CDEFGH).$$

C , D , E , F , G , et H sont des matrices 6×2 . Le bloc C contient les paramètres c_3 et c_4 , le bloc D contient les paramètres d_2 et d_4, \dots , le bloc H contient les paramètres h_1 et h_2 . Considérons les trois premiers blocs de la matrice $2\widetilde{\mathbf{M}}$, à savoir les blocs C et D et E . Six paramètres sont impliqués. Choisissons 5 parmi ceux-là, par exemple c_3 , c_4 , d_2 , d_4 et

e_2 comme paramètres indépendants.

Troisième étape : Détermination des contraintes dynamiques universelles.

Nous allons extraire de la matrice $2\widetilde{\mathbf{M}}$ des matrices 6×6 en sélectionnant chaque fois trois blocs parmi les six blocs C, D, E, F, G et H , et en imposant la condition du rang, c'est à dire l'annulation du déterminant.

Sélectionnons les blocs C, D et E . On obtient alors la matrice 6×6 suivante :

$$(CDE) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & d_2 - 1 & 0 & e_2 - 1 & 0 \\ c_3 - 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_3 - 1 \\ 0 & c_4 - 1 & 0 & d_4 - 1 & 0 & 0 \\ c_3 + 1 & 0 & d_2 + 1 & 0 & e_2 - e_3 & e_3 - e_2 \\ 0 & c_4 + 1 & d_2 - d_4 & d_4 - d_2 & e_2 + 1 & 0 \\ c_3 - c_4 & c_4 - c_3 & 0 & d_4 + 1 & 0 & e_3 + 1 \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Le déterminant $|CDE|$ de cette matrice peut se mettre sous la forme d'un produit de deux facteurs

$$\begin{aligned} |CDE| = & - (c_4 d_2 e_3 - d_2 e_3 - c_4 d_2 + 2c_3 d_2 - d_2 - 4 - c_3 - d_4 \\ & - c_3 d_4 - e_3 + 2d_4 e_3 - e_2 - c_3 e_2 + c_3 d_4 e_2 - d_4 e_2 - c_4 - c_4 e_3 + 2c_4 e_2) \\ & (d_2 - d_2 e_3 - c_4 d_2 + c_4 d_2 e_3 - c_3 - d_4 + c_3 d_4 + e_3 - e_2 + c_3 e_2 + d_4 e_2 - c_3 d_4 e_2 - c_4 e_3 + c_4). \end{aligned} \quad (3.7)$$

En égalisant $|CDE|$ à zéro, on obtient

$$\begin{aligned} c_4 d_2 e_3 - d_2 e_3 - c_4 d_2 + 2c_3 d_2 - d_2 - 4 - c_3 - d_4 - c_3 d_4 - e_3 + 2d_4 e_3 - e_2 \\ - c_3 e_2 + c_3 d_4 e_2 - d_4 e_2 - c_4 - c_4 e_3 + 2c_4 e_2 = 0, \end{aligned} \quad (3.8)$$

ou

$$\begin{aligned} d_2 - d_2 e_3 - c_4 d_2 + c_4 d_2 e_3 - c_3 - d_4 + c_3 d_4 + e_3 - e_2 + c_3 e_2 + d_4 e_2 \\ - c_3 d_4 e_2 - c_4 e_3 + c_4 = 0. \end{aligned} \quad (3.9)$$

La première solution, (3.8), n'est pas conforme à la limite des masses égales, à cause de la présence de 4. Ceci d'une part. D'autre part, on peut résoudre l'équation (3.9) pour e_3

et obtenir ainsi la première contrainte dynamique universelle

$$e_3 = \frac{c_4 d_2 - c_4 - d_2 - d_4 e_2 + d_4 - c_3 d_4 + e_2 + c_3 + c_3 d_4 e_2 - c_3 e_2}{(1 - c_4)(1 - d_2)}. \quad (3.10)$$

Pour déterminer la deuxième et la troisième contraintes, on construit deux matrices en considérant les blocs C, E, F pour l'une des deux et les blocs D, E, F pour l'autre. Pour chacune des deux matrices, le déterminant se met sous la forme de deux facteurs. L'annulation de l'un des facteurs n'est pas conforme avec les exigences de symétrie. Plus précisément, $|CEF| = 0$ et $|DEF| = 0$ impliquent respectivement que

$$\begin{aligned} e_3 f_1 - e_3 + c_4 e_3 - c_4 e_3 f_1 - f_1 - c_3 f_1 + e_2 - e_2 c_4 + c_4 e_2 f_1 + c_3 e_2 f_1 + f_4 + c_3 f_4 \\ - c_3 e_2 f_4 - e_2 f_4 = 0 \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$\begin{aligned} -e_2 f_1 - e_2 + d_4 e_2 f_1 + d_4 e_2 - f_4 + f_1 - d_2 f_4 + d_2 f_1 + e_3 + e_3 f_4 + d_2 e_3 f_4 \\ - d_2 e_3 f_1 - d_4 e_3 f_1 - d_4 e_3 = 0. \end{aligned} \quad (3.12)$$

En tenant compte de l'expression de e_3 , (3.10), (3.11) et (3.12) peuvent se mettre respectivement sous la forme

$$\begin{aligned} \frac{(e_2-1)}{d_2-1} (-c_3 + c_3 d_4 + f_1 c_4 d_2 - c_4 d_2 + c_4 - f_1 c_3 d_4 - d_4 \\ - f_1 + f_4 - c_4 f_1 + c_3 f_4 - c_3 f_4 d_2 + c_3 f_1 d_2 - d_2 f_4 + d_4 f_1 + d_2) = 0. \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{(d_4-1)(e_2-1)}{(d_2-1)(c_4-1)} (d_4 - c_3 d_4 - f_1 c_3 d_4 + d_4 f_1 + c_3 - c_4 - d_2 - c_4 f_1 \\ + c_4 d_2 + c_3 f_4 d_2 + f_1 c_4 d_2 - c_3 f_1 d_2 - f_4 - d_2 f_4 + c_3 f_4 + f_1) = 0. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Dans (3.13) $e_2 - 1$ ne peut pas s'annuler parce que e_2 est choisi comme paramètre indépendant (Condition de self-consistance). Il s'ensuit que

$$\begin{aligned} -c_3 + c_3 d_4 + f_1 c_4 d_2 - c_4 d_2 + c_4 - f_1 c_3 d_4 - d_4 - f_1 + f_4 - c_4 f_1 + c_3 f_4 \\ - c_3 f_4 d_2 + c_3 f_1 d_2 - d_2 f_4 + d_4 f_1 + d_2 = 0. \end{aligned} \quad (3.15)$$

De même, $d_4 - 1$ et $e_2 - 1$ dans (3.14) ne peuvent s'annuler, car d_4 et e_2 sont considérés

comme des paramètres indépendants. Donc

$$\begin{aligned} d_4 - c_3d_4 - f_1c_3d_4 + d_4f_1 + c_3 - c_4 - d_2 - c_4f_1 + c_4d_2 + c_3f_4d_2 + f_1c_4d_2 \\ - c_3f_1d_2 - f_4 - d_2f_4 + c_3f_4 + f_1 = 0. \end{aligned} \quad (3.16)$$

L'équation (3.15) donne pour f_4 l'expression

$$f_4 = \frac{-c_3 + c_3d_4 + f_1c_4d_2 - c_4d_2 + c_4 - f_1c_3d_4 - d_4 - f_1 - c_4f_1 + c_3f_1d_2 + d_4f_1 + d_2}{-1 - c_3 + c_3d_2 + d_2}. \quad (3.17)$$

En substituant à f_4 son expression, (3.17), dans (3.16) on obtient

$$2 \frac{(-f_1 + c_3f_1d_2 - c_3 + d_2)(-c_3d_4 + c_3 - d_2 + c_4d_2 + d_4 - c_4)}{(d_2 - 1)(c_3 + 1)} = 0. \quad (3.18)$$

Dans (3.18) seul le facteur $(-f_1 + c_3f_1d_2 - c_3 + d_2)$ peut s'annuler,

$$f_1 + c_3f_1d_2 - c_3 + d_2 = 0. \quad (3.19)$$

ce qui donne la deuxième contrainte dynamique

$$f_1 = \frac{c_3 - d_2}{-1 + c_3}. \quad (3.20)$$

En substituant à f_1 son expression, (3.20), dans (3.17), on retrouve la troisième contrainte dynamique

$$f_4 = \frac{c_3d_4 - c_4d_2 + c_4 - d_4}{-1 + c_3d_2} \quad (3.21)$$

Pour obtenir la quatrième et la cinquième contraintes, on considère les déterminants $|CDG|$ et $|DEG|$. En posant $|CDG| = 0$ et $|DEG| = 0$, et en rejetant les solutions qui ne sont pas conformes à la condition de symétrie, on obtient respectivement

$$\begin{aligned} c_4d_2g_3 - c_4g_3 + d_2g_3 - g_3 - d_2 + c_3d_2 + d_4 - c_3d_4 - c_3d_2g_1 - c_4d_2g_1 + c_4g_1 \\ + g_1 + c_3d_4g_1 - d_4g_1 = 0, \end{aligned} \quad (3.22)$$

et

$$\begin{aligned} d_4e_2g_3 + d_4g_3 - e_2g_3 - g_3 - d_2 + g_1 - d_2g_1 + d_4 + d_2e_3 + d_2e_3g_1 - d_4e_3 \\ - d_4e_3g_1 + e_2g_1 - d_4e_2g_1 = 0. \end{aligned} \quad (3.23)$$

(3.22) donne

$$g_3 = \frac{d_4 g_1 - c_3 d_2 - d_4 + c_3 d_4 + d_2 + c_4 d_2 g_1 - c_4 g_1 - g_1 + c_3 d_2 g_1 - c_3 d_4 g_1}{-c_4 + d_2 - 1 + c_4 d_2} \quad (3.24)$$

En remplaçant e_3 et g_3 par leurs expressions, (3.10) et (3.24) respectivement, (3.23) peut se mettre sous la forme

$$2 \frac{(d_4 - 1)(d_4 - d_2)(c_3 - 1)(-g_1 - c_4 + e_2 + c_4 e_2 g_1)}{(d_2 - 1)(c_4 - 1)(1 + c_4)} = 0. \quad (3.25)$$

Comme c_3 , d_2 et d_4 ont été choisis comme paramètres indépendants,

$$-g_1 - c_4 + e_2 + c_4 e_2 g_1 = 0, \quad (3.26)$$

ce qui donne la quatrième contrainte dynamique

$$g_1 = \frac{-e_2 + c_4}{-1 + c_4 e_2}. \quad (3.27)$$

En substituant à g_1 son expression, (3.27), dans (3.24), on obtient la cinquième contrainte

$$g_3 = \frac{c_4 d_2 - c_4 - d_4 e_2 - e_2 c_3 d_2 + c_3 d_2 + c_3 d_4 e_2 + d_4 - c_3 d_4 - d_2 + e_2}{(d_2 - 1)(-1 + c_4 e_2)}. \quad (3.28)$$

Pour retrouver les deux dernières contraintes dynamiques, nous allons considérer les deux déterminants $|CDH|$ et $|CGH|$. $|CDH| = 0$ implique que

$$\begin{aligned} h_1 + c_3 d_4 h_2 + c_3 h_2 - h_2 - d_4 h_2 + c_4 - c_4 h_1 + d_4 h_1 - c_3 - c_3 d_4 h_1 + c_4 d_2 h_1 \\ - c_4 d_2 + c_3 d_2 - c_3 d_2 h_1 = 0, \end{aligned} \quad (3.29)$$

ce qui donne

$$h_1 = \frac{c_3 d_4 h_2 + c_3 h_2 - h_2 - d_4 h_2 - c_3 + c_4 - c_4 d_2 + c_3 d_2}{c_4 + c_3 d_4 - c_4 d_2 - d_4 - 1 + c_3 d_2}. \quad (3.30)$$

$|CGH| = 0$ implique que

$$\begin{aligned} h_2 - g_3 h_1 - h_1 - c_4 g_3 h_1 - c_4 h_1 - c_4 + c_4 g_1 + c_4 g_1 h_2 + c_3 h_2 + c_3 - g_1 c_3 h_2 \\ - g_1 c_3 + g_3 h_2 + g_3 c_4 h_2 = 0. \end{aligned} \quad (3.31)$$

En utilisant les expressions de g_1 , (3.27), g_3 , (3.28), et h_1 , (3.30), (3.31) peut être mise sous la forme

$$\frac{2(1+c_4)(c_4-c_3)}{(d_4-c_4-c_3d_4+c_4d_2+1-c_3d_2)(c_4e_2-1)} (c_4d_2h_2 + c_4e_2 - d_2c_4e_2 - c_4h_2 - c_3d_2 + e_2c_3d_2 - c_3d_4h_2 + d_2 + h_2c_3d_4e_2 + d_4h_2 - h_2d_4e_2 - d_2h_2 - e_2 + h_2) = 0. \quad (3.32)$$

Seul le dernier facteur peut s'annuler

$$c_4d_2h_2 + c_4e_2 - d_2c_4e_2 - c_4h_2 - c_3d_2 + e_2c_3d_2 - c_3d_4h_2 + d_2 + h_2c_3d_4e_2 + d_4h_2 - h_2d_4e_2 - d_2h_2 - e_2 + h_2 = 0, \quad (3.33)$$

d'où la sixième contrainte

$$h_2 = \frac{c_3d_2 - c_4e_2 + d_2c_4e_2 - d_2 + e_2 - e_2c_3d_2}{-c_3d_4 - c_4 + c_4d_2 + d_4 - d_4e_2 - d_2 + c_3d_4e_2 + 1}. \quad (3.34)$$

En substituant à h_2 son expression (3.34) dans (3.30), on obtient la septième contrainte

$$h_1 = \frac{c_4d_2 - c_4 - d_2 - c_3e_2 + c_3 + e_2}{-c_3d_4 - c_4 + c_4d_2 + d_4 - d_4e_2 - d_2 + c_3d_4e_2 + 1}. \quad (3.35)$$

Les 7 contraintes dynamiques universelles du système à 4 corps sont [23]

$$\begin{aligned} e_3 &= \frac{c_3 - c_4 - d_2 + d_4 + e_2 + c_4d_2 - c_3d_4 - c_3e_2 - d_4e_2 + c_3d_4e_2}{1 - c_4 - d_2 + c_4d_2}, \\ f_1 &= \frac{d_2 - c_3}{1 - c_3d_2}, \\ f_4 &= \frac{d_4 - c_4 + c_4d_2 - c_3d_4}{1 - c_3d_2}, \\ g_1 &= \frac{e_2 - c_4}{1 - c_4e_2}, \\ g_3 &= \frac{d_4 + e_2 - c_4 - d_2 + c_3d_2 + c_4d_2 - c_3d_4 - d_4e_2 - c_3d_2e_2 + c_3d_4e_2}{1 - d_2 - c_4e_2 + c_4d_2e_2}, \\ h_1 &= \frac{c_3 - c_4 - d_2 + e_2 + c_4d_2 - c_3e_2}{1 - c_4 - d_2 + d_4 + c_4d_2 - c_3d_4 - d_4e_2 + c_3d_4e_2}, \\ h_2 &= \frac{e_2 - d_2 - c_4e_2 + c_3d_2 + c_4d_2e_2 - c_3d_2e_2}{1 - c_4 - d_2 + d_4 + c_4d_2 - c_3d_4 - d_4e_2 + c_3d_4e_2}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

3.3 Comment le cas $N = 4$ peut servir à retrouver le cas $N = 3$

Si on remarque que le système à quatre corps peut être considéré comme un système à trois corps auquel on a adjoint une quatrième particule. Les paramètres c_3 et d_2 jouent les mêmes rôles pour les deux systèmes, le paramètre f_1 du système à quatre corps correspond au paramètre e_1 dans le cas à trois corps, les paramètres restants du système à quatre n'ayant pas de correspondants dans le cas à trois corps. On peut voir que la deuxième contrainte du système à quatre corps est l'unique relation parmi les sept qui implique uniquement les paramètres c_3 , d_2 et f_1 , et n'est rien d'autre que l'unique contrainte dynamique universelle du cas à trois corps, obtenue en remplaçant f_1 par e_1 .

3.4 Système à 5 corps

La décomposition du terme d'énergie cinétique correspondant à la borne inférieure optimisée pour le système à 5 corps est

$$\begin{aligned}
T^{(5)} &= \frac{1}{2m_1} \vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m_2} \vec{p}_2^2 + \frac{1}{2m_3} \vec{p}_3^2 + \frac{1}{2m_4} \vec{p}_4^2 + \frac{1}{2m_5} \vec{p}_5^2 \\
&= (b_1 \vec{p}_1 + b_2 \vec{p}_2 + b_3 \vec{p}_3 + b_4 \vec{p}_4 + b_5 \vec{p}_5) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4 + \vec{p}_5) \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + c_3 \vec{p}_3 + c_4 \vec{p}_4 + c_5 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_3 + d_2 \vec{p}_2 + d_4 \vec{p}_4 + d_5 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{14}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_4 + e_2 \vec{p}_2 + e_3 \vec{p}_3 + e_5 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{15}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_5 + f_2 \vec{p}_2 + f_3 \vec{p}_3 + f_4 \vec{p}_4)^2 \\
&\quad + \frac{a_{23}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3 + g_1 \vec{p}_1 + g_4 \vec{p}_4 + g_5 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{24}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_4 + h_1 \vec{p}_1 + h_3 \vec{p}_3 + h_5 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{25}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_5 + j_1 \vec{p}_1 + j_3 \vec{p}_3 + j_4 \vec{p}_4)^2 \\
&\quad + \frac{a_{34}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_4 + k_1 \vec{p}_1 + k_2 \vec{p}_2 + k_5 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{35}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_5 + l_1 \vec{p}_1 + l_2 \vec{p}_2 + l_4 \vec{p}_4)^2 \\
&\quad + \frac{a_{45}}{4} (\vec{p}_4 - \vec{p}_5 + n_1 \vec{p}_1 + n_2 \vec{p}_2 + n_3 \vec{p}_3)^2.
\end{aligned} \tag{3.37}$$

où nous avons adopté, pour des raisons de commodité, la notation suivante

$$\begin{aligned}
x_{12,q} &= c_q & q &= 3, 4, 5, \\
x_{13,q} &= d_q & q &= 2, 4, 5, \\
x_{14,q} &= e_q & q &= 2, 3, 5, \\
x_{15,q} &= f_q & q &= 2, 3, 4, \\
x_{23,q} &= g_q & q &= 1, 4, 5, \\
x_{24,q} &= h_q & q &= 1, 3, 5, \\
x_{25,q} &= j_q & q &= 1, 3, 4, \\
x_{34,q} &= k_q & q &= 3, 4, 5, \\
x_{35,q} &= l_q & q &= 1, 2, 4, \\
x_{45,q} &= n_q & q &= 1, 2, 3.
\end{aligned} \tag{3.38}$$

La matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ s'écrit alors comme

$$\tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{4} \left(\begin{array}{ccccc} 4 & (1-d_2)^2 & (1-e_2)^2 & (1-f_2)^2 & (1-g_1)^2 \\ (1-c_3)^2 & 4 & (1-e_3)^2 & (1-f_3)^2 & (1+g_1)^2 \\ (1-c_4)^2 & (1-d_4)^2 & 4 & (1-f_4)^2 & (g_1-g_4)^2 \\ (1-c_5)^2 & (1-d_5)^2 & (1-e_5)^2 & 4 & (g_1-g_5)^2 \\ (1+c_3)^2 & (1+d_2)^2 & (e_2-e_3)^2 & (f_2-f_3)^2 & 4 \\ (1+c_4)^2 & (d_2-d_4)^2 & (1+e_2)^2 & (f_2-f_4)^2 & (1-g_4)^2 \\ (1+c_5)^2 & (d_2-d_5)^2 & (e_2-e_5)^2 & (1+f_2)^2 & (1-g_5)^2 \\ (c_3-c_4)^2 & (1+d_4)^2 & (1+e_3)^2 & (f_3-f_4)^2 & (1+g_4)^2 \\ (c_3-c_5)^2 & (1+d_5)^2 & (e_3-e_5)^2 & (1+f_3)^2 & (1+g_5)^2 \\ (c_4-c_5)^2 & (d_4-d_5)^2 & (1+e_5)^2 & (1+f_4)^2 & (g_4-g_5)^2 \\ \\ (1-h_1)^2 & (1-j_1)^2 & (k_1-k_2)^2 & (l_1-l_2)^2 & (n_1-n_2)^2 \\ (h_1-h_3)^2 & (j_1-j_3)^2 & (1-k_1)^2 & (1-l_1)^2 & (n_1-n_3)^2 \\ (1+h_1)^2 & (j_1-j_4)^2 & (1+k_1)^2 & (l_1-l_4)^2 & (1-n_1)^2 \\ (h_1-h_5)^2 & (1+j_1)^2 & (k_1-k_5)^2 & (1+l_1)^2 & (1+n_1)^2 \\ (1-h_3)^2 & (1-j_3)^2 & (1-k_2)^2 & (1-l_2)^2 & (n_2-n_3)^2 \\ 4 & (1-j_4)^2 & (1+k_2)^2 & (l_2-l_4)^2 & (1-n_2)^2 \\ (1-h_5)^2 & 4 & (k_2-k_5)^2 & (1+l_2)^2 & (1+n_2)^2 \\ (1+h_3)^2 & (j_3-j_4)^2 & 4 & (1-l_4)^2 & (1-n_3)^2 \\ (h_3-h_5)^2 & (1+j_3)^2 & (1-k_5)^2 & 4 & (1+n_3)^2 \\ (1+h_5)^2 & (1+j_4)^2 & (1+k_5)^2 & (1+l_4)^2 & 4 \end{array} \right)$$

3.4.1 Expression et condition de rang sur la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$

De nouveau il est plus commode de travailler avec la matrice $\tilde{\mathbf{N}} := 2\tilde{\mathbf{M}}$ qu'avec la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$ et ce pour même raison invoquée dans le cas $N = 4$. La matrice $\tilde{\mathbf{N}}$ se présente sous la forme de 10 blocs, chaque bloc consistant en une matrice rectangulaire 10×3 . Plus explicitement,

$$\tilde{\mathbf{N}} = (CDEFGHJKLN).$$

$C, D, E, F, G, H, J, K, L$ et N sont des matrices 10×3 . Le bloc C contient les paramètres c_3, c_4 et c_5 , le bloc D contient les paramètres d_2, d_4 et d_5, \dots , le bloc N contient les

paramètres n_1, n_2 et n_3 :

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ c_3 - 1 & 0 & 0 \\ 0 & c_4 - 1 & 0 \\ 0 & 0 & c_5 - 1 \\ c_3 + 1 & 0 & 0 \\ 0 & c_4 + 1 & 0 \\ 0 & 0 & c_5 + 1 \\ c_3 - c_4 & c_4 - c_3 & 0 \\ c_3 - c_5 & 0 & c_5 - c_3 \\ 0 & c_4 - c_5 & c_5 - c_4 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} d_2 - 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_4 - 1 & 0 \\ 0 & 0 & d_5 - 1 \\ d_2 + 1 & 0 & 0 \\ d_2 - d_4 & d_4 - d_2 & 0 \\ d_2 - d_5 & 0 & d_5 - d_2 \\ 0 & d_4 + 1 & 0 \\ 0 & 0 & d_5 + 1 \\ 0 & d_4 - d_5 & d_5 - d_4 \end{pmatrix}, \quad E = \begin{pmatrix} e_2 - 1 & 0 & 0 \\ 0 & e_3 - 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e_5 - 1 \\ e_2 - e_3 & e_3 - e_2 & 0 \\ e_2 + 1 & 0 & 0 \\ e_2 - e_5 & 0 & e_5 - e_2 \\ 0 & e_3 + 1 & 0 \\ 0 & e_3 - e_5 & e_5 - e_3 \\ 0 & 0 & e_5 + 1 \end{pmatrix},$$

$$F = \begin{pmatrix} f_2 - 1 & 0 & 0 \\ 0 & f_3 - 1 & 0 \\ 0 & 0 & f_4 - 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ f_2 - f_3 & f_3 - f_2 & 0 \\ f_2 - f_4 & 0 & f_4 - f_2 \\ f_2 + 1 & 0 & 0 \\ 0 & f_3 - f_4 & f_4 - f_3 \\ 0 & f_3 + 1 & 0 \\ 0 & 0 & f_4 + 1 \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} g_1 - 1 & 0 & 0 \\ g_1 + 1 & 0 & 0 \\ g_1 - g_4 & g_4 - g_1 & 0 \\ g_1 - g_5 & 0 & g_5 - g_1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_4 - 1 & 0 \\ 0 & 0 & g_5 - 1 \\ 0 & g_4 + 1 & 0 \\ 0 & 0 & g_5 + 1 \\ 0 & g_4 - g_5 & g_5 - g_4 \end{pmatrix}, \quad H = \begin{pmatrix} h_1 - 1 & 0 & 0 \\ h_1 - h_3 & h_3 - h_1 & 0 \\ h_1 + 1 & 0 & 0 \\ h_1 - h_5 & 0 & h_5 - h_1 \\ 0 & h_3 - 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_5 - 1 \\ 0 & h_3 + 1 & 0 \\ 0 & h_3 - h_5 & h_5 - h_3 \\ 0 & 0 & h_5 + 1 \end{pmatrix},$$

$$J = \begin{pmatrix} j_1 - 1 & 0 & 0 \\ j_1 - j_3 & j_3 - j_1 & 0 \\ j_1 - j_4 & 0 & j_4 - j_1 \\ j_1 + 1 & 0 & 0 \\ 0 & j_3 - 1 & 0 \\ 0 & 0 & j_4 - 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & j_3 - j_4 & j_4 - j_3 \\ 0 & j_3 + 1 & 0 \\ 0 & 0 & j_4 + 1 \end{pmatrix}, \quad K = \begin{pmatrix} k_1 - k_2 & k_2 - k_1 & 0 \\ k_1 - 1 & 0 & 0 \\ k_1 + 1 & 0 & 0 \\ k_1 - k_5 & 0 & k_5 - k_1 \\ 0 & k_2 - 1 & 0 \\ 0 & k_2 + 1 & 0 \\ 0 & k_2 - k_5 & k_5 - k_2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & k_5 - 1 \\ 0 & 0 & k_5 + 1 \end{pmatrix}, \quad L = \begin{pmatrix} l_1 - l_2 & l_2 - l_1 & 0 \\ l_1 - 1 & 0 & 0 \\ l_1 - l_4 & 0 & l_4 - l_1 \\ l_1 + 1 & 0 & 0 \\ 0 & l_2 - 1 & 0 \\ 0 & l_2 - l_4 & l_4 - l_2 \\ 0 & l_2 + 1 & 0 \\ 0 & 0 & l_4 - 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & l_4 + 1 \end{pmatrix}$$

et

$$N = \begin{pmatrix} n_1 - n_2 & n_2 - n_1 & 0 \\ n_1 - n_3 & 0 & n_3 - n_1 \\ n_1 - 1 & 0 & 0 \\ n_1 + 1 & 0 & 0 \\ 0 & n_2 - n_3 & n_3 - n_2 \\ 0 & n_2 - 1 & 0 \\ 0 & n_2 + 1 & 0 \\ 0 & 0 & n_3 - 1 \\ 0 & 0 & n_3 + 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Choix des paramètres indépendants

Choisissons comme paramètres indépendants tous les paramètres intervenant dans les blocs C et D , et deux paramètres du bloc E par exemple e_2 et e_5 , ce qui nous fait au total 8 paramètres. Il nous faut un dernier paramètre qu'on choisit dans les 7 blocs restants. Nous avons pris le paramètre j_1 qui fait partie du bloc J .

Contraintes Dynamiques Universelles

Déterminons maintenant les contraintes dynamiques universelles, c'est à dire les expressions des 21 paramètres restants, en termes des 9 paramètres indépendants $c_3, c_4, c_5, d_2, d_4, d_5, e_2, e_5$ et j_1 , en considérant des matrices carrées 10×10 obtenues à partir de la matrice $\tilde{\mathbf{N}}$ en sélectionnant 10 de ses 30 colonnes.

Pour déterminer e_3 considérons la matrice formée des blocs C, D, E et de la première colonne du bloc F . Nous obtenons de cette manière la matrice 10×10

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_2 - 1 & 0 & 0 & e_2 - 1 & 0 & 0 & f_2 - 1 \\ c_3 - 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_3 - 1 & 0 & 0 \\ 0 & c_4 - 1 & 0 & 0 & d_4 - 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_5 - 1 & 0 & 0 & d_5 - 1 & 0 & 0 & e_5 - 1 & 0 \\ c_3 + 1 & 0 & 0 & d_2 + 1 & 0 & 0 & e_2 - e_3 & e_3 - e_2 & 0 & f_2 - f_3 \\ 0 & c_4 + 1 & 0 & d_2 - d_4 & d_4 - d_2 & 0 & e_2 + 1 & 0 & 0 & f_2 - f_4 \\ 0 & 0 & c_5 + 1 & d_2 - d_5 & 0 & d_5 - d_2 & e_2 - e_5 & 0 & e_5 - e_2 & f_2 + 1 \\ c_3 - c_4 & c_4 - c_3 & 0 & 0 & d_4 + 1 & 0 & 0 & e_3 + 1 & 0 & 0 \\ c_3 - c_5 & 0 & c_5 - c_3 & 0 & 0 & d_5 + 1 & 0 & e_3 - e_5 & e_5 - e_3 & 0 \\ 0 & c_4 - c_5 & c_5 - c_4 & 0 & d_4 - d_5 & d_5 - d_4 & 0 & 0 & e_5 + 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Le déterminant de cette matrice que nous notons $|CDE1f|$, peut se mettre sous la forme du produit de deux facteurs. L'annulation de l'un des facteurs ne satisfait pas aux exigences de symétrie, ceci est une caractéristique générale qui se répète dans la suite.

$|CDE1f| = 0$ implique alors que

$$e_2 - e_3 + c_4 e_3 - c_4 d_2 e_3 + d_2 e_3 + c_3 - c_4 - d_2 + c_4 d_2 - c_3 d_4 + d_4 - c_3 e_2 - d_4 e_2 + c_3 d_4 e_2 = 0,$$

qui donne la première contrainte dynamique

$$e_3 = \frac{c_3 d_4 e_2 - c_4 - d_2 + c_4 d_2 + c_3 + d_4 - c_3 e_2 + e_2 - c_3 d_4 - d_4 e_2}{-c_4 + c_4 d_2 - d_2 + 1}. \quad (3.39)$$

Pour déterminer j_3 et j_4 , considérons les deux matrices carrées formées respectivement des blocs C, D, J et de la colonne $1e$ pour l'une d'entre-elles et des blocs C, E, J et de la colonne $1g$ pour l'autre. Pour chacune des matrices, le déterminant se met sous la forme de deux facteurs. L'annulation de l'un des facteurs n'est pas conforme aux exigences de symétrie. Plus précisément, $|CDJ1e| = 0$ implique que

$$c_5 j_1 + j_1 - c_3 d_2 j_1 - c_5 d_2 j_1 + c_3 d_5 j_1 - d_5 j_1 + d_5 - c_3 d_5 - j_3 - c_5 j_3 + d_2 j_3 - d_2 + c_3 d_2 + c_5 d_2 j_3 = 0$$

d'où une deuxième contrainte dynamique

$$j_3 = \frac{-c_5 j_1 - j_1 + c_3 d_2 j_1 + c_5 d_2 j_1 - c_3 d_5 j_1 + d_5 j_1 - d_5 + c_3 d_5 - c_3 d_2 + d_2}{-c_5 + d_2 - 1 + c_5 d_2}. \quad (3.40)$$

$|CEJ1g| = 0$ implique

$$e_5 - e_5 c_4 + c_4 e_5 j_1 - e_5 j_1 + e_2 j_4 - e_2 + e_2 c_4 + e_2 j_4 c_5 - c_4 e_2 j_1 - c_5 e_2 j_1 - j_4 - j_4 c_5 + c_5 j_1 + j_1 = 0$$

d'où une troisième contrainte dynamique

$$j_4 = \frac{-e_5 + e_5 c_4 - c_4 e_5 j_1 + e_5 j_1 + c_4 e_2 j_1 + e_2 - e_2 c_4 - c_5 j_1 + c_5 e_2 j_1 - j_1}{c_5 e_2 - 1 - c_5 + e_2}. \quad (3.41)$$

Pour déterminer f_2, f_3 et f_4 , considérons les matrices $(CDF1e)$, $(CEF1d)$ et $(DJF1e)$. Chacun des déterminants se présente sous la forme de deux facteurs. En rejetant les solutions qui ne satisfont pas aux exigences de symétrie, $|CDF1e| = 0$ implique

$$c_5 - c_3 + c_3 f_2 - c_3 d_5 f_2 + c_3 d_5 + d_5 f_2 - d_5 - c_5 f_3 + d_2 - f_2 + f_3 + c_5 d_2 f_3 - d_2 f_3 - c_5 d_2 = 0, \quad (3.42)$$

ce qui donne

$$f_3 = \frac{c_3 - f_2 c_3 + f_2 c_3 d_5 - c_3 d_5 - d_5 f_2 + d_5 - d_2 - c_5 + f_2 + c_5 d_2}{-c_5 + 1 + c_5 d_2 - d_2} \quad (3.43)$$

et $|CEF1d| = 0$ implique

$$f_4 - e_2 f_4 - c_5 f_4 + c_5 e_2 f_4 - e_5 - c_4 e_5 f_2 + e_5 f_2 + c_4 e_5 - f_2 + c_4 f_2 - c_5 e_2 + c_5 - c_4 + e_2 = 0. \quad (3.44)$$

En utilisant les expressions de j_3 et f_3 , $|DJF1e| = 0$ se réduit à

$$2(d_5 - 1)(d_2 - d_5)(-j_1 + f_2 j_1 c_5 - c_5 + f_2) \frac{c_3 - 1}{(d_2 - 1)(c_5 - 1)(1 + c_5)} = 0$$

ce qui nous fournit une quatrième contrainte dynamique

$$f_2 = \frac{j_1 + c_5}{j_1 c_5 + 1}. \quad (3.45)$$

En remplaçant f_2 par son expression, (3.45), dans (3.43) et dans (3.44) on obtient une cinquième puis une sixième contrainte dynamique

$$f_3 = -\frac{j_1 c_5 - j_1 c_5 d_2 - c_3 d_5 + d_5 j_1 c_3 + d_5 - d_5 j_1 - j_1 c_3 + c_3 - d_2 + j_1}{(d_2 - 1)(j_1 c_5 + 1)}, \quad (3.46)$$

$$f_4 = \frac{e_2 j_1 c_5 - j_1 c_5 + e_2 + e_5 j_1 - c_4 + c_4 e_5 + c_4 j_1 - c_4 e_5 j_1 - e_5 - j_1}{(j_1 c_5 + 1)(e_2 - 1)}. \quad (3.47)$$

Pour déterminer g_1 , g_4 et g_5 , on considère les matrices $(CEG1f)$, $(CFG1h)$ et $(DFG1e)$. On calcule dans chaque cas le déterminant, on l'égalise à zéro et on sélectionne la solution qui satisfait aux conditions de symétrie. $|CEG1f| = 0$ donne alors

$$e_2 - c_4 e_2 - e_3 + c_4 e_3 - g_1 + c_4 e_2 g_1 - c_3 g_1 + c_3 e_2 g_1 + e_3 g_1 - c_4 e_3 g_1 + c_3 g_4 - c_3 e_2 g_4 + g_4 - e_2 g_4 = 0, \quad (3.48)$$

d'où

$$g_4 = \frac{c_4 e_3 - c_4 e_3 g_1 - e_3 + e_3 g_1 + e_2 - g_1 - c_3 g_1 + c_3 e_2 g_1 - c_4 e_2 + c_4 e_2 g_1}{-1 - c_3 + c_3 e_2 + e_2}. \quad (3.49)$$

En utilisant l'expression de e_3 , (3.49) peut se mettre sous la forme

$$g_4 = \frac{c_4 d_2 g_1 - c_4 g_1 - c_4 d_2 + c_4 + c_3 d_4 + d_4 g_1 + c_3 d_2 g_1 - c_3 d_4 g_1 - d_4 - g_1 - c_3 + d_2}{(c_3 + 1)(-1 + d_2)}. \quad (3.50)$$

$|CFG1h| = 0$ admet comme solution

$$f_2 - c_5 f_2 + c_5 f_2 g_1 + c_3 f_2 g_1 - c_3 f_2 g_5 - f_2 g_5 - c_3 g_1 - g_1 + g_5 + c_3 g_5 - c_5 f_3 g_1 + f_3 g_1 - f_3 + c_5 f_3 = 0 \quad (3.51)$$

d'où

$$g_5 = \frac{f_2 - c_5 f_2 + c_5 f_2 g_1 + c_3 f_2 g_1 - f_3 + c_5 f_3 - c_3 g_1 - g_1 - c_5 f_3 g_1 + f_3 g_1}{c_3 f_2 + f_2 - 1 - c_3},$$

ou en utilisant les expressions de f_2 et de f_3

$$g_5 = \frac{g_1 c_5 d_2 - c_5 g_1 - c_5 d_2 + c_5 - g_1 + c_3 d_2 g_1 + d_2 + c_3 d_5 - c_3 + d_5 g_1 - c_3 d_5 g_1 - d_5}{(c_3 + 1)(-1 + d_2)}. \quad (3.52)$$

$|DFG1e| = 0$ donne

$$d_2 f_3 g_5 - d_5 f_3 g_1 - d_2 f_3 g_1 - d_5 f_3 - d_2 g_5 + d_2 g_1 + f_3 + f_3 g_5 - g_5 + g_1 - f_2 - f_2 g_1 + d_5 f_2 + d_5 f_2 g_1 = 0, \quad (3.53)$$

équation qui se simplifie en tenant compte des expressions de g_4 et de g_5 ((3.50) et (3.52)) en

$$\frac{2(j_1 - 1)(d_5 - 1)}{(c_3 + 1)(d_2 - 1)^2(c_5 j_1 + 1)} (c_5 - c_3 - c_5 d_2 + d_2 + c_3 d_5 - d_5) (c_3 d_2 g_1 - c_3 - g_1 + d_2) = 0. \quad (3.54)$$

Comme on a considéré que les c et les d sont indépendants, seul le dernier facteur dans le membre de gauche de (3.54) peut s'annuler,

$$c_3 d_2 g_1 - c_3 - g_1 + d_2 = 0,$$

qui nous fournit alors la 7ème contrainte dynamique

$$g_1 = \frac{c_3 - d_2}{c_3 d_2 - 1}. \quad (3.55)$$

En remplaçant g_1 par son expression (3.55) dans (3.50) et (3.52) on obtient les 8ème et

9ème contraintes dynamiques

$$g_4 = -\frac{c_4d_2 - c_4 - c_3d_4 + d_4}{c_3d_2 - 1}, \quad (3.56)$$

$$g_5 = \frac{-c_5d_2 + c_5 + c_3d_5 - d_5}{c_3d_2 - 1}. \quad (3.57)$$

Pour déterminer h_1 , h_2 et h_5 considérons les trois matrices $(CDH2j)$, $(FGH1e)$ et $(EGH1f)$. $|CDH2j| = 0$ donne

$$h_3 + c_4h_3 - c_3d_2 + d_2 + c_4d_2h_1 + c_3d_2h_1 - d_2h_3 - c_4d_2h_3 - d_4 + c_3d_4 - c_3d_4h_1 + d_4h_1 - h_1 - c_4h_1 = 0, \quad (3.58)$$

d'où

$$h_3 = \frac{-c_4h_1 + c_3d_2h_1 - c_3d_2 + d_2 + c_4d_2h_1 + c_3d_4 - c_3d_4h_1 + d_4h_1 - d_4 - h_1}{-c_4 + d_2 + c_4d_2 - 1}. \quad (3.59)$$

$|FGH1e| = 0$ et $|EGH1f| = 0$ donnent respectivement

$$\begin{aligned} & f_2g_5h_3 - f_2g_5 - f_4g_5h_3 + f_4g_5 + f_2g_4h_1 - f_2h_1 + f_3h_1 - f_3g_4h_1 \\ & - f_2g_1h_3 - f_2g_4h_5 + f_2g_1 + f_2h_5 + f_3g_4h_5 + f_4g_1h_3 - f_3h_5 - f_4g_1 = 0 \end{aligned} \quad (3.60)$$

et

$$g_1 - g_4 + g_4h_3 - g_1h_3 - e_2 + e_2g_1 + e_2g_4h_3 - e_2g_1h_3 + e_2g_4h_1 - e_2h_1 - e_3g_4 + e_3 - e_3g_4h_1 + e_3h_1 = 0. \quad (3.61)$$

En utilisant les expressions de g_1 , g_4 et e_3 et celle de h_3 en fonction de h_1 , (3.63), la relation précédente se simplifie en

$$(e_2 - c_4 + e_2c_4h_1 - h_1) \frac{(c_4d_2 - c_4 - 1 + d_4 - c_3d_4 + c_3d_2)(c_4d_2 - c_4 + d_4 - d_2 + c_3 - c_3d_4)}{(d_2 - 1)(c_4 - 1)(1 + c_4)(c_3d_2 - 1)} = 0.$$

En appliquant les conditions de symétrie et de self-consistance, $(c_4d_2 - c_4 - 1 + d_4 - c_3d_4 + c_3d_2)$ et $(c_4d_2 - c_4 + d_4 - d_2 + c_3 - c_3d_4)$ ne peuvent s'annuler, et par conséquent

$$e_2 - c_4 + e_2c_4h_1 - h_1 = 0,$$

ce qui donne une 10ème contrainte

$$h_1 = \frac{c_4 - e_2}{e_2 c_4 - 1}. \quad (3.62)$$

En reportant dans l'expression de h_3 on arrive à la 11ème contrainte dynamique

$$h_3 = \frac{c_4 d_2 - c_4 - d_4 e_2 + c_3 d_2 + d_4 - e_2 c_3 d_2 + e_2 - c_3 d_4 - d_2 + c_3 d_4 e_2}{(d_2 - 1)(e_2 c_4 - 1)}. \quad (3.63)$$

En remplaçant h_1 et h_3 par leurs expressions, (3.62) et (3.63), dans (3.60), on obtient

$$\frac{(j_1 - 1)(c_4 d_2 - c_3 d_4 + c_3 d_2 - 1 + d_4 - c_4)(d_2 - d_5 + c_3 d_5 - c_3 + c_5 - c_5 d_2)}{(j_1 c_5 + 1)(c_3 d_2 - 1)(d_2 - 1)(e_2 c_4 - 1)} \times (e_5 - c_5 - h_5 + h_5 e_2 c_4 + c_5 e_2 - c_4 e_5) = 0.$$

Seul le dernier facteur peut s'annuler, ce qui nous fournit la 12ème contrainte dynamique

$$h_5 = \frac{c_5 - c_5 e_2 + c_4 e_5 - e_5}{e_2 c_4 - 1}. \quad (3.64)$$

Dans le but d'obtenir k_1 , k_2 et k_5 considérons les matrices $(CDK1f)$, $(FHK1d)$ et $(EHK1f)$. En égalisant $|CDK1f|$, $|FHK1d|$ et $|EHK1f|$ à zéro et en tenant compte des conditions de symétrie et de self-consistance, on obtient

$$c_3 - c_4 + c_4 k_1 - k_1 + k_2 - c_3 k_2 - d_4 k_1 + c_3 d_4 k_1 + d_4 k_2 - c_3 d_4 k_2 + c_4 d_2 - c_3 d_2 - c_4 d_2 k_1 + c_3 d_2 k_1 = 0, \quad (3.65)$$

$$f_3 h_5 k_2 + f_3 h_5 - f_4 h_5 - f_4 h_5 k_2 - f_3 h_1 k_2 - f_3 h_1 - f_4 k_1 + f_2 h_3 k_1 - f_4 h_3 k_1 + f_2 k_1 + f_4 k_5 + f_4 h_1 k_2 + f_4 h_3 k_5 - f_2 k_5 + f_4 h_1 - f_2 h_3 k_5 = 0, \quad (3.66)$$

$$e_3 k_2 + e_3 + e_3 h_1 k_2 + e_3 h_1 + h_1 k_2 + h_1 - k_1 + k_2 - e_2 - e_2 k_1 - h_3 - h_3 k_1 - e_2 h_3 - e_2 h_3 k_1 = 0. \quad (3.67)$$

L'équation (3.65) permet d'exprimer k_2

$$k_2 = \frac{-c_4 + c_3 + c_4 k_1 - k_1 - c_4 d_2 k_1 + c_3 d_2 k_1 - d_4 k_1 + c_3 d_4 k_1 + c_4 d_2 - c_3 d_2}{-1 + c_3 - d_4 + c_3 d_4}. \quad (3.68)$$

L'équation (3.67) donne, en tenant compte des expressions de e_3 (3.39), h_1 (3.62), h_3 (3.63), ainsi que celle de k_2 en fonction de k_1 , (3.68),

$$\frac{2(e_2+1)(c_3-c_4)}{(e_2c_4-1)(1+d_4)(-1+c_3)} (c_3d_4e_2k_1 + c_3e_2 - c_3 - c_3d_4k_1 - e_2 - d_4e_2k_1 - c_4d_2 + d_4k_1 + d_2 - c_4k_1 - d_2k_1 + c_4d_2k_1 + c_4 + k_1) = 0.$$

Les conditions de self-consistance et de symétrie ne permettent pas au 1er et au 2ème facteur de s'annuler. Il s'ensuit que c'est le dernier facteur qui doit obligatoirement s'annuler

$$c_3d_4e_2k_1 + c_3e_2 - c_3 - c_3d_4k_1 - e_2 - d_4e_2k_1 - c_4d_2 + d_4k_1 + d_2 - c_4k_1 - d_2k_1 + c_4d_2k_1 + c_4 + k_1 = 0,$$

ce qui permet de tirer la 13ème contrainte dynamique

$$k_1 = -\frac{c_3e_2 - c_3 - e_2 + c_4 + d_2 - c_4d_2}{c_3d_4e_2 - c_3d_4 - d_4e_2 + d_4 - c_4 - d_2 + c_4d_2 + 1}. \quad (3.69)$$

En reportant dans (3.68), on obtient la 14ème contrainte

$$k_2 = -\frac{-c_3d_2 + e_2c_3d_2 - e_2c_4d_2 - e_2 + e_2c_4 + d_2}{c_3d_4e_2 - c_3d_4 - d_4e_2 + d_4 - c_4 - d_2 + c_4d_2 + 1}. \quad (3.70)$$

Reportons les expressions de k_1 , (3.69), et k_2 , (3.70), dans (3.66), et remplaçons f_2 , f_3 , f_4 , h_1 , h_3 et h_5 par leurs expressions respectives, (3.45), (3.46), (3.47), (3.62), (3.63) et (3.64). Nous obtenons

$$\begin{aligned} & (k_5c_3d_4e_2 + c_3d_5e_2 - k_5c_3d_4 - c_3d_5 - k_5d_4e_2 - d_5e_2 \\ & + k_5d_4 + d_5 + d_2e_5 - k_5d_2 + k_5 - d_2c_4e_5 - e_5 - k_5c_4 + k_5c_4d_2 + c_4e_5) \\ & \times \frac{(1-c_4+e_2-e_2c_4+d_4-c_3d_4-d_4e_2+c_3d_4e_2-2d_2+c_3d_2+c_4d_2-e_2c_3d_2+e_2c_4d_2)(j_1-1)(c_5e_2-c_4e_5+c_4-e_2+e_5-c_5)}{(j_1c_5+1)(e_2-1)(-1+d_2)(e_2c_4-1)(c_3d_4e_2-c_3d_4-d_4e_2+d_4-c_4-d_2+c_4d_2+1)} = 0. \end{aligned} \quad (3.71)$$

En vertu de la condition de self-consistance, seul le premier facteur peut s'annuler,

$$\begin{aligned} & k_5c_3d_4e_2 + c_3d_5e_2 - k_5c_3d_4 - c_3d_5 - k_5d_4e_2 - d_5e_2 + k_5d_4 + d_5 + d_2e_5 \\ & - k_5d_2 + k_5 - d_2c_4e_5 - e_5 - k_5c_4 + k_5c_4d_2 + c_4e_5 = 0, \end{aligned} \quad (3.72)$$

ce qui donne la 15ème contrainte dynamique

$$k_5 = -\frac{c_3d_5e_2 - c_3d_5 - d_5e_2 + d_5 + d_2e_5 - d_2c_4e_5 - e_5 + c_4e_5}{c_3d_4e_2 - c_3d_4 - d_4e_2 + d_4 - c_4 - d_2 + c_4d_2 + 1}. \quad (3.73)$$

Pour la détermination de l_1 , l_2 et l_4 , considérons les matrices $(CDL1e)$, $(CFL3k)$ et $(EGL1f)$. En calculant pour chacune des matrices le déterminant, en l'égalisant à zéro et en tenant compte des deux conditions de symétrie et de self-consistance, on obtient

$$\begin{aligned} c_5l_1 - c_5 + c_3 - c_3l_2 + c_3d_5l_1 - c_3d_5l_2 + c_3d_2l_1 - c_3d_2 + c_5d_2 - c_5d_2l_1 \\ -l_1 + l_2 - d_5l_1 + d_5l_2 = 0, \end{aligned} \quad (3.74)$$

$$\begin{aligned} c_5d_2j_1 + l_1c_5j_1 - l_1c_5d_2j_1 - c_5j_1 - l_1d_5j_1 + l_1c_3d_5j_1 - j_1 + d_2 - c_3 + l_1 \\ +c_3j_1 + d_5l_1 - d_2l_1 = 0 \end{aligned} \quad (3.75)$$

et

$$\begin{aligned} -c_3d_5l_1 - e_3g_5l_4 - e_3l_4 + e_2g_5l_4 + e_2l_4 + e_3g_5l_1 + e_3g_4l_2 - e_3g_1l_2 - e_3g_4 \\ +e_3l_1 + e_3g_1 - e_2g_5l_1 - e_5g_4l_2 + e_5g_4 - e_5g_1 - e_2l_1 + e_5g_1l_2 = 0. \end{aligned} \quad (3.76)$$

La première relation permet de tirer l_2 en fonction de l_1

$$l_2 = \frac{c_5l_1 - c_5 + c_3 - c_3d_2 + c_3d_5l_1 - c_5d_2l_1 + c_3d_2l_1 + c_5d_2 - l_1 - d_5l_1}{c_3 + c_3d_5 - 1 - d_5}. \quad (3.77)$$

La deuxième relation permet d'obtenir la 16ème contrainte

$$l_1 = -\frac{c_5d_2j_1 - j_1 - c_5j_1 - c_3 + c_3j_1 + d_2}{c_5j_1 + c_3d_5j_1 - d_5j_1 + 1 - c_5d_2j_1 + d_5 - d_2 - c_3d_5}. \quad (3.78)$$

En remplaçant dans l'expression de l_2 , (3.77), on obtient alors la 17ème contrainte

$$l_2 = -\frac{j_1d_2c_3 - c_3d_2 - c_5 - j_1 + c_5d_2 + d_2}{c_5j_1 + c_3d_5j_1 - d_5j_1 + 1 - c_5d_2j_1 + d_5 - d_2 - c_3d_5}. \quad (3.79)$$

De la relation (3.76), on tire une expression pour l_4

$$l_4 = \frac{e_3g_1l_2 - e_3g_5l_1 - e_3g_4l_2 + e_3g_4 - e_3l_1 - e_3g_1 + e_2g_5l_1 + e_5g_4l_2 - e_5g_4 + e_5g_1 + e_2l_1 - e_5g_1l_2}{-e_3g_5 - e_3 + e_2g_5 + e_2}. \quad (3.80)$$

En remplaçant l_1 et l_2 par leurs expressions (3.78) et (3.79) dans (3.80), et également e_3 , g_1 , g_4 et g_5 par leurs expressions, (3.39), (3.55), (3.50) et (3.52), on aboutit à la 18ème contrainte

$$l_4 = \frac{d_4(c_3 - 1)(e_2 - 1)(j_1 - 1) + (1 - d_2)((c_4 - 1)(e_5 - 1)(j_1 - 1) - c_5(e_2 - 1)(j_1 - 1) - (1 + c_5)(e_2 - 1))}{(1 - e_2)(j_1(c_5 + 1)(1 - d_2) + d_5(1 - c_3)(1 - j_1) + (1 - d_2)(1 - j_1))}. \quad (3.81)$$

Pour la détermination de n_1 , n_2 et n_3 , considérons les matrices $(CDN1e)$, $(DJN1e)$ et $(EJN3d)$. En calculant pour chaque matrice le déterminant correspondant, en l'égalisant à zéro et en tenant compte de la condition de symétrie, on arrive aux relations

$$\begin{aligned} c_4d_2n_3 - c_4n_3 + c_4n_1 - c_4d_2n_1 + c_5n_3 - c_5d_2n_3 - d_5n_2 + d_5n_1 + c_3d_5n_2 \\ - c_3d_5n_1 + d_4n_2 - d_4n_1 - c_5n_1 - c_3d_4n_2 + c_3d_4n_1 + c_5d_2n_1 = 0, \end{aligned} \quad (3.82)$$

$$\begin{aligned} d_5j_1n_2 + d_5j_1 - d_4j_1n_2 - d_4j_1 + d_5j_4n_3 + d_5n_3 - d_2j_4n_3 - d_2n_3 - d_5j_4n_1 \\ - d_5j_3n_2 - d_5j_3 - d_5n_1 + d_2j_4n_1 + d_4j_3 + d_2n_1 + d_4j_3n_2 = 0, \end{aligned} \quad (3.83)$$

$$\begin{aligned} -e_2j_4 - j_4 - j_4n_2 + e_2j_4n_1 + e_5 + e_5j_1 + e_5j_1n_2 - e_5n_1 - e_5j_4n_2 - e_5j_4n_1 \\ + j_1 - e_2 + j_1n_2 + e_2n_1 = 0. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Utilisons la première relation pour tirer n_3 en fonction de n_1 et n_2

$$n_3 = \frac{(c_4n_1 - c_5n_1 - d_4n_1 + d_4n_2 + d_5n_1 - d_5n_2 - c_4d_2n_1 + c_3d_4n_1 + d_2c_5n_1 - c_3d_4n_2 - c_3d_5n_1 + c_3d_5n_2)}{c_4 - c_5 - c_4d_2 + d_2c_5}. \quad (3.85)$$

Reportons dans la deuxième relation (3.83). On obtient alors une relation que dépend seulement de n_1 et n_2 , qui peut se mettre sous la forme

$$\begin{aligned} c_4j_1 - c_5j_1 - c_4j_3 + c_5j_3 - d_2n_1 + d_2n_2 + d_5n_1 - d_5n_2 - c_4d_2j_1 + d_2c_5j_1 + c_4d_2j_3 \\ - d_2c_5j_3 + c_3d_2n_1 - c_3d_2n_2 - c_3d_5n_1 + c_3d_5n_2 + c_4j_1n_2 - c_5j_1n_2 - c_4j_3n_2 - d_2j_4n_1 \\ + d_2j_4n_2 + c_5j_3n_2 + d_5j_4n_1 - d_5j_4n_2 - c_4d_2j_1n_2 + c_3d_2j_4n_1 \\ + d_2c_5j_1n_2 - c_3d_2j_4n_2 + c_4d_2j_3n_2 \\ - d_2c_5j_3n_2 - c_3d_5j_4n_1 \\ + c_3d_5j_4n_2 = 0. \end{aligned}$$

En faisant usage des l'expressions de j_4 et j_3 , et en tenant compte de la condition de self-consistance on arrive à

$$\begin{aligned}
& c_4 - c_5 - n_1 + n_2 - e_2c_4 + e_2c_5 + 2e_2n_1 - 2e_2n_2 - e_5n_1 + e_5n_2 - c_4j_1 + c_5j_1 + c_4n_2 \\
& - c_5n_1 - j_1n_1 + j_1n_2 + e_2c_4j_1 - e_2c_5j_1 - e_2c_4n_1 + e_2c_5n_1 + e_5c_4n_1 - e_5c_4n_2 \\
& + e_5j_1n_1 - e_5j_1n_2 - c_4j_1n_2 - c_5j_1n_1 + 2c_5j_1n_2 + e_2c_4j_1n_1 \\
& + e_2c_5j_1n_1 - 2e_2c_5j_1n_2 - e_5c_4j_1n_1 \\
& + e_5c_4j_1n_2 = 0,
\end{aligned}$$

ce qui permet d'obtenir n_1 en fonction de n_2

$$n_1 = \frac{(j_1 - 1)(e_2 - 1)(c_4 - c_5) - n_2(2e_2 - e_5 - c_4 + e_5c_4) - 2j_1n_2c_5(e_2 - 1) + j_1n_2(c_4 - 1)(e_5 - 1) + n_2}{-2e_2 + e_5 + c_5 + j_1 + e_2c_4 - e_2c_5 - e_5c_4 - e_5j_1 + c_5j_1 - e_2c_4j_1 - e_2c_5j_1 + e_5c_4j_1 + 1}. \quad (3.86)$$

En remplaçant dans (3.84) j_4 par son expression, (3.41), puis en remplaçant n_1 par son expression en terme de n_2 , (3.86), nous aboutissons à

$$\begin{aligned}
& \frac{(e_5 - e_2)}{c_5 + 1} \times \frac{e_2 - c_5 - j_1 + n_2 - e_2c_4 + e_2c_5 - e_2n_2 + e_5n_2 + e_2c_4j_1 - e_5c_4n_2 - e_5j_1n_2 + c_5j_1n_2 - e_2c_5j_1n_2 + e_5c_4j_1n_2}{(e_2 - 1)} = 0.
\end{aligned}$$

En utilisant la condition de self-consistance, seul le dernier facteur peut s'annuler

$$e_2 - c_5 - j_1 + n_2 - e_2c_4 + e_2c_5 - e_2n_2 + e_5n_2 + e_2c_4j_1 - e_5c_4n_2 - e_5j_1n_2 + c_5j_1n_2 - e_2c_5j_1n_2 + e_5c_4j_1n_2 = 0,$$

d'où on tire l'expression de la 19ème contrainte

$$n_2 = - \frac{c_4e_2j_1 - c_4e_2 - j_1 + e_2 - c_5 + e_2c_5}{-e_2 - c_5e_2j_1 - e_5c_4 + c_4e_5j_1 + 1 - e_5j_1 + c_5j_1 + e_5}. \quad (3.87)$$

En reportant dans l'expression de n_1 , on obtient la 20ème contrainte

$$n_1 = - \frac{-c_4 - j_1 + c_4j_1 + c_5e_2j_1 + e_2 - c_5j_1}{-e_2 - c_5e_2j_1 - e_5c_4 + c_4e_5j_1 + 1 - e_5j_1 + c_5j_1 + e_5}. \quad (3.88)$$

Puis en substituant à n_1 et n_2 leurs expressions (3.88) et (3.87) dans l'expression de n_3 (3.85), on arrive à la 21ème contrainte dynamique universelle

$$n_3 = \frac{(e_2 - 1)((c_3 - 1)(d_4 - d_5)(j_1 - 1) + j_1(c_5 - 1)(d_2 - 1) + (d_2 - 1)(1 + j_1)) + (c_4 - 1)(d_2 - 1)(j_1 - 1)}{(1 - d_2)(1 - e_2)(1 + c_5j_1) + e_5(1 - c_4)(1 - d_2)(1 - j_1)}. \quad (3.89)$$

Les 21 contraintes dynamiques universelles du système à 5 corps sont

$$\begin{aligned}
e_3 &= \frac{c_3 d_4 e_2 - c_3 d_4 - c_3 e_2 + c_3 - d_4 e_2 + d_4 + c_4 d_2 - d_2 + e_2 - c_4}{(1 - c_4)(1 - d_2)}, \\
f_2 &= \frac{c_5 + j_1}{1 + j_1 c_5}, \\
f_3 &= \frac{j_1 c_5 - c_5 d_2 j_1 - c_3 d_5 + j_1 c_3 d_5 + c_3 - d_5 j_1 - c_3 j_1 - d_2 + d_5 + j_1}{(1 - d_2)(1 + j_1 c_5)}, \\
f_4 &= \frac{j_1 c_4 e_5 - c_5 e_2 j_1 + c_4 - e_5 c_4 - c_4 j_1 - e_5 j_1 + j_1 c_5 - e_2 + e_5 + j_1}{(1 - e_2)(1 + j_1 c_5)}, \\
g_1 &= \frac{c_3 - d_2}{c_3 d_2 - 1}, \\
g_4 &= \frac{c_4 d_2 - c_3 d_4 - c_4 + d_4}{1 - c_3 d_2}, \\
g_5 &= \frac{d_2 c_5 - c_3 d_5 - c_5 + d_5}{1 - c_3 d_2}, \\
h_1 &= \frac{e_2 - c_4}{1 - c_4 e_2}, \\
h_3 &= \frac{c_4 d_2 - c_4 + c_3 d_2 + e_2 + d_4 - c_3 e_2 d_2 - c_3 d_4 + c_3 d_4 e_2 - d_4 e_2 - d_2}{(1 - d_2)(1 - c_4 e_2)}, \\
h_5 &= \frac{c_5 e_2 - c_4 e_5 - c_5 + e_5}{1 - c_4 e_2}, \\
j_3 &= \frac{c_3 d_5 j_1 - c_3 d_2 j_1 - c_3 d_5 + c_3 d_2 + j_1 + c_5 j_1 - c_5 d_2 j_1 - d_5 j_1 + d_5 - d_2}{1 + c_5 - d_2 - d_2 c_5}, \\
j_4 &= \frac{j_1 + j_1 c_5 - e_5 j_1 + c_4 e_5 j_1 - c_4 e_2 j_1 - c_5 e_2 j_1 - c_4 e_5 + e_5 - e_2 + c_4 e_2}{1 + c_5 - e_2 - c_5 e_2}, \\
k_1 &= \frac{c_3 - c_4 - d_2 + e_2 - c_3 e_2 + c_4 d_2}{1 - c_4 - d_2 + d_4 - c_3 d_4 + c_4 d_2 - d_4 e_2 + c_3 d_4 e_2}, \\
k_2 &= \frac{e_2 - d_2 + c_3 d_2 - c_4 e_2 - c_3 d_2 e_2 + c_4 d_2 e_2}{1 - c_4 - d_2 + d_4 - c_3 d_4 + c_4 d_2 - d_4 e_2 + c_3 d_4 e_2}, \\
k_5 &= \frac{e_5 - d_5 + c_3 d_5 - c_4 e_5 - d_2 e_5 + d_5 e_2 - c_3 d_5 e_2 + c_4 d_2 e_5}{1 - c_4 - d_2 + d_4 - c_3 d_4 + c_4 d_2 - d_4 e_2 + c_3 d_4 e_2}, \\
l_1 &= \frac{c_3 - d_2 + j_1 - c_3 j_1 + c_5 j_1 - c_5 d_2 j_1}{1 - d_2 + d_5 - c_3 d_5 + c_5 j_1 - d_5 j_1 + c_3 d_5 j_1 - c_5 d_2 j_1}, \\
l_2 &= \frac{c_5 - d_2 + j_1 + c_3 d_2 - c_5 d_2 - c_3 d_2 j_1}{1 - d_2 + d_5 - c_3 d_5 + c_5 j_1 - d_5 j_1 + c_3 d_5 j_1 - c_5 d_2 j_1}, \\
l_4 &= \frac{d_4 (c_3 - 1)(e_2 - 1)(j_1 - 1) + (1 - d_2)((c_4 - 1)(e_5 - 1)(j_1 - 1) - c_5(e_2 - 1)(j_1 - 1) - (1 + c_5)(e_2 - 1))}{(1 - e_2)(j_1(c_5 + 1)(1 - d_2) + d_5(1 - c_3)(1 - j_1) + (1 - d_2)(1 - j_1))}, \\
n_1 &= \frac{c_4 - e_2 + j_1 - c_4 j_1 + c_5 j_1 - c_5 e_2 j_1}{1 - e_2 + e_5 - c_4 e_5 + c_5 j_1 - e_5 j_1 + c_4 e_5 j_1 - c_5 e_2 j_1}, \\
n_2 &= \frac{c_5 - e_2 + j_1 + c_4 e_2 - c_5 e_2 - c_4 e_2 j_1}{1 - e_2 + e_5 - c_4 e_5 + c_5 j_1 - e_5 j_1 + c_4 e_5 j_1 - c_5 e_2 j_1}, \\
n_3 &= \frac{(e_2 - 1)((c_3 - 1)(d_4 - d_5)(j_1 - 1) + j_1(c_5 - 1)(d_2 - 1) + (d_2 - 1)(1 + j_1)) + (c_4 - 1)(d_2 - 1)(j_1 - 1)}{(1 - d_2)(1 - e_2)(1 + c_5 j_1) + e_5(1 - c_4)(1 - d_2)(1 - j_1)}.
\end{aligned} \tag{3.90}$$

3.5 Comment le cas $N = 5$ peut servir à retrouver le cas $N = 4$

Le système à cinq corps peut être considéré comme un système à quatre corps, les particules 1, 2, 3 et 4 par exemple, auquel on a adjoint une particule supplémentaire, la particule 5. Les paramètres c_3, c_4, d_2, d_4, e_2 et e_3 jouent les mêmes rôles pour les deux systèmes. Les paramètres f_1, f_4, g_1, g_3, h_1 et h_2 du cas à quatre corps correspondent respectivement aux paramètres g_1, g_4, h_1, h_3, k_1 et k_2 du cas à cinq corps, tandis que les paramètres restants du cas à cinq corps n'ont pas de correspondants dans le cas à quatre corps.

Nous allons essayer de retrouver les 7 contraintes dynamiques universelles du cas à quatre corps à partir des 21 contraintes du cas à cinq corps obtenues précédemment. Pour cela, il faut combiner les 21 contraintes du cas à cinq corps pour en tirer le plus grand nombre de relations impliquant uniquement les paramètres qui ont des correspondants dans le cas à quatre corps, à savoir $c_3, c_4, d_2, d_4, e_2, e_3, g_1, g_4, h_1, h_3, k_1$ et k_2 . Ces relations ne sont rien d'autre que les relations donnant $e_3, g_1, g_4, h_1, h_3, k_1$ et k_2 :

$$\begin{aligned}
e_3 &= \frac{c_3 d_4 e_2 - c_4 - d_2 + c_4 d_2 + c_3 + d_4 - c_3 e_2 + e_2 - c_3 d_4 - d_4 e_2}{-c_4 + c_4 d_2 - d_2 + 1}, \\
g_1 &= \frac{c_3 - d_2}{c_3 d_2 - 1}, \\
g_4 &= -\frac{c_4 d_2 - c_4 - c_3 d_4 + d_4}{c_3 d_2 - 1}, \\
h_1 &= \frac{c_4 - e_2}{e_2 c_4 - 1}, \\
h_3 &= \frac{c_4 d_2 - c_4 - d_4 e_2 + c_3 d_2 + d_4 - e_2 c_3 d_2 + e_2 - c_3 d_4 - d_2 + c_3 d_4 e_2}{(d_2 - 1)(e_2 c_4 - 1)}, \\
k_1 &= -\frac{c_3 e_2 - c_3 - e_2 + c_4 + d_2 - c_4 d_2}{c_3 d_4 e_2 - c_3 d_4 - d_4 e_2 + d_4 - c_4 - d_2 + c_4 d_2 + 1}, \\
k_2 &= -\frac{-c_3 d_2 + e_2 c_3 d_2 - e_2 c_4 d_2 - e_2 + e_2 c_4 + d_2}{c_3 d_4 e_2 - c_3 d_4 - d_4 e_2 + d_4 - c_4 - d_2 + c_4 d_2 + 1}.
\end{aligned} \tag{3.91}$$

En remplaçant g_1 par f_1 , g_4 par f_4 , h_1 par g_1 , h_3 par g_3 , k_1 par h_1 et k_2 par h_2 , on retrouve les sept contraintes dynamiques universelles du système à quatre corps (3.36).

3.6 Adaptation de la technique lorsque le système possède des symétries

Lorsque le système ne possède pas de symétries particulières, la totalité des contraintes dynamiques universelles ne peuvent être obtenues que par le calcul. Si par contre le système possède des propriétés de symétrie, par exemple si des masses sont égales avec des interactions à deux corps ne dépendant que des masses des particules, alors tout ou une partie des contraintes dynamiques universelles est obtenue par des arguments de symétrie. Pour être plus précis, les arguments de symétrie seuls permettent d'accéder à toutes les contraintes dynamiques universelles dans le cas des configurations avec une ou deux masses distinctes. Dans le cas de configurations avec trois masses distinctes et plus les arguments de symétrie permettent d'accéder à une partie des contraintes dynamiques universelles. Le reste de celles-ci sont alors à déterminer par le calcul après avoir tenu compte des symétries du problème. On détermine les a_{ij} indépendants, les b_k indépendants et les paramètres $x_{ij,k}$ également indépendants compte tenu des symétries du problème. En identifiant le terme d'énergie cinétique avec la décomposition qui est à la base de la borne inférieure optimisée, on obtient un système d'équations linéaires avec les a_{ij} et les b_k comme inconnues et les $x_{ij,k}$ comme paramètres. On peut utiliser un certain nombre d'équations, autant qu'il y a de b_k indépendants, pour éliminer les b_k en faveur des a_{ij} et des paramètres $x_{ij,k}$. On obtient ainsi un système d'équations linéaires au nombre des a_{ij} avec les a_{ij} comme inconnues et les $x_{ij,k}$ comme paramètres, système qui peut être écrit sous forme matricielle comme

$$\tilde{\mathbf{D}}\mathbf{A} = \mathbf{C},$$

où $\tilde{\mathbf{D}}$ est une matrice carrée dont le nombre de lignes est égale au nombre des a_{ij} indépendants, \mathbf{A} est une matrice unicolonne des a_{ij} et \mathbf{C} est une matrice unicolonne, ayant le même nombre de lignes que la matrice \mathbf{A} . Le système d'équations permet en principe de déterminer les a_{ij} en termes des paramètres $x_{ij,k}$. En principe seulement, car la détermination de l'inverse de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ n'est pas toujours aisée. Pour calculer les contraintes dynamiques universelles on généralise la méthode décrite précédemment. On commence par dériver la colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ par rapport à un $x_{ij,k}$ (il existe une et seule colonne de $\tilde{\mathbf{D}}$ qui dépend d'un paramètre $x_{ij,k}$), on répète la procédure pour chacun

des paramètres $x_{ij,k}$. On organise les colonnes ainsi obtenues sous forme d'une matrice rectangulaire qu'on notera pour des raisons évidentes $\widetilde{\mathbf{M}}$ dont le nombre de lignes est le nombre des a_{ij} indépendants et le nombre de colonnes est le nombre des paramètres $x_{ij,k}$ indépendants. Pour Obtenir les Contraintes Dynamiques Universelles, on impose à la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$ d'être de rang égal au nombre des a_{ij} indépendants moins un. Il s'ensuit que le nombre de Contraintes Dynamiques Universelles est la différence du nombre des $x_{ij,k}$ indépendants et du nombre des a_{ij} indépendants plus un. Ceci signifie en particulier qu'il n'y a pas de Contraintes Dynamiques Universelles lorsque le nombre des a_{ij} indépendants dépasse celui des $x_{ij,k}$ indépendants. Illustrons cette procédure sur quelques exemples simples.

3.6.1 Système à 4 corps avec trois masses distinctes

Il n'existe qu'une seule configuration de ce type, à savoir (m_1, m_1, m_3, m_4) .

Nous avons

$$\begin{aligned}
T^{(4)} &= \frac{1}{2m_1} \vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m_1} \vec{p}_2^2 + \frac{1}{2m_3} \vec{p}_3^2 + \frac{1}{2m_4} \vec{p}_4^2 \\
&= (b_1 \vec{p}_1 + b_1 \vec{p}_2 + b_3 \vec{p}_3 + b_4 \vec{p}_4) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4) \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 \\
&\quad + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_3 + d_2 \vec{p}_2 + d_4 \vec{p}_4)^2 \\
&\quad + \frac{a_{14}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_4 + e_2 \vec{p}_2 + e_3 \vec{p}_3)^2 \\
&\quad + \frac{a_{23}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3 + d_2 \vec{p}_1 + d_4 \vec{p}_4)^2 \\
&\quad + \frac{a_{24}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_4 + e_2 \vec{p}_1 + e_3 \vec{p}_3)^2 \\
&\quad + \frac{a_{34}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_4 + h_1 \vec{p}_1 + h_1 \vec{p}_2)^2.
\end{aligned} \tag{3.92}$$

Les contraintes dynamiques résultant de la symétrie sont

$$c_3 = c_4 = 0, \quad f_1 = d_2, \quad f_4 = d_4, \quad g_1 = e_2, \quad e_3 = g_3 \quad \text{et} \quad h_1 = h_2.$$

En identifiant les deux membres de (3.92) on obtient un système de 7 équations à 7 inconnues a_{12} , a_{13} , a_{14} , a_{34} , b_1 , b_3 et b_4 . En éliminant b_1 , b_3 et b_4 on obtient un système

de 4 équations à 4 inconnues

$$\tilde{\mathbf{D}} \times \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ a_{14} \\ a_{34} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_3} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_4} \\ \frac{1}{2m_3} + \frac{1}{2m_4} \end{pmatrix}$$

avec

$$\tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 4 & 2(d_2 - 1)^2 & 2(e_2 - 1)^2 & 0 \\ 1 & (d_2 + 1)^2 + 4 & (e_3 - e_2)^2 + (e_3 - 1)^2 & (h_1 - 1)^2 \\ 1 & (d_4 - d_2)^2 + (d_4 - 1)^2 & (e_2 + 1)^2 + 4 & (h_1 + 1)^2 \\ 0 & 2(d_4 + 1)^2 & 2(e_3 + 1)^2 & 4 \end{pmatrix}.$$

En appliquant la procédure décrite ci-dessus on obtient la matrice 4×5 $\tilde{\mathbf{M}}$

$$\tilde{\mathbf{M}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2(d_2 - 1) & 0 & 2(e_2 - 1) & 0 & 0 \\ (d_2 + 1) & 0 & (e_2 - e_3) & (2e_3 - e_2 - 1) & (h_1 - 1) \\ (d_2 - d_4) & (2d_4 - d_2 - 1) & (e_2 + 1) & 0 & (h_1 + 1) \\ 0 & 2(d_4 + 1) & 0 & 2(e_3 + 1) & 0 \end{pmatrix}.$$

En imposant à $\tilde{\mathbf{M}}$ d'être de rang 3 au plus, on obtient deux contraintes, à savoir :

$$e_3 = \frac{e_2 - d_2 + d_4 - e_2 d_4}{1 - d_2},$$

$$h_1 = \frac{e_2 - d_2}{1 - d_2 + d_4 - e_2 d_4}.$$

On peut remarquer que le paramètre d_4 joue le rôle du paramètre c_3 dans le cas à trois corps, le paramètre e_3 joue le rôle du paramètre d_2 et le paramètre h_1 joue le rôle du paramètre e_1 . Les deux autres paramètres d_2 et e_2 n'ayant pas de correspondants dans le cas à trois corps.

Notons les paramètres d_2 et e_2 par x et y respectivement

$$x := d_2, \quad y := e_2,$$

et réappelons d_4 , e_3 et h_1 par c_3 , d_2 et e_1 respectivement. Les deux contraintes dynamiques obtenues ci-dessus peuvent alors se réécrire comme

$$d_2 = \frac{y - x + c_3 - yc_3}{1 - x}, \quad e_1 = \frac{y - x}{1 - x + c_3 - yc_3}.$$

On peut utiliser la première relation pour tirer x , par exemple, en termes des autres paramètres

$$x = \frac{y + c_3 - d_2 - yc_3}{1 - d_2}.$$

En reportant dans la deuxième relation, on obtient

$$e_1 = \frac{c_3 - d_2}{c_3 d_2 - 1},$$

qui n'est rien d'autre que l'unique Contrainte Dynamique Universelle du système à trois corps.

3.6.2 Système à 5 corps avec trois masses distinctes

Deux configurations sont possibles $(m_1, m_1, m_1, m_4, m_5)$ et $(m_1, m_1, m_3, m_3, m_5)$. Considérons à tour de rôle les deux configurations précédentes.

Configuration $(m_1, m_1, m_1, m_4, m_5)$

Nous avons

$$\begin{aligned} T^{(5)} &= \frac{1}{2m_1} \vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m_1} \vec{p}_2^2 + \frac{1}{2m_1} \vec{p}_3^2 + \frac{1}{2m_4} \vec{p}_4^2 + \frac{1}{2m_5} \vec{p}_5^2 \\ &= (b_1 \vec{p}_1 + b_1 \vec{p}_2 + b_1 \vec{p}_3 + b_4 \vec{p}_4 + b_5 \vec{p}_5) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4 + \vec{p}_5) \\ &\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_3)^2 + \frac{a_{14}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_4 + e_2 \vec{p}_2 + e_2 \vec{p}_3 + e_5 \vec{p}_5)^2 \\ &\quad + \frac{a_{15}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_5 + f_2 \vec{p}_2 + f_2 \vec{p}_3 + f_4 \vec{p}_4)^2 + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3)^2 \\ &\quad + \frac{a_{14}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_4 + e_2 \vec{p}_1 + e_2 \vec{p}_3 + h_5 \vec{p}_5)^2 \\ &\quad + \frac{a_{15}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_5 + f_2 \vec{p}_1 + f_2 \vec{p}_3 + f_4 \vec{p}_4)^2 \\ &\quad + \frac{a_{14}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_4 + e_2 \vec{p}_1 + e_2 \vec{p}_2 + h_5 \vec{p}_5)^2 \\ &\quad + \frac{a_{15}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_5 + f_2 \vec{p}_1 + f_2 \vec{p}_2 + f_4 \vec{p}_4)^2 \\ &\quad + \frac{a_{45}}{4} (\vec{p}_4 - \vec{p}_5 + n_1 \vec{p}_1 + n_1 \vec{p}_2 + n_1 \vec{p}_3)^2. \end{aligned} \tag{3.93}$$

La symétrie du problème implique que

$$\begin{aligned}
b_1 &= b_2 = b_3, \\
c_3 &= c_4 = c_5 = 0, \\
d_2 &= d_4 = d_5 = 0, \\
g_1 &= g_4 = g_5 = 0, \\
e_2 &= e_3 = k_1 = k_2 = h_1 = h_3, \\
f_2 &= f_3 = j_1 = j_3 = l_1 = l_2, \\
h_5 &= k_5 = e_5, \\
f_4 &= j_4 = l_4 \\
n_1 &= n_2 = n_3.
\end{aligned} \tag{3.94}$$

On a 4 a_{ij} indépendants, 3 b_k indépendants et 5 paramètres indépendants e_2, e_3, f_2, f_4 et n_1 . L'identification du terme de l'énergie cinétique avec sa décomposition nous fournit un système linéaire de 7 équations à 7 inconnues : les a_{ij} et les b_k , avec 5 paramètres. En éliminant les b_k en faveur des a_{ij} , on obtient un système linéaire de 4 équations à 4 inconnues les a_{ij} , avec toujours 5 paramètres

$$\tilde{\mathbf{D}} \times \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{14} \\ a_{15} \\ a_{45} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{m_1} \\ \frac{2}{m_1} + \frac{2}{m_2} \\ \frac{2}{m_1} + \frac{2}{m_3} \\ \frac{2}{m_2} + \frac{2}{m_3} \end{pmatrix}$$

avec

$$\tilde{\mathbf{D}} = \begin{pmatrix} 3 & (e_2 - 1)^2 & (f_2 - 1)^2 & 0 \\ 2 & 2(3 + e_2^2 + 2e_2) & (1 + 2f_2^2 + 3f_4^2 - 4f_4f_2 - 2f_4) & (n_1 - 1)^2 \\ 2 & (1 + 2e_2^2 + 3e_5^2 - 4e_5e_2 - 2e_5) & 2(3 + f_2^2 + 2f_2) & (n_1 + 1)^2 \\ 0 & 3(e_5 + 1)^2 & 3(f_4 + 1)^2 & 4 \end{pmatrix}.$$

En appliquant la procédure décrite ci-dessus on obtient la matrice 4×5 $\widetilde{\mathbf{M}}$

$$\widetilde{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} 2(e_2 - 1) & 0 & 2(f_2 - 1) & 0 & 0 \\ 4e_2 + 4 & 0 & 4f_2 - 4f_4 & (6f_4 - 4f_2 - 2) & 2(n_1 - 1) \\ 4e_2 - 4e_5 & (6e_5 - 4e_2 - 2) & 4f_2 + 4 & 0 & 2(n_1 + 1) \\ 0 & 3(e_5 + 1) & 0 & 6(f_4 + 1) & 0 \end{pmatrix}.$$

En imposant à $\widetilde{\mathbf{M}}$ d'être de rang 3 au plus, on obtient deux contraintes dynamiques, à savoir :

$$\begin{aligned} f_4 &= \frac{e_2 - e_5 - j_1 + e_5 j_1}{e_2 - 1}, \\ n_1 &= \frac{e_2 - j_1}{e_2 - e_5 + e_5 j_1 - 1}. \end{aligned}$$

Les paramètres e_5 , f_4 et n_1 correspondent respectivement aux paramètres c_3 , d_2 et e_1 dans le cas à trois corps, les paramètres e_2 et f_2 n'ayant pas de correspondants. En notant

$$y := e_2, \quad x := f_2$$

et en réappelant e_5 , f_4 , et n_1 ; c_3 , d_2 et e_1 respectivement, les deux contraintes ci-dessus peuvent être réécrites comme :

$$\begin{aligned} d_2 &= \frac{y - c_3 - x + c_3 x}{y - 1}, \\ e_1 &= \frac{y - x}{y - c_3 + c_3 x - 1}. \end{aligned}$$

La première relation permet d'exprimer par exemple x en fonction de y , c_3 , et d_2

$$x = \frac{y - c_3 + d_2 - y d_2}{1 - c_3}.$$

En reportant dans la deuxième relation, on retrouve la contrainte dynamique à trois corps

$$e_1 = \frac{c_3 - d_2}{c_3 d_2 - 1}.$$

Configuration $(m_1, m_1, m_3, m_3, m_5)$

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

$$\begin{aligned}
T^{(5)} &= \frac{1}{2m_1} \vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m_1} \vec{p}_2^2 + \frac{1}{2m_3} \vec{p}_3^2 + \frac{1}{2m_3} \vec{p}_4^2 + \frac{1}{2m_5} \vec{p}_5^2 \\
&= (b_1 \vec{p}_1 + b_1 \vec{p}_2 + b_3 \vec{p}_3 + b_3 \vec{p}_4 + b_5 \vec{p}_5) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4 + \vec{p}_5) \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_3 + d_2 \vec{p}_2 + d_4 \vec{p}_4 + d_5 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{14}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_4 + e_2 \vec{p}_2 + e_3 \vec{p}_3 + e_5 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{15}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_5 + f_2 \vec{p}_2 + f_3 \vec{p}_3 + f_4 \vec{p}_4)^2 \\
&\quad + \frac{a_{23}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3 + g_1 \vec{p}_1 + g_4 \vec{p}_4 + g_5 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{24}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_4 + h_1 \vec{p}_1 + h_3 \vec{p}_3 + h_5 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{25}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_5 + j_1 \vec{p}_1 + j_3 \vec{p}_3 + j_4 \vec{p}_4)^2 \\
&\quad + \frac{a_{34}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2 + \frac{a_{35}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_5 + l_1 \vec{p}_1 + l_2 \vec{p}_2 + l_4 \vec{p}_4)^2 \\
&\quad + \frac{a_{45}}{4} (\vec{p}_4 - \vec{p}_5 + n_1 \vec{p}_1 + n_2 \vec{p}_2 + n_3 \vec{p}_3)^2.
\end{aligned} \tag{3.95}$$

La symétrie du problème implique

$$\begin{aligned}
b_1 &= b_2, & b_3 &= b_4, \\
c_3 &= c_4 = c_5 = 0, \\
k_1 &= k_2 = k_5 = 0, \\
e_3 &= g_4 = d_4 = h_3, \\
f_3 &= f_4 = j_3 = j_4, \\
g_1 &= h_1 = e_2 = d_2, \\
h_5 &= e_5 = d_5 = g_5, \\
l_1 &= l_2 = n_1 = n_2, \\
f_2 &= j_1, \\
l_4 &= n_3.
\end{aligned} \tag{3.96}$$

et

$$a_{13} = a_{23} = a_{14} = a_{24}, \quad a_{15} = a_{25}, \quad a_{35} = a_{45}.$$

On a donc 3 b_k indépendants, 5 a_{ij} indépendants et 7 paramètres indépendants $d_2, d_4, d_5, f_2, f_3, l_1$ et l_4 .

L'identification du terme d'énergie cinétique et de sa décomposition nous fournit un système linéaire de 8 équations à 8 inconnues, avec 7 paramètres. L'élimination des b_k nous amène à un système linéaire de 5 équations à 5 inconnues avec toujours le même nombre de paramètres

$$\tilde{\mathbf{D}} \times \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ a_{15} \\ a_{34} \\ a_{35} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_3} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_5} \\ \frac{1}{2m_3} + \frac{1}{2m_4} \\ \frac{1}{2m_3} + \frac{1}{2m_5} \end{pmatrix}$$

avec

$$\tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 4 & 4d_2^2 - 8d_2 + 4 & 2f_2^2 - 4f_2 + 2 & 0 & 0 \\ 1 & 2d_2^2 - 2d_2d_4 + 2d_2 + 2d_4^2 - 2d_4 + 6 & f_2^2 - 2f_2f_3 + 2f_3^2 - 2f_3 + 1 & 1 & 2l_1^2 - 2l_1l_4 - 2l_1 + l_4^2 + 1 \\ 1 & 2d_2^2 - 4d_2d_5 + 4d_5^2 - 4d_5 + 2 & f_2^2 + 2f_2 + 5 & 0 & 2l_1^2 + 4l_1 + 2 \\ 0 & 4d_4^2 + 8d_4 + 4 & 0 & 4 & 2l_4^2 - 4l_4 + 2 \\ 0 & 2d_4^2 - 4d_4d_5 + 4d_5^2 + 4d_5 + 2 & 2f_3^2 + 4f_3 + 2 & 1 & l_4^2 + 2l_4 + 5 \end{pmatrix}.$$

La matrice $\tilde{\mathbf{M}}$ correspondante, qui est une matrice 5×7 , est donnée par

$$\tilde{\mathbf{M}} = 2 \begin{pmatrix} 4d_2 - 4 & 0 & 0 & 2f_2 - 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2d_2 - d_4 + 1 & 2d_4 - d_2 - 1 & 0 & f_2 - f_3 & 2f_3 - f_2 - 1 & 2l_1 - l_4 - 1 & l_4 - l_1 \\ 2d_2 - 2d_5 & 0 & 4d_5 - 2d_2 - 2 & f_2 + 1 & 0 & 2l_1 + 2 & 0 \\ 0 & 4d_4 + 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2l_4 - 2 \\ 0 & 2d_4 - 2d_5 & 4d_5 - 2d_4 + 2 & 0 & 2f_3 + 2 & 0 & l_4 + 1 \end{pmatrix}.$$

En imposant à $\tilde{\mathbf{M}}$ d'être de rang 4 au plus, on obtient trois contraintes, à savoir :

$$\begin{aligned} f_3 &= \frac{d_2 - d_5 - f_2 + d_5f_2}{d_2 - 1}, \\ l_1 &= \frac{d_2 - f_2}{d_2 - d_5 + d_5f_2 - 1}, \\ l_4 &= \frac{-d_5 + d_2 + d_4 - f_2 + d_5f_2 - d_4f_2}{d_2 - d_5 + d_5f_2 - 1}. \end{aligned}$$

d_5 , f_3 et l_1 jouent respectivement les rôles de c_3 , d_2 et e_1 du cas à trois corps. Les paramètres d_2 , d_4 , f_2 et l_4 n'ont pas de correspondants. Notons d_2 , d_4 , f_2 et l_4 ; x , y , z et w et réappelons d_5 , f_3 et l_1 respectivement c_3 , d_2 et e_1 . Les contraintes précédentes se

réécrivent alors comme

$$\begin{aligned} d_2 &= \frac{x - c_3 - z + c_3 z}{x - 1}, \\ e_1 &= \frac{x - z}{x - c_3 + c_3 z - 1}, \\ w &= \frac{-c_3 + x + y - z + c_3 z - yz}{x - c_3 + c_3 z - 1}. \end{aligned}$$

La première relation peut servir à exprimer x en termes de c_3 , d_2 et z

$$x = \frac{z + c_3 - d_2 - z c_3}{1 - d_2}.$$

En remplaçant dans la deuxième équation x par son expression, on obtient

$$e_1 = \frac{c_3 - d_2}{c_3 d_2 - 1}$$

qui n'est rien d'autre que l'unique contrainte dynamique du cas à trois corps.

3.6.3 Système à 5 corps avec quatre masses distinctes

La seule configuration possible est $(2111) := (m_1, m_1, m_3, m_4, m_5)$. La décomposition de l'énergie cinétique se réduit dans ce cas à :

$$\begin{aligned} T^{(5)} &= \frac{1}{2m_1} \vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m_1} \vec{p}_2^2 + \frac{1}{2m_3} \vec{p}_3^2 + \frac{1}{2m_4} \vec{p}_4^2 + \frac{1}{2m_5} \vec{p}_5^2 \\ &= (b_1 \vec{p}_1 + b_1 \vec{p}_2 + b_3 \vec{p}_3 + b_4 \vec{p}_4 + b_5 \vec{p}_5) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4 + \vec{p}_5) \\ &\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_3 + d_2 \vec{p}_2 + d_4 \vec{p}_4 + d_5 \vec{p}_5)^2 \\ &\quad + \frac{a_{14}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_4 + e_2 \vec{p}_2 + e_3 \vec{p}_3 + e_5 \vec{p}_5)^2 \\ &\quad + \frac{a_{15}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_5 + f_2 \vec{p}_2 + f_3 \vec{p}_3 + f_4 \vec{p}_4)^2 \\ &\quad + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3 + d_2 \vec{p}_1 + d_4 \vec{p}_4 + d_5 \vec{p}_5)^2 \\ &\quad + \frac{a_{14}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_4 + e_2 \vec{p}_1 + e_3 \vec{p}_3 + e_5 \vec{p}_5)^2 \\ &\quad + \frac{a_{15}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_5 + f_2 \vec{p}_1 + f_3 \vec{p}_3 + f_4 \vec{p}_4)^2 \\ &\quad + \frac{a_{34}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_4 + k_1 \vec{p}_1 + k_1 \vec{p}_2 + k_5 \vec{p}_5)^2 \\ &\quad + \frac{a_{35}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_5 + l_1 \vec{p}_1 + l_1 \vec{p}_2 + l_4 \vec{p}_4)^2 \\ &\quad + \frac{a_{45}}{4} (\vec{p}_4 - \vec{p}_5 + n_1 \vec{p}_1 + n_1 \vec{p}_2 + n_3 \vec{p}_3)^2. \end{aligned} \tag{3.97}$$

La symétrie du problème implique 4 b_k , 7 a_{ij} et 15 paramètres indépendants $x_{ij,k}$. L'identification du terme d'énergie cinétique avec sa décomposition donne 11 équations à 11 inconnues, les quatre b et les sept a , avec 15 paramètres. En éliminant les b entre ces équations nous nous retrouvons avec un système linéaire de 7 équation à 7 inconnues les a , avec 15 paramètres

$$\tilde{\mathbf{D}} \times \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ a_{14} \\ a_{15} \\ a_{34} \\ a_{35} \\ a_{45} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_3} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_4} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_5} \\ \frac{1}{2m_3} + \frac{1}{2m_4} \\ \frac{1}{2m_3} + \frac{1}{2m_5} \\ \frac{1}{2m_3} + \frac{1}{2m_5} \end{pmatrix}$$

avec

$$\tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 4 & 2(d_2 - 1)^2 & 2(e_2 - 1)^2 & 2(f_2 - 1)^2 \\ 1 & (2d_2 + d_2^2 + 5) & (e_3 - 1)^2 + (e_3 - e_2)^2 & (f_3 - 1)^2 + (f_3 - f_2)^2 \\ 1 & (d_4 - 1)^2 + (d_4 - d_2)^2 & (2e_2 + e_2^2 + 5) & (f_4 - 1)^2 + (f_4 - f_2)^2 \\ 1 & (d_5 - 1)^2 + (d_5 - d_2)^2 & (e_5 - 1)^2 + (e_5 - e_2)^2 & (2f_2 + f_2^2 + 5) \\ 0 & 2(d_4 + 1)^2 & 2(e_3 + 1)^2 & 2(f_3 - f_4)^2 \\ 0 & 2(d_5 + 1)^2 & 2(e_3 - e_5)^2 & 2(f_3 + 1)^2 \\ 0 & 2(d_4 - d_5)^2 & 2(e_5 + 1)^2 & 2(f_4 + 1)^2 \\ & & 0 & 0 & 0 \\ & & (k_1 - 1)^2 & (l_1 - 1)^2 & (n_1 - n_3)^2 \\ & & (k_1 + 1)^2 & (l_1 - l_4)^2 & (n_1 - 1)^2 \\ & & (k_1 - k_5)^2 & (l_1 + 1)^2 & (n_1 + 1)^2 \\ & & 1 & (l_4 - 1)^2 & (n_3 - 1)^2 \\ & & (k_5 - 1)^2 & 1 & (n_3 + 1)^2 \\ & & (k_5 + 1)^2 & (l_4 + 1)^2 & 1 \end{pmatrix}.$$

On en déduit l'expression de la matrice 7×15 $\widetilde{\mathbf{M}}$

$$\widetilde{\mathbf{M}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2d_2 - 2 & 0 & 0 & 2e_2 - 2 & 0 & 0 & 2f_2 - 2 \\ d_2 + 1 & 0 & 0 & e_2 - e_3 & 2e_3 - e_2 - 1 & 0 & f_2 - f_3 \\ d_2 - d_4 & 2d_4 - d_2 - 1 & 0 & e_2 + 1 & 0 & 0 & f_2 - f_4 \\ d_2 - d_5 & 0 & 2d_5 - d_2 - 1 & e_2 - e_5 & 0 & 2e_5 - e_2 - 1 & f_2 + 1 \\ 0 & 2d_4 + 2 & 0 & 0 & 2e_3 + 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2d_5 + 2 & 0 & 2e_3 - 2e_5 & 2e_5 - 2e_3 & 0 \\ 0 & 2d_4 - 2d_5 & 2d_5 - 2d_4 & 0 & 0 & 2e_5 + 2 & 0 \\ \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2f_3 - f_2 - 1 & 0 & k_1 - 1 & 0 & l_1 - 1 & 0 & n_1 - n_3 & n_3 - n_1 \\ 0 & 2f_4 - f_2 - 1 & k_1 + 1 & 0 & l_1 - l_4 & l_4 - l_1 & n_1 - 1 & 0 \\ 0 & 0 & k_1 - k_5 & k_5 - k_1 & l_1 + 1 & 0 & n_1 + 1 & 0 \\ 2f_3 - 2f_4 & 2f_4 - 2f_3 & 0 & 0 & 0 & l_4 - 1 & 0 & n_3 - 1 \\ 2f_3 + 2 & 0 & 0 & k_5 - 1 & 0 & 0 & 0 & n_3 + 1 \\ 0 & 2f_4 + 2 & 0 & k_5 + 1 & 0 & l_4 + 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

En imposant à $\widetilde{\mathbf{M}}$ d'être de rang 6 au plus, on obtient 9 relations entre les paramètres $d_2, d_4, d_5, e_2, e_3, e_5, f_2, f_3, f_4, k_1, k_5, l_1, l_4, d_5, n_1$ et n_3

$$e_3 = \frac{e_2 - d_2 + d_4 - e_2 d_4}{1 - d_2},$$

$$f_3 = \frac{d_5 - d_2 + f_2 - d_5 f_2}{1 - d_2},$$

$$f_4 = \frac{e_5 - e_2 + f_2 - e_5 f_2}{1 - e_2},$$

$$k_1 = \frac{e_2 - d_2}{1 - d_2 + d_4 - e_2 d_4},$$

$$k_5 = \frac{e_5 - d_5 + e_2 d_5 - e_5 d_2}{1 - d_2 + d_4 - e_2 d_4},$$

$$l_1 = \frac{f_2 - d_2}{1 - d_2 + d_5 - d_5 f_2},$$

$$l_4 = \frac{e_2 - e_5 + d_4 - f_2 - e_2 d_2 - e_2 d_4 + e_5 d_2 + e_5 f_2 + d_2 f_2 - d_4 f_2 + e_2 d_4 f_2 - e_5 d_2 f_2}{e_2 + d_2 - d_5 - e_2 d_2 + e_2 d_5 + d_5 f_2 - e_2 d_5 f_2 - 1},$$

$$n_1 = \frac{f_2 - e_2}{1 - e_2 + e_5 - e_5 f_2},$$

$$n_3 = \frac{e_2 + d_4 - d_5 - f_2 - e_2 d_2 - e_2 d_4 + e_2 d_5 + d_2 f_2 - d_4 f_2 + d_5 f_2 + e_2 d_4 f_2 - e_2 d_5 f_2}{e_2 - e_5 + d_2 - e_2 d_2 + e_5 d_2 + e_5 f_2 - e_5 d_2 f_2 - 1}.$$

Les paramètres $d_4, d_5, e_3, e_5, f_3, f_4, k_1, k_5, l_1, l_4, n_1$ et n_3 correspondent respectivement aux paramètres $c_3, c_4, d_2, d_4, e_2, e_3, f_1, f_4, g_1, g_3, h_1$, et h_2 dans le cas à 4 corps. Ceci d'une part. D'autre part, les paramètres d_2, e_2 et f_2 n'ont pas de correspondants à quatre corps. Réappelons d_2, e_2 et f_2 respectivement x, y et z et faisons le changement de notation relative à la correspondance entre les cas à cinq et à quatre corps. Par exemple $d_4 \rightarrow c_3, d_5 \rightarrow c_4$, etc... Les 9 contraintes précédentes prennent alors la forme

$$\begin{aligned}
d_2 &= \frac{y - x + c_3 - yc_3}{1 - x}, \\
e_2 &= \frac{x - c_4 - z + c_4z}{x - 1}, \\
e_3 &= \frac{y - d_4 - z + d_4z}{y - 1}, \\
f_1 &= \frac{x - y}{x - c_3 + yc_3 - 1}, \\
f_4 &= -\frac{d_4 - c_4 + yc_4 - d_4x}{x - c_3 + yc_3 - 1}, \\
g_1 &= \frac{x - z}{x - c_4 + c_4z - 1}, \\
g_3 &= \frac{y - d_4 + c_3 - z - yx - yc_3 + d_4x + d_4z + xz - c_3z + yc_3z - d_4xz}{y + x - c_4 - yx + yc_4 + c_4z - yc_4z - 1}, \\
h_1 &= \frac{y - z}{y - d_4 + d_4z - 1}, \\
h_2 &= \frac{y + c_3 - c_4 - z - yx - yc_3 + yc_4 + xz - c_3z + c_4z + yc_3z - yc_4z}{y - d_4 + x - yx + d_4x + d_4z - d_4xz - 1}.
\end{aligned}$$

On peut utiliser la première relation pour tirer y en fonction de x et la deuxième relation pour tirer z en fonction de x . On obtient

$$\begin{aligned}
y &= \frac{x - c_3 + d_2 - xd_2}{1 - c_3} \\
z &= \frac{x + e_2 - c_4 - xe_2}{1 - c_4}.
\end{aligned}$$

En injectant dans les 7 relations restantes, on obtient les 7 contraintes dynamiques du système à 4 corps (3.36).

Il est clair d'après les exemples précédents qu'il existe un lien entre les contraintes dynamiques universelles pour des systèmes avec des nombres de corps différents pourvu que les mêmes masses sont impliquées dans tous les cas. Ici, cette relation nous a permis

de retrouver les contraintes dynamiques universelles dans le sens du compliqué au simple. Ce qui est plus intéressant c'est évidemment d'utiliser ce lien dans le sens inverse, c'est à dire de déterminer au moins une partie des contraintes dynamiques universelles d'un système à partir de la connaissance de celles d'un système plus simple. Ce travail sera exposé au chapitre suivant.

Chapitre 4

Les Contraintes Dynamiques

Universelles pour $N > 5$

4.1 Comptage du nombre de contraintes dynamiques universelles

Lorsque la borne inférieure optimisée est atteinte, les valeurs correspondantes des paramètres variationnels $x_{ij,k}$ sont tels que

$$\frac{\partial}{\partial x_{ij,k}} \sum_{p < q=1}^N E_{pq}^{(2)}[a_{pq}] = 0.$$

On a montré au chapitre 3 que cette condition est équivalente à imposer à la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$ d'être de rang $C_N - L_N + 1$ au plus.

Nous supposons dans tout ce qui suit que les interactions ne détruisent pas la symétrie du terme d'énergie cinétique. Il est facile de voir que cette condition revient à supposer une interaction à deux corps ne dépendant que des masses des deux particules impliquées.

On peut montrer que le nombre de contraintes dynamiques universelles autres que celles déduites par des arguments de symétrie est égal au nombre des $x_{ij,k}$ indépendants diminué du nombre des a_{ij} indépendants et augmenté d'une unité.

Considérons un système de N particules avec n masses distinctes. Dénotons par r_1 le nombre de particules de masse m_1 , par r_2 le nombre de particules de masse $m_2, \dots,$

par r_n le nombre de particules de masse m_n . Nous avons $r_1 + r_2 + \dots + r_n = N$. Nous parlerons d'amas n°1 pour les r_1 particules de masse m_1 , d'amas n°2 pour les r_2 particules de masse m_2, \dots , et d'amas n° n pour les r_n particules de masse m_n . On peut parmi ces amas distinguer ceux qui sont constitués de plus d'une particule de ceux constitués d'une particule unique. Soit p le nombre d'amas de plus d'une particule. Evidemment $p \leq n$.

Nous allons maintenant dériver une expression pour le nombre des contraintes dynamiques universelles autres que celles déduites par des arguments de symétrie. Notre tâche consistera à évaluer le nombre de a_{ij} indépendants, puis le nombre de paramètres variationnels $x_{ij,k}$ indépendants en termes de n le nombre d'amas et de p le nombre d'amas composés de plus d'une particule (de deux particules ou plus). On en déduit alors le nombre de contraintes dynamiques universelles autres que celles déduites par des arguments de symétrie.

Les a_{ij} indépendants s'obtiennent de deux manières. Ou on prend deux particules appartenant à deux amas différents et nous avons $n(n-1)/2$ possibilités de le faire. Ou on prend deux particules appartenant au même amas, à condition que l'amas soit formé de deux particules ou plus, et nous avons p possibilités, le nombre d'amas avec au moins deux particules. Le nombre totales de a_{ij} indépendants est donc de :

$$n(n-1)/2 + p.$$

En ce qui concerne le nombre de paramètres variationnels $x_{ij,k}$, on peut aisément voir qu'il est donné par

$$np(p-1)/2 + (n-1)p(n-p) + (n-2)(n-p)(n-p-1)/2,$$

En effet, on est alors en face de l'une des trois situations suivantes :

- 2 amas formés chacun de deux particules ou plus, auquel cas le nombre de $x_{ij,k}$ indépendant est de $n((n-2)x_{ij,k}$ venant des $(n-2)$ amas restants + $1x_{ij,k}$ pour chacun des deux amas impliqués). Il y a $p(p-1)/2$ possibilités pour de tels amas.
- 1 amas formé de deux particules et plus et un deuxième formé d'une seule particule. Le nombre de $x_{ij,k}$ indépendants est alors $(n-1)((n-2)x_{ij,k}$ venant des $n-2$ amas restants + $1x_{ij,k}$ pour l'amas formé de deux particules ou plus). Il y a $p(n-p)$

possibilités pour de tels amas.

- 2 amas formés chacun d'une seule particule. Le nombre de $x_{ij,k}$ indépendants est alors de $(n-2)(n-2)$ $x_{ij,k}$ venant des $n-2$ amas restants). Il y a $(n-p)(n-p-1)/2$ possibilités de ce type.

La première situation correspond à $np(p-1)/2$ paramètres $x_{ij,k}$ indépendants, la deuxième à $(n-1)p(n-p)$ paramètres $x_{ij,k}$ indépendants et la troisième à $(n-2)(n-p)(n-p-1)/2$ paramètres $x_{ij,k}$ indépendants. Donc au total nous avons, comme annoncé

$$np(p-1)/2 + (n-1)p(n-p) + (n-2)(n-p)(n-p-1)/2$$

$x_{ij,k}$ indépendants.

Le nombre de $x_{ij,k}$ indépendants peut également être mis sous la forme

$$n(n-1)(n-2)/2 + p(n-1). \quad (4.1)$$

Il s'ensuit que le nombre de contraintes dynamiques universelles, autres que celles déduites par des arguments de symétrie, est de

$$n(n-1)(n-2)/2 + p(n-1) - (n(n-1)/2 + p) + 1 = n(n-1)(n-3)/2 + p(n-2) + 1. \quad (4.2)$$

Par exemple pour les systèmes à 6 corps $(4 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$, $(3 \times m_1, 2 \times m_2, 1 \times m_3)$ et $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3)$ on a 2, 3 et 4 contraintes respectivement.

Il vaut la peine de noter que ce nombre ne dépend que du nombre d'amas et de leurs répartitions en amas à 1 corps et en amas à 2 corps et plus. Par exemple pour $(4 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$, on peut à la place des quatre particules de masse m_1 , prendre n'importe quel nombre de particules, excepté 1 particule. De même dans $(3 \times m_1, 2 \times m_2, 1 \times m_3)$ 3 et 2 peuvent être remplacés par n'importe quels nombres supérieurs ou égaux à deux. Dans $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3)$, on peut remplacer les 2 particules de masse m_1 par trois, quatre, ... C'est également le cas pour les deux particules de masse m_2 et les deux particules de masse m_3 . Comme on le montrera au chapitre 6, ce qui en fait est plus surprenant, c'est que l'expression même des contraintes dynamiques universelles n'est pas

affectée par la composition du système, pourvu que le nombre d'amas et la répartition en amas à 1 corps et en amas à deux corps et plus n'est pas modifiée. Autrement dit, si on change

$$(r_1 \times m_1, r_2 \times m_2, \dots, r_p \times m_p, 1 \times m_{p+1}, \dots, 1 \times m_n) \text{ avec } r_1, r_2, \dots, r_p > 1 \quad (4.3)$$

en

$$(r'_1 \times m_1, r'_2 \times m_2, \dots, r'_p \times m_p, 1 \times m_{p+1}, \dots, 1 \times m_n) \text{ avec } r'_1, r'_2, \dots, r'_p > 1, \quad (4.4)$$

non seulement, le nombre de contraintes dynamiques universelles n'est pas modifié, mais également l'expression de ces dernières.

Une autre propriété intéressante qu'on mettra également en évidence dans ce chapitre, est que les contraintes dynamiques universelles pour le système (4.3) forment un sous-ensemble de celles pour le système

$$(r_1 \times m_1, r_2 \times m_2, \dots, r_p \times m_p, \dots, r_{p'} \times m_{p'}, 1 \times m_{p'+1}, \dots, 1 \times m_n) \text{ avec } p' > p.$$

Ceci signifie par exemple que les deux contraintes du systèmes à 6 corps ($4 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3$) font partie des trois contraintes du système ($3 \times m_1, 2 \times m_2, 1 \times m_3$) est que ces derniers font partie des quatre contraintes du système ($2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3$).

Cette propriété est d'autant plus intéressante qu'elle peut être utilisée pour déterminer partiellement les contraintes dynamiques d'un système à partir de celles d'un système plus simple. Par exemple le cas à trois corps ($1 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3$) peut servir à déduire une contrainte dynamique pour les systèmes ($r_1 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3$), ($r_1 \times m_1, r_2 \times m_2, 1 \times m_3$) et ($r_1 \times m_1, r_2 \times m_2, r_3 \times m_3$). Le cas à quatre corps ($1 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3, 1 \times m_4$) peut servir à extraire 7 contraintes dynamiques pour les systèmes ($r_1 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3, 1 \times m_4$), sur un total de 9 contraintes, ($r_1 \times m_1, r_2 \times m_2, 1 \times m_3, 1 \times m_4$), sur un total de 11 contraintes dynamiques,.... Le cas à cinq corps ($1 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5$) peut servir à extraire 21 contraintes dynamiques pour les systèmes à six corps avec 5 masses distinctes ($r_1 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5$) sur un total de 24 contraintes,...

4.2 Système à 6 corps avec trois masses distinctes

4.2.1 Configuration $(4 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$

La décomposition de la partie cinétique de l'Hamiltonien est donnée par

$$\begin{aligned}
T^{(6)} &= \frac{1}{2m_1} \vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m_1} \vec{p}_2^2 + \frac{1}{2m_1} \vec{p}_3^2 + \frac{1}{2m_1} \vec{p}_4^2 + \frac{1}{2m_2} \vec{p}_5^2 + \frac{1}{2m_3} \vec{p}_6^2 \\
&= (b_1 \vec{p}_1 + b_1 \vec{p}_2 + b_1 \vec{p}_3 + b_1 \vec{p}_4 + b_2 \vec{p}_5 + b_3 \vec{p}_6) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4 + \vec{p}_5 + \vec{p}_6) \\
&\quad + \frac{a_{11}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 + \frac{a_{11}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_3)^2 + \frac{a_{11}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_4)^2 \\
&\quad + \frac{a_{11}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3)^2 + \frac{a_{11}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_4)^2 + \frac{a_{11}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2 \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_5 + x \vec{p}_2 + x \vec{p}_3 + x \vec{p}_4 + c_3 \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_6 + y \vec{p}_2 + y \vec{p}_3 + y \vec{p}_4 + d_2 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_5 + x \vec{p}_1 + x \vec{p}_3 + x \vec{p}_4 + c_3 \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_6 + y \vec{p}_1 + y \vec{p}_3 + y \vec{p}_4 + d_2 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_5 + x \vec{p}_1 + x \vec{p}_2 + x \vec{p}_4 + c_3 \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_6 + y \vec{p}_1 + y \vec{p}_2 + y \vec{p}_4 + d_2 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_4 - \vec{p}_5 + x \vec{p}_1 + x \vec{p}_3 + x \vec{p}_2 + c_3 \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_4 - \vec{p}_6 + y \vec{p}_1 + y \vec{p}_3 + y \vec{p}_2 + d_2 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{23}}{4} (\vec{p}_5 - \vec{p}_6 + e_1 \vec{p}_1 + e_1 \vec{p}_2 + e_1 \vec{p}_3 + e_1 \vec{p}_4)^2,
\end{aligned} \tag{4.5}$$

où nous avons adopté la même notation pour les paramètres variationnels $x_{ij,k}$ que celle utilisée dans le cas à trois corps section 3.1, c'est à dire que le paramètre c_3 de la configuration $(4 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$ joue le même rôle que c_3 du cas à trois corps et de même pour d_2 et e_1 . Les paramètres qui n'ont pas un équivalent dans le cas à trois corps et qui sont au nombre de deux sont notés par x et y . L'identification des deux membres de (4.5) nous amène à un système linéaire de 7 équations à 7 inconnues ; une équation pour les termes en \vec{p}_i^2 ($i = 1, \dots, 4$), une pour le terme en \vec{p}_5^2 , une autre pour le terme en \vec{p}_6^2 et 4 autres équations pour les termes croisés $\vec{p}_i \cdot \vec{p}_j$, $\vec{p}_i \cdot \vec{p}_5$, $\vec{p}_i \cdot \vec{p}_6$ et $\vec{p}_5 \cdot \vec{p}_6$ ($i = 1, \dots, 4$). Après élimination des paramètres b_1, b_2, b_3, b_4, b_5 et b_6 on aboutit à un système linéaire de quatre équations à quatre inconnues a_{ij} : $a_{11}, a_{12}, a_{13}, a_{23}$ et cinq paramètres indépendants c_3, d_2, e_1, x et y , système qui peut être écrit sous forme matricielle :

$$\frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 & 2(x-1)^2 & 2(y-1)^2 & 0 \\ 3 & 7+3x^2+6x & 1+3y^2+4d_2^2-2d_2-6yd_2 & (e_1-1)^2 \\ 3 & 1+3x^2+4c_3^2-6c_3x-2c_3 & 7+3y^2+6y & (e_1+1)^2 \\ 0 & 4(c_3+1)^2 & 4(d_2+1)^2 & 4 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{12} \\ a_{13} \\ a_{23} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_2} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_3} \\ \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \end{pmatrix}.$$

On en déduit l'expression de la matrice 4×5 $\widetilde{\mathbf{M}}$

$$\widetilde{\mathbf{M}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2(x-1) & 0 & 2(y-1) & 0 & 0 \\ 3x+3 & 0 & 3y-3d_2 & 4d_2-1-3y & e_1-1 \\ 3x-3c_3 & 4c_3-3x-1 & 3y+3 & 0 & e_1+1 \\ 0 & 4c_3+4 & 0 & 4d_2+4 & 0 \end{pmatrix}.$$

En imposant à $\widetilde{\mathbf{M}}$ d'être de rang 3 au plus, on obtient 2 contraintes dynamiques

$$d_2 = \frac{c_3 y - y - c_3 + x}{x - 1}, \quad (4.6)$$

$$e_1 = \frac{c_3 - d_2}{c_3 d_2 - 1}. \quad (4.7)$$

4.2.2 Configuration $(3 \times m_1, 2 \times m_2, 1 \times m_3)$

En adoptant une notation appropriée de telle manière que les paramètres qui correspondent dans les configurations $(4 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$ et $(1 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$ soient notés de la même façon,

$$\begin{aligned}
T^{(6)} &= \frac{1}{2m_1} \vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m_1} \vec{p}_2^2 + \frac{1}{2m_1} \vec{p}_3^2 + \frac{1}{2m_2} \vec{p}_4^2 + \frac{1}{2m_2} \vec{p}_5^2 + \frac{1}{2m_3} \vec{p}_6^2 \\
&= (b_1 \vec{p}_1 + b_1 \vec{p}_2 + b_1 \vec{p}_3 + b_2 \vec{p}_4 + b_2 \vec{p}_5 + b_3 \vec{p}_6) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4 + \vec{p}_5 + \vec{p}_6) \\
&\quad + \frac{a_{11}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 + \frac{a_{11}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_3)^2 + \frac{a_{11}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3)^2 + \frac{a_{22}}{4} (\vec{p}_4 - \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_4 + x \vec{p}_2 + x \vec{p}_3 + w \vec{p}_5 + c_3 \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_4 + x \vec{p}_1 + x \vec{p}_3 + w \vec{p}_5 + c_3 \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_4 + x \vec{p}_1 + x \vec{p}_2 + w \vec{p}_5 + c_3 \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_5 + x \vec{p}_2 + x \vec{p}_3 + w \vec{p}_4 + c_3 \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_5 + x \vec{p}_1 + x \vec{p}_3 + w \vec{p}_4 + c_3 \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_5 + x \vec{p}_1 + x \vec{p}_2 + w \vec{p}_4 + c_3 \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_6 + y \vec{p}_2 + y \vec{p}_3 + d_2 \vec{p}_4 + d_2 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_6 + y \vec{p}_1 + y \vec{p}_3 + d_2 \vec{p}_4 + d_2 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_6 + y \vec{p}_1 + y \vec{p}_2 + d_2 \vec{p}_4 + d_2 \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{23}}{4} (\vec{p}_4 - \vec{p}_6 + e_1 \vec{p}_1 + e_1 \vec{p}_3 + e_1 \vec{p}_2 + z \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{23}}{4} (\vec{p}_5 - \vec{p}_6 + e_1 \vec{p}_1 + e_1 \vec{p}_2 + e_1 \vec{p}_3 + z \vec{p}_4)^2.
\end{aligned} \tag{4.8}$$

Nous avons deux paramètres additionnels z et w , qui n'ont pas leurs correspondants ni dans la configuration $(1 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$ ni dans la configuration $(4 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$.

L'identification des deux membres de (4.8), nous amène, après élimination des paramètres b_i , à un système linéaire de 5 équations à 5 inconnues a_{ij} : $(a_{11}, a_{12}, a_{13}, a_{22}, a_{23})$ avec 7 paramètres indépendants c_3, d_2, e_1, x, y, w et z , système qu'on peut écrire sous forme matricielle comme :

$$\begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{(x-1)^2}{2} & \frac{(y-1)^2}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3(w+1)^2}{4} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{(z-1)^2}{4} \\ \frac{1}{2} & \frac{7+4x^2+3w^2-4wx-2w+4x}{4} & \frac{1+2y^2+3d_2^2-2d_2-4d_2y}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1+z^2-2e_1z-2e_1+2e_1^2}{4} \\ \frac{1}{2} & \frac{2+4x^2-8xc_3-4c_3+6c_3^2}{4} & \frac{6+2y^2+4y}{4} & 0 & \frac{(e_1+1)^2}{2} \\ 0 & \frac{3+3w^2+6c_3^2+6c_3-6wc_3}{4} & \frac{3(d_2+1)^2}{4} & \frac{1}{4} & \frac{5+z^2+2z}{4} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{12} \\ a_{13} \\ a_{22} \\ a_{23} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1} \\ \frac{1}{m_2} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_2} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_3} \\ \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \end{pmatrix}.$$

Lorsque la borne inférieure est atteinte, la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$

$$\widetilde{\mathbf{M}} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 4x - 4 & 0 & 0 & 4y - 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6w + 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2z - 2 \\ 8x - 4w + 4 & 6w - 4x - 2 & 0 & 4y - 4d_2 & 6d_2 - 2 - 4y & -z - 1 + 2e_1 & 2z - 2e_1 \\ 8x - 8c_3 & 0 & -8x - 4 + 12c_3 & 4y + 4 & 0 & 2e_1 + 2 & 0 \\ 0 & 6w - 6c_3 & 12c_3 + 6 - 6w & 0 & 6d_2 + 6 & 0 & 2z + 2 \end{pmatrix}$$

doit être de rang 4 au plus. Cette condition permet de tirer trois contraintes dynamiques, les deux contraintes relatives à la configuration $(4 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$ et une contrainte supplémentaire

$$\begin{aligned} d_2 &= \frac{c_3 y - c_3 + x - y}{x - 1}, \\ e_1 &= \frac{c_3 - d_2}{c_3 d_2 - 1}, \\ z &= \frac{w - d_2 - w d_2 + c_3 d_2}{c_3 d_2 - 1}. \end{aligned}$$

4.2.3 Configuration $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3)$

De nouveau, on adoptera des notations de telle manière que les paramètres qui ont leurs correspondants dans les configurations $(3 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$ et $(3 \times m_1, 2 \times m_2, 1 \times m_3)$ soient notés de la même façon. Comparativement à la configuration $(3 \times m_1, 2 \times m_2, 1 \times m_3)$, nous avons deux paramètres supplémentaires t et u qui n'ont pas de correspondants. Le terme d'énergie cinétique s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
T^{(6)} &= \frac{1}{2m_1} \vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m_1} \vec{p}_2^2 + \frac{1}{2m_2} \vec{p}_3^2 + \frac{1}{2m_2} \vec{p}_4^2 + \frac{1}{2m_3} \vec{p}_5^2 + \frac{1}{2m_3} \vec{p}_6^2 \\
&= (b_1 \vec{p}_1 + b_1 \vec{p}_2 + b_3 \vec{p}_3 + b_3 \vec{p}_4 + b_5 \vec{p}_5 + b_5 \vec{p}_6) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4 + \vec{p}_5 + \vec{p}_6) \\
&\quad + \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 \\
&\quad + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_3 + x \vec{p}_2 + w \vec{p}_4 + c_3 \vec{p}_5 + c_3 \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_4 + x \vec{p}_2 + w \vec{p}_3 + c_3 \vec{p}_5 + c_3 \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{15}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_5 + y \vec{p}_2 + d_2 \vec{p}_3 + d_2 \vec{p}_4 + t \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{15}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_6 + y \vec{p}_2 + d_2 \vec{p}_3 + d_2 \vec{p}_4 + t \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3 + x \vec{p}_1 + w \vec{p}_4 + c_3 \vec{p}_5 + c_3 \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{14}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_4 + x \vec{p}_1 + w \vec{p}_3 + c_3 \vec{p}_5 + c_3 \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{15}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_5 + y \vec{p}_1 + d_2 \vec{p}_3 + d_2 \vec{p}_4 + t \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{16}}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_6 + y \vec{p}_1 + d_2 \vec{p}_3 + d_2 \vec{p}_4 + t \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{34}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2 \\
&\quad + \frac{a_{35}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_5 + e_1 \vec{p}_1 + e_1 \vec{p}_2 + z \vec{p}_4 + u \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{35}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_6 + e_1 \vec{p}_1 + e_1 \vec{p}_2 + z \vec{p}_4 + u \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{35}}{4} (\vec{p}_4 - \vec{p}_5 + e_1 \vec{p}_1 + e_1 \vec{p}_2 + z \vec{p}_3 + u \vec{p}_6)^2 \\
&\quad + \frac{a_{35}}{4} (\vec{p}_4 - \vec{p}_6 + e_1 \vec{p}_1 + e_1 \vec{p}_2 + z \vec{p}_3 + u \vec{p}_5)^2 \\
&\quad + \frac{a_{56}}{4} (\vec{p}_5 - \vec{p}_6)^2.
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Après élimination des paramètres b_i , nous obtenons un système linéaire de six équations à six inconnues $a_{12}, a_{13}, a_{15}, a_{34}, a_{35}, a_{56}$ avec neuf paramètres indépendants $x, w, c_3, y,$

d_2, t, e_1, z et u . Système qui peut être écrit sous forme matricielle comme :

$$\begin{pmatrix} 2 & 2(x-1)^2 & 2(y-1)^2 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{3+x^2+x-wx-w+w^2}{2} & \frac{1+2d_2^2-2d_2-2yd_2+y^2}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1+2e_1^2-2ze_1+z^2-2e_1}{2} & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1+x^2-2c_3x-2c_3+2c_3^2}{2} & \frac{3+y^2-t+y-yt+t^2}{2} & 0 & \frac{1+2e_1^2+u^2+2e_1-2ue_1}{2} & \frac{1}{4} \\ 0 & 2(w+1)^2 & 0 & 2 & 2(z-1)^2 & 0 \\ 0 & \frac{1+w^2+2c_3^2+2c_3-2c_3w}{2} & \frac{2d_2-2d_2t+2d_2^2+1+t^2}{2} & \frac{1}{4} & \frac{3+z^2+u^2+z-u-uz}{2} & \frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 2(t+1)^2 & 0 & 2(u+1)^2 & 2 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ a_{15} \\ a_{34} \\ a_{35} \\ a_{56} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_2} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_3} \\ \frac{1}{m_2} \\ \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \\ \frac{1}{m_3} \end{pmatrix}.$$

La matrice $6 \times 9 \widetilde{\mathbf{M}}$ prend alors la forme :

$$\widetilde{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} 4x-4 & 0 & 0 & 4y-4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2x+1-w}{2} & \frac{-x-1+2w}{2} & 0 & y-d_2 & 2d_2-1-y & 0 & 2e_1-z-1 & e_1-z & 0 \\ x-c_3 & 0 & -x-1+2c_3 & \frac{y+1-t}{2} & 0 & \frac{-1-y+2t}{2} & 2e_1+1-u & 0 & u-e_1 \\ 0 & 4(w+1) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4z-4 & 0 \\ 0 & w-c_3 & 2c_3+1-w & 0 & 1-t+2d_2 & -d_2+t & 0 & \frac{2z+1-u}{2} & \frac{2u-1-z}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4t+4 & 0 & 0 & 4u+4 \end{pmatrix}.$$

En imposant à $\widetilde{\mathbf{M}}$ d'être de rang 5 au plus, on obtient les 4 contraintes suivantes :

$$\begin{aligned} e_1 &= \frac{c_3 - d_2}{c_3 d_2 - 1}, \\ z &= \frac{w - d_2 - w d_2 + c_3 d_2}{c_3 d_2 - 1}, \\ d_2 &= \frac{c_3 y - c_3 + x - y}{x - 1}, \\ u &= \frac{t - c_3 - t c_3 + c_3 d_2}{1 - c_3 d_2}. \end{aligned} \tag{4.10}$$

On remarque qu'aux trois contraintes pour la configuration $(3 \times m_1, 2 \times m_2, 1 \times m_3)$ s'ajoute une contrainte supplémentaire.

4.3 Comment le cas $N = 5$ permet d'obtenir partiellement les contraintes dynamiques universelles pour des systèmes avec $N > 5$

Nous allons dans cette section, utiliser les contraintes dynamiques universelles du système à 5 corps pour obtenir, partiellement, celles de systèmes composés de plus de 5 particules mais avec 5 masses distinctes. Nous avons cinq configurations possibles pour de tels systèmes à savoir, $(q_1 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5)$, $(q_1 \times m_1, q_2 \times m_2, 1 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5)$, $(q_1 \times m_1, q_2 \times m_2, q_3 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5)$, $(q_1 \times m_1, q_2 \times m_2, q_3 \times m_3, q_4 \times m_4, 1 \times m_5)$ et $(q_1 \times m_1, q_2 \times m_2, q_3 \times m_3, q_4 \times m_4, q_5 \times m_5)$ où q_1, q_2, q_3, q_4, q_5 sont des entiers supérieurs à 1.

Sachant que les contraintes dynamiques universelles ne sont pas affectées si on change le nombre de particules dans un amas donné, on peut se restreindre sans perte de généralité aux configurations $(2 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5)$, $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 1 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5)$, $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5)$, $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3, 2 \times m_4, 1 \times m_5)$ et $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3, 2 \times m_4, 2 \times m_5)$. On a noté les paramètres associés à chaque configuration et leurs correspondants, s'ils existent, par les mêmes symboles. Il s'ensuit que les contraintes dynamiques universelles pour chacune des configurations prennent la même forme que les contraintes dynamiques universelles dans le cas à cinq corps. On obtient donc pour chacune des configurations considérées 21 contraintes dynamiques. Ce nombre est bien sûr inférieur au nombre total de contraintes dynamiques universelles qui est de 24 pour la configuration $(2 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5)$, 27 pour la configuration $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 1 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5)$, 30 pour la configuration $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5)$, 33 pour la configuration $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3, 2 \times m_4, 1 \times m_5)$ et 36 pour la configuration $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3, 2 \times m_4, 2 \times m_5)$. Il nous manque alors 3 contraintes pour la configuration $(2 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5)$, 6 contraintes pour la configuration $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 1 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5)$, 9 contraintes pour la configuration $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5)$, 12 contraintes pour la configuration $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3, 2 \times m_4, 1 \times m_5)$ et 15 contraintes pour la configuration $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3, 2 \times m_4, 2 \times m_5)$.

Nous avons reporté dans les tableaux suivants les différents paramètres a_{ij} ainsi que les

coefficients $x_{ij,k}$ de la décomposition des \vec{p}_{ij} correspondants sur les différentes impulsions \vec{p}_k . Les paramètres $x_{ij,k}$ qui n'ont pas de correspondants dans les cas à cinq corps sont notés par des lettres en gras.

Configuration ($2 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5$)

	\vec{p}_1	\vec{p}_2	\vec{p}_3	\vec{p}_4	\vec{p}_5	\vec{p}_6
a_{12}	1	-1	0	0	0	0
a_{13}	1	c_1	-1	c_3	c_4	c_5
a_{14}	1	d_1	d_2	-1	d_4	d_5
a_{15}	1	e_1	e_2	e_3	-1	e_5
a_{16}	1	f_1	f_2	f_3	f_4	-1
a_{34}	g_1	g_1	1	-1	g_4	g_5
a_{35}	h_1	h_1	1	h_3	-1	h_5
a_{36}	j_1	j_1	1	j_3	j_4	-1
a_{45}	k_1	k_1	k_2	1	-1	k_5
a_{46}	l_1	l_1	l_2	1	l_4	-1
a_{56}	n_1	n_1	n_2	n_3	1	-1

Configuration ($2 \times m_1, 2 \times m_2, 1 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5$)

	\vec{p}_1	\vec{p}_2	\vec{p}_3	\vec{p}_4	\vec{p}_5	\vec{p}_6	\vec{p}_7
a_{12}	1	-1	0	0	0	0	0
a_{34}	0	0	1	-1	0	0	0
a_{13}	1	\mathbf{c}_1	-1	\mathbf{c}_2	c_3	c_4	c_5
a_{15}	1	\mathbf{d}_1	d_2	d_2	-1	d_4	d_5
a_{16}	1	\mathbf{e}_1	e_2	e_2	e_3	-1	e_5
a_{17}	1	\mathbf{f}_1	f_2	f_2	f_3	f_4	-1
a_{35}	g_1	g_1	1	\mathbf{g}_2	-1	g_4	g_5
a_{36}	h_1	h_1	1	\mathbf{h}_2	h_3	-1	h_5
a_{37}	j_1	j_1	1	\mathbf{j}_2	j_3	j_4	-1
a_{56}	k_1	k_1	k_2	k_2	1	-1	k_5
a_{57}	l_1	l_1	l_2	l_2	1	l_4	-1
a_{67}	n_1	n_1	n_2	n_2	n_3	1	-1

Configuration ($2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3, 1 \times m_4, 1 \times m_5$)

	\vec{p}_1	\vec{p}_2	\vec{p}_3	\vec{p}_4	\vec{p}_5	\vec{p}_6	\vec{p}_7	\vec{p}_8
a_{12}	1	-1	0	0	0	0	0	0
a_{34}	0	0	1	-1	0	0	0	0
a_{56}	0	0	0	0	1	-1	0	0
a_{13}	1	\mathbf{c}_1	-1	\mathbf{c}_2	c_3	c_3	c_4	c_5
a_{15}	1	\mathbf{d}_1	d_2	d_2	-1	\mathbf{d}_3	d_4	d_5
a_{17}	1	\mathbf{e}_1	e_2	e_2	e_3	e_3	-1	e_5
a_{18}	1	\mathbf{f}_1	f_2	f_2	f_3	f_3	f_4	-1
a_{35}	g_1	g_1	1	\mathbf{g}_2	-1	\mathbf{g}_3	g_4	g_5
a_{37}	h_1	h_1	1	\mathbf{h}_2	h_3	h_3	-1	h_5
a_{38}	j_1	j_1	1	\mathbf{j}_2	j_3	j_3	j_4	-1
a_{57}	k_1	k_1	k_2	k_2	1	\mathbf{k}_3	-1	k_5
a_{58}	l_1	l_1	l_2	l_2	1	\mathbf{l}_3	l_4	-1
a_{78}	n_1	n_1	n_2	n_2	n_3	n_3	1	-1

Configuration ($2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3, 2 \times m_4, 1 \times m_5$)

	\vec{p}_1	\vec{p}_2	\vec{p}_3	\vec{p}_4	\vec{p}_5	\vec{p}_6	\vec{p}_7	\vec{p}_8	\vec{p}_9
a_{12}	1	-1	0	0	0	0	0	0	0
a_{34}	0	0	1	-1	0	0	0	0	0
a_{56}	0	0	0	0	1	-1	0	0	0
a_{78}	0	0	0	0	0	0	1	-1	0
a_{13}	1	c_1	-1	c_2	c_3	c_3	c_4	c_4	c_5
a_{15}	1	d_1	d_2	d_2	-1	d_3	d_4	d_4	d_5
a_{17}	1	e_1	e_2	e_2	e_3	e_3	-1	e_4	e_5
a_{19}	1	f_1	f_2	f_2	f_3	f_3	f_4	f_4	-1
a_{35}	g_1	g_1	1	g_2	-1	g_3	g_4	g_4	g_5
a_{37}	h_1	h_1	1	h_2	h_3	h_3	-1	h_4	h_5
a_{39}	j_1	j_1	1	j_2	j_3	j_3	j_4	j_4	-1
a_{57}	k_1	k_1	k_2	k_2	1	k_3	-1	k_4	k_5
a_{59}	l_1	l_1	l_2	l_2	1	l_3	l_4	l_4	-1
a_{79}	n_1	n_1	n_2	n_2	n_3	n_3	1	n_4	-1

Configuration ($2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3, 2 \times m_4, 2 \times m_5$)

	\vec{p}_1	\vec{p}_2	\vec{p}_3	\vec{p}_4	\vec{p}_5	\vec{p}_6	\vec{p}_7	\vec{p}_8	\vec{p}_9	\vec{p}_{10}
a_{12}	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0
a_{34}	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	0
a_{56}	0	0	0	0	1	-1	0	0	0	0
a_{78}	0	0	0	0	0	0	1	-1	0	0
a_{910}	0	0	0	0	0	0	0	0	1	-1
a_{13}	1	\mathbf{c}_1	-1	\mathbf{c}_2	c_3	c_3	c_4	c_4	c_5	c_5
a_{15}	1	\mathbf{d}_1	d_2	d_2	-1	\mathbf{d}_3	d_4	d_4	d_5	d_5
a_{17}	1	\mathbf{e}_1	e_2	e_2	e_3	e_3	-1	\mathbf{e}_4	e_5	e_5
a_{19}	1	\mathbf{f}_1	f_2	f_2	f_3	f_3	f_4	f_4	-1	\mathbf{f}_5
a_{35}	g_1	g_1	1	\mathbf{g}_2	-1	\mathbf{g}_3	g_4	g_4	g_5	g_5
a_{37}	h_1	h_1	1	\mathbf{h}_2	h_3	h_3	-1	\mathbf{h}_4	h_5	h_5
a_{39}	j_1	j_1	1	\mathbf{j}_2	j_3	j_3	j_4	j_4	-1	\mathbf{j}_5
a_{57}	k_1	k_1	k_2	k_2	1	\mathbf{k}_3	-1	\mathbf{k}_4	k_5	k_5
a_{59}	l_1	l_1	l_2	l_2	1	\mathbf{l}_3	l_4	l_4	-1	\mathbf{l}_5
a_{79}	n_1	n_1	n_2	n_2	n_3	n_3	1	\mathbf{n}_4	-1	\mathbf{n}_5

Chapitre 5

L'Oscillateur Harmonique

Pour se faire une idée de la qualité de la borne inférieure optimisée, il est bon de considérer des cas exactement solubles. Un tel cas est fourni par l'oscillateur harmonique. Dans ce chapitre, nous allons dériver les expressions analytiques exactes des niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique à N corps pour certaines configurations de masse mais avec N quelconque.

5.1 Méthodologie

Considérons un système de N oscillateurs décrit par l'Hamiltonien

$$H = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2m_j} \vec{p}_j^2 + \sum_{i < j=1}^N k_{ij} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 \quad (5.1)$$

qu'on appellera aussi oscillateur harmonique à N corps.

Pour déterminer le spectre et les états propres de H , on introduit un ensemble de $N - 1$ coordonnées de Jacobi, en plus de la coordonnée du centre de masse du système, ainsi que les moments conjugués correspondants, en plus de l'impulsion totale (impulsion associée au centre de masse). L'Hamiltonien se met alors sous la forme

$$H = \frac{1}{2M} \vec{P}^2 + H_R, \quad (5.2)$$

où $\frac{1}{2M} \vec{P}^2$ est l'énergie cinétique du centre de masse (M est la masse totale du système et \vec{P} le moment conjugué associé à la coordonnée du centre de masse du système qui n'est

rien d'autre que l'impulsion totale du système) et où l'Hamiltonien relatif se présente sous la forme

$$H_R = K + V. \quad (5.3)$$

K , la partie cinétique de H_R , est une forme quadratique en les $N - 1$ (impulsions) moments conjugués associés aux $N - 1$ coordonnées de Jacobi. Cette forme quadratique est généralement une forme quadratique diagonale en les moments conjugués. V , la partie énergie potentielle de H_R , se présente sous une forme quadratique des $N - 1$ coordonnées de Jacobi. Deux cas de figure peuvent se présenter :

1. La forme quadratique en les coordonnées de Jacobi est diagonale (ceci est lié à un choix judicieux des coordonnées de Jacobi) et alors H_R s'écrit comme une somme de $N - 1$ oscillateurs harmoniques découplés, chaque oscillateur correspondant à une coordonnée de Jacobi. Le spectre et les états propres de H s'en déduisent alors immédiatement.
2. La forme quadratique en les coordonnées de Jacobi n'est pas diagonale, c'est à dire qu'il y a des couplages entre les différentes coordonnées de Jacobi. Dans ce cas, on commence d'abord par faire une transformation d'échelle sur les coordonnées de Jacobi et on fait évidemment la transformation inverse sur les moments associés (pour préserver la relations de commutations canoniques) de telle manière que le terme d'énergie cinétique se présente comme une forme diagonale associée à une matrice proportionnelle à la matrice identité. Autrement dit, sous le changement de variables en question, l'énergie cinétique se présente à un facteur global près, comme la somme des carrés des moments associés aux nouvelles coordonnées de Jacobi. La forme quadratique non diagonale de l'énergie potentielle se transformera en une autre forme quadratique non diagonale en les nouvelles coordonnées de Jacobi.

Ensuite on effectue une transformation orthogonale sur les coordonnées de Jacobi, et naturellement sur leurs moments conjugués. La forme quadratique de l'énergie cinétique ne change pas de forme sauf que les anciens moments conjugués sont remplacés par les nouveaux moments conjugués. Un choix convenable de la transformation orthogonale va nous permettre de découpler les coordonnées de Jacobi, le terme d'énergie potentielle sera alors une forme quadratique diagonale en les nou-

velles variables. Le problème est équivalent en fait à diagonaliser la matrice réelle symétrique associée à la forme quadratique, ce qui revient à résoudre une équation algébrique de degré $N - 1$. Comme c'est bien établi, on sait résoudre exactement une équation algébrique jusqu'au degré 4. Lorsque l'équation algébrique est de degré supérieur à 4, on ne dispose pas dans le cas général des expressions analytiques pour les racines, mais on sait déterminer numériquement, avec n'importe quel degré de précision fixé à l'avance, les racines. Donc pour $N - 1 \leq 4$, c'est à dire pour $N \leq 5$, on peut diagonaliser exactement la forme quadratique associée à l'énergie potentielle. L'Hamiltonien H_R se présente alors sous la forme d'une somme d'oscillateurs découplés et le spectre et les états propres de H_R sont alors immédiats.

Nous avons réussi à dériver des expressions analytiques compactes pour les énergies des états fondamentaux de systèmes d'oscillateurs comprenant jusqu'à trois masses distinctes. Nous pourrions en principe aller jusqu'à cinq masses distinctes, mais les expressions sont tellement compliquées que nous n'avons pu, pour le moment, les mettre sous une forme suffisamment compacte.

Dans ce qui suit nous allons considérer tour à tour les configurations $(N \times m)$, $((N - 1) \times m, 1 \times M)$, $(n \times m, n' \times M)$ et $(n_1 \times m_1, n_2 \times m_2, n_3 \times m_3)$.

5.2 Configuration $(N \times m)$

Un choix naturel des coordonnées de Jacobi est le suivant :

$$\begin{aligned}
\vec{\rho}_1 &= -\vec{r}_2 + \vec{r}_1, \\
\vec{\rho}_2 &= -\vec{r}_3 + \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \\
&\vdots \\
\vec{\rho}_i &= -\vec{r}_{i+1} + \frac{1}{i}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \cdots + \vec{r}_i), \\
&\vdots \\
\vec{\rho}_{N-2} &= -\vec{r}_{N-1} + \frac{1}{N-2}(\vec{r}_1 + \cdots + \vec{r}_{N-1}), \\
\vec{\rho}_{N-1} &= -\vec{r}_N + \frac{1}{N-1}(\vec{r}_1 + \cdots + \vec{r}_N).
\end{aligned} \tag{5.4}$$

On peut exprimer les différentes coordonnées individuelles des particules en termes des coordonnées de Jacobi, équation (5.4), et de la coordonnée du centre de masse \vec{R} définie comme :

$$\vec{R} = \frac{1}{N} (\vec{r}_1 + \cdots + \vec{r}_{N-1} + \vec{r}_N). \quad (5.5)$$

Un calcul direct mène à

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{1}{3}\vec{\rho}_2 + \frac{1}{4}\vec{\rho}_3 + \cdots + \frac{1}{N-1}\vec{\rho}_{N-2} + \frac{1}{N}\vec{\rho}_{N-1} + \vec{R}, \\ \vec{r}_2 &= -\frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{1}{3}\vec{\rho}_2 + \frac{1}{4}\vec{\rho}_3 + \cdots + \frac{1}{N-1}\vec{\rho}_{N-2} + \frac{1}{N}\vec{\rho}_{N-1} + \vec{R}, \\ \vec{r}_3 &= -\frac{2}{3}\vec{\rho}_2 + \frac{1}{4}\vec{\rho}_3 + \cdots + \frac{1}{N-1}\vec{\rho}_{N-2} + \frac{1}{N}\vec{\rho}_{N-1} + \vec{R}, \\ &\vdots \\ \vec{r}_i &= -\frac{i-1}{i}\vec{\rho}_{i-1} + \frac{1}{i+1}\vec{\rho}_i + \cdots + \frac{1}{N-1}\vec{\rho}_{N-2} + \frac{1}{N}\vec{\rho}_{N-1} + \vec{R}, \\ &\vdots \\ \vec{r}_{N-2} &= -\frac{N-3}{N-2}\vec{\rho}_{N-3} + \frac{1}{N-1}\vec{\rho}_{N-2} + \frac{1}{N}\vec{\rho}_{N-1} + \vec{R}, \\ \vec{r}_{N-1} &= -\frac{N-2}{N-1}\vec{\rho}_{N-2} + \frac{1}{N}\vec{\rho}_{N-1} + \vec{R}, \\ \vec{r}_N &= -\frac{N-1}{N}\vec{\rho}_{N-1} + \vec{R}. \end{aligned} \quad (5.6)$$

L'énergie potentielle du système V

$$V = \lambda \sum_{i < j=1}^N (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2, \quad (5.7)$$

peut être mise sous la forme

$$V = \lambda (N-1) \sum_{i=1}^{N-1} \vec{r}_i^2 - 2\lambda \sum_{i < j=1}^N \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j. \quad (5.8)$$

En remplaçant les \vec{r}_i par leurs expressions, on trouve

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \vec{r}_i^2 &= \sum_{i=1}^{N-1} \frac{i}{i+1} \vec{\rho}_i^2 + N \vec{R}^2, \\ \sum_{i < j=1}^{N-1} \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j &= \frac{N}{2} (N-1) \vec{R}^2 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \frac{i}{i+1} \vec{\rho}_i^2. \end{aligned} \quad (5.9)$$

En mettant tout ensemble, on obtient

$$\begin{aligned}
V &= \lambda(N-1) \left(\sum_{i=1}^{N-1} \frac{i}{i+1} \vec{\rho}_i^2 + N \vec{R}^2 \right) - 2\lambda \left(\frac{N}{2} (N-1) \vec{R}^2 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \frac{i}{i+1} \vec{\rho}_i^2 \right) \\
V &= \lambda N \sum_{i=1}^{N-1} \frac{i}{i+1} \vec{\rho}_i^2.
\end{aligned} \tag{5.10}$$

Les moments conjugués des coordonnées de Jacobi, équation (5.4), sont

$$\begin{aligned}
\vec{p}_{\rho_1} &= \frac{1}{2} (-\vec{p}_2 + \vec{p}_1), \\
\vec{p}_{\rho_2} &= \frac{2}{3} (-\vec{p}_3 + \frac{1}{2} (\vec{p}_1 + \vec{p}_2)), \\
&\vdots \\
\vec{p}_{\rho_i} &= \frac{i}{i+1} (-\vec{p}_{i+1} + \frac{1}{i} (\vec{p}_1 + \dots + \vec{p}_i)), \\
&\vdots \\
\vec{p}_{\rho_{N-2}} &= \frac{N-2}{N-1} \left(-\vec{p}_{N-1} + \frac{1}{N-2} (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \dots + \vec{p}_{N-2}) \right), \\
\vec{p}_{\rho_{N-1}} &= -\frac{N-1}{N} \vec{p}_N + \frac{1}{N} (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \dots + \vec{p}_{N-1}).
\end{aligned} \tag{5.11}$$

Ces relations, équation (5.11), auxquelles on adjoint l'expression du moment conjugué du centre de masse \vec{P}

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \dots + \vec{p}_{N-1} + \vec{p}_N, \tag{5.12}$$

peuvent être inversées pour obtenir les expressions des moments conjugués des particules en fonction des moments conjugués des coordonnées de Jacobi, équation (5.11), et du moment conjugué du centre de masse, équation (5.12). Ces dernières expressions lorsque insérées dans la partie cinétique de l'Hamiltonien donnent

$$T := \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 = \frac{\vec{P}^2}{2N} + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\vec{p}_{\rho_i}^2}{\frac{2im}{i+1}}.$$

L'Hamiltonien, équation (5.1), peut être écrit en termes des coordonnées de Jacobi, équation (5.4), de leurs moments conjugués, équation (5.11), et de l'impulsion total, équation (5.12), comme

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2N} + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\vec{p}_{\rho_i}^2}{\frac{2im}{i+1}} + \lambda N \sum_{i=1}^{N-1} \frac{i}{i+1} \vec{\rho}_i^2. \tag{5.13}$$

De cette équation, on déduit l'Hamiltonien du mouvement relatif H_R par soustraction de l'énergie cinétique du centre de masse

$$H_R = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\vec{p}_{\rho_i}^2}{2im} + \lambda N \sum_{i=1}^{N-1} \frac{i}{i+1} \vec{\rho}_i^2. \quad (5.14)$$

H_R apparaît donc comme la somme de $N - 1$ oscillateurs harmoniques indépendants.

Sachant que les niveaux d'énergie d'un Hamiltonien d'oscillateur harmonique [27]

$$H = \frac{1}{2\mu} \vec{p}^2 + \lambda \vec{r}^2 \quad (5.15)$$

sont donnés par

$$E_j = (2j + 3) \sqrt{\frac{\lambda}{2\mu}}, \quad j = 0, 1, \dots, \quad (5.16)$$

les niveaux d'énergie du système sont la somme des niveaux d'énergie des $N - 1$ oscillateurs harmoniques :

$$E_{j_1, j_2, \dots, j_{N-1}} = \sum_{i=1}^{N-1} (2j_i + 3) \sqrt{\frac{\lambda N}{2m}}, \quad (5.17)$$

où j_1, j_2, \dots, j_{N-1} sont des entiers positifs ou nuls. L'énergie du niveau fondamental correspond à $j_1 = 0, j_2 = 0, \dots, j_{N-1} = 0$

$$E_0^{(N)} = 3(N - 1) \sqrt{\frac{\lambda N}{2m}}. \quad (5.18)$$

5.3 Configuration $((N - 1) \times m, 1 \times M)$

On peut toujours, sans perte de généralité, numéroter les $N - 1$ particules de même masse m de 1 à $N - 1$, et la seule particule de masse M par N :

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

Un choix naturel des coordonnées de Jacobi est le suivant :

$$\begin{aligned}
\vec{\rho}_1 &= -\vec{r}_2 + \vec{r}_1, \\
\vec{\rho}_2 &= -\vec{r}_3 + \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \\
&\vdots \\
\vec{\rho}_i &= -\vec{r}_{i+1} + \frac{1}{i}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \cdots + \vec{r}_i), \\
&\vdots \\
\vec{\rho}_{N-2} &= -\vec{r}_{N-1} + \frac{1}{N-2}(\vec{r}_1 + \cdots + \vec{r}_{N-1}), \\
\vec{\rho}_{N-1} &= -\vec{r}_N + \frac{1}{N-1}(\vec{r}_1 + \cdots + \vec{r}_N).
\end{aligned} \tag{5.19}$$

On peut exprimer les coordonnées des particules en fonction de ces coordonnées de Jacobi, et de la coordonnées \vec{R} du centre de masse du système donnée par

$$\vec{R} = \frac{m(\vec{r}_1 + \cdots + \vec{r}_{N-1}) + M\vec{r}_N}{(N-1)m + M}. \tag{5.20}$$

Nous avons

$$\begin{aligned}
\vec{r}_1 &= \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{1}{3}\vec{\rho}_2 + \frac{1}{4}\vec{\rho}_3 + \cdots + \frac{1}{N-1}\vec{\rho}_{N-2} + \frac{M}{(N-1)m + M}\vec{\rho}_{N-1} + \vec{R}, \\
\vec{r}_2 &= -\frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{1}{3}\vec{\rho}_2 + \frac{1}{4}\vec{\rho}_3 + \cdots + \frac{1}{N-1}\vec{\rho}_{N-2} + \frac{M}{(N-1)m + M}\vec{\rho}_{N-1} + \vec{R}, \\
\vec{r}_3 &= -\frac{2}{3}\vec{\rho}_2 + \frac{1}{4}\vec{\rho}_3 + \cdots + \frac{1}{N-1}\vec{\rho}_{N-2} + \frac{M}{(N-1)m + M}\vec{\rho}_{N-1} + \vec{R}, \\
&\vdots \\
\vec{r}_i &= -\frac{i-1}{i}\vec{\rho}_{i-1} + \frac{1}{i+1}\vec{\rho}_i + \cdots + \frac{1}{N-1}\vec{\rho}_{N-2} + \frac{M}{(N-1)m + M}\vec{\rho}_{N-1} + \vec{R}, \\
&\vdots \\
\vec{r}_{N-2} &= -\frac{N-3}{N-2}\vec{\rho}_{N-3} + \frac{1}{N-1}\vec{\rho}_{N-2} + \frac{1}{N-1}\vec{\rho}_{N-2} + \frac{M}{(N-1)m + M}\vec{\rho}_{N-1} + \vec{R}, \\
\vec{r}_{N-1} &= -\frac{N-2}{N-1}\vec{\rho}_{N-2} + \frac{M}{(N-1)m + M}\vec{\rho}_{N-1} + \vec{R}, \\
\vec{r}_N &= -\frac{(N-1)m}{(N-1)m + M}\vec{\rho}_{N-1} + \vec{R}.
\end{aligned} \tag{5.21}$$

L'énergie potentielle V ,

$$V = \lambda_{mm} \sum_{i < j=1}^{N-1} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 + \lambda_{mM} \sum_{i=1}^{N-1} (\vec{r}_i - \vec{r}_N)^2, \quad (5.22)$$

peut être mise sous la forme

$$V = ((N-2)\lambda_{mm} + \lambda_{mM}) \sum_{i=1}^{N-1} r_i^2 + \lambda_{mM} (N-1) r_N^2 - 2\lambda_{mm} \sum_{i < j=1}^{N-1} \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j - 2\lambda_{mM} \sum_{i=1}^{N-1} \vec{r}_i \cdot \vec{r}_N. \quad (5.23)$$

En remplaçant les \vec{r}_i par leurs expressions, on trouve

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N-1} r_i^2 &= \sum_{i=1}^{N-2} \frac{i}{i+1} \bar{\rho}_i^2 + \frac{(N-1)M^2}{((N-1)m+M)^2} \bar{\rho}_{N-1}^2 + (N-1) \bar{R}^2 \\ &+ 2 \frac{(N-1)M}{(N-1)m+M} \bar{\rho}_{N-1} \cdot \vec{R}, \end{aligned} \quad (5.24)$$

$$r_N^2 = \frac{(N-1)m^2}{((N-1)m+M)^2} \bar{\rho}_{N-1}^2 + \bar{R}^2 - 2 \frac{(N-1)m}{(N-1)m+M} \bar{\rho}_{N-1} \cdot \vec{R}, \quad (5.25)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i < j=1}^{N-1} \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j &= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-2} \frac{i}{i+1} \bar{\rho}_i^2 + \frac{1}{2} \frac{(N-1)(N-2)M^2}{((N-1)m+M)^2} \bar{\rho}_{N-1}^2 \\ &+ \frac{1}{2} (N-1)(N-2) \bar{R}^2 + \frac{(N-1)(N-2)M}{(N-1)m+M} \bar{\rho}_{N-1} \cdot \vec{R}, \end{aligned} \quad (5.26)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N-1} \vec{r}_i \cdot \vec{r}_N &= -\frac{(N-1)^2 M m}{((N-1)m+M)^2} \bar{\rho}_{N-1}^2 + (N-1) \bar{R}^2 \\ &+ \frac{(N-1)M - (N-1)^2 m}{(N-1)m+M} \bar{\rho}_{N-1} \cdot \vec{R}. \end{aligned} \quad (5.27)$$

En reportant dans (5.23), on obtient

$$V = ((N-1)\lambda_{mm} + \lambda_{mM}) \sum_{i=1}^{N-2} \frac{i}{i+1} \bar{\rho}_i^2 + \lambda_{mM} (N-1) \bar{\rho}_{N-1}^2. \quad (5.28)$$

Les moments conjugués des coordonnées de Jacobi, équation (5.19), sont

$$\begin{aligned}
\vec{p}_{\rho_1} &= \frac{1}{2} (-\vec{p}_2 + \vec{p}_1), \\
\vec{p}_{\rho_2} &= \frac{2}{3} \left(-\vec{p}_3 + \frac{1}{2} (\vec{p}_1 + \vec{p}_2) \right), \\
&\vdots \\
\vec{p}_{\rho_i} &= \frac{i}{i+1} \left(-\vec{p}_{i+1} + \frac{1}{i} (\vec{p}_1 + \cdots + \vec{p}_i) \right), \\
&\vdots \\
\vec{p}_{\rho_{N-2}} &= \frac{N-2}{N-1} \left(-\vec{p}_{N-1} + \frac{1}{N-2} (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \cdots + \vec{p}_{N-2}) \right), \\
\vec{p}_{\rho_{N-1}} &= -\frac{(N-1)m}{(N-1)m+M} \vec{p}_N + \frac{M}{(N-1)m+M} (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \cdots + \vec{p}_{N-1}). \quad (5.29)
\end{aligned}$$

Ces relations, auxquelles on adjoint l'expression de l'impulsion totale \vec{P} ,

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \cdots + \vec{p}_{N-1} + \vec{p}_N, \quad (5.30)$$

peuvent être inversées pour tirer les expressions des impulsions individuelles des particules en fonction des moments conjugués des coordonnées de Jacobi, équation (5.29), et de l'impulsion totale. En insérant les expressions ainsi obtenues dans la partie cinétique de l'Hamiltonien, on obtient

$$T := \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 = \frac{\vec{P}^2}{2((N-1)m+M)} + \sum_{i=1}^{N-2} \frac{\vec{p}_{\rho_i}^2}{\frac{2im}{i+1}} + \frac{\vec{p}_{\rho_{N-1}}^2}{\frac{2(N-1)mM}{(N-1)m+M}}.$$

L'Hamiltonien, équation (5.1), s'écrit alors en fonction des coordonnées de Jacobi, équation (5.19), de leurs moments conjugués, équation (5.29), et du moment du centre de masse, équation (5.30), comme

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2((N-1)m+M)} \vec{P}^2 + \sum_{i=1}^{N-2} \left(\frac{1}{\frac{2im}{i+1}} \vec{p}_{\rho_i}^2 + ((N-1)\lambda_{mm} + \lambda_{mM}) \frac{i}{i+1} \vec{\rho}_i^2 \right) \\
&\quad + \frac{1}{\frac{2(N-1)mM}{(N-1)m+M}} \vec{p}_{\rho_{N-1}}^2 + \lambda_{mM} (N-1) \vec{\rho}_{N-1}^2. \quad (5.31)
\end{aligned}$$

Il s'ensuit que l'Hamiltonien relatif H_R est donné par :

$$\begin{aligned}
H_R = & \sum_{i=1}^{N-2} \left(\frac{1}{\frac{2im}{i+1}} \vec{p}_{\rho_i}^2 + ((N-1)\lambda_{mm} + \lambda_{mM}) \frac{i}{i+1} \vec{\rho}_i^2 \right) \\
& + \frac{1}{\frac{2(N-1)mM}{(N-1)m+M}} \vec{p}_{\rho_{N-1}}^2 + \lambda_{mM} (N-1) \vec{\rho}_{N-1}^2.
\end{aligned} \tag{5.32}$$

H_R apparaît donc comme la somme de $N-1$ oscillateurs harmoniques indépendants. Les niveaux d'énergie sont donnés par la somme des niveaux d'énergie des $N-1$ oscillateurs harmoniques

$$\begin{aligned}
E_{j_1, j_2, \dots, j_{N-1}} = & \sum_{i=1}^{N-2} (2j_i + 3) \sqrt{\frac{(N-1)\lambda_{mm} + \lambda_{mM}}{2m}} \\
& + (2j_{N-1} + 3) \sqrt{\frac{\lambda_{mM}((N-1)m + M)}{2mM}},
\end{aligned} \tag{5.33}$$

où j_1, j_2, \dots, j_{N-1} sont des entiers positifs ou nuls. L'énergie du niveau fondamental, qui correspond évidemment à $j_1 = 0, j_2 = 0, \dots, j_{N-1} = 0$, s'exprime alors comme :

$$E_0^{(N)} = 3(N-2) \sqrt{\frac{(N-1)\lambda_{mm} + \lambda_{mM}}{2m}} + 3 \sqrt{\frac{((N-1)m + M)\lambda_{mM}}{2mM}}. \tag{5.34}$$

5.4 Configuration $(n \times m, n' \times M)$

Ici n et n' sont supérieurs à un, ce qui signifie que le système est au moins un système de quatre corps. Nous pouvons toujours numérotter les n particules de même masse m de 1 à n , et les n' particules restantes de même masse M de $n+1$ à N . Evidemment $n + n' = N$

$$\begin{aligned}
m_1 &= m_2 = \dots = m_n = m; \\
m_{n+1} &= m_{n+2} = \dots = m_N = M.
\end{aligned}$$

Comme dans la section précédente, on commence par introduire un ensemble de $N-1$ coordonnées de Jacobi $\vec{\rho}_i$. Ici, un choix naturel des coordonnées de Jacobi est de considérer des coordonnées relatives à l'intérieur de l'amas de n particules de même masse m , des coordonnées relatives à l'intérieur de l'amas des n' particules de même masse M , et la

coordonnée relative entre les deux amas :

$$\begin{aligned}
\vec{\rho}_i &= -\vec{r}_{i+1} + \frac{1}{i} \sum_{k=1}^i \vec{r}_k, & 1 \leq i < n; \\
\vec{\rho}_i &= -\vec{r}_{i+1} + \frac{1}{i-n} \sum_{k=n+1}^i \vec{r}_k, & n < i < N; \\
\vec{\rho}_n &= \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \vec{r}_k - \frac{1}{n'} \sum_{k=n+1}^N \vec{r}_k.
\end{aligned} \tag{5.35}$$

La coordonnée du centre de masse est donnée par

$$\vec{R} = \frac{1}{nm + n'M} \left(m \sum_{k=1}^n \vec{r}_k + M \sum_{k=n+1}^N \vec{r}_k \right). \tag{5.36}$$

En inversant les équations (5.35, 5.36), on obtient les expressions des coordonnées individuelles des particules en fonction des coordonnées de Jacobi et de la coordonnée du centre de masse

$$\begin{aligned}
\vec{r}_1 &= \frac{1}{2} \vec{\rho}_1 + \sum_{k=2}^{n-1} \frac{1}{k+1} \vec{\rho}_k + \frac{n'M}{nm + n'M} \vec{\rho}_n + \vec{R}; \\
&\vdots \\
\vec{r}_i &= -\frac{(i-1)}{i} \vec{\rho}_{i-1} + \sum_{k=i}^{n-1} \frac{1}{k+1} \vec{\rho}_k + \frac{n'M}{nm + n'M} \vec{\rho}_n + \vec{R}, & 1 < i < n, \\
&\vdots \\
\vec{r}_n &= -\frac{n-1}{n} \vec{\rho}_{n-1} + \frac{n'M}{nm + n'M} \vec{\rho}_n + \vec{R}.
\end{aligned} \tag{5.37}$$

$$\begin{aligned}
\vec{r}_{n+1} &= \frac{1}{2} \vec{\rho}_{n+1} + \sum_{k=n+2}^{N-1} \frac{1}{k-n+1} \vec{\rho}_k - \frac{nm}{nm + n'M} \vec{\rho}_n + \vec{R}; \\
&\vdots \\
\vec{r}_i &= -\frac{i-n-1}{i-n} \vec{\rho}_{i-1} + \sum_{k=i}^{N-1} \frac{1}{k-n+1} \vec{\rho}_k - \frac{nm}{nm + n'M} \vec{\rho}_n + \vec{R}, & n < i < N; \\
&\vdots \\
\vec{r}_N &= -\frac{N-n-1}{N-n} \vec{\rho}_{N-1} - \frac{nm}{nm + n'M} \vec{\rho}_n + \vec{R}.
\end{aligned} \tag{5.38}$$

L'énergie potentielle V ,

$$V = \lambda_{mm} \sum_{i < j=1}^n (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 + \lambda_{MM} \sum_{i < j=n+1}^N (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 + \lambda_{mM} \sum_{i=1}^n \sum_{j=n+1}^N (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2, \quad (5.39)$$

peut être réécrite sous la forme

$$V = ((n-1)\lambda_{mm} + n'\lambda_{mM}) \sum_{i=1}^n \vec{r}_i^2 + ((n'-1)\lambda_{MM} + n\lambda_{mM}) \sum_{i=n+1}^N \vec{r}_i^2 - 2 \left(\lambda_{mm} \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j + \lambda_{MM} \sum_{i=n+1}^N \sum_{j=i+1}^N \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j + \lambda_{mM} \sum_{i=1}^n \sum_{j=n+1}^N \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j \right) \quad (5.40)$$

En reportant les expressions des \vec{r}_i , $i = 1, \dots, N$, équations (5.37, 5.38), on obtient pour les différentes contributions impliquées dans V les expressions suivantes :

$$\sum_{i=1}^n \vec{r}_i^2 = n\vec{R}^2 + \frac{2nn'M}{nm + n'M} \vec{\rho}_n \cdot \vec{R} + n \frac{n'^2 M^2}{(nm + n'M)^2} \vec{\rho}_n^2 + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{k}{k+1} \vec{\rho}_k^2. \quad (5.41)$$

$$\sum_{i=n+1}^N \vec{r}_i^2 = n'\vec{R}^2 - \frac{2nn'm}{nm + n'M} \vec{\rho}_n \cdot \vec{R} + n' \frac{n^2 m^2}{(nm + n'M)^2} \vec{\rho}_n^2 + \sum_{k=n+1}^{N-1} \frac{k-n}{k-n+1} \vec{\rho}_k^2. \quad (5.42)$$

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j = \frac{1}{2} n(n-1) \vec{R}^2 + n(n-1) \frac{n'M}{nm + n'M} \vec{\rho}_n \cdot \vec{R} + \frac{1}{2} n(n-1) \frac{n'^2 M^2}{(nm + n'M)^2} \vec{\rho}_n^2 - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} \frac{k}{k+1} \vec{\rho}_k^2. \quad (5.43)$$

$$\sum_{i=n+1}^N \sum_{j=i+1}^N \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j = \frac{1}{2} n'(n'-1) \vec{R}^2 - n'(n'-1) \frac{nm}{nm + n'M} \vec{\rho}_n \cdot \vec{R} + \frac{1}{2} n'(n'-1) \frac{n^2 m^2}{(nm + n'M)^2} \vec{\rho}_n^2 - \frac{1}{2} \sum_{k=n+1}^{N-1} \frac{k-n}{k-n+1} \vec{\rho}_k^2. \quad (5.44)$$

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=n+1}^N \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j = nn' \vec{R}^2 + nn' \frac{-nm + n'M}{nm + n'M} \vec{\rho}_n \cdot \vec{R} - nn' \frac{nmn'M}{(nm + n'M)^2} \vec{\rho}_n^2. \quad (5.45)$$

En insérant ces expressions, équations (5.41-5.45), dans l'équation (5.40), on obtient

$$V = (n\lambda_{mm} + n'\lambda_{mM}) \sum_{i=1}^{n-1} \frac{i}{i+1} \vec{\rho}_i^2 + nn'\lambda_{mM} \vec{\rho}_n^2 + (\lambda_{MM}n' + \lambda_{mM}n) \sum_{i=n+1}^{N-1} \frac{i-n}{i-n+1} \vec{\rho}_i^2. \quad (5.46)$$

Les moments conjugués correspondants aux coordonnées de Jacobi, équation (5.35), sont

$$\begin{aligned} \vec{p}_{\rho_i} &= \frac{i}{i+1} \left(-\vec{p}_{i+1} + \frac{1}{i} \sum_{j=1}^i \vec{p}_j \right), & 1 \leq i < n, \\ \vec{p}_{\rho_n} &= \frac{n'M}{nm + n'M} \sum_{j=1}^n \vec{p}_j - \frac{nm}{nm + n'M} \sum_{j=n+1}^N \vec{p}_j, \\ \vec{p}_{\rho_i} &= \frac{i-n}{i-n+1} \left(-\vec{p}_{i+1} + \frac{1}{i-n} \sum_{j=n+1}^i \vec{p}_j \right), & n < i < N, \end{aligned} \quad (5.47)$$

où les \vec{p}_i , $i = 1, \dots, N$, représentent les moments conjugués correspondants aux coordonnées individuelles des particules \vec{r}_i , $i = 1, \dots, N$. L'impulsion totale \vec{P} est la somme des impulsions individuelles

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \dots + \vec{p}_n + \vec{p}_{n+1} + \dots + \vec{p}_N. \quad (5.48)$$

En inversant les relations (5.47, 5.48), on obtient les moments individuels en fonction des moments conjugués des coordonnées de Jacobi. Ensuite en substituant les expressions ainsi obtenues dans la partie cinétique de l'Hamiltonien, équation (5.1), on trouve

$$T := \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 = \frac{1}{2(nm + n'M)} \vec{P}^2 + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{2i} \vec{p}_{\rho_i}^2 + \frac{1}{2 \frac{nmn'M}{nm+n'M}} \vec{p}_n^2 + \sum_{i=n+1}^{N-1} \frac{1}{2 \frac{(i-n)}{i-n+1} M} \vec{p}_{\rho_i}^2. \quad (5.49)$$

L'expression du terme d'énergie cinétique et celle du terme d'énergie potentielle, équations (5.46, 5.49), nous permettent d'exprimer l'Hamiltonien en fonction des coordonnées de Jacobi, équation (5.35), de leurs moments conjugués, équation (5.47), et de l'impulsion

totale, équation (5.48),

$$\begin{aligned}
H = & \frac{1}{2(nm + n'M)} \vec{P}^2 + \sum_{i=1}^{n-1} \left(\frac{1}{\frac{2i}{i+1}} \vec{p}_{\rho_i}^2 + (n\lambda_{mm} + n'\lambda_{mM}) \frac{i}{i+1} \vec{\rho}_i^2 \right) \\
& + \left(\frac{1}{2\frac{nmn'M}{nm+n'M}} \vec{p}_n^2 + nn'\lambda_{mM} \vec{\rho}_n^2 \right) \\
& + \sum_{i=n+1}^{N-1} \left(\frac{1}{\frac{2(i-n)}{i-n+1}M} \vec{p}_{\rho_i}^2 + (\lambda_{MM}n' + \lambda_{mM}n) \frac{i-n}{i-n+1} \vec{\rho}_i^2 \right).
\end{aligned} \tag{5.50}$$

En soustrayant l'énergie du centre de masse, on obtient l'Hamiltonien relatif H_R

$$\begin{aligned}
H_R = & \sum_{i=1}^{n-1} \left(\frac{1}{\frac{2i}{i+1}} \vec{p}_{\rho_i}^2 + (n\lambda_{mm} + n'\lambda_{mM}) \frac{i}{i+1} \vec{\rho}_i^2 \right) + \left(\frac{1}{2\frac{nmn'M}{nm+n'M}} \vec{p}_n^2 + nn'\lambda_{mM} \vec{\rho}_n^2 \right) \\
& + \sum_{i=n+1}^{N-1} \left(\frac{1}{\frac{2(i-n)}{i-n+1}M} \vec{p}_{\rho_i}^2 + (\lambda_{MM}n' + \lambda_{mM}n) \frac{i-n}{i-n+1} \vec{\rho}_i^2 \right).
\end{aligned} \tag{5.51}$$

H_R paraît comme la somme de $N - 1$ oscillateurs harmoniques indépendants. Les niveaux d'énergie sont donc la somme des niveaux d'énergies des $N - 1$ oscillateurs harmoniques indépendants. Il s'ensuit que

$$\begin{aligned}
E_{j_1, j_2, \dots, j_{n-1}, j_n, j_{n+1}, \dots, j_{n+n'-1}} = & \sum_{i=1}^{n-1} (2j_i + 3) \sqrt{\frac{\lambda_{mm}n + \lambda_{mM}n'}{2m}} \\
& + (2j_n + 3) \sqrt{\frac{\lambda_{mM}(nm + n'M)}{2mM}} \\
& + \sum_{i=1}^{n'-1} (2j_{n+i} + 3) \sqrt{\frac{\lambda_{MM}n' + \lambda_{mM}n}{2M}},
\end{aligned} \tag{5.52}$$

avec $j_i, i = 1, \dots, n + n' - 1$, des entiers positifs ou nuls. L'énergie du niveau fondamental $E_0^{(N)}$ correspond aux j_i tous nuls. Donc

$$E_0^{(N)} = 3(n-1) \sqrt{\frac{\lambda_{mm}n + \lambda_{mM}n'}{2m}} + 3(n'-1) \sqrt{\frac{\lambda_{MM}n' + \lambda_{mM}n}{2M}} + 3 \sqrt{\frac{\lambda_{mM}(nm + n'M)}{2mM}}, \tag{5.53}$$

ou encore en remplaçant n' par $N - n$

$$E_0^{(N)} = 3(n-1)\sqrt{\frac{\lambda_{mm}n + \lambda_{mM}(N-n)}{2m}} + 3(N-n-1)\sqrt{\frac{\lambda_{MM}(N-n) + \lambda_{mM}n}{2M}} + 3\sqrt{\frac{\lambda_{mM}(nm + (N-n)M)}{2mM}} \quad (5.54)$$

5.5 Configuration $(n_1 \times m_1, n_2 \times m_2, n_3 \times m_3)$

Faisons le choix suivant des coordonnées de Jacobi

$$\begin{aligned} \vec{\rho}_i &= \vec{r}_{i+1} - \frac{1}{i} \sum_{k=1}^i \vec{r}_k & 1 \leq i \leq n_1 - 1 \\ \vec{\lambda}_i &= \vec{r}_{i+n_1+1} - \frac{1}{i} \sum_{k=n_1+1}^{n_1+i} \vec{r}_k & 1 \leq i \leq n_2 - 1 \\ \vec{\sigma}_i &= \vec{r}_{i+n_1+n_2+1} - \frac{1}{i} \sum_{k=n_1+n_2+1}^{n_1+n_2+i} \vec{r}_k & 1 \leq i \leq n_3 - 1 \\ \vec{\xi} &= \frac{1}{n_2} \sum_{k=1}^{n_2} \vec{r}_{n_1+k} - \frac{1}{n_1} \sum_{k=1}^{n_1} \vec{r}_k \\ \vec{\eta} &= \frac{1}{n_3} \sum_{k=1}^{n_3} \vec{r}_{n_1+n_2+k} - \frac{m_1}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \sum_{k=1}^{n_1} \vec{r}_k - \frac{m_2}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \sum_{k=1}^{n_2} \vec{r}_{n_1+k} \end{aligned} \quad (5.55)$$

La coordonnée du centre de masse est alors donnée par

$$\vec{R} = \frac{1}{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3} \left(m_1 \sum_{k=1}^{n_1} \vec{r}_k + m_2 \sum_{k=1}^{n_2} \vec{r}_{n_1+k} + m_3 \sum_{k=1}^{n_3} \vec{r}_{n_1+n_2+k} \right). \quad (5.56)$$

On peut inverser les relations précédentes pour obtenir les vecteurs position \vec{r}_i en termes des coordonnées de Jacobi et de la coordonnée du centre de masse avec comme résultat

$$\begin{aligned} \vec{r}_i &= \vec{R} + \frac{i-1}{i} \vec{\rho}_{i-1} - \sum_{k=i}^{n_1-1} \frac{1}{k+1} \vec{\rho}_k - \frac{n_2 m_2}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \vec{\xi} - \frac{n_3 m_3}{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3} \vec{\eta} & 1 \leq i \leq n_1 \\ \vec{r}_{n_1+i} &= \vec{R} + \frac{i-1}{i} \vec{\lambda}_{i-1} - \sum_{k=i}^{n_2-1} \frac{1}{k+1} \vec{\lambda}_k + \frac{n_1 m_1}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \vec{\xi} - \frac{n_3 m_3}{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3} \vec{\eta} & 1 \leq i \leq n_2 \\ \vec{r}_{n_1+n_2+i} &= \vec{R} + \frac{i-1}{i} \vec{\sigma}_{i-1} - \sum_{k=i}^{n_3-1} \frac{1}{k+1} \vec{\sigma}_k + \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3} \vec{\eta} & 1 \leq i \leq n_3. \end{aligned} \quad (5.57)$$

Définissons la vitesse \vec{v}_i associée à \vec{r}_i

$$\vec{v}_i = \vec{p}_i/m_i$$

où \vec{p}_i est le moment conjugué de \vec{r}_i .

Définissons les vitesses associées aux coordonnées de Jacobi par

$$\begin{aligned}
\vec{v}_{\rho_i} &= \vec{v}_{i+1} - \frac{1}{i} \sum_{k=1}^i \vec{v}_k & 1 \leq i \leq n_1 - 1 \\
\vec{v}_{\lambda_i} &= \vec{v}_{i+n_1+1} - \frac{1}{i} \sum_{k=n_1+1}^{n_1+i} \vec{v}_k & 1 \leq i \leq n_2 - 1 \\
\vec{v}_{\sigma_i} &= \vec{v}_{i+n_1+n_2+1} - \frac{1}{i} \sum_{k=n_1+n_2+1}^{n_1+n_2+i} \vec{v}_k & 1 \leq i \leq n_3 - 1 \\
\vec{v}_{\xi} &= \frac{1}{n_2} \sum_{k=1}^{n_2} \vec{v}_{n_1+k} - \frac{1}{n_1} \sum_{k=1}^{n_1} \vec{v}_k \\
\vec{v}_{\eta} &= \frac{1}{n_3} \sum_{k=1}^{n_3} \vec{v}_{n_1+n_2+k} - \frac{m_1}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \sum_{k=1}^{n_1} \vec{v}_k - \frac{m_2}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \sum_{k=1}^{n_2} \vec{v}_{n_1+k} \\
\vec{v}_R &= \frac{1}{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3} \left(m_1 \sum_{k=1}^{n_1} \vec{v}_k + m_2 \sum_{k=1}^{n_2} \vec{v}_{n_1+k} + m_3 \sum_{k=1}^{n_3} \vec{v}_{n_1+n_2+k} \right).
\end{aligned} \tag{5.58}$$

Les relations liant vitesses de Jacobi et moments conjugués de Jacobi sont les suivantes

$$\begin{aligned}
\vec{p}_{\rho_i} &= \frac{im_1^2}{(i+1)m_1} \vec{v}_{\rho_i} = \frac{im_1}{i+1} \vec{v}_{\rho_i} & 1 \leq i \leq n_1 - 1 \\
\vec{p}_{\lambda_i} &= \frac{im_2^2}{(i+1)m_2} \vec{v}_{\lambda_i} = \frac{im_2}{i+1} \vec{v}_{\lambda_i} & 1 \leq i \leq n_2 - 1 \\
\vec{p}_{\sigma_i} &= \frac{im_3^2}{(i+1)m_3} \vec{v}_{\sigma_i} = \frac{im_3}{i+1} \vec{v}_{\sigma_i} & 1 \leq i \leq n_3 - 1 \\
\vec{p}_{\xi} &= \frac{n_1 n_2 m_1 m_2}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \vec{v}_{\xi} \\
\vec{p}_{\eta} &= \frac{n_3 m_3 (n_1 m_1 + n_2 m_2)}{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3} \vec{v}_{\eta} \\
\vec{P} &= (n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3) \vec{v}_R.
\end{aligned} \tag{5.59}$$

Les relations donnant les vitesses associées aux coordonnées de Jacobi en fonction des vitesses associées aux \vec{r}_i peuvent être inversées donnant lieu aux mêmes relations que (5.57), sauf que les positions sont remplacées par des vitesses.

L'énergie cinétique du système peut alors se mettre sous la forme

$$T = \frac{1}{2}m_1 \sum_{i=1}^{n_1} \vec{v}_i^2 + \frac{1}{2}m_2 \sum_{i=1}^{n_2} \vec{v}_{n_1+i}^2 + \frac{1}{2}m_3 \sum_{i=1}^{n_3} \vec{v}_{n_1+n_2+i}^2.$$

Mais on peut montrer que :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n_1} \vec{r}_i^2 &= n_1 \vec{R}^2 + \sum_{i=1}^{n_1-1} \frac{i}{i+1} \vec{\rho}_i^2 + \frac{n_1 n_2^2 m_2^2}{(n_1 m_1 + m_2 n_2)^2} \vec{\xi}^2 + \frac{n_1 n_3^2 m_3^2}{(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)^2} \vec{\eta}^2 \\ &\quad - 2 \frac{m_2 n_1 n_2}{n_1 m_1 + m_2 n_2} \vec{R} \cdot \vec{\xi} \\ &\quad - 2 \frac{n_1 n_3 m_3}{n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3} \vec{R} \cdot \vec{\eta} \\ &\quad + 2 \frac{n_1 n_2 n_3 m_2 m_3}{(n_1 m_1 + m_2 n_2)(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)} \vec{\xi} \cdot \vec{\eta}, \end{aligned} \quad (5.60)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n_2} \vec{r}_{n_1+i}^2 &= n_2 \vec{R}^2 + \sum_{i=1}^{n_2-1} \frac{i}{i+1} \vec{\lambda}_i^2 + \frac{n_2 n_1^2 m_1^2}{(n_1 m_1 + m_2 n_2)^2} \vec{\xi}^2 + \frac{n_2 n_3^2 m_3^2}{(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)^2} \vec{\eta}^2 \\ &\quad + 2 \frac{n_1 n_2 m_1}{n_1 m_1 + m_2 n_2} \vec{R} \cdot \vec{\xi} \\ &\quad - 2 \frac{n_2 n_3 m_3}{n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3} \vec{R} \cdot \vec{\eta} \\ &\quad - 2 \frac{n_1 n_2 n_3 m_1 m_3}{(n_1 m_1 + m_2 n_2)(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)} \vec{\xi} \cdot \vec{\eta}, \end{aligned} \quad (5.61)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n_3} \vec{r}_{n_1+n_2+i}^2 &= n_3 \vec{R}^2 + \sum_{i=1}^{n_3-1} \frac{i}{i+1} \vec{\sigma}_i^2 + n_3 \left(\frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3} \right)^2 \vec{\eta}^2 \\ &\quad + 2 n_3 \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3} \vec{R} \cdot \vec{\eta}. \end{aligned} \quad (5.62)$$

Il en est donc de même pour les vitesses

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n_1} \vec{v}_i^2 &= n_1 \vec{R}^2 + \sum_{i=1}^{n_1-1} \frac{i}{i+1} \vec{v}_{\rho_i}^2 + \frac{n_1 n_2^2 m_2^2}{(n_1 m_1 + m_2 n_2)^2} \vec{v}_{\xi}^2 + \frac{n_1 n_3^2 m_3^2}{(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)^2} \vec{v}_{\eta}^2 \\ &\quad - 2 \frac{m_2 n_1 n_2}{n_1 m_1 + m_2 n_2} \vec{v}_R \cdot \vec{v}_{\xi} - 2 \frac{n_1 n_3 m_3}{n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3} \vec{v}_R \cdot \vec{v}_{\eta} \\ &\quad + 2 \frac{n_1 n_2 n_3 m_2 m_3}{(n_1 m_1 + m_2 n_2)(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)} \vec{v}_{\xi} \cdot \vec{v}_{\eta}, \end{aligned} \quad (5.63)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n_2} \vec{v}_{n_1+i}^2 &= n_2 \vec{R}^2 + \sum_{i=1}^{n_2-1} \frac{i}{i+1} \vec{v}_{\lambda_i}^2 + \frac{n_2 n_1^2 m_1^2}{(n_1 m_1 + m_2 n_2)^2} \vec{v}_{\xi}^2 + \frac{n_2 n_3^2 m_3^2}{(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)^2} \vec{v}_{\eta}^2 \\ &\quad + 2 \frac{n_1 n_2 m_1}{n_1 m_1 + m_2 n_2} \vec{v}_R \cdot \vec{v}_{\xi} - 2 \frac{n_2 n_3 m_3}{n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3} \vec{v}_R \cdot \vec{v}_{\eta} \\ &\quad - 2 \frac{n_1 n_2 n_3 m_1 m_3}{(n_1 m_1 + m_2 n_2)(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)} \vec{v}_{\xi} \cdot \vec{v}_{\eta}, \end{aligned} \quad (5.64)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n_3} \vec{v}_{n_1+n_2+i}^2 &= n_3 \vec{v}_R^2 + \sum_{i=1}^{n_3-1} \frac{i}{i+1} \vec{v}_{\sigma_i}^2 + n_3 \left(\frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3} \right)^2 \vec{v}_{\eta}^2 \\ &\quad + 2 n_3 \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3} \vec{v}_R \cdot \vec{v}_{\eta}. \end{aligned} \quad (5.65)$$

D'où en reportant dans l'expression de l'énergie cinétique

$$\begin{aligned}
T = & \frac{1}{2} (n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3) \vec{v}_R^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_1-1} \frac{i m_1}{i+1} \vec{v}_{\rho_i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_2-1} \frac{i m_2}{i+1} \vec{v}_{\lambda_i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_3-1} \frac{i m_3}{i+1} \vec{v}_{\sigma_i}^2 \\
& + \frac{1}{2} \frac{n_1 n_2 m_1 m_2}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \vec{v}_{\xi}^2 + \frac{1}{2} \frac{n_3 m_3 (n_1 m_1 + n_2 m_2)}{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3} \vec{v}_{\eta}^2, \tag{5.66}
\end{aligned}$$

ou encore en terme des moments conjugués associés aux coordonnées de Jacobi

$$\begin{aligned}
T = & \frac{1}{2(n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3)} \vec{P}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_1-1} \frac{i+1}{i m_1} \vec{p}_{\rho_i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_2-1} \frac{i+1}{i m_2} \vec{p}_{\lambda_i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_3-1} \frac{i+1}{i m_3} \vec{p}_{\sigma_i}^2 \\
& + \frac{1}{2} \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{n_1 n_2 m_1 m_2} \vec{p}_{\xi}^2 + \frac{1}{2} \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{n_3 m_3 (n_1 m_1 + n_2 m_2)} \vec{p}_{\eta}^2.
\end{aligned}$$

Le terme de l'énergie potentielle

$$V = \sum_{i < j=1}^N \lambda_{ij} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2$$

peut être réécrit sous la forme

$$\begin{aligned}
V = & \lambda_{11} \sum_{i < j=1}^{n_1} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 + \lambda_{22} \sum_{i < j=1}^{n_1} (\vec{r}_{n_1+i} - \vec{r}_{n_1+j})^2 + \lambda_{33} \sum_{i < j=1}^{n_1} (\vec{r}_{n_1+i} - \vec{r}_{n_1+j})^2 \\
& + \lambda_{12} \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} (\vec{r}_i - \vec{r}_{n_1+j})^2 + \lambda_{13} \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_3} (\vec{r}_i - \vec{r}_{n_1+n_2+j})^2 \\
& + \lambda_{23} \sum_{i=1}^{n_2} \sum_{j=1}^{n_3} (\vec{r}_{n_1+i} - \vec{r}_{n_1+n_2+j})^2,
\end{aligned}$$

ou encore

$$\begin{aligned}
V = & ((n_1 - 1) \lambda_{11} + n_2 \lambda_{12} + n_3 \lambda_{13}) \sum_{i=1}^{n_1} \vec{r}_i^2 + ((n_2 - 1) \lambda_{22} + n_1 \lambda_{12} + n_3 \lambda_{23}) \sum_{i=1}^{n_2} \vec{r}_{n_1+i}^2 \\
& + ((n_3 - 1) \lambda_{33} + n_1 \lambda_{13} + n_2 \lambda_{23}) \sum_{i=1}^{n_3} \vec{r}_{n_1+n_2+i}^2 \\
& - 2 \left(\lambda_{11} \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=i+1}^{n_1} \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j + \lambda_{22} \sum_{i=1}^{n_2} \sum_{j=i+1}^{n_2} \vec{r}_{n_1+i} \cdot \vec{r}_{n_1+j} + \lambda_{33} \sum_{q=1}^{n_3} \sum_{p=q+1}^{n_3} \vec{r}_{n_1+n_2+i} \cdot \vec{r}_{n_1+n_2+j} \right. \\
& \left. + \lambda_{12} \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} \vec{r}_i \cdot \vec{r}_{n_1+j} + \lambda_{13} \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_3} \vec{r}_i \cdot \vec{r}_{n_1+n_2+j} + \lambda_{23} \sum_{i=1}^{n_2} \sum_{j=1}^{n_3} \vec{r}_{n_1+i} \cdot \vec{r}_{n_1+n_2+j} \right). \tag{5.67}
\end{aligned}$$

Les produits carrés ayant été calculés, équation (5.60-5.62), il nous reste à calculer les produits rectangulaires. En remplaçant les \vec{r}_i par leurs expressions en termes des coordonnées de Jacobi et de la coordonnée du centre de masse, on obtient :

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=i+1}^{n_1} \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j &= \frac{n_1(n_1-1)}{2} \vec{R}^2 \\
&- \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_1-1} \frac{i}{i+1} \vec{\rho}_i^2 + \frac{n_1(n_1-1)}{2} \frac{n_2^2 m_2^2}{(n_1 m_1 + n_2 m_2)^2} \vec{\xi}^2 \\
&+ \frac{n_1(n_1-1)}{2} \frac{n_3^2 m_3^2}{(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)^2} \vec{\eta}^2 \\
&+ n_1(n_1-1) \left(-\frac{n_2 m_2}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \vec{R} \cdot \vec{\xi} - \frac{n_3 m_3}{n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3} \vec{R} \cdot \vec{\eta} \right. \\
&\quad \left. + \frac{n_2 n_3 m_2 m_3}{(n_1 m_1 + n_2 m_2)(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)} \vec{\xi} \cdot \vec{\eta} \right) \quad (5.68)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n_2} \sum_{j=i+1}^{n_2} \vec{r}_{n_1+i} \cdot \vec{r}_{n_1+j} &= \frac{n_2(n_2-1)}{2} \vec{R}^2 \\
&- \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_2-1} \frac{i}{i+1} \vec{\lambda}_i^2 + \frac{n_2(n_2-1)}{2} \frac{n_1^2 m_1^2}{(n_1 m_1 + n_2 m_2)^2} \vec{\xi}^2 \\
&+ \frac{n_2(n_2-1)}{2} \frac{n_3^2 m_3^2}{(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)^2} \vec{\eta}^2 \\
&+ n_2(n_2-1) \left(\frac{n_1 m_1}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \vec{R} \cdot \vec{\xi} - \frac{n_3 m_3}{n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3} \vec{R} \cdot \vec{\eta} \right. \\
&\quad \left. - \frac{n_1 n_3 m_1 m_3}{(n_1 m_1 + n_2 m_2)(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)} \vec{\xi} \cdot \vec{\eta} \right) \quad (5.69)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n_3} \sum_{j=i+1}^{n_3} \vec{r}_{n_1+n_2+i} \cdot \vec{r}_{n_1+n_2+j} &= \frac{n_3(n_3-1)}{2} \vec{R}^2 \\
&- \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_3-1} \frac{i}{i+1} \vec{\sigma}_i^2 \\
&+ \frac{(n_3-1)}{2} \frac{n_3 (n_1 m_1 + m_2 n_2)^2}{(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)^2} \vec{\eta}^2 \\
&+ (n_3-1) \frac{n_3 (n_1 m_1 + m_2 n_2)}{(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)} \vec{R} \cdot \vec{\eta} \quad (5.70)
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} \vec{r}_i \cdot \vec{r}_{n_1+j} &= n_1 n_2 \vec{R}^2 \\
&- n_1^2 n_2^2 \frac{m_1 m_2}{(n_1 m_1 + n_2 m_2)^2} \vec{\xi}^2 \\
&+ n_1 n_2 \frac{n_3^2 m_3^2}{(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)^2} \vec{\eta}^2 \\
&- n_1 n_2 \frac{n_2 m_2 - n_1 m_1}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \vec{R} \cdot \vec{\xi} - 2 n_1 n_2 \frac{n_3 m_3}{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3} \vec{R} \cdot \vec{\eta} \\
&+ n_1 n_2 \frac{n_3 m_3 (n_2 m_2 - n_1 m_1)}{(n_1 m_1 + n_2 m_2) (n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3)} \vec{\xi} \cdot \vec{\eta} \quad (5.71)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_3} \vec{r}_i \cdot \vec{r}_{n_1+n_2+j} &= n_1 n_3 \vec{R}^2 - n_1 m_3 \frac{n_3^2 (n_1 m_1 + m_2 n_2)}{(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)^2} \vec{\eta}^2 \\
&- n_1 n_2 n_3 \frac{m_2}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \vec{R} \cdot \vec{\xi} - n_1 n_3 \frac{n_3 m_3 - (n_1 m_1 + m_2 n_2)}{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3} \vec{R} \cdot \vec{\eta} \\
&- n_1 n_2 n_3 \frac{m_2}{(n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3)} \vec{\xi} \cdot \vec{\eta} \quad (5.72)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n_2} \sum_{j=1}^{n_3} \vec{r}_{n_1+i} \cdot \vec{r}_{n_1+n_2+j} &= n_2 n_3 \vec{R}^2 \\
&- n_2 m_3 \frac{n_3^2 (n_1 m_1 + m_2 n_2)}{(n_1 m_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)^2} \vec{\eta}^2 \\
&+ n_1 n_2 n_3 \frac{m_1}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \vec{R} \cdot \vec{\xi} \\
&- n_2 n_3 \frac{n_3 m_3 - (n_1 m_1 + m_2 n_2)}{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3} \vec{R} \cdot \vec{\eta} \\
&+ n_1 n_2 n_3 \frac{m_1}{(n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3)} \vec{\xi} \cdot \vec{\eta}. \quad (5.73)
\end{aligned}$$

En faisant usage des expressions (5.60-5.62), (5.68-5.73) le terme d'énergie potentielle

peut être mis sous la forme :

$$\begin{aligned}
V = & (n_1\lambda_{11} + n_2\lambda_{12} + n_3\lambda_{13}) \sum_{i=1}^{n_1-1} \frac{i}{i+1} \vec{p}_i^2 \\
& + (n_1\lambda_{12} + n_2\lambda_{22} + n_3\lambda_{23}) \sum_{i=1}^{n_2-1} \frac{i}{i+1} \vec{\lambda}_i^2 \\
& + (n_1\lambda_{13} + n_2\lambda_{23} + n_3\lambda_{33}) \sum_{i=1}^{n_3-1} \frac{i}{i+1} \vec{\sigma}_i^2 \\
& + n_1 n_2 \frac{\lambda_{12} (n_1 m_1 + n_2 m_2)^2 + n_1 n_3 m_1^2 \lambda_{23} + n_2 n_3 m_2^2 \lambda_{13}}{(n_1 m_1 + n_2 m_2)^2} \vec{\xi}^2 \\
& + n_3 (n_1 \lambda_{13} + n_2 \lambda_{23}) \vec{\eta}^2 + 2 n_1 n_2 n_3 \frac{m_2 \lambda_{13} - m_1 \lambda_{23}}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \vec{\xi} \cdot \vec{\eta}.
\end{aligned}$$

L'Hamiltonien relatif s'écrit alors comme

$$\begin{aligned}
H_R = & \sum_{i=1}^{n_1-1} \left(\frac{1}{2} \frac{i+1}{i m_1} \vec{p}_{\rho_i}^2 + (n_1 \lambda_{11} + n_2 \lambda_{12} + n_3 \lambda_{13}) \frac{i}{i+1} \vec{p}_i^2 \right) \\
& + \sum_{i=1}^{n_2-1} \left(\frac{1}{2} \frac{i+1}{i m_2} \vec{p}_{\lambda_i}^2 + (n_1 \lambda_{12} + n_2 \lambda_{22} + n_3 \lambda_{23}) \frac{i}{i+1} \vec{\lambda}_i^2 \right) \\
& + \sum_{i=1}^{n_3-1} \left(\frac{1}{2} \frac{i+1}{i m_3} \vec{p}_{\sigma_i}^2 + (n_1 \lambda_{13} + n_2 \lambda_{23} + n_3 \lambda_{33}) \frac{i}{i+1} \vec{\sigma}_i^2 \right) \\
& + \frac{1}{2} \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{n_1 n_2 m_1 m_2} \vec{p}_{\xi}^2 \\
& + \frac{1}{2} \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{n_3 m_3 (n_1 m_1 + n_2 m_2)} \vec{p}_{\eta}^2 \\
& + n_1 n_2 \frac{\lambda_{12} (n_1 m_1 + n_2 m_2)^2 + n_1 n_3 m_1^2 \lambda_{23} + n_2 n_3 m_2^2 \lambda_{13}}{(n_1 m_1 + n_2 m_2)^2} \vec{\xi}^2 \\
& + n_3 (n_1 \lambda_{13} + n_2 \lambda_{23}) \vec{\eta}^2 + 2 n_1 n_2 n_3 \frac{m_2 \lambda_{13} - m_1 \lambda_{23}}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \vec{\xi} \cdot \vec{\eta}. \tag{5.74}
\end{aligned}$$

Notre Hamiltonien se présente sous la forme d'une somme de $n_1 + n_2 + n_3 - 3$ oscillateurs découplés et deux oscillateurs couplés, les oscillateurs en $\vec{\xi}$ et en $\vec{\eta}$, que nous allons découpler. Pour cela effectuons les transformations d'échelle sur les moments conjugués

des coordonnées de Jacobi

$$\begin{aligned}\vec{p}_\xi &\rightarrow \vec{p}'_\xi = \sqrt{\frac{1}{2} \frac{m_1 n_1 + m_2 n_2}{n_1 n_2 m_1 m_2}} \vec{p}_\xi \\ \vec{p}_\eta &\rightarrow \vec{p}'_\eta = \sqrt{\frac{1}{2} \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{n_3 m_3 (n_1 m_1 + n_2 m_2)}} \vec{p}_\eta\end{aligned}$$

qui correspondent aux transformations d'échelle sur les coordonnées de Jacobi

$$\begin{aligned}\vec{\xi} &\rightarrow \vec{\xi}' = \sqrt{\frac{2n_1 n_2 m_1 m_2}{m_1 n_1 + m_2 n_2}} \vec{\xi} \\ \vec{\eta} &\rightarrow \vec{\eta}' = \sqrt{\frac{2n_3 m_3 (n_1 m_1 + n_2 m_2)}{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}} \vec{\eta}.\end{aligned}$$

La partie de l'Hamiltonien relatif impliquant les coordonnées de Jacobi $\vec{\xi}$ et $\vec{\eta}$ et leurs moments conjugués prend alors la forme

$$\begin{aligned}H_R(\vec{\xi}, \vec{\eta}) &= \vec{p}'_{\xi'}{}^2 + \vec{p}'_{\eta'}{}^2 \\ &+ \frac{\lambda_{12} (n_1 m_1 + n_2 m_2)^2 + n_1 n_3 m_1^2 \lambda_{23} + n_2 n_3 m_2^2 \lambda_{13}}{2m_1 m_2 (n_1 m_1 + n_2 m_2)} \xi'^2 \\ &+ (n_1 \lambda_{13} + n_2 \lambda_{23}) \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{2m_3 (n_1 m_1 + n_2 m_2)} \eta'^2 \\ &+ n_1 n_2 n_3 \frac{m_2 \lambda_{13} - m_1 \lambda_{23}}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \sqrt{\frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{n_1 n_2 n_3 m_3 m_1 m_2}} \vec{\xi}' \cdot \vec{\eta}'.\end{aligned}$$

Nous avons donc à diagonaliser la matrice \mathbf{M} définie par

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \frac{\lambda_{12}(n_1 m_1 + n_2 m_2)^2 + n_1 n_3 m_1^2 \lambda_{23} + n_2 n_3 m_2^2 \lambda_{13}}{2m_1 m_2 (n_1 m_1 + n_2 m_2)} & \frac{n_1 n_2 n_3}{2} \frac{m_2 \lambda_{13} - m_1 \lambda_{23}}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \sqrt{\frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{n_1 n_2 n_3 m_3 m_1 m_2}} \\ \frac{n_1 n_2 n_3}{2} \frac{m_2 \lambda_{13} - m_1 \lambda_{23}}{n_1 m_1 + n_2 m_2} \sqrt{\frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{n_1 n_2 n_3 m_3 m_1 m_2}} & (n_1 \lambda_{13} + n_2 \lambda_{23}) \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{2m_3 (n_1 m_1 + n_2 m_2)} \end{pmatrix}.$$

Cette matrice admet deux valeurs propres A_1 et A_2 qui sont de surcroît positifs car il est clair que la matrice \mathbf{M} est définie positive (ses éléments diagonaux sont positifs et sont déterminant est également positif).

Après diagonalisation, $H_R(\vec{\xi}, \vec{\eta})$ va prendre la forme

$$H_R(\vec{\xi}, \vec{\eta}) = \vec{p}_{\xi''}^2 + \vec{p}_{\eta''}^2 + A_1 \vec{\xi}''^2 + A_2 \vec{\eta}''^2.$$

Donc $H_R(\vec{\xi}, \vec{\eta})$ se présente alors sous forme d'une somme de deux oscillateurs et

$$\begin{aligned} H_R = & \sum_{i=1}^{n_1-1} \left(\frac{1}{2} \frac{i+1}{im_1} \vec{p}_{\rho_i}^2 + (n_1 \lambda_{11} + n_2 \lambda_{12} + n_3 \lambda_{13}) \frac{i}{i+1} \vec{\rho}_i^2 \right) \\ & + \sum_{i=1}^{n_2-1} \left(\frac{1}{2} \frac{i+1}{im_2} \vec{p}_{\lambda_i}^2 + (n_1 \lambda_{12} + n_2 \lambda_{22} + n_3 \lambda_{23}) \frac{i}{i+1} \vec{\lambda}_i^2 \right) \\ & + \sum_{i=1}^{n_3-1} \left(\frac{1}{2} \frac{i+1}{im_3} \vec{p}_{\sigma_i}^2 + (n_1 \lambda_{13} + n_2 \lambda_{23} + n_3 \lambda_{33}) \frac{i}{i+1} \vec{\sigma}_i^2 \right) \\ & + \vec{p}_{\xi''}^2 + \vec{p}_{\eta''}^2 + A_1 \vec{\xi}''^2 + A_2 \vec{\eta}''^2. \end{aligned} \quad (5.75)$$

Les niveaux d'énergie sont donc la somme des énergies des niveaux de $N - 1$ oscillateurs harmoniques indépendants. Il s'ensuit que

$$\begin{aligned} E_{j_1, j_2, \dots, j_{n_1-1}, j_{n_1}, j_{n_1+1}, \dots, j_{n_1+n_2}, \dots, j_{n_1+n_2+n_3-1}}^{(N)} = & \sum_{i=1}^{n_1-1} (2j_i + 3) \sqrt{\frac{n_1 \lambda_{11} + n_2 \lambda_{12} + n_3 \lambda_{13}}{2m_1}} \\ & + \sum_{i=n_1}^{n_1+n_2-2} (2j_i + 3) \sqrt{\frac{n_1 \lambda_{12} + n_2 \lambda_{22} + n_3 \lambda_{23}}{2m_2}} \\ & + \sum_{i=n_1+n_2-1}^{n_1+n_2+n_3-3} (2j_i + 3) \sqrt{\frac{n_1 \lambda_{13} + n_2 \lambda_{23} + n_3 \lambda_{33}}{2m_3}} \\ & + (2j_{n_1+n_2+n_3-2} + 3) \sqrt{A_1} \\ & + (2j_{n_1+n_2+n_3-1} + 3) \sqrt{A_2}. \end{aligned} \quad (5.76)$$

où j_i sont des entiers positifs ou nuls et où on a utilisé l'expression de l'énergie d'un oscillateur sphérique à trois dimensions. L'énergie de l'état fondamental de H_R est alors la somme des énergies des états fondamentaux de chacun des oscillateurs, qui s'obtiennent en égalisant tous les j_i à zéro

$$\begin{aligned} E_0^{(N)} = & 3 \left((n_1 - 1) \sqrt{\frac{1}{2} \frac{n_1 \lambda_{11} + n_2 \lambda_{12} + n_3 \lambda_{13}}{m_1}} + (n_2 - 1) \sqrt{\frac{1}{2} \frac{n_1 \lambda_{12} + n_2 \lambda_{22} + n_3 \lambda_{23}}{m_2}} \right. \\ & \left. + (n_3 - 1) \sqrt{\frac{1}{2} \frac{n_1 \lambda_{13} + n_2 \lambda_{23} + n_3 \lambda_{33}}{m_3}} + \sqrt{A_1} + \sqrt{A_2} \right) \end{aligned} \quad (5.77)$$

En élevant $\sqrt{A_1} + \sqrt{A_2}$ au carré

$$\left(\sqrt{A_1} + \sqrt{A_2}\right)^2 = A_1 + A_2 + 2\sqrt{A_1 A_2}.$$

Mais

$$A_1 + A_2 = \text{tr} \mathbf{M}$$

et

$$A_1 A_2 = \det \mathbf{M}.$$

Par conséquent

$$\sqrt{A_1} + \sqrt{A_2} = \sqrt{\text{tr}(A) + 2\sqrt{\det(A)}}.$$

En se reportant à l'expression de la matrice \mathbf{M}

$$\text{tr}(\mathbf{M}) = \lambda_{12} \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{2m_1 m_2} + \lambda_{13} \frac{n_1 m_1 + n_3 m_3}{2m_1 m_3} + \lambda_{23} \frac{n_2 m_2 + n_3 m_3}{2m_2 m_3}, \quad (5.78)$$

$$\det(\mathbf{M}) = \frac{m_1 n_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3}{4m_1 m_2 m_3} (n_1 \lambda_{12} \lambda_{13} + n_2 \lambda_{12} \lambda_{23} + n_3 \lambda_{13} \lambda_{23}). \quad (5.79)$$

Il s'ensuit que l'énergie du niveau fondamental $E_0^{(N)}$ de H_R est donnée par

$$E_0^{(N)} = 3 \left((n_1-1) \sqrt{\frac{n_1 \lambda_{11} + n_2 \lambda_{12} + n_3 \lambda_{13}}{2m_1}} + (n_2-1) \sqrt{\frac{n_1 \lambda_{12} + n_2 \lambda_{22} + n_3 \lambda_{23}}{2m_2}} + (n_3-1) \sqrt{\frac{n_1 \lambda_{13} + n_2 \lambda_{23} + n_3 \lambda_{33}}{2m_3}} \right. \\ \left. + \sqrt{\frac{\lambda_{12}(n_1 m_1 + n_2 m_2)}{2m_1 m_2} + \frac{\lambda_{13}(n_1 m_1 + n_3 m_3)}{2m_1 m_3} + \frac{\lambda_{23}(n_2 m_2 + n_3 m_3)}{2m_2 m_3} + \sqrt{\frac{n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3}{m_1 m_2 m_3} (n_1 \lambda_{12} \lambda_{13} + n_2 \lambda_{12} \lambda_{23} + n_3 \lambda_{13} \lambda_{23})}} \right) \quad (5.80)$$

Dans le cas à trois corps, on retrouve le résultat connu [11]

$$E_0^{(3)} = 3 \sqrt{\frac{m_1 + m_2}{2m_1 m_2} \lambda_{12} + \frac{m_1 + m_3}{2m_1 m_3} \lambda_{13} + \frac{m_2 + m_3}{2m_2 m_3} \lambda_{23} + \sqrt{\frac{m_1 + m_2 + m_3}{m_1 m_2 m_3} (\lambda_{12} \lambda_{13} + \lambda_{12} \lambda_{23} + \lambda_{13} \lambda_{23})}} \\ = 3 \sqrt{\frac{\lambda_{12} + \lambda_{13}}{2m_1} + \frac{\lambda_{12} + \lambda_{23}}{2m_2} + \frac{\lambda_{13} + \lambda_{23}}{2m_3} + \sqrt{\frac{m_1 + m_2 + m_3}{m_1 m_2 m_3} (\lambda_{12} \lambda_{13} + \lambda_{12} \lambda_{23} + \lambda_{13} \lambda_{23})}} \quad (5.81)$$

Chapitre 6

Saturation des bornes inférieures optimisées

Tous les résultats de nos calculs numériques montrent que la borne inférieure optimisée est saturée dans le cas des interactions harmoniques. Nous avons considéré un tel nombre de cas, qu'il nous est maintenant très difficile de croire que la propriété de saturabilité puisse être prise à défaut. Autrement dit, nous avons acquis la certitude que la borne inférieure optimisée est saturée dans le cas des interactions harmoniques. En dépit de cela, d'un point de vu mathématique une évidence numérique reste une évidence numérique et ne peut constituer, strictement parlant, une démonstration rigoureuse de la saturabilité. Notre but dans ce chapitre est de combler partiellement cette lacune. Plus explicitement, nous allons démontrer analytiquement [14] que la borne inférieure optimisée est saturée pour les trois configurations $(N \times m)$, $((N - 1) \times m, 1 \times M)$ et $(n \times m, n' \times M)$, où $N > 2$, n et n' sont supérieurs à 1.

Dans chaque cas, nous allons d'abord dériver analytiquement l'expression de la borne inférieure optimisée puis nous allons la comparer avec la valeur exacte de l'énergie de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique à N corps obtenue au chapitre précédent.

6.1 Configuration ($N \times m$)

Toutes les particules sont de même masse.

Il est à remarquer que la borne inférieure améliorée est saturée dans ce cas, c'est à dire coïncide avec l'énergie de l'état fondamental du système.

Le système est alors invariant dans toute permutation des particules. Par conséquent,

$$a_{ij} = a \quad i < j = 1, \dots, N, \quad (6.1)$$

$$b_i = b \quad i = 1, \dots, N \quad (6.2)$$

et

$$x_{ij,k} = 0 \quad k = 1, \dots, N, \quad k \neq i \text{ et } k \neq j. \quad (6.3)$$

Dans ce cas on n'a pas de paramètres à ajuster.

L'identification des deux membres de la relation

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \vec{p}_i^2 = \left(\sum_{i=1}^N b \vec{p}_i \right) \left(\sum_{j=1}^N \vec{p}_j \right) + \sum_{i < j=1}^N \frac{a}{4} (\vec{p}_i - \vec{p}_j)^2 \quad (6.4)$$

donne une seule équation pour les termes en \vec{p}_i^2

$$\frac{1}{2m} = b + \frac{a}{4} (N-1), \quad (6.5)$$

et également une seule équation pour les termes en $\vec{p}_i \cdot \vec{p}_j$ pour $i \neq j = 1, \dots, N$

$$0 = 2b - \frac{a}{2}. \quad (6.6)$$

En éliminant le paramètre b entre les deux équations précédentes, on arrive à une expression pour le paramètre a :

$$a = \frac{2}{mN}. \quad (6.7)$$

Nous avons pour des interactions harmoniques

$$V_{ij}(\vec{r}_{ij}) = V_{mm}(\vec{r}_{ij}) = \lambda r_{ij}^2 \quad i < j < N, \quad (6.8)$$

et la borne inférieure optimisée se réduit alors à :

$$E_{ob} = \sum_{i < j=1}^N E^{(2)} [a, \lambda, 2] = \frac{N(N-1)}{2} E^{(2)} (a, \lambda, 2), \quad (6.9)$$

où $E^{(2)} (a, \lambda, 2)$, avec λ positif, dénote l'énergie du niveau fondamental de l'Hamiltonien $H_{oh}^{(2)}$ à deux corps défini par

$$H_{oh}^{(2)} := a\vec{p}^2 + \lambda r^2. \quad (6.10)$$

En utilisant l'expression du paramètre a équation (6.7) et le résultat bien connu

$$E^{(2)} (a, \lambda, 2) = 3\sqrt{a\lambda}, \quad (6.11)$$

l'équation (6.9) se réduit à

$$E_{ob} = 3 \frac{N(N-1)}{2} \sqrt{\frac{2}{mN} \lambda} = 3(N-1) \sqrt{\frac{\lambda N}{2m}} \quad (6.12)$$

qui n'est rien d'autre que l'énergie exacte d'un système d'oscillateurs harmoniques de même masse (5.18). Il est aussi à remarquer que dans ce cas particulier les bornes inférieures améliorée et optimisée coïncident toutes deux avec l'énergie de l'état fondamental.

6.2 Configuration $((N-1) \times m, 1 \times M)$

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

$$m_1 = m_2 = \dots = m_{N-1} = m \quad \text{et} \quad m_N = M.$$

Comme le système est invariant dans toute permutation des $N-1$ particules de même masse m , on a les relations suivantes

$$\begin{aligned} a_{ij} &= a_{mm} & i < j = 1, 2, \dots, N-1, \\ a_{iN} &= a_{mM} & i < N, \\ b_1 &= b_2 = \dots = b_{N-1} = b, \end{aligned} \quad (6.13)$$

et

$$\begin{aligned} x_{ij,k} &= 0 & i < j < N, k \neq i, k \neq j, \\ x_{iN,k} &= \ell & i < N, k \neq i, k \neq N. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Nous avons ainsi un seul paramètre variationnel ℓ à ajuster et deux valeurs distinctes a_{mm} et a_{mM} pour les a_{ij} .

Les $N + \frac{N(N-1)}{2}$ relations obtenues par identification des deux membres de l'équation (2.5) se réduisent aux 4 relations suivantes

$$\begin{aligned} b + \frac{N-2}{4}a_{mm} + \frac{1}{4}a_{mM} + \frac{N-2}{4}\ell^2 a_{mM} &= \frac{1}{2m}, \\ b_N + \frac{N-1}{4}a_{mM} &= \frac{1}{2M}, \\ 2b - \frac{1}{2}a_{mm} + \ell a_{mM} + \frac{N-3}{2}\ell^2 a_{mM} &= 0, \\ b + b_N - \frac{1}{2}a_{mM} - \frac{N-2}{2}\ell a_{mM} &= 0. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Les équations (6.15) peuvent être considérées comme un système de quatre équations à quatre inconnues a_{mm} , a_{mM} , b , b_N , avec un paramètre ℓ . La résolution de ce système est triviale et donne pour a_{mm} et a_{mM} les expressions suivantes

$$\begin{aligned} a_{mm}(\ell) &= 2 \frac{(\ell+1)(\ell N - 3\ell + 1 + N)M - (\ell-1)^2 m}{(\ell N + N - 2\ell)^2 m M}, \\ a_{mM}(\ell) &= 2 \frac{(N-1)m + M}{(\ell N + N - 2\ell)^2 m M}. \end{aligned} \quad (6.16)$$

La borne inférieure optimisée sera obtenue en maximisant une somme d'énergies de systèmes à deux corps par rapport au paramètre variationnel ℓ :

$$\begin{aligned} E_{olb} &= \max_{\ell} \left[\sum_{i < j=1}^{N-1} E^{(2)} [a_{mm}(\ell)] + \sum_{i=1}^{N-1} E^{(2)} [a_{mM}(\ell)] \right] \\ &= \max_{\ell} \left[\frac{N(N-1)}{2} E^{(2)} [a_{mm}(\ell)] + (N-1) E^{(2)} [a_{mM}(\ell)] \right]. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Dans le cas de potentiels en loi de puissance

$$\begin{aligned} V_{ij}(\vec{r}_{ij}) &= V_{mm}(\vec{r}_{ij}) = \lambda_{mm} r_{ij}^{\nu_{mm}} & i < j < N, \\ V_{iN}(\vec{r}_{iN}) &= V_{mM}(\vec{r}_{iN}) = \lambda_{mM} r_{iN}^{\nu_{mM}} & i < N, \end{aligned} \quad (6.18)$$

l'expression (6.17) se simplifie en :

$$\begin{aligned} E_{olb} &= \max_{\ell} \left[\sum_{i < j=1}^{N-1} E^{(2)}(a_{mm}(\ell), \lambda_{mm}, \nu_{mm}) + \sum_{i=1}^{N-1} E^{(2)}(a_{mM}(\ell), \lambda_{mM}, \nu_{mM}) \right], \\ &= \max_{\ell} \left[\frac{(N-1)(N-2)}{2} |\lambda_{mm}|^{\frac{2}{\nu_{mm}+2}} (a_{mm}(\ell))^{\frac{\nu_{mm}}{\nu_{mm}+2}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{mm}) \right. \\ &\quad \left. + (N-1) |\lambda_{mM}|^{\frac{2}{\nu_{mM}+2}} (a_{mM}(\ell))^{\frac{\nu_{mM}}{\nu_{mM}+2}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{mM}) \right]. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Pour obtenir (6.19), on a fait usage des lois d'échelle (1.157).

Dans le cas de l'oscillateur harmonique, c'est à dire pour $\nu_{mm} = \nu_{mM} = 2$, on définit

$$E(\ell) := \frac{(N-1)(N-2)}{2} \sqrt{\lambda_{mm} a_{mm}(\ell)} E^{(2)}(1, 1, 2) + (N-1) \sqrt{\lambda_{mM} a_{mM}(\ell)} E^{(2)}(1, 1, 2), \quad (6.20)$$

où $E^{(2)}(a, \lambda, 2)$, avec λ positif, dénote l'énergie du niveau fondamental de l'oscillateur à deux corps dont l'Hamiltonien $H_{oh}^{(2)}$ est donné par (6.10).

La borne inférieure optimisée E_{olb} , sera donc

$$E_{olb} = \max_{\ell} E(\ell). \quad (6.21)$$

En utilisant le résultat bien connu (6.11), l'équation (6.20) se réduit à

$$E(\ell) = 3 \frac{(N-1)(N-2)}{2} \sqrt{\lambda_{mm}} \sqrt{a_{mm}(\ell)} + 3(N-1) \sqrt{\lambda_{mM}} \sqrt{a_{mM}(\ell)}. \quad (6.22)$$

Avant d'aller plus loin, il est plus commode de mettre $a_{mm}(\ell)$ et $a_{mM}(\ell)$ (6.16) sous la forme

$$\begin{aligned} a_{mm}(\ell) &= \frac{2}{(N-1)m} + \frac{2(\ell-1)^2((N-1)m+M)}{(N-\ell+(N-1)\ell)^2(N-1)mM}, \\ a_{mM}(\ell) &= \frac{4}{(N-\ell+(N-1)\ell)^2} \frac{(N-1)m+M}{2mM}. \end{aligned} \quad (6.23)$$

Il est également plus convenable de faire le changement de variable suivant :

$$h := \frac{(N-2)(1-\ell)}{(2-N)(1-\ell) + 2(N-1)}. \quad (6.24)$$

En terme du nouveau paramètre h , a_{mm} et a_{mM} s'écrivent

$$a_{mm}(h) = \frac{2}{(N-1)m} - \frac{2((N-1)m+M)}{(N-2)^2(N-1)mM}h^2, \quad (6.25)$$

$$a_{mM}(h) = \frac{((N-1)m+M)}{2mM(N-1)^2}(1+h)^2, \quad (6.26)$$

et la borne inférieure optimisée E_{olb} peut s'écrire comme :

$$E_{olb} = \max_h E(h), \quad (6.27)$$

où

$$E(h) = 3(N-1) \left(\frac{(N-2)}{2} \sqrt{\lambda_{mm}} \sqrt{\frac{2}{(N-1)m} - \frac{2((N-1)m+M)}{(N-2)^2(N-1)mM}h^2} + \sqrt{\lambda_{mM}} \sqrt{\frac{(N-1)m+M}{2mM(N-1)^2}} \sqrt{(1+h)^2} \right). \quad (6.28)$$

Faisons maintenant la conjecture que $(1+h)$ est positif lorsque $E(h)$ atteint son maximum. Nous avons

$$\frac{\partial E(h)}{\partial h} = 3(N-1) \left\{ -\sqrt{\lambda_{mm}} \frac{(N-1)m+M}{(N-2)(N-1)mM} \frac{h}{\sqrt{\frac{2}{(N-1)m} - \frac{2((N-1)m+M)h^2}{(N-2)^2(N-1)mM}}} + \sqrt{\lambda_{mM}} \sqrt{\frac{(N-1)m+M}{2mM(N-1)^2}} \right\}. \quad (6.29)$$

En posant $\frac{\partial E(h)}{\partial h}$ égale à zéro, on trouve la valeur h_0 de h correspondant au maximum de $E(h)$

$$h_0 = (N-2) \sqrt{\frac{M}{(N-1)m+M}} \sqrt{\frac{\lambda_{mM}}{(N-1)\lambda_{mm} + \lambda_{mM}}}. \quad (6.30)$$

En substituant à h_0 son expression, (6.30), dans $E(h)$, équation (6.28), on trouve pour

la borne inférieure optimisée E_{olb} , l'expression suivante

$$E_{olb} = E(h_0) = \frac{3}{\sqrt{2}} \left\{ (N-2) \sqrt{\frac{(N-1)\lambda_{mm} + \lambda_{mM}}{m}} + \sqrt{\frac{\lambda_{mM}}{m}} \sqrt{\frac{(N-1)m + M}{M}} \right\}, \quad (6.31)$$

qui est identique à l'énergie du niveau fondamental de l'oscillateur harmonique à N corps, équation (5.18). Ainsi la borne inférieure optimisée E_{olb} , équation (6.31), est saturée dans le cas de forces harmonique pour la configuration $(n \times m, 1 \times M)$.

6.3 Configuration $(n \times m, n' \times M)$

On peut sans perte de généralité numéroter les n particules de même masse m de 1 à n et les n' particules de même masse M de $n+1$ à N . Evidemment $n + n' = N$.

$$\begin{aligned} m_1 &= m_2 = \dots = m_n = m; \\ m_{n+1} &= m_{n+2} = \dots = m_N = M. \end{aligned} \quad (6.32)$$

Comme le système est invariant dans toute permutation des particules de même masse, alors

$$\begin{aligned} a_{ij} &= a_{mm}, & i < j \leq n, \\ a_{ij} &= a_{mM}, & i = 1, \dots, n, j = n+1, \dots, N, \\ a_{ij} &= a_{MM}, & n < i < j \leq N, \end{aligned} \quad (6.33)$$

$$\begin{aligned} b_1 &= b_2 = \dots = b_n = b_m, \\ b_{n+1} &= b_{n+2} = \dots = b_N = b_M, \end{aligned} \quad (6.34)$$

et

$$\begin{aligned} x_{ij,q} &= 0, & i < j \leq n \text{ ou } n < i < j \leq N, \\ x_{ij,q} &= \ell, & i = 1, \dots, n, j = n+1, \dots, N, 1 \leq q \leq n, q \neq i, \\ x_{ij,q} &= p, & i = 1, \dots, n, j = n+1, \dots, N, n < q \leq N, q \neq j. \end{aligned} \quad (6.35)$$

Nous avons dans ce cas trois valeurs différentes a_{mm} , a_{mM} , a_{MM} , de a_{ij} , et deux paramètres variationnels ℓ et p . Les $N + \frac{N(N-1)}{2}$ relations obtenues par identification des deux membres de l'équation (2.5) se réduisent dans ce cas à 5 relations

$$\begin{aligned}
b_m + \frac{1}{4}(n-1)a_{mm} + \frac{n'}{4}(\ell^2(n-1)+1)a_{mM} &= \frac{1}{2m}, \\
b_M + \frac{n}{4}(p^2(n'-1)+1)a_{mM} + \frac{1}{4}(n'-1)a_{MM} &= \frac{1}{2M}, \\
2b_m - \frac{1}{2}a_{mm} + \left(\ell + \frac{\ell^2}{2}(n-2)\right)n'a_{mM} &= 0, \\
2b_M - \frac{1}{2}a_{MM} + \left(p + \frac{p^2}{2}(n'-2)\right)na_{mM} &= 0, \\
b_m + b_M + \frac{1}{2}((n'-1)p - 1 - \ell(n-1) + p\ell(n-1)(n'-1))a_{mM} &= 0. \quad (6.36)
\end{aligned}$$

Les équations (6.36) peuvent être considérées comme un système linéaire de cinq équations à cinq inconnues, a_{mm} , a_{mM} , a_{MM} , b_m et b_M . La résolution de ce système mène aux expressions suivantes pour a_{mm} , a_{mM} , et a_{MM} en termes de ℓ et p

$$a_{mm}(\ell, p) = \frac{2}{nm} - \frac{2(N-n)((N-n)M + nm)(\ell-1)^2}{nmM(N - (N-n)\ell + n(N-n)\ell - n(N-n)p + np)^2}, \quad (6.37)$$

$$a_{mM}(\ell, p) = 2 \frac{nm + (N-n)M}{mM(N - (N-n)\ell + n(N-n)\ell - n(N-n)p + np)^2}, \quad (6.38)$$

$$a_{MM}(\ell, p) = \frac{2}{(N-n)M} - \frac{2n(nm + (N-n)M)(p+1)^2}{(N-n)mM(N - (N-n)\ell + n(N-n)\ell - n(N-n)p + np)^2}. \quad (6.39)$$

Dans les expressions précédentes on a remplacé n' par $N - n$.

La borne inférieure optimisée sera obtenue en maximisant la somme des énergies des systèmes à deux corps par rapport aux paramètres variationnels ℓ et p :

$$\begin{aligned}
E_{olb} &= \max_{\ell, p} \left[\sum_{i < j=1}^n E^{(2)}[a_{mm}(\ell, p)] + \sum_{i=1}^n \sum_{j=n+1}^{n+n'} E^{(2)}[a_{mM}(\ell, p)] + \sum_{i < j=n+1}^{n+n'} E^{(2)}[a_{MM}(\ell, p)] \right] \\
&= \max_{\ell, p} \left[\frac{n(n-1)}{2} E^{(2)}[a_{mm}(\ell, p)] + nn' E^{(2)}[a_{mM}(\ell, p)] + \frac{n'(n'-1)}{2} E^{(2)}[a_{MM}(\ell, p)] \right]. \quad (6.40)
\end{aligned}$$

Dans le cas de potentiels en loi de puissance

$$\begin{aligned}
V_{ij}(\vec{r}_{ij}) &= V_{mm}(\vec{r}_{ij}) = \lambda_{mm} r_{ij}^{\nu_{mm}} & i < j < n, \\
V_{ij}(\vec{r}_{ij}) &= V_{mM}(\vec{r}_{iN}) = \lambda_{mM} r_{iN}^{\nu_{mM}} & i < n, \quad n+1 < j < N \\
V_{ij}(\vec{r}_{ij}) &= V_{MM}(\vec{r}_{iN}) = \lambda_{MM} r_{iN}^{\nu_{MM}} & n+1 < i < j < N
\end{aligned} \tag{6.41}$$

(6.40) se réduit à

$$\begin{aligned}
E_{olb} &= \max_{\ell, p} \left[\frac{n(n-1)}{2} E^{(2)}(a_{mm}(\ell, p), \lambda_{mm}, \nu_{mm}) + nn' E^{(2)}(a_{mM}(\ell, p), \lambda_{mM}, \nu_{mM}) \right. \\
&\quad \left. + \frac{n'(n'-1)}{2} E^{(2)}(a_{MM}(\ell, p), \lambda_{MM}, \nu_{MM}) \right] \\
&= \max_{\ell, p} \left[\frac{n(n-1)}{2} |\lambda_{mm}|^{\frac{2}{\nu_{mm}+2}} (a_{mm}(\ell, p))^{\frac{\nu_{mm}}{\nu_{mm}+2}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{mm}) \right. \\
&\quad + nn'' |\lambda_{mM}|^{\frac{2}{\nu_{mM}+2}} (a_{mM}(\ell, p))^{\frac{\nu_{mM}}{\nu_{mM}+2}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{mM}) \\
&\quad \left. + \frac{n'(n'-1)}{2} |\lambda_{MM}|^{\frac{2}{\nu_{MM}+2}} (a_{MM}(\ell, p))^{\frac{\nu_{MM}}{\nu_{MM}+2}} E^{(2)}(1, 1, \nu_{MM}) \right]. \tag{6.42}
\end{aligned}$$

De nouveau, pour obtenir (6.42), on fait usage des lois d'échelle (1.157).

La borne inférieure optimisée E_{olb} pour l'oscillateur harmonique à N corps $\nu_{mm} = \nu_{mM} = \nu_{MM} = 2$, peut être mise sous la forme

$$E_{olb} = \max_{\ell, p} E(\ell, p), \tag{6.43}$$

où on a défini $E(\ell, p)$ comme

$$\begin{aligned}
E(\ell, p) := & 3 \left(\frac{n(n-1)}{2} \sqrt{\lambda_{mm} a_{mm}(\ell, p)} + \frac{(N-n)(N-n-1)}{2} \sqrt{\lambda_{MM} a_{MM}(\ell, p)} \right. \\
& \left. + n(N-n) \sqrt{\lambda_{mM} a_{mM}(\ell, p)} \right). \tag{6.44}
\end{aligned}$$

$a_{mm}(\ell, p)$, $a_{mM}(\ell, p)$, et $a_{MM}(\ell, p)$, sont données respectivement par les équations (6.37), (6.38), et (6.39).

Faisons maintenant le changement de variables

$$h = \frac{(n-1)(N-n)(1-\ell)}{(N-n)(1-\ell) + n(N-n)(\ell-p) + n(1+p)}, \tag{6.45}$$

$$c = \frac{n(N-n-1)(1+p)}{(N-n)(1-\ell) + n(N-n)(\ell-p) + n(1+p)}. \tag{6.46}$$

En termes des nouveaux paramètres h , équation (6.45), et c , équation (6.46), a_{mm} , a_{mM} , et a_{MM} peuvent être réécrites comme suit

$$a_{mm}(h, c) = \frac{2}{nm} - \frac{2(nm + (N-n)M)}{n(N-n)(n-1)^2 mM} h^2, \quad (6.47)$$

$$a_{mM}(h, c) = \frac{nm + (N-n)M}{2n^2(N-n)^2 mM} (1+h+c)^2, \quad (6.48)$$

$$a_{MM}(h, c) = \frac{2}{(N-n)M} - \frac{2(nm + (N-n)M)}{n(N-n)(N-n-1)^2 mM} c^2. \quad (6.49)$$

Une fois exprimée en termes de h et c , $E(\ell, p)$, équation (6.44), prend l'expression suivante

$$\begin{aligned} E(h, c) = & \frac{3}{2} \left(n(n-1) \sqrt{\lambda_{mm}} \sqrt{\frac{2}{nm}} \sqrt{1 - \frac{nm + (N-n)M}{(N-n)(n-1)^2 M} h^2} \right. \\ & + (N-n)(N-n-1) \sqrt{\lambda_{MM}} \sqrt{\frac{2}{(N-n)M}} \sqrt{1 - \frac{nm + (N-n)M}{n(N-n-1)^2 m} c^2} \\ & \left. + \sqrt{\lambda_{mM}} \sqrt{\frac{2(nm + (N-n)M)}{mM}} \sqrt{(1+h+c)^2} \right), \end{aligned} \quad (6.50)$$

et la borne optimisée E_{ob} sera

$$E_{ob} = \max_{h,c} E(h, c). \quad (6.51)$$

Calculons maintenant les dérivées partielles de $E(h, c)$ par rapport à h et c . Nous obtenons

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(h, c)}{\partial h} = & \frac{3}{\sqrt{2}} \left(-n(n-1) \sqrt{\frac{\lambda_{mm}}{nm}} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{nm + (N-n)M}{(n-1)^2(N-n)M} h^2}} \frac{nm + (N-n)M}{(n-1)^2(N-n)M} h \right. \\ & \left. + \sqrt{\lambda_{mM}} \sqrt{\frac{nm + (N-n)M}{mM}} \right) \end{aligned} \quad (6.52)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(h, c)}{\partial c} = & \frac{3}{\sqrt{2}} \left(-(N-n)(N-n-1) \sqrt{\frac{\lambda_{MM}}{(N-n)M}} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{nm + (N-n)M}{(N-n-1)^2 nm} c^2}} \frac{nm + (N-n)M}{(N-n-1)^2 nm} c \right. \\ & \left. + \sqrt{\lambda_{mM}} \sqrt{\frac{nm + (N-n)M}{mM}} \right), \end{aligned} \quad (6.53)$$

où nous avons conjecturé que $1 + h + c > 0$ au voisinage du maximum de $E(h, c)$, équation (6.50). En imposant à $\partial E(h, c)/\partial h$ et à $\partial E(h, c)/\partial c$ d'être simultanément nulles, on obtient pour h , la valeur h_0 et pour c la valeurs c_0 , correspondant au maximum de $E(h, c)$. C'est la borne inférieure optimisée. Un calcul direct mène à

$$h_0 = (N - n)(n - 1) \sqrt{\frac{M}{nm + (N - n)M}} \sqrt{\frac{\lambda_{mM}}{n\lambda_{mm} + (N - n)\lambda_{mM}}} \quad (6.54)$$

$$c_0 = n(N - n - 1) \sqrt{\frac{m}{nm + (N - n)M}} \sqrt{\frac{\lambda_{mM}}{(N - n)\lambda_{MM} + n\lambda_{mM}}}. \quad (6.55)$$

On obtient finalement en remplaçant h_0 et c_0 par leurs expressions explicites, équations (6.54) et (6.55) respectivement, l'expression suivante pour la borne inférieure optimisée E_{olb} ,

$$E_{olb} = E(h_0, c_0) = \frac{3}{\sqrt{2}} \left((n - 1) \sqrt{\frac{n\lambda_{mm} + (N - n)\lambda_{mM}}{m}} + \sqrt{\lambda_{mM}} \sqrt{\frac{nm + (N - n)M}{mM}} + (N - n - 1) \sqrt{\frac{n\lambda_{mM} + (N - n)\lambda_{MM}}{M}} \right), \quad (6.56)$$

qui n'est rien d'autre que l'énergie exact (5.54) de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique à N corps pour la configuration de masse $(n \times m, (N - n) \times M)$, ce qui signifie que la borne inférieure optimisée est saturée pour l'oscillateur harmonique à N corps dans le cas de configurations de masse du type $(n \times m, (N - n) \times M)$.

6.4 Système à N corps avec trois masses distinctes

Il vaut la peine de signaler que la borne inférieure optimisée, ((6.12),(6.31)) pour les deux configurations $(n \times m)$ et $((N - 1) \times m, 1 \times M)$ peuvent être considérer comme des cas particuliers de la configuration $(n \times m, (N - n) \times M)$ équation (6.56) malgré que ces trois bornes sont clairement différentes en ce qui concerne les termes a_{ij} et les paramètres variationnels $x_{ij,k}$. Pour ce fait, il n'est plus nécessaire de considérer toutes les configurations possibles du système à 3 masses distinctes, à savoir $(n_1 \times m_1, 1 \times m_1, 1_1 \times m_1)$, $(n_1 \times m_1, n_2 \times m_2, 1 \times m_3)$ et $(n_1 \times m_1, n_2 \times m_2, n_3 \times m_3)$. Nous ne considérerons donc que la configuration du type le plus général $(n_1 \times m_1, n_2 \times m_2, n_3 \times m_3)$ avec $n_1, n_2, n_3 \geq 2$.

Vue de la complexité du problème à N corps avec trois masses distinctes comparativement à ceux avec une ou deux masses distinctes, il faut adopter une notation plus adéquate :

Les impulsions des particules de même masse m_1 seront représentées par \vec{p}_i ($i = 1, \dots, n_1$), celles des particules de même masse m_2 seront représentées par \vec{p}'_i ($i = 1, \dots, n_2$) et celles des particules de même masse m_3 par \vec{p}''_i ($i = 1, \dots, n_3$).

Les particules seront numérotées séparément dans chaque amas, c'est à dire de 1 à n_1 pour le premier amas, de 1 à n_2 pour le deuxième et de 1 à n_3 pour le troisième amas.

Comme le système est invariant dans toute permutation des particules de même masse, on a alors six paramètres a_{ij} , un pour chaque paire de particules d'un même amas, a_{11} pour les paires du premier amas, a_{22} pour celles du deuxième amas et a_{33} pour les paires du troisième amas. Trois autres paramètres à distinguer pour les paires de particules d'amas différents, c'est à dire a_{ij} (a_{12} , a_{13} et a_{23}) pour les paires composées d'une particule du amas i et une du amas j . Nous avons de plus 3 valeurs différentes des paramètres b_i , à savoir b_i (b_1 , b_2 et b_3) pour les particules du amas i . Les paramètres variationnels seront dans ce cas au nombre de 9.

La décomposition de la partie cinétique de l'Hamiltonien (2.5) pour la configuration $(n_1 \times m_1, n_2 \times m_2, n_3 \times m_3)$ est

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{n_1} \frac{1}{2m_1} \vec{p}_i^2 + \sum_{i=1}^{n_2} \frac{1}{2m_2} \vec{p}'_i{}^2 + \sum_{i=1}^{n_3} \frac{1}{2m_3} \vec{p}''_i{}^2 = \\
& \left(\sum_{i=1}^{n_1} b \vec{p}_i + \sum_{i=1}^{n_2} b' \vec{p}'_i + \sum_{i=1}^{n_3} b'' \vec{p}''_i \right) \left(\sum_{i=1}^{n_1} \vec{p}_i + \sum_{i=1}^{n_2} \vec{p}'_i + \sum_{i=1}^{n_3} \vec{p}''_i \right) \\
& + \frac{a_{11}}{4} \sum_{i<j=1}^{n_1} (\vec{p}_i - \vec{p}_j)^2 + \frac{a_{22}}{4} \sum_{i<j=1}^{n_2} (\vec{p}'_i - \vec{p}'_j)^2 + \frac{a_{33}}{4} \sum_{i<j=1}^{n_3} (\vec{p}''_i - \vec{p}''_j)^2 \\
& + \frac{a_{12}}{4} \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} \left(\vec{p}_i - \vec{p}'_j + c_1 \sum_{k_1 \neq i=1}^{n_1} \vec{p}_i + c_2 \sum_{k_2 \neq j=1}^{n_2} \vec{p}'_{k_2} + c_3 \sum_{k_3=1}^{n_3} \vec{p}''_{k_3} \right)^2 \\
& + \frac{a_{13}}{4} \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_3} \left(\vec{p}_i - \vec{p}''_j + f_1 \sum_{k_1 \neq i=1}^{n_1} \vec{p}_i + f_2 \sum_{k_2=1}^{n_2} \vec{p}'_{k_2} + f_3 \sum_{k_3 \neq j=1}^{n_3} \vec{p}''_{k_3} \right)^2 \\
& + \frac{a_{23}}{4} \sum_{i=1}^{n_2} \sum_{j=1}^{n_3} \left(\vec{p}'_i - \vec{p}''_j + d_1 \sum_{k_1=1}^{n_1} \vec{p}_i + d_2 \sum_{k_2 \neq i=1}^{n_2} \vec{p}'_{k_2} + d_3 \sum_{k_3 \neq j=1}^{n_3} \vec{p}''_{k_3} \right)^2.
\end{aligned} \tag{6.57}$$

L'identification des deux membres de (6.57) donne

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2m_1} = & \frac{a_{11}}{4} (n_1 - 1) + \frac{a_{12}}{4} (n_2 + c_1^2 n_2 (n_1 - 1)) + \frac{a_{13}}{4} (n_3 + f_1^2 n_3 (n_1 - 1)) \\
& + \frac{a_{23}}{4} (d_1^2 n_2 n_3) + b_1
\end{aligned} \tag{6.58}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2m_2} = & \frac{a_{22}}{4} (n_2 - 1) + \frac{a_{12}}{4} (n_1 + c_2^2 n_1 (n_2 - 1)) + \frac{a_{13}}{4} (f_2^2 n_1 n_3) \\
& + \frac{a_{23}}{4} (n_3 + d_2^2 n_3 (n_2 - 1)) + b_2
\end{aligned} \tag{6.59}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2m_3} = & \frac{a_{33}}{4} (n_3 - 1) + \frac{a_{12}}{4} (n_1 n_2 c_3^2) + \frac{a_{13}}{4} (n_1 + f_3^2 n_1 (n_3 - 1)) \\
& + \frac{a_{23}}{4} (n_2 + d_3^2 n_2 (n_3 - 1)) + b_3
\end{aligned} \tag{6.60}$$

respectivement pour les termes en \vec{p}_i^2 , $\vec{p}'_i{}^2$, $\vec{p}''_i{}^2$ et

$$\begin{aligned}
0 = & b_1 + b_2 + \frac{a_{12}}{4} (-2 + 2c_2 (n_2 - 1) - 2c_1 (n_1 - 1) + 2c_1 c_2 (n_1 - 1) (n_2 - 1)) \\
& + \frac{a_{13}}{4} (2f_2 n_3 + 2f_1 f_2 n_3 (n_1 - 1)) + \frac{a_{23}}{4} (2d_1 d_2 n_3 (n_2 - 1) + 2d_1 n_3),
\end{aligned} \tag{6.61}$$

$$\begin{aligned}
0 = & b_1 + b_3 + \frac{a_{12}}{4} (2c_3 n_2 + 2c_1 c_3 n_2 (n_1 - 1)) + \frac{a_{23}}{4} (2d_1 d_3 n_2 (n_3 - 1) - 2d_1 n_2) \\
& + \frac{a_{13}}{4} (-2 + 2f_3 (n_3 - 1) - 2f_1 (n_1 - 1) + 2f_1 f_3 (n_1 - 1) (n_3 - 1)),
\end{aligned} \tag{6.62}$$

$$\begin{aligned}
0 = & b_2 + b_3 + \frac{a_{12}}{4} (-2c_3 n_1 + 2c_2 c_3 n_1 (n_2 - 1)) + \frac{a_{13}}{4} (2f_2 f_3 n_1 (n_3 - 1) - 2f_2 n_1) \\
& + \frac{a_{23}}{4} (-2 + 2d_3 (n_3 - 1) - 2d_2 (n_2 - 1) + 2d_2 d_3 (n_3 - 1) (n_2 - 1))
\end{aligned} \tag{6.63}$$

pour les termes en $\vec{p}_i \cdot \vec{p}'_j$, $\vec{p}_i \cdot \vec{p}''_j$, $\vec{p}'_i \cdot \vec{p}''_j$ respectivement, et pour les termes en

$\vec{p}_i \cdot \vec{p}_j, \vec{p}'_i \cdot \vec{p}'_j, \vec{p}''_i \cdot \vec{p}''_j (i \neq j) :$

$$0 = \frac{a_{11}}{4} (-2) + \frac{a_{12}}{4} (4c_1 n_2 + 2c_1^2 n_2 (n_1 - 2)) + \frac{a_{13}}{4} (4f_1 n_3 + 2f_1^2 n_3 (n_1 - 2)) \quad (6.64)$$

$$+ \frac{a_{23}}{4} (2d_1^2 n_2 n_3) + 2b_1,$$

$$0 = \frac{a_{22}}{4} (-2) + \frac{a_{12}}{4} (-4c_2 n_1 + 2c_2^2 n_1 (n_2 - 2)) + \frac{a_{13}}{4} (2f_2^2 n_1 n_3) \quad (6.65)$$

$$+ \frac{a_{23}}{4} (4d_2 n_3 + 2d_2^2 n_3 (n_2 - 2)) + 2b_2,$$

$$0 = \frac{a_{33}}{4} (-2) + \frac{a_{12}}{4} (2c_3^2 n_1 n_2) + \frac{a_{13}}{4} (-4f_3 n_1 + 2f_3^2 n_1 (n_3 - 2)) \quad (6.66)$$

$$+ \frac{a_{23}}{4} (-4d_3 n_2 + 2d_3^2 n_2 (n_3 - 2)) + 2b_3.$$

Après élimination de b_1, b_2 et b_3 , le système des équations ((6.58) à (6.66)) peut se mettre sous une forme matricielle

$$\boldsymbol{\alpha} = \tilde{\mathbf{D}}\mathbf{A},$$

avec $\alpha_{ij} := \frac{1}{2m_i} + \frac{1}{2m_j}$, donnant ainsi les a_{ij} en faveur de $c_1, c_2, c_3, f_1, f_2, f_3, d_1, d_2$ et d_3

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{22} \\ a_{33} \\ a_{12} \\ a_{13} \\ a_{23} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1} \\ \frac{1}{m_2} \\ \frac{1}{m_3} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_2} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_3} \\ \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \end{pmatrix},$$

d_2 et d_3 :

$$\begin{aligned}
E_{olb} &= \max \left[\sum_{i < j = 1}^{n_1} E^{(2)} [a_{11}] + \sum_{i < j = 1}^{n_2} E^{(2)} [a_{22}] + \sum_{i < j = 1}^{n_3} E^{(2)} [a_{33}] \right. \\
&\quad \left. + \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} E^{(2)} [a_{12}] + \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_3} E^{(2)} [a_{13}] + \sum_{i=1}^{n_2} \sum_{j=1}^{n_3} E^{(2)} [a_{23}] \right] \\
&= \max \left[\frac{n_1(n_1-1)}{2} E^{(2)} [a_{11}] + \frac{n_2(n_2-1)}{2} E^{(2)} [a_{22}] + \frac{n_3(n_3-1)}{2} E^{(2)} [a_{33}] \right. \\
&\quad \left. + n_1 n_2 E^{(2)} [a_{12}] + n_1 n_3 E^{(2)} [a_{13}] + n_2 n_3 E^{(2)} [a_{23}] \right], \tag{6.68}
\end{aligned}$$

qui se réduit, dans le cas de forces dérivants de potentiels en loi de puissance (1.156), à

$$\begin{aligned}
E_{olb} &= \max \left[\frac{n_1(n_1-1)}{2} E^{(2)} (a_{11}, \lambda_{11}, \nu_{11}) + \frac{n_2(n_2-1)}{2} E^{(2)} (a_{22}, \lambda_{22}, \nu_{22}) \right. \\
&\quad \left. + \frac{n_3(n_3-1)}{2} E^{(2)} (a_{33}, \lambda_{33}, \nu_{33}) \right. \\
&\quad \left. + n_1 n_2 E^{(2)} (a_{12}, \lambda_{12}, \nu_{12}) + n_1 n_3 E^{(2)} (a_{13}, \lambda_{13}, \nu_{13}) + n_2 n_3 E^{(2)} (a_{23}, \lambda_{23}, \nu_{23}) \right],
\end{aligned}$$

ou encore

$$\begin{aligned}
E_{olb} &= \max \left[\frac{n_1(n_1-1)}{2} |\lambda_{11}|^{\frac{2}{\nu_{11}+2}} (a_{11})^{\frac{\nu_{11}}{\nu_{11}+2}} E^{(2)} (1, 1, \nu_{11}) \right. \\
&\quad \left. + \frac{n_2(n_2-1)}{2} |\lambda_{22}|^{\frac{2}{\nu_{22}+2}} (a_{22})^{\frac{\nu_{22}}{\nu_{22}+2}} E^{(2)} (1, 1, \nu_{22}) \right. \\
&\quad \left. + \frac{n_3(n_3-1)}{2} |\lambda_{33}|^{\frac{2}{\nu_{33}+2}} (a_{33})^{\frac{\nu_{33}}{\nu_{33}+2}} E^{(2)} (1, 1, \nu_{33}) \right. \\
&\quad \left. + n_1 n_2 |\lambda_{12}|^{\frac{2}{\nu_{12}+2}} (a_{12})^{\frac{\nu_{12}}{\nu_{12}+2}} E^{(2)} (1, 1, \nu_{12}) + n_1 n_3 |\lambda_{13}|^{\frac{2}{\nu_{13}+2}} (a_{13})^{\frac{\nu_{13}}{\nu_{13}+2}} E^{(2)} (1, 1, \nu_{13}) \right] \\
&\quad \left. + n_2 n_3 |\lambda_{23}|^{\frac{2}{\nu_{23}+2}} (a_{23})^{\frac{\nu_{23}}{\nu_{23}+2}} E^{(2)} (1, 1, \nu_{23}) \right]. \tag{6.69}
\end{aligned}$$

L'équation (6.69) est à la base de tout les calculs numériques dans ce manuscrit concernant la borne inférieure optimisée qui sont des cas particuliers du système étudié ci dessus. Les valeurs des énergies exactes à deux corps $E^{(2)} [1, 1, \nu]$ seront calculer séparément et par des méthodes de résolution numériques de l'équation de Schrödinger comme par exemple la méthode de Multhopp présentée en appendice.

Il vaut la peine de rappeler que cette maximisation, équation (6.69), se fait sur 9 paramètres ce qui ne serait jamais facile à achever. La difficulté du problème peut être réduite considérablement si on tient en main les contraintes dynamiques universelles et réduire ainsi le nombre de paramètres variationnels indépendants. Nous avons 4 contraintes dynamiques universelles à dériver.

La matrice $2\widetilde{\mathbf{M}}$ qui est une matrice 6×9 se réduit dans ce cas à

$$2\widetilde{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} 2n_2(c_1 - 1) & 0 & 0 \\ 0 & 2n_1(c_2 + 1) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ (n_1 - 1)(n_2c_1 + 1 - c_2n_2 + c_2) & (n_2 - 1)(c_2n_1 - 1 - c_1n_1 + c_1) & 0 \\ n_2(n_1 - 1)(c_1 - c_3) & 0 & n_2(n_1c_3 - 1 - c_1n_1 + c_1) \\ 0 & -n_1(-c_2 + c_3)(n_2 - 1) & n_1(1 - c_2n_2 + c_2 + c_3n_2) \\ \\ 2n_3(f_1 - 1) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2n_1(f_3 + 1) \\ n_3(f_1n_1 - f_1 - f_2n_1 + f_2) & n_3(f_2n_1 - 1 - f_1n_1 + f_1) & 0 \\ (n_1 - 1)(f_3 + f_1n_3 - f_3n_3 + 1) & 0 & (n_3 - 1)(f_1 - f_1n_1 + f_3n_1 - 1) \\ 0 & n_1(f_2n_3 + 1 - f_3n_3 + f_3) & n_1(f_3n_3 - f_3 - f_2n_3 + f_2) \\ \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2n_3(d_2 - 1) & 0 \\ 0 & 0 & 2n_2(d_3 + 1) \\ n_3(d_2 + d_1n_2 - d_2n_2 - 1) & n_3(d_1 - d_2 - d_1n_2 + d_2n_2) & 0 \\ n_2(d_3 + d_1n_3 - d_3n_3 + 1) & 0 & n_2(d_1 - d_3 - d_1n_3 + d_3n_3) \\ 0 & (n_2 - 1)(d_3 + d_2n_3 - d_3n_3 + 1) & (n_3 - 1)(d_2 - d_2n_2 + d_3n_2 - 1) \end{pmatrix}.$$

Au maximum de la borne inférieure la matrice $\widetilde{\mathbf{M}}$ (ou $2\widetilde{\mathbf{M}}$) doit être de rang 5 au

plus, ce qui permet de tirer 4 contraintes dynamiques universelles

$$\begin{aligned}
 f_1 &= \frac{-c_1 - f_2 + c_3 + c_1 f_2}{c_3 - 1}, \\
 d_2 &= -\frac{-f_2 c_3 + c_2 f_2 + f_2 - c_2}{f_2 c_3 - 1}, \\
 f_3 &= \frac{f_2 c_3 + f_2 d_3 c_3 - c_3 - d_3}{c_3 - 1}, \\
 d_1 &= \frac{c_3 - f_2}{f_2 c_3 - 1},
 \end{aligned} \tag{6.70}$$

où on a choisit c_1, c_2, c_3, f_2 et d_2 comme paramètres indépendants.

Il vaut la peine de remarquer que les deux systèmes (4.10) et (6.70) sont équivalents si on remplace dans (4.10) x par c_1 , w par c_2 , y par f_1 , t par f_3 , e_1 par d_1 , d_2 par f_2 , z par d_2 et u par d_3 . Ces contraintes dynamiques universelles (6.70) ne sont rien d'autres que les contraintes dynamiques universelles déjà obtenues pour la configuration (4.10).

Chapitre 7

Comparaison numérique des bornes inférieures

Ce chapitre est consacré à la comparaison numérique de différentes bornes inférieures, bornes inférieures optimisée E_{olb} (6.69), améliorée $E_{améliorée}$ (1.192) et naïve $E_{naïve}$ (1.170), pour des systèmes à N corps. On s'est limité à la présentation des cas $N = 5, 6$ et 7 , c'est à dire les cas à cinq, six et sept corps, en considérant des interactions à deux corps dérivant de potentiels en loi de puissance avec le même exposant et même intensité pour les paires de particules

$$v_{ij} = v, \quad \lambda_{ij} = \text{signe}(v), \quad i < j = 1, \dots$$

On a considéré toutes les configurations possibles jusqu'à la limite de 3 masses distinctes et ce pour différentes valeurs des masses des particules dans un système d'unités où $\hbar = 1$. Nous avons quatre formes représentatives du potentiel en loi de puissance, à savoir le potentiel harmonique $v = 2$, le potentiel linéaire $v = 1$, le potentiel Martin $v = 0.1$ et enfin le potentiel coulombien $v = -1$. Nous allons considéré tour à tour les systèmes à 5, à 6 et à 7 corps.

7.1 Système à cinq corps

Il y a deux configurations possibles avec deux masses distinctes, à savoir $(4 \times m_1, m_5)$ et $(3 \times m_1, 2 \times m_4)$ et deux configurations ayant trois masses distinctes $(3 \times m_1, 1 \times m_4, 1 \times m_5)$ et $(2 \times m_1, 2 \times m_3, 1 \times m_5)$.

7.1.1 Deux masses distinctes

Pour les deux configurations $(4 \times m_1, m_5)$ et $(3 \times m_1, 2 \times m_4)$, nous avons fixé la valeur de $m_1 = 1$ et varié m_5 .

1. Configurations $(4 \times m_1, m_5)$ $m_1=m_2=m_3=m_4=1$,

$v = 2$				$v = 1$			
m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	51.64	55.51	56.71	0.01	30.61	32.96	33.16
0.10	23.07	27.15	27.81	0.10	19.24	21.69	21.90
0.50	16.35	20.49	20.59	0.50	15.58	18.13	18.18
1.00	15.00	18.97	18.97	1.00	14.73	17.23	17.23
3.00	13.90	17.03	17.47	3.00	13.98	16.02	16.29
10.0	13.45	14.69	16.74	10.0	13.66	14.40	15.81
100	13.26	10.90	16.39	100	13.53	11.13	15.57
500	13.25	9.602	16.36	500	13.52	9.634	15.55
∞	13.24	8.485	16.35	∞	13.51	7.423	15.54

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	12.52	12.75	12.75	0.01	-6.079	-3.086	-3.080
0.10	11.96	12.20	12.21	0.10	-6.727	-3.753	-3.742
0.50	11.66	11.92	11.92	0.50	-8.667	-5.375	-5.369
1.00	11.57	11.83	11.83	1.00	-10.00	-6.250	-6.250
3.00	11.48	11.71	11.73	3.00	-12.00	-7.875	-7.464
10.0	11.44	11.51	11.68	10.0	-13.27	-12.81	-8.265
100	11.42	10.92	11.65	100	-13.92	-80.04	-8.712
500	11.42	10.48	11.65	500	-13.98	-380.0	-8.757
∞	11.42	4.782	11.65	∞	-14.00	$-\infty$	-8.769

2. Configuration ($3 \times m_1, 2 \times m_4$) $m_1=m_2=m_3=1, m_4= m_5$ variables

$v = 2,$				$v = 1$			
m_4	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_4	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	83.46	83.74	93.79	0.01	43.92	44.15	47.76
0.05	40.37	43.58	47.40	0.05	27.77	29.49	31.03
0.10	30.35	34.24	36.49	0.10	23.19	25.34	26.29
0.20	23.44	27.73	28.84	0.20	19.68	22.13	22.63
0.50	17.64	21.99	22.20	0.50	16.39	19.00	19.10
1.00	15.00	18.97	18.97	1.00	14.73	17.23	17.23
2.00	13.35	16.62	16.81	2.00	13.62	15.77	15.88
10.0	11.65	12.77	14.20	10.0	12.34	13.13	14.10
100	11.04	10.21	12.98	100	11.77	10.86	13.12

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_4	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_4	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	13.28	13.33	13.51	0.01	-3.129	-1.599	-1.237
0.05	12.57	12.72	12.80	0.05	-3.621	-1.972	-1.673
0.10	12.29	12.48	12.53	0.10	-4.191	-2.393	-2.168
0.20	12.03	12.25	12.29	0.20	-5.200	-3.117	-2.988
0.50	11.74	12.00	12.00	0.50	-7.500	-4.667	-4.635
1.00	11.57	11.83	11.83	1.00	-10.00	-6.250	-6.250
2.00	11.44	11.68	11.69	2.00	-13.00	-8.167	-8.058
10.0	11.25	11.36	11.48	10.0	-23.91	-17.20	-12.76
100	11.12	10.91	11.32	100	-114.9	-107.5	-36.05

7.1.2 Trois masses distinctes

Nous avons fixé m_1 à 1 et celle de m_3 à 2 et varié m_5 .

1. **Configurations** ($3 \times m_1, 1 \times m_4, 1 \times m_5$). $m_1=m_2=m_3=1, m_4=2, m_5$ variable

$v = 2,$				$v = 1$			
m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	51.01	53.90	55.71	0.01	30.20	32.10	32.60
0.10	22.39	25.83	26.80	0.10	18.79	20.92	21.31
0.50	15.59	19.20	19.55	0.50	15.08	17.36	17.54
1.00	14.20	17.74	17.90	1.00	14.19	16.47	16.57
3.00	13.04	16.00	16.36	3.00	13.39	15.37	15.58
10.0	12.56	13.96	15.59	10.0	13.04	13.95	15.06
100.	12.35	10.33	15.21	100.	12.89	10.80	14.80
500.	12.33	9.011	15.17	500.	12.87	9.292	14.77
∞	12.33	7.864	15.16	∞	12.87	7.040	14.77

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	12.47	12.68	12.70	0.01	-7.079	-3.635	-3.569
0.10	11.91	12.13	12.15	0.10	-7.736	-4.360	-4.243
0.50	11.60	11.84	11.86	0.50	-9.800	-6.169	-6.029
1.00	11.50	11.75	11.76	1.00	-11.33	-7.167	-7.062
3.00	11.41	11.64	11.66	3.00	-13.90	-8.877	-8.572
10.0	11.36	11.46	11.60	10.0	-15.79	-13.53	-9.652
100.	11.34	10.90	11.57	100.	-16.86	-76.93	-10.30
500.	11.33	10.46	11.56	500.	-16.97	-360.2	-10.37
∞	11.33	4.744	11.56	∞	-17.00	$-\infty$	-10.39

2. **Configurations** ($2 \times m_1, 2 \times m_3, 1 \times m_5$). $m_1=m_2=1, m_3=m_4=2, m_5$ variable

$v = 2,$				$v = 1$			
m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	50.34	52.88	54.67	0.01	29.75	31.50	32.01
0.10	21.67	24.77	25.74	0.10	18.31	20.29	20.68
0.50	14.79	18.08	18.47	0.50	14.54	16.67	16.87
1.00	13.35	16.62	16.81	1.00	13.62	15.77	15.88
3.00	12.14	14.98	15.23	3.00	12.77	14.71	14.86
10.0	11.62	13.16	14.43	10.0	12.38	13.43	14.30
100.	11.40	9.707	14.02	100.	12.21	10.43	14.01
500.	11.38	8.397	13.98	500.	12.19	8.921	13.98
∞	11.38	7.243	13.97	∞	12.19	6.657	13.97

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	12.42	12.63	12.65	0.01	-8.413	-4.262	-4.209
0.10	11.85	12.07	12.09	0.10	-9.078	-5.017	-4.892
0.50	11.54	11.77	11.79	0.50	-11.27	-6.998	-6.848
1.00	11.44	11.68	11.69	1.00	-13.00	-8.167	-8.058
3.00	11.33	11.57	11.58	3.00	-16.13	-10.10	-9.917
10.0	11.27	11.40	11.51	10.0	-18.64	-14.66	-11.34
100.	11.25	10.86	11.48	100.	-20.14	-76.69	-12.23
500.	11.25	10.42	11.47	500.	-20.29	-354.4	-12.33
∞	11.24	4.705	11.47	∞	-20.33	$-\infty$	-12.36

7.2 Système à six corps

Il y a trois configurations possibles avec deux masses distinctes, à savoir $(5 \times m_1, m_6)$, $(4 \times m_1, 2 \times m_5)$ et $(3 \times m_1, 3 \times m_4)$, et trois configurations avec trois masses distinctes $(4 \times m_1, 1 \times m_5, 1 \times m_6)$, $(3 \times m_1, 2 \times m_4, 1 \times m_6)$ et $(2 \times m_1, 2 \times m_3, 2 \times m_5)$.

7.2.1 Deux masses distinctes

Pour les configurations $(5 \times m_1, m_6)$, $(4 \times m_1, 2 \times m_5)$ et $(3 \times m_1, 3 \times m_4)$, nous avons fixé la valeur de m_1 à 1 et varié m_6 .

1. Configurations $(5 \times m_1, m_6)$, $m_1 = \dots = m_5 = 1$, m_6 variable

$v = 2$				$v = 1$			
m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	61.09	66.82	68.27	0.01	38.94	42.55	42.81
0.10	29.15	35.12	35.93	0.10	25.74	29.49	29.75
0.50	21.63	27.68	27.82	0.50	21.50	25.37	25.43
1.00	20.12	25.98	25.98	1.00	20.51	24.32	24.32
3.00	18.89	23.66	24.25	3.00	19.65	22.83	23.20
10.0	18.39	20.48	23.38	10.0	19.27	20.58	22.61
100	18.18	14.59	22.96	100	19.12	15.43	22.32
500	18.16	12.46	22.92	500	19.10	12.96	22.29
∞	18.16	10.61	22.91	∞	19.10	9.279	22.28

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	18.34	18.73	18.73	0.01	-12.63	-6.385	-6.375
0.10	17.65	18.05	18.06	0.10	-13.64	-7.429	-7.412
0.50	17.28	17.70	17.70	0.50	-16.67	-9.931	-9.921
1.00	17.17	17.59	17.59	1.00	-18.75	-11.25	-11.25
3.00	17.06	17.43	17.47	3.00	-21.88	-13.75	-13.07
10.0	17.01	17.14	17.40	10.0	-23.86	-21.85	-14.28
100	16.99	16.20	17.37	100	-24.88	-133.8	-14.97
500	16.98	15.47	17.36	500	-24.98	-633.8	-15.04
∞	16.98	5.978	17.36	∞	-25.00	$-\infty$	-15.06

2. Configurations ($4 \times m_1, 2 \times m_5$), $m_1=\dots=m_4=1, m_5= m_6$ variable

$v = 2$				$v = 1$			
m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	97.74	100.3	110.1	0.01	54.98	56.60	60.09
0.05	48.83	54.02	58.04	0.05	35.87	38.89	40.49
0.10	37.46	43.30	45.77	0.10	30.46	33.91	34.94
0.20	29.64	35.87	37.16	0.20	26.32	30.08	30.65
0.50	23.09	29.38	29.65	0.50	22.45	26.39	26.52
1.00	20.12	25.98	25.98	1.00	20.51	24.32	24.32
2.00	18.29	23.23	23.51	2.00	19.23	22.57	22.73
10.0	16.43	18.11	20.52	10.0	17.80	18.96	20.64
100	15.81	14.08	19.14	100	17.21	15.29	19.54

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	19.33	19.52	19.70	0.01	-7.711	-3.675	-3.190
0.05	18.43	18.72	18.81	0.05	-8.515	-4.331	-3.924
0.10	18.08	18.41	18.47	0.10	-9.443	-5.063	-4.759
0.20	17.75	18.12	18.16	0.20	-11.08	-6.294	-6.126
0.50	17.39	17.80	17.81	0.50	-14.79	-8.819	-8.774
1.00	17.17	17.59	17.59	1.00	-18.75	-11.25	-11.25
2.00	17.01	17.40	17.42	2.00	-23.33	-14.11	-13.90
10.0	16.79	16.94	17.07	10.0	-38.18	-28.93	-20.06
100	16.65	16.19	16.98	100	-152.3	-186.5	-43.89

3. Configurations ($3 \times m_1, 3 \times m_4$), $m_1=m_2=m_3=1$, $m_4=m_5=m_6$ variable

$v = 2$				$v = 1$			
m_4	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_4	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	130.1	125.4	151.2	0.01	68.63	66.14	76.08
0.05	61.15	64.86	73.71	0.05	42.18	44.01	47.88
0.10	45.07	50.57	55.44	0.10	34.66	37.63	39.86
0.20	33.94	40.42	42.63	0.20	28.86	32.58	33.63
0.50	24.50	31.09	31.45	0.50	23.36	27.41	27.59
1.00	20.12	25.98	25.98	1.00	20.51	24.32	24.32
2.00	17.33	21.99	22.24	2.00	18.54	21.75	21.90
10.0	14.25	15.99	17.53	10.0	16.09	17.46	18.50
100	13.01	12.54	15.12	100	14.79	14.25	16.39

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_4	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_4	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	20.13	19.99	20.51	0.01	-4.010	-2.406	-1.331
0.05	18.92	19.06	19.30	0.05	-5.010	-3.005	-2.131
0.10	18.44	18.67	18.84	0.10	-6.170	-3.702	-3.040
0.20	18.00	18.33	18.41	0.20	-8.250	-4.950	-4.563
0.50	17.48	17.89	17.91	0.50	-13.13	-7.875	-7.790
1.00	17.17	17.59	17.59	1.00	-18.75	-11.25	-11.25
2.00	16.92	17.31	17.33	2.00	-26.25	-15.75	-15.58
10.0	16.52	16.75	16.88	10.0	-61.70	-37.02	-30.40
100	16.16	16.05	16.45	100	-401.0	-240.6	-133.4

7.2.2 Trois masses distinctes

Nous avons fixé m_1 à 1, m_5 à 2 et varié m_6 .

1. Configurations ($4 \times m_1, 1 \times m_5, 1 \times m_6$), $m_1=\dots=m_4=1$, $m_5=2$, m_6 variable

$v = 2$				$v = 1$			
m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	60.34	64.98	67.09	0.01	38.44	41.53	42.12
0.10	28.36	33.58	34.75	0.10	25.20	28.56	29.03
0.50	20.77	26.19	26.61	0.50	20.91	24.44	24.67
1.00	19.23	24.54	24.75	1.00	19.88	23.41	23.53
3.00	17.95	22.46	22.99	3.00	18.97	22.06	22.38
10.0	17.41	19.67	22.09	10.0	18.57	20.06	21.76
100	17.19	14.03	21.63	100	18.40	15.12	21.43
500	17.17	11.88	21.59	500	18.38	12.63	21.40
∞	17.16	9.985	21.57	∞	18.38	8.896	21.40

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	18.28	18.64	18.66	0.01	-14.29	-7.311	-7.208
0.10	17.59	17.96	17.98	0.10	-15.31	-8.433	-8.238
0.50	17.21	17.60	17.62	0.50	-18.50	-11.17	-10.95
1.00	17.09	17.50	17.51	1.00	-20.83	-12.64	-12.46
3.00	16.97	17.35	17.38	3.00	-24.67	-15.21	-14.63
10.0	16.91	17.09	17.31	10.0	-27.42	-22.87	-16.16
100	16.89	16.18	17.26	100	-28.97	-129.7	-17.10
500	16.88	15.45	17.26	500	-29.13	-607.4	-17.20
∞	16.88	5.939	17.26	∞	-29.17	$-\infty$	-17.22

2. Configurations ($3 \times m_1, 2 \times m_4, 1 \times m_6$) $m_1=m_2=m_3=1, m_4=m_5=2, m_6$ variable

$v = 2$				$v = 1$			
m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	59.57	63.66	65.89	0.01	37.89	40.73	41.40
0.10	27.53	32.29	33.53	0.10	24.63	27.76	28.28
0.50	19.87	24.86	25.37	0.50	20.28	23.60	23.88
1.00	18.29	23.23	23.51	1.00	19.23	22.57	22.73
3.00	16.96	21.29	21.71	3.00	18.27	21.29	21.54
10.0	16.40	18.79	20.78	10.0	17.83	19.49	20.88
100	16.16	13.42	20.30	100	17.64	14.75	20.53
500	16.14	11.28	20.25	500	17.62	12.27	20.49
∞	16.13	9.364	20.24	∞	17.62	8.513	20.49

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	18.21	18.56	18.59	0.01	-16.37	-8.316	-8.183
0.10	17.52	17.88	17.91	0.10	-17.41	-9.485	-9.247
0.50	17.13	17.51	17.54	0.50	-20.75	-12.45	-12.17
1.00	17.01	17.40	17.42	1.00	-23.33	-14.11	-13.90
3.00	16.88	17.26	17.28	3.00	-27.88	-16.88	-16.46
10.0	16.81	17.02	17.20	10.0	-31.40	-24.30	-18.37
100	16.78	16.15	17.16	100	-33.48	-128.5	-19.59
500	16.78	15.42	17.15	500	-33.70	-595.0	-19.73
∞	16.78	5.900	17.15	∞	-33.75	$-\infty$	-19.76

3. Configurations ($2 \times m_1, 2 \times m_3, 2 \times m_5$), $m_1=m_2=1, m_3=m_4=2, m_5=m_6$ variable

$v = 2$				$v = 1$			
m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	96.53	96.61	107.8	0.01	54.17	54.60	58.87
0.05	47.51	50.85	55.76	0.05	34.99	37.07	39.19
0.10	36.06	40.20	43.46	0.10	29.53	32.09	33.59
0.20	28.13	32.81	34.81	0.20	25.31	28.26	29.25
0.50	21.41	26.44	27.23	0.50	21.30	24.58	25.02
1.00	18.29	23.23	23.51	1.00	19.23	22.50	22.73
2.00	16.33	20.78	20.96	2.00	17.82	20.95	21.05
10.0	14.28	16.28	17.86	10.0	16.20	17.71	18.81
100	13.60	12.38	16.43	100	15.54	14.14	17.63

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	19.23	19.36	19.59	0.01	-10.63	-5.111	-4.318
0.05	18.32	18.56	18.70	0.05	-11.44	-5.842	-5.062
0.10	17.96	18.24	18.35	0.10	-12.40	-6.668	-5.939
0.20	17.63	17.95	18.02	0.20	-14.15	-8.080	-7.465
0.50	17.25	17.61	17.65	0.50	-18.38	-11.09	-10.67
1.00	17.01	17.40	17.42	1.00	-23.33	-14.11	-13.90
2.00	16.82	17.22	17.23	2.00	-29.58	-17.64	-17.55
10.0	16.57	16.79	16.94	10.0	-48.67	-32.83	-30.48
100	16.41	16.06	16.74	100	-194.9	-180.8	-56.19

7.3 Système à sept corps

Il y a trois configurations possibles avec deux masses distinctes à savoir $(6 \times m_1, m_7)$, $(5 \times m_1, 2 \times m_6)$ et $(4 \times m_1, 3 \times m_5)$ et quatre configurations ayant trois masses distinctes $(5 \times m_1, 1 \times m_3, 1 \times m_7)$, $(4 \times m_1, 2 \times m_3, 1 \times m_7)$, $(3 \times m_1, 3 \times m_4, 1 \times m_7)$ et $(3 \times m_1, 2 \times m_4, 2 \times m_6)$.

7.3.1 Deux masses distinctes

Pour les configurations $(6 \times m_1, m_7)$, $(5 \times m_1, 2 \times m_6)$ et $(4 \times m_1, 3 \times m_5)$, nous avons fixé la valeur de m_1 à 1 et varié m_7 .

1. Configurations $(6 \times m_1, m_7)$, $m_1 = \dots = m_6 = 1$, m_7 variable

$v = 2$				$v = 1$			
m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	70.59	78.40	80.07	0.01	47.84	52.92	53.22
0.10	35.60	43.69	44.63	0.10	32.93	38.17	38.49
0.50	27.37	35.55	35.71	0.50	28.14	33.53	33.60
1.00	25.72	33.67	33.67	1.00	27.02	32.34	32.34
3.00	24.37	31.01	31.74	3.00	26.04	30.60	31.06
10.0	23.82	26.98	30.75	10.0	25.63	27.68	30.37
100	23.59	18.67	30.25	100	25.45	20.33	30.01
500	23.57	15.51	30.20	500	25.43	16.65	29.97
∞	23.57	12.73	30.18	∞	25.43	11.13	29.96

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	25.23	25.80	25.81	0.01	-22.68	-11.45	-11.43
0.10	24.40	24.99	25.00	0.10	-24.14	-12.95	-12.92
0.50	23.96	24.57	24.58	0.50	-28.50	-16.52	-16.51
1.00	23.83	24.45	24.45	1.00	-31.50	-18.38	-18.38
3.00	23.70	24.25	24.30	3.00	-36.00	-21.84	-20.91
10.0	23.64	23.87	24.22	10.0	-38.86	-33.97	-22.62
100	23.61	22.50	24.18	100	-40.32	-201.9	-23.62
500	23.61	21.41	24.17	500	-40.46	-951.8	-23.72
∞	23.61	7.174	24.17	∞	-40.50	$-\infty$	-23.75

2. Configurations ($5 \times m_1, 2 \times m_6$), $m_1=\dots=m_5=1, m_6=m_7$ variable

$v = 2$				$v = 1$			
m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	111.5	116.5	126.1	0.01	66.40	69.57	72.76
0.05	57.41	64.77	68.97	0.05	44.54	49.06	50.71
0.10	44.84	52.82	55.50	0.10	38.35	43.30	44.41
0.20	36.20	44.58	46.02	0.20	33.62	38.90	39.54
0.50	28.98	37.42	37.74	0.50	29.22	34.69	34.85
1.00	25.72	33.67	33.67	1.00	27.02	32.34	32.34
2.00	23.72	30.56	30.92	2.00	25.59	30.31	30.52
10.0	21.71	24.09	27.58	10.0	24.01	25.65	28.15
100	21.07	18.22	26.05	100	23.39	20.20	26.92

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	26.44	26.81	26.89	0.01	-15.31	-7.149	-6.536
0.05	25.35	25.82	25.91	0.05	-16.50	-8.169	-7.650
0.10	24.92	25.44	25.50	0.10	-17.88	-9.299	-8.912
0.20	24.53	25.09	25.13	0.20	-20.30	-11.18	-10.97
0.50	24.09	24.69	24.71	0.50	-25.75	-14.92	-14.86
1.00	23.83	24.45	24.45	1.00	-31.50	-18.38	-18.38
2.00	23.64	24.22	24.24	2.00	-38.00	-22.38	-22.02
10.0	23.39	23.60	23.94	10.0	-57.27	-44.71	-29.90
100	23.24	22.47	23.74	100	-194.7	-291.9	-54.43

3. Configurations ($4 \times m_1, 3 \times m_4$), $m_1=m_2=m_3=m_4=1$, $m_5=m_6=m_7$ variable

$v = 2$				$v = 1$			
m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	148.5	147.1	171.7	0.01	82.71	82.05	91.57
0.05	71.40	77.42	86.36	0.05	52.01	55.36	59.26
0.10	53.43	61.12	66.24	0.10	43.29	47.74	50.09
0.20	41.02	49.65	52.11	0.20	36.59	41.80	42.98
0.50	30.54	39.31	39.75	0.50	30.26	35.85	36.07
1.00	25.72	33.67	33.67	1.00	27.02	32.34	32.34
2.00	22.67	29.15	29.52	2.00	24.81	29.37	29.59
10.0	19.41	21.73	24.30	10.0	22.16	23.97	25.77
100	18.16	16.94	21.66	100	20.85	19.42	22.43

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_5	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	27.46	27.49	28.01	0.01	-9.401	-4.771	-3.333
0.05	25.96	26.28	26.53	0.05	-10.94	-5.798	-4.622
0.10	25.37	25.80	25.95	0.10	-12.72	-6.970	-6.084
0.20	24.83	25.35	25.43	0.20	-15.90	-9.008	-8.499
0.50	24.21	24.81	24.83	0.50	-23.25	-13.52	-13.40
1.00	23.83	24.45	24.45	1.00	-31.50	-18.38	-18.38
2.00	23.53	24.11	24.13	2.00	-42.00	-24.58	-24.25
10.0	23.09	23.38	23.62	10.0	-86.73	-55.11	-41.91
100	22.72	22.38	23.19	100	-494.6	-359.9	-145.6

7.3.2 Trois masses distinctes

Nous avons fixé m_1 à 1, m_6 à 2 et varié m_7 .

1. Configurations $(5 \times m_1, 1 \times m_6, 1 \times m_7), m_1=\dots=m_5=1, m_6=2, m_7$ variable

$v = 2$				$v = 1$			
m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	69.75	76.37	78.74	0.01	47.24	51.74	52.41
0.10	34.72	41.95	43.29	0.10	32.31	37.09	37.65
0.50	26.42	33.86	34.35	0.50	27.46	32.45	32.73
1.00	24.74	32.05	32.31	1.00	26.32	31.29	31.44
3.00	23.34	29.65	30.34	3.00	25.29	29.69	30.13
10.0	22.76	26.08	29.32	10.0	24.84	27.09	29.40
100	22.52	18.11	28.79	100	24.65	20.02	29.02
500	22.50	14.93	28.74	500	24.63	16.33	28.98
∞	22.49	12.11	28.72	∞	24.63	10.75	28.97

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	25.15	25.69	25.72	0.01	-25.18	-12.85	-12.67
0.10	24.32	24.88	24.91	0.10	-26.65	-14.45	-14.17
0.50	23.87	24.46	24.48	0.50	-31.20	-18.31	-17.98
1.00	23.74	24.33	24.35	1.00	-34.50	-22.38	-20.02
3.00	23.60	24.15	24.20	3.00	-39.85	-23.94	-23.01
10.0	23.53	23.80	24.11	10.0	-43.64	-35.39	-25.09
100	23.50	22.48	24.06	100	-45.73	-196.8	-26.36
500	23.49	21.40	24.05	500	-45.95	-918.9	-26.50
∞	23.49	7.135	24.05	∞	-46.00	$-\infty$	-26.54

2. Configurations ($4 \times m_1, 2 \times m_5, 1 \times m_7$), $m_1=\dots=m_4=1, m_5=m_6=2, m_7$ variable

$v = 2$				$v = 1$			
m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	68.89	74.80	77.39	0.01	46.61	50.78	51.57
0.10	33.80	40.46	41.93	0.10	31.65	36.14	36.78
0.50	25.44	32.35	32.98	0.50	26.76	31.47	31.83
1.00	23.72	30.56	30.92	1.00	25.58	30.31	30.52
3.00	22.28	28.33	28.93	3.00	24.51	28.81	29.18
10.0	21.67	25.13	27.88	10.0	24.03	26.46	28.42
100	21.42	17.51	27.33	100	23.82	19.67	28.01
500	21.39	14.34	27.27	500	23.81	15.99	27.97
∞	21.39	11.49	27.25	∞	23.80	10.37	27.96

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	25.06	25.59	25.63	0.01	-28.18	-14.33	-14.08
0.10	24.24	24.78	24.82	0.10	-29.66	-15.99	-15.61
0.50	23.78	24.35	24.38	0.50	-34.40	-20.13	-19.69
1.00	23.64	24.22	24.24	1.00	-38.00	-22.38	-22.02
3.00	23.49	24.05	24.08	3.00	-44.20	-26.17	-25.41
10.0	23.41	23.73	23.99	10.0	-48.91	-37.23	-27.91
100	23.38	22.45	23.93	100	-51.65	-194.7	-29.51
500	23.38	21.37	23.93	500	-51.93	-900.1	-29.69
∞	23.38	7.096	23.92	∞	-52.00	$-\infty$	-29.73

3. Configurations ($3 \times m_1, 3 \times m_4, 1 \times m_7$), $m_1=\dots=m_3=1, m_4=\dots=m_6=2, m_7$ variable

$v = 2$				$v = 1$			
m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	67.97	73.52	76.02	0.01	45.96	49.94	50.72
0.10	32.85	39.11	40.55	0.10	30.97	35.27	35.89
0.50	24.43	30.94	31.59	0.50	26.02	30.55	30.91
1.00	22.67	29.15	29.52	1.00	24.81	29.37	29.59
3.00	21.19	27.03	27.51	3.00	23.70	27.93	28.21
10.0	20.56	24.13	26.44	10.0	23.19	25.78	27.43
100	20.28	16.87	25.86	100	22.97	19.27	26.99
500	20.26	13.72	25.80	500	22.95	15.61	26.95
∞	20.25	10.86	25.78	∞	22.94	9.986	26.93

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_7	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	24.98	25.50	25.53	0.01	-31.68	-15.97	-15.77
0.10	24.15	24.68	24.72	0.10	-33.18	-17.67	-17.30
0.50	23.68	24.25	24.28	0.50	-38.10	-22.07	-21.65
1.00	23.53	24.11	24.13	1.00	-42.00	-24.58	-24.25
3.00	23.37	23.94	23.97	3.00	-49.05	-28.70	-28.15
10.0	23.29	23.64	23.87	10.0	-54.68	-39.56	-31.12
100	23.26	22.41	23.81	100	-58.06	-195.5	-33.09
500	23.25	21.34	23.80	500	-58.41	-895.3	-33.32
∞	23.25	7.057	23.80	∞	-58.50	$-\infty$	-33.38

4. Configurations ($3 \times m_1, 2 \times m_4, 2 \times m_6$), $m_1=..=m_3=1, m_4=m_5=2, m_6=m_7$ variable

$v = 2,$				$v = 1$			
m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	110.1	112.2	123.5	0.01	65.40	67.21	71.51
0.05	55.88	61.17	66.37	0.05	43.47	46.90	49.16
0.10	43.24	49.32	52.87	0.10	37.24	41.17	42.81
0.20	34.49	41.13	43.37	0.20	32.44	36.77	37.89
0.50	27.11	34.09	35.03	0.50	27.90	32.58	33.11
1.00	23.72	30.56	30.92	1.00	25.58	30.31	30.52
2.00	21.60	27.79	28.11	2.00	24.02	28.45	28.63
10.0	19.42	22.18	24.66	10.0	22.26	24.34	26.11
100	18.72	16.54	23.08	100	21.58	19.08	24.81

$v = 0.1$				$v = -1$			
m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}	m_6	$E_{naïve}$	$E_{améliorée}$	E_{olb}
0.01	26.31	26.60	26.85	0.01	-19.81	-9.343	-8.345
0.05	25.21	25.61	25.76	0.05	-21.02	-10.47	-9.468
0.10	24.78	25.23	25.34	0.10	-22.43	-11.74	-10.78
0.20	24.38	24.87	24.96	0.20	-24.98	-13.86	-13.04
0.50	23.92	24.47	24.52	0.50	-31.05	-18.23	-17.62
1.00	23.64	24.22	24.24	1.00	-38.00	-22.38	-22.02
2.00	23.42	24.00	24.02	2.00	-46.50	-27.04	-26.80
10.0	23.14	23.44	23.69	10.0	-70.86	-49.07	-37.58
100	22.97	22.35	23.47	100	-210.9	-281.4	-63.97

Discussion

1. Nos résultats numériques illustrés par les tableaux précédents mettent en évidence la saturabilité de la borne inférieure optimisée dans le cas de forces harmoniques. A part les configurations avec au plus deux masses distinctes où nous avons démontré analytiquement la propriété de saturabilité, nous avons également considéré des configurations avec trois masses distinctes où on n'est pas encore parvenu à démon-

trer analytiquement la propriété de saturabilité, mais où on dispose de l'expression analytique exacte de l'énergie de l'état fondamental (5.80). Dans ce cas à trois masses distinctes on a une évidence numérique de la saturabilité.

2. La borne inférieure optimisée est meilleure que les deux bornes inférieures naïve et améliorée dans tous les cas de figure, c'est à dire pour toutes les configurations considérées. Autrement dit, la borne inférieure optimisée est supérieure de manière absolue aux bornes inférieures naïve et améliorée.
3. La borne inférieure améliorée est meilleure que la borne inférieure naïve pour certaines configurations, en particulier lorsqu'on a affaire à des configurations peu dissymétriques. La situation est inversée, c'est à dire que la borne inférieure naïve devient meilleure que la borne inférieure améliorée, pour d'autres configurations de masse. Et la dissymétrie joue en faveur de la borne inférieure naïve. Donc, en conclusion, aucune des deux bornes inférieures naïve et améliorée ne l'emporte de manière absolue.
4. La borne inférieure optimisée possède un double degré de flexibilité :

Le premier degré de flexibilité, qui est aussi commun aux bornes inférieures naïve et améliorée, est lié au fait que l'énergie de l'état fondamental de l'Hamiltonien à N corps est remplacée par une somme d'énergie d'états fondamentaux d'Hamiltoniens à deux corps, mais avec le même type d'interaction (si le système à N corps est gouverné par des interactions harmoniques, c'est aussi le cas des systèmes à deux corps, si le système à N corps est régi par des interactions coulombiennes, ce sera également le cas des systèmes à deux corps correspondant, etc...).

Le deuxième degré de flexibilité de la borne inférieure optimisée que ne partagent pas les autres bornes naïve et améliorée, est que la borne inférieure optimisée est en quelque sorte la meilleure d'un ensemble de bornes inférieures correspondant chacune à un jeu de valeurs d'un certain nombre de paramètres. Autrement dit, la borne inférieure optimisée résulte d'un processus d'optimisation sur un certain nombre de paramètres libres.

Le développement systématique sur des gaussiennes corrélées qui lui fournit une borne supérieure pour l'énergie de l'état fondamental, possède un seul degré de flexibilité au sens que la fonction d'onde d'essai dépend d'un certain nombre de

paramètres ; la borne supérieure résultant d'une procédure d'optimisation sur ces paramètres. Mais on utilise toujours des gaussiennes corrélées qu'il s'agit d'interactions harmoniques ou non harmoniques, ce qui présente un manque de souplesse certain. On peut comprendre, que le problème n'est pas très grave, s'il s'agit d'une interaction proche d'une interaction harmonique, mais les choses vont s'aggraver si l'interaction est vraiment très dissemblable à l'interaction harmonique : si l'interaction est de type Coulombien par exemple. Pour obtenir une bonne approximation du niveau d'énergie de l'état fondamental du système, il faut alors pousser le développement sur des gaussiennes corrélées assez loin.

A la lumière de la discussion précédente, nous pouvons conjecturer que la borne inférieure optimisée peut constituer une excellente approximation pour l'énergie de l'état fondamental du système, peut être meilleure que l'approximation fournie par le développement systématique sur des gaussiennes corrélées, si celui-ci n'est pas poussé très loin et ou/si l'interaction diffère radicalement d'une interaction harmonique.

On peut aussi voir les choses de la manière suivante : Dans le cas d'interaction harmonique, la borne inférieure optimisée et la borne supérieure résultant d'un développement sur des gaussiennes corrélées coïncident toutes deux avec l'énergie exacte de l'état fondamental du système (saturation de la borne inférieure optimisée et forme de la fonction d'onde de l'état fondamental pour une interaction harmonique). Lorsque on s'éloigne du cas harmonique, la borne inférieure optimisée et la borne supérieure résultant d'un développement sur des gaussiennes corrélées diffèrent avec l'énergie exacte inconnue de l'état fondamental du système comprise entre les deux bornes. Mais on s'attend à une détérioration plus rapide de la borne supérieure comparativement à la borne inférieure optimisée.

5. Dans tous les cas de figure, la combinaison d'une borne inférieure et d'une borne supérieure fournit un encadrement pour l'énergie exacte. Il est clair que le meilleur de ces encadrements est obtenu lorsque on prend pour borne inférieure, la borne inférieure optimisée. Ceci est illustré par le tableau [1] dans le cas d'un système formé de cinq particules interagissant par un potentiel en loi de puissance $V_{ij}(r_{ij}) = \text{signe}(\nu)r_{ij}^\nu$ pour différentes configurations de masse du type $(3 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$. Nous avons considéré trois potentiels réguliers à l'origine, les potentiels harmonique

($\nu = 2$) et linéaire ($\nu = 1$) et également le potentiel de Martin ($\nu = 0.1$), et un potentiel singulier à l'origine, le potentiel Coulombien ($\nu = -1$). La borne supérieure est fournie par un calcul variationnel utilisant une seule gaussienne corrélée

$$\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3, \vec{x}_4) = b_1 \exp(-A_{11} \vec{x}_1^2 - A_{22} \vec{x}_2^2 - A_{33} \vec{x}_3^2 - A_{44} \vec{x}_4^2 - 2A_{34} \vec{x}_3 \cdot \vec{x}_4) \quad (7.1)$$

où $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3$ et \vec{x}_4 sont des coordonnées de Jacobi liées aux coordonnées individuelles par les relations

$$\begin{aligned} \vec{x}_1 &= \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \\ \vec{x}_2 &= \vec{r}_3 - \frac{1}{2}\vec{r}_1 - \frac{1}{2}\vec{r}_2 \\ \vec{x}_3 &= \vec{r}_4 - \frac{1}{3}\vec{r}_1 - \frac{1}{3}\vec{r}_2 - \frac{1}{3}\vec{r}_3 \\ \vec{x}_4 &= \vec{r}_5 - \frac{m_1}{m_2+3m_1}\vec{r}_1 - \frac{m_1}{m_2+3m_1}\vec{r}_2 - \frac{m_1}{m_2+3m_1}\vec{r}_3 - \frac{m_2}{m_2+3m_1}\vec{r}_4. \end{aligned}$$

$A_{11}, A_{22}, A_{33}, A_{44}, A_{34}$ sont des paramètres variationnels et b_1 est un facteur de normalisation.

m_1, \dots, m_5	$v_{ij} = 2, \lambda_{ij} = 1$		$v_{ij} = 1, \lambda_{ij} = 1$	
	E_{olb}	$E_{\text{supérieure}}$	E_{olb}	$E_{\text{supérieure}}$
1, 1, 1, 1, 1	18.9737	18.9737	17.2273	17.2765
1, 1, 1, 1, 5	17.0763	17.0763	16.0304	16.0761
1, 1, 1, 2, 3	16.3598	16.3598	15.5828	15.6272
2, 2, 2, 1, 3	14.0893	14.0893	14.1081	14.1483
3, 3, 3, 1, 2	13.1232	13.1232	13.4442	13.4825
5, 5, 5, 5, 1	10.7114	10.7114	11.6940	11.7274

m_1, \dots, m_5	$v_{ij} = 0.1, \lambda_{ij} = 1$		$v_{ij} = -1, \lambda_{ij} = -1$	
	E_{olb}	$E_{\text{supérieure}}$	E_{olb}	$E_{\text{supérieure}}$
1, 1, 1, 1, 1	11.8297	11.8525	-6.2500	-5.3052
1, 1, 1, 1, 5	11.7053	11.7279	-7.8752	-6.6847
1, 1, 1, 2, 3	11.6584	11.6808	-8.5715	-7.2757
2, 2, 2, 1, 3	11.4943	11.5164	-11.5390	-9.7946
3, 3, 3, 1, 2	11.4136	11.4356	-13.4680	-11.4316
5, 5, 5, 5, 1	11.1726	11.2013	-21.5805	-18.3181

Tableau [1].

On travaille dans un système d'unités où $\hbar = 1$. E_{olb} et $E_{\text{supérieure}}$ désignent respectivement la borne inférieure optimisée, équation (6.69), et la borne supérieure obtenue en minimisant par rapport aux paramètres variationnels A_{ij} l'expression donnée par l'équation (1.146) pour $\lambda_{ij} = \text{signe}(\nu)$ et $N = 5$.

Remarque :

La borne inférieure optimisée, aussi bien que la borne supérieure correspondant à une gaussienne corrélée comme fonction d'onde d'essai, résultent d'un processus d'optimisation. Donnons à titre d'exemple les valeurs des paramètres $x_{ij,k}$ (6.57) correspondant à la borne inférieure optimisée et ceux des paramètres A_{ij} (7.1) correspondant à la borne supérieure, dans le cas particulier d'une configuration $(3 \times 1, 1 \times 2, 1 \times 3)$ et pour un potentiel linéaire. Nous avons

$$A_{11} \simeq 0.988, \quad A_{22} \simeq 1.318, \quad A_{33} \simeq 1.956, \quad A_{44} \simeq 2.555, \quad A_{34} \simeq 0.147.$$

Ceci d'une part. D'autre part

$$c_1 \simeq -0.187, \quad c_3 \simeq -0.201, \quad f_2 \simeq -0.301, \quad f_1 \simeq -0.286, \quad d_1 \simeq -0.106.$$

Il est à noter l'absence des paramètres c_2, f_3, d_3 venant du fait qu'on a une seule particule de masse $m_2 = 2$ et une seule particule de masse $m_3 = 3$. Il est bon également de souligner que les deux contraintes dynamiques universelles donnant f_1 et d_1 en termes de c_1, c_3 et f_2 (6.70) sont bien vérifiées numériquement.

En combinant une borne inférieure à des calculs variationnels, tel le développement systématique sur des gaussiennes corrélées, exposé à la section 2 du chapitre 1, nous pouvons obtenir un encadrement de l'énergie du niveau fondamental du système à N corps. Pour illustrer ceci, nous avons considéré un système formé de cinq particules interagissant par un potentiel en loi de puissance $V_{ij}(r_{ij}) = \text{signe}(\nu)r_{ij}^\nu$. On a pris pour simplifier les deux premières particules de même masse $m_1 = m_2 = 1$, la troisième et la quatrième particules également de même masse $m_3 = m_4 = 2$ et la cinquième particule de masse variable m_5 , toujours dans un système d'unités où $\hbar = 1$. Dans ce cas l'énergie E_0 de l'état fondamental du système est une fonction de m_5 . On a tracé dans le plan (E_0, m_5) (on a adopté une échelle logarithmique pour permettre une accessibilité à une large plage

de valeurs de m_5) les trois courbes correspondantes aux trois bornes inférieures naïve, améliorée et optimisée. On a aussi tracé la courbe correspondant à un calcul variationnel utilisant une seule gaussienne corrélée, calcul fournissant une borne supérieure pour l'énergie de l'état fondamental du système. Nous avons considéré un exemple de potentiel régulier à l'origine, le potentiel linéaire ($\nu = 1$) Figure [1], et un exemple de potentiel singulier à l'origine, le potentiel Coulombien ($\nu = -1$) Figure [2].

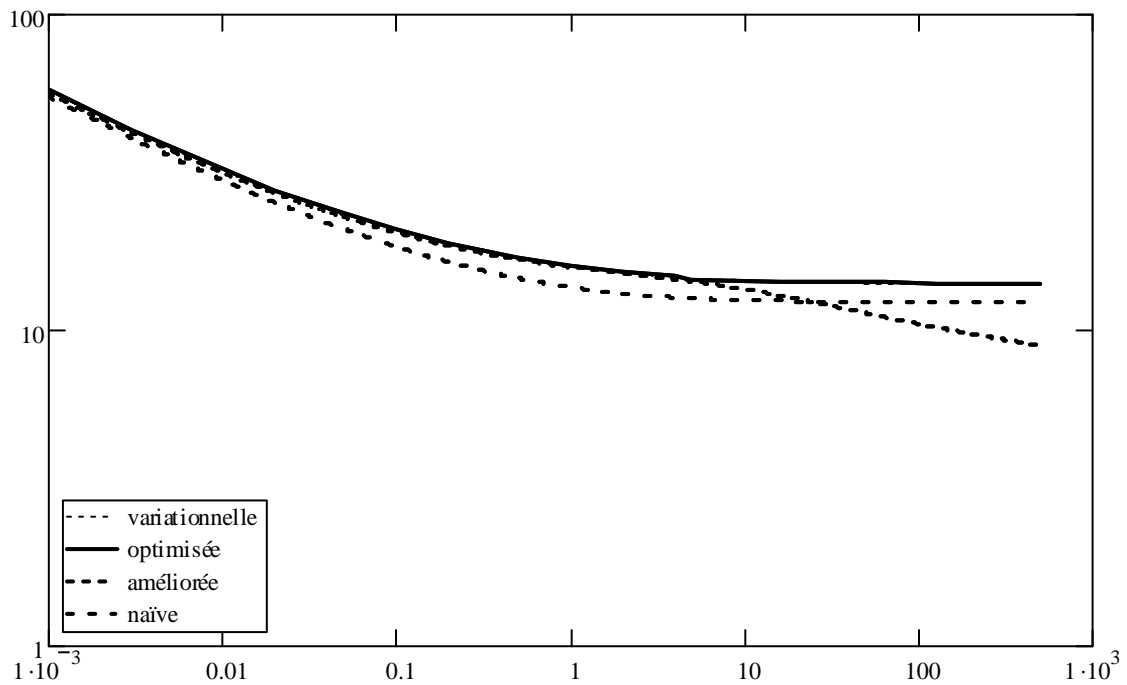


Figure [1] : Les différentes bornes en fonction de m_5 . Cas du potentiel linéaire $V_{ij} = r_{ij}$

Dans le cas d'un potentiel linéaire, les valeurs fournies par la borne inférieure optimisée et le calcul variationnel utilisant une gaussienne corrélée sont très voisines. Il en résulte que les courbes représentatives correspondantes sont pratiquement confondues. Donc aussi bien la borne inférieure optimisée que le calcul variationnel utilisant une seule gaussienne

coïncident pratiquement avec l'énergie de l'état fondamental.

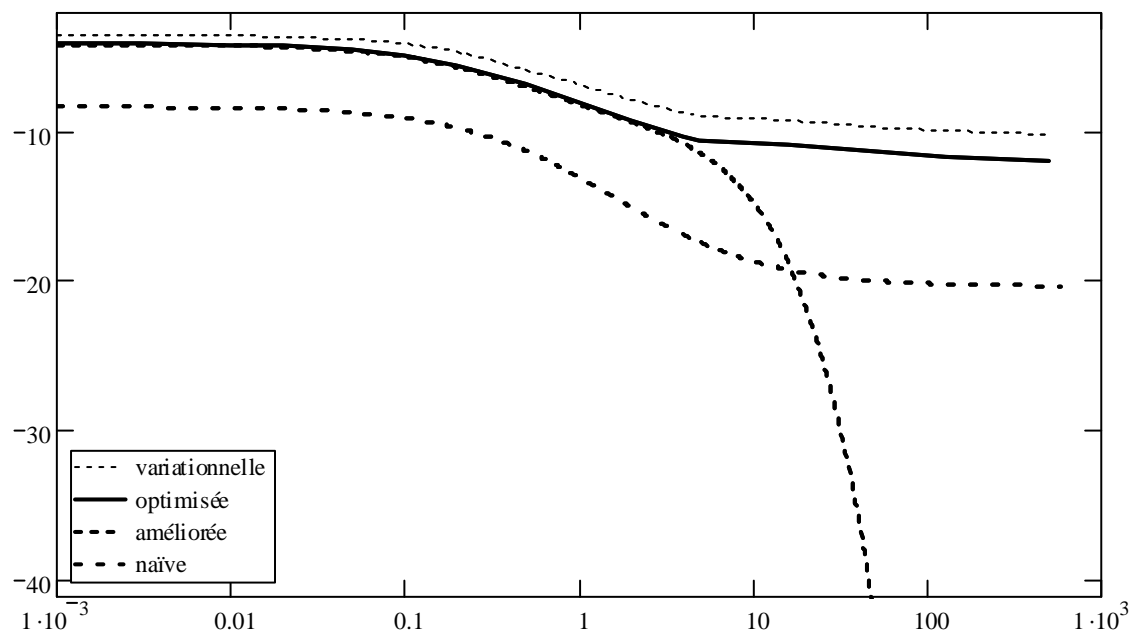


Figure [2] : Les différentes bornes en fonction de m_5 . Cas du potentiel Coulombien

$$V_{ij} = -1/r_{ij}$$

Dans le cas d'un potentiel Coulombien, les valeurs exactes de l'énergie du niveau fondamental pour les différentes valeurs de m_5 sont nécessairement à l'intérieur de la bande délimitée par la borne supérieure fournie par le calcul utilisant une seule gaussienne corrélée et la borne inférieure optimisée. A la lumière de la discussion précédente, on s'attend dans ce cas à ce que la borne inférieure optimisée fournisse un meilleur résultat que la borne supérieure.

Conclusion

Dans cette thèse, nous avons mis l'accent sur l'étude d'une borne inférieure pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à N corps, gouverné par une cinématique non relativiste, avec des interactions à deux corps invariante par translation. Cette borne inférieure, déjà connue pour des systèmes à trois corps [21] et à quatre corps [23, 24, 25], a été généralisée par nous soins [12] pour un système formé d'un nombre quelconque de particules. L'originalité de cette borne inférieure est qu'elle résulte d'un processus d'optimisation sur un nombre de paramètres libres, ce qui justifie l'appellation de borne inférieure optimisée utilisée pour désigner une telle borne. Il s'avère que les valeurs des paramètres libres correspondant à la borne inférieure optimisée satisfont à un certain nombre de relations baptisées contraintes dynamiques universelles pour la bonne raison qu'elles résultent d'un principe dynamique, le principe variationnel en l'occurrence, d'où le qualificatif de dynamique et qu'elles sont indépendantes de la forme du potentiel, d'où le qualificatif d'universelle. Une partie importante de la thèse est consacrée à la détermination des contraintes dynamiques universelles. Ceci est motivé par le fait qu'en plus de leur importance théorique incontestable les contraintes dynamiques universelles sont également d'une importance pratique insoupçonnable pour celui qui n'est pas confronté à l'extrême rudesse des problèmes d'optimisation non linéaire. En effet, pour déterminer les valeurs des paramètres libres associés à la borne inférieure optimisée, on est confronté à un problème d'optimisation non linéaire. Il s'ensuit que la réduction, respectivement l'augmentation, du nombre de paramètres a comme effet de simplifier, respectivement de compliquer, de manière spectaculaire le processus d'optimisation. Comme les contraintes dynamiques universelles ne sont pas de nature cinématique, on peut les ignorer, effectuer la procédure d'optimisation et vérifier ensuite qu'elles sont effectivement satisfaites. Bien sûr, le prix à payer est une augmentation exponentielle du temps de calcul, ce qui ne

saurait se faire qu'avec des moyens de calculs considérables. On montre que la dérivation des contraintes dynamiques universelles peut se faire de manière complète et dans le cas le plus général pour $N = 3, 4, 5$, c'est à dire pour les systèmes à trois, quatre et cinq corps. La détermination de l'unique contrainte dynamique universelle pour $N = 3$ est très simple relativement à la détermination des 7 contraintes dynamiques universelles pour $N = 4$, laquelle est un jeu d'enfant comparativement à la détermination des 21 contraintes dynamiques universelles pour $N = 5$. Autrement dit, il y a un saut qualitatif dans le degré de difficulté lorsque on passe d'une valeur de N à la valeur immédiatement supérieure. On constate aussi des liens entre le cas $N = 4$ et le cas $N = 3$. Ceci d'une part. D'autre part, on constate également des liens entre le cas $N = 5$ et les deux cas $N = 4$ et $N = 3$. Pour $N > 5$, c'est à dire pour des systèmes à six corps et plus, les contraintes dynamiques universelles ne peuvent être déterminées que pour certaines configurations de masse, autrement dit, lorsque le système possède suffisamment de propriétés de symétrie. Dans pareils cas, un certain nombre de contraintes dynamiques universelles résultent de considérations de symétrie et les autres contraintes restantes sont calculées. On conjecture aussi que les contraintes dynamiques universelles obtenues pour certains systèmes peuvent servir à déterminer, partiellement, celles de systèmes plus compliqués et on a mis effectivement en oeuvre cette conjecture sur le plan pratique. A la base de cette conjecture se trouve toute une série de constatations :

1. L'existence de liens entre les contraintes dynamiques universelles dans le cas $N = 4$ et le cas $N = 3$.
2. L'existence de liens entre les contraintes dynamiques universelles dans le cas $N = 5$ et les cas $N = 4$ et $N = 3$.
3. Les liens entre les contraintes dynamiques universelles pour les configurations à six corps avec trois masses distinctes $(4 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$, $(3 \times m_1, 2 \times m_2, 1 \times m_3)$ et $(2 \times m_1, 2 \times m_2, 2 \times m_3)$.
4. Les liens entre les contraintes dynamiques universelles pour les configurations avec trois masses distinctes $(n_1 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$, $(n_1 \times m_1, n_2 \times m_2, 1 \times m_3)$ et $(n_1 \times m_1, n_2 \times m_2, n_3 \times m_3)$ avec $n_1, n_2, n_3 > 1$.

On a aussi dérivé des expressions analytiques pour les niveaux d'énergie d'un système à N corps interagissant par des forces harmoniques, c'est à dire pour l'oscillateur har-

monique à N corps (système de N oscillateurs harmoniques), dans le cas de certaines configurations de masse, mais avec N quelconque. On peut envisager des configurations jusqu'à trois masses distinctes. L'expression du niveau fondamental est, dans chacun des cas envisagés, particulièrement compacte. Cet intérêt particulier pour des interactions harmoniques est motivé en partie par le fait que l'on veut comparer la borne inférieure optimisée avec l'énergie exacte de l'état fondamental dans un cas où celle-ci est disponible, l'oscillateur harmonique à N corps en l'occurrence. Il s'avère alors que la borne inférieure optimisée est saturée dans le cas d'interactions harmoniques. Nous avons considéré un très grand nombre de configurations et cette propriété de saturation n'a jamais été mise en défaut, au point que nous avons maintenant acquis la quasi-certitude que la propriété de saturabilité de la borne inférieure optimisée est une propriété générale valable dans tous les cas de figure. Cependant, d'un point de vue strictement mathématique, une évidence numérique reste une évidence numérique qui a besoin d'être confirmée par une démonstration analytique. Nous avons dans cette thèse accompli partiellement cette tâche en démontrant analytiquement [14] la propriété de saturabilité pour trois configurations de masse $(N \times m)$, $((N - 1) \times m, 1 \times M)$ et $(n \times m, (N - n) \times M)$ avec $n, n' > 1$.

Nos résultats numériques montrent en outre que la borne inférieure optimisée est toujours meilleure que deux autres bornes populaires pour les systèmes à N corps, les bornes dites naïve et améliorée. Autrement dit, la borne inférieure optimisée est toujours supérieure aux bornes inférieures naïve et améliorée. Nos investigations numériques présentent un caractère si intensif au point de rendre cette conclusion définitive. Ceci d'une part.

D'autre part, la borne inférieure optimisée possède un tel degré de flexibilité qu'elle peut même constituer une excellente approximation à l'énergie de l'état fondamental. Nous avons même des raisons de penser, que la borne inférieure optimisée constitue une meilleure approximation de l'énergie de l'état fondamental que celle fournie par des calculs variationnels poussés tel que le développement systématique sur des gaussiennes corrélées.

Que reste-t-il à faire ? On peut envisager des applications à des problèmes physiques concrets. La borne inférieure optimisée peut servir à approximer l'énergie de l'état fondamental de divers systèmes physiques à N corps dans différents domaines ou disciplines. La décomposition du terme d'énergie cinétique qui est à la base de la borne inférieure

optimisée, peut servir à dériver des conditions suffisantes d'inexistence de systèmes bornés [28].

Annexe A

La méthode de Multhopp

La méthode de Multhopp [29] est une méthode de résolution numérique des équations différentielles aux valeurs propres telle que l'équation de Schrödinger radiale réduite

$$\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} U(r) + [E - V_{eff}(r)] U(r) = 0 \quad r \geq 0, \quad (\text{A.1})$$

où μ , $U(r)$ 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 (A.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

$$r = r_0 \frac{x}{1-x} \quad (\text{A.2})$$

ou encore en inversant

$$x = \frac{r}{r+r_0}, \quad (\text{A.3})$$

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

$$\frac{d}{dr} = \frac{(x-1)^2}{r_0} \frac{d}{dx}, \quad (\text{A.4})$$

et par conséquent

$$\frac{d^2}{dr^2} = \frac{(x-1)^4}{r_0^2} \frac{d^2}{dx^2} + 2 \frac{(x-1)^3}{r_0^2} \frac{d}{dx}. \quad (\text{A.5})$$

Dans le but d'éliminer le terme en $\frac{d}{dx}$, on va adopter le changement de fonction suivant

$$v(x) = \frac{\sqrt{r_0}}{(1-x)} U(r(x)). \quad (\text{A.6})$$

L'équation (A.1) s'écrit dans la nouvelle variable x et la nouvelle fonction $v(x)$ comme

$$\frac{1}{2\mu} \frac{(1-x)^4}{r_0^2} \frac{d^2}{dx^2} v(x) + V_{eff}(r(x)) v(x) = E v(x). \quad (\text{A.7})$$

On remarque que $v(0) = \lim_{x \rightarrow 1} v(x) = 0$. Il s'ensuit qu'un développement en série de Fourier est possible

$$v(x) := \sum_{i=1}^N a_i \sin(i\pi x), \quad (\text{A.8})$$

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 $x_i = (i+1)h$

$$v_j := \sum_{i=1}^N a_i \sin(i\pi x_j). \quad (\text{A.9})$$

En utilisant le fait que

$$\sum_{k=1}^N \sin\left(k \frac{\pi(j+1)}{N+1}\right) \sin\left(k \frac{\pi(i+1)}{N+1}\right) = \frac{N+1}{2} \delta_{ij}, \quad (\text{A.10})$$

on peut inverser (A.9) pour obtenir les poids a_i en fonction des v_j et des x_j

$$a_i = 2h \sum_{j=1}^N v_j \sin(i\pi x_j). \quad (\text{A.11})$$

Toujours en faisant usage de la relation (A.10), l'équation (A.7) se simplifie en

$$\frac{1}{\mu(N+1)r_0^2} \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N k^2 \pi^2 \sin(k\pi x_i) \sin(k\pi x_j) v_j - \sum_{j=1}^N [E - V_{eff}(r(x_i))] \delta_{ij} v_j = 0, \quad (\text{A.12})$$

équation qui peut être réécrite comme une équation aux valeurs propres

$$\sum_{j=1}^N A_{ij} v_j = E v_i, \quad (\text{A.13})$$

avec

$$A_{ij} = \pi^2 h \frac{(1-x_i)^4}{\mu r_0^2} \left(\sum_{k=1}^N k^2 \sin(k\pi x_i) \sin(k\pi x_j) \right) + \delta_{ij} V(r(x_i)). \quad (\text{A.14})$$

Notons que la matrice A n'est pas symétrique. Néanmoins, nous pouvons ramener le problème aux valeurs propres (A.13) à celui d'un problème aux valeurs propres d'une matrice symétrique. Pour ce faire, définissons un nouveau vecteur w d'éléments

$$w_j = \frac{1}{(x_j - 1)^2} v_j. \quad (\text{A.15})$$

En remplaçant v par son expression en terme de w , l'équation aux valeurs propres (A.13) se réduit à

$$\sum_{j=1}^N B_{ij} w_j = E w_i, \quad (\text{A.16})$$

où la matrice B est maintenant une matrice symétrique dont les éléments B_{ij} sont donnés par

$$B_{ij} = \frac{\pi^2 h}{\mu r_0^2} (1-x_i)^2 (1-x_j)^2 \left(\sum_{k=1}^N k^2 \sin(k\pi x_i) \sin(k\pi x_j) \right) + \delta_{ij} V(r(x_i)). \quad (\text{A.17})$$

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.

	$\nu = -1$	$\nu = -1/2$	$\nu = 0.1$	$\nu = 1$	$\nu = 2$
$E^{(2)}(1, 1, \nu)$	-0.25000	-0.43804	1.23573	2.33811	3.00000

Tableau [A1].

Bibliographie

- [1] M.E. Fisher and D. Ruelle, *J. Math. Phys.* **7** (1966) 260
- [2] F.J. Dyson and A. Lenard, *J. Math. Phys.* **8** (1967) 423
- [3] J.-M. Lévy-Leblond, *J. Math. Phys.* **10** (1969) 806
- [4] J.-P. Ader, J.-M. Richard and P. Taxil, *Phys. Rev. D* **25** (1982) 2370
- [5] S. Nussinov, *Phys. Rev. Lett.* **51** (1983) 2081
- [6] J.-M. Richard, *Phys. Lett. B* **139** (1984) 408
- [7] R.L. Hall and H.R. Post, *Proc. Phys. Soc.* **90** (1967) 381
- [8] J.-L. Basdevant, A. Martin and J.-M. Richard, *Nucl. Phys. B* **343** (1990) 60
- [9] J.-L. Basdevant, A. Martin and J.-M. Richard, *Nucl. Phys. B* **343** (1990) 69
- [10] See for instance, K Varga and Y.Suzuki, *Phys. Rev. C* **52** (1995) 2885
- [11] Kh. Boudjemaa, Thèse de magister, Université de Constantine (2000)
- [12] Kh. Boudjemaa and S.R. Zouzou, *Optimized lower bound on N-body Hamiltonians*, *J. Phys. A : Math. Gen.* **39** (2006) 7383 – 7409
- [13] Kh. Boudjemaa and S.R. Zouzou, *Optimized lower bound on five-body Hamiltonians*, en préparation.
- [14] Kh. Boudjemaa and S.R. Zouzou, *An analytical proof of saturability of an optimized lower bound for N-body Hamiltonians, for some configurations of masses, with arbitrary N*, *J. Phys. A : Math. Gen.* **39** (2006) 5857 – 5872 (16)
- [15] C.Quigg et J. L. Rosner, *Phys. Rep.* **56** (1979) 167
- [16] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, *Mécanique Quantique* (Hermann, Paris, 1977)
- [17] W. Thirring, *A Course in Mathematical Physics*, **Vol.3** (Springer Verlag, 1981)

- [18] A. Galindo et P. Pascual, *Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, Madrid, 1989)
- [19] S. Fleck et J.-M. Richard, *Few-Body Systems* **19** (1995) 19
- [20] F. R. Gantmacher, *Théorie des Matrices* (Dunod, Paris, 1966)
- [21] J.-L. Basdevant, A. Martin, J.-M. Richard and T. T. Wu, *Nucl. Phys.* **B393** (1993) 111
- [22] A. Metatla, Thèse de magister, Université de Constantine (1997)
- [23] A. Benslama, A. Metatla, Bachkhaznadj, 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
- [24] A. Krikeb, Thèse de Doctorat, Université Claude Bernard, Lyon (1999)
- [25] B. Bouaouina, Thèse de magister, Université de Constantine (1999)
- [26] B. Barkat, Thèse de magister, Université de Constantine (1999)
- [27] J.-M. Richard, *Phys. Rep.* **56** (1991) 1
- [28] J.-M. Richard and S. Fleck *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994) 1464
- [29] J.-M. Richard, *Phys. Rep.* **212** (1992) 1

Lower Bounds for Few Body Systems

Abstract

This thesis deals with few body systems, although most of the results we obtain apply equally well to N-body systems with arbitrary N. Most of this thesis is devoted to the study of a lower bound for the ground state energy of N-body systems, governed by non-relativistic kinematics and translationally invariant two-body interactions. The originality of this lower bound relies in the fact that it results from an optimization process over a number of parameters. This lower bound is correspondingly called optimized lower bound. It proves that the values of the parameters corresponding to the optimized lower bound satisfy a certain number of relations called universal dynamical constraints, dynamical because these relations are of dynamical nature since resulting from a dynamical principle, i.e., the variational principle, and universal because these relations are independent of the particular form of the potential. A large part of this thesis has been devoted to a derivation of these universal dynamical constraints which in addition to their theoretical interest are extremely important on practical grounds, leading to a spectacular simplification of the optimization process. This derivation has been made completely and in the more general case for three, four and five body problems and partially for problems with more than five particles. A very interesting property of the optimized lower bound is its saturability in the particular case of harmonic interactions. This property of saturability has never been taken in default, and we are now convinced of its general character. Moreover, we have proved analytically this property of saturability for special mass configurations but for arbitrary N. Partially because of this we have been lead to derive compact expressions for the N-body harmonic oscillator exact energies in the case of special mass configurations. In addition, our optimized lower bound proves to be absolutely superior or better than naive and improved lower bounds. Furthermore, our optimized lower bound is of so high quality that it may even be taken as an excellent approximation to the exact N-body ground state energy, in competition with very sophisticated variational calculations, which give an upper bound for the N-body ground state energy.

Mots clés

Hamiltonian, variational method, trial wave function, correlated Gaussian, upper bound, lower bound, optimization, universal dynamical constraint, harmonic oscillator,

saturability.

Bornes inférieures pour les systèmes à petit nombre de corps

Résumé

Ce travail de thèse s'inscrit dans le cadre de systèmes à petit nombre de corps gouvernés par une cinématique non relativiste avec des interactions à deux corps invariantes par translation. Dans cette thèse, nous avons mis l'accent sur l'étude d'une borne inférieure optimisée pour l'énergie de l'état fondamental de tels systèmes. L'originalité de cette borne inférieure est qu'elle résulte d'un processus d'optimisation sur un nombre de paramètres libres. Il s'avère que les valeurs des paramètres libres correspondant à la borne inférieure optimisée satisfont à un certain nombre de contraintes. L'un des objectifs de cette thèse était, d'une part, de dériver ces contraintes, complètement ou partiellement selon la complexité du problème, et de faire apparaître leurs propriétés spectaculaires, et d'autre part de montrer analytiquement la saturation de la borne inférieure optimisée dans le cas de forces harmoniques. Pour cela on été obligé à dériver les expressions analytiques exactes de l'énergie de l'oscillateur harmonique à N corps pour quelques configurations de masse mais avec N quelconque.

La combinaison de la borne inférieure et d'une borne supérieure fournit un encadrement pour l'énergie exacte. Nos résultats numériques montrent que la borne inférieure optimisée est toujours meilleure que deux autres bornes populaires pour les systèmes à N corps, les bornes dites naïve et améliorée.

Bornes Inférieures pour les Systèmes à Petit Nombre de Corps

Résumé

Le travail de cette thèse s'inscrit dans le cadre des systèmes à petit nombre de corps, bien que la plupart des résultats obtenus s'appliquent également aux systèmes à N corps avec N quelconque. Nous avons surtout mis l'accent sur l'étude d'une borne inférieure pour l'énergie de l'état fondamental de systèmes à N corps, gouvernés par une cinématique non relativiste avec des interactions à deux corps invariantes par translation. L'originalité de cette borne inférieure réside dans le fait qu'elle résulte d'un processus d'optimisation sur un certain nombre de paramètres libres. Ce qui justifie la désignation de cette borne inférieure comme borne inférieure optimisée. Il s'avère que les valeurs des paramètres

libres correspondant à la borne inférieure optimisée satisfont à un certain nombre de relations baptisées contraintes dynamiques universelles, dynamiques parce que ces relations sont de nature dynamique, et non cinématique, car résultant d'un principe dynamique, le principe variationnel en l'occurrence et universelles puisque ne dépendant pas de la forme particulière du potentiel d'interaction. Une large partie de la thèse a été consacrée à la dérivation de ces contraintes dynamiques universelles qui en plus de leur grande importance théorique ont également une importance pratique considérable, amenant à une simplification spectaculaire du processus d'optimisation. Cette dérivation a été faite de manière complète et dans le cas le plus général pour les problèmes à trois, quatre et cinq corps et de manière partielle pour les problèmes à plus de cinq corps. Une propriété très intéressante de la borne inférieure optimisée est la saturabilité dans le cas particulier des interactions harmoniques. Cette propriété de saturabilité n'a jamais été prise à défaut, et nous avons développé maintenant une quasi-certitude quand à son caractère général. De plus, nous avons montré analytiquement cette propriété de saturabilité pour certaines configurations spéciales de masse mais pour un nombre quelconque de corps. Lié à cela nous avons alors été amenés à dériver des expressions compactes pour les énergies exactes de l'oscillateur harmonique à N corps pour certaines configurations de masse. De surcroît, notre borne inférieure s'avère supérieure de manière absolue aux bornes inférieures naïve et améliorée. En outre, notre borne inférieure optimisée fournit des valeurs si proches des énergies exactes des états fondamentaux, au point qu'elle constitue une excellente approximation de l'énergie de l'état fondamental de systèmes à N corps, en compétition avec des calculs variationnels très poussés, qui eux fournissent une borne supérieure pour l'énergie de l'état fondamental de systèmes à N corps.

Mots clés

Hamiltonien, méthode variationnelle, fonction d'onde d'essai, gaussienne corrélée, borne supérieure, borne inférieure, optimisation, contrainte dynamique universelle, oscillateur harmonique, saturabilité.

Mots clés

Hamiltonien, Méthode variationnelle, Fonction d'onde d'essai, Borne supérieure, Borne inférieure, Gaussienne corrélée, Oscillateur harmonique, Saturabilité, Contrainte, Optimisation.