MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE «Abbes LAGHROUR» DE KHENCHELA
FACULTE DES SCIENCES ET TECHNOLOGIE

Département des Sciences de la Matière

N° de série :……

Mémoire de fin d'études

Pour l'obtention du diplôme de Master (L.M.D)

Filière : Physique

Option : Physique des matériaux

Intitulé :

Résolution exacte du problème de l'oscillateur harmonique quantique à N-corps

Réalisé par :

- BOUDJEMAA Ahlam
- KEZIZ Salima

Dirigé par : Dr. BOUDJEMAA Kheir-Eddine

Membres de jury :

- Président	BENYEZA Nabil	Univ. Abbes LAGHROUR-Khenchela
- Examinateur	MEROUANI Lazher	Univ. Abbes LAGHROUR -Khenchela

Présenté le: 06 /07 /2017

Remerciements

Avant toute personne, Nous remercie DIEU pour nos avoir donné la santé, La patience et le courage tout au long du travail.

Nous remercie vivement Dr.BOUDJEMAA Kheir-Eddine

d'avoir accepté de nous encadrer et d'avoir mis son savoir à notre disposition, ses conseils et ses observations qui nous ont fortement aidées à finir ce travail.

Nous remercions également tous les membres du jury (BENYEZA Nabil et MEROUANI Lazher) qui nous ont guidés dans ce travail

Bien sur, nous n'oublie pas remercier tous mes

Collègues de la promotion 2016/2017 pour leurs

Encouragement, toute la famille de département de SM,

Et tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin

De bien durant la réalisation de ce travail.

AHLAM et SALIMA

DEDICACE

بتوفيق من الله الواحد الأحد

Je dédie ce travail à

L'esprit de mon père, "Tayeb" qui est resté pur et mourut sur l'installation et que vous êtes.

Ma mère, qui est toujours présente et continue de l'être pour faire mon bonheur. Merci pour être sacrifiée pour que ces enfants grandissent et prospèrent. Que dieu la protège et lui donne bonne santé et qu'elle trouve ici la preuve de ma reconnaissance infinie.

A mes chères sœurs et mes frères et ses enfants

Douaa, Hana, Safa, Mohamed, Ritadj

A ma tante et ses enfants

A tous mes amis (Somia, Naima, Ghania, Nadjet) avec qui j'ai passé les meilleurs moments de ma vie.

A ma cher binôme AHLAM et sa famille.

A tous ceux qui sont chers à mon cœur.

SALIMA

DEDICACE

بتوفيق من الله الواحد الأحد

Je dédie ce travail à

Mon père, pour ses encouragements incessants et son soutien moral aux moments difficiles qui furent pour moi les meilleurs gages de réussite. Qu'il trouve dans ce travail la preuve modeste d'une reconnaissance infinie et d'un profond amour.

ma très chère mère, qui m'a accompagné durant ce long parcours de mon éducation.

A mes frères :Keir-eddine, Ahmed, Youcef

A ma sœur : Miled

A mon Frère de l'allaitement: Abd-errazak Merzougui

A toute la famille grandes et petits.

A mes chères amies : Somia, Naima,

A tous mes Collègues de la promotion Physique théorique 2014/2015

A tous ceux qui sont chers à mon cœur.

AHLAM

Table des matières

Liste des tableaux

Liste des figures

Liste des symboles

V	Energie potentiel
$\vec{r}$	Coordonnée relative
$\vec{p}_i$	Quantité de mouvement de la i ème particules
E	L'énergie
$\hat{H}$	L'Hamiltonien
$\hat{H}_r$	L'Hamiltonien relatif
Ψ	Fonction d'onde
$R_{n,l}$	Fonction d'onde radiale
$\hbar$	Constante de Plank réduite
Δ	L'opérateur de laplace
$d\wp$	Probabilité de présence
δ_{ij}	Kronecker
$\overrightarrow{R}$	Vecteur du centre de masse
m_i	La masse de la i ème particules
$\mathbf{M}$	La masse totale d'un système de particules
$\vec{\rho}, \vec{\sigma}, \vec{\delta}, ...$	Coordonnées de Jacobi
k_{ij}	Constante de couplage
$\hat{N}$	L'opérateur hermitique
$H_n(q)$	Le $n - ème$ polynôme d'Hermite
ξ_r	L'espace des états
L_ν^q	Le polynôme associé de Laguerre
$\hat{T}$	L'opérateur de l'énergie cinétique
$\mu, \mu_\rho, ...$	La masse réduite
$E_n^{(N)}$	Le spectre d'énergie du système à N corps

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.

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.

La résolution analytique des problèmes à N corps est très difficile voir impossible pour la plupart des problèmes réels. Déjà, le problème le plus simple, à savoir le problème à un corps invariant par rotation, ou, ce qui revient au même, le problème à deux corps avec une interaction invariante par translation et par rotation, ne sont résolvables que pour des classes très particulières de potentiel. Dans tous les autres cas, on est obligé à recourir à des méthodes de résolution approximatives. Parmi ces méthodes, citons le développement sur les harmoniques hypersphériques [1], [2], les équations de Faddeev [3], dérivation de bornes supérieures par le développement systématique sur des Gaussiennes corrélées [4], ...

Parmi les systèmes à N corps qui sont exactement solubles on trouve l'oscillateur harmonique qui fera l'objet principal du travail présenté dans ce mémoire. On vise donc à résoudre de manière analytique exacte de l'équation de Schrödinger à N corps pour des potentiels harmoniques. On s'intéresse en particulier à la détermination du spectre d'énergie et la fonction d'onde radiale.

Le manuscrit s'organise comme suit :

Dans le premier chapitre : nous présentons un aperçu assez général sur l'équation de Schrödinger et les relations de commutation canonique. Nous avons ensuite présenté les coordonnées de Jacobi indispensables pour le traitement des problèmes à petit nombre de corps.

Le deuxième chapitre de ce mémoire, concerne l'oscillateur harmonique à une particule. Nous avons résolu le problème de l'oscillateur harmonique à une et à trois dimensions par une méthode algébrique.

Le troisième chapitre est dévolu à l'oscillateur harmonique à deux corps. Nous allons montrer que le problème à deux corps, dont l'interaction ne dépend que de la distance relative entre eux est équivalent au problème d'une particule en mouvement dans un champ de force centrale.

Le quatrième chapitre sera consacré à l'étude de l'oscillateur harmonique à trois corps. Toutes les configurations possibles de masses seront considérer.

Le cinquième chapitre concerne l'oscillateur harmonique à quatre corps. Nous allons examiner le cas de toutes les masses égales puis le cas avec trois masses différentes et finalement le cas général où toutes les masses sont différentes.

Le problème à cinq corps sera traité dans le sixième chapitre. Nous allons considéré trois configurations, à savoir, la configuration avec toutes les masses égales puis celle avec deux masses différentes et finalement le cas général dont les masses sont toutes différentes.

Finalement, on a une conclusion générale sur ce travail

Chapitre 1

L'équation de Schrödinger

Dans ce chapitre, nous allons présenter en détail l'équation de Schrödinger qui est l'équation de base de la mécanique quantique ainsi que les relations de commutations canonique. Nous allons ensuite présenter les coordonnées de Jacobi utiles pour étudier les systèmes à petit nombre de corps.

1.1 L'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger, fondé par le physicien autrichien Erwin Schrödinger en 1925, est l'équation de base de la mécanique quantique non relativiste [5]. Elle a la même importance centrale pour la mécanique quantique que les lois du mouvement de Newton ont pour les phénomènes à grande échelle de la mécanique classique ou les équations de Maxwell en électromagnétisme. Elle décrit la forme des ondes de probabilité (ou des fonctions d'onde) qui régissent le mouvement des petites particules et spécifie comment ces ondes sont modifiées par des influences externes.

Selon la mécanique classique, si une particule de masse m est soumise à une force telle que son énergie potentielle soit $V(\vec{r})$, alors la somme de $V(\vec{r})$ et l'énergie cinétique $\vec{p}^2/2m$ est égale à une constante, l'énergie totale E de la particule. Ainsi :

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}). \tag{1.1}$$

En mécanique quantique l'énergie totale est substituée par un opérateur $\hat{H}$ appelé hamiltonien qui est propriétaire d'une expression similaire à l'expression de l'énergie classique. L'équation de Schrödinger est donnée par la loi suivante :

$$\hat{H}\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) \tag{1.2}$$

ou encore

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})\right)\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t), \tag{1.3}$$

L'opérateur hamiltonien peut être obtenu à partir d'hamiltonien de la mécanique classique par le principe de correspondance ; Si $H(\vec{r},\vec{p})$ est l'hamiltonien classique, l'hamiltonien quantique est obtenu en substituant aux variables classiques $\vec{r}$ (coordonnées) et $\vec{p}$ (impulsions) les opérateurs $\hat{r}$ et $\hat{p}$. Dans la représentation en coordonnées, les règles de correspondance [6] pour l'énergie E et les composantes p_x, p_y, p_z de $\vec{p}$.

$$E \to \hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad p_x \to \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \to \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z \to \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}, \tag{1.4}$$

L'équation de Schrödinger devient alors :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t). \tag{1.5}$$

En mécanique quantique, il existe des états d'énergie bien déterminée appelés également états stationnaires. Pour un système qui évolue dans un potentiel constant, éventuellement nul, tous les instants sont équivalents vis-à-vis de ce système. La densité de probabilité de présence $|\Psi|^2$ doit, dans ce cas, être indépendante du temps.

Pour un système à une particule de fonction d'onde $\Psi(\vec{r},t)$, on doit avoir :

$$|\Psi(\vec{r},t)|^2 = |\Psi(\vec{r})|^2. \tag{1.6}$$

La fonction vérifiant la relation (1.6) est de la forme :

$$\Psi(\vec{r},t) = \Psi(\vec{r})\,e^{i\alpha t}. \tag{1.7}$$

$\Psi(\vec{r},t)$ est la fonction d'onde décrivant un état stationnaire d'énergie E. En reportant l'expression (1.7) dans l'équation de Schrödinger (1.2), il vient :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = -\hbar\alpha\Psi(\vec{r},t) = \hat{H}\Psi(\vec{r},t)\,. \tag{1.8}$$

Puisque l'hamiltonien classique $\hat{H}$ est égale à l'énergie E, on a : $\hat{H}\Psi = E\Psi$, d'où $\alpha = -E/\hbar$. C'est une équation aux valeurs propres. Les fonctions d'onde des états stationnaires en fonction du temps sont donc de la forme [7] :

$$\Psi(\vec{r},t) = \Psi(\vec{r})\,e^{\frac{-i}{\hbar}Et}. \tag{1.9}$$

En mécanique quantique, les solutions de l'équation de Schrödinger d'un système physique sont appelées des fonctions d'onde qui doivent être interprétées en termes probabilistes. Le carré de la fonction d'onde, cependant, a une signification physique : la probabilité $d\wp$ de trouver la particule à un moment donné t dans un volume élémentaire $d^3\vec{r}$ est :

$$d\wp = |\Psi(\vec{r},t)|^2\,d^3\vec{r}.$$

$|\Psi(\vec{r},t)|^2$ s'interprété donc comme une densité de probabilité de présence.

1.2 Relations de commutation canoniques

Dans la description quantique du mouvement d'une particule, il est clair que les opérateurs de coordonnées $\hat{r}_i = \hat{x},\ \hat{y},\ \hat{z}$ et de quantités de mouvement $\hat{p}_x,\ \hat{p}_y,\ \hat{p}_z$, ne commutent pas, et leurs relations de commutation sont données par :

$$[\hat{r}_i,\hat{p}_j] = \hat{r}_i\hat{p}_j - \hat{p}_j\hat{r}_i = i\hbar\delta_{ij}, \qquad i,j = 1,2,3. \tag{1.10}$$

où

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 \text{ si} & i = j \\ 0 \text{ si} & i \neq j \end{cases} \tag{1.11}$$

est le symbole de Kronecker.

Nous avons en particulier

$$
\begin{aligned}
[\hat{x}, \hat{p}_x] &= [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar, \qquad (1.12)\\
[\hat{x}, \hat{p}_y] &= [\hat{x}, \hat{p}_z] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_z] = [\hat{z}, \hat{p}_x] = [\hat{z}, \hat{p}_y] = 0.
\end{aligned}
$$

Ces relations sont appelées Relations de Commutation Canonique.

Propriété :

Lors d'une transformation d'échelle effectuée sur l'opérateur position $\hat{x}$, son moment Conjugué $\hat{p}_x$ se transforme inversement. En effet, si on considère le nouveau opérateur position $\hat{x}^{'} = \alpha\hat{x}$, son moment conjugué $\hat{p}_x^{'}$ doit être $\hat{p}_x^{'} = \frac{1}{\alpha}\hat{p}_x$ pour vérifier la relation de commutation canonique :

$$\left[\alpha\hat{x}, \frac{1}{\alpha}\hat{p}_x\right] = \left[\hat{x}^{'}, \hat{p}_x^{'}\right] = i\hbar. \qquad (1.13)$$

1.3 Coordonnées de Jacobi

Pour étudier un système à petit nombre de corps, on peut introduire des coordonnées dites de Jacobi pour éliminer le mouvement du centre de masse. Pour un système à deux corps, il est familier de remplacer les coordonnées individuelles $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ par la coordonnée relative $\vec{r}$

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2,$$

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

$$\vec{R} = \frac{1}{m_1 + m_2}\left(m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2\right).$$

Considérons maintenant un système de N particules de masses m_i et de positions $\vec{r}_i$. Soit $\mathbf{M}$ la masse totale du système et $\vec{R}$ la coordonné du centre de masse :

$$
\begin{aligned}
\mathbf{M} &= \sum_{i=1}^{N} m_i, \qquad (1.14)\\
\vec{R} &= \frac{1}{\mathbf{M}}\sum_{i=1}^{N} m_i\vec{r}_i. \qquad (1.15)
\end{aligned}
$$

Nous définissons la j-ème coordonnée de Jacobi comme la variable relative de la $(j+1)$ème particule par rapport au centre de masse des j premières.

$$\vec{\rho}_j = -\vec{r}_{j+1} + \frac{1}{\sum_{i=1}^{j} m_i} \sum_{i=1}^{j} m_i \vec{r}_i. \tag{1.16}$$

Au centre de masse des j premières particules, nous pouvons donc partir d'une particule est définir récursivement toutes les coordonnées de Jacobi [8].

Pour les problèmes atomiques il est intéressant de prendre le noyau (la particule la plus massive) comme première de référence. Les coordonnées de Jacobi seront approximativement équivalentes aux coordonnées relatives des électrons vis-à-vis du noyau.

Chapitre 2

L'oscillateur harmonique à une particule

On appelle oscillateur harmonique le système formé par une particule ou une assemblée de particules plongées dans un potentiel de la forme :

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2, \tag{2.1}$$

avec k une constante réelle positive.

L'exemple le plus simple est celui d'une masse m soumise à une force de rappel $F = -kx$, proportionnelle à la distance de la masse par rapport à une position de repos définie ici par $x = 0$ [9]. Un grand nombre de systèmes stables obéissent, en première approximation, à un modèle de ce genre : éloignés de leur position d'équilibre, ces systèmes tendent à y revenir, régis, si l'on se borne aux petites oscillations, par les équations de l'oscillateur harmonique. C'est le cas pour les vibrations des atomes d'une molécule, ou celles des atomes et molécules au sein d'un réseau cristallin.

En outre, le champ électromagnétique pouvant être interprété formellement en termes d'oscillateurs harmoniques, la quantification des champs électromagnétiques provient directement des propriétés de l'oscillateur harmonique traité en mécanique quantique.

2.1 Approximation harmonique

Les systèmes se présentant en bonne approximation sous la forme d'oscillateurs harmoniques sont très nombreux. Classiquement, lorsqu'un système est en équilibre en $x = x_0$, son énergie potentielle est minimale, d'où $dV(x)/dx|_{x=x_0} = 0$. Au voisinage du point d'équilibre $x = x_0$, on peut développer le potentiel $V(x)$ en série de Taylor :

$$V(x) = V(x_0) + \frac{k}{2}(x - x_0)^2 + C(x - x_0)^3 + ... \tag{2.2}$$

Pour des petites oscillations autour de $x = x_0$ ($|x - x_0| << k/C$), le terme cubique est négligeable et le système se ramène à un oscillateur harmonique. Nous choisissons les origines des positions et des énergies telles que $x_0 = 0$ et $V(x_0) = 0$, on obtient alors un potentiel correspondant à celui d'un oscillateur harmonique donné par la relation (2.1).

2.2 L'oscillateur harmonique à une dimension

L'importance de l'oscillateur harmonique en physique quantique est double. Le premier aspect concerne la possibilité de décrire en première approximation un système lié par un oscillateur harmonique, cela donne des informations précieuses sur les niveaux d'énergie, leur espacement et leur dégénérescence. C'est l'idée utilisée dans la description du modèle en couche des noyaux atomiques. Le second aspect concerne le formalisme utilisé basé sur la définition des opérateurs de création et d'annihilation.

On considère une particule de masse m plongée dans un puits de potentiel harmonique, c'est-à-dire que le mouvement de cette particule sera défini par l'hamiltonien :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2, \tag{2.3}$$

où ω est la pulsation propre de l'oscillateur.

On introduit l'opérateur de création de quanta :

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x \tag{2.4}$$

et son hermitien conjugué l'opérateur d'annihilation de quanta :

$$a = \left(a^{+}\right)^{+} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x. \tag{2.5}$$

On considère l'opérateur hermitique $\hat{N} = a^{+}a$:

$$\begin{aligned} \hat{N} &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x\right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar}\hat{p}_x^2 + \frac{i}{2\hbar}\left(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}\right) \\ &= \frac{1}{\omega\hbar}\left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\right) - \frac{1}{2}\mathbb{1} \end{aligned} \tag{2.6}$$

où on a utilisé la relation de commutation

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar\mathbb{1}. \tag{2.7}$$

L'hamiltonien (2.3) s'exprime donc en fonction de l'opérateur $\hat{N}$ par :

$$\hat{H} = \omega\hbar\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\mathbb{1}\right).$$

La recherche des valeurs et vecteurs propres de l'hamiltonien $\hat{H}$ se réduit par conséquent à la recherche des valeurs propres n et des vecteurs propres $|n\rangle$ de $\hat{N}$:

$$\begin{aligned} \hat{N}\ |n\rangle &= n\ |n\rangle \\ \hat{H}\ |n\rangle &= \omega\hbar\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\mathbb{1}\right)\ |n\rangle = \omega\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right)\ |n\rangle . \end{aligned}$$

Valeurs propres de $\hat{\mathbf{N}}$

Comme l'opérateur $\hat{N}$ est hermitique car $\hat{N}^{+} = (a^{+}a)^{+} = a^{+}a = \hat{N}$, ce qui définit des valeurs propres n réelles :

$$n^{*} = \langle n|\,\hat{N}^{+}\,|n\rangle = \langle n|\,\hat{N}\,|n\rangle = n.$$

Le vecteur bra $\langle n|\ a^{+}$ est le transposé du ket $a\ |n\rangle$ et par conséquent n représente la norme (positive ou nulle) du vecteur $a\ |n\rangle$:

$$n = \|a\ \ |n\rangle\| \geq 0. \tag{2.8}$$

Les valeurs propres n sont donc positives ou nulles.

En faisant usage des expressions des opérateurs a (2.5) et a^+ (2.4) et de la relation de commutation canonique (2.7), le commutateur $[a, a^+]$ se réduit à :

$$a\ a^+ - a^+a = \left[a, a^+\right] = \mathbb{1}.$$

Il en résulte les relations importantes :

$$\begin{aligned} \hat{N}\ a &= a^+a\ a = \left(aa^+ - \mathbb{1}\right) a = aa^+a - a = a\left(a^+a - \mathbb{1}\right) \\ &= a\left(\hat{N} - \mathbb{1}\right), \end{aligned}$$

et de façon analogue avec l'opérateur de création :

$$\begin{aligned} \hat{N}\ a^+ &= a^+a\ a^+ = a^+\left(\mathbb{1} + a^+a\right) = a^+\left(a^+a + \mathbb{1}\right) \\ &= a^+\left(\hat{N} + \mathbb{1}\right), \end{aligned}$$

ou aussi en terme de commutateurs :

$$\begin{aligned} \left[\hat{N}, a\right] &= -a, \\ \left[\hat{N}, a^+\right] &= a^+. \end{aligned}$$

En appliquant l'opérateur $\hat{N}a$ au vecteur $|n\rangle$, il vient :

$$\hat{N}a\ \ |n\rangle = a\left(\hat{N} - \mathbb{1}\right)|n\rangle = a\hat{N}\,|n\rangle - a\,|n\rangle = an\,|n\rangle - a\,|n\rangle = (n-1)\,a\,|n\rangle\,. \tag{2.9}$$

Ainsi, le vecteur $a\,|n\rangle$ est un vecteur propre de $\hat{N}$ correspondant à la valeur propre $(n-1)$ nécessairement positive $(n - 1 \geq 0)$. On peut donc dire que le vecteur $a\,|n\rangle$ est proportionnel au vecteur $|n-1\rangle$ qui est aussi vecteur propre de $\hat{N}$ correspondant à la valeur propre $(n-1)$:

$$\hat{N}\,|n-1\rangle = (n-1)\,|n-1\rangle\,. \tag{2.10}$$

De même le vecteur $a^2\,|n\rangle$ est vecteur propre de $\hat{N}$ correspondant à la valeur propre $(n-2)$:

$$\begin{aligned} \hat{N}a^2\,|n\rangle &= \left(a\hat{N}-a\right)a\,|n\rangle = \left(a\hat{N}a-a^2\right)|n\rangle = \left(a\left(a\hat{N}-a\right)-a^2\right)|n\rangle \\ &= \left(a^2\hat{N}-2a^2\right)|n\rangle = \left(a^2 n-2a^2\right)|n\rangle \\ &= (n-2)\,a^2\,|n\rangle\,. \end{aligned} \tag{2.11}$$

De manière générale, le vecteur $a^p\,|n\rangle$ (avec $p\geq 2$) est un vecteur propre de $\hat{N}$ correspondant à la valeur propre $(n-p+1)$:

$$\hat{N}a^p\,|n\rangle = (n-p+1)\,a^p\,|n\rangle\,. \tag{2.12}$$

En comparant les relations (2.9) et (2.10) cela conduit à poser :

$$a\,|n\rangle = c\,|n-1\rangle\,. \tag{2.13}$$

On peut, sans perte de généralité, supposer les vecteurs $|n\rangle$ normalisés et écrire

$$\left\langle n^{'}\mid n\right\rangle = \delta_{nn'}.$$

La norme du vecteur $a\,|n\rangle$ s'écrit :

$$(a\,|n\rangle)^{+}\,(a\,|n\rangle) = \langle n|\,a^{+}a\,|n\rangle = \langle n-1|\,c^{*}c\,|n-1\rangle = |c|^2\,\langle n-1|\,n-1\rangle = |c|^2\,.$$

Mais d'après (2.8), la norme de $a\,|n\rangle$ est égale à n, on peut donc déterminer la constante de proportionnalité c :

$$c = \sqrt{n}.$$

L'opérateur d'annihilation a fait passer de l'état propre $|n\rangle$ de $\hat{N}$ à l'état propre $|n-1\rangle$ de

$\hat{N}$ via la relation (2.13) qui devient donc :

$$a\left|n\right\rangle = \sqrt{n}\left|n-1\right\rangle . \tag{2.14}$$

Multiplions les deux membres de cette dernière équation par l'opérateur a, nous obtenons

$$a^2\left|n\right\rangle = aa\left|n\right\rangle = a\sqrt{n}\left|n-1\right\rangle = \sqrt{n\left(n-1\right)}\left|n-2\right\rangle . \tag{2.15}$$

Ainsi, en multipliant de gauche successivement l'équation (2.15) par a on aboutit, par récurrence, à :

$$a^p\left|n\right\rangle = \sqrt{n\left(n-1\right)\left(n-2\right)...\left(n-p+1\right)}\left|n-p\right\rangle .$$

Si $n = 0$, c'est-à-dire si la norme du vecteur $a\left|n\right\rangle$ est nulle ($\left\|a\left|n\right\rangle\right\| = 0$), alors le vecteur $a\left|n\right\rangle$ lui-même est nul :

$$a\left|0\right\rangle = 0.$$

La valeur 0 appartient donc à la suite des valeurs possibles de n qui sont donc des valeurs entières positives ou nulles $n = 0, 1, 2, ...$

L'équation aux valeurs propres de l'opérateur hamiltonien $\hat{H}$ s'écrit donc

$$\hat{H}\left|n\right\rangle = \left(\hat{N} + \frac{1}{2}\mathbb{1}\right)\hbar\omega\left|n\right\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\left|n\right\rangle .$$

Le spectre d'énergie de l'oscillateur harmonique est donc discret et les valeurs possibles de l'énergie sont données par :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{2.16}$$

et la fonction d'onde associée est :

$$\Psi_n\left(x\right) = Ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}H_n\left(\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right)$$

où C est le constante de normalisation et $H_n\left(q\right)$ est le $n - \grave{e}me$ polynôme d'Hermite [10].

L'état fondamental correspond à $n = 0$ qui mène à la plus petite valeur de l'énergie :

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

et la fonction d'onde correspondante est une fonction gaussienne :

$$\Psi_0(x) = Ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

On montre de façon tout à fait analogue que :

$$\hat{N}\left(a^+\right)^p|n\rangle = (n+p)\left(a^+\right)^p|n\rangle$$

et

$$\left(a^+\right)^p|n\rangle = \sqrt{(n+1)\ldots(n+p)}\,|n+p\rangle\,.$$

A partir d'une valeur propre $n > 0$ quelconque et de son état propre correspondant $|n\rangle$ de $\hat{N}$, en appliquant l'opérateur d'annihilation a, on construit donc des états propres $\left|n^{'}\right\rangle = |n-1\rangle$, $|n-2\rangle$,..., et par récurrence, on déduit que ce processus s'arrête forcement à $n^{'} = 0$ avec l'état $|0\rangle$.

2.3 L'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions

L'hamiltonien de l'oscillateur harmonique à trois dimensions s'écrit comme suit :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) + \frac{1}{2}m\left(\omega_x^2\hat{x}^2 + \omega_y^2\hat{y}^2 + \omega_z^2\hat{z}^2\right)$$

formellement, il s'agit de trois oscillateurs indépendants. ω_x, ω_y et ω_z sont des constantes réelles positives appelées *pulsations.* L'oscillateur est dit isotrope si :

$$\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega.$$

Alors :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2\right) \tag{2.17}$$

L'espace des états ξ_r peut être considéré comme le produit tensoriel des espaces des états ξ_x, ξ_y et ξ_z d'une particule en mouvement sur les axes Ox, Oy et Oz

$$\xi_r = \xi_x \otimes \xi_y \otimes \xi_z$$

où ξ_x est l'espace des états d'une particule se déplaçant suivant Ox, ξ_y et ξ_z étant définis de façon analogue. Alors l'hamiltonien peut être écrit sous la forme d'une somme de trois oscillateurs harmoniques unidimensionnels comme suit :

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z \ , \tag{2.18}$$

avec

$$\hat{H}_{r_i} = \frac{\hat{p}_{r_i}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{r}_i^2, \qquad r_i = x, y, z.$$

Comme on connaît les valeurs propres et les vecteurs propres d'un oscillateur à une dimension, on a pour les trois hamiltoniens $\hat{H}_x$, $\hat{H}_y$ et $\hat{H}_z$

$$\begin{aligned}
\hat{H}_x \left| n_x \right\rangle &= E_{n_x} \left| n_x \right\rangle = \left(n_x + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \left| n_x \right\rangle , \\
\hat{H}_y \left| n_y \right\rangle &= E_{n_y} \left| n_y \right\rangle = \left(n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \left| n_y \right\rangle , \\
\hat{H}_z \left| n_z \right\rangle &= E_{n_z} \left| n_z \right\rangle = \left(n_z + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \left| n_z \right\rangle ,
\end{aligned}$$

où $\left| n_x \right\rangle$, $\left| n_y \right\rangle$ et $\left| n_z \right\rangle$ appartiennent respectivement à ξ_x, ξ_y et ξ_z, et n_x, n_y et n_z sont des entiers positifs ou nuls.

Les valeurs propres de $\hat{H}$, (2.18), sont les sommes des valeurs propres de $\hat{H}_x$, $\hat{H}_y$ et $\hat{H}_z$ soit :

$$\begin{aligned}
E_{n_x, n_y, n_z} &= E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} \\
&= \left(n_x + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \left(n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \left(n_z + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \\
&= \left(n_x + n_x + n_x + \frac{3}{2} \right) \hbar\omega \\
&= \left(n + \frac{3}{2} \right) \hbar\omega = E_n \ ,
\end{aligned}$$

où $n = n_x + n_y + n_z$ est un entier égal à la somme de trois nombres entiers dont chacun peut prendre toutes les valeurs positives ou nulles. n sera donc aussi positif ou nul. La fonction d'onde associée est

$$\Psi_n(x,y,z) = Ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_{n_x}\left(\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right) \times e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}y^2} H_{n_y}\left(\frac{m\omega y^2}{\hbar}\right) \times e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}z^2} H_{n_z}\left(\frac{m\omega z^2}{\hbar}\right).$$

D'autre part, si on travail dans le système de coordonnées sphériques, nous obtenons le même résultat avec l'apparition du nombre quantique orbital l :

$$E_{n_r,l} = \left(n_r + l + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega = E_n$$

où $l = 0, 1, ..., n_r - 1$ et $n = n_r + l$, avec n_r un nombre entier positif ou nul.

La fonction d'onde radiale pour l'oscillateur harmonique isotrope est

$$R_{n,l} = Cr^l e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2} L_{(n-l)/2}^{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right)$$

où C est une constante de normalisation et L_ν^q est le polynôme associé de Laguerre [11].

En particulier, l'énergie de l'état fondamental est la valeur propre la plus basse de l'hamiltonien

$$E_0^{(1)} = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

et la fonction d'onde correspondante sera :

$$R_{0,0}^{(1)} = Ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2}.$$

Remarque

On se trouve parfois dans la situation où l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions s'exprime en fonction d'une constante dite de couplage λ :

$$\hat{H} = \alpha\hat{p}^2 + \lambda\hat{r}^2 \tag{2.19}$$

avec $\lambda = \frac{1}{2}m\omega^2$ et $\alpha = 1/(2m)$ sont des paramètre positif. Dans ce cas, le spectre d'énergie s'obtient facilement par la relation

$$E_n = \hbar\sqrt{\lambda\alpha}\,(2n+3)\,. \tag{2.20}$$

et la fonction d'onde

$$R_{n,l} = Cr^l e^{-\frac{1}{2\hbar}\sqrt{\frac{\lambda}{\alpha}}r^2} L_{(n-l)/2}^{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2\hbar}\sqrt{\frac{\lambda}{\alpha}}r^2\right). \tag{2.21}$$

Chapitre 3

L'oscillateur harmonique à deux corps

L'étude des vibrations des noyaux d'une molécule diatomique est une application simple des résultats obtenus pour l'oscillateur harmonique [12]. Nous allons voir qu'on peut en effet ramener le problème des vibrations des deux noyaux atomiques de la molécule à celui plus simple d'une masse réduite vibrant dans un potentiel harmonique.

Pour cela, nous allons d'abord étudier le problème général de deux particules en interaction qui ne sont soumises à aucune force extérieure, ce qui est le cas précisément de l'oscillateur harmonique.

En mécanique classique, le problème du mouvement de deux particules en interaction peut être réduit à celui d'une seule particule, en séparant le mouvement du centre de masse et celui autour de ce centre. Nous allons voir qu'une séparation analogue peut être réalisée en mécanique quantique.

3.1 Problème de deux particules en interaction

Considérons deux particules de masses respectives m_1 et m_2. Soient $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ les rayons vecteurs des particules ($Figure$ 1). Notons $\vec{r}$ le vecteur relatif :

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2. \tag{3.1}$$

Supposons que le système ne soit soumis à aucune force extérieure et que l'interaction entre les particules ne dépend que de leur distance relative $r = \|\vec{r}\|$ [13]. Notons par $V(\vec{r})$ l'énergie potentielle d'interaction. L'opérateur hamiltonien de ce système s'écrit :

$$\hat{H} = \hat{T} + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + V(\vec{r}) \tag{3.2}$$

où $\hat{T}$ est la partie cinétique de l'hamiltonien, Δ_1 et Δ_2 sont les Laplaciens relatifs aux coordonnées respectives de chaque particule.

Introduisons le rayon vecteur $\vec{R}$ du centre d'inertie défini par :

$$\overrightarrow{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2} \tag{3.3}$$

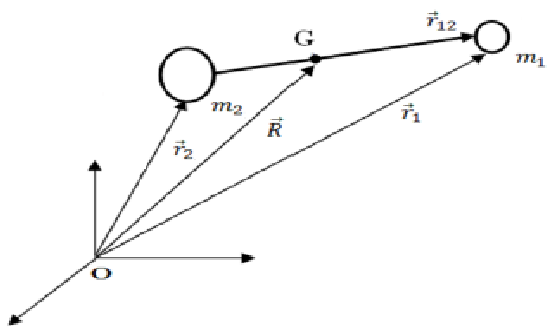

Figure1 : Système à deux corps : La coordonnée relative $\vec{r} = \vec{r}_{12}$
et la coordonnée du centre de masse $\vec{R}$

Notons X, Y et Z les composantes de $\vec{R}$, x, y et z celles de $\vec{r}$, x_1, y_1 et z_1 les composantes de $\vec{r}_1$ et x_2, y_2 et z_2 celles de $\vec{r}_2$. Les anciennes variables x_i, y_i et z_i sont liées aux nouvelles par les relations (3.1) et (3.3). On a, par exemple :

$$x = x_1 - x_2, \qquad X = \frac{m_1}{m_1 + m_2}x_1 + \frac{m_2}{m_1 + m_2}x_2$$

et des relations analogues pour les autres variables. Ce changement de variables permet d'exprimer les laplaciens qui figurent dans l'hamiltonien (3.2) en fonction des nouvelles variables x, y, z, X, Y et Z.

Soit une fonction f des deux variables $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ (en vérité c'est une fonction de six variables, une variable pour chaque composante des deux vecteurs) et soit une deuxième fonction g des variables $\vec{r}$ et $\vec{R}$ décrivant la même grandeur $A = f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = g\left(\vec{r}, \vec{R}\right)$. La différentielle de A s'écrit :

$$dA = df(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\partial f}{\partial x_1}dx_1 + \frac{\partial f}{\partial y_1}dy_1 + \frac{\partial f}{\partial z_1}dz_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2}dx_2 + \frac{\partial f}{\partial y_2}dy_2 + \frac{\partial f}{\partial z_2}dz_2 \qquad (3.4)$$

si on adopte comme variables les vecteurs $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$. Et

$$dA = dg\left(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{R}\right) = \frac{\partial g}{\partial x}dx + \frac{\partial g}{\partial y}dy + \frac{\partial g}{\partial z}dz + \frac{\partial g}{\partial X}dX + \frac{\partial g}{\partial Y}dY + \frac{\partial g}{\partial Z}dZ \qquad (3.5)$$

avec les variables $\vec{r}$ et $\vec{R}$.

En utilisant le fait que

$$dx = dx_1 - dx_2, \qquad dy = dy_1 - dy_2, \qquad dz = dz_1 - dz_2, \qquad (3.6)$$

et

$$\begin{aligned} dX &= \tfrac{m_1}{m_1+m_2}dx_1 + \tfrac{m_2}{m_1+m_2}dx_2, \\ dY &= \tfrac{m_1}{m_1+m_2}dy_1 + \tfrac{m_2}{m_1+m_2}dy_2, \\ dZ &= \tfrac{m_1}{m_1+m_2}dz_1 + \tfrac{m_2}{m_1+m_2}dz_2, \end{aligned} \qquad (3.7)$$

on peut tirer les composantes des Laplaciens Δ_1 et Δ_2 en fonction des dérivées partielles par rapport aux composantes du vecteur relatif $\vec{r}$ et celles du vecteur du centre de masse $\vec{R}$:

$$\begin{aligned} \tfrac{\partial}{\partial x_1} &= \tfrac{m_1}{m_1+m_2}\tfrac{\partial}{\partial X} + \tfrac{\partial}{\partial x}, & \tfrac{\partial}{\partial x_2} &= \tfrac{m_2}{m_1+m_2}\tfrac{\partial}{\partial X} - \tfrac{\partial}{\partial x}, \\ \tfrac{\partial}{\partial y_1} &= \tfrac{m_1}{m_1+m_2}\tfrac{\partial}{\partial Y} + \tfrac{\partial}{\partial y}, & \tfrac{\partial}{\partial y_2} &= \tfrac{m_2}{m_1+m_2}\tfrac{\partial}{\partial Y} - \tfrac{\partial}{\partial y}, \\ \tfrac{\partial}{\partial z_1} &= \tfrac{m_1}{m_1+m_2}\tfrac{\partial}{\partial Z} + \tfrac{\partial}{\partial z}, & \tfrac{\partial}{\partial z_2} &= \tfrac{m_2}{m_1+m_2}\tfrac{\partial}{\partial Z} - \tfrac{\partial}{\partial z}. \end{aligned}$$

Les dérivées secondes se déduisent facilement

$$\begin{aligned} \tfrac{\partial^2}{\partial x_1^2} &= \left(\tfrac{m_1}{m_1+m_2}\right)^2 \tfrac{\partial^2}{\partial X^2} + \tfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \tfrac{2m_1}{m_1+m_2}\tfrac{\partial}{\partial x}\tfrac{\partial}{\partial X}, & \tfrac{\partial^2}{\partial x_2^2} &= \left(\tfrac{m_2}{m_1+m_2}\right)^2 \tfrac{\partial^2}{\partial X^2} + \tfrac{\partial^2}{\partial x^2} - \tfrac{2m_2}{m_1+m_2}\tfrac{\partial}{\partial x}\tfrac{\partial}{\partial X}, \\ \tfrac{\partial}{\partial y_1} &= \left(\tfrac{m_1}{m_1+m_2}\right)^2 \tfrac{\partial^2}{\partial Y^2} + \tfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \tfrac{2m_1}{m_1+m_2}\tfrac{\partial}{\partial y}\tfrac{\partial}{\partial Y}, & \tfrac{\partial}{\partial y_2} &= \left(\tfrac{m_2}{m_1+m_2}\right)^2 \tfrac{\partial^2}{\partial Y^2} + \tfrac{\partial^2}{\partial y^2} - \tfrac{2m_2}{m_1+m_2}\tfrac{\partial}{\partial y}\tfrac{\partial}{\partial Y}, \\ \tfrac{\partial}{\partial z_1} &= \left(\tfrac{m_1}{m_1+m_2}\right)^2 \tfrac{\partial^2}{\partial Z^2} + \tfrac{\partial^2}{\partial z^2} + \tfrac{2m_1}{m_1+m_2}\tfrac{\partial}{\partial z}\tfrac{\partial}{\partial Z}, & \tfrac{\partial}{\partial z_2} &= \left(\tfrac{m_2}{m_1+m_2}\right)^2 \tfrac{\partial^2}{\partial Z^2} + \tfrac{\partial^2}{\partial z^2} - \tfrac{2m_2}{m_1+m_2}\tfrac{\partial}{\partial z}\tfrac{\partial}{\partial Z}. \end{aligned}$$

où on a utilisé le fait que $\frac{\partial}{\partial \alpha}\frac{\partial}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta}\frac{\partial}{\partial \alpha}$.

Les expressions des Laplaciens Δ_1 et Δ_2 se simplifient en :

$$\begin{aligned}\Delta_1 = \quad \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_1^2} = \quad & \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\right)^2\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right) \\ & + \frac{2m_1}{m_1+m_2}\left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial Y}+\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial Z}\right) \ ,\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}\Delta_2 = \quad \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_2^2} = \quad & \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\left(\frac{m_2}{m_1+m_2}\right)^2\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right) \\ & - \frac{2m_2}{m_1+m_2}\left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial Y}+\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial Z}\right) \ ,\end{aligned}$$

En fin, la partie cinétique $\hat{T}$ de l'hamiltonien du système se réduit à :

$$\begin{aligned}T = & -\frac{\hbar^2}{2m_1}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)-\frac{\hbar^2}{2m_1}\left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\right)^2\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right)-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{2m_1}{m_1+m_2}\left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial Y}+\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial Z}\right) \\ & -\frac{\hbar^2}{2m_2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)-\frac{\hbar^2}{2m_2}\left(\frac{m_2}{m_1+m_2}\right)^2\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right)+\frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{2m_2}{m_1+m_2}\left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial Y}+\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial Z}\right) \\ = & -\left(\frac{\hbar^2}{2m_1}+\frac{\hbar^2}{2m_2}\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\left(\frac{\hbar^2}{2m_1}\left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\right)^2+\frac{\hbar^2}{2m_2}\left(\frac{m_2}{m_1+m_2}\right)^2\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right) \\ = & -\frac{\hbar^2}{2}\frac{m_1+m_2}{m_1m_2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right) \\ = & -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right)\end{aligned}$$

où $\mu = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$ et $\mathbf{M} = m_1 + m_2$ sont respectivement la masse réduite et la masse totale du système.

Si on adopte les notations suivantes :

$$\begin{aligned}\Delta_r &= \frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ \Delta_R &= \frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2}{\partial Z^2},\end{aligned}$$

l'hamiltonien $\hat{H}$ donné par (3.2) s'écrit en fonction des nouvelles variables $\vec{r}$ et $\vec{R}$:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{\hbar^2}{2\mathbf{M}}\Delta_R + V\left(\vec{r}\right). \tag{3.8}$$

L'équation stationnaire de Schrödinger du système s'écrit alors sous sa nouvelle forme :

$$\hat{H}\Psi\left(\vec{r},\vec{R}\right) = E\Psi\left(\vec{r},\vec{R}\right) \tag{3.9}$$

où Ψ dépend des nouvelles variables $\vec{r}$ et $\vec{R}$: $\Psi\left(\vec{r},\vec{R}\right)=\Psi\left(x,y,z,X,Y,Z\right)$

Séparation des variables

Comme l'énergie potentielle $V\left(\vec{r}\right)$ ne dépend que de la variable r, nous allons voir qu'on peut utiliser la méthode de séparation des variables pour simplifier la résolution de l'équation de Schrödinger (3.9). Pour cela, cherchons une solution sous la forme :

$$\Psi\left(\vec{r},\vec{R}\right)=\Psi\left(\vec{r}\right)\varphi\left(\vec{R}\right). \tag{3.10}$$

Substituant l'expression (3.10) dans l'équation de Schrödinger (3.9), on obtient par séparation des variables, les deux équations :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r+V\left(\vec{r}\right)\right)\Psi\left(\vec{r}\right) = E_r\Psi\left(\vec{r}\right) \tag{3.11}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathbf{M}}\Delta_R\varphi\left(\vec{R}\right) = E_R\varphi\left(\vec{R}\right) \tag{3.12}$$

avec $E=E_r+E_R$.

L'opérateur

$$\hat{H}_r=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r+V\left(\vec{r}\right) \tag{3.13}$$

est souvent appelé **hamiltonien relatif**.

La fonction d'onde $\Psi\left(\vec{r}\right)$ décrit le mouvement relatif des deux particules en tant que mouvement d'une particule fictive de masse μ dans un potentiel $V\left(\vec{r}\right)$. L'équation (3.11) est l'équation de Schrödinger de ces mouvements relatifs et E_r est l'énergie du système résultant de l'interaction des deux particules.

La fonction $\varphi\left(\vec{R}\right)$ décrit le mouvement du centre de masse en tant que mouvement libre d'une particule de masse totale $\mathbf{M}$. L'équation (3.12) est l'équation de Schrödinger décrivant ce mouvement et E_R l'énergie de translation de l'ensemble des deux particules.

Remarque

Dans un repère lié au centre de masse du système l'énergie totale est égale à l'énergie du mouvement relatif $E'=E_r^{'}$ puisque la vitesse du centre de masse est nulle et il est de même pour l'énergie cinétique $E_R^{'}=0$.

Dans le reste de ce document on ne s'intéresse que de l'énergie relative.

3.2 Cas d'une interaction harmonique

Le potentiel de deux particules en interaction harmonique est de la forme :

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(\vec{r}) = k(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 = kr^2,$$

et l'hamiltonien du mouvement relatif est :

$$\hat{H}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r + kr^2.$$

Le spectre d'énergie du mouvement relatif de deux particules en interaction harmonique s'obtient donc par l'équation (2.20) :

$$E_n^{(2)} = (2n+3)\hbar\sqrt{k\alpha} = (2n+3)\hbar\sqrt{\frac{k}{2\mu}} \tag{3.14}$$

En vertu de (3.14), la fonction d'onde radiale associée est

$$R_{n,l}^{(2)}(r) = Cr^l e^{-\frac{1}{2\hbar}\sqrt{2\mu k}r^2} \times L_{(n-l)/2}^{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2\hbar}\sqrt{2\mu k}r^2\right).$$

Le niveau fondamental se réduit à

$$E_0^{(2)} = 3\hbar\sqrt{\frac{k}{2\mu}} \tag{3.15}$$

et la fonction d'onde radiale correspondante :

$$R_{n,l}^{(2)}(r) = Ce^{-\frac{1}{2\hbar}\sqrt{2\mu k}r^2}.$$

Chapitre 4

L'oscillateur harmonique à trois corps

On s'intéresse dans ce chapitre à l'étude des systèmes à trois corps en interaction harmonique à deux corps ne dépendant que de la distance relative entre eux :

$$V\left(\vec{r}_i, \vec{r}_j\right) = V\left(\left|\vec{r}_i - \vec{r}_j\right|\right) = k_{ij}\left(\vec{r}_i - \vec{r}_j\right)^2. \tag{4.1}$$

Supposons que les particules ne se distinguent que par leur masse et donc la constante de couplage k_{ij} de l'interaction entre deux particules ne dépend que des masses des deux particules impliquées. Autrement-dit, de manière générale :

$$k_{\alpha\beta} = k_{\alpha\gamma} \qquad \text{si} \qquad m_\beta = m_\gamma. \tag{4.2}$$

L'hamiltonien du système s'écrit donc :

$$\hat{H}^{(3)} = \frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^{\,2}}{2m_3} + k_{12}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right)^2 + k_{13}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_3\right)^2 + k_{23}\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_3\right)^2. \tag{4.3}$$

Nous allons considérer tour-à-tour toutes les configurations possibles de masse, à savoir :

- toute les masses égales : configuration qu'on notera $(m,\, m,\, m)$.

- configuration avec deux masses différentes qu'on notera $(m,\, m,\, M)$.

- la configuration la plus générale avec toutes les masses différentes (m_1, m_2, m_3).

4.1 Système ayant toutes les masses égales $(3 \times m)$

Cette configuration correspond au cas où les 3 masses du système sont toutes égales.

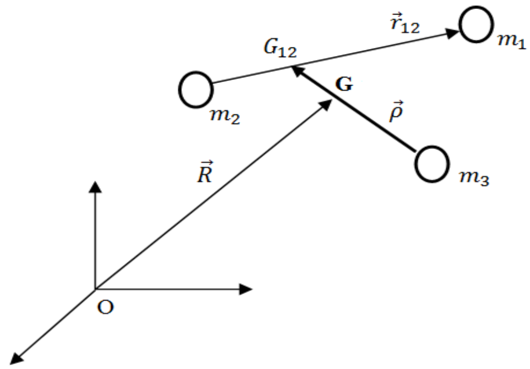

Figure 2 : Coordonnées de Jacobi pour le système à trois corps :

$\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ vecteur liant les deux premières particules,

$\vec{\rho}$ le vecteur liant la troisième particule et le centre de masse des deux premières.

Les coordonnées de Jacobi $\vec{r}$ (1.16) et $\vec{\rho}$ sont définies dans ce cas par :

$$\begin{aligned} \vec{r} &:= \vec{\rho}_1 = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \\ \vec{\rho} &:= \vec{\rho}_2 = -\vec{r}_3 + \tfrac{1}{2}\left(\vec{r}_1 + \vec{r}_2\right). \end{aligned} \tag{4.4}$$

En adjoignant aux coordonnées de Jacobi $\vec{r}$ et $\vec{\rho}$ (4.4), la coordonnée du centre de masse $\vec{R}$ définie par :

$$\vec{R} = \frac{1}{3}\left(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3\right), \tag{4.5}$$

on obtient un système de trois équations que l'on peut inverser pour exprimer les coordonnées individuelles $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$ et $\vec{r}_3$ en termes des coordonnées de Jacobi $\vec{r}$ et $\vec{\rho}$, et de la coordonnée du centre de masse $\vec{R}$. Nous obtenons :

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= \vec{R} + \tfrac{1}{2}\vec{r} + \tfrac{1}{3}\vec{\rho}, \\ \vec{r}_2 &= \vec{R} - \tfrac{1}{2}\vec{r} + \tfrac{1}{3}\vec{\rho}, \\ \vec{r}_3 &= \vec{R} - \tfrac{2}{3}\vec{\rho}. \end{aligned}$$

Le terme de l'énergie cinétique dans l'hamiltonien (4.3) exprimé en termes des vitesses $\dot{\vec{r}}_1 = d\vec{r}_1/dt$, $\dot{\vec{r}}_2 = d\vec{r}_2/dt$ et $\dot{\vec{r}}_3 = d\vec{r}_3/dt$,

$$T^{(3)} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} = \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_2^2 + \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_3^2, \tag{4.6}$$

se réduit en termes des vitesses relatives aux coordonnées de Jacobi à :

$$T^{(3)} = \frac{1}{2}(3m)\dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{m}{2}\right)\dot{\vec{r}}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{2m}{3}\right)\dot{\vec{\rho}}^2 \tag{4.7}$$

où $\dot{\vec{R}} = d\vec{R}/dt$, $\dot{\vec{r}} = d\vec{r}/dt$ et $\dot{\vec{\rho}} = d\vec{\rho}/dt$. Les masses $3m$, $m/2$ et $2m/3$ seront considérées comme des masses fictives ou réduites liées respectivement aux coordonnées $\vec{R}$, $\vec{r}$ et $\vec{\rho}$. Il est clair que la masse fictive liée à la coordonnée du centre de masse ne peut être que la masse totale du système $\mathbf{M} = 3m$ comme il se doit.

En termes des moments conjugués $\vec{P}_R$, $\vec{p}_r$ et $\vec{p}_\rho$ l'énergie cinétique s'écrit :

$$T^{(3)} = \frac{1}{2\mathbf{M}}\vec{P}_R^2 + \frac{1}{2\left(\frac{m}{2}\right)}\vec{p}_r^2 + \frac{1}{2\left(\frac{2m}{3}\right)}\vec{p}_\rho^2 \ . \tag{4.8}$$

Dans les conditions (4.2), c'est-à-dire que les constantes de couplage sont toutes égales :

$$k_{ij} = k, \qquad \text{si } i < j = 1, 2, 3,$$

l'énergie potentielle se réduit à son tour en termes des coordonnées $\vec{R}$, $\vec{r}$ et $\vec{\rho}$ à :

$$V^{(3)} = k(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + k(\vec{r}_1 - \vec{r}_3)^2 + k(\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2 = \frac{3}{2}kr^2 + 2k\rho^2. \tag{4.9}$$

L'hamiltonien du système se simplifie en :

$$\hat{H}^{(3)} = \frac{\vec{P}_R^2}{2\mathbf{M}} + \frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + \frac{3}{2}kr^2 + 2k\rho^2 \tag{4.10}$$

où

$$\begin{aligned}\mu_r &= \frac{m}{2},\\ \mu_\rho &= \frac{2m}{3}\end{aligned}$$

représentent respectivement les masses réduites relatives aux coordonnées de Jacobi $\vec{r}$ et $\vec{\rho}$. L'hamiltonien relatif se réduit donc à :

$$\hat{H}_r^{(3)} = \left(\frac{p_r^2}{2\mu_r} + \frac{3}{2}kr^2\right) + \left(\frac{p_\rho^2}{2\mu_\rho} + 2k\rho^2\right) \tag{4.11}$$

qui n'est d'autre que l'hamiltonien d'un système composé de deux oscillateurs harmoniques indépendants. L'énergie du système est alors la somme des énergies des deux oscillateurs et la fonction d'onde totale est le produit des fonctions d'onde de ces oscillateurs. Dans un système d'unités où $\hbar = 1$, nous avons :

$$\begin{aligned}E_{n_1,n_2}^{(3)} &= \sqrt{\frac{1}{2\mu_r}\frac{3}{2}k}\,(2n_1+3) + \sqrt{\frac{1}{2\mu_\rho}2k}\,(2n_2+3)\\ &= \sqrt{\frac{3k}{2m}}\,(2\,(n_1+n_2)+6) = 2\sqrt{\frac{3k}{2m}}\,(n+3)\,. \end{aligned}\tag{4.12}$$

La fonction d'onde radiale associée est le produit des deux fonctions d'onde radiales :

$$R_{n_1,l_1,n_2,l_2}^{(3)}(r,\rho) = \; Cr^{l_1}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{3k\mu_r}r^2}L_{(n_1-l_1)/2}^{l_1+\frac{1}{2}}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{3k\mu_r}r^2\right) \times \rho^{l_2}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{4k\mu_\rho}\rho^2}L_{(n_2-l_2)/2}^{l_2+\frac{1}{2}}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{4k\mu_\rho}\rho^2\right)$$

avec n_1, n_2, et n, $l_1$et l_2 des entiers positifs ou nuls.

L'état fondamental

L'énergie et la fonction d'onde du niveau fondamental seront donnés par :

$$E_0^{(3)} = 3\left(\sqrt{\frac{3k}{2m}} + \sqrt{\frac{3k}{2m}}\right) = 6\sqrt{\frac{3k}{2m}}, \tag{4.13}$$

$$R_{0,0,0,0}^{(3)} = Ce^{-\frac{1}{2}\sqrt{3k\mu_r}r^2}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{4k\mu_\rho}\rho^2}. \tag{4.14}$$

4.2 Système ayant deux masses différentes $(2 \times m, 1 \times M)$

Le système considéré ici est formé de deux particules de même masse $m_1 = m_2 = m$ et d'une troisième particule de masse $m_3 = M$.

Comme $m_1 = m_2$, les conditions (4.2) impliquent :

$$k_{13} = k_{23} = k.$$

Les coordonnées de Jacobi $\vec{r}$ et $\vec{\rho}$ sont définies de la même manière que dans le cas des masses égales, équations (4.4) tandis que la coordonnée du centre de masse $\vec{R}$ est cette fois-ci donnée par :

$$\vec{R} = \frac{1}{2m+M}\left(m\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 + M\vec{r}_3\right). \tag{4.15}$$

En inversant les relations (4.4) et (4.15), on obtient l'expression des coordonnées individuelles en termes des coordonnées de Jacobi et de la coordonnée du centre de masse avec le résultat :

$$\begin{aligned}
\vec{r}_1 &= \vec{R} + \tfrac{1}{2}\vec{r} + \tfrac{M}{M+2m}\vec{\rho}, \\
\vec{r}_2 &= \vec{R} - \tfrac{1}{2}\vec{r} + \tfrac{2M}{2M+4m}\vec{\rho}, \\
\vec{r}_3 &= \vec{R} - \tfrac{2m}{M+2m}\vec{\rho}.
\end{aligned}$$

Le terme de l'énergie cinétique dans l'hamiltonien (4.3) s'exprime en fonction des vitesses $\dot{\vec{r}}_1 = d\vec{r}_1/dt$, $\dot{\vec{r}}_2 = d\vec{r}_2/dt$ et $\dot{\vec{r}}_3 = d\vec{r}_3/dt$,

$$T^{(3)} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + \frac{\vec{p}_3^2}{2M} = \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_1^{\,2} + \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_2^{\,2} + \frac{1}{2}M\dot{\vec{r}}_3^{\,2}, \tag{4.16}$$

se réduit à

$$T^{(3)} = \frac{1}{2}(2m+M)\dot{\vec{R}}^{\,2} + \frac{1}{2}\left(\frac{m}{2}\right)\dot{\vec{r}}^{\,2} + \frac{1}{2}\left(\frac{2Mm}{M+2m}\right)\dot{\vec{\rho}}^{\,2} \tag{4.17}$$

où $\dot{\vec{R}} = d\vec{R}/dt$, $\dot{\vec{r}} = d\vec{r}/dt$ et $\dot{\vec{\rho}} = d\vec{\rho}/dt$. Ou encore en termes de moment conjugués $\vec{P}_R$, $\vec{p}_r$ et $\vec{p}_\rho$:

$$T^{(3)} = \frac{\vec{P}_R^2}{2\mathbf{M}} + \frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho}. \tag{4.18}$$

Les masses

$$\mu_r = \frac{m}{2} \tag{4.19}$$

et

$$\mu_\rho = \frac{2Mm}{M+2m} \tag{4.20}$$

représentent respectivement les masses réduites relatives aux coordonnées de Jacobi $\vec{r}$ et $\vec{\rho}$. $\mathbf{M}$ $=2m+M$ est la masse totale du système.

Le terme de l'énergie potentielle se réduit à son tour à :

$$V^{(3)} = k_{12}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right)^2 + k\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_3\right)^2 + k\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_3\right)^2 = \left(\frac{1}{2}k + k_{12}\right)r^2 + 2k\rho^2. \tag{4.21}$$

On s'intéresse toujours à l'hamiltonien relatif qui se simplifie en une somme d'hamiltoniens de deux oscillateurs harmoniques tridimensionnels isotropes découplés :

$$\begin{aligned} \hat{H}_r^{(3)} &= \frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + \left(\frac{1}{2}k + k_{12}\right)r^2 + 2k\rho^2 \\ &= \left(\frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \left(\frac{1}{2}k + k_{12}\right)r^2\right) + \left(\frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + 2k\rho^2\right) \end{aligned}$$

où μ_r et μ_ρ sont données respectivement par (4.19) et (4.20).

Le spectre d'énergie et la fonction d'onde radiale pour l'oscillateur harmonique à trois corps avec deux masses différentes seront donnés par[1]

$$\begin{aligned} E_{n_1,n_2}^{(3)} &= \sqrt{\frac{\frac{1}{2}k + k_{12}}{2\mu_r}}\left(2n_1+3\right) + \sqrt{\frac{2k}{2\mu_\rho}}\left(2n_2+3\right) \\ &= \sqrt{\frac{k + 2k_{12}}{2m}}\left(2n_1+3\right) + \sqrt{\frac{k\left(M+2m\right)}{2Mm}}\left(2n_2+3\right). \end{aligned} \tag{4.22}$$

$$\begin{aligned} R_{n_1,l_1,n_2,l_2}^{(3)}\left(r,\rho\right) = \; & C \quad r^{l_1} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{1}{2}k+k_{12}\right)m}r^2} L_{(n_1-l_1)/2}^{l_1+\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{1}{2}k+k_{12}\right)m}r^2\right) \\ & \times \quad \rho^{l_2} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8kMm}{M+2m}}\rho^2} L_{(n_2-l_2)/2}^{l_2+\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8kMm}{M+2m}}\rho^2\right) \end{aligned}$$

où n_1 et n_2, $l_1$et l_2 des entiers positifs ou nuls.

[1] Toujours dans un système d'unité où $\hbar = 1$

L'énergie du niveau fondamental et la fonction d'onde radiale du système à trois corps avec deux masses différentes s'obtient donc par les expressions suivantes :

$$E_0^{(3)} = 3\left(\sqrt{\frac{k+2k_{12}}{2m}}+\sqrt{\frac{k\,(M+2m)}{2Mm}}\right). \tag{4.23}$$

$$R_{0,0,0,0}^{(3)} = Ce^{-\frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{1}{2}k+k_{12}\right)m}r^2}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8kMm}{M+2m}}\rho^2}$$

4.3 Système ayant toutes les masses différentes (m_1, m_2, m_3)

Dans ce cas, les coordonnées de Jacobi $\vec{r}$ et $\vec{\rho}$ (1.16) sont définies par :

$$\begin{aligned}\vec{r} &: = \vec{\rho}_1 = \vec{r} = -\vec{r}_2 + \vec{r}_1,\\ \vec{\rho} &: = \vec{\rho}_2 = -\vec{r}_3 + \frac{1}{m_1+m_2}\left(m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2\right),\end{aligned}$$

La coordonnée du centre de masse est donnée dans notre cas par :

$$\vec{R} = \frac{1}{m_1+m_2+m_3}\left(m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2 + m_3\vec{r}_3\right).$$

Les coordonnées des particules individuelles s'expriment en termes des coordonnées de Jacobi $\vec{r}$ et $\vec{\rho}$ et de la coordonnée du centre de masse $\vec{R}$ comme :

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

La partie cinétique $T^{(3)}$ dans l'hamiltonien (4.3) exprimé en termes des vitesses $\dot{\vec{r}}_1 = d\vec{r}_1/dt$, $\dot{\vec{r}}_2 = d\vec{r}_2/dt$ et $\dot{\vec{r}}_3 = d\vec{r}_3/dt$ se réduit à

$$\begin{aligned}T^{(3)} &= \frac{1}{2}m_1\dot{\vec{r}}_1^{\,2} + \frac{1}{2}m_2\dot{\vec{r}}_2^{\,2} + \frac{1}{2}m_3\dot{\vec{r}}_3^{\,2}\\ &= \frac{1}{2}\left(m_1+m_2+m_3\right)\dot{\vec{R}}^{\,2} + \frac{1}{2}\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}\dot{\vec{r}}^{\,2} + \frac{1}{2}\frac{m_3\left(m_1+m_2\right)}{m_1+m_2+m_3}\dot{\vec{\rho}}^{\,2},\end{aligned} \tag{4.24}$$

qui peut être réécrite en termes des moments conjugués $\vec{P}_R$, $\vec{p}_r$ et $\vec{p}_\rho$ comme

$$T^{(3)} = \frac{\vec{P}_R^2}{2\mathbf{M}} + \frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho}, \tag{4.25}$$

avec $\mathbf{M} = m_1 + m_2 + m_3$ la masse totale du système et

$$\begin{aligned} \mu_r &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \\ \mu_\rho &= \frac{m_3 (m_1 + m_2)}{m_1 + m_2 + m_3}, \end{aligned} \tag{4.26}$$

les masses réduites relatives aux coordonnées $\vec{r}$ et $\vec{\rho}$ respectivement.

On peut sans difficulté montrer que le terme de l'énergie potentielle

$$V^{(3)} = k_{12} (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + k_{13} (\vec{r}_1 - \vec{r}_3)^2 + k_{23} (\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2, \tag{4.27}$$

se simplifie en

$$V^{(3)} = \frac{k_{12} (m_1 + m_2)^2 + m_1^2 k_{23} + m_2^2 k_{13}}{(m_1 + m_2)^2} r^2 + (k_{13} + k_{23}) \rho^2 - 2 \frac{m_1 k_{23} - m_2 k_{13}}{(m_1 + m_2)} \vec{r}.\vec{\rho}. \tag{4.28}$$

L'hamiltonien relatif du système prend la forme quadratique suivante :

$$\hat{H}_r^{(3)} = \frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + \frac{k_{12}(m_1+m_2)^2 + m_1^2 k_{23} + m_2^2 k_{13}}{(m_1+m_2)^2} r^2 + (k_{13} + k_{23}) \rho^2 - 2 \frac{m_1 k_{23} - m_2 k_{13}}{(m_1+m_2)} \vec{r}.\vec{\rho} \tag{4.29}$$

décrivant ainsi un système de deux oscillateurs harmoniques couplés. Du fait, le spectre d'énergie ne peut être déduit directement. Il faut donc chercher à découpler cet hamiltonien par des changements de variables.

Pour ne pas affecter le terme cinétique qui est déjà découplé, nous allons d'abord procédé par une transformation d'échelle

$$\vec{r} \to \vec{r}^{\,\prime} \text{ et } \vec{\rho} \to \vec{\rho}^{\,\prime}$$

de telle sorte à ramener les termes en $\vec{p}_r^2$ et $\vec{p}_\rho^2$ à des facteurs multiplicatifs égaux (égaux à l'unité par exemple) :

$$\frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} \to \vec{p}_{r'}^2 + \vec{p}_{\rho'}^2.$$

Pour ce faire, on considère la transformation d'échelle suivante :

$$\frac{\vec{p}_r^{\,2}}{2\mu_r} \rightarrow \vec{p}_{r'}^{\,2}\ , \qquad \frac{\vec{p}_\rho^{\,2}}{2\mu_\rho} \rightarrow \vec{p}_{\rho'}^{\,2}. \tag{4.30}$$

C'est-à-dire

$$\vec{p}_{r'} = \frac{1}{\sqrt{2\mu_r}}\vec{p}_r\ , \qquad \vec{p}_{\rho'} = \frac{1}{\sqrt{2\mu_\rho}}\vec{p}_\rho. \tag{4.31}$$

Pour que $\vec{r}^{\,\prime}$ et $\vec{p}_{r'}$ soient des moments conjugués l'un de l'autre il faut que $\vec{r}^{\,\prime}$ se transforme inversement (voir section 1.2)

$$\vec{r} \quad \rightarrow \quad \vec{r}^{\,\prime} = \vec{r}\sqrt{2\mu_r}, \tag{4.32}$$

$$\vec{\rho} \quad \rightarrow \quad \vec{\rho}^{\,\prime} = \vec{\rho}\sqrt{2\mu_\rho}, \tag{4.33}$$

ou encore

$$\vec{r} \quad = \quad \vec{r}^{\,\prime}\sqrt{\frac{m_1+m_2}{2m_1m_2}}, \tag{4.34}$$

$$\vec{\rho} \quad = \quad \vec{\rho}^{\,\prime}\sqrt{\frac{m_1+m_2+m_3}{2m_3\left(m_1+m_2\right)}}. \tag{4.35}$$

En termes de ces nouvelles variables, l'hamiltonien relatif s'écrit :

$$\hat{H}_r^{(3)} = \vec{p}_{r'}^{\,2} + \vec{p}_{\rho'}^{\,2} + V^{(3)}\left(\vec{r}^{\,\prime}, \vec{\rho}^{\,\prime}\right)$$

avec

$$\begin{aligned} V^{(3)}\left(\vec{r}^{\,\prime}, \vec{\rho}^{\,\prime}\right) \quad = \quad & \frac{k_{12}\left(m_1+m_2\right)^2 + m_1^2k_{23} + m_2^2k_{13}}{2m_1m_2\left(m_1+m_2\right)} r'^2 + \frac{m_1+m_2+m_3}{2m_3\left(m_1+m_2\right)}\left(k_{13}+k_{23}\right)\rho'^2 \\ & + \sqrt{\frac{m_1+m_2+m_3}{m_1m_2m_3}}\frac{m_1k_{23}-m_2k_{13}}{\left(m_1+m_2\right)}\vec{r}^{\,\prime}.\vec{\rho}^{\,\prime}. \end{aligned}$$

Sachant qu'une transformation orthogonale

$$\vec{r}^{\,\prime} \rightarrow \tilde{\vec{r}} \text{ et } \vec{\rho}^{\,\prime} \rightarrow \tilde{\vec{\rho}}$$

garde inchangé la norme ($\vec{p}_r^{\,2} + \vec{p}_\rho^{\,2}$ dans notre cas), il est plus commode de se servir de telle transformation pour éliminer le terme croisé $(\vec{r}'.\vec{\rho}')$ qui apparaît dans l'expression de l'énergie potentielle. Cette dernière peut être écrite sous forme matricielle comme

$$V^{(3)}\left(\vec{r}',\vec{\rho}'\right)=\begin{pmatrix}\vec{r}' & \vec{\rho}'\end{pmatrix}A^{(3)}\begin{pmatrix}\vec{r}'\\ \vec{\rho}'\end{pmatrix} \tag{4.36}$$

où $A^{(3)}$ est une matrice carré d'ordre 2.

Il est clair qu'il existe une multitude de choix de la matrice $A^{(3)}$ vérifiant l'égalité (4.36). Mais en tenant compte du fait que la diagonalisation d'une matrice symétrique se fait via une transformation orthogonale [14], il est plus judicieux de choisir une matrice $A^{(3)}$ symétrique :

$$A^{(3)}=\begin{pmatrix}\frac{k_{12}(m_1+m_2)^2+m_1^2k_{23}+m_2^2k_{13}}{2m_1m_2(m_1+m_2)} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{m_1+m_2+m_3}{m_1m_2m_3}}\frac{m_1k_{23}-m_2k_{13}}{(m_1+m_2)}\\ \frac{1}{2}\sqrt{\frac{m_1+m_2+m_3}{m_1m_2m_3}}\frac{m_1k_{23}-m_2k_{13}}{(m_1+m_2)} & \frac{m_1+m_2+m_3}{2m_3(m_1+m_2)}\left(k_{13}+k_{23}\right)\end{pmatrix}. \tag{4.37}$$

Après diagonalisation de $A^{(3)}$ on obtient une matrice $\tilde{A}^{(3)}$ diagonale,

$$\tilde{A}^{(3)}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{pmatrix},$$

dont les éléments diagonaux sont les valeurs propres λ_1 et λ_2 de $A^{(3)}$.

L'hamiltonien relatif se réduit donc en une somme de deux hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques découplés

$$\hat{H}_r^{(3)}=\vec{p}_{\tilde{r}}^{\,2}+\lambda_1\tilde{r}^2+\vec{p}_{\tilde{\rho}}^{\,2}+\lambda_2\tilde{\rho}^2.$$

Le spectre d'énergie s'obtient immédiatement en sommant les énergies des deux oscillateurs :

$$E_{n_1,n_2}^{(3)}=\sqrt{\lambda_1}\left(2n_1+3\right)+\sqrt{\lambda_2}\left(2n_2+3\right) \tag{4.38}$$

et la fonction d'onde radiale sera le produit des fonctions d'onde des deux oscillateurs découplés

$$R_{n_1,l_1,n_2,l_2}^{(3)}\left(\tilde{r},\tilde{\rho}\right)=\ C\ \tilde{r}^{l_1}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_1}\tilde{r}^2}L_{(n_1-l_1)/2}^{l_1+\frac{1}{2}}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{\lambda_1}\tilde{r}^2\right)\times\tilde{\rho}^{l_2}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_2}\tilde{\rho}^2}L_{(n_2-l_2)/2}^{l_2+\frac{1}{2}}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{\lambda_2}\tilde{\rho}^2\right)$$

où n_1 et n_2, l_1 et l_2 des entiers positifs ou nuls.

Le problème réside donc dans la détermination des valeurs propres λ_1 et λ_2. Si on s'intéresse seulement au niveau fondamental, on peut contourner ce problème et déterminer son énergie sans passer par le calcul explicite des valeurs propres λ_1 et λ_2. En effet, l'énergie du niveau fondamental ($n_1 = n_2 = 0$) s'exprime par

$$E_0^{(3)} = 3\left(\sqrt{\lambda_1} + \sqrt{\lambda_2}\right),$$

qui n'est d'autre que la somme, a un facteur multiplicatif près, des racines carrées des deux valeurs propres. Cette somme peut être calculer directement sans passer par le calcul explicite de λ_1 et λ_2 mais seulement par le calcul direct de la trace **Tr** et du déterminant **det** de la matrice $\tilde{A}^{(3)}$. Nous avons

$$\left(\sqrt{\lambda_1} + \sqrt{\lambda_2}\right)^2 = \lambda_1 + \lambda_2 + 2\sqrt{\lambda_1}\sqrt{\lambda_2},$$

d'où

$$\sqrt{\lambda_1} + \sqrt{\lambda_2} = \sqrt{\lambda_1 + \lambda_2 + 2\sqrt{\lambda_1}\sqrt{\lambda_2}}.$$

Le produit et la somme des valeurs propres ne sont d'autre que le déterminant et la trace respectivement de la matrice $\tilde{A}^{(3)}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{Tr}\ \tilde{A} &= \lambda_1 + \lambda_2 \\ \mathbf{det}\ \tilde{A} &= \lambda_1\lambda_2 \end{aligned}$$

se qui mène à :

$$\sqrt{\lambda_1} + \sqrt{\lambda_2} = \sqrt{\mathbf{Tr}\ \tilde{A} + \mathbf{2}\sqrt{\mathbf{det}\ \tilde{A}}}. \tag{4.39}$$

Sachant que ces deux quantités ne changent pas lors d'une transformation orthogonale (**Tr** $\tilde{A}^{(3)} =$ **Tr** $A^{(3)}$ et **det** $\tilde{A}^{(3)} =$ **det** $A^{(3)}$), le déterminant et la trace de $\tilde{A}$ se déduisent directement de l'expression de $A^{(3)}$ (4.37)

$$\begin{aligned}
\textbf{Tr } A^{(3)} &= \frac{k_{12}\left(m_1+m_2\right)^2+m_1^2k_{23}+m_2^2k_{13}}{2m_1m_2\left(m_1+m_2\right)}+\frac{m_1+m_2+m_3}{2m_3\left(m_1+m_2\right)}\left(k_{13}+k_{23}\right) \\
&= \frac{1}{2}k_{12}\frac{m_1+m_2}{m_1m_2}+\frac{1}{2}k_{23}\frac{m_2+m_3}{m_2m_3}+\frac{1}{2}k_{13}\frac{m_1+m_3}{m_1m_3},
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
\textbf{det } A^{(3)} &= \frac{k_{12}\left(m_1+m_2\right)^2+m_1^2k_{23}+m_2^2k_{13}}{4m_1m_2m_3\left(m_1+m_2\right)^2}\mathbf{M}\left(k_{13}+k_{23}\right)-\frac{\mathbf{M}}{4m_1m_2m_3}\left(\frac{m_1k_{23}-m_2k_{13}}{m_1+m_2}\right)^2 \\
&= \frac{1}{4}\frac{\mathbf{M}}{m_1m_2m_3}\left(k_{12}k_{13}+k_{12}k_{13}+k_{13}k_{23}\right).
\end{aligned}$$

L'énergie du niveau fondamental d'un système composé de trois particules en interaction à deux corps de type harmonique se réduit en une forme très symétrique et très compacte (toujours dans système d'unité où $\hbar = 1$)

$$E_0^{(3)} = 3\sqrt{\frac{k_{12}+k_{13}}{2m_1}+\frac{k_{12}+k_{23}}{2m_2}+\frac{k_{13}+k_{23}}{2m_3}+\sqrt{\frac{(m_1+m_2+m_3)(k_{12}k_{13}+k_{12}k_{13}+k_{13}k_{23})}{m_1m_2m_3}}} \tag{4.40}$$

Nous fournissons dans le tableau suivant des résultats numériques pour le spectre d'énergie du système à trois corps. Nous restreignons nos calculs au niveau fondamental et au premier état excité. Certaines configurations de masse ont été considérées et toutes les constantes de couplage sont choisies pour être égales $k_{ij} = 1$.

m_1, m_2, m_3	$E_0^{(3)}$	$E_1^{(3)}$	m_1, m_2, m_3	$E_0^{(3)}$	$E_1^{(3)}$
$1, 1, 1$	07.3485	9.7980	$1, 2, 2$	05.9522	07.6842
$1, 1, 2$	06.6742	8.6742	$1, 2, 3$	05.6647	07.2346
$1, 1, 3$	06.4128	8.2386	$1, 2, 4$	05.5074	06.9829

Table 4.1 – Énergies des états fondamentaux et excités pour l'oscillateur harmonique à trois corps.

Chapitre 5

L'oscillateur harmonique à quatre corps

Dans ce chapitre, nous examinons le problème de quatre particules en interaction harmonique. Le système est décrit par l'hamiltonien :

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{(4)} &= \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_4} + k_{12}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right)^2 + k_{13}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_3\right)^2 + k_{14}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_4\right)^2 \\
&\quad + k_{23}\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_3\right)^2 + k_{24}\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_4\right)^2 \\
&\quad + k_{34}\left(\vec{r}_3 - \vec{r}_4\right)^2 . \qquad (5.1)
\end{aligned}$$

Nous allons considéré les configurations avec toutes les masses égales, des configurations ayant trois masses différentes et la configuration la plus générale avec toutes les masses différentes. Les configurations avec deux masses différentes ont été déjà traité dans la référence [15].

5.1 Système ayant toutes les masses égales $(4 \times m)$

L'hamiltonien (5.1) du système pour cette configuration où les particules du système sont toutes de même masse s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(4)} &= \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m} + k\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right)^2 + k\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_3\right)^2 + k\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_4\right)^2 \\ &\quad + k\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_3\right)^2 + k\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_4\right)^2 \\ &\quad + k\left(\vec{r}_3 - \vec{r}_4\right)^2, \end{aligned} \tag{5.2}$$

où on a supposé que toutes les constantes de couplage sont égales $k_{ij} = k$. Ceci est justifié par les conditions (4.2).

Pour étudier le problème à quatre corps, on a besoin de trois coordonnées de Jacobi que nous noterons $\vec{r}$, $\vec{\rho}$ et $\vec{\sigma}$ (1.16) :

$$\begin{aligned} \vec{r} &:= \vec{\rho}_1 = -\vec{r}_2 + \vec{r}_1, \\ \vec{\rho} &:= \vec{\rho}_2 = -\vec{r}_3 + \tfrac{1}{2}\left(\vec{r}_1 + \vec{r}_2\right), \\ \vec{\sigma} &:= \vec{\rho}_3 = -\vec{r}_4 + \tfrac{1}{3}\left(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3\right). \end{aligned} \tag{5.3}$$

La coordonnée du centre de masse est définie par

$$\vec{R} = \frac{1}{4}\left(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3 + \vec{r}_4\right). \tag{5.4}$$

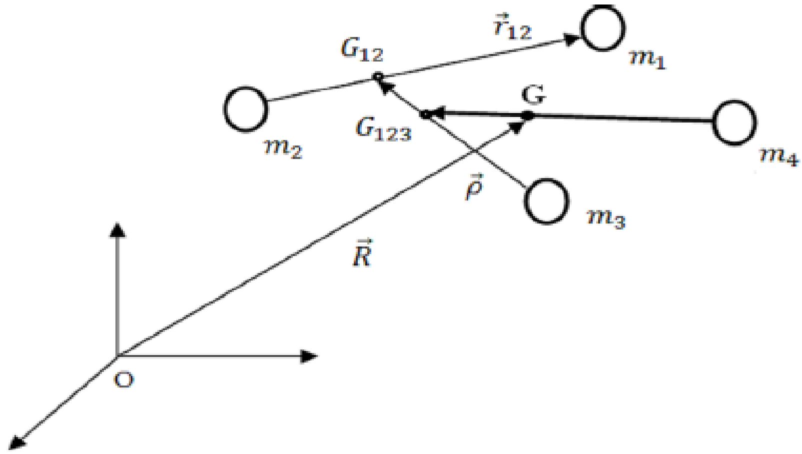

Figure 3 : Coordonnées de Jacobi pour le système à quatre corps :

$\overrightarrow{r} = \overrightarrow{r}_1 - \overrightarrow{r}_2$ vecteur liant les deux premières particules,

$\overrightarrow{\rho}$ le vecteur liant la troisième particules et le centre de masse des deux première,

$\overrightarrow{\sigma}$ le vecteur liant la quatrième particules et le centre de masse des trois premières.

En inversant les relations (5.3) et (5.4), on obtient les expressions des coordonnées individuelles $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$, $\vec{r}_3$ et $\vec{r}_4$ en termes des coordonnées de Jacobi $\vec{r}$, $\vec{\rho}$ et $\vec{\sigma}$ et de la coordonnée du centre de masse $\vec{R}$:

$$\begin{aligned}
\vec{r}_1 &= \vec{R} + \tfrac{1}{2}\vec{r} + \tfrac{1}{3}\vec{\rho} + \tfrac{1}{4}\vec{\sigma}, \\
\vec{r}_2 &= \vec{R} - \tfrac{1}{2}\vec{r} + \tfrac{1}{3}\vec{\rho} + \tfrac{1}{4}\vec{\sigma}, \\
\vec{r}_3 &= \vec{R} - \tfrac{2}{3}\vec{\rho} + \tfrac{1}{4}\vec{\sigma}, \\
\vec{r}_4 &= \vec{R} - \tfrac{3}{4}\vec{\sigma}.
\end{aligned} \tag{5.5}$$

En peut exprimer le terme de l'énergie cinétique dans l'hamiltonien (5.2) en fonction des vitesses $\dot{\vec{r}}_1 = d\vec{r}_1/dt$, $\dot{\vec{r}}_2 = d\vec{r}_2/dt$, $\dot{\vec{r}}_3 = d\vec{r}_3/dt$ et $\dot{\vec{r}}_4 = d\vec{r}_4/dt$ avec le résultat

$$\begin{aligned}
T^{(4)} &= \frac{1}{2}m_1\dot{\vec{r}}_1^{\,2} + \frac{1}{2}m_2\dot{\vec{r}}_2^{\,2} + \frac{1}{2}m_3\dot{\vec{r}}_3^{\,2} + \frac{1}{2}m_4\dot{\vec{r}}_4^{\,2} \\
&= \frac{1}{2}(4m)\dot{\vec{R}}^{\,2} + \frac{1}{2}\left(\frac{m}{2}\right)\dot{\vec{r}}^{\,2} + \frac{1}{2}\left(\frac{2m}{3}\right)\dot{\vec{\rho}}^{\,2} + \frac{1}{2}\left(\frac{3m}{4}\right)\dot{\vec{\sigma}}^{\,2},
\end{aligned} \tag{5.6}$$

ou encore en termes des moments conjugués $\vec{P}_R$, $\vec{p}_r$, $\vec{p}_\rho$ et $\vec{p}_\sigma$ comme

$$T^{(4)} = \frac{\vec{P}_R^2}{2\mathbf{M}} + \frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + \frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma}. \tag{5.7}$$

$\mathbf{M} = 4m$ est la masse totale du système et

$$\begin{aligned} \mu_r &= \frac{m}{2}, \\ \mu_\rho &= \frac{2m}{3} \end{aligned}$$

et

$$\mu_\sigma = \frac{3m}{4}$$

les masses réduites associées respectivement aux coordonnées de Jacobi $\vec{r}$, $\vec{\rho}$ et $\vec{\sigma}$.

Le calcul du terme de l'énergie potentielle conduit à

$$\begin{aligned} V^{(4)} &= k\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right)^2 + k\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_3\right)^2 + k\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_4\right)^2 \\ &\quad + k\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_3\right)^2 + k\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_4\right)^2 \\ &\quad + k\left(\vec{r}_3 - \vec{r}_4\right)^2 \\ &= 2kr^2 + \frac{8}{3}k\rho^2 + 3k\sigma^2. \end{aligned} \tag{5.8}$$

On obtient l'expression de l'hamiltonien du système en fonction des coordonnées de Jacobi et des moments conjugués associés

$$\hat{H}^{(4)} = \frac{\vec{P}_R^2}{2\mathbf{M}} + \frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + \frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma} + 2kr^2 + \frac{8}{3}k\rho^2 + 3k\sigma^2, \tag{5.9}$$

et donc l'hamiltonien relatif se réduit à :

$$\hat{H}_r^{(4)} = \left(\frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + 2kr^2\right) + \left(\frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + \frac{8}{3}k\rho^2\right) + \left(\frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma} + 3k\sigma^2\right), \tag{5.10}$$

qui peut être vu comme la somme des hamiltoniens de trois oscillateurs harmoniques découplés.

L'énergie du système est alors la somme des énergies de ces oscillateurs :

$$\begin{aligned}
E^{(4)}_{n_1,n_2,n_3} &= \sqrt{\frac{1}{2\mu_r}2k}\,(2n_1+3)+\sqrt{\frac{1}{2\mu_\rho}\frac{8}{3}k}\,(2n_2+3)+\sqrt{\frac{1}{2\mu_\rho}3k}\,(2n_3+3) \\
&= \sqrt{\frac{2k}{m}}\,(2n_1+3)+\sqrt{\frac{2k}{m}}\,(2n_2+3)+\sqrt{\frac{2k}{m}}\,(2n_3+3) \\
&= \sqrt{\frac{2k}{m}}\,(2\,(n_1+n_2+n_3)+9) \qquad (5.11)
\end{aligned}$$

où n_1, n_2 et n_3 des entiers positifs ou nuls, où encore si on pose $n = n_1 + n_2 + n_3$:

$$E^{(4)}_{n_1,n_2,n_3} = E^{(4)}_n = \sqrt{\frac{2k}{m}}\,(2n+9)\,. \qquad (5.12)$$

La fonction d'onde associée est le produit des trois fonctions d'onde

$$\begin{aligned}
R^{(4)}_{n_1,l_1,n_2,l_2,n_3,l_3}(r,\rho,\sigma) = \; & C \quad r^{l_1}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{4k\mu_r}r^2}L^{l_1+\frac{1}{2}}_{(n_1-l_1)/2}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{4k\mu_r}r^2\right) \\
& \times \quad \rho^{l_2}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{16k\mu_\rho}{3}}\rho^2}L^{l_2+\frac{1}{2}}_{(n_2-l_2)/2}\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{16k\mu_\rho}{3}}\rho^2\right) \\
& \times \quad \sigma^{l_3}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{6k\mu_\sigma}\sigma^2}L^{l_3+\frac{1}{2}}_{(n_3-l_3)/2}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{6k\mu_\sigma}\sigma^2\right).
\end{aligned}$$

Le niveau fondamental correspond à $n = 0$, ce qui mène à l'expression :

$$E^{(4)}_0 = 9\sqrt{\frac{2k}{m}}, \qquad (5.13)$$

et la fonction d'onde correspondante est

$$R^{(4)}_{0,0,0,0} = Ce^{-\frac{1}{2}\sqrt{4k\mu_r}r^2}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{16k\mu_\rho}{3}}\rho^2}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{6k\mu_\sigma}\sigma^2}.$$

5.2 Système ayant trois masses différentes $(2\times m, \mathbf{m}, M\ )$

Nous avons ici un système composé de quatre particules dont deux sont de masses égales à m, une troisième particule de masse $\mathbf{m}$ et la quatrième particule de masse M. L'hamiltonien

(5.1) du système s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}\hat{H}^{(4)} &= \frac{\vec{p}_1^2}{2m}+\frac{\vec{p}_2^2}{2m}+\frac{\vec{p}_3^2}{2\mathbf{m}}+\frac{\vec{p}_4^2}{2M}+k\left(\vec{r}_1-\vec{r}_2\right)^2+\mathbf{k}\left(\vec{r}_1-\vec{r}_3\right)^2+K\left(\vec{r}_1-\vec{r}_4\right)^2 \\ &\quad +\mathbf{k}\left(\vec{r}_2-\vec{r}_3\right)^2+K\left(\vec{r}_2-\vec{r}_4\right)^2 \\ &\quad +\mathbf{K}\left(\vec{r}_3-\vec{r}_4\right)^2, \end{aligned} \tag{5.14}$$

où nous avons adopté la propriété (4.2), c'est-à-dire $k_{12}=k$, $k_{13}=k_{23}=\mathbf{k}$, $k_{14}=k_{24}=K$ et $k_{34}=\mathbf{K}$.

Les coordonnées de Jacobi et la coordonnée du centre de masse pour cette configuration sont :

$$\begin{aligned}\vec{r} &:= \vec{\rho}_1=-\vec{r}_2+\vec{r}_1, \\ \vec{\rho} &:= \vec{\rho}_2=-\vec{r}_3+\tfrac{1}{2}\left(\vec{r}_1+\vec{r}_2\right), \\ \vec{\sigma} &:= \vec{\rho}_3=-\vec{r}_4+\tfrac{1}{2m+\mathbf{m}}\left(m\vec{r}_1+m\vec{r}_2+\mathbf{m}\vec{r}_3\right)\end{aligned} \tag{5.15}$$

et

$$\vec{R}=\frac{1}{2m+\mathbf{m}+M}\left(m\vec{r}_1+m\vec{r}_2+\mathbf{m}\vec{r}_3+M\vec{r}_4\right). \tag{5.16}$$

En inversant le système d'équation (5.15) et (5.16), on obtient les expressions des coordonnées des particules individuelles $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$, $\vec{r}_3$ et $\vec{r}_4$ en fonction des coordonnées de Jacobi $\vec{r}$, $\vec{\rho}$, $\vec{\sigma}$ et de la coordonnée du centre de masse $\vec{R}$:

$$\begin{aligned}\vec{r}_1 &= \vec{R}+\tfrac{1}{2}\vec{r}+\tfrac{\mathbf{m}}{2m+\mathbf{m}}\vec{\rho}+\tfrac{M}{2m+\mathbf{m}+M}\vec{\sigma}, \\ \vec{r}_2 &= \vec{R}-\tfrac{1}{2}\vec{r}+\tfrac{\mathbf{m}}{2m+\mathbf{m}}\vec{\rho}+\tfrac{M}{2m+\mathbf{m}+M}\vec{\sigma}, \\ \vec{r}_3 &= \vec{R}-\tfrac{2m}{2m+\mathbf{m}}\vec{\rho}+\tfrac{M}{2m+\mathbf{m}+M}\vec{\sigma}, \\ \vec{r}_4 &= \vec{R}-\tfrac{(2m+\mathbf{m})}{2m+\mathbf{m}+M}\vec{\sigma}.\end{aligned} \tag{5.17}$$

Le terme de l'énergie cinétique dans l'hamiltonien s'écrit :

$$\begin{aligned}T^{(4)} &= \tfrac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_1^{\,2}+\tfrac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_2^{\,2}+\tfrac{1}{2}\mathbf{m}\dot{\vec{r}}_3^{\,2}+\tfrac{1}{2}M\dot{\vec{r}}_4^{\,2} \\ &= \tfrac{1}{2}\left(2m+\mathbf{m}+M\right)\dot{\vec{R}}^{\,2}+\tfrac{1}{2}\left(\tfrac{m}{2}\right)\dot{\vec{r}}^{\,2}+\tfrac{1}{2}\left(\tfrac{2m\mathbf{m}}{2m+\mathbf{m}}\right)\dot{\vec{\rho}}^{\,2}+\tfrac{1}{2}\left(\tfrac{M(2m+\mathbf{m})}{2m+\mathbf{m}+M}\right)\dot{\vec{\sigma}}^{\,2},\end{aligned} \tag{5.18}$$

ou en termes des moment conjugués $\vec{P}_R$, $\vec{p}_r$, $\vec{p}_\rho$ et $\vec{p}_\sigma$:

$$T^{(4)} = \frac{\vec{P}_R^2}{2\left(2m + \mathbf{m} + M\right)} + \frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + \frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma}. \tag{5.19}$$

où

$$\begin{aligned} \mu_r &= \frac{m}{2}, \\ \mu_\rho &= \frac{2m\mathbf{m}}{2m + \mathbf{m}}, \\ \mu_\sigma &= \frac{M\left(2m + \mathbf{m}\right)}{2m + \mathbf{m} + M} \end{aligned}$$

les masses réduites associées aux coordonnées de Jacobi $\vec{r}$, $\vec{\rho}$ et $\vec{\sigma}$ respectivement.

En reportant les expressions (5.17) de $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3$ et $\vec{r}_4$ dans l'expression de l'énergie potentielle,

$$\begin{aligned} V^{(4)} = {} & k\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right)^2 + \mathbf{k}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_3\right)^2 + K\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_4\right)^2 \\ & + \mathbf{k}\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_3\right)^2 + K\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_4\right)^2 \\ & + \mathbf{K}\left(\vec{r}_3 - \vec{r}_4\right)^2, \end{aligned} \tag{5.20}$$

on obtient :

$$V^{(4)} = \left(k + \tfrac{1}{2}\mathbf{k} + \tfrac{1}{2}K\right) r^2 + \tfrac{2\mathbf{k}(2m+\mathbf{m})^2 + 4\mathbf{K}m^2 + 2Km\mathbf{m}^2}{(2m+\mathbf{m})^2}\rho^2 + \left(2K + \mathbf{K}\right)\sigma^2 + 4\tfrac{K\mathbf{m} - m\mathbf{K}}{2m+\mathbf{m}}\vec{\rho}.\vec{\sigma}. \tag{5.21}$$

c'est une forme quadratique en les variables r , ρ et σ qui est non diagonale justifiée par la présence du dernière terme en $\vec{\rho}.\vec{\sigma}$.

Pour diagonaliser cet hamiltonien on est obligé à passer par la diagonalisation d'une matrice symétrique 3×3 comme nous avons procédé dans le cas à trois corps avec toutes les masses differéntes (voir section 4.3) .

Nous allons d'abord procédé par une transformation d'échelle tel que :

$$\frac{1}{2\mu_r}\overrightarrow{p}_r^2 \rightarrow \overrightarrow{p}_{r'}^2\ , \quad \frac{1}{2\mu_\rho}\overrightarrow{p}_\rho^2 \rightarrow \overrightarrow{p}_{\rho'}^2\ , \quad \frac{1}{2\mu_\sigma}\overrightarrow{p}_\sigma^2 \rightarrow \overrightarrow{p}_{\sigma'}^2\ ,$$

qui peut être réalisé par la transformation suivante sur les coordonnées :

$$\begin{aligned}
&\vec{r} \to \vec{r}' = \sqrt{m}\vec{r}, \\
&\vec{\rho} \to \vec{\rho}' = \sqrt{\tfrac{4m\mathbf{m}}{2m+\mathbf{m}}}\vec{\rho}, \\
&\vec{\sigma} \to \vec{\sigma}' = \sqrt{\tfrac{2M(2m+\mathbf{m})}{2m+\mathbf{m}+M}}\vec{\sigma},
\end{aligned} \tag{5.22}$$

ou encore

$$\begin{aligned}
&\vec{r} = \tfrac{1}{\sqrt{m}}\vec{r}', \\
&\vec{\rho} = \tfrac{1}{\sqrt{\frac{4m\mathbf{m}}{2m+\mathbf{m}}}}\vec{\rho}', \\
&\vec{\sigma} = \tfrac{1}{\sqrt{\frac{2M(2m+\mathbf{m})}{2m+\mathbf{m}+M}}}\vec{\sigma}'.
\end{aligned} \tag{5.23}$$

L'expression de l'hamiltonien relatif devient :

$$\begin{aligned}
\hat{H}_r^{(4)} &= \vec{p}^{\,2}_{r'} + \vec{p}^{\,2}_{\rho'} + \vec{p}^{\,2}_{\sigma'} \\
&\quad + \tfrac{1}{m}\left(k + \tfrac{\mathbf{k}}{2} + \tfrac{K}{2}\right) r'^2 + \tfrac{\mathbf{k}(2m+\mathbf{m})^2 + 2\mathbf{K}m^2 + K\mathbf{m}^2}{2m\mathbf{m}(2m+\mathbf{m})}\rho'^2 + \tfrac{(2K+\mathbf{K})(2m+\mathbf{m}+M)}{2M(2m+\mathbf{m})}\sigma'^2 \\
&\quad + 4\tfrac{K\mathbf{m}-m\mathbf{K}}{2m+\mathbf{m}}\sqrt{\tfrac{2m+\mathbf{m}+M}{8m\mathbf{m}M}}\vec{\rho}'.\vec{\sigma}' \\
&= \vec{p}^{\,2}_{r'} + \vec{p}^{\,2}_{\rho'} + \vec{p}^{\,2}_{\sigma'} + V^{(4)}\left(\vec{r}', \vec{\rho}', \vec{\sigma}'\right).
\end{aligned} \tag{5.24}$$

Sachant qu'une transformation orthogonale

$$\vec{r}' \to \tilde{\vec{r}} \text{ et } \vec{\rho}' \to \tilde{\vec{\rho}} \text{ et } \vec{\sigma}' \to \tilde{\vec{\sigma}}$$

garde inchangé la norme $(\vec{p}^{\,2}_{r'} + \vec{p}^{\,2}_{\rho'} + \vec{p}^{\,2}_{\sigma'})$, il est plus commode de se servir de telle transformation pour éliminer le terme en $\vec{\rho}'.\vec{\sigma}'$ et ramener le terme de l'énergie potentielle en une forme diagonale. Ce dernier s'écrit sous forme matricielle comme :

$$V^{(4)}\left(\vec{r}', \vec{\rho}', \vec{\sigma}'\right) = \begin{pmatrix} \vec{r}' & \vec{\rho}' & \vec{\sigma}' \end{pmatrix} A^{(4)} \begin{pmatrix} \vec{r}' \\ \vec{\rho}' \\ \vec{\sigma}' \end{pmatrix}. \tag{5.25}$$

où $A^{(4)}$ est dans ce cas une matrice d'ordre 3, tel que :

$$A^{(4)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m}\left(k+\frac{1}{2}\mathbf{k}+\frac{1}{2}K\right) & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\mathbf{k}(2m+\mathbf{m})^2+2\mathbf{K}m^2+K\mathbf{m}^2}{2m\mathbf{m}(2m+\mathbf{m})} & 2\frac{K\mathbf{m}-m\mathbf{K}}{2m+\mathbf{m}}\sqrt{\frac{2m+\mathbf{m}+M}{8m\mathbf{m}M}} \\ 0 & 2\frac{K\mathbf{m}-m\mathbf{K}}{2m+\mathbf{m}}\sqrt{\frac{2m+\mathbf{m}+M}{8m\mathbf{m}M}} & \frac{(2K+\mathbf{K})(2m+\mathbf{m}+M)}{2M(2m+\mathbf{m})} \end{pmatrix}. \tag{5.26}$$

Après avoir diagonaliser la matrice $A^{(4)}$, on obtient une matrice $\tilde{A}^{(4)}$ diagonale,

$$\tilde{A}^{(4)} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix},$$

dont les élements diagonaux sont les valeurs propres λ_1, λ_2 et λ_3 de $A^{(4)}$.

Donc, l'hamiltonien du système est la somme d'hamiltoniens de trois oscillateurs harmoniques indépendants :

$$\begin{aligned} \hat{H}_r^{(4)} &= \vec{p}_{\tilde{r}}^2 + \vec{p}_{\tilde{\rho}}^2 + \vec{p}_{\tilde{\sigma}}^2 + \lambda_1 \tilde{r}^2 + \lambda_2 \tilde{\rho}^2 + \lambda_3 \tilde{\sigma}^2 \\ &= \left(\vec{p}_{\tilde{r}}^2 + \lambda_1 \tilde{r}^2\right) + \left(\vec{p}_{\tilde{\rho}}^2 + \lambda_2 \tilde{\rho}^2\right) + \left(\vec{p}_{\tilde{\sigma}}^2 + \lambda_3 \tilde{\sigma}^2\right). \end{aligned} \tag{5.27}$$

Le spectre d'énergie du système s'obtient en sommant les énergies des trois oscillateurs :

$$E_{n_1,n_2,n_3}^{(4)} = \sqrt{\lambda_1}\,(2n_1+3) + \sqrt{\lambda_2}\,(2n_1+3) + \sqrt{\lambda_3}\,(2n_1+3) \tag{5.28}$$

et la fonction d'onde radiale est le produit des fonctions d'onde des trois oscillateurs découplés

$$\begin{aligned} R_{n_1,l_1,n_2,l_2,n_3,l_3}^{(4)}(\tilde{r},\tilde{\rho},\tilde{\sigma}) = {} & C\tilde{r}^{l_1}\tilde{\rho}^{l_2}\tilde{\sigma}^{l_3} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_1}\tilde{r}^2} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_2}\tilde{\rho}^2} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_3}\tilde{\sigma}^2} \\ & \times L_{(n_1-l_1)/2}^{l_1+\frac{1}{2}}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{\lambda_1}\tilde{r}^2\right) L_{(n_2-l_2)/2}^{l_2+\frac{1}{2}}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{\lambda_2}\tilde{\rho}^2\right) L_{(n_3-l_3)/2}^{l_3+\frac{1}{2}}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{\lambda_3}\tilde{\sigma}^2\right). \end{aligned} \tag{5.29}$$

En particulier, le niveau fondamental $E_0^{(4)}$ du système ce réduit à :

$$E_0^{(4)} = 3\left(\sqrt{\lambda_1} + \sqrt{\lambda_2} + \sqrt{\lambda_3}\right)$$

et la fonction d'onde radiale associée :

$$R^{(4)}_{0,0,0,0,0,0}\left(\tilde{r},\tilde{\rho},\tilde{\sigma}\right) = Ce^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_1}\tilde{r}^2}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_2}\tilde{\rho}^2}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_3}\tilde{\sigma}^2}. \tag{5.30}$$

5.3 Système ayant toutes les masses différentes (m_1, m_2, m_3, m_4)

On utilise trois coordonnées de Jacobi définies par (1.16), c'est-à-dire :

$$\begin{aligned}
\vec{r} &:= \vec{\rho}_1 = -\vec{r}_2 + \vec{r}_1,\\
\vec{\rho} &:= \vec{\rho}_2 = -\vec{r}_3 + \tfrac{1}{m_1+m_2}\left(m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2\right),\\
\vec{\sigma} &:= \vec{\rho}_3 = -\vec{r}_4 + \tfrac{1}{m_1+m_2+m_3}\left(m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2 + m_3\vec{r}_3\right).
\end{aligned} \tag{5.31}$$

La coordonnée du centre de masse est :

$$\vec{R} = \frac{1}{m_1+m_2+m_3+m_4}\left(m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2 + m_3\vec{r}_3 + m_4\vec{r}_4\right). \tag{5.32}$$

Les expressions des coordonnées $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$, $\vec{r}_3$ et $\vec{r}_4$ en fonction de $\vec{r}$, $\vec{\rho}$ et $\vec{\sigma}$ (5.31) et de $\vec{R}$ (5.32) peuvent être obtenus avec comme résultat :

$$\begin{aligned}
\vec{r}_1 &= \vec{R} + \tfrac{m_2}{m_1+m_2}\vec{r} + \tfrac{m_3}{m_1+m_2+m_3}\vec{\rho} + \tfrac{m_4}{m_1+m_2+m_3+m_4}\vec{\sigma},\\
\vec{r}_2 &= \vec{R} - \tfrac{m_1}{m_1+m_2}\vec{r} + \tfrac{m_3}{m_1+m_2+m_3}\vec{\rho} + \tfrac{m_4}{m_1+m_2+m_3+m_4}\vec{\sigma},\\
\vec{r}_3 &= \vec{R} - \tfrac{m_1+m_2}{m_1+m_2+m_3}\vec{\rho} + \tfrac{m_4}{m_1+m_2+m_3+m_4}\vec{\sigma},\\
\vec{r}_4 &= \vec{R} - \tfrac{m_1+m_2+m_3}{m_1+m_2+m_3+m_4}\vec{\sigma}.
\end{aligned} \tag{5.33}$$

En reportant les expressions (5.33) de $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$, $\vec{r}_3$ et $\vec{r}_4$ dans l'expression de la partie cinétique de l'hamiltonien (5.1), on obtient :

$$T^{(4)} = \tfrac{(m_1+m_2+m_3+m_4)}{2}\dot{\vec{R}}^2 + \tfrac{1}{2}\tfrac{m_1m_2}{m_1+m_2}\dot{\vec{r}}^2 + \tfrac{1}{2}\tfrac{m_3(m_1+m_2)}{m_1+m_2+m_3}\dot{\vec{\rho}}^2 + \tfrac{1}{2}\tfrac{m_4(m_1+m_2+m_3)}{m_1+m_2+m_3+m_4}\dot{\vec{\sigma}}^2,$$

et en termes des moments conjugués $\vec{P}_R$, $\vec{p}_r$, $\vec{p}_\rho$ et $\vec{p}_\sigma$

$$T^{(4)} = \tfrac{\vec{p}_R^2}{2(m_1+m_2+m_3+m_4)} + \tfrac{\vec{p}_r^2}{2\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}} + \tfrac{\vec{p}_\rho^2}{2\frac{m_3(m_1+m_2)}{m_1+m_2+m_3}} + \tfrac{\vec{p}_\sigma^2}{2\frac{m_4(m_1+m_2+m_3)}{m_1+m_2+m_3+m_4}}.$$

Nous avons ici de nouvelles masses réduites associées à ces nouvelles coordonnées $\vec{r}$, $\vec{\rho}$ et $\vec{\sigma}$ qui sont données par

$$\begin{array}{l} \mu_r = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}, \\ \mu_\rho = \frac{m_3(m_1+m_2)}{m_1+m_2+m_3}, \\ \mu_\sigma = \frac{m_4(m_1+m_2+m_3)}{m_1+m_2+m_3+m_4}. \end{array}$$

On peut sans difficulté montrer que le terme de l'énergie potentielle :

$$\begin{aligned} V^{(4)} &= k_{12}\left(\vec{r}_1-\vec{r}_2\right)^2+k_{13}\left(\vec{r}_1-\vec{r}_3\right)^2+k_{14}\left(\vec{r}_1-\vec{r}_4\right)^2 \\ &\quad +k_{23}\left(\vec{r}_2-\vec{r}_3\right)^2+k_{24}\left(\vec{r}_2-\vec{r}_4\right)^2 \\ &\quad +k_{34}\left(\vec{r}_3-\vec{r}_4\right)^2 \end{aligned} \tag{5.34}$$

se simplifie en :

$$\begin{array}{ll} V^{(4)} = & \frac{k_{12}(m_1+m_2)^2+m_1^2(k_{23}+k_{24})+m_2^2(k_{13}+k_{14})}{(m_1+m_2)^2} r^2 \\ & +\frac{(m_1+m_2+m_3)^2(k_{13}+k_{23})+k_{34}(m_1+m_2)^2+m_3^2(k_{14}+k_{24})}{(m_1+m_2+m_3)^2} \rho^2 \\ & +\left(k_{14}+k_{24}+k_{34}\right)\sigma^2 \\ & +2\frac{(m_1+m_2+m_3)(m_2k_{13}-m_1k_{23})+m_3(m_2k_{14}-m_1k_{24})}{(m_1+m_2)(m_1+m_2+m_3)} \vec{r}.\vec{\rho} \\ & +2\frac{m_2k_{14}-m_1k_{24}}{m_1+m_2} \vec{r}.\vec{\sigma} \\ & +2\frac{m_3(k_{14}+k_{24})-k_{34}(m_1+m_2)}{m_1+m_2+m_3} \vec{\rho}.\vec{\sigma} \end{array} \tag{5.35}$$

qui est une forme quadratique en les variables $\vec{r}$, $\vec{\rho}$ et $\vec{\sigma}$ mais non diagonale justifiée par la présence des termes $\vec{r}.\vec{\sigma}$, $\vec{r}.\vec{\rho}$ et $\vec{\rho}.\vec{\sigma}$. On est donc obligé à diagonaliser cette forme quadratique.

Nous allons d'abord procédé par une transformation d'échelle

$$\begin{array}{l} \vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \sqrt{2\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}}\vec{r} \\ \vec{\rho} \rightarrow \vec{\rho}' = \sqrt{2\frac{m_3(m_1+m_2)}{m_1+m_2+m_3}}\vec{\rho} \\ \vec{\sigma} \rightarrow \vec{\sigma}' = \sqrt{2\frac{m_4(m_1+m_2+m_3)}{m_1+m_2+m_3+m_4}}\vec{\sigma} \end{array} \tag{5.36}$$

ou encore

$$
\begin{aligned}
\vec{r} &= \sqrt{\tfrac{m_1+m_2}{2m_1m_2}}\vec{r}', \\
\vec{\rho} &= \frac{1}{\sqrt{\frac{2m_3(m_1+m_2)}{m_1+m_2+m_3}}}\vec{\rho}', \\
\vec{\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{\frac{2m_4(m_1+m_2+m_3)}{m_1+m_2+m_3+m_4}}}\vec{\sigma}'.
\end{aligned} \tag{5.37}
$$

L'expression de l'hamiltonien relatif dans ce cas est :

$$
\hat{H}_r^{(4)} = \vec{p}^{\,2}_{r'} + \vec{p}^{\,2}_{\rho'} + \vec{p}^{\,2}_{\sigma'} + V^{(4)}\left(\vec{r}', \vec{\rho}', \vec{\sigma}'\right)
$$

avec

$$
\begin{aligned}
V^{(4)}\left(\vec{r}', \vec{\rho}', \vec{\sigma}'\right) \quad = \quad & \tfrac{k_{12}(m_1+m_2)^2+m_1^2(k_{23}+k_{24})+m_2^2(k_{13}+k_{14})}{2m_1m_2(m_1+m_2)} r'^2 \\
& + \tfrac{(m_1+m_2+m_3)^2(k_{13}+k_{23})+k_{34}(m_1+m_2)^2+m_3^2(k_{14}+k_{24})}{2m_3(m_1+m_2)(m_1+m_2+m_3)} \rho'^2 \\
& + \tfrac{(m_1+m_2+m_3+m_4)(k_{14}+k_{24}+k_{34})}{2m_4(m_1+m_2+m_3)} \sigma'^2 \\
& + \tfrac{(m_1+m_2+m_3)(m_2k_{13}-m_1k_{23})+m_3(m_2k_{14}-m_1k_{24})}{(m_1+m_2)(m_1+m_2+m_3)} \sqrt{\tfrac{m_1+m_2+m_3}{m_3m_1m_2}}\,\vec{r}'.\vec{\rho}' \\
& + \tfrac{(m_2k_{14}-m_1k_{24})}{(m_1+m_2)} \sqrt{\tfrac{(m_1+m_2)(m_1+m_2+m_3+m_4)}{m_1m_2m_4(m_1+m_2+m_3)}}\,\vec{r}'.\vec{\sigma}' \\
& + \tfrac{m_3(k_{14}+k_{24})-k_{34}(m_1+m_2)}{m_1+m_2+m_3} \sqrt{\tfrac{m_1+m_2+m_3+m_4}{m_3m_4(m_1+m_2)}}\,\vec{\rho}'.\vec{\sigma}' \ .
\end{aligned}
$$

On peut se servir d'une transformation orthogonale,

$$
\begin{aligned}
\vec{r}' &\to \widetilde{\vec{r}} = f(r', \rho', \sigma') \\
\vec{\rho}' &\to \widetilde{\vec{\rho}} = f(r', \rho', \sigma') \\
\vec{\sigma}' &\to \widetilde{\vec{\sigma}} = f(r', \rho', \sigma'),
\end{aligned} \tag{5.38}
$$

garde inchangé la norme ($\vec{p}^{\,2}_{r'} + \vec{p}'^{\,2}_{\rho'} + \vec{p}'^{\,2}_{\sigma'}$ dans notre cas), il plus commode de se servir de telle transformation pour éliminer les termes en $\vec{r}'.\vec{\rho}'$, $\vec{r}'.\vec{\sigma}'$ et $\vec{\rho}'.\vec{\sigma}'$ et ramener le terme de l'énergie potentielle en une forme diagonale. Ce dernier s'écrit sous forme matricielle comme :

$$
V^{(4)}\left(\vec{r}', \vec{\rho}', \vec{\sigma}'\right) = \begin{pmatrix} \vec{r}' & \vec{\rho}' & \vec{\sigma}' \end{pmatrix} A^{(4)} \begin{pmatrix} \vec{r}' \\ \vec{\rho}' \\ \vec{\sigma}' \end{pmatrix}. \tag{5.39}
$$

On doit choisir une forme symétrique pour la matrice $A^{(4)}$. Soit :

$$A^{(4)} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{12} & A_{22} & A_{23} \\ A_{13} & A_{23} & A_{33} \end{pmatrix} \tag{5.40}$$

avec

$$\begin{aligned}
A_{11} &= \tfrac{k_{12}(m_1+m_2)^2+m_1^2(k_{23}+k_{24})+m_2^2(k_{13}+k_{14})}{2m_1m_2(m_1+m_2)}, \\
A_{22} &= \tfrac{(m_1+m_2+m_3)^2(k_{13}+k_{23})+k_{34}(m_1+m_2)^2+m_3^2(k_{14}+k_{24})}{2m_3(m_1+m_2)(m_1+m_2+m_3)}, \\
A_{33} &= \tfrac{(m_1+m_2+m_3+m_4)(k_{14}+k_{24}+k_{34})}{2m_4(m_1+m_2+m_3)}, \\
A_{12} &= \tfrac{1}{2}\tfrac{(m_1+m_2+m_3)(m_2k_{13}-m_1k_{23})+m_3(m_2k_{14}-m_1k_{24})}{(m_1+m_2)(m_1+m_2+m_3)}\sqrt{\tfrac{m_1+m_2+m_3}{m_3m_1m_2}}, \\
A_{13} &= \tfrac{1}{2}\tfrac{(m_2k_{14}-m_1k_{24})}{(m_1+m_2)}\sqrt{\tfrac{(m_1+m_2)(m_1+m_2+m_3+m_4)}{m_1m_2m_4(m_1+m_2+m_3)}}, \\
A_{23} &= \tfrac{1}{2}\tfrac{m_3(k_{14}+k_{24})-k_{34}(m_1+m_2)}{m_1+m_2+m_3}\sqrt{\tfrac{m_1+m_2+m_3+m_4}{m_3m_4(m_1+m_2)}}.
\end{aligned} \tag{5.41}$$

Après diagonalisation de la matrice $A^{(4)}$, on obtient une matrice $\tilde{A}^{(4)}$ diagonale dont les élements diagonaux sont les valeurs propres λ_1, λ_2 et λ_3 de $A^{(4)}$ tel que :

$$\tilde{A}^{(4)} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}$$

Donc, l'hamiltonien du système est la somme d'hamiltoniens de trois oscillateurs harmoniques indépendants :

$$\hat{H}_r^{(4)} = \vec{p}_{\tilde{r}}^{\,2} + \vec{p}_{\tilde{\rho}}^{\,2} + \vec{p}_{\tilde{\sigma}}^{\,2} + \lambda_1\widetilde{r}^2 + \lambda_2\widetilde{\rho}^2 + \lambda_3\widetilde{\sigma}^2 = \left(\vec{p}_{\tilde{r}}^{\,2} + \lambda_1\widetilde{r}^2\right) + \left(\vec{p}_{\tilde{\rho}}^{\,2} + \lambda_2\widetilde{\rho}^2\right) + \left(\vec{p}_{\tilde{\sigma}}^{\,2} + \lambda_3\widetilde{\sigma}^2\right). \tag{5.42}$$

En connaissant les énergies de trois oscillateurs harmoniques on peut déduire le spectre d'énergie :

$$E^{(4)}_{n_1,n_2,n_3} = \sqrt{\lambda_1}\,(2n_1+3) + \sqrt{\lambda_2}\,(2n_1+3) + \sqrt{\lambda_3}\,(2n_1+3)\,. \tag{5.43}$$

La fonction d'onde radiale est le produit des fonctions d'onde des trois oscillateurs découplés qui a la même forme que celle donnée par l'equation (5.29) à l'exception qu'on utilise les nouvelles coordonnées de Jacobi $\widetilde{\vec{r}}$, $\widetilde{\vec{\rho}}$ et $\widetilde{\vec{\sigma}}$ (5.38).

L'énergie du niveau fondamental $E_0^{(4)}$ du système est donnée par :

$$E_0^{(4)} = 3\left(\sqrt{\lambda_1} + \sqrt{\lambda_2} + \sqrt{\lambda_3}\right)$$

et la fonction d'onde radiale correspondante a la même forme de l'équation (5.30).

Nous fournissons dans le tableau suivant des résultats numériques pour le spectre d'énergie du système à quatre corps. Nous restreignons nos calculs au niveau fondamentale et au premier états excité. Certaines configurations de masse ont été considérées et toutes les constantes de couplage sont choisies pour être égales $k_{ij} = 1$.

$m_1, ..., m_4$	$E_0^{(4)}$	$E_1^{(4)}$	$m_1, ..., m_4$	$E_0^{(4)}$	$E_1^{(4)}$
$1, 1, 1, 1$	12.7279	15.5563	$1, 1, 2, 3$	10.5428	12.3433
$1, 1, 1, 2$	11.8394	14.0755	$1, 2, 3, 3$	09.1797	10.8127
$1, 1, 2, 2$	10.9169	12.9169	$1, 2, 3, 4$	08.9549	10.4687

Table 5.1 – Énergies des états fondamentaux et excités pour l'oscillateur harmonique à quatre corps.

Chapitre 6

L'oscillateur harmonique à cinq corps

On se propose dans ce chapitre d'étudier des systèmes composés de cinq particules en interaction harmonique. L'hamiltonien du système s'écrit comme :

$$
\begin{aligned}
\hat{H}^{(5)} \quad = \quad & \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_4} + \frac{\vec{p}_5^2}{2m_5} \\
& + k_{12} (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + k_{13} (\vec{r}_1 - \vec{r}_3)^2 + k_{14} (\vec{r}_1 - \vec{r}_4)^2 + k_{15} (\vec{r}_1 - \vec{r}_5)^2 \\
& + k_{23} (\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2 + k_{24} (\vec{r}_2 - \vec{r}_4)^2 + k_{25} (\vec{r}_2 - \vec{r}_5)^2 \\
& + k_{34} (\vec{r}_3 - \vec{r}_4)^2 + k_{35} (\vec{r}_3 - \vec{r}_5)^2 \\
& + k_{45} (\vec{r}_4 - \vec{r}_5)^2 . \qquad (6.1)
\end{aligned}
$$

Nous allons considéré les configurations suivantes :

- la configuration la plus simple avec toutes masse égale $(5 \times m)$
- configuration avec deux masses différentes $(4 \times m, M)$
- la configuration la plus générale avec toutes les masses différentes $(m_1, m_2, m_3, m_4, m_5)$.

6.1 Système ayant toutes les masses égales $(5 \times m)$

L'hamiltonien (6.1) du système pour cette configuration, où les particules du système sont toutes de même masse, s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}\hat{H}^{(5)} &= \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m} + \frac{\vec{p}_5^2}{2m} \\ &\quad + k\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right)^2 + k\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_3\right)^2 + k\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_4\right)^2 + k\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_5\right)^2 \\ &\quad + k\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_3\right)^2 + k\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_4\right)^2 + k\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_5\right)^2 \\ &\quad + k\left(\vec{r}_3 - \vec{r}_4\right)^2 + k\left(\vec{r}_3 - \vec{r}_5\right)^2 \\ &\quad + k\left(\vec{r}_4 - \vec{r}_5\right)^2 . \end{aligned} \tag{6.2}$$

où on a supposé que toutes les constantes de couplage sont égale $k_{ij} = k$ (4.2).

Pour chaque configuration de masse du problème à cinq corps, nous devons faire le choix de quatre coordonnées de Jacobi que nous noterons $\vec{r}$, $\vec{\rho}$, $\vec{\sigma}$ et $\vec{\delta}$ (1.16).

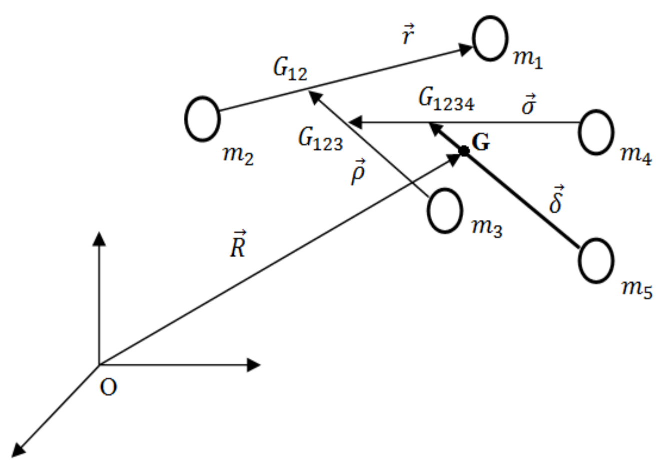

Figure 4 : Coordonnées de Jacobi pour le système à cinq corps :

$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ vecteur liant les deux premières particules,

$\vec{\rho}$ le vecteur liant la troisième particules et le centre de masse des deux première,

$\vec{\sigma}$ le vecteur liant la quatrième particules et le centre de masse des trois premières,

$\vec{\delta}$ le vecteur liant la cinquième particules et le centre de masse des quatre premières.

Le choix possible des coordonnées de Jacobi est le suivant :

$$\begin{aligned}
\vec{r} &:= \vec{\rho}_1 = -\vec{r}_2 + \vec{r}_1, \\
\vec{\rho} &:= \vec{\rho}_2 = -\vec{r}_3 + \tfrac{1}{2}\left(\vec{r}_1 + \vec{r}_2\right), \\
\vec{\sigma} &:= \vec{\rho}_3 = -\vec{r}_4 + \tfrac{1}{3}\left(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3\right), \\
\vec{\delta} &:= \vec{\rho}_4 = -\vec{r}_5 + \tfrac{1}{4}\left(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3 + \vec{r}_4\right).
\end{aligned} \tag{6.3}$$

La coordonnée du centre de masse est définie par

$$\vec{R} = \frac{1}{5}\left(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3 + \vec{r}_4 + \vec{r}_5\right). \tag{6.4}$$

En inversant les relations (6.3) et (6.4), on obtient les expressions des coordonnées individuelles $\vec{r}_i\,(i = 1, 2, 3, 4, 5)$ en termes des coordonnées de Jacobi $\vec{r}$, $\vec{\rho}$, $\vec{\sigma}$ et $\vec{\delta}$ et de la coordonnée du centre de masse $\overrightarrow{R}$

$$\begin{aligned}
\vec{r}_1 &= \vec{R} + \tfrac{1}{2}\vec{r} + \tfrac{1}{3}\vec{\rho} + \tfrac{1}{4}\vec{\sigma} + \tfrac{1}{5}\vec{\delta}\ , \\
\vec{r}_2 &= \vec{R} - \tfrac{1}{2}\vec{r} + \tfrac{1}{3}\vec{\rho} + \tfrac{1}{4}\vec{\sigma} + \tfrac{1}{5}\vec{\delta}\ , \\
\vec{r}_3 &= \vec{R} - \tfrac{2}{3}\vec{\rho} + \tfrac{1}{4}\vec{\sigma} + \tfrac{1}{5}\vec{\delta}\ , \\
\vec{r}_4 &= \vec{R} - \tfrac{3}{4}\vec{\sigma} + \tfrac{1}{5}\vec{\delta}\ , \\
\vec{r}_5 &= \vec{R} - \tfrac{4}{5}\vec{\delta}\ .
\end{aligned} \tag{6.5}$$

En peut exprimer le terme de l'énergie cinétique dans l'hamiltonien (6.2) en fonction des vitesses $\dot{\vec{r}}_1 = d\vec{r}_1/dt$, $\dot{\vec{r}}_2 = d\vec{r}_2/dt$, $\dot{\vec{r}}_3 = d\vec{r}_3/dt$, $\dot{\vec{r}}_4 = d\vec{r}_4/dt$ et $\dot{\vec{r}}_5 = d\vec{r}_5/dt$ avec le résultat

$$\begin{aligned}
T^{(5)} &= \frac{1}{2}m_1\dot{\vec{r}}_1^{\,2} + \frac{1}{2}m_2\dot{\vec{r}}_2^{\,2} + \frac{1}{2}m_3\dot{\vec{r}}_3^{\,2} + \frac{1}{2}m_4\dot{\vec{r}}_4^{\,2} + \frac{1}{2}m_5\dot{\vec{r}}_5^{\,2}, \\
&= \frac{1}{2}\left(5m\right)\dot{\vec{R}}^{2} + \frac{1}{2}\left(\frac{m}{2}\right)\dot{\vec{r}}^{2} + \frac{1}{2}\left(\frac{2m}{3}\right)\dot{\vec{\rho}}^{2} + \frac{1}{2}\left(\frac{3m}{4}\right)\dot{\vec{\sigma}}^{2} + \frac{1}{2}\left(\frac{4m}{5}\right)\dot{\vec{\delta}}^{2}.
\end{aligned} \tag{6.6}$$

Ou encore en termes des moment conjugués $\vec{P}_R$, $\vec{p}_r$, $\vec{p}_\rho$, $\vec{p}_\sigma$et $\vec{p}_\delta$ comme

$$T^{(5)} = \frac{\vec{P}_R^2}{2\mathbf{M}} + \frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + \frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma} + \frac{\vec{p}_\delta^2}{2\mu_\delta}, \tag{6.7}$$

avec $\mathbf{M} = 5m$ la masse totale du système et

$$\mu_r = \tfrac{m}{2},$$
$$\mu_\rho = \tfrac{2m}{3},$$
$$\mu_\sigma = \tfrac{3m}{4},$$
$$\mu_\delta = \tfrac{4m}{5}.$$

les masses réduites associées respectivement aux coordonnées de Jacobi $\vec{r}$, $\vec{\rho}$, $\vec{\sigma}$ et $\vec{\delta}$.

Le calcul du terme de l'énergie potentielle mène à

$$\begin{aligned} V^{(5)} &= k\left(\vec{r}_1-\vec{r}_2\right)^2+k\left(\vec{r}_1-\vec{r}_3\right)^2+k\left(\vec{r}_1-\vec{r}_4\right)^2+k\left(\vec{r}_1-\vec{r}_5\right)^2 \\ &\quad +k\left(\vec{r}_2-\vec{r}_3\right)^2+k\left(\vec{r}_2-\vec{r}_4\right)^2+k\left(\vec{r}_2-\vec{r}_5\right)^2+k\left(\vec{r}_3-\vec{r}_4\right)^2+k\left(\vec{r}_3-\vec{r}_5\right)^2 \\ &\quad +k\left(\vec{r}_4-\vec{r}_5\right)^2 \\ &= \frac{5}{2}kr^2+\frac{10}{3}k\rho^2+\frac{15}{4}k\sigma^2+4k\delta^2. \end{aligned} \tag{6.8}$$

On obtient l'expression de l'hamiltonien du système en fonction des coordonnées de Jacobi et des moments conjugués associés :

$$\hat{H}^{(5)} = \frac{\vec{P}_R^2}{2\mathbf{M}}+\frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r}+\frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho}+\frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma}+\frac{\vec{p}_\delta^2}{2\mu_\delta}+\frac{5}{2}kr^2+\frac{10}{3}k\rho^2+\frac{15}{4}k\sigma^2+4k\delta^2 \tag{6.9}$$

et l'hamiltonien relatif se réduit donc à :

$$\begin{aligned} \hat{H}_r^{(5)} &= \frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r}+\frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho}+\frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma}+\frac{\vec{p}_\delta^2}{2\mu_\delta}+\frac{5}{2}kr^2+\frac{10}{3}k\rho^2+\frac{15}{4}k\sigma^2+4k\delta^2 \\ &= \left(\frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r}+\frac{5}{2}kr^2\right)+\left(\frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho}+\frac{10}{3}k\rho^2\right)+\left(\frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma}+\frac{15}{4}k\sigma^2\right)+\left(\frac{\vec{p}_\delta^2}{2\mu_\delta}+4k\delta^2\right). \end{aligned} \tag{6.10}$$

Ce dernier apparaît comme la somme des hamiltoniens de quatre oscillateurs harmoniques découplés. L'énergie du système est alors la somme des énergies de ces oscillateurs :

$$\begin{aligned}
E^{(5)}_{n_1,n_2,n_3,n_4} &= \sqrt{\tfrac{5k}{4\mu_r}}\,(2n_1+3) + \sqrt{\tfrac{5}{3}\tfrac{k}{\mu_\rho}}\,(2n_2+3) + \sqrt{\tfrac{15k}{8\mu_\sigma}}\,(2n_3+3) + \sqrt{\tfrac{2k}{\mu_\delta}}\,(2n_4+3) \\
&= \tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{10k}{m}}\,(2n_1+3) + \tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{10k}{m}}\,(2n_2+3) + \tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{10k}{m}}\,(2n_3+3) + \tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{10k}{m}}\,(2n_4+3) \\
&= \sqrt{\tfrac{10k}{m}}\,(n_1+n_2+n_3+n_4+6)
\end{aligned}$$

avec n_1, n_2, n_3 et n_4 des entiers positifs ou nuls, où encore si on pose $n = n_1 + n_2 + n_3 + n_4$

$$E^{(5)}_{n_1,n_2,n_3,n_4} = E^{(5)}_n = \sqrt{\frac{10k}{m}}\,(n+6)\,. \tag{6.11}$$

La fonction d'onde radiale associée est le produit des quatre fonctions d'onde radiale

$$\begin{aligned}
R^{(5)}_{n_1,l_1,\ldots,n_4,l_4}(r,\ldots,\delta) \;&= C r^{l_1} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{5k\mu_r}r^2} L^{l_1+\frac{1}{2}}_{(n_1-l_1)/2}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{5k\mu_r}r^2\right) \\
&\times \rho^{l_2} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{20k\mu_\rho}{3}}\rho^2}\; L^{l_2+\frac{1}{2}}_{(n_2-l_2)/2}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{20k\mu_\rho}{3}}\rho^2\right) \\
&\times \sigma^{l_3} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2}k\mu_\sigma}\sigma^2} L^{l_3+\frac{1}{2}}_{(n_3-l_3)/2}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{15}{2}k\mu_\sigma}\sigma^2\right) \\
&\times \delta^{l_4} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{8k\mu_\delta}\delta^2} L^{l_4+\frac{1}{2}}_{(n_4-l_4)/2}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{8k\mu_\delta}\delta^2\right)
\end{aligned}$$

avec l_1, l_2, l_3 et l_4 des entiers positifs ou nuls.

Le niveau fondamental correspond à $n = 0$, ce qui mène à l'expression :

$$E^{(5)}_0 = 6\sqrt{\frac{10k}{m}}. \tag{6.12}$$

et la fonction d'onde radiale correspondante est

$$R^{(5)}_{0,0,\ldots,0,0}(r,\rho,\sigma,\delta) = C e^{-\frac{1}{2}\sqrt{5k\mu_r}r^2} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{20k\mu_\rho}{3}}\rho^2} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2}k\mu_\sigma}\sigma^2} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{8k\mu_\delta}\delta^2}.$$

6.2 Système ayant deux masses différentes $(4 \times m, m_5)$

On peut sans perte de généralité numéroter les particules de même masse m de 1 à 4 et cinquième particule ayant une valeur différente pour sa masse m_5. L'hamiltonien du système s'écrit comme :

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{(5)} &= \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m} + \frac{\vec{p}_5^2}{2m_5} \\
&\quad + k\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right)^2 + k\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_3\right)^2 + k\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_4\right)^2 + \mathbf{k}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_5\right)^2 \\
&\quad + k\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_3\right)^2 + k\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_4\right)^2 + \mathbf{k}\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_5\right)^2 \\
&\quad + k\left(\vec{r}_3 - \vec{r}_4\right)^2 + \mathbf{k}\left(\vec{r}_3 - \vec{r}_5\right)^2 \\
&\quad + \mathbf{k}\left(\vec{r}_4 - \vec{r}_5\right)^2 . \qquad (6.13)
\end{aligned}$$

où nous avons adopté la notation $k_{12} = k_{13} = k_{14} = k_{23} = k_{24} = k_{34} = k$ et $k_{15} = k_{25} = k_{35} = k_{45} = \mathbf{k}$.

Les coordonnées de Jacobi et la coordonnée du centre de masse que nous allons utiliser seront :

$$\begin{aligned}
\vec{r} &:= \vec{\rho}_1 = -\vec{r}_2 + \vec{r}_1, \\
\vec{\rho} &:= \vec{\rho}_2 = -\vec{r}_3 + \tfrac{1}{2}\left(\vec{r}_1 + \vec{r}_2\right), \\
\vec{\sigma} &:= \vec{\rho}_3 = -\overrightarrow{r}_4 + \tfrac{1}{3}\left(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3\right), \\
\vec{\delta} &:= \vec{\rho}_4 = -\vec{r}_5 + \tfrac{1}{4}\left(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3 + \vec{r}_4\right)
\end{aligned} \qquad (6.14)$$

et

$$\vec{R} = \frac{1}{4m + m_5}\left(m\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 + m\vec{r}_3 + m\vec{r}_4 + m_5\vec{r}_5\right). \qquad (6.15)$$

Les coordonnées des particules individuelles $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$, $\vec{r}_3, \vec{r}_4$ et $\vec{r}_5$ peuvent être exprimé en fonction des coordonnées de Jacobi $\vec{r}$, $\vec{\rho}$, $\vec{\sigma}$ et $\vec{\delta}$, et de la coordonnée du centre de masse $\vec{R}$ (6.14) et (6.15) par :

$$\begin{aligned}
\vec{r}_1 &= \vec{R} + \tfrac{1}{2}\vec{r} + \tfrac{1}{3}\vec{\rho} + \tfrac{1}{4}\vec{\sigma} + \tfrac{m_5}{4m+m_5}\vec{\delta}, \\
\vec{r}_2 &= \vec{R} - \tfrac{1}{2}\vec{r} + \tfrac{1}{3}\vec{\rho} + \tfrac{1}{4}\vec{\sigma} + \tfrac{m_5}{4m+m_5}\vec{\delta}, \\
\vec{r}_3 &= \overrightarrow{R} - \tfrac{2}{3}\overrightarrow{\rho} + \tfrac{1}{4}\overrightarrow{\sigma} + \tfrac{m_5}{4m+m_5}\overrightarrow{\delta}, \\
\vec{r}_4 &= \vec{R} - \tfrac{3}{4}\vec{\sigma} + \tfrac{m_5}{4m+m_5}\vec{\delta}, \\
\vec{r}_5 &= \vec{R} - \tfrac{4m}{4m+m_5}\vec{\delta}.
\end{aligned}$$

Avec ces expressions de $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$, $\vec{r}_3$, $\vec{r}_4$ et $\vec{r}_5$ reportées dans l'expression de l'hamiltonien (6.13), la partie potentielle se réduite en une forme diagonale :

$$V^{(5)} = \frac{1}{2}(4k+\mathbf{k})\,r^2 + \frac{2}{3}(4k+\mathbf{k})\,\rho^2 + \frac{3}{4}(4k+\mathbf{k})\,\sigma^2 + 4\mathbf{k}\delta^2.$$

On développant le terme de l'énergie cinétique qui figure dans l'hamiltonien (6.13) on obtient :

$$T^{(5)} = \tfrac{1}{2}(4m+m_5)\,\dot{\vec{R}}^{2} + \tfrac{1}{2}\left(\tfrac{1}{2}m\right)\dot{\vec{r}}^{2} + \tfrac{1}{2}\left(\tfrac{2}{3}m\right)\dot{\vec{\rho}}^{2} + \tfrac{1}{2}\left(\tfrac{3}{4}m\right)\dot{\vec{\sigma}}^{2} + \tfrac{1}{2}\left(\tfrac{4mm_5}{4m+m_5}\right)\dot{\vec{\delta}}^{2},$$

ou en termes des moments conjugués $\vec{P}_R$, $\vec{p}_r, \vec{p}_\rho$ et $\vec{p}_\sigma$

$$\begin{aligned} T^{(5)} &= \frac{\vec{P}_R^2}{2\mathbf{M}} + \frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + \frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma} + \frac{\vec{p}_\delta^2}{2\mu_\delta} \\ &= \frac{\vec{P}_R^2}{2(4m+m_5)} + \frac{\vec{p}_r^2}{2\left(\frac{m}{2}\right)} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\left(\frac{2}{3}m\right)} + \frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\left(\frac{3}{4}m\right)} + \frac{\vec{p}_\delta^2}{2\left(\frac{4mm_5}{4m+m_5}\right)}. \end{aligned}$$

qui est aussi diagonale.

Nous avons ici de nouvelle masse réduites associées à ces nouvelle coordonnées $\vec{r}$, $\vec{\rho}$, $\vec{\sigma}$ et $\vec{\delta}$ qui sont données par

$$\begin{aligned} \mu_r &= \tfrac{m}{2}, \\ \mu_\rho &= \tfrac{2m}{3}, \\ \mu_\sigma &= \tfrac{3m}{4}, \\ \mu_\delta &= \tfrac{4mm_5}{4m+m_5}. \end{aligned}$$

L'expression de l'hamiltonien relatif $\hat{H}_r$ dans ce cas est :

$$\hat{H}_r^{(5)} = \frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + \frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma} + \frac{\vec{p}_\delta^2}{2\mu_\delta} + \frac{1}{2}(4k+\mathbf{k})\,r^2 + \frac{2}{3}(4k+\mathbf{k})\,\rho^2 + \frac{3}{4}(4k+\mathbf{k})\,\sigma^2 + 4\mathbf{k}\delta^2.$$

Le spectre d'énergie sera donné par :

$$\begin{aligned} E^{(5)}_{n_1,\ldots,n_4} &= \sqrt{\tfrac{1}{2\mu_r}\tfrac{(4k+\mathbf{k})}{2}}\,(2n_1+3) + \sqrt{\tfrac{1}{2\mu_\rho}\tfrac{2(4k+\mathbf{k})}{3}}\,(2n_2+3) + \sqrt{\tfrac{1}{2\mu_\sigma}\tfrac{3(4k+\mathbf{k})}{4}}\,(2n_3+3) + \sqrt{\tfrac{4\mathbf{k}}{2\mu_\delta}}\,(2n_4+3) \\ &= \sqrt{\tfrac{(4k+\mathbf{k})}{2m}}\,(2n_1+3) + \sqrt{\tfrac{(4k+\mathbf{k})}{2m}}\,(2n_2+3) + \sqrt{\tfrac{(4k+\mathbf{k})}{2m}}\,(2n_3+3) + \sqrt{\tfrac{(4m+m_5)\mathbf{k}}{2mm_5}}\,(2n_4+3). \end{aligned}$$

La fonction d'onde radiale associée est le produit des quatre fonctions d'onde radiale :

$$\begin{aligned} R^{(5)}_{n_1,l_1,\ldots,n_4,l_4}(r,\ldots,\delta) = & \; Cr^{l_1}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{(4k+\mathbf{k})\mu_r}r^2}L^{l_1+\frac{1}{2}}_{(n_1-l_1)/2}\left(\frac{1}{2}\sqrt{(4k+\mathbf{k})\,\mu_r}r^2\right) \\ & \times\rho^{l_2}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{4(4k+\mathbf{k})\mu_\rho}{3}}\rho^2}L^{l_2+\frac{1}{2}}_{(n_2-l_2)/2}\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{4(4k+\mathbf{k})\mu_\rho}{3}}\rho^2\right) \\ & \times\sigma^{l_3}e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3(4k+\mathbf{k})\mu_\sigma}{2}}\sigma^2}L^{l_3+\frac{1}{2}}_{(n_3-l_3)/2}\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3(4k+\mathbf{k})\mu_\sigma}{2}}\sigma^2\right) \\ & \times\delta^{l_4}e^{-\sqrt{2k\mu_\delta}\delta^2}\;L^{l_4+\frac{1}{2}}_{(n_4-l_4)/2}\left(\sqrt{2k\mu_\delta}\delta^2\right) \end{aligned}$$

avec l_1, l_2, l_3 et l_4 des entiers positifs ou nuls.

Et le niveau fondamental du système est donné par :

$$E^{(5)}_0 = 3\left(\sqrt{\frac{(4k+\mathbf{k})}{2m}}+\sqrt{\frac{(4k+\mathbf{k})}{2m}}+\sqrt{\frac{(4k+\mathbf{k})}{2m}}+\sqrt{\frac{4m+m_5}{2mm_5}\mathbf{k}}\right). \tag{6.16}$$

6.3 Système ayant toutes les masses différentes $(m_1, m_2, m_3, m_4, m_5)$

Les coordonnées de Jacobi pour cette configuration sont définies par

$$\begin{aligned} \vec{r} &: = \vec{\rho}_1 = -\vec{r}_2+\vec{r}_1, \\ \vec{\rho} &: = \vec{\rho}_2 = -\vec{r}_3+\frac{1}{m_1+m_2}\left(m_1\vec{r}_1+m_2\vec{r}_2\right), \\ \vec{\sigma} &: = \vec{\rho}_3 = -\vec{r}_4+\frac{1}{m_1+m_2+m_3}\left(m_1\vec{r}_1+m_2\vec{r}_2+m_3\vec{r}_3\right), \\ \vec{\delta} &: = \vec{\rho}_4 = -\vec{r}_5+\frac{1}{m_1+m_2+m_3+m_4}\left(m_1\vec{r}_1+m_2\vec{r}_2+m_3\vec{r}_3+m_4\vec{r}_4\right) \end{aligned} \tag{6.17}$$

et la coordonnée du centre de masse $\vec{R}$ est définie par :

$$\vec{R} = \frac{1}{m_1+m_2+m_3+m_4+m_5}\left(m_1\vec{r}_1+m_2\vec{r}_2+m_3\vec{r}_3+m_4\vec{r}_4+m_5\vec{r}_5\right). \tag{6.18}$$

En inversant les relations (6.17) et (6.18), on obtient les expressions des coordonnées individuelles $\vec{r}_i\,(i=1,\ldots,5)$ en termes des coordonnées de Jacobi $\vec{r}$, $\vec{\rho}$, $\vec{\sigma}$ et $\vec{\delta}$ et de la coordonnée du centre de masse $\vec{R}$

$$
\begin{array}{l}
\vec{r}_1 = \vec{R} + \frac{m_2}{m_1+m_2}\vec{r} + \frac{m_3}{m_1+m_2+m_3}\vec{\rho} + \frac{m_4}{m_1+m_2+m_3+m_4}\vec{\sigma} + \frac{m_5}{m_1+m_2+m_3+m_4+m_5}\vec{\delta}, \\
\vec{r}_2 = \vec{R} - \frac{m_1}{m_1+m_2}\vec{r} + \frac{m_3}{m_1+m_2+m_3}\vec{\rho} + \frac{m_4}{m_1+m_2+m_3+m_4}\vec{\sigma} + \frac{m_5}{m_1+m_2+m_3+m_4+m_5}\vec{\delta}, \\
\vec{r}_3 = \vec{R} - \frac{m_1+m_2}{m_1+m_2+m_3}\vec{\rho} + \frac{m_4}{m_1+m_2+m_3+m_4}\vec{\sigma} + \frac{m_5}{m_1+m_2+m_3+m_4+m_5}\vec{\delta}, \\
\vec{r}_4 = \vec{R} - \frac{m_1+m_2+m_3}{m_1+m_2+m_3+m_4}\vec{\sigma} + \frac{m_5}{m_1+m_2+m_3+m_4+m_5}\vec{\delta}, \\
\vec{r}_5 = \vec{R} - \frac{m_1+m_2+m_3+m_4}{m_1+m_2+m_3+m_4+m_5}\vec{\delta}.
\end{array}
\tag{6.19}
$$

Le terme de l'énergie cinétique dans l'hamiltonien (6.1) en fonction des vitesses $\dot{\vec{r}}_1 = d\vec{r}_1/dt$, $\dot{\vec{r}}_2 = d\vec{r}_2/dt$, $\dot{\vec{r}}_3 = d\vec{r}_3/dt$, $\dot{\vec{r}}_4 = d\vec{r}_4/dt$ et $\dot{\vec{r}}_5 = d\vec{r}_5/dt$ se réduit à

$$
\begin{array}{ll}
T^{(5)} & = \frac{1}{2}m_1\dot{\vec{r}}_1^{\,2} + \frac{1}{2}m_2\dot{\vec{r}}_2^{\,2} + \frac{1}{2}m_3\dot{\vec{r}}_3^{\,2} + \frac{1}{2}m_4\dot{\vec{r}}_4^{\,2} + \frac{1}{2}m_5\dot{\vec{r}}_5^{\,2} \\
 & = \frac{1}{2}\mathbf{M}\dot{\vec{R}}^{\,2} + \frac{1}{2}\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}\dot{\vec{r}}^{\,2} + \frac{1}{2}\frac{m_3(m_1+m_2)}{m_1+m_2+m_3}\dot{\vec{\rho}}^{\,2} + \frac{1}{2}\frac{m_4(m_1+m_2+m_3)}{\mathbf{M}-m_5}\dot{\vec{\sigma}}^{\,2} + \frac{1}{2}\frac{m_5(\mathbf{M}-m_5)}{\mathbf{M}}\dot{\vec{\delta}}^{\,2}
\end{array}
\tag{6.20}
$$

qui peut être réécrit en termes des moments conjugués $\vec{P}_R$, $\vec{p}_r$, $\vec{p}_\rho$, $\vec{p}_\sigma$et $\vec{p}_\delta$ comme

$$
T^{(5)} = \frac{\vec{p}_R^{2}}{2\mathbf{M}} + \frac{\vec{p}_r^{2}}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^{\,2}}{2\mu_\rho} + \frac{\vec{p}_\sigma^{2}}{2\mu_\sigma} + \frac{\vec{p}_\delta^{2}}{2\mu_\delta}
\tag{6.21}
$$

avec $\mathbf{M} = m_1 + m_2 + m_3 + m_4 + m_5$ la masse totale du système et

$$
\begin{array}{l}
\mu_r = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2}, \\
\mu_\rho = \frac{m_3(m_1+m_2)}{m_1+m_2+m_3}, \\
\mu_\sigma = \frac{m_4(m_1+m_2+m_3)}{m_1+m_2+m_3+m_4}, \\
\mu_\delta = \frac{m_5(m_1+m_2+m_3+m_4)}{m_1+m_2+m_3+m_4+m_5}.
\end{array}
\tag{6.22}
$$

les masses réduites associées respectivement aux coordonnées de Jacobi $\vec{r}$, $\vec{\rho}$, $\vec{\sigma}$ et $\vec{\delta}$.

En reportant les expressions de $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$, $\vec{r}_3$ et $\vec{r}_4$, (6.19), dans l'expression de l'énergie potentielle :

$$\begin{aligned} V^{(5)} &= k_{12}\left(\vec{r}_1-\vec{r}_2\right)^2+k_{13}\left(\vec{r}_1-\vec{r}_3\right)^2+k_{14}\left(\vec{r}_1-\vec{r}_4\right)^2+k_{15}\left(\vec{r}_1-\vec{r}_5\right)^2 \\ &\quad +k_{23}\left(\vec{r}_2-\vec{r}_3\right)^2+k_{24}\left(\vec{r}_2-\vec{r}_4\right)^2+k_{25}\left(\vec{r}_2-\vec{r}_5\right)^2 \\ &\quad +k_{34}\left(\vec{r}_3-\vec{r}_4\right)^2+k_{35}\left(\vec{r}_3-\vec{r}_5\right)^2 \\ &\quad +k_{45}\left(\vec{r}_4-\vec{r}_5\right)^2, \end{aligned} \tag{6.23}$$

on obtient

$$\begin{aligned} V^{(5)} &= \tfrac{k_{12}(m_1+m_2)^2+m_1^2(k_{23}+k_{24}+k_{25})+m_2^2(k_{13}+k_{14}+k_{15})}{(m_1+m_2)^2} r^2 \\ &+ \tfrac{(k_{13}+k_{23})(m_1+m_2+m_3)^2+(m_1+m_2)^2(k_{34}+k_{35})+m_3^2(k_{14}+k_{15}+k_{24}+k_{25})}{(m_1+m_2+m_3)^2}\rho^2 \\ &+ \tfrac{(k_{14}+k_{24}+k_{34})(\mathbf{M}-m_5)^2+k_{45}(m_1+m_2+m_3)^2+m_4^2(k_{15}+k_{25}+k_{35})}{(\mathbf{M}-m_5)^2}\sigma^2 \\ &+ \left(k_{15}+k_{25}+k_{35}+k_{45}\right)\delta^2 \\ &+ 2\tfrac{(m_1+m_2+m_3)(m_2k_{13}-m_1k_{23})+m_2m_3(k_{14}+k_{15})-m_1m_3(k_{24}+k_{25})}{(m_1+m_2)(m_1+m_2+m_3)}\vec{r}.\vec{\rho} \\ &+ 2\tfrac{(\mathbf{M}-m_5)(m_2k_{14}-m_1k_{24})+m_4(m_2k_{15}-m_1k_{25})}{(m_1+m_2)(\mathbf{M}-m_5)}\vec{r}.\vec{\sigma} \\ &+ 2\tfrac{m_2k_{15}-m_1k_{25}}{m_1+m_2}\vec{r}.\vec{\delta} \\ &+ 2\tfrac{(\mathbf{M}-m_5)(m_3(k_{14}+k_{24})-k_{34}(m_1+m_2))+m_4(m_3(k_{15}+k_{25})-k_{35}(m_1+m_2))}{(m_1+m_2+m_3)(\mathbf{M}-m_5)}\vec{\rho}.\vec{\sigma} \\ &+ 2\tfrac{m_3(k_{15}+k_{25})-k_{35}(m_1+m_2)}{m_1+m_2+m_3}\vec{\rho}.\vec{\delta} \\ &+ 2\tfrac{(k_{15}+k_{25}+k_{35})m_4-k_{45}(m_1+m_2+m_3)}{\mathbf{M}-m_5}\vec{\sigma}.\vec{\delta} \end{aligned} \tag{6.24}$$

L'hamiltonien relatif du système prend la forme suivante :

$$
\begin{aligned}
H_r^{(5)} \quad = \quad & \tfrac{1}{2\mu_r}p_r^2 + \tfrac{1}{2\mu_\rho}{p_\rho}^2 + \tfrac{1}{2\mu_\sigma}p_\sigma^2 + \tfrac{1}{2\mu_\delta}p_\delta^2 \\
+ \; & \tfrac{k_{12}(m_1+m_2)^2+m_1^2(k_{23}+k_{24}+k_{25})+m_2^2(k_{13}+k_{14}+k_{15})}{(m_1+m_2)^2} r^2 \\
+ \; & \tfrac{(k_{13}+k_{23})(m_1+m_2+m_3)^2+(m_1+m_2)^2(k_{34}+k_{35})+m_3^2(k_{14}+k_{15}+k_{24}+k_{25})}{(m_1+m_2+m_3)^2} \rho^2 \\
+ \; & \tfrac{(k_{14}+k_{24}+k_{34})(\mathbf{M}-m_5)^2+k_{45}(m_1+m_2+m_3)^2+m_4^2(k_{15}+k_{25}+k_{35})}{(\mathbf{M}-m_5)^2} \sigma^2 \\
+ \; & (k_{15}+k_{25}+k_{35}+k_{45})\,\delta^2 \\
+ \; & 2\tfrac{(m_1+m_2+m_3)(m_2k_{13}-m_1k_{23})+m_2m_3(k_{14}+k_{15})-m_1m_3(k_{24}+k_{25})}{(m_1+m_2)(m_1+m_2+m_3)} \vec{r}.\vec{\rho} \\
+ \; & 2\tfrac{(\mathbf{M}-m_5)(m_2k_{14}-m_1k_{24})+m_4(m_2k_{15}-m_1k_{25})}{(m_1+m_2)(\mathbf{M}-m_5)} \vec{r}.\vec{\sigma} \\
+ \; & 2\tfrac{m_2k_{15}-m_1k_{25}}{m_1+m_2} \vec{r}.\vec{\delta} \\
+ \; & 2\tfrac{(\mathbf{M}-m_5)(m_3(k_{14}+k_{24})-k_{34}(m_1+m_2))+m_4(m_3(k_{15}+k_{25})-k_{35}(m_1+m_2))}{(m_1+m_2+m_3)(\mathbf{M}-m_5)} \vec{\rho}.\vec{\sigma} \\
+ \; & 2\tfrac{m_3(k_{15}+k_{25})-k_{35}(m_1+m_2)}{m_1+m_2+m_3} \vec{\rho}.\vec{\delta} \\
+ \; & 2\tfrac{(k_{15}+k_{25}+k_{35})m_4-k_{45}(m_1+m_2+m_3)}{\mathbf{M}-m_5} \vec{\sigma}.\vec{\delta}
\end{aligned} \tag{6.25}
$$

qui a une forme quadratique décrivant ainsi un système de quatre oscillateurs harmoniques couplés. Du fait, le spectre d'énergie ne peut être déduit directement. Il faut donc chercher à découpler cet hamiltonien par des changements de variables.

Pour ne pas affecter le terme cinétique qui est déjà découplé, nous allons d'abord procéder par une transformation d'échelle

$$\vec{r} \to \vec{r}^{\,\prime}, \qquad \vec{\rho} \to \vec{\rho}^{\,\prime}, \qquad \vec{\sigma} \to \vec{\sigma}^{\,\prime} \quad \text{et} \quad \vec{\delta} \to \vec{\delta}^{\,\prime}$$

de telle sorte à ramener les termes en $\vec{p}_r^2$, ${\vec{p}_\rho}^2$, $\vec{p}_\sigma^2$ et $\vec{p}_\delta^2$ à des facteurs multiplicatifs égaux (égaux à l'unité par exemple) :

$$\frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + \frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma} + \frac{\vec{p}_\delta^2}{2\mu_\delta} \to \vec{p}_{r'}^2 + \vec{p}_{\rho'}^2 + \vec{p}_{\sigma'}^2 + \vec{p}_{\delta'}^2$$

Pour ce faire, on considère la transformation d'échelle suivante :

$$\frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} \to \vec{p}_{r'}^2 \ , \qquad \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} \to \vec{p}_{\rho'}^2 \ , \qquad \frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma} \to \vec{p}_{\sigma'}^2 \ , \qquad \frac{\vec{p}_\delta^2}{2\mu_\delta} \to \vec{p}_{\delta'}^2 \ . \tag{6.26}$$

c'est-à-dire

$$\vec{p}_{r'} = \frac{\vec{p}_r}{\sqrt{2\mu_r}} \ , \qquad \vec{p}_{\rho'} = \frac{\vec{p}_\rho}{\sqrt{2\mu_\rho}} \ , \qquad \vec{p}_{\sigma'} = \frac{\vec{p}_\sigma}{\sqrt{2\mu_\sigma}} \ , \qquad \vec{p}_{\delta'} = \frac{\vec{p}_\delta}{\sqrt{2\mu_\delta}}. \tag{6.27}$$

Pour que $\vec{r}'$ et $\vec{p}_{r'}$ soient des moments conjugués l'un de l'autre il faut que $\vec{r}'$ se transforme inversement (voir section 1.2)

$$\vec{r} \to \vec{r}' = \vec{r}\sqrt{2\mu_r} \ , \qquad \vec{\rho} \to \vec{\rho}' = \vec{\rho}\sqrt{2\mu_\rho} \ , \qquad \vec{\sigma} \to \vec{\sigma}' = \vec{\sigma}\sqrt{2\mu_\sigma} \ , \qquad \vec{\delta} \to \vec{\delta}' = \vec{\delta}\sqrt{2\mu_\delta}. \tag{6.28}$$

Ou encore

$$\begin{aligned} \vec{r} &= \sqrt{\tfrac{m_1+m_2}{2m_1m_2}}\vec{r}' \ , \\ \vec{\rho} &= \sqrt{\tfrac{m_1+m_2+m_3}{2m_3(m_1+m_2)}}\vec{\rho}' \ , \\ \vec{\sigma} &= \sqrt{\tfrac{m_1+m_2+m_3+m_4}{2m_4(m_1+m_2+m_3)}}\vec{\sigma}' \ , \\ \vec{\delta} &= \sqrt{\tfrac{m_1+m_2+m_3+m_4+m_5}{2m_5(m_1+m_2+m_3+m_4)}}\vec{\delta}' \ . \end{aligned} \tag{6.29}$$

En termes de ces nouvelles variables, l'hamiltonien relatif s'écrit :

$$\hat{H}_r^{(5)} = \vec{p}_r^2 + \vec{p}_\rho^2 + \vec{p}_\sigma^2 + \vec{p}_\delta^2 + V^{(5)}\left(\vec{r}', \vec{\rho}', \vec{\sigma}', \vec{\delta}'\right)$$

avec

$$
\begin{aligned}
V^{(5)} \quad = \quad & \frac{k_{12}(m_1+m_2)^2+m_1^2(k_{23}+k_{24}+k_{25})+m_2^2(k_{13}+k_{14}+k_{15})}{2m_1m_2(m_1+m_2)}r'^2 \\
+ \quad & \frac{(k_{13}+k_{23})(m_1+m_2+m_3)^2+(m_1+m_2)^2(k_{34}+k_{35})+m_3^2(k_{14}+k_{15}+k_{24}+k_{25})}{2m_3(m_1+m_2)(m_1+m_2+m_3)}\rho'^2 \\
+ \quad & \frac{(k_{14}+k_{24}+k_{34})(\mathbf{M}-m_5)^2+k_{45}(m_1+m_2+m_3)^2+m_4^2(k_{15}+k_{25}+k_{35})}{2m_4(m_1+m_2+m_3)(\mathbf{M}-m_5)}\sigma'^2 \\
+ \quad & \frac{\mathbf{M}(k_{15}+k_{25}+k_{35}+k_{45})}{2m_5(\mathbf{M}-m_5)}\delta'^2 \\
+ \quad & \frac{(m_1+m_2+m_3)(m_2k_{13}-m_1k_{23})+m_2m_3(k_{14}+k_{15})-m_1m_3(k_{24}+k_{25})}{(m_1+m_2)(m_1+m_2+m_3)}\sqrt{\frac{m_1+m_2+m_3}{m_1m_2m_3}}\vec{r}'\vec{\rho}' \\
+ \quad & \frac{(\mathbf{M}-m_5)(m_2k_{14}-m_1k_{24})+m_4(m_2k_{15}-m_1k_{25})}{(m_1+m_2)(\mathbf{M}-m_5)}\sqrt{\frac{(m_1+m_2)(\mathbf{M}-m_5)}{m_1m_2m_4(m_1+m_2+m_3)}}\vec{r}'\vec{\sigma}' \\
+ \quad & \frac{m_2k_{15}-m_1k_{25}}{m_1+m_2}\sqrt{\frac{(m_1+m_2)\mathbf{M}}{m_1m_2m_5(\mathbf{M}-m_5)}}\vec{r}'\vec{\delta}' \\
+ \quad & \frac{(\mathbf{M}-m_5)(m_3(k_{14}+k_{24})-k_{34}(m_1+m_2))+m_4(m_3(k_{15}+k_{25})-k_{35}(m_1+m_2))}{(m_1+m_2+m_3)(\mathbf{M}-m_5)}\sqrt{\frac{\mathbf{M}-m_5}{m_3m_4(m_1+m_2)}}\vec{\rho}'\vec{\sigma}' \\
+ \quad & \frac{m_3(k_{15}+k_{25})-k_{35}(m_1+m_2)}{m_1+m_2+m_3}\sqrt{\frac{(m_1+m_2+m_3)\mathbf{M}}{m_3m_5(m_1+m_2)(\mathbf{M}-m_5)}}\vec{\rho}'\vec{\delta}' \\
+ \quad & \frac{(k_{15}+k_{25}+k_{35})m_4-k_{45}(m_1+m_2+m_3)}{\mathbf{M}-m_5}\sqrt{\frac{\mathbf{M}}{m_4m_5(m_1+m_2+m_3)}}\vec{\sigma}'\vec{\delta}' \quad .
\end{aligned}
$$

Sachant qu'une transformation orthogonale

$$
\vec{r}' \to \tilde{\vec{r}}, \qquad \vec{\rho}' \to \tilde{\vec{\rho}}, \qquad \vec{\sigma}' \to \tilde{\vec{\sigma}} \quad \text{et} \quad \vec{\delta}' \to \tilde{\vec{\delta}}
$$

garde inchangé la norme ($\vec{p}_r^2 + \vec{p}_\rho^2 + \vec{p}_\sigma^2 + \vec{p}_\delta^2$ dans notre cas), il est plus commode de se servir de telle transformation pour éliminer les termes croisés et ramener le terme de l'énergie potentielle en une forme diagonale. $V^{(5)}\left(\vec{r}', \vec{\rho}', \vec{\sigma}', \vec{\delta}'\right)$ s'écrit sous forme matricielle comme :

$$
V^{(5)}\left(\vec{r}', \vec{\rho}', \vec{\sigma}', \vec{\delta}'\right) = \begin{pmatrix} \vec{r}' & \vec{\rho}' & \vec{\sigma}' & \vec{\delta}' \end{pmatrix} A^{(5)} \begin{pmatrix} \vec{r}' \\ \vec{\rho}' \\ \vec{\sigma}' \\ \vec{\delta}' \end{pmatrix} \tag{6.30}
$$

où A est une matrice (4×4).

Il est clair qu'il existe une multitude de choix de la matrice $A^{(5)}$ vérifiant l'égalité (6.30). Mais en tenant compte du fait que la diagonalisation d'une matrice symétrique se fait via une transformation orthogonale, il est plus judicieux de choisir une matrice $A^{(5)}$ symétrique

$$A^{(5)}= \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{34} \\ A_{41} & A_{42} & A_{43} & A_{44} \end{pmatrix}.$$

avec

$$\begin{aligned}
A_{11} &= \frac{k_{12}(m_1+m_2)^2+m_1^2(k_{23}+k_{24}+k_{25})+m_2^2(k_{13}+k_{14}+k_{15})}{2m_1m_2(m_1+m_2)} \\
A_{22} &= \frac{(k_{13}+k_{23})(m_1+m_2+m_3)^2+(m_1+m_2)^2(k_{34}+k_{35})+m_3^2(k_{14}+k_{15}+k_{24}+k_{25})}{2m_3(m_1+m_2)(m_1+m_2+m_3)} \\
A_{33} &= \frac{(k_{14}+k_{24}+k_{34})(\mathbf{M}-m_5)^2+k_{45}(m_1+m_2+m_3)^2+m_4^2(k_{15}+k_{25}+k_{35})}{2m_4(m_1+m_2+m_3)(\mathbf{M}-m_5)} \\
A_{44} &= \frac{(k_{15}+k_{25}+k_{35}+k_{45})\mathbf{M}}{2m_5(\mathbf{M}-m_5)}
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
A_{12} &= \frac{(m_1+m_2+m_3)(m_2k_{13}-m_1k_{23})+m_2m_3(k_{14}+k_{15})-m_1m_3(k_{24}+k_{25})}{2(m_1+m_2)(m_1+m_2+m_3)}\sqrt{\frac{m_1+m_2+m_3}{m_1m_2m_3}} \\
A_{13} &= \frac{(\mathbf{M}-m_5)(m_2k_{14}-m_1k_{24})+m_4(m_2k_{15}-m_1k_{25})}{2(m_1+m_2)(\mathbf{M}-m_5)}\sqrt{\frac{(m_1+m_2)(\mathbf{M}-m_5)}{m_1m_2m_4(m_1+m_2+m_3)}} \\
A_{14} &= \frac{m_2k_{15}-m_1k_{25}}{2(m_1+m_2)}\sqrt{\frac{(m_1+m_2)\mathbf{M}}{m_1m_2m_5(\mathbf{M}-m_5)}} \\
A_{23} &= \frac{(\mathbf{M}-m_5)(m_3(k_{14}+k_{24})-k_{34}(m_1+m_2))+m_4(m_3(k_{15}+k_{25})-k_{35}(m_1+m_2))}{2(m_1+m_2+m_3)(\mathbf{M}-m_5)}\sqrt{\frac{\mathbf{M}-m_5}{m_3m_4(m_1+m_2)}} \\
A_{24} &= \frac{m_3(k_{15}+k_{25})-k_{35}(m_1+m_2)}{2(m_1+m_2+m_3)}\sqrt{\frac{(m_1+m_2+m_3)\mathbf{M}}{m_3m_5(m_1+m_2)(\mathbf{M}-m_5)}} \\
A_{34} &= \frac{(k_{15}+k_{25}+k_{35})m_4-k_{45}(m_1+m_2+m_3)}{2(\mathbf{M}-m_5)}\sqrt{\frac{\mathbf{M}}{m_4m_5(m_1+m_2+m_3)}}.
\end{aligned}$$

Après diagonalisation de $A^{(5)}$ on obtient une matrice $\tilde{A}^{(5)}$ diagonale

$$\tilde{A}^{(5)} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix},$$

dont les éléments diagonaux λ_1, λ_2, λ_3 et λ_4 sont les valeurs propres de $A^{(5)}$.

L'hamiltonien relatif se réduit donc en une somme de quatre hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques découplés isotropes à trois dimensions

$$\hat{H}_r^{(5)} = p_{\tilde{r}}^2 + \lambda_1 \tilde{r}^2 + p_{\tilde{\rho}}^2 + \lambda_2 \tilde{\rho}^2 + p_{\tilde{\sigma}}^2 + \lambda_3 \tilde{\sigma}^2 + p_{\tilde{\delta}}^2 + \lambda_4 \tilde{\delta}^2.$$

Le spectre d'énergie s'obtient immédiatement

$$E_{n_1,n_2,n_3,n_4}^{(5)} = \sqrt{\lambda_1}\,(2n_1+3) + \sqrt{\lambda_2}\,(2n_2+3) + \sqrt{\lambda_3}\,(2n_3+3) + \sqrt{\lambda_4}\,(2n_4+3)$$

et la fonction d'onde radiale associée est le produit des quatre fonctions d'onde radiales

$$\begin{aligned} R_{n_1,l_1,\ldots,n_4,l_4}^{(5)}\left(\tilde{r},\tilde{\rho},\tilde{\sigma},\tilde{\delta}\right) = \; & C\tilde{r}^{l_1} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_1}\tilde{r}^2} L_{(n_1-l_1)/2}^{l_1+\frac{1}{2}}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{\lambda_1}\tilde{r}^2\right) \\ & \times \tilde{\rho}^{l_2} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_2}\tilde{\rho}^2} L_{(n_2-l_2)/2}^{l_2+\frac{1}{2}}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{\lambda_2}\tilde{\rho}^2\right) \\ & \times \tilde{\sigma}^{l_3} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_3}\tilde{\sigma}^2} L_{(n_3-l_3)/2}^{l_3+\frac{1}{2}}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{\lambda_3}\tilde{\sigma}^2\right) \\ & \times \tilde{\delta}^{l_4} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_4}\tilde{\delta}^2} L_{(n_4-l_4)/2}^{l_4+\frac{1}{2}}\left(\tfrac{1}{2}\sqrt{\lambda_4}\tilde{\delta}^2\right) \end{aligned}$$

avec n_1, n_2, n_3 et n_4, l_1, l_2, l_3 et l_4 des entiers positifs ou nuls.

L'énergie du niveau fondamental du système à cinq corps avec toutes masses différentes s'obtient donc par :

$$E_0^{(5)} = 3\left(\sqrt{\lambda_1} + \sqrt{\lambda_2} + \sqrt{\lambda_3} + \sqrt{\lambda_4}\right)$$

et la fonction d'onde est le produit des fonctions d'onde des deux oscillateurs découplés

$$R_{0,0,0,0,0,0,0,0}^{(5)}\left(\widetilde{\vec{r}},\widetilde{\vec{\rho}},\widetilde{\vec{\sigma}},\widetilde{\vec{\delta}}\right) = Ce^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_1}\tilde{r}^2} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_2}\tilde{\rho}^2} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_3}\tilde{\sigma}^2} e^{-\frac{1}{2}\sqrt{\lambda_4}\tilde{\delta}^2}$$

Le problème réside donc dans la détermination des valeurs propres.

Remarque

Considérons un système composé de $N+1$ particules plongées dans un potentiel $V^{(N+1)}$. Ce système peut être vu comme un système moins compliqué composé de N particules avec en plus une particule supplémentaire, la $(N+1)\,\grave{e}me$ par exemple.

On peut montrer qu'il est facile de déduire la solution du système moins compliqué à partir de celle obtenue pour le problème plus compliqué. Il suffit d'éliminer la contribution de la particule supplémentaire à l'hamiltonien, c'est-à-dire, il faut l'isoler des autres particules. Pour éliminer la contribution de cette particule à l'énergie cinétique il suffit faire tendre sa masse à l'infini ($m_{N+1} \to \infty$) et pour éliminer sa contribution à l'énergie potentielle il faut neutraliser les interactions de cette particules avec les autres particules. Cette neutralisation peut être obtenue en égalisant à zéro toutes les constantes de couplage impliquant cette particule. De façon explicite on doit poser : $(k_{i\ ,N+1} = 0\ ,\ i = 1, 2, ..., N)$.

A titre d'exemple, en remplaçant m_5 par $+\infty$ et $k_{15}, k_{25}, k_{35}, k_{45}$ par 0 dans la solution du problème à cinq corps, on retrouve la solution du problème à 4 corps.

Nous fournissons dans le tableau suivant des résultats numériques pour le spectre d'énergie du système à cinq corps. Nous restreignons nos calculs au niveau fondamental et au premier état excité. Certaines configurations de masse ont été considérées et toutes les constantes de couplage sont choisies pour être égales $k_{ij} = 1$.

$m_1, ..., m_5$	$E_0^{(5)}$	$E_1^{(5)}$	$m_1, ..., m_5$	$E_0^{(5)}$	$E_1^{(5)}$
$1, 1, 1, 1, 1$	18.9737	22.1359	$1, 1, 2, 3, 4$	14.4942	16.1835
$1, 1, 1, 1, 2$	17.9044	20.3540	$1, 2, 2, 3, 3$	13.6093	15.4350
$1, 1, 1, 2, 2$	16.8096	19.0456	$1, 2, 2, 3, 4$	13.3362	15.0181
$1, 1, 1, 2, 3$	16.3598	18.3598	$1, 2, 3, 4, 4$	12.5646	14.1457
$1, 1, 2, 2, 3$	15.2315	17.1879	$1, 2, 3, 4, 5$	12.3797	13.8657

Table 6.1 – Énergies des états fondamentaux et excités pour l'oscillateur harmonique à cinq corps.

Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons développé une méthode analytique pour résoudre exactement le problème quantique de quelques corps, gouverné par des forces harmoniques à deux corps dans un espace tridimensionnel. La méthode est basée uniquement sur des transformations de coordonnées. Notre point de départ était l'extraction de l'énergie cinétique du centre de masse de l'énergie totale. Cela peut être fait tout au long de l'introduction de coordonnées Jacobi. Pour un système à N corps, $N-1$ coordonnées Jacobi sont nécessaires. Un choix approprié des coordonnées de Jacobi donne pour l'énergie cinétique une forme quadratique diagonale en fonction de ces coordonnées, tandis que l'énergie potentielle prend aussi une forme quadratique, mais en général non diagonale. L'hamiltonien est alors exprimé comme une somme de $N-1$ oscillateurs harmoniques couplés. Le découplage de ces oscillateurs est indispensable pour pouvoir déterminer le spectre d'énergie est les fonctions d'onde. Nous avons montré que le problème de la diagonalisation du hamiltonien d'un système à N-corps se réduit à une diagonalisation d'une matrice symétrique d'ordre $N-1$ en utilisant une transformation orthogonale. Les valeurs propres de l'opérateur hamiltonien ont été obtenues exactement sans aucune approximation. Les cas particuliers à trois, à quatre et à cinq corps ont été traités en détail et les matrices à diagonalisées pour chaque cas ont été données explicitement en termes de masses des particules et des constantes de couplage.

Pour l'énergie de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique à trois corps, nous avons obtenu une expression très compacte, l'équation (4.40), où nous avons utilisé une formule clé, équation (4.39), qui donne la somme des racines carrées des valeurs propres d'une matrice symétrique 2×2 sans dériver explicitement les expressions des valeurs propres elles-mêmes. Pour l'oscillateur harmonique à quatre et cinq corps, nous espérons pouvoir dériver une formule similaire pour les matrices symétriques d'ordre trois et quatre respectivement.

Finalement, nous espérons que ce mémoire sera le début d'une autre grande recherche si Dieu le veut.

Annexe A

Polynôme d'Hermite

L'équation différentielle d'Hermite est donnée par :

$$y^{''} + -2xy^{'} + 2ny = 0 \qquad , y = H_n\left(x\right)$$

où n= 0, 1, 2, 3, ...

Les solutions de cette équation sont les polynômes d'Hermite, exprimés par la formule de Rodriguès :

$$H_n\left(x\right) = \left(-1\right)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x^2}\right)$$

Les premiers polynômes de Laguerre sont les suivants :

$$H_0\left(x\right) = 1 \quad H_1\left(x\right) = 2x \quad H_2\left(x\right) = 4x^2 - 2$$

Il faut remarquer que $H_n\left(x\right)$ est un polynôme de degré n.

Propriétés des polynômes d'Hermite

Les propriétés des polynômes d'hermite sont :

– Fonction génératrice

$$e^{-t^2+2t.x} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n\left(x\right)\frac{t^n}{n!}.$$

– Formules de récurrence

$$\begin{aligned} H_{n+1}(x) &= (2x) H_n(x) - 2n H_{n-1}(x) \\ H_n'(x) &= 2n H_{n-1}(x) \end{aligned}$$

– Orthogonalité

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = 0 \qquad n \neq m.$$

– Relation de parité

$$H_n(x) = (-1)^n H_n(-x).$$

Annexe B

Polynôme de Laguerre

L'équation différentielle de Laguerre est donnée par :

$$xy^{''} + (1-x)\,y^{'} + ny = 0 \qquad , y = L_n\,(x)$$

où n= 0, 1, 2, 3, ...

Les solutions de cette équation sont les polynômes de Laguerre, exprimés par la formule de Rodriguès :

$$L_n\,(x) = \frac{1}{n!}e^x \frac{d^n}{dx^n}\left(x^n e^{-x}\right)$$

Les premiers polynômes de Laguerre sont les suivants :

$$L_0\,(x) = 1, \quad L_1\,(x) = 1 - x, \quad L_2\,(x) = \tfrac{1}{2}x^2 - 2x + 1$$

Il faut remarquer que $L_n\,(x)$ est un polynôme de degré n.

Propriétés des polynômes de Laguerre

Les propriétés des polynômes de Laguerre sont :

– Fonction génératrice

$$\frac{e^{-\frac{xh}{1-h}}}{1-h} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n\,(x)\,h^n.$$

– Formules de récurrence

$$\begin{aligned} L'_{n+1}(x) - L'_n(x) + L_n(x) &= 0 \\ (n+1) L_{n+1}(x) - (2n+1-x) L_n(x) + nL_{n-1}(x) &= 0 \\ xL'_n(x) - nL_n(x) + nL_{n-1}(x) &= 0 \end{aligned}$$

– Orthogonalité

$$\int_0^\infty e^{-x} L_n(x) L_k(x)\, dx = \delta_{nk} = \begin{cases} 1 \text{ si} & n = k \\ 0 \text{ si} & n \neq k \end{cases}$$

Polynômes associés de Laguerre

Ce sont les polynômes définis par

$$L_n^k(x) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} L_{n+k}(x)$$

et satisfaisant l'équation

$$xy'' + (k+1-x) y' + ny = 0 \qquad , y = L_n^k(x) \ .$$

Les polynômes $L_n^k(x)$ peuvent également être trouvés à partir de la formule de Rodrigues

$$L_n^k(x) = \frac{x^{-k} e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \left(x^{n+k} e^{-x} \right).$$

Les polynômes associés de Laguerre sont orthogonaux :

$$\int_0^\infty x^k e^{-x} L_n^k(x) L_m^k(x)\, dx = \begin{cases} \frac{(n+k)!}{n!} \text{ si} & m = n \\ 0 \qquad \text{si} & m \neq n \end{cases} .$$

Bibliographie

[1] L. M. Delves, *Nucl. Phys.* 9, 391 (1959) ; 20, 275 (1960).

[2] F. T. Smith, *Phys. Rev.* 120, 1058 (1960) ; J. Math. Phys. 3, 735 (1962).

[3] J.-M. Richard, *Phys. Rep.* 212 (1992) 1.

[4] S. Fleck et J.-M. Richard, *Few-Body Systems* 19 (1995) 19.

[5] Encyclopædia Britannica, Phys. (1999).

[6] G. Lochak, S. Diner et D. Fargue, *L'objet quantique*, (Flammarion , 1989).

[7] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloe, *Mécanique quantique*, (Hermann, Paris,1977).

[8] J.- M. Richard, Laboratoire de Physique Subatomique et Cosmologie, Université Joseph Fourier, (2009).

[9] D. Gratias, M.Fayard, Techniques de l'ingénieur, Mécanique quantique.

[10] G. B. Arfken, H. J. Weber, *Mathematical Methods for physicists* (Elsevier academic press, 6ème édition).

[11] M. L. Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences* (Wiley, New York, 1983).

[12] J. Hladik, M. Chrysos, P-E Hladik et L. U Ancarani, *Mécanique quantique : Atomes et noyaux, Applications technologiques* (Dunod, Paris, 2006).

[13] J. Hladik, M. Chrysos, *Introduction à la mécanique quantique : Cours et exercices corrigés,* (Dunod, Paris, 2000).

[14] W. Thirring, *A Course in Mathematical Physics*, Vol. 3 (Springer Verlag, 1981).

[15] M. Saghiri, *Résolution exacte d'un système quantique non relativiste à trois et à quatre corps pour des potentils harmoniques*, Master physique des matériaux (univ. Khenchela, 2013).

Abstract

This work deals with few body systems governed by a non relativistic kinematics with interactions with two bodies invariant by translation or rotation. For a N-body system, we present N -1 Jacobi coordinates. We show that eigen values and the eigen states of the Hamiltonian operator can be analytically obtained by the diagonalization of an N - 1 symmetrical matrix. Cases with three bodies, four and five are treated in detail. In the three-body case, we obtain a very compact formula for fundamental energy.

ملخـــــــــص

هذا العمل يسجل ضمن إطار الأنظمة ذات عدد قليل من الأجسام التي تحكمها الكينماتيكا غير النسبية مع التفاعلات بين جسمين غير متغيرين بالانسحاب أو الدوران.

من اجل نظام يحتوي على ن جسم, نحتاج إلى (ن- 1) من إحداثيات جاكوبي ونبين أن القيم البحتة و الحالات البحتة للهاميلتونيان يمكن الحصول عليها تحليليا من خلال أقطرة مصفوفة متناظرة, الحالات ذات ثلاث أجسام, أربع و خمس معالجة بالتفصيل

في الحالة ذات ثلاث أجسام, نحصل على صيغة متراصة للطاقة الأساسية.

Résumé

Le travail présenté dans ce mémoire 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 ou rotation. Pour un système à N-corps, nous présentons N -1 coordonnées de Jacobi. Nous montrons que les valeurs propres et les états propres de l'opérateur hamiltonien peuvent être obtenues analytiquement par la diagonalisation d'une matrice symétrique d'ordre N - 1. Les cas avec trois, quatre et cinq corps sont traités en détail. Dans le cas à trois corps, nous obtenons une formule très compacte pour l'énergie fondamentale.