

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE «Abbés LAGHROUR» DE KHENCHELA

FACULTE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE

Département Sciences de la matière



N° de série :.....

Mémoire de fin d'études

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

Spécialité : Physique

Option : Physique des Matériaux

**Bornes inférieures pour l'énergie de l'état
fondamental d'un système quantique non
relativiste à quatre corps**

Réalisé par :

- BOUDJELLAL Fadwa
- BENKHELIFA Dounia

Dirigé par : Dr. Boudjemaa Kheir Eddine

Membres de jury :

Président : Dr. BAAOUAGUE Khaled

Examineur : Dr. HEMAME Zoubir

Année universitaire : 2020/2021

Remerciements

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

Nous remercions 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 aidés à finir ce travail.

Nous remercions également tous les membres du jury (Dr. BAAOUAGUE KHALED , Dr. HEMAME ZOUBIR)

Bien sûr, nous n'oublions pas à remercier tous nos collègues de la promotion 2020/2021 pour leurs encouragement, toute la famille de département de SM, et tous ceux qui nous ont aidé de près ou de loin durant la réalisation de ce travail.

DEDICACE

Dieu soit loué, qui nous a permis d'apprécier cette étape de notre cheminement académique avec ce mémoire, fruit d'efforts et de réussites, par sa grâce, est dédié à mes honorables parents, que Dieu les préserve et les perpétue comme une lumière pour mon chemin.

A tous ma chère famille qui m'a soutenu et qui reste mes chers frères et sœurs.

FADWA

DEDICACE

Au propriétaire d'une biographie parfumée et d'une pensée éclairée, à qui l'on attribue l'obtention d'une éducation supérieure, mon père bien –aimé. Que Dieu prolonge sa vie A celle qui m'a mis sur le chemin de la vie, m'a calmé, et m'a nourri jusqu'à ce que je devienne vieux, ma chère maman.

Dieu vous bénisse

A la chérie de mon cœur et à la douceur de mes yeux, ma chère fille, mayacine
À l'âme pure de mon mari, qui ont eu un grand impact sur de nombreux obstacles et difficultés à mes amis et à tous ceux qui m'ont soutenu et m'ont aidé avec tout ce qu'ils avaient

Je vous présente cette recherche, et j'espère qu'elle vous apportera satisfaction.

DOUNIA

Table des matières

Introduction	7
1 L'équation de Schrödinger	9
1.1 L'équation de Schrödinger	9
1.2 Relations de commutation canoniques	11
1.3 Potentiels en loi de puissance	12
1.4 L'oscillateur harmonique à une particule	14
1.4.1 Approximation harmonique	15
1.4.2 L'oscillateur harmonique à une dimension	15
1.4.3 L'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions	21
2 Résolution numérique de l'équation de Schrödinger	24
2.0.4 Application	27
3 L'oscillateur harmonique à deux corps	29
3.1 Problème de deux particules en interaction	29
3.2 Cas d'une interaction harmonique	32
3.3 Résultats numériques	33
4 L'oscillateur harmonique à quatre corps	34
4.1 Coordonnées de Jacobi	35
4.2 Système ayant toutes les masses égales	36
4.3 Système ayant trois masses différentes (m, m, \mathbf{m}, M)	39

5	Bornes inférieures pour des hamiltoniens à quatre corps	42
5.1	Le principe variationnel de Ritz	42
5.2	Borne inférieure naïve	44
5.3	Borne inférieure améliorée	50
5.3.1	Configuration (m, m, m, m)	54
5.3.2	Configuration (m, m, M, M)	54
5.4	Borne inférieure optimisée	55
5.4.1	Configuration (m, m, m, m)	60
5.4.2	Configuration (m, m, m, M)	62
5.4.3	Configuration (m, m, M, M)	64
5.4.4	Configuration (m, m, \mathbf{m}, M)	65
5.5	Comparaison numérique des différentes bornes inférieures	68
	Conclusion	74
	Annexe A	76
	Annexe B	78

Table des Figures

Figure 1 : Programme sur Mathcad de la méthode de Multhopp pour la résolution numérique de l'équation de Schrödinger radiale réduite	27
Figure 2 : Système à deux corps : coordonnée relative $\vec{r} = \vec{r}_{12}$ et coordonnée du centre de masse \vec{R}	30
Figure 3 : Coordonnées de Jacobi pour un système à quatre corps.	37

Liste des Tableaux

Tableau 1 : Energie du niveau fondamental d'un système à une particule de masse $m = 1$, plongé dans un potentiel de type : $V(r) = \text{sign}(\beta)r^\beta$	28
Tableau 2 : Energie du niveau fondamental d'un système à deux particule de masses $m_1= 1$ et m_2 variable interagissant via un potentiel de type : $V(r) = \text{sign}(\beta)r^\beta$	33
Tableau 3 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel harmonique ($\beta=2$); $m_1=m_2=m_3=1$ et m_4 variable.	69
Tableau 4 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel harmonique ($\beta=2$); $m_1=m_2=1$ et $m_3=m_4$ variable.	69
Tableau 5 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel harmonique ($\beta=2$); $m_1=m_2=1$, $m_3=2$ et m_4 variable.	69
Tableau 6 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel linéaire ($\beta=1$); $m_1=m_2=m_3=1$ et m_4 variable.	70
Tableau 7 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel linéaire ($\beta=1$); $m_1=m_2=1$ et $m_3=m_4$ variable.	70
Tableau 8 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel linéaire ($\beta=1$); $m_1=m_2=1$, $m_3=2$ et m_4 variable.	70
Tableau 9 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel de Martin ($\beta=0.1$); $m_1=m_2=m_3=1$ et m_4 variable.	71
Tableau 10 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel de Martin ($\beta=0.1$); $m_1=m_2=1$ et $m_3=m_4$ variable.	71
Tableau 11 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel de Martin ($\beta=0.1$); $m_1=m_2=1$, $m_3=2$ et m_4 variable.	71
Tableau 12 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel Coulombien ($\beta= -1$); $m_1=m_2=m_3=1$ et m_4 variable.	72
Tableau 13 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel Coulombien ($\beta= -1$); $m_1=m_2=1$ et $m_3=m_4$ variable.	72

Tableau 14 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel
Coulombien ($\beta = -1$); $m_1 = m_2 = 1$, $m_3 = 2$ et m_4 variable. 72

Liste des Symboles

\hat{H}	Hamiltonien
\hat{H}_r	Hamiltonien relatif
\hat{T}	Energie cinétique
V	Energie potentielle
E	Energie totale
ψ	Fonction d'onde
\vec{r}_i	Vecteur position de la i-ème particule
\vec{p}_i	Quantité de mouvement de la i-ème particule
δ_{ij}	Symbole de Kronecker
\vec{R}	Vecteur de centre de masse
\vec{r}	Coordonnée relative
$\vec{\rho}, \vec{\sigma}, \vec{\delta}, \dots$	Coordonnées de Jacobi
m_i	Masse de la i-ème particule
\mathbf{M}	Masse totale
μ	La masse réduite
k_{ij}	Constante de couplage
\hbar	Constant de plank réduite
E_0	Energie du fondamental d'un système à 1 corps
$E_0^{(N)}$	Energie du fondamental d'un système à N corps

Introduction

L'étude des propriétés des systèmes quantiques à N corps en interaction est l'une des branches les plus actives de la physique théorique actuelle. La dynamique de tels systèmes est gouvernée par l'équation de Schrödinger à N corps [1]. En raison du grand nombre de degrés de liberté mis en jeu et de la nature des interactions entre particules, les équations du mouvement de ces systèmes ne sont pas exactement solubles dans la plupart des cas. Même le problème à un corps pour un potentiel invariant par rotation ou le problème à deux corps en interaction invariante par translation et par rotation, ne sont solubles que pour des formes très particulières du potentiel d'interaction. La complexité du problème croît exponentiellement avec le nombre de particules. Les problèmes à un et à deux corps sont dits triviaux, tandis que celui à trois corps est considéré comme le problème non trivial le plus simple et qui n'admet pas de solutions exactes même en mécanique classique. Dans tous ces cas, on est obligé à recourir à des méthodes de résolution approximatives. Parmi ces méthodes, citons le développement sur les harmoniques hypersphériques, les équations de Faddeev [2], dérivation de bornes supérieures par le développement systématique sur des Gaussiennes corrélées [3], dérivation de bornes inférieures [4][5],

L'objectif principale du travail présenté dans ce mémoire est d'appliquer le principe variationnel [6] pour dériver de bornes inférieures pour l'énergie de l'état fondamental de systèmes à quatre corps [7] pour certaines configurations de masses et qui consiste en une extension d'une étude antérieure similaire menée pour le cas à trois corps [8].

Ce document est organisé de la manière suivante :

Dans premier chapitre nous allons rappeler l'équation de Schrödinger à une particule ainsi que les relations de commutation canoniques. Une attention particulière a été portée aux in-

teractions en loi de puissance dont l'interaction harmonique et l'interaction coulombienne sont des cas particuliers.

Le chapitre 2 est consacré à la résolution numérique de l'équation de Schrödinger à deux corps. Parmi les différentes méthodes disponibles dans la littérature nous avons choisi et appliqué la méthode de Multhopp.

Dans le chapitre 3 on s'intéresse aux systèmes à N corps en interaction harmonique, système que nous appelons dans le reste du document par l'oscillateur harmonique à N corps. Nous commençons par rappeler le résultat exacts bien connu du problème de l'oscillateur harmonique à deux corps puis nous considérons l'oscillateur harmonique à 4 corps dont on cherche à déterminer le spectre d'énergie et ce pour quelques configurations particulières de masses.

Le chapitre 4 est dévolu aux bornes inférieures. On cherche à dériver des bornes inférieures pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à 4 corps. Nous allons considérer trois bornes inférieures, à savoir : la borne naïve, la borne améliorée et la borne optimisée. Une comparaison numérique de ces bornes sera effectuée à la fin de ce manuscrit.

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 [9]. 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 :

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

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 :

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

ou encore

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

L'opérateur hamiltonien peut être obtenu à partir d'hamiltonien de la mécanique classique par le principe de correspondance [10]; 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 pour l'énergie E et les composantes p_x, p_y, p_z de \vec{p} .

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

L'équation de Schrödinger devient alors :

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

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 :

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

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

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

$\Psi(\vec{r}, t)$ 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 :

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

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 [11] :

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

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 $d\varphi$ de trouver la particule à un moment donné t dans un volume élémentaire $d^3\vec{r}$ est.

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

$|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ s'interprète 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 :

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

où

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

est le symbole de Kronecker.

Nous avons en particulier

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

Ces relations sont appelées Relations de Commutation Canoniques.

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 :

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

1.3 Potentiels en loi de puissance

Considérons un système d'une particule à 1 dimension plongée dans un puits de potentiel en loi de puissance

$$V(x) = \lambda x^\beta$$

c'est à dire décrit par un Hamiltonien H de la forme

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \lambda x^\beta, \quad (1.14)$$

où m , p_x , x désignent respectivement la masse, l'impulsion et la position de la particule. λ est une constante de couplage de même signe que l'exposant β du potentiel en loi de puissance.

L'une des propriétés intéressantes du potentiel en loi de puissance est que l'on peut déduire la solution d'un système quantique (particule de masse m' plongée dans un potentiel en loi de puissance $V(x) = \lambda x^\beta$) à partir des résultats obtenus pour un système identique avec une autre masse m et une autre constante de couplage et cela sans refaire la résolution analytique ou numérique du système avec les nouveaux paramètres.

Soit maintenant un deuxième système identique au précédent sauf que la masse est multipliée par un facteur positif α et la constante de couplage est multipliée par un autre facteur également

positif γ . Autrement dit, le deuxième système est décrit par l'Hamiltonien $H_{\alpha,\gamma}$ donné par

$$H_{\alpha,\gamma} = \frac{p_x^2}{2\alpha m} + \gamma \lambda x^\beta. \quad (1.15)$$

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

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (1.16)$$

et

$$H_{\alpha,\gamma} |\Psi_{\alpha,\gamma}\rangle = E_{\alpha,\gamma} |\Psi_{\alpha,\gamma}\rangle \quad (1.17)$$

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

Réécrivons $H_{\alpha,\gamma}$ en termes, de la nouvelle coordonnée x' définie par

$$x' = Cx, \quad (1.18)$$

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

$$p'_x = \frac{1}{C} p_x. \quad (1.19)$$

Nous avons

$$H_{\alpha,\gamma} = \frac{C^2 p_x'^2}{2\alpha m} + C^{-\beta} \gamma \lambda x'^\beta. \quad (1.20)$$

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

$$\frac{C^2}{\alpha} = d \quad (1.21)$$

et

$$C^{-\beta} \gamma = d. \quad (1.22)$$

En combinant les deux relations précédentes, on obtient

$$\frac{C^2}{\alpha} = C^{-\beta} \gamma \quad (1.23)$$

d'où

$$C^{2+\beta} = \alpha \gamma \quad (1.24)$$

et par conséquent

$$C = (\alpha \gamma)^{\frac{1}{2+\beta}}. \quad (1.25)$$

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

$$d = \alpha^{\frac{-\beta}{2+\beta}} \gamma^{\frac{2}{2+\beta}}. \quad (1.26)$$

Donc, dans les nouvelles coordonnées

$$H_{\alpha, \gamma} = \alpha^{\frac{-\beta}{2+\beta}} \gamma^{\frac{2}{2+\beta}} \left(\frac{p_x'^2}{2m} + \lambda x'^\beta \right). \quad (1.27)$$

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

$$E_{\alpha, \gamma} = \alpha^{\frac{-\beta}{2+\beta}} \gamma^{\frac{2}{2+\beta}} E. \quad (1.28)$$

Ou encore

$$E(m', \lambda') = E(\alpha m, \gamma \lambda) = \left(\frac{m'}{m} \right)^{\frac{-\beta}{2+\beta}} \left(\frac{\lambda'}{\lambda} \right)^{\frac{2}{2+\beta}} E(m, \lambda). \quad (1.29)$$

1.4 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 :

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2, \quad (1.30)$$

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 $x = 0$ [12]. 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.

1.4.1 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 :

$$V(x) = V(x_0) + \frac{k}{2}(x - x_0)^2 + C(x - x_0)^3 + \dots \quad (1.31)$$

Pour des petites oscillations autour de $x = x_0$ ($|x - x_0| \ll k/C$), 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 (1.30).

1.4.2 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 :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2, \quad (1.32)$$

où ω est la pulsation propre de l'oscillateur.

On introduit l'opérateur de création de quanta :

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x \quad (1.33)$$

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

$$a = (a^+)^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x. \quad (1.34)$$

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

$$\begin{aligned} \hat{N} &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar}\hat{p}_x^2 + \frac{i}{2\hbar}(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}) \\ &= \frac{1}{\omega\hbar} \left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \right) - \frac{1}{2}\mathbb{1} \end{aligned} \quad (1.35)$$

où on a utilisé la relation de commutation

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar\mathbb{1}. \quad (1.36)$$

L'hamiltonien (1.32) 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{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 $a |n\rangle$:

$$n = \|a |n\rangle\| \geq 0. \quad (1.37)$$

Les valeurs propres n sont donc positives ou nulles.

En faisant usage des expressions des opérateurs a (1.34) et a^+ (1.33) et de la relation de commutation canonique (1.36), le commutateur $[a, a^+]$ se réduit à :

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

Il en résulte les relations importantes :

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

et de façon analogue avec l'opérateur de création :

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

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 :

$$\hat{N}a |n\rangle = a \left(\hat{N} - \mathbb{1}\right) |n\rangle = a\hat{N} |n\rangle - a |n\rangle = an |n\rangle - a |n\rangle = (n - 1) a |n\rangle. \quad (1.38)$$

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 $(n - 1)$:

$$\hat{N} |n - 1\rangle = (n - 1) |n - 1\rangle. \quad (1.39)$$

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

$$\begin{aligned}\hat{N}a^2 |n\rangle &= \left(a\hat{N} - a\right) a |n\rangle = \left(a\hat{N}a - a^2\right) |n\rangle = \left(a \left(a\hat{N} - a\right) - a^2\right) |n\rangle \\ &= \left(a^2\hat{N} - 2a^2\right) |n\rangle = \left(a^2n - 2a^2\right) |n\rangle \\ &= (n - 2) a^2 |n\rangle.\end{aligned} \quad (1.40)$$

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 $(n - p + 1)$:

$$\hat{N}a^p |n\rangle = (n - p + 1) a^p |n\rangle. \quad (1.41)$$

En comparant les relations (1.38) et (1.39) cela conduit à poser :

$$a |n\rangle = c |n - 1\rangle. \quad (1.42)$$

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

$$\langle n' | n \rangle = \delta_{nn'}.$$

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 (1.37), 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 (1.42) qui devient donc :

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \quad (1.43)$$

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

$$a^2|n\rangle = aa|n-1\rangle = a\sqrt{n}|n-1\rangle = \sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle. \quad (1.44)$$

Ainsi, en multipliant de gauche successivement (1.44) par a on aboutit, par récurrence, à :

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

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

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

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

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

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

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

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (1.45)$$

et la fonction d'onde associée est :

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

où C est la constante de normalisation et $H_n(q)$ est le n -ème polynôme d'Hermite [13].

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 :

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

On montre de façon tout à fait analogue que :

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

et

$$(a^+)^p |n\rangle = \sqrt{(n+1) \dots (n+p)} |n+p\rangle.$$

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 $|n'\rangle = |n-1\rangle, |n-2\rangle, \dots$, et par récurrence, on déduit que ce processus s'arrête forcément à $n' = 0$ avec l'état $|0\rangle$.

1.4.3 L'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions

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

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

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 :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \frac{1}{2}m\omega^2 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2) \quad (1.46)$$

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 :

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z, \quad (1.47)$$

avec

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

Comme on connaît les valeurs propres et les vecteurs propres d'un oscillateur à une dimen-

sion, on a pour les trois hamiltoniens \hat{H}_x , \hat{H}_y et \hat{H}_z

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

où $|n_x\rangle$, $|n_y\rangle$ et $|n_z\rangle$ 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} , (1.47), sont les sommes des valeurs propres de \hat{H}_x , \hat{H}_y et \hat{H}_z soit :

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

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

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

D'autre part, si on travaille 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 $l = 0, 1, \dots, n_r - 1$ 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

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

où C est une constante de normalisation et L_ν^q est le polynôme associé de Laguerre [14].

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

$$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

et la fonction d'onde correspondante sera :

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

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 :

$$\hat{H} = \alpha\hat{p}^2 + \lambda\hat{r}^2 \tag{1.48}$$

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

$$E_n = \hbar\sqrt{\lambda\alpha}(2n + 3). \tag{1.49}$$

et la fonction d'onde

$$R_{n,l}(r) = Cr^l e^{-\frac{1}{2\hbar}\sqrt{\frac{\lambda}{\alpha}}r^2} L_{(n-l)/2}^{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2\hbar}\sqrt{\frac{\lambda}{\alpha}}r^2\right). \tag{1.50}$$

En particulier, l'énergie de l'état fondamental ($n=0$) se simplifie en :

$$E_n = 3\hbar\sqrt{\lambda\alpha}. \tag{1.51}$$

Chapitre 2

Résolution numérique de l'équation de Schrödinger

On se propose dans ce chapitre de résoudre numériquement l'équation de Schrödinger radiale réduite

$$\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} U(r) + [E - V_{eff}(r)] U(r) = 0 \quad r \geq 0, \quad (2.1)$$

par la méthode de Mulhopp [2] qui est une méthode de résolution numérique des équations différentielles aux valeurs propres telle que l'équation de Schrödinger. μ , $U(r)$ et E désignent respectivement la masse réduite du système, la fonction d'onde radiale réduite et l'énergie correspondante. $V_{eff}(r)$ est le potentiel effectif qui est la somme du potentiel d'interaction $V(r)$ et du terme centrifuge $\ell(\ell + 1)/2\mu r^2$.

Généralement la résolution numérique a comme point de départ une division d'un domaine fini. Cependant, le domaine de définition de la fonction d'onde radiale réduite $U(r)$ solution de l'équation (2.1) n'est pas borné ($r \in [0, \infty[$), d'où la nécessité de construire une bijection de $[0, \infty[$ sur un domaine borné. Un exemple d'une telle bijection est

$$r = r_0 \frac{x}{1 - x} \quad (2.2)$$

ou encore en inversant

$$x = \frac{r}{r + r_0}, \quad (2.3)$$

où $x \in [0, 1[$ est la nouvelle variable sans dimension et r_0 est un paramètre de même dimension que r et qui doit être choisi de l'ordre de grandeur du rayon de la fonction d'onde (par exemple le rayon de Bohr dans le cas du potentiel Coulombien). Nous avons

$$\frac{d}{dr} = \frac{(x-1)^2}{r_0} \frac{d}{dx}, \quad (2.4)$$

et par conséquent

$$\frac{d^2}{dr^2} = \frac{(x-1)^4}{r_0^2} \frac{d^2}{dx^2} + 2 \frac{(x-1)^3}{r_0^2} \frac{d}{dx}. \quad (2.5)$$

Dans le but d'éliminer le terme en $\frac{d}{dx}$, on va adopter le changement de fonction suivant

$$v(x) = \frac{\sqrt{r_0}}{(1-x)} U(r(x)). \quad (2.6)$$

L'équation (2.1) s'écrit dans la nouvelle variable x et la nouvelle fonction $v(x)$ comme

$$\frac{1}{2\mu} \frac{(1-x)^4}{r_0^2} \frac{d^2}{dx^2} v(x) + V_{eff}(r(x)) v(x) = E v(x). \quad (2.7)$$

On remarque que $v(0) = \lim_{x \rightarrow 1} v(x) = 0$. Il s'ensuit qu'un développement en série de Fourier est possible

$$v(x) := \sum_{i=1}^N a_i \sin(i\pi x), \quad (2.8)$$

où les a_i sont les coefficients du développement. Pour N fini, on peut diviser le domaine de définition de $v(x)$ $[0, 1[$ en $N+1$ intervalles de même largeur $h = \frac{1}{N+1}$. Toutes les informations sur la fonction d'onde sont contenues dans les paramètres de poids a_i et les valeurs v_i de $v(x)$ aux points $x_i = (i+1)h$

$$v_j := \sum_{i=1}^N a_i \sin(i\pi x_i). \quad (2.9)$$

En utilisant le fait que

$$\sum_{k=1}^N \sin\left(k \frac{\pi(j+1)}{N+1}\right) \sin\left(k \frac{\pi(i+1)}{N+1}\right) = \frac{N+1}{2} \delta_{ij}, \quad (2.10)$$

on peut inverser (2.9) pour obtenir les poids a_i en fonction des v_j et des x_j

$$a_i = 2h \sum_{j=1}^N v_j \sin(i\pi x_j). \quad (2.11)$$

Toujours en faisant usage de la relation (2.10), l'équation (2.7) se simplifie en

$$\frac{1}{\mu} \frac{(x_i - 1)^4}{(N + 1) r_0^2} \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N k^2 \pi^2 \sin(k\pi x_i) \sin(k\pi x_j) v_j - \sum_{j=1}^N [E - V_{eff}(r(x_i))] \delta_{ij} v_j = 0, \quad (2.12)$$

équation qui peut être réécrite comme une équation aux valeurs propres

$$\sum_{j=1}^N A_{ij} v_j = E v_i, \quad (2.13)$$

avec

$$A_{ij} = \pi^2 h \frac{(1 - x_i)^4}{\mu r_0^2} \left(\sum_{k=1}^N k^2 \sin(k\pi x_i) \sin(k\pi x_j) \right) + \delta_{ij} V(r(x_i)). \quad (2.14)$$

Notons que la matrice A n'est pas symétrique. Néanmoins, nous pouvons ramener le problème aux valeurs propres (2.13) à celui d'un problème aux valeurs propres d'une matrice symétrique.

Pour ce faire, définissons un nouveau vecteur w d'éléments

$$w_j = \frac{1}{(x_j - 1)^2} v_j. \quad (2.15)$$

En remplaçant v par son expression en terme de w , l'équation aux valeurs propres (2.13) se réduit à

$$\sum_{j=1}^N B_{ij} w_j = E w_i, \quad (2.16)$$

où la matrice B est maintenant une matrice symétrique dont les éléments B_{ij} sont donnés par

$$B_{ij} = \frac{\pi^2 h}{\mu r_0^2} (1 - x_i)^2 (1 - x_j)^2 \left(\sum_{k=1}^N k^2 \sin(k\pi x_i) \sin(k\pi x_j) \right) + \delta_{ij} V(r(x_i)). \quad (2.17)$$

La diagonalisation de la matrice B donne des valeurs approximatives pour les énergies des N premiers niveaux et des vecteurs d'états correspondants. Il est bon de remarquer que les niveaux les plus bas sont les mieux approximés.

2.0.4 Application

Nous allons construire un algorithme qui va nous permettre de résoudre l'équation de Schrödinger, c'est-à-dire, de déterminer l'énergie et la fonction d'onde correspondante.

On se restreint dans notre travail aux potentiels centraux en lois de puissances

$$V(r) = \text{sign}(\beta)r^\beta$$

et pour simplifier, nous avons choisi ($\hbar = 1, \omega = 1, m = 1$).

La figure 3 représente un programme que nous avons construit (Mathcad) permettant de résoudre numériquement l'équation de Schrödinger radiale réduite par la méthode de Multhopp [2] :

$$E(N, EL, \beta) := \left\{ \begin{array}{l} r(q) \leftarrow \frac{q+1}{N-q} \\ F(i, j) \leftarrow \frac{[(N-i)^2 \cdot (N-j)^2] \cdot 2 \cdot \pi^2}{(N+1)^5} \cdot \left[\sum_{k=1}^N \left[k^2 \cdot \sin\left[\frac{k \cdot \pi \cdot (i+1)}{N+1}\right] \cdot \sin\left[\frac{k \cdot \pi \cdot (j+1)}{N+1}\right] \right] \right] + \delta(i, j) \cdot \left[\frac{|\beta|}{\beta} \cdot r(j)^\beta + \frac{EL \cdot (EL+1)}{r(j)^2} \right] \\ M \leftarrow \text{matrix}(N, N, F) \\ P \leftarrow \text{eigenvals}(M) \\ E \leftarrow \text{sort}(P) \\ E \end{array} \right.$$

Figure1 : Programme sur Mathcad de la méthode de Multhopp pour la résolution numérique de l'équation de Schrödinger radiale réduite

Ce programme a comme sortie la valeur E qui est un vecteur dont les composantes, au nombre de N, sont les énergies propres organisé par ordre croissant via la fonction **sort()**.

Les valeurs numériques de l'énergie de l'état fondamental E_0 d'un système à une particule de masse m sont calculées dans un système d'unités où $\hbar = 1$. Nous avons considéré des forces d'interaction qui dérivent de potentiels en loi de puissance $V(r) = \text{sign}(\beta)r^\beta$ pour quelques valeurs de l'exposant β :

Tableau 1 : Energie du niveau fondamental d'un système à une particule
de masse $m = 1$ et plongé dans un potentiel $V(r) = \text{sign}(\beta)r^\beta$.

	$\beta = -1$	$\beta = -1/2$	$\beta = 0.1$	$\beta = 1$	$\beta = 2$
E_0	-0.250000	-0.43804	1.23573	2.33811	3.00000

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 [16]. 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.

3.1 Problème de deux particules en interaction

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 [8].

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 par \vec{r} le vecteur relatif :

$$\vec{r} := \vec{r}_{12} = -\vec{r}_2 + \vec{r}_1 \quad . \quad (3.1)$$

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 $r = \|\vec{r}\|$ [17]. Notons par $V(\vec{r})$ l'énergie potentielle d'interaction. L'opérateur hamiltonien de ce système s'écrit :

$$\hat{H}^{(2)} = \hat{T}^{(2)} + V(\vec{r}) = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}) \quad (3.2)$$

où $\hat{T}^{(2)}$ est la partie cinétique de l'hamiltonien, $V(\vec{r})$ le potentiel d'interaction.

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

$$(m_1 + m_2) \vec{R} = m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2. \quad (3.3)$$

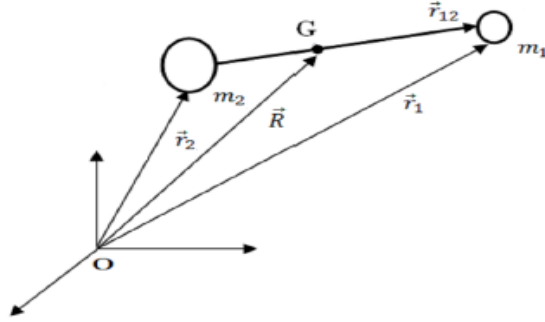


Figure1 : Système à deux corps : coordonnée relative $\vec{r} = \vec{r}_{12}$
et coordonnée du centre de masse \vec{R} .

Supposons que le système ne soit soumis à aucune force extérieure et que l'interaction entre les particules ne dépende que de leur distance relative $r = \|\vec{r}\|$.

En mécanique classique, l'énergie cinétique T s'écrit :

$$T^{(2)} = \frac{1}{2} m_1 \dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \dot{\vec{r}}_2^2. \quad (3.4)$$

On peut utiliser les équations (3.1) et (3.3) pour exprimer les vecteurs \vec{r}_1 et \vec{r}_2 en fonction de \vec{r} et \vec{R} , avec le résultat

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

En dérivant par rapport au temps, on trouve des expressions analogues pour les vitesses

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

On reporte ces dernières expressions dans (3.4), la partie cinétique $T^{(2)}$ s'écrit alors en termes du vecteur relatif et du vecteur du centre de masse :

$$\begin{aligned}T^{(2)} &= \frac{1}{2}m_1 \left(\dot{\vec{R}} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \dot{\vec{r}} \right)^2 + \frac{1}{2}m_2 \left(\dot{\vec{R}} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \dot{\vec{r}} \right)^2, \\ &= \frac{1}{2}(m_1 + m_2) \dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \right) \dot{\vec{r}}^2, \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{M} \dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2} \mu_r \dot{\vec{r}}^2,\end{aligned}$$

où $\mu_r = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ et $\mu_R = \mathbf{M} = m_1 + m_2$ sont respectivement la masse réduite et la masse totale de système. Ou en termes des impulsions \vec{P}_R et \vec{p}_r :

$$T^{(2)} = \frac{1}{2\mathbf{M}} \vec{P}_R^2 + \frac{1}{2\mu_r} \vec{p}_r^2.$$

L'hamiltonien s'écrit en fonction des nouvelles variables \vec{r} et \vec{R}

$$H^{(2)} = \frac{1}{2\mathbf{M}} \vec{P}_R^2 + \left(\frac{1}{2\mu_r} \vec{p}_r^2 + V(\vec{r}) \right). \quad (3.5)$$

Notons que ce résultat est valable en mécanique quantique et que l'on peut le montrer explicitement [8] si on remplace les impulsions \vec{P}_R et \vec{p}_r par des opérateurs :

$$\begin{aligned}\vec{p}_r^2 &\rightarrow -i\hbar\Delta_r = -i\hbar \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \\ \vec{P}_R^2 &\rightarrow -i\hbar\Delta_R = -i\hbar \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right)\end{aligned}$$

où (x, y, z) et (X, Y, Z) représentent respectivement les coordonnées des vecteurs \vec{r} et \vec{R} .

Si on retranche l'énergie cinétique $\vec{P}_R^2/(2\mathbf{M})$ de l'hamiltonien (3.5) on obtient la quantité

$$\hat{H}_r = \frac{1}{2\mu_r} \vec{p}_r^2 + V(\vec{r}) \quad (3.6)$$

qui est souvent appelé **hamiltonien relatif**.

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 qu'à 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 (1.49) qui devient dans un système d'unité où $\hbar = 1$:

$$E_n^{(2)} = (2n + 3) \sqrt{k\alpha} = (2n + 3) \hbar \sqrt{\frac{k}{2\mu}}. \quad (3.7)$$

En vertu de (3.7), 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

$$E_0^{(2)} = 3\hbar \sqrt{\frac{k}{2\mu}}. \quad (3.8)$$

et la fonction d'onde radiale correspondante :

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

3.3 Résultats numériques

On a vu dans la section précédente que la résolution du problème de particules en interaction qui ne dépend que de la distance qui les sépare se ramène à la résolution du problème à une particule dans un champ central, c-à-d, la résolution de l'équation de Schrödinger radiale réduite. Du fait, on peut appliquer la méthode numérique présentée dans le chapitre précédent pour déduire le spectre d'énergie du système à deux corps. Il suffit de remplacer la masse de la particule par la masse réduite des deux particules en question.

Nous fournissons dans le tableau suivant les valeurs numériques de l'énergie du niveau fondamental $E_0^{(2)}$ d'un système à deux corps de masse réduite μ égale à $m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ dans un système d'unité où $\hbar = 1$. Nous avons considéré des forces d'interaction qui dérivent de potentiels en loi de puissance $V(r) = \text{sign}(\beta) r^\beta$ pour quelques valeurs de l'exposant β :

Tableau 2 : Energie du niveau fondamental d'un système à deux particule de masse $m_1 = 1$ et m_2 variable en interaction : $V(r) = \text{sign}(\beta) r^\beta$.

(m_1, m_2)	(1, 1)	(1, 5)	(1, 0.2)	(1, 2)	(1, ∞)
$\beta = 2$	3.00000	2.32379	5.19615	2.59808	2.12132
$\beta = 1$	2.33811	1.97204	3.37213	2.12431	1.85576
$\beta = 0.1$	1.23573	1.20603	1.30209	1.21891	1.195661
$\beta = -1/2$	-0.43804	-0.51936	-0.30372	-0.48213	-0.55190
$\beta = -1$	-0.25000	-0.41666	-0.08333	-0.33333	-0.50000

Notons que, dans la dernière colonne du tableau précédent on a attribué une masse infinie pour la deuxième particule. Cinématiquement ceci traduit l'immobilité de cette particule. Cette situation peut donc décrire le problème d'une seule particule plongée dans un puits de potentiel.

Chapitre 4

L'oscillateur harmonique à quatre corps

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

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

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 :

$$k_{\alpha\beta} = k_{\alpha\gamma} \quad \text{si} \quad m_\beta = m_\gamma. \quad (4.2)$$

Le système est décrit donc par l'hamiltonien :

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(4)} = & \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_4} + k_{12} (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + k_{13} (\vec{r}_1 - \vec{r}_3)^2 + k_{14} (\vec{r}_1 - \vec{r}_4)^2 \\ & + k_{23} (\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2 + k_{24} (\vec{r}_2 - \vec{r}_4)^2 \\ & + k_{34} (\vec{r}_3 - \vec{r}_4)^2. \end{aligned} \quad (4.3)$$

4.1 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.

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 :

$$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^N m_i, \quad (4.4)$$

$$\vec{R} = \frac{1}{\mathbf{M}} \sum_{i=1}^N m_i \vec{r}_i. \quad (4.5)$$

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.

$$\vec{\rho}_j = -\vec{r}_{j+1} + \frac{1}{\sum_{i=1}^j m_i} \sum_{i=1}^j m_i \vec{r}_i. \quad (4.6)$$

Au centre de masse des j premières particules, nous pouvons donc partir d'une particule est définir récursivement toutes les coordonnées de Jacobi [18].

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

L'hamiltonien du système s'écrit donc :

$$\hat{H}^{(3)} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} + k_{12} (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + k_{13} (\vec{r}_1 - \vec{r}_3)^2 + k_{23} (\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2. \quad (4.7)$$

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, m) .
- configuration avec deux masses différentes qu'on notera (m, m, M, M) .
- et la configuration où intervient trois masses différentes (m, m, \mathbf{m}, M) .

4.2 Système ayant toutes les masses égales

L'hamiltonien (4.3) du système pour cette configuration où les particules du système sont toutes de même masse s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}
 \hat{H}^{(4)} &= \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m} + k(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + k(\vec{r}_1 - \vec{r}_3)^2 + k(\vec{r}_1 - \vec{r}_4)^2 \\
 &\quad + k(\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2 + k(\vec{r}_2 - \vec{r}_4)^2 \\
 &\quad + k(\vec{r}_3 - \vec{r}_4)^2,
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

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 $\vec{\sigma}$ (4.6) :

$$\begin{aligned}
 \vec{r} &:= \vec{\rho}_1 = -\vec{r}_2 + \vec{r}_1, \\
 \vec{\rho} &:= \vec{\rho}_2 = -\vec{r}_3 + \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \\
 \vec{\sigma} &:= \vec{\rho}_3 = -\vec{r}_4 + \frac{1}{3}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3).
 \end{aligned} \tag{4.9}$$

La coordonnée du centre de masse est définie par

$$\vec{R} = \frac{1}{4}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3 + \vec{r}_4). \tag{4.10}$$

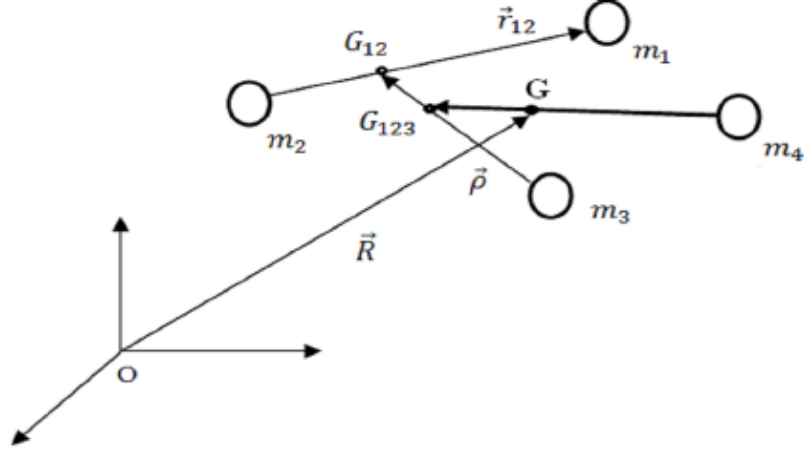


Figure 3 : Coordonnées de Jacobi pour le système à quatre corps :

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

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

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

En inversant les relations (4.9) et (4.10), 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} :

$$\begin{aligned}
 \vec{r}_1 &= \vec{R} + \frac{1}{2}\vec{r} + \frac{1}{3}\vec{\rho} + \frac{1}{4}\vec{\sigma}, \\
 \vec{r}_2 &= \vec{R} - \frac{1}{2}\vec{r} + \frac{1}{3}\vec{\rho} + \frac{1}{4}\vec{\sigma}, \\
 \vec{r}_3 &= \vec{R} - \frac{2}{3}\vec{\rho} + \frac{1}{4}\vec{\sigma}, \\
 \vec{r}_4 &= \vec{R} - \frac{3}{4}\vec{\sigma}.
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

On peut exprimer le terme de l'énergie cinétique dans l'hamiltonien (4.8) 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

$$\begin{aligned}
 T^{(4)} &= \frac{1}{2}m_1\dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{\vec{r}}_2^2 + \frac{1}{2}m_3\dot{\vec{r}}_3^2 + \frac{1}{2}m_4\dot{\vec{r}}_4^2 \\
 &= \frac{1}{2}(4m)\dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{m}{2}\right)\dot{\vec{r}}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{2m}{3}\right)\dot{\vec{\rho}}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{3m}{4}\right)\dot{\vec{\sigma}}^2,
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

ou encore en termes des moments conjugués \vec{P}_R , \vec{p}_r , \vec{p}_ρ et \vec{p}_σ comme

$$T^{(4)} = \frac{\vec{P}_R^2}{2\mathbf{M}} + \frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + \frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma}. \tag{4.13}$$

$\mathbf{M} = 4m$ 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

$$\begin{aligned}V^{(4)} &= k(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + k(\vec{r}_1 - \vec{r}_3)^2 + k(\vec{r}_1 - \vec{r}_4)^2 \\ &\quad + k(\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2 + k(\vec{r}_2 - \vec{r}_4)^2 \\ &\quad + k(\vec{r}_3 - \vec{r}_4)^2 \\ &= 2kr^2 + \frac{8}{3}k\rho^2 + 3k\sigma^2.\end{aligned}\tag{4.14}$$

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

$$\hat{H}^{(4)} = \frac{\vec{P}_R^2}{2\mathbf{M}} + \frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + \frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma} + 2kr^2 + \frac{8}{3}k\rho^2 + 3k\sigma^2,\tag{4.15}$$

et donc l'hamiltonien relatif se réduit à :

$$\hat{H}_r^{(4)} = \left(\frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + 2kr^2 \right) + \left(\frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + \frac{8}{3}k\rho^2 \right) + \left(\frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma} + 3k\sigma^2 \right),\tag{4.16}$$

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 :

$$\begin{aligned}
E_{n_1, n_2, n_3}^{(4)} &= \sqrt{\frac{1}{2\mu_r} 2k (2n_1 + 3)} + \sqrt{\frac{1}{2\mu_\rho} \frac{8}{3} k (2n_2 + 3)} + \sqrt{\frac{1}{2\mu_\rho} 3k (2n_3 + 3)} \\
&= \sqrt{\frac{2k}{m} (2n_1 + 3)} + \sqrt{\frac{2k}{m} (2n_2 + 3)} + \sqrt{\frac{2k}{m} (2n_3 + 3)} \\
&= \sqrt{\frac{2k}{m} (2(n_1 + n_2 + n_3) + 9)}
\end{aligned} \tag{4.17}$$

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

$$E_{n_1, n_2, n_3}^{(4)} = E_n^{(4)} = \sqrt{\frac{2k}{m} (2n + 9)}. \tag{4.18}$$

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

$$E_0^{(4)} = 9\sqrt{\frac{2k}{m}}. \tag{4.19}$$

4.3 Système ayant trois masses différentes (m, 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 (4.3) du système s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{(4)} &= \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + \frac{\vec{p}_3^2}{2\mathbf{m}} + \frac{\vec{p}_4^2}{2M} + k (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + \mathbf{k} (\vec{r}_1 - \vec{r}_3)^2 + K (\vec{r}_1 - \vec{r}_4)^2 \\
&\quad + \mathbf{k} (\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2 + K (\vec{r}_2 - \vec{r}_4)^2 \\
&\quad + \mathbf{K} (\vec{r}_3 - \vec{r}_4)^2,
\end{aligned} \tag{4.20}$$

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 :

$$\begin{aligned}
\vec{r} &:= \vec{\rho}_1 = -\vec{r}_2 + \vec{r}_1, \\
\vec{\rho} &:= \vec{\rho}_2 = -\vec{r}_3 + \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \\
\vec{\sigma} &:= \vec{\rho}_3 = -\vec{r}_4 + \frac{1}{2m+\mathbf{m}}(m\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 + \mathbf{m}\vec{r}_3)
\end{aligned} \tag{4.21}$$

et

$$\vec{R} = \frac{1}{2m + \mathbf{m} + M} (m\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 + \mathbf{m}\vec{r}_3 + M\vec{r}_4). \tag{4.22}$$

En inversant le système d'équation (4.21) et (4.22), 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} :

$$\begin{aligned}
\vec{r}_1 &= \vec{R} + \frac{1}{2}\vec{r} + \frac{\mathbf{m}}{2m+\mathbf{m}}\vec{\rho} + \frac{M}{2m+\mathbf{m}+M}\vec{\sigma}, \\
\vec{r}_2 &= \vec{R} - \frac{1}{2}\vec{r} + \frac{\mathbf{m}}{2m+\mathbf{m}}\vec{\rho} + \frac{M}{2m+\mathbf{m}+M}\vec{\sigma}, \\
\vec{r}_3 &= \vec{R} - \frac{2m}{2m+\mathbf{m}}\vec{\rho} + \frac{M}{2m+\mathbf{m}+M}\vec{\sigma}, \\
\vec{r}_4 &= \vec{R} - \frac{(2m+\mathbf{m})}{2m+\mathbf{m}+M}\vec{\sigma}.
\end{aligned} \tag{4.23}$$

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

$$\begin{aligned}
T^{(4)} &= \frac{1}{2}m\vec{r}_1^2 + \frac{1}{2}m\vec{r}_2^2 + \frac{1}{2}\mathbf{m}\vec{r}_3^2 + \frac{1}{2}M\vec{r}_4^2 \\
&= \frac{1}{2}(2m + \mathbf{m} + M)\vec{R}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{m}{2}\right)\vec{r}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{2m\mathbf{m}}{2m+\mathbf{m}}\right)\vec{\rho}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{M(2m+\mathbf{m})}{2m+\mathbf{m}+M}\right)\vec{\sigma}^2,
\end{aligned} \tag{4.24}$$

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

$$T^{(4)} = \frac{\vec{P}_R^2}{2(2m + \mathbf{m} + M)} + \frac{\vec{p}_r^2}{2\mu_r} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{2\mu_\rho} + \frac{\vec{p}_\sigma^2}{2\mu_\sigma}. \tag{4.25}$$

où

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

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

En reportant les expressions (4.23) de \vec{r}_1 , \vec{r}_2 , \vec{r}_3 et \vec{r}_4 dans l'expression de l'énergie potentielle,

$$\begin{aligned} V^{(4)} &= k(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + \mathbf{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_3)^2 + K(\vec{r}_1 - \vec{r}_4)^2 \\ &\quad + \mathbf{k}(\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2 + K(\vec{r}_2 - \vec{r}_4)^2 \\ &\quad + \mathbf{K}(\vec{r}_3 - \vec{r}_4)^2, \end{aligned} \quad (4.26)$$

on obtient :

$$V^{(4)} = \left(k + \frac{1}{2}\mathbf{k} + \frac{1}{2}K\right) r^2 + \frac{2\mathbf{k}(2m+\mathbf{m})^2 + 4\mathbf{K}m^2 + 2Km^2}{(2m+\mathbf{m})^2} \rho^2 + (2K + \mathbf{K}) \sigma^2 + 4\frac{K\mathbf{m}-m\mathbf{K}}{2m+\mathbf{m}} \vec{\rho} \cdot \vec{\sigma}. \quad (4.27)$$

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

Pour diagonaliser cet hamiltonien on est obligé à passer par la diagonalisation d'une matrice symétrique 3×3 . On montre [15] que le spectre d'énergie du système s'obtient par :

$$E_{n_1, n_2, n_3}^{(4)} = \sqrt{\lambda_1} (2n_1 + 3) + \sqrt{\lambda_2} (2n_2 + 3) + \sqrt{\lambda_3} (2n_3 + 3). \quad (4.28)$$

où λ_1 , λ_2 et λ_3 sont les valeurs propres de la matrice A d'ordre 3, tel que :

$$A = \begin{pmatrix} \frac{1}{m} \left(k + \frac{1}{2}\mathbf{k} + \frac{1}{2}K\right) & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\mathbf{k}(2m+\mathbf{m})^2 + 2\mathbf{K}m^2 + Km^2}{2m\mathbf{m}(2m+\mathbf{m})} & 2\frac{K\mathbf{m}-m\mathbf{K}}{2m+\mathbf{m}} \sqrt{\frac{2m+\mathbf{m}+M}{8m\mathbf{m}M}} \\ 0 & 2\frac{K\mathbf{m}-m\mathbf{K}}{2m+\mathbf{m}} \sqrt{\frac{2m+\mathbf{m}+M}{8m\mathbf{m}M}} & \frac{(2K+\mathbf{K})(2m+\mathbf{m}+M)}{2M(2m+\mathbf{m})} \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

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

$$E_0^{(4)} = 3 \left(\sqrt{\lambda_1} + \sqrt{\lambda_2} + \sqrt{\lambda_3} \right). \quad (4.30)$$

Chapitre 5

Bornes inférieures pour des hamiltoniens à quatre corps

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

$$H^{(4)} = \sum_{i=1}^4 \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 + \sum_{i < j=1}^4 V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \quad , \quad (5.1)$$

où m_i , \vec{r}_i et \vec{p}_i désignent respectivement la masse, la position et l'impulsion de la i^{eme} particule. $\vec{r}_{ij} := \vec{r}_i - \vec{r}_j$ avec $i \neq j = 1, 2, 3, 4$. Il est à noter que le potentiel $V^{(ij)}(\vec{r}_{ij})$ dont dérive la force à deux corps peut dépendre de la paire $\{i, j\}$.

5.1 Le principe variationnel de Ritz

Le but de cette section est de présenter la méthode variationnelle [6], qui est une méthode d'approximation largement utilisée.

Considérons un système d'Hamiltonien H . Supposons pour simplifier que le spectre d'énergie soit discret. Notons par $E_0, E_1, \dots, E_i, \dots$ les valeurs propres de H pris dans un ordre croissant. Par conséquent, $E_0, E_1, \dots, E_i, \dots$ désignent respectivement les énergies du niveau fondamental,

du premier niveau excité, ..., du i ème niveau excité, ... du système. Notons par $|\varphi_{i,\alpha}\rangle$ les états propres orthonormés de H

$$H |\varphi_{i,\alpha}\rangle = E_i |\varphi_{i,\alpha}\rangle, \quad (5.2)$$

$$\langle \varphi_{i,\alpha} | \varphi_{i',\alpha'} \rangle = \delta_{i,i'} \delta_{\alpha,\alpha'}, \quad (5.3)$$

où l'indice supplémentaire $\alpha = 1, 2, \dots, g_i$ permet de distinguer les états propres indépendants normalisés de H , choisis orthogonaux, correspondant à la même énergie propre E_i . g_i désigne donc la dégénérescence du niveau d'énergie E_i .

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

$$\sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} |\varphi_{i,\alpha}\rangle \langle \varphi_{i,\alpha}| = I \quad (5.4)$$

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

$$|\Psi\rangle = \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} c_{i,\alpha} |\varphi_{i,\alpha}\rangle, \quad (5.5)$$

où

$$c_{i,\alpha} = \langle \varphi_{i,\alpha} | \Psi \rangle. \quad (5.6)$$

Nous avons en utilisant les relations (5.2) et (5.3) et le fait que $E_i \geq E_0 \quad \forall i = 0, 1, \dots$

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} E_i |c_{i,\alpha}|^2 \geq E_0 \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} |c_{i,\alpha}|^2 = E_0 \langle \Psi | \Psi \rangle. \quad (5.7)$$

Donc

$$E_0 \leq \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (5.8)$$

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

l'état fondamental de H . Le résultat (5.8) est à la base de la méthode variationnelle.

Nous allons appliquer ce principe pour obtenir des bornes inférieures pour l'énergie de l'état fondamental d'un systèmes à 4 corps. L'idée d'obtention de ces bornes inférieures est basée sur la décomposition de la partie cinétique de l'hamiltonien en une somme de termes cinétiques à deux corps pour pouvoir ensuite les regrouper avec les potentiels à deux corps qui présentent la partie potentielle dans l'hamiltonien à N corps. Ce dernier peut être vu comme une somme d'hamiltoniens à deux corps. Cette idée a permis la création de quelques bornes inférieures pour l'énergie du fondamental pour des systèmes à N corps, à savoir, Borne inférieure naïve, Borne inférieure améliorée et Borne inférieure optimisée.

Nous allons dériver ces trois bornes pour un systèmes composé de quatre corps.

5.2 Borne inférieure naïve

La borne inférieure naïve correspond à la décomposition suivante du terme d'énergie cinétique $T^{(N)}$:

$$T^{(N)} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 = \sum_{i<j=1}^N \frac{1}{2\mu_{ij}} \vec{p}_{ij}^2$$

où \vec{p}_{ij} est le "vecteur" moment conjugué relatif au vecteur position \vec{r}_{ij} et μ_{ij} la masse réduite relative à la paire de particule i et j . Plus explicitement pour $N = 4$:

$$\begin{aligned} T^{(4)} &= \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_4} \\ &= \frac{1}{3} \left(\frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} \right) + \frac{1}{3} \left(\frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} \right) + \frac{1}{3} \left(\frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_4} \right) \\ &\quad + \frac{1}{3} \left(\frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} \right) + \frac{1}{3} \left(\frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_4} \right) + \frac{1}{3} \left(\frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_4} \right). \end{aligned} \quad (5.9)$$

L'Hamiltonien $H^{(4)}$ (5.1) peut alors être réécrit comme une somme d'Hamiltoniens à deux corps $H_{ij}^{(2)1}$

¹Le (2) en exposant de $E_n^{(2)}$ signifie qu'il s'agit d'un système à deux corps.

$$H^{(4)} = \sum_{i < j = 1}^4 H_{ij}^{(2)}. \quad (5.10)$$

avec

$$H_{ij}^{(2)} = \frac{1}{3} \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \frac{\vec{p}_j^2}{2m_j} \right) + V_{ij}(\vec{r}_{ij}). \quad (5.11)$$

alors

$$\begin{aligned} H^{(4)} = & \left[\frac{1}{3} \left(\frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} \right) + V_{12}(\vec{r}_{12}) \right] + \left[\frac{1}{3} \left(\frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} \right) + V_{13}(\vec{r}_{13}) \right] \\ & + \left[\frac{1}{3} \left(\frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_4} \right) + V_{14}(\vec{r}_{14}) \right] + \left[\frac{1}{3} \left(\frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} \right) + V_{23}(\vec{r}_{23}) \right] \\ & + \left[\frac{1}{3} \left(\frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_4} \right) + V_{24}(\vec{r}_{24}) \right] + \left[\frac{1}{3} \left(\frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_4} \right) + V_{34}(\vec{r}_{34}) \right]. \end{aligned}$$

On définit les quantités

$$\vec{P}_{ij} := \vec{p}_i + \vec{p}_j \quad (5.12)$$

et

$$\vec{p}_{ij} := \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} \left(\frac{\vec{p}_i}{m_i} - \frac{\vec{p}_j}{m_j} \right) = \frac{m_j \vec{p}_i - m_i \vec{p}_j}{m_i + m_j}. \quad (5.13)$$

Il est clair que \vec{P}_{ij} et \vec{p}_{ij} (bien sûr $i \neq j = 1, \dots, 4$) sont, respectivement, des moments conjugués de $\vec{R}_{ij} := [m_i \vec{r}_i + m_j \vec{r}_j] / (m_i + m_j)$ et $\vec{r}_{ij} := \vec{r}_i - \vec{r}_j$ respectivement¹. En effet :

$$\begin{aligned} [\vec{p}_{ij}, \vec{r}_i - \vec{r}_j] &= \left[\frac{m_j}{m_i + m_j} \vec{p}_i - \frac{m_i}{m_i + m_j} \vec{p}_j, \vec{r}_i - \vec{r}_j \right] \\ &= \left[\frac{m_j}{m_i + m_j} \vec{p}_i, \vec{r}_i \right] + \left[-\frac{m_i}{m_i + m_j} \vec{p}_j, -\vec{r}_j \right] \\ &= \frac{m_j}{m_i + m_j} [\vec{p}_i, \vec{r}_i] + \frac{m_i}{m_i + m_j} [\vec{p}_j, \vec{r}_j] \\ &= -\frac{m_j}{m_i + m_j} i\hbar - \frac{m_i}{m_i + m_j} i\hbar \\ &= -i\hbar \end{aligned}$$

¹ \vec{R}_{ij} n'est d'autre que le vecteur position du centre de masse des deux particules i et j .

et

$$\begin{aligned}
[\vec{P}_{ij}, \vec{R}_{ij}] &= \left[\vec{p}_i + \vec{p}_j, \frac{m_i}{m_i + m_j} \vec{r}_i + \frac{m_j}{m_i + m_j} \vec{r}_j \right] \\
&= \left[\vec{p}_i, \frac{m_i}{m_i + m_j} \vec{r}_i \right] + \left[\vec{p}_j, \frac{m_j}{m_i + m_j} \vec{r}_j \right] \\
&= \frac{m_i}{m_i + m_j} [\vec{p}_i, \vec{r}_i] + \frac{m_j}{m_i + m_j} [\vec{p}_j, \vec{r}_j] \\
&= \frac{m_i}{m_i + m_j} (-i\hbar) + \frac{m_j}{m_i + m_j} (-i\hbar) \\
&= -i\hbar
\end{aligned}$$

Des deux équations (5.12) et (5.13), on peut tirer \vec{p}_i et \vec{p}_j en fonction de \vec{p}_{ij} et \vec{P}_{ij} :

$$\begin{aligned}
\vec{p}_j &= \frac{m_j}{m_i + m_j} \vec{P}_{ij} - \vec{p}_{ij} . \\
\vec{p}_i &= \frac{m_i}{m_i + m_j} \vec{P}_{ij} + \vec{p}_{ij} .
\end{aligned}$$

De plus, les différentes contributions de l'énergie cinétique (5.9) associées aux différentes paires de particules ij peuvent être réécrites en fonction de \vec{p}_{ij} et \vec{P}_{ij} avec comme résultat :

$$\begin{aligned}
T'_{ij} &= \frac{1}{3} \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \frac{\vec{p}_j^2}{2m_j} \right) = \frac{1}{3} \left(\frac{\vec{P}_{ij}^2}{2(m_i + m_j)} + \frac{1}{2} \frac{m_i + m_j}{m_i m_j} \vec{p}_{ij}^2 \right) \\
&= \frac{1}{3} \frac{\vec{P}_{ij}^2}{2(m_i + m_j)} + \frac{1}{2} \frac{m_i + m_j}{3m_i m_j} \vec{p}_{ij}^2 \\
&= \frac{\vec{P}_{ij}^2}{6(m_i + m_j)} + \frac{\vec{p}_{ij}^2}{2\mu_{ij}},
\end{aligned}$$

où μ_{ij} est la masse réduite standard de deux particules de masses $3m_i$ et $3m_j$

$$\mu_{ij} = 3 \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} = \frac{3m_i 3m_j}{3m_i + 3m_j} , \quad (5.14)$$

ou plus précisément :

$$\begin{aligned}
\mu_{12} &= 3 \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} , & \mu_{13} &= 3 \frac{m_1 m_3}{m_1 + m_3} , & \mu_{14} &= 3 \frac{m_1 m_4}{m_1 + m_4} \\
\mu_{23} &= 3 \frac{m_2 m_3}{m_2 + m_3} , & \mu_{24} &= 3 \frac{m_2 m_4}{m_2 + m_4} , & \mu_{34} &= 3 \frac{m_3 m_4}{m_3 + m_4} .
\end{aligned} \quad (5.15)$$

l'hamiltonien correspondant à chaque paire ij s'écrit

$$H_{ij}^{(2)} = \frac{\vec{P}_{ij}^2}{6(m_i + m_j)} + \frac{\vec{p}_{ij}^2}{2\mu_{ij}} + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}). \quad (5.16)$$

Ainsi

$$H^{(4)} = \sum_{i<j=1}^4 \frac{\vec{P}_{ij}^2}{6(m_i + m_j)} + \sum_{i<j=1}^4 H_{ij}^{(2)}, \quad (5.17)$$

avec

$$H_{ij}^{(2)} = \frac{\vec{p}_{ij}^2}{2\mu_{ij}} + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}), \quad (5.18)$$

où de façon explicite

$$\begin{aligned} H^{(4)} = & \frac{\vec{p}_{12}^2}{6(m_1+m_2)} + \frac{\vec{p}_{13}^2}{6(m_1+m_3)} + \frac{\vec{p}_{14}^2}{6(m_1+m_4)} + \frac{\vec{p}_{23}^2}{6(m_2+m_3)} + \frac{\vec{p}_{24}^2}{6(m_2+m_4)} + \frac{\vec{p}_{34}^2}{6(m_3+m_4)} \\ & + \left[\frac{\vec{p}_{12}^2}{2\mu_{12}} + V^{(12)}(\vec{r}_{12}) \right] + \left[\frac{\vec{p}_{13}^2}{2\mu_{13}} + V^{(13)}(\vec{r}_{13}) \right] + \left[\frac{\vec{p}_{14}^2}{2\mu_{14}} + V^{(14)}(\vec{r}_{14}) \right] \\ & + \left[\frac{\vec{p}_{23}^2}{2\mu_{23}} + V^{(23)}(\vec{r}_{23}) \right] + \left[\frac{\vec{p}_{24}^2}{2\mu_{24}} + V^{(24)}(\vec{r}_{24}) \right] + \left[\frac{\vec{p}_{34}^2}{2\mu_{34}} + V^{(34)}(\vec{r}_{34}) \right]. \end{aligned}$$

Soit $|\Psi\rangle$ l'état fondamental normalisé inconnu du système et $E_0^{(4)}$ l'énergie correspondante, alors

$$E_0^{(4)} = \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | \sum_{i<j=1}^4 H_{ij}^{(2)} | \psi \rangle. \quad (5.19)$$

ou encore

$$E_0^{(4)} = \langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{i<j=1}^4 \langle \psi | \frac{\vec{P}_{ij}^2}{6(m_i + m_j)} | \psi \rangle + \sum_{i<j=1}^4 \langle \psi | H_{ij}^{(2)} | \psi \rangle.$$

De plus, $\vec{P}_{ij}^2 / [4(m_i + m_j)]$ est un opérateur défini positif, donc de valeur moyenne également positif

$$\langle \psi | \frac{\vec{P}_{ij}^2}{6(m_i + m_j)} | \psi \rangle \geq 0. \quad (5.20)$$

En vertu du principe variationnel (5.8)

$$\langle \psi | H_{ij}^{(2)} | \psi \rangle \geq E_{ij}^{(2)}(\mu_{ij}), \quad (5.21)$$

où $E_{ij}^{(2)}(\mu_{ij})$ désigne l'énergie de l'état fondamental de l'hamiltonien à deux corps $H_{ij}^{(2)}$. D'où

$$E_0^{(4)} \geq \sum_{i < j=1}^4 E_{ij}^{(2)}(\mu_{ij}). \quad (5.22)$$

Le côté droit de l'inégalité (5.22) est appelé borne inférieure naïve et notée E_{naive} :

$$E_{naive} = E_{12}^{(2)}(\mu_{12}) + E_{13}^{(2)}(\mu_{13}) + E_{14}^{(2)}(\mu_{14}) + E_{23}^{(2)}(\mu_{23}) + E_{24}^{(2)}(\mu_{24}) + E_{34}^{(2)}(\mu_{34}). \quad (5.23)$$

Appliquons maintenant notre résultat au cas des potentiels en loi de puissance¹

$$V^{(ij)}(r_{ij}) = k_{ij} r_{ij}^{-\beta}. \quad (5.24)$$

En faisant appel aux loi d'échelle (1.29), l'expression (5.23) se réduit à

$$\begin{aligned} E_{naive} &= (2\mu_{12})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} (k_{12})^{\frac{2}{2+\beta}} E_{12}^{(2)}(1/2, 1) + (2\mu_{13})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} (k_{13})^{\frac{2}{2+\beta}} E_{13}^{(2)}(1/2, 1) \\ &+ (2\mu_{14})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} (k_{14})^{\frac{2}{2+\beta}} E_{14}^{(2)}(1/2, 1) + (2\mu_{23})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} (k_{23})^{\frac{2}{2+\beta}} E_{23}^{(2)}(1/2, 1) \\ &+ (2\mu_{24})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} (k_{24})^{\frac{2}{2+\beta}} E_{24}^{(2)}(1/2, 1) + (2\mu_{34})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} (k_{34})^{\frac{2}{2+\beta}} E_{34}^{(2)}(1/2, 1). \end{aligned} \quad (5.25)$$

et si on suppose de plus que les interactions sont identiques pour toutes les paires de particules ; même exposant β et même constantes de couplage $k_{ij} = k \quad \forall i, j$, nous obtenons :

$$\begin{aligned} E_{naive} &= k^{\frac{2}{2+\beta}} \left[(2\mu_{12})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} E_{12}^{(2)}(1/2, 1) + (2\mu_{13})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} E_{13}^{(2)}(1/2, 1) + (2\mu_{14})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} E_{14}^{(2)}(1/2, 1) \right. \\ &\left. + (2\mu_{23})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} E_{23}^{(2)}(1/2, 1) + (2\mu_{24})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} E_{24}^{(2)}(1/2, 1) + (2\mu_{34})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} E_{34}^{(2)}(1/2, 1) \right]. \end{aligned} \quad (5.26)$$

où $E_{ij}^{(2)}(1/2, 1)$ représente l'énergie de l'état fondamental du système à 2 corps de masse réduite $\mu_{ij} = 1/2$ et de constante de couplage $\lambda_{ij} = 1$. Notons qu'une masse réduite $\mu = 1/2$ signifie que les deux particules ont même masse $m_1 = m_2 = 1$, c-à-d, $E_0^{(2)}(\mu = 1/2) = E^{(2)}(m_1=1, m_2=1)$

¹ k_{ij} et β doivent être de même signe pour avoir des états liés.

Examinant maintenant le cas des interactions harmoniques :

$$V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) = k_{ij} \vec{r}_{ij}^2. \quad (5.27)$$

On peut se servir du résultat (3.8) du quatrième chapitre pour évaluer la borne inférieure naïve. En tenant compte de (5.15), les expressions des énergies à deux corps intervenant dans (5.23) se réduisent à

$$\begin{aligned} E_{12}^{(2)}(\mu_{12}) &= 3\sqrt{\frac{1}{2\mu_{12}}k_{12}} = \sqrt{\frac{3}{2}\frac{m_1+m_2}{m_1m_2}k_{12}}, & E_{23}^{(2)}(\mu_{23}) &= 3\sqrt{\frac{1}{2\mu_{23}}k_{23}} = \sqrt{\frac{3}{2}\frac{m_2+m_3}{m_2m_3}k_{23}}, \\ E_{13}^{(2)}(\mu_{13}) &= 3\sqrt{\frac{1}{2\mu_{13}}k_{13}} = \sqrt{\frac{3}{2}\frac{m_1+m_3}{m_1m_3}k_{13}}, & E_{24}^{(2)}(\mu_{24}) &= 3\sqrt{\frac{1}{2\mu_{24}}k_{24}} = \sqrt{\frac{3}{2}\frac{m_2+m_4}{m_2m_4}k_{24}}, \\ E_{14}^{(2)}(\mu_{14}) &= 3\sqrt{\frac{1}{2\mu_{14}}k_{14}} = \sqrt{\frac{3}{2}\frac{m_1+m_4}{m_1m_4}k_{14}}, & E_{34}^{(2)}(\mu_{34}) &= 3\sqrt{\frac{1}{2\mu_{34}}k_{34}} = \sqrt{\frac{3}{2}\frac{m_3+m_4}{m_3m_4}k_{34}}, \end{aligned} \quad (5.28)$$

et la borne naïve se simplifie en

$$\begin{aligned} E_{naive}^{(OH)} &= \sqrt{\frac{3}{2}} \left[\sqrt{k_{12} \frac{m_1+m_2}{m_1m_2}} + \sqrt{k_{13} \frac{m_1+m_3}{m_1m_3}} + \sqrt{k_{14} \frac{m_1+m_4}{m_1m_4}} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{k_{23} \frac{m_2+m_3}{m_2m_3}} + \sqrt{k_{24} \frac{m_2+m_4}{m_2m_4}} + \sqrt{k_{34} \frac{m_3+m_4}{m_3m_4}} \right]. \end{aligned} \quad (5.29)$$

Essayons maintenant de tester la qualité de cette borne naïve. Pour cela nous allons comparer la borne naïve avec l'énergie exacte de l'oscillateur harmonique obtenue dans le chapitre précédent. Nous commençons par examiner le cas le plus simple, à savoir, le cas où toutes les masses sont égales, configuration (m, m, m, m) :

Dans ce cas particulier où toutes les masses sont égales $m_i = m \quad \forall i = 1, \dots$, les conditions (4.2), se réduisent à ; $k_{ij} = k \quad \forall i < j = 1, \dots, 4$.

$$k_{12} = k_{13} = k_{14} = k_{23} = k_{24} = k_{34} = k. \quad (5.30)$$

La borne inférieure naïve (5.29) se réduit à son tour à :

$$E_{naive}^{(OH)} = \sqrt{\frac{3}{2}}k \left(6\sqrt{\frac{2}{m}} \right) = 6\sqrt{\frac{3k}{m}}. \quad (5.31)$$

Le rapport entre la borne naïve est la valeur exacte (4.19) pour cette configuration est

$$\frac{E_{naive}^{(OH)}}{E_{exact}^{(OH)}} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{3}{2}} = 0.816.$$

Examinons maintenant l'une des configurations avec deux masses différentes, soit (m, m, M, M) . L'équation (5.29) se réduit à :

$$E_{naive}^{(OH)} = \sqrt{\frac{3}{2}} k \left(\sqrt{\frac{2}{m}} + 4 \sqrt{\frac{m+M}{mM}} + \sqrt{\frac{2}{M}} \right)$$

où, pour simplification, les k_{ij} sont pris égaux ; $k_{ij} = k$.

A titre d'exemple, calculons le rapport entre la borne naïve est la valeur exacte (4.30) pour les valeurs des masses $m = 1$ et $M = 10$:

$$\frac{E_{naive}^{(OH)}}{E_{exact}^{(OH)}} = \frac{7.4179}{8.7307} = 0.8496, \quad (5.32)$$

rapport très proche de l'unité mais pas satisfaisant.

La borne naïve constitue donc une bonne approximation de l'énergie exacte. Le défaut de cette borne inférieure naïve est que le mouvement du centre de masse n'est pas séparé de l'Hamiltonien $H^{(4)}$, ceci d'une part. D'autre part, la valeur moyenne de l'énergie cinétique du centre de masse de chaque paire de particules est approximée par "zéro". Cela affectera forcément la qualité de la borne inférieure naïve. Ceci a motivé le développement d'une autre borne : la borne *inférieure améliorée* qu'on va présenter dans la section suivante.

5.3 Borne inférieure améliorée

La borne inférieure améliorée a comme point de départ la décomposition suivante du terme d'énergie cinétique où l'énergie cinétique du centre du masse du système sera séparée du mouvement relatif :

$$T^{(4)} = \sum_{i=1}^4 \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} = \frac{\tilde{\mathbf{P}}^2}{2\mathbf{M}} + \sum_{i<j=1}^4 \frac{(m_j \vec{p}_i - m_i \vec{p}_j)^2}{2m_i m_j \mathbf{M}}.$$

C'est-à-dire :

$$\begin{aligned}
\frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_4} &= \frac{\tilde{\mathbf{P}}^2}{2\mathbf{M}} + \frac{(m_2\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_2)^2}{2m_1m_2\mathbf{M}} + \frac{(m_3\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_3)^2}{2m_1m_3\mathbf{M}} \\
&+ \frac{(m_4\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_4)^2}{2m_1m_4\mathbf{M}} + \frac{(m_3\vec{p}_2 - m_2\vec{p}_3)^2}{2m_2m_3\mathbf{M}} \\
&+ \frac{(m_4\vec{p}_2 - m_2\vec{p}_4)^2}{2m_2m_4\mathbf{M}} + \frac{(m_4\vec{p}_3 - m_3\vec{p}_4)^2}{2m_3m_4\mathbf{M}}
\end{aligned} \tag{5.33}$$

où $\tilde{\mathbf{P}}^2/(2\mathbf{M})$ désigne l'énergie cinétique du centre de masse et $\mathbf{M} = m_1 + m_2 + m_3 + m_4$ la masse totale. L'Hamiltonien du système peut alors être réécrit comme :

$$\begin{aligned}
H^{(4)} &= \frac{\tilde{\mathbf{P}}^2}{2\mathbf{M}} + \frac{(m_2\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_2)^2}{2m_1m_2\mathbf{M}} + V^{(12)}(\vec{r}_{12}) \\
&+ \frac{(m_3\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_3)^2}{2m_1m_3\mathbf{M}} + V^{(13)}(\vec{r}_{13}) + \frac{(m_4\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_4)^2}{2m_1m_4\mathbf{M}} + V^{(14)}(\vec{r}_{14}) \\
&+ \frac{(m_3\vec{p}_2 - m_2\vec{p}_3)^2}{2m_2m_3\mathbf{M}} + V^{(23)}(\vec{r}_{23}) + \frac{(m_4\vec{p}_2 - m_2\vec{p}_4)^2}{2m_2m_4\mathbf{M}} + V^{(24)}(\vec{r}_{24}) \\
&+ \frac{(m_4\vec{p}_3 - m_3\vec{p}_4)^2}{2m_3m_4\mathbf{M}} + V^{(34)}(\vec{r}_{34}),
\end{aligned} \tag{5.34}$$

$$= \frac{\tilde{\mathbf{P}}^2}{2\mathbf{M}} + \sum_{i<j=1}^4 \tilde{H}_{ij}^{(2)}, \tag{5.35}$$

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

$$\tilde{H}_{ij}^{(2)} = \frac{(m_j\vec{p}_i - m_i\vec{p}_j)^2}{2m_im_j\mathbf{M}} + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}). \quad i < j = 1, \dots, 4. \tag{5.36}$$

Comme

$$\vec{p}_{ij} := \frac{m_j\vec{p}_i - m_i\vec{p}_j}{m_i + m_j}, \quad i < j = 1, \dots, 4. \tag{5.37}$$

est un moment conjugué de \vec{r}_{ij} , il est plus judicieux de réécrire $\tilde{H}_{ij}^{(2)}$ en faisant apparaître explicitement \vec{p}_{ij} (5.13) :

$$\begin{aligned}
\tilde{H}_{ij}^{(2)} &= \frac{(m_i + m_j)^2}{(m_i + m_j)^2} \frac{(m_j \vec{p}_i - m_i \vec{p}_j)^2}{2m_i m_j \mathbf{M}} + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \\
&= \frac{(m_i + m_j)^2}{2m_i m_j \mathbf{M}} \left(\frac{m_j \vec{p}_i - m_i \vec{p}_j}{m_i + m_j} \right)^2 + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \\
&= \frac{\vec{p}_{ij}^2}{2\tilde{\mu}_{ij}} + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij})
\end{aligned} \tag{5.38}$$

où

$$\tilde{\mu}_{ij} = \frac{m_i m_j \mathbf{M}}{(m_i + m_j)^2} \tag{5.39}$$

représente la masse réduite relative à la paire ij . Ou de manière explicite

$$\begin{aligned}
\tilde{\mu}_{12} &= \frac{m_1 m_2 \mathbf{M}}{(m_1 + m_2)^2} & \tilde{\mu}_{23} &= \frac{m_2 m_3 \mathbf{M}}{(m_2 + m_3)^2} \\
\tilde{\mu}_{13} &= \frac{m_1 m_3 \mathbf{M}}{(m_1 + m_3)^2} & \tilde{\mu}_{24} &= \frac{m_2 m_4 \mathbf{M}}{(m_2 + m_4)^2} \\
\tilde{\mu}_{14} &= \frac{m_1 m_4 \mathbf{M}}{(m_1 + m_4)^2} & \tilde{\mu}_{34} &= \frac{m_3 m_4 \mathbf{M}}{(m_3 + m_4)^2}
\end{aligned} \tag{5.40}$$

Soit $|\Psi\rangle$ l'état fondamental normalisé, généralement inconnu, et $E_0^{(3)}$ l'énergie correspondante.

Nous avons

$$E_0^{(4)} = \langle \Psi | H^{(4)} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2\mathbf{M}} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \sum_{i < j=1}^4 \tilde{H}_{ij}^{(2)} | \Psi \rangle. \tag{5.41}$$

Dans l'étude des systèmes de particules il est souvent commode de se placer dans un référentiel lié au centre de masse de l'ensemble des particules. Dans ce cas la vitesse du centre de masse sera nulle. Ce qui se traduit par

$$\langle \Psi | \frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2\mathbf{M}} | \Psi \rangle = 0, \tag{5.42}$$

et en vertu du principe variationnel(5.8)

$$\langle \Psi | \tilde{H}_{ij}^{(2)} | \Psi \rangle \geq E_{ij}^{(2)}(\tilde{\mu}_{ij}), \tag{5.43}$$

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

$$E_0^{(0)} \geq \sum_{i < j=1}^4 E_{ij}^{(2)}(\tilde{\mu}_{ij}). \tag{5.44}$$

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

$$E_{\text{améliorée}} = E_{12}^{(2)}(\tilde{\mu}_{12}) + E_{13}^{(2)}(\tilde{\mu}_{13}) + E_{14}^{(2)}(\tilde{\mu}_{14}) + E_{23}^{(2)}(\tilde{\mu}_{23}) + E_{24}^{(2)}(\tilde{\mu}_{24}) + E_{34}^{(2)}(\tilde{\mu}_{34}). \quad (5.45)$$

Appliquons maintenant notre résultat au cas des potentiels en loi de puissance ($V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) = \lambda_{ij} r_{ij}^\beta$). L'expression (5.45) se réduit à

$$E_{\text{améliorée}} = E_{12}^{(2)}(\tilde{\mu}_{12}) + E_{13}^{(2)}(\tilde{\mu}_{13}) + E_{14}^{(2)}(\tilde{\mu}_{14}) + E_{23}^{(2)}(\tilde{\mu}_{23}) + E_{24}^{(2)}(\tilde{\mu}_{24}) + E_{34}^{(2)}(\tilde{\mu}_{34}). \quad (5.46)$$

En faisant appel aux loi d'échelle (1.29), l'expression (5.45) se réduit à

$$\begin{aligned} E_{\text{améliorée}} = & (2\tilde{\mu}_{12})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} (k_{12})^{\frac{2}{2+\beta}} E_{12}^{(2)}(1/2, 1) + (2\tilde{\mu}_{13})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} (k_{13})^{\frac{2}{2+\beta}} E_{13}^{(2)}(1/2, 1) \\ & + (2\tilde{\mu}_{14})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} (k_{14})^{\frac{2}{2+\beta}} E_{14}^{(2)}(1/2, 1) + (2\tilde{\mu}_{23})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} (k_{23})^{\frac{2}{2+\beta}} E_{23}^{(2)}(1/2, 1) \\ & + (2\tilde{\mu}_{24})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} (k_{24})^{\frac{2}{2+\beta}} E_{24}^{(2)}(1/2, 1) + (2\tilde{\mu}_{34})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} (k_{34})^{\frac{2}{2+\beta}} E_{34}^{(2)}(1/2, 1) \end{aligned} \quad (5.47)$$

où les masses réduites $\tilde{\mu}_{ij}$ sont données pour cette borne améliorée par (5.40), et si on suppose de plus que les interactions sont identiques pour toutes les paires de particules ; même exposant β et même constantes de couplage $k_{ij} = k \quad \forall i, j$, nous obtenons :

$$\begin{aligned} E_{\text{naive}} = & k^{\frac{2}{2+\beta}} \left[(2\tilde{\mu}_{12})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} E_{12}^{(2)}(1/2, 1) + (2\tilde{\mu}_{13})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} E_{13}^{(2)}(1/2, 1) + (2\tilde{\mu}_{14})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} E_{14}^{(2)}(1/2, 1) \right. \\ & \left. + (2\tilde{\mu}_{23})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} E_{23}^{(2)}(1/2, 1) + (2\tilde{\mu}_{24})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} E_{24}^{(2)}(1/2, 1) + (2\tilde{\mu}_{34})^{\frac{-\beta}{2+\beta}} E_{34}^{(2)}(1/2, 1) \right]. \end{aligned} \quad (5.48)$$

où $E_{ij}^{(2)}(1/2, 1)$ représente l'énergie de l'état fondamental du système à 2 corps de masse réduite $\mu_{ij} = 1/2$ et de constante de couplage $k_{ij} = 1$.

Examinant maintenant le cas de l'oscillateur harmonique à 4 corps où le potentiel à deux corps est de la forme ($V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) = k_{ij} r_{ij}^2$). Pour évaluer la borne inférieure améliorée on utilise le résultat (3.8). En tenant compte de (5.40), les expressions des énergies à deux corps intervenant

dans (5.45) se réduisent à

$$\begin{aligned}
E_{12}^{(2)}(\tilde{\mu}_{12}) &= 3\sqrt{\frac{1}{2\tilde{\mu}_{12}}k_{12}} = 3\sqrt{\frac{k_{12}(m_1+m_2)^2}{2\mathbf{M}m_1m_2}} & E_{23}^{(2)}(\tilde{\mu}_{23}) &= 3\sqrt{\frac{1}{2\tilde{\mu}_{23}}k_{23}} = 3\sqrt{\frac{k_{23}(m_2+m_3)^2}{2\mathbf{M}m_2m_3}} \\
E_{13}^{(2)}(\tilde{\mu}_{13}) &= 3\sqrt{\frac{1}{2\tilde{\mu}_{13}}k_{13}} = 3\sqrt{\frac{k_{13}(m_1+m_3)^2}{2\mathbf{M}m_1m_3}} & E_{24}^{(2)}(\tilde{\mu}_{24}) &= 3\sqrt{\frac{1}{2\tilde{\mu}_{24}}k_{24}} = 3\sqrt{\frac{k_{24}(m_2+m_4)^2}{2\mathbf{M}m_2m_4}} \\
E_{14}^{(2)}(\tilde{\mu}_{14}) &= 3\sqrt{\frac{1}{2\tilde{\mu}_{14}}k_{14}} = 3\sqrt{\frac{k_{14}(m_1+m_4)^2}{2\mathbf{M}m_1m_4}}, & E_{34}^{(2)}(\tilde{\mu}_{34}) &= 3\sqrt{\frac{1}{2\tilde{\mu}_{34}}k_{34}} = 3\sqrt{\frac{k_{34}(m_3+m_4)^2}{2\mathbf{M}m_3m_4}}.
\end{aligned} \tag{5.49}$$

La borne améliorée se simplifie en

$$\begin{aligned}
E_{\text{améliorée}}^{(OH)} &= 3\sqrt{\frac{1}{\mathbf{M}}} \left[\sqrt{\frac{k_{12}(m_1+m_2)^2}{2m_1m_2}} + \sqrt{\frac{k_{13}(m_1+m_3)^2}{2m_1m_3}} + \sqrt{\frac{k_{14}(m_1+m_4)^2}{2m_1m_4}} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{\frac{k_{23}(m_2+m_3)^2}{2m_2m_3}} + \sqrt{\frac{k_{24}(m_2+m_4)^2}{2m_2m_4}} + \sqrt{\frac{k_{34}(m_3+m_4)^2}{2m_3m_4}} \right]. \tag{5.50}
\end{aligned}$$

Nous allons maintenant comparer la borne améliorée avec l'énergie exacte de l'oscillateur harmonique. Nous allons examiner deux configurations particulières de masse, à savoir (m, m, m, m) et (m, m, M, M) .

5.3.1 Configuration (m, m, m, m)

Lorsque toutes les masses du système sont égales $m_i = m \quad \forall i = 1, \dots, 4$ et dans les conditions où $k_{ij} = k \quad \forall i < j = 1, \dots, 4$, l'équation (5.50) se réduit à :

$$E_{\text{améliorée}}^{(OH)} = 3\sqrt{\frac{1}{4m}} \left(6\sqrt{2k} \right) = 9\sqrt{\frac{2k}{m}} \tag{5.51}$$

qui est identique à l'énergie exacte (4.19). La borne inférieure améliorée est dite saturée dans le cas des forces harmoniques pour la configuration (m, m, m, m) .

5.3.2 Configuration (m, m, M, M)

Lorsque $m_1 = m_2 = m$ et $m_3 = m_4 = M$, les conditions (4.2) s'écrivent :

$$k_{12} = k \quad , \quad k_{13} = k_{23} = K \quad \text{et} \quad k_{34} = k'$$

la borne améliorée (5.50) se réduit dans ce cas à :

$$E_{\text{améliorée}}^{(OH)} = 3\sqrt{\frac{1}{2m+2M}} \left(\sqrt{2k} + 4\sqrt{\frac{K(m+M)^2}{2mM}} + \sqrt{2k'} \right).$$

Toujours pour simplifier on va supposer que $k_{ij} = k = k' = K$, donc

$$E_{\text{améliorée}}^{(OH)} = 3\sqrt{\frac{k}{2m+2M}} \left(\sqrt{2} + 4\sqrt{\frac{(m+M)^2}{2mM}} + \sqrt{2} \right).$$

A titre d'exemple, calculons numériquement le rapport entre la borne améliorée est la valeur exacte (4.30) pour $m = 1$ et $M = 2$ et prenons l'unité comme valeur pour toutes les constantes de couplage $k_{ij} = k = k' = K = 1$

$$\frac{E_{\text{améliorée}}^{(OH)}}{E_{\text{exact}}^{(OH)}} = \frac{10.813}{10.917} = 0.990. \quad (5.52)$$

rapport très proche de l'unité. Par contre si on prend pour les valeurs des masses $m = 1$ et $M = 10$ on trouve

$$\frac{E_{\text{améliorée}}^{(OH)}}{E_{\text{exact}}^{(OH)}} = \frac{8.1019}{8.7307} = 0.928 \quad (5.53)$$

On constate donc que lorsque la diversité des valeurs des masses augmente, la borne améliorée s'éloigne de la valeur exacte et que la borne améliorée ne peut s'égaliser avec la valeur exacte que lorsque $m = M$. Donc la propriété de saturabilité de la borne améliorée, dans le cas des forces harmoniques ne peut être satisfaite que lorsque toutes les masses du système sont égales, bien sûr toujours dans les condition (5.30).

5.4 Borne inférieure optimisée

Une nouvelle borne inférieure a été développée dans le but qu'elle sera toujours saturée dans le cas des forces harmoniques et pour toutes les configurations possibles, la borne inférieure optimisée en l'occurrence.

Considérons un système à quatre corps d'hamiltonien

$$H^{(4)} = \sum_{i=1}^4 \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 + \sum_{i<j=1}^4 V_{ij}(\vec{r}_{ij}), \quad (5.54)$$

Notre point de départ sera la décomposition suivante

$$\sum_{i=1}^4 \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i^2 = \left(\sum_{j=1}^4 b_j \vec{p}_j \right) \left(\sum_{i=1}^4 \vec{p}_i \right) + \sum_{i<j=1}^4 a_{ij} \vec{p}_{ij}^2, \quad (5.55)$$

de la partie cinétique de l'Hamiltonien impliquant les paramètres b_j , $j = 1, 2, 3$, et les paramètres nécessairement positifs a_{ij} , $i < j = 1, 2, 3$ appelé paramètre de masse. \vec{p}_{ij} est une combinaison linéaire des différentes impulsions \vec{p}_k

$$\vec{p}_{ij} = \sum_{k=1}^4 \frac{1}{2} x_{ij,k} \vec{p}_k. \quad (5.56)$$

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

$$[r_{ij,k}, p_{ij,\ell}] = i\hbar \delta_{k,\ell} \quad k, \ell = 1, 2, 3, \quad (5.57)$$

où $r_{ij,k}$ et $p_{ij,\ell}$ représentent respectivement la k -eme composante de \vec{r}_{ij} et la ℓ eme composante de \vec{p}_{ij} . En remplaçant les \vec{p}_{ij} par leurs expressions (5.56), l'équation (5.55) peut être réécrite

comme

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2m_1}\vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m_2}\vec{p}_2^2 + \frac{1}{2m_3}\vec{p}_3^2 + \frac{1}{2m_4}\vec{p}_4^2 &= (b_1\vec{p}_1 + b_2\vec{p}_2 + b_3\vec{p}_3 + b_4\vec{p}_4) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4) \\
&+ \frac{a_{12}}{4} (x_{12,1}\vec{p}_1 + x_{12,2}\vec{p}_2 + x_{12,3}\vec{p}_3 + x_{12,4}\vec{p}_4)^2 \\
&+ \frac{a_{13}}{4} (x_{13,1}\vec{p}_1 + x_{13,2}\vec{p}_2 + x_{13,3}\vec{p}_3 + x_{13,4}\vec{p}_4)^2 \\
&+ \frac{a_{14}}{4} (x_{14,1}\vec{p}_1 + x_{14,2}\vec{p}_2 + x_{14,3}\vec{p}_3 + x_{14,4}\vec{p}_4)^2 \\
&+ \frac{a_{23}}{4} (x_{23,1}\vec{p}_1 + x_{23,2}\vec{p}_2 + x_{23,3}\vec{p}_3 + x_{23,4}\vec{p}_4)^2 \\
&+ \frac{a_{24}}{4} (x_{24,1}\vec{p}_1 + x_{24,2}\vec{p}_2 + x_{24,3}\vec{p}_3 + x_{24,4}\vec{p}_4)^2 \\
&+ \frac{a_{34}}{4} (x_{34,1}\vec{p}_1 + x_{34,2}\vec{p}_2 + x_{34,3}\vec{p}_3 + x_{34,4}\vec{p}_4)^2 .
\end{aligned} \tag{5.58}$$

Nous pouvons, sans perte de généralité, prendre $x_{ij,i}$ égal à 1 par une redéfinition des a_{ij} et des $x_{ij,k}$ pour $k \neq i = 1, 2, \dots, 4$. Ensuite, en imposant les relations de commutation canoniques, équation (5.57), on aboutit à $x_{ij,j} = -1$. En effet,

$$\begin{aligned}
[\vec{r}_{ij}, \vec{p}_{ij}] &= \left[\vec{r}_{ij}, \sum_{k=1}^4 \frac{1}{2} x_{ij,k} \vec{p}_k \right] = \sum_{k=1}^4 \frac{1}{2} x_{ij,k} [\vec{r}_i - \vec{r}_j, \vec{p}_k] \\
&= \sum_{k=1}^4 \frac{1}{2} x_{ij,k} [\vec{r}_i, \vec{p}_k] - \sum_{k=1}^4 \frac{1}{2} x_{ij,k} [\vec{r}_j, \vec{p}_k] \\
&= \sum_{k=1}^4 \frac{1}{2} x_{ij,k} i\hbar \delta_{ik} - \sum_{k=1}^4 \frac{1}{2} x_{ij,k} i\hbar \delta_{jk} \\
&= i\hbar \left(\frac{1}{2} x_{ij,i} - \frac{1}{2} x_{ij,j} \right)
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé la définition de δ de Kronecker:

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0 & si \quad n \neq m \\ 1 & si \quad n = m \end{cases} .$$

Donc en fixant $x_{ij,i}$ à 1, on détermine $x_{ij,j}$

$$\begin{aligned} i\hbar \left(\frac{1}{2}x_{ij,i} - \frac{1}{2}x_{ij,j} \right) &= i\hbar \Rightarrow \frac{1}{2} - \frac{1}{2}x_{ij,j} = 1 \\ &\Rightarrow x_{ij,j} = -1. \end{aligned}$$

Il nous reste deux paramètres $x_{ij,k}$ pour chaque paire de particules, 12 paramètres en tous.

Dans ce qui suit nous allons étudier en détail les configurations suivantes :

- Systèmes à quatre corps ayant toutes les masses égales : Configuration (m, m, m, m) .
- Systèmes à quatre corps avec deux masses différentes : Configurations (m, m, m, M) et (m, m, M, M) .
- Systèmes à quatre corps avec trois masses différentes : Configuration (m, m, \mathbf{m}, M) .

On remarquera que les paramètres b_j , a_{ij} , et $x_{ij,k}$ sont contraints par des relations obtenues en identifiant les deux membres de l'équation (5.58). Plus précisément, l'identification du membre de gauche de l'équation (5.58) avec son membre de droite nous fournit $4 + 4(4 - 1)/2$ contraintes. Si on remarque que le nombre des b_j est de 4 et que le nombre des a_{ij} est de $4(4 - 1)/2$, ces contraintes peuvent être utilisées pour éliminer les b_j et les a_{ij} en faveur des $x_{ij,k}$. Dorénavant, les b_j et les a_{ij} seront considérés comme des fonctions implicites des $x_{ij,k}$. La décomposition de l'Hamiltonien, (5.54), correspondant à (5.58) est

$$H^{(4)} = \left(\sum_{j=1}^4 b_j \vec{p}_j \right) \left(\sum_{i=1}^4 \vec{p}_i \right) + \sum_{i < j=1}^4 \left(\frac{a_{ij}}{4} \left(\sum_{k=1}^4 x_{ij,k} \vec{p}_k \right)^2 + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \right). \quad (5.59)$$

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

$$\begin{aligned} E &= \langle \Psi | H | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \left(\sum_{j=1}^4 b_j \vec{p}_j \right) \left(\sum_{i=1}^4 \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle + \sum_{i < j=1}^4 \langle \Psi | \left(\frac{a_{ij}}{4} \left(\sum_{k=1}^4 x_{ij,k} \vec{p}_k \right)^2 + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \right) | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (5.60)$$

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

$$\left(\sum_{i=1}^4 \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle = \vec{0}, \quad (5.61)$$

et par conséquent, la contribution du premier terme du membre de droite de l'équation (5.60) est nulle. Il en résulte

$$E = \sum_{i < j=1}^4 \langle \Psi | \left(\frac{a_{ij}}{4} \left(\sum_{k=1}^4 x_{ij,k} \vec{p}_k \right)^2 + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \right) | \Psi \rangle. \quad (5.62)$$

Mais, en vertu du principe variationnel

$$\langle \Psi | \left(\frac{a_{ij}}{4} \left(\sum_{k=1}^4 x_{ij,k} \vec{p}_k \right)^2 + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) \right) | \Psi \rangle \geq E_{ij}^{(2)}[a_{ij}(x_{kl,m})], \quad (5.63)$$

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

$$H_{ij}^{(2)}[a_{ij}(x_{kl,m})] = \frac{a_{ij}}{4} \left(\sum_{k=1}^4 x_{ij,k} \vec{p}_k \right)^2 + V^{(ij)}(\vec{r}_{ij}). \quad (5.64)$$

Il s'ensuit que

$$E \geq \sum_{i < j=1}^4 E_{ij}^{(2)}[a_{ij}(x_{kl,m})]. \quad (5.65)$$

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

$$\sum_{i < j=1}^4 E_{ij}^{(2)}[a_{ij}(x_{kl,m})], \quad (5.66)$$

pour chaque jeu de valeurs des paramètres $x_{kl,m}$. La meilleur de ces bornes correspond évidemment aux valeurs des $x_{kl,m}$ qui maximisent $\sum_{i < j=1}^4 E_{ij}^{(2)}[a_{ij}(x_{kl,m})]$.

$$E_{\text{optimisée}} := \max_{x_{kl,m}} \sum_{i < j=1}^4 E_{ij}^{(2)}[a_{ij}(x_{kl,m})] \quad (5.67)$$

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

dernière expression se réduit dans le cas des potentiels en loi de puissance () en

$$\begin{aligned}
E_{\text{optimisée}} : &= \max_{x_{kl,m}} \left[k_{12}^{\frac{2}{2+\beta}} (a_{12}(x_{kl,m}))^{\frac{\beta}{2+\beta}} E_{12}^{(2)}(1/2, 1) + k_{13}^{\frac{2}{2+\beta}} (a_{13}(x_{kl,m}))^{\frac{\beta}{2+\beta}} E_{13}^{(2)}(1/2, 1) \right. \\
&+ k_{14}^{\frac{2}{2+\beta}} (a_{14}(x_{kl,m}))^{\frac{\beta}{2+\beta}} E_{14}^{(2)}(1/2, 1) + k_{23}^{\frac{2}{2+\beta}} (a_{23}(x_{kl,m}))^{\frac{\beta}{2+\beta}} E_{23}^{(2)}(1/2, 1) \\
&\left. + k_{24}^{\frac{2}{2+\beta}} (a_{24}(x_{kl,m}))^{\frac{\beta}{2+\beta}} E_{24}^{(2)}(1/2, 1) + k_{34}^{\frac{2}{2+\beta}} (a_{34}(x_{kl,m}))^{\frac{\beta}{2+\beta}} E_{34}^{(2)}(1/2, 1) \right] \quad (5.68)
\end{aligned}$$

où $E_{34}^{(2)}(1/2, 1)$ représente l'énergie de l'état fondamental d'un système à deux corps de masses égales à l'unité (réduite égale à 1/2) en interaction caractérisée par un potentiel en loi de puissance $V^{(ij)}(r_{ij}) = \text{sign}(\beta)r_{ij}^{\beta}$, c'est à dire, de constante de couplage égale, en valeur absolue, à l'unité ($|\text{sign}(\beta)| = 1$).

Dans le but de réduire l'écriture on pose :

$$\begin{array}{lll}
x_{12,3} = x & x_{14,2} = r & x_{24,1} = h \\
x_{12,4} = y & x_{14,3} = v & x_{24,3} = j \\
x_{13,2} = z & x_{23,1} = s & x_{34,1} = l \\
x_{13,4} = t & x_{23,4} = w & x_{34,2} = g .
\end{array}$$

Avec cette notation, la décomposition (5.58) se réduit à

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2m_1}\vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m_2}\vec{p}_2^2 + \frac{1}{2m_3}\vec{p}_3^2 + \frac{1}{2m_4}\vec{p}_4^2 &= (b_1\vec{p}_1 + b_2\vec{p}_2 + b_3\vec{p}_3 + b_4\vec{p}_4) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4) \\
&+ \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + x\vec{p}_3 + y\vec{p}_4)^2 + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_1 + z\vec{p}_2 - \vec{p}_3 + t\vec{p}_4)^2 \\
&+ \frac{a_{14}}{4} (\vec{p}_1 + r\vec{p}_2 + v\vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2 + \frac{a_{23}}{4} (s\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_3 + w\vec{p}_4)^2 \\
&+ \frac{a_{24}}{4} (h\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + j\vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2 + \frac{a_{34}}{4} (l\vec{p}_1 + g\vec{p}_2 + \vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2 .
\end{aligned} \quad (5.69)$$

5.4.1 Configuration (m, m, m, m)

Toujours dans les conditions (4.2), le système est invariant sous toute permutation des quatre particules. Il s'ensuit qu'on a un seul a_{ij} indépendant, un seul paramètre b_i et aucun paramètre $x_{ij,k}$ indépendant

$$\begin{aligned}
a_{12} &= a_{13} = a_{14} = a_{23} = a_{24} := a \\
b_1 &= b_2 = b_3 = b_4 := b
\end{aligned}$$

et

$$x = y = z = t = r = v = s = w = h = j = l = g = 0.$$

L'équation (5.69) s'écrit dans ce cas comme

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2m}\vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m}\vec{p}_2^2 + \frac{1}{2m}\vec{p}_3^2 + \frac{1}{2m}\vec{p}_4^2 &= (b\vec{p}_1 + b\vec{p}_2 + b\vec{p}_3 + b\vec{p}_4) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4) \\
&+ \frac{a}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 + \frac{a}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_3)^2 + \frac{a}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_4)^2 \\
&+ \frac{a}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3)^2 + \frac{a}{4} (\vec{p}_2 - \vec{p}_4)^2 + \frac{a}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2 .
\end{aligned}$$

En égalisant, terme à terme, les deux membres de cette dernière équation on trouve

$$\frac{1}{2m}\vec{p}_i^2 = \frac{1}{4}(3a + 4b)\vec{p}_i^2 \quad \text{pour } i = 1, \dots, 4 \quad (5.70)$$

et

$$0 = -\frac{1}{2}(a - 4b)\vec{p}_i\vec{p}_j \quad \text{pour } i < j = 1, \dots, 4. \quad (5.71)$$

De l'équation (5.71) on tire b puis on reporte dans (5.70) pour déterminer a . On trouve

$$a = \frac{1}{2m}$$

La borne inférieure optimisée se calcule dans ce cas sans aucun processus d'optimisation par

$$\begin{aligned}
E_{\text{optimisée}} &= \sum_{i < j = 1}^4 E_{ij}^{(2)}[a] \\
&= 6E_{ij}^{(2)}[a]
\end{aligned}$$

Cette expression se réduit dans le cas des potentiels en loi de puissance en

$$E_{\text{optimisée}} := 6k^{\frac{2}{2+\beta}} (a)^{\frac{\beta}{2+\beta}} E^{(2)}(1/2, 1),$$

et dans le cas des forces harmoniques en

$$E_{\text{optimisée}} = 6\sqrt{k}\sqrt{\frac{1}{2m}}3$$

qui n'est d'autre que l'énergie exacte de l'oscillateur harmonique à 4 corps de masses égales (4.19). On dit que la borne inférieure optimisée est saturée dans le cas des forces harmoniques lorsque toutes les masses du système sont égales.

5.4.2 Configuration (m, m, m, M)

Sans perte de généralité, on peut supposer que les trois première particules ont des masses égales et la quatrième avec une masse différente. Dans ce cas, le système est invariant sous la permutation des trois particules de même masse. De la symétrie de permutations des particules identiques on doit avoir seulement deux paramètres de masses a_{ij} indépendants :

$$a_{12} = a_{13} = a_{23}$$

$$a_{14} = a_{24} = a_{34}$$

et

$$x = y = z = t = s = w = 0.$$

Il nous reste donc un seul paramètre variationnel

$$r = v = h = j = l = g.$$

En égalisant des deux membres, terme à terme, de l'équation (5.69), on trouve :

$$a_{12} = a_{13} = a_{23} = \frac{M(r+5)(r+1) - m(r-1)^2}{2Mm(r+2)^2},$$

$$a_{14} = a_{24} = a_{34} = \frac{M+3m}{2Mm(r+2)^2}.$$

La borne inférieure optimisée se calcule dans ce cas par la formule

$$\begin{aligned}
E_{\text{optimisée}} &= \max_r \left[E_{12}^{(2)}[a_{12}(r)] + E_{13}^{(2)}[a_{13}(r)] + E_{14}^{(2)}[a_{14}(r)] \right. \\
&\quad \left. + E_{23}^{(2)}[a_{23}(r)] + E_{24}^{(2)}[a_{24}(r)] + E_{34}^{(2)}[a_{34}(r)] \right] \\
&= 3 \max_r \left(E_{12}^{(2)}[a_{12}(r)] + E_{14}^{(2)}[a_{14}(r)] \right)
\end{aligned}$$

qui se réduit dans le cas de potentiels en loi de puissances (5.68)

$$E_{\text{optimisée}} = \max_r \left[3k_{12}^{\frac{2}{2+\beta}} (a_{12}(r))^{\frac{\beta}{2+\beta}} + 3k_{14}^{\frac{2}{2+\beta}} (a_{14}(r))^{\frac{\beta}{2+\beta}} \right] E^{(2)}(1/2, 1) \quad (5.72)$$

ou encore, de manière plus explicite,

$$\begin{aligned}
E_{\text{optimisée}} &= 3 \max_r \left[k_{12}^{\frac{2}{2+\beta}} \left(\frac{M(r+5)(r+1) - m(r-1)^2}{2Mm(r+2)^2} \right)^{\frac{\beta}{2+\beta}} \right. \\
&\quad \left. + k_{14}^{\frac{2}{2+\beta}} \left(\frac{M+3m}{2Mm(r+2)^2} \right)^{\frac{\beta}{2+\beta}} \right] E^{(2)}(1/2, 1)
\end{aligned}$$

Dans le cas des force harmonique, $\beta = 2$ et $E^{(2)}(1/2, 1) = 3$, on a :

$$E_{\text{optimisée}} = 3 \max_r \left(3 \sqrt{k_{12} \frac{M(r+5)(r+1) - m(r-1)^2}{2mM(r+2)^2}} + 3 \sqrt{k_{14} \frac{M+3m}{2Mm(r+2)^2}} \right) \quad (5.73)$$

où la maximisation porte sur un seul paramètre r .

5.4.3 Configuration (m, m, M, M)

L'invariance sous la permutation des particules de même masse permet de réécrire la décomposition sous la forme suivante

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2m}\vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m}\vec{p}_2^2 + \frac{1}{2M}\vec{p}_3^2 + \frac{1}{2M}\vec{p}_4^2 &= (b_1\vec{p}_1 + b_1\vec{p}_2 + b_3\vec{p}_3 + b_3\vec{p}_4) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4) \\
&+ \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_1 + z\vec{p}_2 - \vec{p}_3 + t\vec{p}_4)^2 \\
&+ \frac{a_{14}}{4} (\vec{p}_1 + z\vec{p}_2 + t\vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2 + \frac{a_{23}}{4} (z\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_3 + t\vec{p}_4)^2 \\
&+ \frac{a_{24}}{4} (z\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + t\vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2 + \frac{a_{34}}{4} (\vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2. \quad (5.74)
\end{aligned}$$

la symétrie du problème exige que $x = y = 0$ et $l = g = 0$. Il s'ensuit qu'on a deux paramètres variationnels $r = z = s = h$ et $v = t = w = j$ et 3 expressions différentes pour les a_{ij} à savoir a_{12} , $a_{13} = a_{14} = a_{23} = a_{24}$ et a_{34} . Avec cette notation, et en égalisant terme à terme les deux membre de (5.74) on peut éliminer les b_i et exprimer les a_{ij} en fonction de r et v .

En effet, pour les termes en \vec{p}_i^2 on trouve

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2m}\vec{p}_1^2 &= \frac{1}{4}\vec{p}_1^2 (4b_1 + a_{12} + 2a_{13} + 2z^2a_{13}) \\
&\rightarrow \frac{1}{2m} = \frac{1}{4} (4b_1 + a_{12} + 2a_{13} + 2z^2a_{13}) \quad (5.75)
\end{aligned}$$

et une expression similaire pour \vec{p}_2^2 . De même, on trouve pour \vec{p}_3^2 et \vec{p}_4^2

$$\frac{1}{2M} = \frac{1}{4} (4b_3 + 2a_{13} + a_{34} + 2t^2a_{13}) . \quad (5.76)$$

Les termes croisés (en $\vec{p}_i \cdot \vec{p}_j$ $i \neq j$) doivent s'annuler :

$$0 = 4b_1 - a_{12} + 4za_{13} \quad (5.77)$$

pour $\vec{p}_1 \cdot \vec{p}_2$,

$$0 = -4b_3 + a_{34} + 4ta_{13} \quad (5.78)$$

pour $\vec{p}_3 \cdot \vec{p}_4$ et

$$0 = 2b_1 + 2b_3 + a_{13} (z + 1) (t - 1) \quad (5.79)$$

pour $\vec{p}_1 \cdot \vec{p}_3$, $\vec{p}_1 \cdot \vec{p}_4$, $\vec{p}_2 \cdot \vec{p}_3$ et $\vec{p}_2 \cdot \vec{p}_4$.

On a donc un système de 5 équations (5.75-5.79) à 5 inconnues b_1 , b_3 , a_{12} , a_{13} et a_{34} . Les variables t et z sont considéré comme des paramètres libres. En éliminant b_1 et b_3 de ce système on trouve un nouveau système de 3 équations à 3 inconnues, a_{12} , a_{13} et a_{34}

$$2a_{12} + 2a_{13}(z-1)^2 = \frac{2}{m} \quad (5.80)$$

$$\frac{1}{2}a_{12} + a_{13}(-t+z-tz+t^2+z^2+3) + \frac{1}{2}a_{34} = \frac{1}{M} + \frac{1}{m} \quad (5.81)$$

$$2a_{13}(t+1)^2 + 2a_{34} = \frac{2}{M}. \quad (5.82)$$

Système que l'on peut écrire sous forme matricielle comme

$$\begin{pmatrix} 2 & 2(z-1)^2 & 0 \\ \frac{1}{2} & (-t+z-tz+t^2+z^2+3) & \frac{1}{2} \\ 0 & 2(t+1)^2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ a_{34} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{m} \\ \frac{1}{M} + \frac{1}{m} \\ \frac{2}{M} \end{pmatrix}. \quad (5.83)$$

On peut donc déterminer a_{12} , a_{13} et a_{34} en inversant la matrice

$$A := \begin{pmatrix} 2 & 2(z-1)^2 & 0 \\ \frac{1}{2} & (-t+z-tz+t^2+z^2+3) & \frac{1}{2} \\ 0 & 2(t+1)^2 & 2 \end{pmatrix}. \quad (5.84)$$

La borne inférieure optimisée se calcule dans ce cas par la formule

$$E_{\text{optimisée}} = \max_{\{z,t\}} \left[E_{12}^{(2)}(a_{12}(z,t)) + 4E_{13}^{(2)}(a_{13}(z,t)) + E_{34}^{(2)}(a_{34}(x,y,z)) \right], \quad (5.85)$$

où la maximisation porte sur deux paramètres z et t .

5.4.4 Configuration (m, m, \mathbf{m}, M)

Dans cette configuration trois valeurs différentes des masses sont impliquées. Sans perte de généralité, on peut supposer que les deux premières particules sont de même masse $m_1 = m_2 := m$ et la troisième et la quatrième particules avec des masses différentes $m_3 = \mathbf{m}$ et $m_4 = M$. Dans ce cas, le système est invariant sous la permutation des 2 premières particules et on doit

avoir quatre paramètres de masses a_{ij} indépendants :

$$\begin{aligned} a_{12} \\ a_{13} &= a_{23} \\ a_{14} &= a_{24} \\ a_{34} \end{aligned}$$

et

$$b_1 = b_2 := b .$$

Il nous reste donc 5 paramètres variationnels

$$\begin{aligned} z &= t \quad , \quad s = w \\ r &= h \quad , \quad v = j \\ l &= g, \end{aligned}$$

avec

$$x = y = 0 .$$

Avec ces contraintes, la décomposition (5.58) devient

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m} \vec{p}_2^2 + \frac{1}{2\mathbf{m}} \vec{p}_3^2 + \frac{1}{2M} \vec{p}_4^2 &= (b_1 \vec{p}_1 + b_1 \vec{p}_2 + b_3 \vec{p}_3 + b_4 \vec{p}_4) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4) \\ &+ \frac{a_{12}}{4} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 + \frac{a_{13}}{4} (\vec{p}_1 + z \vec{p}_2 - \vec{p}_3 + t \vec{p}_4)^2 \\ &+ \frac{a_{14}}{4} (\vec{p}_1 + h \vec{p}_2 + v \vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2 + \frac{a_{13}}{4} (z \vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_3 + t \vec{p}_4)^2 \\ &+ \frac{a_{14}}{4} (h \vec{p}_1 + \vec{p}_2 + v \vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2 + \frac{a_{34}}{4} (l \vec{p}_1 + l \vec{p}_2 + \vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2 . \end{aligned} \tag{5.86}$$

En égalisant, terme à terme, les deux membres de l'équation précédente, on trouve deux équations identiques,

$$\frac{1}{2m} = \frac{1}{4} (a_{14} h^2 + a_{34} l^2 + a_{13} z^2 + 4b + a_{12} + a_{13} + a_{14}) , \tag{5.87}$$

pour les termes en \vec{p}_1^2 et \vec{p}_2^2 . Pour les termes en \vec{p}_3^2 et \vec{p}_4^2 on trouve, respectivement,

$$\frac{1}{2\mathbf{m}} = \frac{1}{4} (2a_{14}v^2 + 4b_3 + 2a_{13} + a_{34}) \quad (5.88)$$

$$\frac{1}{2M} = \frac{1}{4} (2a_{13}t^2 + 4b_4 + 2a_{14} + a_{34}). \quad (5.89)$$

Pour les termes croisés en $\vec{p}_1 \cdot \vec{p}_2$, $\vec{p}_1 \cdot \vec{p}_3$, $\vec{p}_1 \cdot \vec{p}_4$ et $\vec{p}_2 \cdot \vec{p}_3$ qui sont absents dans le membre de gauche de l'équation (5.86), les égalités suivantes doivent être satisfaites

$$0 = \frac{1}{2}a_{34}l^2 + 2b - \frac{1}{2}a_{12} + ha_{14} + za_{13} \quad (5.90)$$

$$0 = b + b_3 - \frac{1}{2}a_{13} + \frac{1}{2}la_{34} + \frac{1}{2}va_{14} - \frac{1}{2}za_{13} + \frac{1}{2}hva_{14} \quad (5.91)$$

$$0 = b + b_4 - \frac{1}{2}a_{14} - \frac{1}{2}ha_{14} - \frac{1}{2}la_{34} + \frac{1}{2}ta_{13} + \frac{1}{2}tza_{13} \quad (5.92)$$

$$0 = b_3 + b_4 - \frac{1}{2}a_{34} - ta_{13} - va_{14} \quad (5.93)$$

Les équations (5.87) à (5.93) constituent un système de 7 équations linéaires à 7 inconnues b , b_3 , b_4 , a_{12} , a_{13} , a_{14} et a_{34} , que l'on peut résoudre facilement. Nous commençons par éliminer b , b_3 , b_4 en utilisant les 3 équations. Il nous reste 4 équations à 4 inconnues a_{12} , a_{13} , a_{14} et a_{34} , système qui peut être réécrit sous forme matricielle comme

$$\begin{pmatrix} 2 & (z-1)^2 & (h-1)^2 & 0 \\ 1 & (z+1)^2 + 4 & (h-v)^2 + (v-1)^2 & (l-1)^2 \\ 1 & (t-1)^2 + (t-z)^2 & (h+1)^2 + 4 & (l+1)^2 \\ 0 & (t+1)^2 & (v+1)^2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ a_{14} \\ a_{34} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{m} \\ \frac{2}{m} + \frac{2}{\mathbf{m}} \\ \frac{2}{m} + \frac{2}{M} \\ \frac{1}{\mathbf{m}} + \frac{1}{M} \end{pmatrix}. \quad (5.94)$$

Les paramètres de masse a_{12} , a_{13} , a_{14} et a_{34} peuvent obtenus par

$$\begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ a_{14} \\ a_{34} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & (z-1)^2 & (h-1)^2 & 0 \\ 1 & (z+1)^2 + 4 & (h-v)^2 + (v-1)^2 & (l-1)^2 \\ 1 & (t-1)^2 + (t-z)^2 & (h+1)^2 + 4 & (l+1)^2 \\ 0 & (t+1)^2 & (v+1)^2 & 2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{2}{m} \\ \frac{2}{m} + \frac{2}{\mathbf{m}} \\ \frac{2}{m} + \frac{2}{M} \\ \frac{1}{\mathbf{m}} + \frac{1}{M} \end{pmatrix}. \quad (5.95)$$

Les variables z , t , h , v , et l sont considérées comme des paramètres variationnels.

La borne inférieure optimisée pour l'énergie du niveau fondamental du système à 4 corps pour la configuration (m, m, m_3, m_4) sera donc obtenue par la formule

$$E_{\text{optimisée}} = \max_{\{z,t,h,v,l\}} \left[E_{12}^{(2)}(a_{12}(z, t, h, v, l)) + 2E_{13}^{(2)}(a_{13}(z, t, h, v, l)) + 2E_{14}^{(2)}(a_{14}(z, t, h, v, l)) + E_{34}^{(2)}(a_{34}(z, t, h, v, l)) \right]. \quad (5.96)$$

qui se réduit dans le cas de potentiels en loi de puissances (5.68) en

$$E_{\text{optimisée}} = \max_{\{z,t,h,v,l\}} \left[k_{12}^{\frac{2}{2+\beta}} (a_{12}(z, t, h, v, l))^{\frac{\beta}{2+\beta}} + 2k_{13}^{\frac{2}{2+\beta}} (a_{13}(z, t, h, v, l))^{\frac{\beta}{2+\beta}} + k_{14}^{\frac{2}{2+\beta}} (a_{14}(z, t, h, v, l))^{\frac{\beta}{2+\beta}} + k_{34}^{\frac{2}{2+\beta}} (a_{34}(z, t, h, v, l))^{\frac{\beta}{2+\beta}} \right] E^{(2)}(1/2, \mathbf{1}) \quad (5.97)$$

où la maximisation porte sur 5 paramètres z, t, h, v et l .

Notons qu'il n'est pas nécessaire de donner les expressions analytiques des paramètres de masse a_{12} , a_{13} , a_{14} et a_{34} . On peut déterminer leurs valeurs numériquement à partir de l'équation matricielle (5.95).

5.5 Comparaison numérique des différentes bornes inférieures

Cette section est consacrée à la comparaison numérique des bornes inférieures pour l'énergie du fondamental de systèmes à 4 corps. On s'est limité à des interactions à deux corps dérivant de potentiels en loi de puissance de même type $\beta_{ij} = \beta \quad \forall i, j$. Nous avons reporté dans les tableaux suivants les valeurs numériques des différentes bornes inférieures naïve $E_{\text{naïve}}$ (5.26), améliorée $E_{\text{améliorée}}$ (5.48), et optimisée $E_{\text{optimisée}}$ (5.97), où on a considéré toutes les configurations possibles jusqu'à la limite de 3 masses différentes pour différentes valeurs des masses des particules dans un système d'unités où $\hbar = 1$, et ce pour différentes valeurs de l'exposant β , à savoir le potentiel harmonique $\beta = 2$, le potentiel linéaire $\beta = 1$, le potentiel de Martin $\beta = 0.1$ et enfin le potentiel coulombien $\beta = -1$.

Tableau 3 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel harmonique ($\beta=2$); $m_1=m_2=m_3=1$ et m_4 variable.

(m_1, m_2, m_3, m_4)	(1, 1, 1, 0.01)	(1, 1, 1, 0.1)	(1, 1, 1, 1)	(1, 1, 1, 3)	(1, 1, 1, 100)
E_{naive}	42.1217	17.3822	10.3923	9.43879	8.88871
$E_{amelioree}$	44.3843	19.8020	12.7279	11.1962	7.58742
$E_{optimisee}$	45. 2888	20.2963	12.7279	11.4853	10.6382
E_{exacte}	45. 2888	20.2963	12.7279	11.4853	10.6382

Tableau 4 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel harmonique ($\beta=2$); $m_1=m_2=1$, $m_3=m_4$ variable.

(m_1, m_2, m_3, m_4)	(1, 1, 0.01, 0.01)	(1, 1, 0.1, 0.1)	(1, 1, 0.2, 0.2)	(1, 1, 0.5, 0.5)	(1, 1, 1, 1)
E_{naive}	68.2867	23.4574	17.60503	12.6668	10.3923
$E_{amelioree}$	66.2695	25.6205	20.17416	15.2913	12.7279
$E_{optimisee}$	76.8187	27.6089	21.07794	15.4388	12.7279
E_{exacte}	76.8187	27.6089	21.07794	15. 4388	12.7279

Tableau 5 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel harmonique ($\beta=2$); $m_1=m_2=1$, $m_3=2$ et m_4 variable.

(m_1, m_2, m_3, m_4)	(1,1,2,0.01)	(1,1,2,0.2)	(1,1,2,1)	(1,1,2,3)	(1,1,2,100)
E_{naive}	41.6271	13.6043	9.69615	8.67851	8.06840
$E_{amelioree}$	43.0679	15.6173	11.7295	10.3452	7.00069
$E_{optimisee}$	44.4996	16.1412	11.8394	10.5428	9.61525
E_{exacte}	44.4996	16.1412	11.8394	10. 5428	9.61525

Tableau 6 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel linéaire ($\beta=1$); $m_1=m_2=m_3=1$ et m_4 variable.

(m_1, m_2, m_3, m_4)	(1, 1, 1, 0.01)	(1, 1, 1, 0.1)	(1, 1, 1, 1)	(1, 1, 1, 3)	(1, 1, 1, 100)
E_{naive}	22.8401	13.4483	9.72693	9.11209	8.73642
$E_{amelioree}$	24.1372	14.8266	11.1346	10.2164	7.43470
$E_{optimisee}$	24.2865	14.9773	11.1346	10.3861	9.84436

Tableau 7 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel linéaire ($\beta=1$); $m_1=m_2=1$, $m_3=m_4$ variable.

(m_1, m_2, m_3, m_4)	(1,1,0.01,0.01)	(1,1,0.1,0.1)	(1,1,0.2,0.2)	(1,1,0.5,0.5)	(1,1,1,1)
E_{naive}	33.1148	16.5603	13.7457	11.0867	9.72693
$E_{amelioree}$	32.0983	17.6329	15.1064	12.5823	11.1346
$E_{optimisee}$	35.9018	18.4851	15.5103	12.6522	11.1346

Tableau 8 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel linéaire ($\beta=1$); $m_1=m_2=1$, $m_3=2$ et m_4 variable.

(m_1, m_2, m_3, m_4)	(1,1,2,0.01)	(1,1,2,0.2)	(1,1,2,1)	(1,1,2,3)	(1,1,2,100)
E_{naive}	22.5338	11.5145	9.28222	8.61025	8.17699
$E_{amelioree}$	23.4806	12.7063	10.5434	9.69414	7.09022
$E_{optimisee}$	23.8736	12.9355	10.6045	9.80518	9.19100

Tableau 9 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel de Martin ($\beta=0.1$); $m_1=m_2=m_3=1$ et m_4 variable.

(m_1, m_2, m_3, m_4)	(1, 1, 1, 0.01)	(1, 1, 1, 0.1)	(1, 1, 1, 1)	(1, 1, 1, 3)	(1, 1, 1, 100)
E_{naive}	7.75890	7.33399	7.03647	6.96919	6.92385
$E_{amelioree}$	7.87772	7.45775	7.17365	7.08500	6.65795
$E_{optimisee}$	7.87869	7.46170	7.17365	7.10144	7.04462

Tableau 10 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel de Martin ($\beta=0.1$); $m_1=m_2=1$, $m_3=m_4$ variable.

(m_1, m_2, m_3, m_4)	(1,1,0.01,0.01)	(1,1,0.1,0.1)	(1,1,0.2,0.2)	(1,1,0.5,0.5)	(1,1,1,1)
E_{naive}	8.28726	7.56906	7.38182	7.16728	7.03647
$E_{amelioree}$	8.23474	7.64712	7.48938	7.29987	7.17365
$E_{optimisee}$	8.41083	7.69779	7.51473	7.30462	7.17365

Tableau 11 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel de Martin ($\beta=0.1$); $m_1=m_2=1$, $m_3=2$ et m_4 variable.

(m_1, m_2, m_3, m_4)	(1,1,2,0.01)	(1,1,2,0.2)	(1,1,2,1)	(1,1,2,3)	(1,1,2,100)
E_{naive}	7.72665	7.18840	6.98860	6.91182	6.85560
$E_{amelioree}$	7.83042	7.30270	7.11779	7.03248	6.62870
$E_{optimisee}$	7.84436	7.31692	7.12322	7.04262	6.97397

Tableau 12 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel Coulombien ($\beta=-1$); $m_1=m_2=m_3=1$ et m_4 variable.

(m_1, m_2, m_3, m_4)	(1, 1, 1, 0.01)	(1, 1, 1, 0.1)	(1, 1, 1, 1)	(1, 1, 1, 3)	(1, 1, 1, 100)
E_{naive}	-2.29455	-2.65909	-4.50000	-5.62500	-6.70545
$E_{amelioree}$	-1.17301	-1.54680	-3.00000	-3.93750	-40.1396
$E_{optimisee}$	-1.16983	-1.54167	-3.00000	-3.73167	-4.467301

Tableau 13 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel Coulombien ($\beta=-1$); $m_1=m_2=1$, $m_3=m_4$ variable.

(m_1, m_2, m_3, m_4)	(1,1,0.01,0.01)	(1,1,0.1,0.1)	(1,1,0.2,0.2)	(1,1,0.5,0.5)	(1,1,1,1)
E_{naive}	-0.81691	-1.37046	-1.90000	-3.12500	-4.50000
$E_{amelioree}$	-0.54460	-0.91364	-1.26667	-2.08333	-3.00000
$E_{optimisee}$	-0.30547	-0.76439	-1.17922	-2.06427	-3.00000

Tableau 14 : Energie du niveau fondamental d'un système à 4-corps interagissant via un potentiel Coulombien ($\beta=-1$); $m_1=m_2=1$, $m_3=2$ et m_4 variable.

(m_1, m_2, m_3, m_4)	(1,1,2,0.01)	(1,1,2,0.2)	(1,1,2,1)	(1,1,2,3)	(1,1,2,100)
E_{naive}	-2.79463	-3.52273	-5.25000	-6.80000	-8.66147
$E_{amelioree}$	-1.44160	-2.21522	-3.54167	-4.58306	-38.1302
$E_{optimisee}$	-1.41634	-2.14635	-3.48917	-4.46423	-5.60219

Les calculs numériques montrent que la borne inférieure optimisée est meilleur que les deux autres bornes inférieures naïve et améliorée. Nous avons, de plus, obtenu une évidence numérique de la propriété de saturabilité de la borne inférieure optimisée dans le cas des forces harmoniques pour toutes les configurations de masses que nous avons considérées.

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 $(N + 1)$ eme par exemple.

On peut montrer qu'il est facile de déduire la solution du système moins compliqué à partir de celui 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 de faire tendre sa masse à l'infini ($m_{N+1} \rightarrow \infty$) 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 : $(k_{i, N+1} = 0, i = 1, 2, \dots, N)$.

A titre d'exemple, en remplaçant m_4 par $+\infty$ et k_{14}, k_{24}, k_{34} par 0 dans la solution du problème à 4 corps, on retrouve la solution du problème à 3 corps.

Conclusion

Le travail réalisé dans le cadre de ce mémoire est une extension d'une étude précédente menée sur les systèmes à trois corps [8]. Dans ce mémoire, nous avons dérivé des bornes inférieures pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à 4 corps en interaction à deux corps invariante par rotation et par translation. A l'origine de chaque borne réside une décomposition particulière de la partie cinétique de l'hamiltonien du système. La décomposition la plus simple de l'hamiltonien en une somme de sous-systèmes à deux corps mène à une borne dite *naïve*. Une deuxième borne dite *améliorée* est obtenue en séparant le mouvement du centre de masse de chaque paire de particules. La troisième borne appelée *optimisée* est obtenue en séparant le mouvement du centre de masse du système total au lieu de celui des paires des particules. Ce qui distingue cette borne des deux autres est qu'elle implique un certain nombre de paramètres libres. Cette borne sera donc obtenue en maximisant la valeur moyenne de l'hamiltonien relatif par rapport à ces paramètres, ce qui justifie son appellation. Les trois bornes inférieures nécessitent une connaissance préalable de l'énergie exacte de l'état fondamental de tous les sous-systèmes à deux corps qui constituent le système global. Du fait, nous nous sommes trouvés obligés de chercher à résoudre de manière exacte le problème à deux corps pour un potentiel d'interaction donné afin d'injecter la solution dans ces trois bornes inférieures. Pour cela, nous avons mis en œuvre un programme permettant de calculer une solution numérique exacte du problème à deux corps. Nous avons étudié en détail les trois bornes inférieures puis appliqué les résultats pour certaines configurations particulières de masses.

Afin de tester la qualité de ces bornes inférieures il est bon d'en disposer de valeurs exactes pour l'énergie de l'état fondamental du système à 4 corps. L'étude analytique de l'oscillateur harmonique à 4 corps nous donne ce dont nous avons besoin. Dans ce contexte nous avons suivi

une démarche basée sur des changements de variables pour résoudre analytiquement et donc exactement le problème de l'oscillateur harmonique à 4 corps et ce pour certaines configurations particulières de masses.

Enfin, une comparaison numérique des bornes inférieures pour des systèmes à 4 corps a été effectuée et présentée sous forme de tableaux contenant les valeurs numériques des différentes bornes. On s'est limité à des interactions à deux corps dérivant de potentiels en loi de puissance de même type et ce pour différents potentiels. On a constaté que la borne optimisée est toujours meilleur que les deux autres bornes et de plus elle est saturée dans le cas des forces harmoniques, c'est à dire qu'elle est égale à la valeur exacte.

Annexe A

Polynôme d'Hermite

L'équation différentielle d'Hermite est donnée par :

$$y'' + -2xy' + 2ny = 0 \quad , y = H_n(x)$$

où $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

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

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

Les premiers polynômes de Laguerre sont les suivants :

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

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

Propriétés des polynômes d'Hermite

Les propriétés des polynômes d'hermite sont :

– Fonction génératrice

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

– Formules de récurrence

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

– Orthogonalité

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

– Relation de parité

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

Annexe B

Polynôme de Laguerre

L'équation différentielle de Laguerre est donnée par :

$$xy'' + (1-x)y' + ny = 0 \quad , y = L_n(x)$$

où $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

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

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

Les premiers polynômes de Laguerre sont les suivants :

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

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

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

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

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

Les polynômes associés de Laguerre sont orthogonaux :

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

Bibliographie

- [1] A. Martin, Phys. Lett. **93B** (1980) 338.
- [2] J.-M. Richard, Phys. Lett. B **139** (1984) 408.
- [3] S. Fleck et J.-M. Richard, Few-Body Systems **19** (1995) 19 .
- [4] J.-P. Ader, J.-M. Richard and P. Taxil, Phys. Rev. **D 25** (1982) 2370
- [5] S. Nussinov, Phys. Rev. Lett. **51** (1983) 2081.
- [6] A. Galindo et P. Pascual, *Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, Madrid, 1989) .
- [7] A. Benslama, A. Metatla, Bachkhaznadj, S. R. Zouzou, A. Krikeb, J.-L. Basdevant, J.-M. Richard and T. T. Wu, *Optimized Lower Bound for Four-Body Hamiltonians*, Few-Body Systems **24** (1998) 39.
- [8] M. Saghiri, *Résolution exacte d'un système quantique non relativiste à trois et à quatre corps pour des potentiels harmoniques*, Master physique des matériaux (univ. Khenchela, 2013).
- [9] Encyclopædia Britannica, Phys. (1999).
- [10] G. Lochak, S. Diner et D. Fargue, *L'objet quantique*, (Flammarion , 1989).
- [11] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloe, *Mécanique quantique*, (Hermann, Paris, 1977).
- [12] D. Gratias, M. Fayard, Techniques de l'ingénieur, Mécanique quantique.
- [13] G. B. Arfken, H. J. Weber, *Mathematical Methods for physicists* (Elsevier academic press, 6ème édition).
- [14] M. L. Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences* (Wiley, New York, 1983).
- [15] A. Boudjemaa, *Résolution exacte du problème de l'oscillateur harmonique quantique à N-corps*, Master physique des matériaux (univ. Khenchela, 2017).

- [16] J. Hladik, M. Chrysos, P-E Hladik et L. U Ancarani, *Mécanique quantique : Atomes et noyaux, Applications technologiques* (Dunod, Paris, 2006).
- [17] J. Hladik, M. Chrysos, *Introduction à la mécanique quantique : Cours et exercices corrigés*, (Dunod, Paris, 2000).
- [18] J.- M. Richard, Laboratoire de Physique Subatomique et Cosmologie, Université Joseph Fourier, (2009).

حدود سفلى من أجل طاقة الحالة الاساسية لجملة كمومية غير نسبية ذات أربع جسيمات

ملخص:

العمل المنجز في هذه المذكرة يندرج في إطار الجمل ذات عدد قليل من الجسيمات أين قمنا بإيجاد حدود سفلى من أجل طاقات المستوي الأساسي لجملة مكونة من أربع جسيمات تحكمها حركية غير نسبية مع تفاعلات ذات جسيمين صامدة إزاء الانسحابات. قمنا بصفة خاصة بالتركيز على الحد السفلي المحسن الى جانب الحد المبسط و الحد المعدل . يتميز الحد السفلي المحسن في كونه ينتج عن مسار تحسيني وفق عدد من وسائل حرة . عند أصل هذه الحدود السفلى تكمن تجزئة جملة الأربع جسيمات الى مجموع جمل ذات جسيمين فتحسب عندئذ هذه الحدود السفلى بجمع قيم طاقات الجمل الجزئية. وعليه فإننا كنا ملزمين بإعداد برنامج يحسب عدديا طاقات الجمل ذات جسيمين. و من أجل معرفة جودة هذه الحدود السفلى أي مدى اقترابها من القيمة الدقيقة كان علينا القيام بدراسة تحليلية لجملة تمتلك حلول دقيقة وغير تقريبية وهي جملة المهتز التوافقي ذو أربع جسيمات . خاصية بالغة الأهمية للحد السفلي المحسن هي التشعب في الحالة الخاصة للقوى التوافقية والتي لم تنقض على الإطلاق و لدينا الآن شبه يقين حول طابعها العام.

كلمات المفاتيح :

- الهاملطوني - معادلة شرودنغر - جملة أربع جسيمات - جملة جسيمين - المبدأ التغير - دالة الإختبار الموجية - الحالة الاساسية - حدود السفلى - تحسین - المهتز التوافقي - التشعب.

Lower bounds for the ground state energy of a non-relativistic quantum four-body

Abstract:

The work done in this manuscript is in the context of few-body systems. We have derived lower bounds for the ground state energy of four-body systems governed by non-relativistic kinematics with translational invariant two-body interactions. In particular, we focused on the optimized lower bound and the naive and improved lower bounds. The optimized bound is distinguished by the fact that it results from an optimization process on a certain number of free parameters. At the origin of each bound lies a decomposition of the four-body system into the sum of two-body subsystems. These lower bounds will be calculated by summing the values of the energies of the two-body subsystems. Therefore, we found ourselves forced to develop a program that numerically calculates the energies of a two-body system. And, in order to test the quality of these lower bounds, i.e., how close they are to the exact value, we had to do an analytical study of a system that admits exact solutions; the four-body harmonic oscillator in this case. A very interesting property of the optimized lower bound is the saturability in the particular case of harmonic interactions. This property of saturability has never been proven wrong and we now have a near certainty about its general character.

Keywords:

Hamiltonian - Schrödinger Equation - Four-body System - Two-body System - Variational principle - Trial wave function - Ground state - Lower bounds - Optimization - Jacobi coordinates - Harmonic oscillator - Saturation.

Bornes inférieures pour l'énergie de l'état fondamental d'un système quantique non relativiste à quatre corps

Résumé:

Le travail effectué dans ce mémoire s'inscrit dans le cadre des systèmes à petit nombre de corps. Nous avons dérivé des bornes inférieures pour les énergies du niveau fondamental de systèmes de quatre particules gouvernés par une cinématique non relativiste avec des interactions à deux corps invariante par translation. En particulier, nous nous sommes concentrés sur la borne inférieure optimisée et les bornes inférieures naïve et améliorée. La borne optimisée se distingue par le fait qu'elle résulte d'un processus d'optimisation sur un certain nombre de paramètres libres. A l'origine de chaque borne se trouve une décomposition du système de quatre corps en la somme de sous-systèmes à deux corps. Ces bornes inférieures seront calculées en sommant les valeurs des énergies des sous-systèmes à deux corps. Par conséquent, nous nous sommes retrouvés obligés de développer un programme qui calcule numériquement les énergies de d'un système de deux particules. Et, afin de tester la qualité de ces bornes inférieures, c'est-à-dire à quel point elles sont proches de la valeur exacte, nous avons dû faire une étude analytique d'un système qui admet des solutions exactes; l'oscillateur harmonique à quatre corps en l'occurrence. Une propriété très intéressante de la borne inférieure optimisée est la saturabilité dans le cas particulier des interactions harmoniques. Cette propriété de saturabilité n'a jamais été prise à défaut, et nous avons développé maintenant une quasi-certitude quant à son caractère général.

Mots clés :

Hamiltonien - Equation de Schrödinger - Système à quatre corps - Système à deux corps - Principe variationnel - Fonction d'onde d'essai - Etat fondamental - Bornes inférieures - Optimisation - Coordonnées de Jacobi - Oscillateur harmonique - Saturation.