



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



Département des Sciences de la Matière

N° de série :.....

## Mémoire de fin d'études

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

**Filière : Physique**

**Spécialité : Physique des Matériaux**

**Intitulé :**

**Résolution variationnelle du problème  
des états liés d'un système quantique  
non relativiste à quatre corps**

Réalisé par : - DRAHAM Meriem  
- RAHMANI Dalel

Dirigé par : Dr. Kh. BOUDJAMAA

Membres de jury :

- Dr. SAADANE Abderraouf
- Dr. BOUBAA Dris

Présenté le .....

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 Notions de base de mécanique quantique</b>	<b>3</b>
1.1 L'équation de Schrödinger . . . . .	3
1.2 La fonction d'onde . . . . .	4
1.3 L'équation de Schrödinger stationnaire . . . . .	5
1.3.1 Cas d'une force centrale . . . . .	6
1.4 Le problème à deux corps . . . . .	8
1.4.1 Séparation des variables . . . . .	12
<b>2 L'Oscillateur harmonique</b>	<b>13</b>
2.1 Approximation harmonique . . . . .	14
2.2 L'oscillateur harmonique à une dimension . . . . .	14
2.3 L'Oscillateur harmonique à trois dimensions . . . . .	21
2.4 L'Oscillateur Harmonique à deux corps . . . . .	25
<b>3 L'Oscillateur Harmonique à quatre corps</b>	<b>26</b>
3.1 Coordonnées de Jacobi et problème à $N$ corps . . . . .	27
3.2 Système ayant toutes les masses égale . . . . .	28
3.3 Système ayant deux masses différentes . . . . .	31
3.3.1 Configuration $(m, m, m, M)$ . . . . .	31
3.3.2 Configuration $(m, m, M, M)$ . . . . .	34
3.3.3 Configuration $(m, m, M, M)$ : Autre choix de coordonnées de Jacobi . . . . .	36

3.4	Système ayant trois masses différentes . . . . .	38
<b>4</b>	<b>Développement sur des gaussiennes corrélées</b>	<b>41</b>
4.1	Théorème variationnel de Ritz . . . . .	41
4.2	La méthode variationnelle . . . . .	42
4.3	Choix de la fonction d'onde d'essai . . . . .	43
4.3.1	L'hamiltonien . . . . .	45
4.4	Application aux problèmes à quatre corps . . . . .	51
4.4.1	Choix standard des coordonnées de Jacobi . . . . .	52
4.4.2	Choix modifié des coordonnées de Jacobi . . . . .	54
4.4.3	Une seule génération de gaussiennes corrélées . . . . .	55
4.4.4	Deux générations de gaussiennes corrélées . . . . .	56
<b>5</b>	<b>Application</b>	<b>63</b>
5.1	La molécule dihydrogène . . . . .	63
	<b>Conclusion</b>	<b>67</b>
5.1.1	. . . . .	68
	<b>Annexe A</b>	<b>69</b>
	<b>Annexe B</b>	<b>70</b>
	<b>Annexe C</b>	<b>72</b>

# Liste des figures

*Figure 1 :* Coordonnées de Jacobi pour le système à quatre corps  $(m, m, m, m)$ .

*Figure 2 :* Coordonnées de Jacobi pour le système à quatre corps  $(m, m, m, M)$ .

*Figure 3 :* Coordonnées de Jacobi pour le système à quatre corps "haltères"  $(m, m, M, M)$ .

*Figure 4 :* Coordonnées de Jacobi pour le système à quatre corps standard  $(m, m, M, M)$ .

*Figure 5 :* Coordonnées de Jacobi pour le système à quatre corps  $(m, m, m_3, M)$ .

*Figure 6 :* Coordonnées de Jacobi pour la molécule de dihydrogène ( $H_2$ )

# Liste des tableaux

- Tableau 1* Valeur exacte  $E_{exacte}$  et borne supérieure  $E_{var}^{(1)}$  pour l'énergie du fondamental pour le système à quatre corps  $(m, m, M, M)$  en interaction :  $V_{ij} = r_{ij}^2$  .
- Tableau 2* Valeur exacte  $E_{exacte}$  et borne supérieure  $E_{var}^{(1)}$  pour l'énergie du fondamental pour le système à quatre corps  $(m, m, m, M)$  en interaction :  $V_{ij} = r_{ij}^2$  .
- Tableau 3* Valeur exacte  $E_{exacte}$  et borne supérieure  $E_{var}^{(1)}$  pour l'énergie du fondamental pour le système à quatre corps  $(m, m, m_3, M)$  en interaction :  $V_{ij} = r_{ij}^2$  .
- Tableau 4* Borne inférieure  $E_{inf}$  et bornes supérieures  $E_{var}^{(1)}$ ,  $E_{var}^{(2)}$  pour l'énergie du fondamental pour le système à quatre corps  $(m, m, M, M)$  en interaction :  $V_{ij} = r_{ij}$  .
- Tableau 5* Borne inférieure  $E_{inf}$  et bornes supérieures  $E_{var}^{(1)}$ ,  $E_{var}^{(2)}$  pour l'énergie du fondamental pour le système à quatre corps  $(m, m, m, M)$  en interaction :  $V_{ij} = r_{ij}$  .
- Tableau 6* Borne inférieure  $E_{inf}$  et bornes supérieures  $E_{var}^{(1)}$ ,  $E_{var}^{(2)}$  pour l'énergie du fondamental pour le système à quatre corps  $(m, m, m_3, M)$  en interaction :  $V_{ij} = r_{ij}$  .
- Tableau 7* Borne inférieure  $E_{inf}$  et bornes supérieures  $E_{var}^{(1)}$ ,  $E_{var}^{(2)}$  pour l'énergie du fondamental pour le système à quatre corps  $(m, m, M, M)$  en interaction :  $V_{ij} = r_{ij}^{0.1}$  .
- Tableau 8* Borne inférieure  $E_{inf}$  et bornes supérieures  $E_{var}^{(1)}$ ,  $E_{var}^{(2)}$  pour l'énergie du fondamental pour le système à quatre corps  $(m, m, m, M)$  en interaction :  $V_{ij} = r_{ij}^{0.1}$  .
- Tableau 9* Borne inférieure  $E_{inf}$  et bornes supérieures  $E_{var}^{(1)}$ ,  $E_{var}^{(2)}$  pour l'énergie du fondamental pour le système à quatre corps  $(m, m, m_3, M)$  en interaction :  $V_{ij} = r_{ij}^{0.1}$  .
- Tableau 10* Borne inférieure  $E_{inf}$  et bornes supérieures  $E_{var}^{(1)}$ ,  $E_{var}^{(2)}$  pour l'énergie du fondamental pour le système à quatre corps  $(m, m, M, M)$  en interaction :  $V_{ij} = -1/r_{ij}$  .
- Tableau 11* Borne inférieure  $E_{inf}$  et bornes supérieures  $E_{var}^{(1)}$ ,  $E_{var}^{(2)}$  pour l'énergie du fondamental pour le système à quatre corps  $(m, m, m, M)$  en interaction :  $V_{ij} = -1/r_{ij}$  .
- Tableau 12* Borne inférieure  $E_{inf}$  et bornes supérieures  $E_{var}^{(1)}$ ,  $E_{var}^{(2)}$  pour l'énergie du fondamental pour le système à quatre corps  $(m, m, m_3, M)$  en interaction :  $V_{ij} = -1/r_{ij}$  .
- Tableau 13* Approximation variationnelle le l'énergie du niveau fondamental et de distance interatomique de la molécule dihydrogène ( $H_2$ ) .

## Liste des symboles

$V$	Energie potentiel
$\vec{r}_i$	Coordonnée de la $i$ ème particules
$\vec{p}_i$	Quantité de mouvement de la $i$ ème particules
$E$	Energie
$\hat{H}$	Hamiltonien
$\hat{H}_r$	Hamiltonien relatif
$\Psi$	Fonction d'onde
$R_{n,l}$	Fonction d'onde radiale
$\hbar$	Constante de Plank réduite
$\Delta$	Opérateur de laplace
$d\wp$	Probabilité de présence
$\vec{R}$	Vecteur du centre de masse
$m_i$	Masse de la $i$ ème particules
$\mathbf{M}$	Masse totale d'un système de particules
$\vec{\rho}, \vec{\sigma}, \vec{\delta}, \dots$	Coordonnées de Jacobi
$k_{ij}$	Constante de couplage
$H_n(q)$	Le $n$ - ème polynôme d'Hermite
$\xi_r$	L'espace des états
$L_\nu^q$	Le polynôme associé de Laguerre
$\hat{T}$	L'opérateur de l'énergie cinétique
$\mu, \mu_\rho, \dots$	Masses réduites
$E_n^{(N)}$	Specre d'énergie du système à $N$ corps
$E_{\text{inf}}^{(N)}$	Borne inférieure pour l'énergie du fondamental pour un système à $N$ corps
$E_{\text{var}}^{(N)}$	Borne supérieure pour l'énergie du fondamental pour un système à $N$ corps

## **Remerciement**

Ce mémoire de Master est le résultat d'un travail et d'une recherche de plusieurs mois. En préambule, nous souhaitons adresser nous nos remerciements aux personnes qui nous apporté leurs soutient et qui ont ainsi contribué à l'élaboration de mémoire de recherche fin d'étude.

Avant tout, nous remercions "Allah" le tout puissant de nous avoir donné la santé, la force, le courage, la patience, la persistance et nous a permis d'exploiter les moyens disponibles à fin d'accomplir ce modeste travail. Merci de nous avoir éclairé le chemin de la réussite.

Nous remercions notre promoteur **Dr Boudjema Kheir Eddine** pour avoir encadré et dirigé ce travail avec une grande rigoureuse scientifique, sa disponibilité, ses précieux conseils, la confiance qu'il nous a accordé et pour son suivi régulier à l'élaboration de ce travail.

Nos remerciements vont aussi aux membres de jury **Dr Saadane Abderaouf** professeur à l'Université de Khenchela et **Dr Boubaa Driss** professeur à l'Université de Khenchela de nous avoir fait l'honneur d'accepter d'évaluer ce travail.

Un grand merci particulier à nos collègues et nos amies de la promotion physique des matériaux pour les sympathiques moments qu'on a passés ensemble, on les remercie pour leur confiance, leur disponibilité et leur fidélité.

## Dédicace

Avant tout je remercie le bon Dieu de nous avoir mis sur le bon chemin pour pouvoir réaliser ce travail que je dédie.

-À la bougie qui est la source de la lumière de ma vie, qui se fond toujours pour éclairer mon parcours, A mon cher père «**Belkacem**» je dédie ce travail et je lui souhaite une longue belle vie.

-À la fleur qui rehausse et aromatise mes jours, qui garde les nuits pour que je me rendorme, à ma très chère mère «**Louiza**» je réalise ce travail et je lui souhaite une longue belle vie.

-À mon cher frère : «**Salah Eddine**» pour son appui et encouragement, à fin d'atteindre mon objectif en question.

-À mes plus belles cousines qui je les considère comme sœurs : «**Maissa, Wided**» qui ont cru en moi et qui ont toujours encouragé, à fin d'accomplir cette noble mission.

-À mon binôme «**Meriem**» j'ai partagé avec elle les joies et les difficultés au suivi de notre travail quelques soient les circonstances et conjonctures qui accompagnent les efforts colossaux consentis et qui se poursuivent surtout les plans.

## Dédicace

Je remercie premièrement le Dieu tout puissant qui ne cesse de me protéger.

Je remercie mon père « **Adjal** » et ma mère « **Hakima** », pour sa patience tout au long de ces cinq dernières années d'études, et son soutien sans faille.

-À mes chères sœurs « **Zineb** » et « **Abir** » pour leurs encouragements permanents, et leur soutien moral.

-À mes chers frères, « **Yassin** » et « **Zaki** » pour leur appui et leur encouragement.

-À mes chères « **Nada** », « **Acinette** » et ma belle « **Manissa** ».

-À mon binôme « **Dalel** » j'ai partagé avec elle les joies et les difficultés au suivi de notre travail quelques soient les circonstances et conjonctures qui accompagnent les efforts colossaux consentis et qui se poursuivent surtout les plans.

-J'exprime mes profondes gratitude et respectueuses reconnaissances à mon encadreur professionnel « **Boudjema kheir Eddine** » pour tout le temps qu'elle m'a accordé et pour tous les conseils qu'elle m'a prodigués.

Et à tous ceux qui m'ont soutenu et me soutiennent encore. Du fond du cœur Merci, et que Dieu vous protège.

# Introduction

Dans l'état actuel des connaissances scientifiques, la mécanique quantique joue un rôle fondamental pour la description et la compréhension des phénomènes naturels. En effet, dès que ces derniers se produisent à une échelle très fine (échelle atomique ou subatomique), ils ne sont explicables que dans le cadre de la physique quantique, par exemple, l'existence et les propriétés des atomes, la liaison chimique, la propagation d'un électron dans un cristal, etc., ne peuvent être comprises dans le cadre de la mécanique classique [1].

Parmi les études qui ont développé la physique quantique figure l'étude théorique de l'équation de Schrödinger qui a été formulée par Erwin Schrödinger en 1925. C'est l'équation fondamentale de la physique quantique non relativiste. Elle décrit l'évolution dans le temps d'une particule massive, et remplit ainsi le même rôle que la relation fondamentale de la dynamique en mécanique classique.

Alors l'étude d'un système quantique consiste essentiellement à résoudre cette équation de Schrödinger. Lorsqu'il s'agit d'un problème à  $N$  corps (particules), la résolution analytique est très compliquée voire même impossible pour la plupart des problèmes réels. Même pour les problèmes à une dimension ou par exemple à une particule dans potentiel invariant par rotation, ne sont solubles que pour des cas très particuliers de potentiels. Dans les autres cas on est obligé à recourir à des méthodes et des techniques de résolution numérique ou approximative de l'équation de Schrödinger. Parmi ces méthodes, citons le développement systématique sur des gaussiennes corrélées [2], les équations de Fadeev [3], le développement sur les harmoniques hyper-sphériques [4], ...

Dans le travail présenté dans ce mémoire, on s'intéresse à la résolution approximative de l'équation de Schrödinger stationnaire pour des problèmes à quatre corps sans spin. Nous al-

lons utiliser la méthode de développement sur des gaussiennes corrélées basée sur la méthode variationnelle pour obtenir une approximation pour l'énergie et la fonction d'onde associées à l'état fondamental du système et qui consiste en une extension d'une étude antérieure similaire menée pour le cas à trois corps [6].

Ce document s'articule autour de cinq chapitres :

Le premier chapitre constitue une revue sur les notions de base de la mécanique quantique où nous présentons l'équation de Schrödinger stationnaire qui décrit les états indépendants du temps d'une particule. Une attention particulière a été portée aux problèmes de forces centrales où on montre que le problème de deux particules en interaction mutuelle se réduit au problème d'une particule à une dimension.

Le deuxième chapitre sera consacré à l'étude d'oscillateur harmonique à une et à trois dimensions dans un cadre quantique. La résolution du problème de l'oscillateur harmonique à deux corps sera également présentée en détail.

Dans le troisième chapitre, nous nous intéresserons au problème à  $N$  corps interagissant via des forces à deux corps qui dérivent de potentiels harmoniques. Ce type de systèmes est souvent appelé "Oscillateur harmonique à  $N$  corps". On s'intéresse en particulier au problème à quatre corps. La méthode adoptée pour résoudre ce problème est basée sur des changements de variables permettant ainsi de réduire le problème l'oscillateur harmonique à quatre corps à un ensemble de trois oscillateurs harmoniques découplés dont l'énergie du système sera la somme des énergies de ces oscillateurs.

Le principal objectif de notre travail sera abordé dans le quatrième chapitre. Nous allons présenter en détail la méthode du développement sur des gaussiennes corrélées appliquée à des systèmes à quatre corps, qui est une méthode basée sur le principe variationnel. Cette méthode nous permettra de trouver une approximation de l'énergie et de la fonction d'onde d'un système à quatre particules en interaction à deux corps.

Nous appliquerons ensuite nos résultats à un système physique concret, la molécule dihydrogène en l'occurrence qui peut être assimilée à un système à quatre corps en interaction à deux corps de type coulombienne. Nous pouvons ainsi trouver une approximation de la fonction d'onde, de l'énergie et de la distance interatomique de la molécule.

Le mémoire se termine par une conclusion générale.

# Chapitre 1

## Notions de base de mécanique quantique

*Dans ce chapitre, nous allons présenter en détail l'équation de Schrödinger pour les problèmes indépendants du temps (stationnaire). Nous allons considérer en particulier le cas de forces centrales et le problème à deux corps.*

### 1.1 L'équation de Schrödinger

En physique classique, l'état d'un système est parfaitement défini par la position et la vitesse de l'ensemble de ses composants. Il ne peut être alors que dans un seul état à un moment et à un endroit donné, il n'en va pas de même en physique quantique. Un système quantique tel qu'une simple onde-corpuscule, peut se trouver dans une superposition cohérente d'états, qui traduit la potentialité de tous ses états possibles. Sa présence en un endroit donné et son énergie deviennent alors probabilistes. Alors la seule explication de cette dualité est décrite par une fonction d'onde  $\psi(r, t)$ , solution de l'équation de Schrödinger qui est considérée comme la base de la physique quantique non relativiste. On peut dire que cette formule est une équation différentielle linéaire permettant de déterminer de manière générale la fonction d'onde associée à une particule [6].

Dans la représentation en coordonnées, l'équation de Schrödinger prend la forme suivante :

$$\hat{H}\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t), \quad (1.1)$$

où  $\hat{H}$  est un opérateur appelé *hamiltonien* composé de l'énergie cinétique  $T = \vec{p}^2 / (2m)$  et de l'énergie potentielle  $\hat{V}(\vec{r})$ ,

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + \hat{V}(\vec{r}). \quad (1.2)$$

$m$  représente la masse de la particule.

Dans la représentation en coordonnées, les règles de correspondance [7], pour l'énergie  $E$  et les composantes  $p_x, p_y, p_z$  de  $\vec{p}$ ,

$$E \rightarrow \hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad , \quad p_x \rightarrow \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad , \quad p_y \rightarrow \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \quad , \quad p_z \rightarrow \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \quad , \quad (1.3)$$

donnent pour l'équation de Schrödinger la forme :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t). \quad (1.4)$$

où  $\Delta$  est l'opérateur de Laplace

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (1.5)$$

## 1.2 La fonction d'onde

Les solutions de l'équation de Schrödinger d'un système quantique sont appelées *fonctions d'onde*, elles peuvent être considérées comme postulat quantique qui décrit l'état quantique d'une particule et contient toutes les informations qu'on veut connaître du système [8]. Cette onde a une interprétation probabiliste ; le carré de la fonction d'onde définit la probabilité  $d\wp$  de trouver l'objet quantique au temps voulu en un endroit donné caractérisé par un volume élémentaire  $d^3\vec{r}$  :

$$d\wp = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}. \quad (1.6)$$

Comme on a vu que l'équation de Schrödinger est une équation aux dérivées partielles du

premier ordre par rapport au temps et de deuxième ordre par rapport aux coordonnées spatiales, c'est donc une équation difficile à résoudre pour la plupart des systèmes quantiques.

### 1.3 L'équation de Schrödinger stationnaire

Selon la théorie classique des ondes, une corde vibrante dont les extrémités sont fixes possède des modes propres de vibrations. Dans un tel mode, l'amplitude des oscillations  $|\psi|$  en un point donné de la corde reste indépendante du temps.

En mécanique quantique, il existe également des états dont l'amplitude est indépendante du temps, et par conséquent, il en est de même pour la densité de probabilité de présence. Ainsi, pour un système à une particule, de fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t)$ , on a alors :

$$(|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi(\vec{r})|^2). \quad (1.7)$$

Dans un tel état, la particule doit avoir une valeur déterminée de l'énergie  $E$ , associée à une (fréquence propre)  $\omega = E/\hbar$ , au même titre que les fréquences propres d'une corde vibrante. De tels états sont appelés états stationnaires. Ainsi qu'on le verra par la suite, les états stationnaires jouent un rôle capital en mécanique quantique.

La fonction satisfaisant (1.7) est nécessairement de la forme :

$$\psi(r, t) = \psi(r) \exp i\alpha(t) \quad (1.8)$$

où  $\psi(\vec{r}, t)$  désigne la fonction d'onde décrivant l'état stationnaire d'énergie  $E$ .

En reportant  $\psi(r, t) = \psi(r) \exp i\alpha(t)$  dans l'équation de Schrödinger, il vient :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = -\hbar\alpha \psi(r, t) = H\psi(r, t). \quad (1.9)$$

Puisque la valeur de l'énergie est bien déterminée et que l'hamiltonien classique est égale à l'énergie  $E$  on doit, par analogie, avoir en mécanique quantique :

$$H\psi(r, t) = E\psi(r, t)$$

d’où  $\alpha = -E/\hbar$ . Les fonctions d’ondes des états stationnaires en fonction du temps sont donc de la forme :

$$\psi(r, t) = \psi(r) \exp(-iEt/\hbar). \quad (1.10)$$

$\hbar = h/(2\pi)$  est appelée constante de plank réduite.

Les fonctions ne dépendant que des coordonnées seront notés généralement par  $\psi$ . Ces fonctions, ainsi que les valeurs  $E$  de l’énergie sont déterminées par l’équation :

$$H\psi(r) = E\psi(r). \quad (1.11)$$

C’est l’équation de Schrödinger des états stationnaires. Les valeurs de  $E$  peuvent former un ensemble discret –auquel cas elles sont généralement notées  $E_n$  ou continu, appelé spectre de l’énergie [9].

Dans ce qui suit, on s’intéresse à l’équation de Schrödinger stationnaire.

### 1.3.1 Cas d’une force centrale

On considère une particule de masse  $m$  et de vecteur de position  $\vec{r}$  plongée dans un potentiel central  $V(r)$ . En mécanique quantique, il s’agit de résoudre l’équation aux valeurs propres de l’Hamiltonien  $H$  associé à l’énergie  $E$  de la particule :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r). \quad (1.12)$$

Comme le potentiel est central, les coordonnées sphériques sont mieux adaptées : une coordonnée radiale

$$r \in [0, +\infty[$$

et deux coordonnées angulaires

$$\theta \in [0, \pi] \quad \text{et} \quad \phi \in [0, 2\pi].$$

Le Laplacien  $\Delta$  s'écrit dans ce système de coordonnées sphériques :

$$\Delta = \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right), \quad (1.13)$$

avec

$$L^2 = \hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right], \quad (1.14)$$

où  $L$  représente l'opérateur du moment cinétique.

L'hamiltonien s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r). \quad (1.15)$$

L'équation de Schrödinger (1.11) peut donc s'écrire sous forme d'équation aux valeurs propres :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi). \quad (1.16)$$

$\psi(r, \theta, \phi)$  est la fonction propre de l'hamiltonien et  $E$  son énergie propre.

### Séparation des variables

L'expression (1.14) montre que toute la dépendance en  $\theta$  et  $\phi$  est contenue dans l'opérateur  $L^2$  et on a

$$[H, L^2] = 0 \quad \text{et} \quad [H, L_z] = 0.$$

Les observables  $H$ ,  $L^2$  et  $L_z$  admettent un système complet de fonctions propres [10], de sorte que l'on a :

$$\begin{aligned} H\psi(r, \theta, \phi) &= E\psi(r, \theta, \phi), \\ L^2\psi(r, \theta, \phi) &= l(l+1)\hbar^2\psi(r, \theta, \phi), \\ L_z\psi(r, \theta, \phi) &= m\hbar\psi(r, \theta, \phi). \end{aligned} \quad (1.17)$$

Les fonctions propres communes à  $L^2$  et  $L_z$  correspondant aux valeurs de  $l$  et  $m$  fixées sont les harmoniques sphériques  $Y_m^l(\theta, \phi)$ . Les fonctions  $\psi(r, \theta, \phi)$  sont donc forcément le produit d'une

fonction  $R(r)$  radiale par les harmoniques sphériques  $Y_m^l(\theta, \phi)$ . Soit :

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_m^l(\theta, \phi). \quad (1.18)$$

En utilisant le fait que :

$$\begin{aligned} L^2\psi(r, \theta, \phi) &= L^2R(r)Y_m^l(r, \theta, \phi) \\ &= R(r)L^2Y_m^l(r, \theta, \phi) \\ &= l(l+1)\hbar^2R(r)Y_m^l(\theta, \phi), \end{aligned} \quad (1.19)$$

on aboutit à l'équation radiale suivante :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r). \quad (1.20)$$

ou encore :

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}) \right] R(r) = 0. \quad (1.21)$$

Dans la littérature, la solution de l'équation de Schrödinger stationnaire a été trouvée seulement pour quelques systèmes physiques comme l'atome d'Hydrogène (potentiel coulombien), l'oscillateur harmonique simple, ... alors que la plupart des cas de différents types de potentiels ont été résolus soit par des méthodes numériques (la méthode d'Euler, la méthode de Hann...) ou par des méthodes approximatives (la méthode de perturbation et la méthode variationnelle) [9].

## 1.4 Le problème à deux corps

Le problème à deux corps est l'un des modèles les plus importants de la physique car il est intimement relié à la conservation de l'énergie et surtout parce qu'on sait résoudre de façon analytique exacte les équations de mouvement de deux objets en rotation l'un autour de l'autre.

Soit deux particules non relativistes, de masses respectivement  $m_1$  et  $m_2$  dont les positions sont désignées par les rayons vecteurs des particules individuelles  $\vec{r}_1$  et  $\vec{r}_2$  de composants  $x_1$ ,

$y_1, z_1$  et  $x_2, y_2, z_2$  respectivement. On définit la position relative  $\vec{r}$  :

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad (1.22)$$

dont les composantes sont :

$$\begin{aligned} x &= x_1 - x_2, \\ y &= y_1 - y_2, \\ z &= z_1 - z_2. \end{aligned} \quad (1.23)$$

On suppose que les deux particules interagissent via un potentiel  $V(r)$  qui ne dépend que de la distance entre les deux particules  $r = \|\vec{r}\|$ , ( $V(\vec{r}) = V(r)$ ), sur lesquelles n'agit aucune autre force. L'énergie cinétique  $\hat{T}$  s'écrit :

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2, \quad (1.24)$$

où  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$  sont les Laplaciens relatifs aux coordonnées respectives de chaque particule. L'opérateur hamiltonien de ce système s'écrit donc :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + \hat{V}(r). \quad (1.25)$$

Introduisons le rayon vecteur du centre de masse  $\vec{R}$  défini par :

$$(m_1 + m_2)\vec{R} = (m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2). \quad (1.26)$$

Les composantes de  $\vec{R}$  sont :

$$\begin{aligned} X &= \frac{m_1}{m_1+m_2}x_1 + \frac{m_2}{m_1+m_2}x_2, \\ Y &= \frac{m_1}{m_1+m_2}y_1 + \frac{m_2}{m_1+m_2}y_2, \\ Z &= \frac{m_1}{m_1+m_2}z_1 + \frac{m_2}{m_1+m_2}z_2. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Essayons maintenant d'exprimer les Laplaciens qui figurent dans l'hamiltonien (1.25) en fonction des nouvelles variables  $x, y, z$  (1.23) et  $X, Y, Z$  (1.27).

Soit une fonction  $f$  des deux variables  $\vec{r}_1$  et  $\vec{r}_2$  (en vérité c'est une fonction de six variables,

une variable pour chaque composante des vecteurs) et soit une deuxième fonction  $g$  des variables  $\vec{r}$  et  $\vec{R}$  décrivant la même grandeur  $A$  :

$$A = f(r_1, r_2) = g(r, R). \quad (1.28)$$

La différentielle de  $A$  s'écrit :

$$dA = df(r_1, r_2) = \frac{df}{dx_1} dx_1 + \frac{df}{dy_1} dy_1 + \frac{df}{dz_1} dz_1 + \frac{df}{dx_2} dx_2 + \frac{df}{dy_2} dy_2 + \frac{df}{dz_2} dz_2$$

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

$$dA = dg(r_1, r_2) = \frac{dg}{dx} dx + \frac{dg}{dy} dy + \frac{dg}{dz} dz + \frac{dg}{dX} dX + \frac{dg}{dY} dY + \frac{dg}{dZ} dZ. \quad (1.29)$$

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

En utilisant le fait que

$$\begin{aligned} dx &= dx_1 - dx_2, \\ dy &= dy_1 - dy_2, \\ dz &= dz_1 - dz_2, \end{aligned} \quad (1.30)$$

et

$$\begin{aligned} dX &= \frac{m_1}{m_1+m_2} dx_1 + \frac{m_2}{m_1+m_2} dx_2 \\ dY &= \frac{m_1}{m_1+m_2} dy_1 + \frac{m_2}{m_1+m_2} dy_2 \\ dZ &= \frac{m_1}{m_1+m_2} dz_1 + \frac{m_2}{m_1+m_2} dz_2, \end{aligned} \quad (1.31)$$

on peut tirer les composantes de laplacien  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$  en fonction des dérivées partielles par rapport aux composantes du vecteur relatif  $\vec{r}$  et celles du vecteur du centre de masse  $\vec{R}$  :

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

Les dérivées secondes se déduisent facilement :

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

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

Les expressions des Laplaciens  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$  se simplifient en :

$$\begin{aligned}\Delta_1 &= \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}, \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right) \\ &\quad + \frac{2m_1}{m_1+m_2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial Y} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial Z}\right), \\ \Delta_2 &= \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2}, \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left(\frac{m_2}{m_1+m_2}\right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right) \\ &\quad - \frac{2m_2}{m_1+m_2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial Y} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial Z}\right).\end{aligned}\tag{1.32}$$

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

$$\hat{T} = \frac{-\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) - \frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right).\tag{1.33}$$

où  $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  et  $M = m_1 + m_2$  sont respectivement la masse réduite et la masse totale du système.

Si on adopte la notation suivante :

$$\begin{aligned}\Delta_r &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \\ \Delta_R &= \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2},\end{aligned}\tag{1.34}$$

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

$$H = \frac{-\hbar^2}{2\mu} \Delta_r - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R + V(r).\tag{1.35}$$

L'équation de Schrödinger avec la nouvelle forme (1.35) de l'hamiltonien s'écrit alors comme :

$$H\psi(\vec{r}, \vec{R}) = E\psi(\vec{r}, \vec{R}). \quad (1.36)$$

où  $\psi$  dépend maintenant des nouvelles variables  $(\vec{r}, \vec{R})$  :  $\psi(\vec{r}, \vec{R}) = \psi(x, y, z, X, Y, Z)$ .

### 1.4.1 Séparation des variables

Comme l'énergie potentielle  $V(\vec{r})$  ne dépend que des variables  $x, y, z$  par l'intermédiaire de la variable  $r$ , l'équation (1.36) peut être simplifiée par la méthode de séparation de variables.

Cherchons de solutions sous la forme :

$$\psi(\vec{r}, \vec{R}) = \varphi(\vec{r})\phi(\vec{R}). \quad (1.37)$$

En substituant l'expression (1.37) dans l'équation (1.36), on obtient par séparation des variables :

$$\begin{aligned} \left( \frac{-\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(\vec{r}) \right) \varphi(\vec{r}) &= E_r \varphi(\vec{r}), \\ \frac{-\hbar^2}{2M} \Delta_R \phi(\vec{R}) &= E_R \phi(\vec{R}). \end{aligned} \quad (1.38)$$

avec :

$$E = E_r + E_R. \quad (1.39)$$

L'opérateur :

$$H_r = \frac{-\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(\vec{r}) \quad (1.40)$$

est souvent appelé **hamiltonien relatif**.

## Chapitre 2

# L'Oscillateur harmonique

*Nous nous sommes concentrés dans ce chapitre sur l'étude détaillé d'un problème quantique exactement soluble. Il s'agit de l'oscillateur harmonique.*

Le concept de l'oscillateur harmonique quantique joue un rôle majeur dans de nombreuses applications de la physique quantique. Un oscillateur harmonique correspond, dans sa forme la plus simple, au mouvement d'une particule de masse  $m$  soumise à un potentiel quadratique. Cependant, l'importance de ce système est bien plus grande que cela puisqu'on peut s'en servir pour décrire le comportement d'un système physique autour d'une position d'équilibre stable. Le traitement de ce modèle dans un formalisme quantique paraît donc naturellement important. De plus, il s'agit d'un système pour lequel de nombreuses réalisations expérimentales existent, telles que des particules piégées dans des puits ou les excitations du champ électromagnétique.

Le but de ce chapitre va donc être de mener l'étude d'un oscillateur harmonique dans un cadre quantique, afin de déterminer le spectre d'énergie et les états quantiques correspondants.

Le hamiltonien classique de l'oscillateur harmonique est donné par :

$$\hat{H} = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (2.1)$$

où  $m$  est la masse de l'oscillateur et  $\omega$  sa pulsation [9].

## 2.1 Approximation harmonique

De manière générale, considérons un potentiel  $V(x)$  qui présente un minimum en un point qu'on prend pour origine des déplacements. Le développement de  $V(x)$  en série de Taylor au voisinage de  $x = 0$  se réduit, au second ordre, à :

$$\begin{aligned} V(x) &= V(0) + \left. \frac{dV(x)}{dx} \right|_{x=0} x + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2V(x)}{dx^2} \right|_{x=0} x^2 + \dots \\ &= V(0) + \frac{1}{2} k x^2 + \dots \end{aligned} \quad (2.2)$$

Comme  $V(x)$  possède un minimum en  $x = 0$ , ce qui correspond à une position d'équilibre stable, le coefficient  $k = d^2V(x)/dx^2|_{x=0}$  est positif et la quantité  $dV(x)/dx|_{x=0}$  est nulle. Lorsque les déplacements autour du point d'équilibre sont suffisamment petits, on peut négliger les termes d'ordre supérieur à deux dans le développement. Le potentiel  $V(x)$  peut être considéré comme nul au point d'équilibre. On obtient alors un potentiel correspondant à celui d'un oscillateur harmonique donné par l'équation (2.1) [10].

## 2.2 L'oscillateur harmonique à une dimension

L'importance de l'oscillateur harmonique en physique quantique est double. Le premier aspect concerne la possibilité de décrire en première approximation un système lié par un oscillateur harmonique, cela donne des informations précieuses sur les niveaux d'énergies, leur espacement et leur dégénérescence. C'est l'idée utilisée dans la description du modèle en couches 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 :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad (2.3)$$

où  $\omega$  est la pulsation propre de l'oscillateur.

L'équation de Schrödinger prend dans ce cas la forme suivante :

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi = 0, \quad (2.4)$$

où  $E$  est l'énergie de l'oscillateur.

Comme indiqué plus haut, puisque le potentiel tend vers l'infinie pour  $|x| \rightarrow \infty$ , il n'y a pas d'états de diffusion dans ce problème. Seules nous intéressent les valeurs de l'énergie  $E$  pour lesquelles les solutions sont de carré sommable, c'est-à-dire, relatives aux états stationnaires. Il est plus commode de travailler avec des quantités sans dimensions. Soit :

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{2E}{\hbar\omega}, \\ y &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \end{aligned} \quad (2.5)$$

L'énergie  $E$  se mesure donc en unité ( $\hbar\omega$ ).

L'équation (2.4) se réduit à :

$$\psi'' + (\varepsilon - y^2) \psi = 0, \quad (2.6)$$

Pour une valeur donnée de l'énergie  $E$  ou de  $\varepsilon$ , cette dernière peut être négligé devant  $y$  lorsque ceci tend vers l'infini. Ceci nous permet d'écrire :

$$\psi'' - y^2 \psi = 0 \quad \text{lorsque } \varepsilon \ll y^2, \quad (2.7)$$

Cette dernière l'équation admet des solutions de la forme :

$$\psi(y) \sim A \exp(-y^2/2), \quad (2.8)$$

Il faut noter que cette solution ne décrit que le comportement asymptotique à l'infini de la solution générale qui reste toujours inconnue. Pour déterminer la solution générale de (2.6) on peut procéder par la méthode de variation de la constante  $A$  :  $A = h(y)$ . La solution générale de l'équation (2.6) sera donc de la forme :

$$\psi(y) = h(y) \exp(-y^2/2), \quad (2.9)$$

En substituant l'expression (2.9) de  $\psi$  dans l'équation (2.6) nous obtenons une équation différentielle pour la fonction  $h(y)$  :

$$h'' - 2yh' + (\varepsilon - 1)h = 0, \quad (2.10)$$

Cette dernière équation peut être résolue par la méthode de développement en série de puissance. En écrivant :

$$h(y) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m = a_0 + a_1 y + a_2 y^2 + a_3 y^3 \dots, \quad (2.11)$$

les dérivées premières et secondes de  $h(y)$  seront données respectivement par :

$$\begin{aligned} h'(y) &= a_1 + 2a_2 y^1 + 3a_3 y^2 \dots &= \sum_{m=0}^{\infty} m a_m y^{m-1}, \\ h''(y) &= (2 \times 1) \times a_2 + (3 \times 2) \times a_3 y^1 \dots &= \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} y^n, \end{aligned} \quad (2.12)$$

En substituant (2.11) et (2.12) dans (2.10) on obtient :

$$\begin{aligned} \left[ \sum_{m=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} y^n \right] - 2y \left[ \sum_{m=0}^{\infty} m a_m y^{m-1} \right] + (\varepsilon - 1) \left[ \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m \right] &= 0, \\ \sum_{n=0}^{\infty} [(n+2)(n+1) a_{n+2} + (\varepsilon - 1 - 2n) a_n] y^n &= 0, \end{aligned} \quad (2.13)$$

Cette dernière équation ne peut être satisfaite que lorsque les coefficients de toutes les puissances de  $y$  sont nuls, c'est-à-dire :

$$(n+2)(n+1) a_{n+2} + (\varepsilon - 1 - 2n) a_n = 0, \quad (2.14)$$

On obtient donc une relation de récurrence entre les coefficients  $a_n$  du développement :

$$a_{n+2} = \frac{-(\varepsilon - 1 - 2n)}{(n+2)(n+1)} a_n, \quad (2.15)$$

Deux types de solutions sont à distinguer : Les séries paires et les séries impaires. En effet, en connaissant  $a_0$  on peut déterminer  $a_2, a_4, \dots, a_{2i}, \dots$  c'est-à-dire tous les coefficient pairs. De même, si on donne  $a_1$  on peut déterminer  $a_3, a_5, \dots, a_{2i+1}, \dots$  c'est-à-dire les coefficient impairs.

Nous obtenons donc deux séries séparées l'une pour les solutions correspondant aux coefficients pairs  $a_{2i}$  et l'autre pour les coefficients impairs  $a_{2i+1}$ .

D'autre part, on peut sans difficulté montrer que la série (2.11) est convergente. En effet, pour les termes d'ordres  $m \gg 1$ , l'équation (2.15) se réduit à :

$$a_{m+2} \sim \frac{2}{m} a_m \quad \text{pour } m \gg 1, \quad (2.16)$$

où encore

$$\frac{a_{m+2}}{a_m} \sim \frac{2}{m} < 1 \quad \text{pour } m \gg 1, \quad (2.17)$$

donc, selon le critère de d'Alembert, la série de terme générale  $a_n$  est convergente.

On cherche maintenant à déterminer l'expression de la fonction  $h(y)$ . Le rapport entre deux termes successifs du développement (2.11) se réduit à :

$$\frac{a_{m+2} y^{m+2}}{a_m y^m} = \frac{2m+1-\varepsilon}{(m+2)(m+1)} y^2 \sim \frac{2y^2}{m}, \quad (2.18)$$

pour les valeurs de  $m \gg 1$ .

Maintenant, si on examine le développement en série de la fonction  $\exp(x)$  :

$$\exp(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots, \quad (2.19)$$

se qui donne pour la fonction  $\exp(x^2)$

$$\exp(x^2) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(x^2)^m}{m!} = \sum_{m=0,2,4,\dots}^{\infty} \frac{x^m}{(m/2)!}, \quad (2.20)$$

Le rapport entre deux termes successifs se simplifie en :

$$\frac{\frac{x^{m+2}}{(m/2+1)!}}{\frac{x^m}{(m/2)!}} = \frac{(m/2)!}{(m/2+1)!} x^2 \sim \frac{2x^2}{m}, \quad (2.21)$$

qui est équivalent à celui obtenu pour la fonction  $h(y)$  (2.18). Donc, pour de grande valeur de

$m$ , la fonction  $h(y)$  a le même comportement que la fonction  $\exp(y^2)$  :

$$h(y) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m \sim e^{y^2} \quad \text{pour } m \gg 1, \quad (2.22)$$

par conséquent, la fonction d'onde (2.9) se réduit à :

$$\begin{aligned} \psi(y) &= h(y) \exp(-y^2/2) \sim \exp(-y^2/2) \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m, \\ &\simeq \exp(-y^2/2) \exp(y^2) = \exp(y^2/2) \quad \text{pour } m \gg 1, \end{aligned} \quad (2.23)$$

qui diverge lorsque  $y \rightarrow \infty$  et est donc physiquement inacceptable. Ce problème ne peut être résolu que si on considère des séries limitées à un ordre  $n$  bien déterminé. Autrement-dit, à partir d'un certain ordre  $n$  tous les coefficients  $a_m$  s'annulent :  $a_m = 0$  pour  $m > n$  ( $a_n$  n'est pas forcément nul : c'est le dernier coefficient non nul). A partir de l'équation (2.15) nous devons avoir :

$$2n + 1 - \varepsilon = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.24)$$

en remplaçant  $\varepsilon$  par son expression en fonction de l'énergie on obtient :

$$\varepsilon = 2n + 1 = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.25)$$

ou encore :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.26)$$

qui représente la quantification de l'énergie pour l'oscillateur harmonique à une dimension.

Intéressons-nous maintenant à la fonction d'onde. Pour chaque valeur de  $n$  nous avons une énergie  $E_n$  bien déterminée, donnée par la relation (2.26) et également une série particulière  $h_n(y)$  de  $h(y)$ ,

$$h_n(y) = \sum_{m=0}^n a_m y^m, \quad (2.27)$$

et par conséquent des fonctions d'onde différentes pour des valeurs différentes de  $n$  :

$$\psi_n(y) = h_n(y) \exp(-y^2/2) = \exp(-y^2/2) \sum_{m=0}^n a_m y^m, \quad (2.28)$$

La relation de récurrence (2.15) devient :

$$a_{m+2}^{(n)} = \frac{-2(m-n)}{(m+2)(m+1)} a_m^{(n)}, \quad (2.29)$$

où on a remplacé  $\varepsilon$  par sa valeur (2.25).

Deux différentes relations de récurrence sont à distinguer, une pour les valeurs paires de  $m$  ou  $n$  et l'autre pour les valeurs impaires.

Pour  $n = 0$ , qui correspond au niveau fondamental, nous avons :

$$h_0(y) = a_0, \quad (2.30)$$

et donc

$$\psi_0(y) = a_0 \exp(-y^2/2), \quad (2.31)$$

C'est la fonction d'onde de l'état fondamental. Le paramètre  $a_0$  est un paramètre de normalisation.

Pour  $n = 1$ , qui correspond au premier état excité, nous avons  $a_0 = 0$  (se qui mène à des valeurs nulles pour tous les coefficients pairs) et :

$$h_1(y) = a_1 y, \quad (2.32)$$

ainsi, la fonction d'onde associée au premier état excité sera donnée par :

$$\psi_1(y) = a_1 y \exp(-y^2/2), \quad (2.33)$$

Là aussi, le premier  $a_1$  est un paramètre de normalisation.

Pour  $n = 2$ , , tous les coefficients impairs son nuls et :

$$h_2(y) = a_0 + a_2 y^2, \quad (2.34)$$

où le paramètre  $a_2$  sera déterminé par la relation de récurrence (2.29) :

$$a_2 = \frac{-2(0-2)}{(0+2)(0+1)}a_0 = -2a_0, \quad (2.35)$$

ainsi,

$$h_2(y) = a_0(1 - 2y^2), \quad (2.36)$$

et donc

$$\psi_2(y) = a_0(1 - 2y^2) \exp(-y^2/2), \quad (2.37)$$

Les fonctions d'onde pour les différentes valeurs de  $n$  peuvent être déterminées en suivant la même démarche. On obtient pour  $n = 3$  et  $n = 4$  :

$$\begin{aligned} h_3(y) &= a_1y + a_3y^3, \\ h_4(y) &= a_0 + a_2y^2 + a_4y^4, \end{aligned} \quad (2.38)$$

On peut vérifier que les fonctions  $h_n(y)$  sont liés aux polynômes bien connus d'Hermite  $H_n(y)$  :

$$\begin{aligned} H_0 &= 1, \\ H_1 &= 2y, \\ H_2 &= 4y^2 - 2, \\ H_3 &= 8y^3 - 12y, \\ H_4 &= 16y^4 - 48y^2 + 12, \\ &\vdots = \vdots \end{aligned}$$

En termes des polynômes d'Hermite, nous pouvons exprimer les fonctions d'onde des états stationnaires de l'oscillateur harmonique à une dimension :

$$\psi_n(x) = A_n H_n \left( \sqrt{m\omega/\hbar} x \right) \exp \left( -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right), \quad (2.39)$$

où  $A_n$  des constantes de normalisation ayant pour valeur :

$$A_n = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4}, \quad (2.40)$$

## 2.3 L'Oscillateur harmonique à trois dimensions

Considérons une particule soumise à un potentiel harmonique à trois dimensions  $V(x, y, z)$  de pulsations  $\omega_x$ ,  $\omega_y$  et  $\omega_z$  pour les différentes direction  $Ox$ ,  $Oy$  et  $Oz$  respectivement :

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}m\omega_x^2x^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2y^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2z^2, \quad (2.41)$$

Si cet oscillateur est isotrope, se qui implique des pulsations égales ( $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$ ), le potentiel (2.41) se réduit à une fonction de la seule variable radiale  $r$ , ( $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ ) :

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2}m\omega^2r^2, \quad (2.42)$$

Nous avons dans ce cas un problème à champ central, appelé souvent l'oscillateur harmonique sphérique.

L'équation de Schrödinger radiale pour l'oscillateur harmonique sphérique (2.42) s'écrit sous la forme :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + \frac{1}{2}m\omega^2r^2 - E \right) U(r) = 0, \quad (2.43)$$

On va résoudre cette équation en examinant le comportement asymptotique des solutions.

Lorsque  $r \rightarrow 0$ , les deux termes ( $m\omega^2r^2/2$ ) et  $E$  seront négligés devant le terme centrifuge  $\hbar^2 l(l+1)/(2mr^2)$ . L'équation (2.43) devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} U(r) = 0, \quad (2.44)$$

qui admet des solutions de la forme  $U(r) \sim r^{(l+1)}$ .

Lorsque  $r \rightarrow \infty$ , les deux termes  $\hbar^2 l(l+1)/(2mr^2)$  et  $E$  seront négligés devant ( $m\omega^2r^2/2$ ). L'équation (2.43) devient dans ce cas :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2}m\omega^2r^2 \right) U(r) = 0, \quad (2.45)$$

qui admet des solutions de type  $U(r) \sim \exp[-m\omega^2r^2/(2\hbar)]$ .

En combinant les deux équations (2.44) et (2.45) on peut écrire la solution de l'équation

(2.43) sous la forme :

$$U(r) = f(r)r^{(l+1)} \exp \left[ -m\omega^2 r^2 / (2\hbar) \right], \quad (2.46)$$

où  $f(r)$  est une fonction de  $r$ . Substituant cette expression dans (2.43) on obtient une équation pour la fonction  $f(r)$  :

$$\frac{d^2}{dr^2} f(r) + 2 \left( \frac{l+1}{r} - \frac{m\omega}{\hbar} r \right) \frac{d}{dr} f(r) + \left[ \frac{2mE}{\hbar^2} - (2l+3) \frac{m\omega}{\hbar} \right] f(r) = 0, \quad (2.47)$$

On cherche maintenant des solutions pour (2.47) sous forme de série de puissance :

$$f(r) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n = a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + \dots + a_n r^n + \dots \quad (2.48)$$

Substituant cette fonction dans l'équation (2.47), nous obtenons :

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[ n(n-1) a_n r^{n-2} + 2 \left( \frac{l+1}{r} - \frac{m\omega}{\hbar} r \right) n a_n r^{n-1} + \left( \frac{2mE}{\hbar^2} - (2l+3) \frac{m\omega}{\hbar} \right) a_n r^n \right] = 0, \quad (2.49)$$

qui se réduit à :

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[ n(n-1+2l) a_n r^{n-2} + \left( \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2m\omega}{\hbar} n - (2l+3) \frac{m\omega}{\hbar} \right) a_n r^n \right] = 0, \quad (2.50)$$

Pour que cette équation soit satisfaite quel que soit  $r$ , il faut que tous les coefficients des différentes puissances de  $r$  s'annulent séparément. Nous aboutissons à la relation de récurrence suivante :

$$a_{n+2} = \frac{m\hbar\omega(2n+2l+3) - 2E}{\hbar^2(n+2)(n+2l+3)} a_n, \quad (2.51)$$

pour  $n \geq 2$ .

Pour  $n = 0$  et  $n = 1$ , l'équation (2.50) mène à :

$$\begin{aligned} 0 \times (2l+1) a_0 &= 0, \\ 1 \times (2l+2) a_1 &= 0, \end{aligned} \quad (2.52)$$

Ce qui implique que  $a_0$  n'est pas forcément nul et que  $a_1$  est nécessairement nul puisque  $l$  est un entier positif (ou nul). Par conséquent, la fonction  $f(r)$  ne doit contenir que des puissances

paires :

$$f(r) = \sum_{i=0,2,4,\dots}^{\infty} a_i r^i = \sum_{n=0}^{\infty} a_{2n} r^{2n}, \quad (2.53)$$

où tous les coefficients  $a_{2n}$  sont proportionnel à  $a_0$ .

Notons que lorsque  $n \rightarrow \infty$  la fonction  $f(r)$  diverge avec un comportement asymptotique comme  $\exp(r^2)$ . La série doit être stoppé à une certaine puissance maximum  $r^{n'}$ , c'est un polynôme de degré  $n'$ . le coefficient  $a_{n'+2}$  doit donc s'annuler. L'équation (2.51) donne :

$$\hbar\omega (2n' + 2l + 3) - 2E = 0, \quad (2.54)$$

où  $n'$  est un nombre pair. Si on introduit le nombre entier  $N = n'/2$  ( $N = 1, 2, 3, \dots$ ) on aboutit à la formule de quantification de l'énergie :

$$E_{N,l} = \hbar\omega (2N + l + 3/2) = \hbar\omega (n + 3/2), \quad (2.55)$$

avec  $n = 2N + l$ .

Le niveau fondamentale correspond à  $n = 0$ , ( $N = 0$  et  $l = 0$ ), et a comme énergie la valeur  $E_{0,0} = 3\hbar\omega/2$ . La fonction d'onde radiale associée sera donc :

$$U_{0,0}(r) = a_0 r \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right), \quad (2.56)$$

où

$$R_{0,0}(r) = a_0 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right), \quad (2.57)$$

qui est de type gaussienne. Le paramètre  $a_0$  sera déterminer et imposant la condition de normalisation. La fonction d'onde  $\psi$  prend la forme :

$$\begin{aligned} \psi_0(r) &= \psi_{0,0}(r, \theta, \varphi) = a_0 r \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right) Y_0^0(\theta, \varphi), \\ &\propto \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right). \end{aligned} \quad (2.58)$$

Puisque  $Y_0^0(\theta, \varphi)$  est une constante,

$$Y_0^0(\theta, \varphi) = (4\pi)^{-1/2}, \quad (2.59)$$

Pour un hamiltonien de forme :

$$\hat{H} = a\hat{p}_x^2 + k\hat{x}^2, \quad (2.60)$$

le spectre d'énergie s'exprime sous la forme :

$$E_n = \hbar\sqrt{ak}(2n + 3), \quad (2.61)$$

et l'énergie de l'état fondamental vaut :

$$E_0 = 3\hbar\sqrt{ak}, \quad (2.62)$$

qui n'est d'autre que  $3\hbar\omega/2$  et la fonction d'onde :

$$\begin{aligned} \psi_0(\vec{r}) &\propto \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right), \\ &\propto \exp\left(-\frac{1}{2\hbar}\sqrt{\frac{k}{a}}r^2\right). \end{aligned} \quad (2.63)$$

Le premier état excité correspond à  $n = 1$ , ( $N = 0$  et  $l = 1$ ), a pour énergie la valeur  $E_{0,1} = 5\hbar\omega/2$ . La fonction d'onde associée sera de la forme :

$$U_{0,1}(\vec{r}) = a_0 r^3 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right), \quad (2.64)$$

Le deuxième état excité correspond à  $n = 2$ , ( $N = 1$  et  $l = 0$ ) ou ( $N = 0$  et  $l = 2$ ) a pour énergie la valeur  $E_{1,0} = 7\hbar\omega/2$ . La fonction d'onde associée sera de la forme :

$$U(\vec{r}) = (a_0 + a_2 r^2) r \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right) = a_0 \left(1 - \frac{2}{3} \frac{m\omega}{\hbar} r^2\right) r \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right), \quad (2.65)$$

Cet état peut être considéré comme étant le premier état excité des états  $s$ , c'est-à-dire de moment orbital nul ( $l = 0$ ) [11].

## 2.4 L'Oscillateur Harmonique à deux corps

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

$$V^{(2)} = k (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 = k\vec{r}^2, \quad (2.66)$$

et l'hamiltonien du mouvement relatif est :

$$\hat{H}_r^{(2)} = \frac{1}{2\mu_r} \vec{p}_r^2 + k\vec{r}^2, \quad (2.67)$$

Le problème se réduit donc à un problème d'une particule dans un espace à trois dimensions plongées dans potentiel central de type harmonique. Le spectre d'énergie s'obtient donc par l'équation (2.62) qui devient dans un système d'unité où  $\hbar = 1$  :

$$E_n^{(2)} = (2n + 3) \sqrt{\frac{k}{2\mu}}, \quad (2.68)$$

et l'énergie du niveau fondamental se réduit à :

$$E_0^{(2)} = 3 \sqrt{\frac{k}{2\mu}}. \quad (2.69)$$

## Chapitre 3

# L'Oscillateur Harmonique à quatre corps

*Nous nous intéresserons dans ce chapitre au problème à  $N$  corps interagissant via des forces à deux corps qui dérivent de potentiels harmoniques. Ce type de systèmes est souvent appelé "Oscillateur harmonique à  $N$  corps".*

Considérons un système à quatre corps en interaction harmonique à deux corps ne dépendant que de la distance relative entre eux :

$$V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = k_{ij} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2. \quad (3.1)$$

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

$$k_{\alpha\beta} = k_{\alpha\gamma} \quad \text{si} \quad m_\beta = m_\gamma. \quad (3.2)$$

L'hamiltonien du système s'écrit donc :

$$\hat{H}^{(4)} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_4} + k_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + k_{13}(\vec{r}_1 - \vec{r}_3)^2 + k_{14}(\vec{r}_1 - \vec{r}_4)^2 + k_{23}(\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2 + k_{24}(\vec{r}_2 - \vec{r}_4)^2 + k_{34}(\vec{r}_3 - \vec{r}_4)^2 \quad (3.3)$$

Nous allons considérer à tour de rôle quelques configurations de masse, à savoir :

- toutes les masses égales : configuration qu'on notera  $(m, m, m, m)$ .
- configurations avec deux masses différentes qu'on notera  $(m, m, m, M)$  et  $(m, m, M, M)$ .
- la configuration avec trois masses différentes qu'on notera  $(m, m, m_3, M)$ .

### 3.1 Coordonnées de Jacobi et problème à $N$ corps

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

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

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

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

Considérons maintenant un système de  $N$  particules de masses  $m_i$  et de positions  $\vec{r}_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ). Soit  $\mathbf{M} = m_1 + \dots + m_N$  la masse totale du système et  $\vec{R}$  la coordonnée du centre de masse :

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

Nous définissons la  $j$ -ème coordonnée de Jacobi comme la coordonnée relative entre la  $(j+1)$ ème particule et le centre de masse des  $j$  premières :

$$\vec{\rho}_j = -\vec{r}_{j+1} + \frac{1}{\sum_{i=1}^j m_i} \sum_{i=1}^j m_i \vec{r}_i, \quad j = 1, \dots, N-1. \quad (3.4)$$

On obtient ainsi  $N-1$  coordonnées de Jacobi. Donc, au lieu de travailler avec le système de coordonnées des particules individuelles  $\{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N\}$ , on utilise un autre système de coordonnées formé par les coordonnées de Jacobi avec la coordonnée du centre de masse  $\{\vec{\rho}_1, \dots, \vec{\rho}_{N-1}, \vec{R}\}$ .

Le recours à l'utilisation de ces coordonnées a pour but de séparer le mouvement du centre de masse du système de particule du mouvement relatif, comme nous le verrons dans ce qui suit.

## 3.2 Système ayant toutes les masses égale

**Configuration**  $(m, m, m, m)$

Nous devons choisir trois ( $3 = 4 - 1$ ) coordonnées de Jacobi. La coordonnée relative des deux premières particules que nous noterons  $\vec{\rho}_1$  et le vecteur  $\vec{\rho}_2$  liant la troisième particule et le centre de masse des deux premières particules ( $G_{12}$ ), et  $\vec{\rho}_3$  vecteur liant la quatrième particule et le centre de masse des trois premières particules ( $G_{123}$ ) :

$$\begin{aligned}\vec{\rho}_1 &= -\vec{r}_2 + \vec{r}_1, \\ \vec{\rho}_2 &= -\vec{r}_3 + \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \\ \vec{\rho}_3 &= -\vec{r}_4 + \frac{1}{3}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3).\end{aligned}\tag{3.5}$$

*Figure 1* : Coordonnées de Jacobi pour le système à quatre corps  $(m, m, m, m)$ .

La coordonnée du centre de masse est définie par :

$$\vec{R} = \frac{1}{4}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3 + \vec{r}_4).\tag{3.6}$$

Nous avons un système de 4 équations (3.5) et (3.6). On peut inverser ce système pour obtenir les expressions des coordonnées individuelles  $\vec{r}_1$ ,  $\vec{r}_2$ ,  $\vec{r}_3$  et  $\vec{r}_4$  en termes des coordonnées de Jacobi  $\vec{\rho}_1$ ,  $\vec{\rho}_2$ ,  $\vec{\rho}_3$  et de la coordonnée du centre de masse  $\vec{R}$  les relations. On obtient :

$$\begin{aligned}\vec{r}_1 &= \vec{R} + \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{1}{3}\vec{\rho}_2 + \frac{1}{4}\vec{\rho}_3, \\ \vec{r}_2 &= \vec{R} - \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{1}{3}\vec{\rho}_2 + \frac{1}{4}\vec{\rho}_3, \\ \vec{r}_3 &= \vec{R} - \frac{2}{3}\vec{\rho}_2 + \frac{1}{4}\vec{\rho}_3, \\ \vec{r}_4 &= \vec{R} - \frac{3}{4}\vec{\rho}_3.\end{aligned}\tag{3.7}$$

En termes des vitesses,

$$\dot{\vec{r}}_1 = d\vec{r}_1/dt, \quad \dot{\vec{r}}_2 = d\vec{r}_2/dt, \quad \dot{\vec{r}}_3 = d\vec{r}_3/dt \quad \text{et} \quad \dot{\vec{r}}_4 = d\vec{r}_4/dt,$$

l'expression de l'énergie cinétique dans l'hamiltonien,

$$T^{(4)} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m} = \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_2^2 + \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_3^2 + \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_4^2, \quad (3.8)$$

se réduit en fonction des vitesses relatives aux coordonnées de Jacobi,

$$\dot{\vec{\rho}}_2 = d\vec{\rho}_1/dt, \quad \dot{\vec{\rho}}_2 = d\vec{\rho}_2/dt, \quad \text{et} \quad \dot{\vec{\rho}}_3 = d\vec{\rho}_3/dt,$$

à :

$$T^{(4)} = \frac{1}{2}(4m)\dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{m}{2}\right)\dot{\vec{\rho}}_1^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{2m}{3}\right)\dot{\vec{\rho}}_2^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{3m}{4}\right)\dot{\vec{\rho}}_3^2 \quad (3.9)$$

où  $\dot{\vec{R}} = d\vec{R}/dt$  est la vitesse du centre de masse.

Les masses

$$\mu_{\rho_1} = \frac{m}{2}, \quad \mu_{\rho_2} = \frac{2m}{3} \quad \text{et} \quad \mu_{\rho_3} = \frac{3m}{4}, \quad \mu_R = 4m, \quad (3.10)$$

sont considérées comme des masses fictives ou réduites liées respectivement aux coordonnées  $\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{\rho}_3$  et  $\vec{R}$ . Il est clair que la masse fictive liée à la coordonnée du centre de masse ne peut être que la masse totale du système  $\mathbf{M} = 4m$ .

En termes des moments conjugués  $\vec{P}_R, \vec{p}_{\rho_1}, \vec{p}_{\rho_2}$  et  $\vec{p}_{\rho_3}$  l'énergie cinétique s'écrit :

$$T^{(4)} = \frac{1}{2\mathbf{M}}\vec{P}_R^2 + \frac{1}{2(m/2)}\vec{p}_{\rho_1}^2 + \frac{1}{2(2m/3)}\vec{p}_{\rho_2}^2 + \frac{1}{2(3m/4)}\vec{p}_{\rho_3}^2. \quad (3.11)$$

A son tour, l'expression de l'énergie potentielle  $V^{(4)}$ ,

$$V^{(4)} = k(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + k(\vec{r}_1 - \vec{r}_3)^2 + k(\vec{r}_1 - \vec{r}_4)^2 \\ + k(\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2 + k(\vec{r}_2 - \vec{r}_4)^2 + k(\vec{r}_3 - \vec{r}_4)^2,$$

dans les condition (3.2), c'est-à-dire que les constantes de couplage sont toutes égales :  $k_{ij} = k$ , ( $i < j = 1, 2, 3, 4$ ), se réduit en termes de coordonnées de Jacobi à :

$$V^{(4)} = 2k\vec{\rho}_1^2 + \frac{8}{3}k\vec{\rho}_2^2 + 3k\vec{\rho}_3^2, \quad (3.12)$$

L'hamiltonien (3.3) se simplifie en :

$$\hat{H}^{(4)} = \frac{1}{2M} \vec{P}_R^2 + \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_1}} \vec{p}_{\rho_1}^2 + 2k\vec{\rho}_1^2 \right] + \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_2}} \vec{p}_{\rho_2}^2 + \frac{8}{3}k\vec{\rho}_2^2 \right] + \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_3}} \vec{p}_{\rho_3}^2 + 3k\vec{\rho}_3^2 \right], \quad (3.13)$$

En retranchant l'énergie cinétique du centre de masse de l'hamiltonien, on obtient :

$$\hat{H}_r^{(4)} = \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_1}} \vec{p}_{\rho_1}^2 + 2k\vec{\rho}_1^2 \right] + \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_2}} \vec{p}_{\rho_2}^2 + \frac{8}{3}k\vec{\rho}_2^2 \right] + \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_3}} \vec{p}_{\rho_3}^2 + 3k\vec{\rho}_3^2 \right], \quad (3.14)$$

l'hamiltonien décrivant le mouvement relatif du système de particules. Il est clair que  $\hat{H}_r^{(4)}$  n'est d'autre que l'hamiltonien d'un système composé de trois oscillateurs harmoniques découplés.

L'énergie du système est alors la somme des énergies des trois oscillateurs. En utilisant le résultat (2.61), nous obtenons :

$$\begin{aligned} E_{n_1, n_2, n_3}^{(4)} &= \hbar \sqrt{\frac{1}{2\mu_{\rho_1}} 2k} (2n_1 + 3) + \hbar \sqrt{\frac{1}{2\mu_{\rho_2}} \frac{8}{3}k} (2n_2 + 3) + \hbar \sqrt{\frac{1}{2\mu_{\rho_3}} 3k} (2n_3 + 3), \\ &= \hbar \sqrt{\frac{2}{m}} k [(2n_1 + 3) + (2n_2 + 3) + (2n_3 + 3)], \\ &= \hbar \sqrt{\frac{2}{m}} k [2n + 9] \end{aligned} \quad (3.15)$$

où  $n_1, n_2, n_3$  et  $n$  des entiers positifs ou nuls.

### L'état fondamentale

L'énergie du niveau fondamental  $E_0^{(4)}$  du système à quatre corps avec toutes les masses égales correspond donc à  $n_1 = n_2 = n_3 = n = 0$ . Nous avons :

$$E_0^{(4)} = 9\hbar \sqrt{\frac{2}{m}} k. \quad (3.16)$$

La fonction d'onde associée est le produit des trois fonctions d'onde. Elle apparaît donc sous la forme d'une gaussienne simple :

$$\begin{aligned}
\psi_0(\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{\rho}_3) &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2k}{1/(2\mu_{\rho_1})}}\vec{\rho}_1^2\right) \times \exp\left(-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{(8/3)k}{1/(2\mu_{\rho_2})}}\vec{\rho}_2^2\right) \times \exp\left(-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3k}{1/(2\mu_{\rho_3})}}\vec{\rho}_3^2\right), \\
&\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\sqrt{4k\mu_{\rho_1}}\vec{\rho}_1^2\right) \times \exp\left(-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{16}{3}k\mu_{\rho_2}}\vec{\rho}_2^2\right) \times \exp\left(-\frac{1}{2}\sqrt{6k\mu_{\rho_3}}\vec{\rho}_3^2\right), \\
&\propto \exp(-\alpha\vec{\rho}_1^2 - \beta\vec{\rho}_2^2 - \gamma\vec{\rho}_3^2)
\end{aligned} \tag{3.17}$$

avec :

$$\begin{aligned}
\alpha &= \sqrt{k\mu_{\rho_1}} &= \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{km}, \\
\beta &= 2\sqrt{\frac{1}{3}k\mu_{\rho_2}} &= \frac{2\sqrt{2}}{3}\sqrt{km}, \\
\gamma &= \frac{1}{2}\sqrt{6k\mu_{\rho_3}} &= \frac{3\sqrt{2}}{4}\sqrt{km}.
\end{aligned}$$

### 3.3 Système ayant deux masses différentes

#### 3.3.1 Configuration $(m, m, m, M)$

Le système considéré ici est formé de quatre particules dont les trois premières particules comme ayant des masses égales  $m_1 = m_2 = m_3 = m$  et la quatrième particule avec une masse différente  $m_4 = M$ .

Comme  $m_1 = m_2 = m_3$ , les conditions (3.2) impliquent :

$$\begin{aligned}
k_{12} &= k_{13} = k_{23} = k, \\
k_{14} &= k_{24} = k_{34} = K.
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Pour cette configuration de masses, la coordonnée du centre de masse à comme expression :

$$\vec{R} = \frac{m}{3m+M}\vec{r}_1 + \frac{m}{3m+M}\vec{r}_2 + \frac{m}{3m+M}\vec{r}_3 + \frac{M}{3m+M}\vec{r}_4. \tag{3.19}$$

On fera le même choix de coordonnées de Jacobi, équation (3.5), que pour la configuration de masses  $(m, m, m, m)$ .

*Figure 2* : Coordonnées de Jacobi pour les système à quatre corps  $(m, m, m, M)$ .

On peut tirer les expressions des coordonnées individuelles  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3$  et  $\vec{r}_4$  en termes des coordonnées de Jacobi  $\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{\rho}_3$  et de la coordonnée du centre de masse  $\vec{R}$  en inversant le système d'équations (3.5) et (3.19). Nous obtenons :

$$\begin{aligned}\vec{r}_1 &= \vec{R} + \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{1}{3}\vec{\rho}_2 + M\frac{\vec{\rho}_3}{M+3m}, \\ \vec{r}_2 &= \vec{R} - \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{1}{3}\vec{\rho}_2 + M\frac{\vec{\rho}_3}{M+3m}, \\ \vec{r}_3 &= \vec{R} - \frac{2}{3}\vec{\rho}_2 + M\frac{\vec{\rho}_3}{M+3m}, \\ \vec{r}_4 &= \vec{R} - 3m\frac{\vec{\rho}_3}{M+3m}.\end{aligned}\tag{3.20}$$

On en déduit alors l'expression de l'énergie cinétique dans l'hamiltonien exprimée en termes des vitesses relatives aux coordonnées de Jacobi  $\dot{\vec{\rho}}_i$  à :

$$\begin{aligned}T^{(4)} &= \frac{\dot{\vec{p}}_1^2}{2m} + \frac{\dot{\vec{p}}_2^2}{2m} + \frac{\dot{\vec{p}}_3^2}{2m} + \frac{\dot{\vec{p}}_4^2}{2M} \\ &= \frac{1}{2}(M+3m)\dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{m}{2}\right)\dot{\vec{\rho}}_1^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{2m}{3}\right)\dot{\vec{\rho}}_2^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{3Mm}{M+3m}\right)\dot{\vec{\rho}}_3^2.\end{aligned}\tag{3.21}$$

Les masses

$$\mu_R = M + 3m \quad , \quad \mu_{\rho_1} = \frac{m}{2} \quad , \quad \mu_{\rho_2} = \frac{2m}{3} \quad \text{et} \quad \mu_{\rho_3} = \frac{3Mm}{M+3m} \quad ,\tag{3.22}$$

seront considérées comme des masses fictives ou réduites liées respectivement aux coordonnées  $\vec{R}, \vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2$  et  $\vec{\rho}_3$ . La masse totale du système  $\mathbf{M} = \mu_R$ .

En termes des moments conjugués  $\vec{P}_R, \vec{p}_{\rho_1}, \vec{p}_{\rho_2}$  et  $\vec{p}_{\rho_3}$  la partie cinétique dans l'hamiltonien (3.3) s'écrit donc :

$$T^{(4)} = \frac{1}{2(3m+M)}\vec{P}_R^2 + \frac{1}{2(m/2)}\vec{p}_{\rho_1}^2 + \frac{1}{2(2m/3)}\vec{p}_{\rho_2}^2 + \frac{1}{2\left(\frac{3Mm}{M+3m}\right)}\vec{p}_{\rho_3}^2.\tag{3.23}$$

Et en termes des coordonnées  $\vec{R}, \vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2$  et  $\vec{\rho}_3$  la partie potentielle  $V^{(4)}$  dans l'hamiltonien (3.3) se réduit à :

$$\begin{aligned}V^{(4)} &= k(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + k(\vec{r}_1 - \vec{r}_3)^2 + K(\vec{r}_1 - \vec{r}_4)^2 + k(\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2 + K(\vec{r}_2 - \vec{r}_4)^2 + K(\vec{r}_3 - \vec{r}_4)^2 \\ &= \frac{1}{2}(K+3k)\rho_1^2 + \frac{2}{3}(K+3k)\rho_2^2 + 3K\rho_3^2.\end{aligned}\tag{3.24}$$

L'hamiltonien du système se simplifie en :

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(4)} &= \frac{1}{2M} \vec{P}_R^2 + \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_1}} \vec{p}_{\rho_1}^2 + \frac{1}{2} \vec{\rho}_1^2 (K + 3k) \right] \\ &+ \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_2}} \vec{p}_{\rho_2}^2 + \frac{2}{3} \vec{\rho}_2^2 (K + 3k) \right] + \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_3}} \vec{p}_{\rho_3}^2 + 3k \vec{\rho}_3^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Et l'hamiltonien relatif se réduit donc en une somme de trois oscillateurs harmoniques :

$$\hat{H}_r^{(4)} = \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_1}} \vec{p}_{\rho_1}^2 + \frac{1}{2} \vec{\rho}_1^2 (K + 3k) \right] + \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_2}} \vec{p}_{\rho_2}^2 + \frac{2}{3} \vec{\rho}_2^2 (K + 3k) \right] + \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_3}} \vec{p}_{\rho_3}^2 + 3k \vec{\rho}_3^2 \right]. \quad (3.26)$$

Le spectre d'énergie sera donné par la somme des énergies des trois oscillateurs :

$$\begin{aligned} E_{n_1, n_2, n_3}^{(4)} &= \hbar \sqrt{\frac{1}{4\mu_{\rho_1}} (K + 3k)} (2n_1 + 3) + \hbar \sqrt{\frac{1}{2\mu_{\rho_2}} (2K + k)} (2n_2 + 3) + \hbar \sqrt{\frac{1}{2\mu_{\rho_3}} 3k} (2n_3 + 3) \\ &= \hbar \sqrt{\frac{1}{2m} (K + 3k)} [2(n_1 + n_2) + 6] + \hbar \sqrt{\frac{M+3m}{2Mm}} k (2n_3 + 3), \end{aligned} \quad (3.27)$$

où  $n_1, n_2$  et  $n_3$  des entiers positifs ou nuls.

### L'état fondamental

L'énergie du niveau fondamental  $E_0^{(4)}$  du système dans la configuration  $(m, m, m, M)$  correspond donc à  $n_1 = n_2 = n_3 = 0$ . Nous avons :

$$E_0^{(4)} = 6\hbar \sqrt{\frac{1}{2m} (K + 3k)} + 3\hbar \sqrt{\frac{M + 3m}{2Mm}} k \quad (3.28)$$

La fonction d'onde associée est le produit des trois fonctions d'onde. Elle apparaît dans ce cas aussi sous forme d'une gaussienne simple :

$$\begin{aligned} \psi_0(\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{\rho}_3) &\propto \exp\left(-\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\frac{1}{2}(K+3k)}{1/(2\mu_{\rho_1})}} \vec{\rho}_1^2\right) \times \exp\left(-\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\frac{2}{3}(K+3k)}{1/(2\mu_{\rho_2})}} \vec{\rho}_2^2\right) \times \exp\left(-\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3k}{1/(2\mu_{\rho_3})}} \vec{\rho}_3^2\right), \\ &\propto \exp\left(-\frac{1}{2} \sqrt{(K + 3k) \mu_{\rho_1}} \vec{\rho}_1^2\right) \times \exp\left(-\frac{1}{2} \sqrt{\frac{4}{3} (K + 3k) \mu_{\rho_2}} \vec{\rho}_2^2\right) \times \exp\left(-\frac{1}{2} \sqrt{6k \mu_{\rho_3}} \vec{\rho}_3^2\right), \\ &\propto \exp(-\alpha \vec{\rho}_1^2 - \beta \vec{\rho}_2^2 - \gamma \vec{\rho}_3^2). \end{aligned} \quad (3.29)$$

### 3.3.2 Configuration $(m, m, M, M)$

Le système considéré ici est formé de deux particules de masses égales  $m_1 = m_2 = m$  et les deux particules restantes de masses égales  $m_3 = m_4 = M$ , ( $m$  et  $M$  sont en général différentes, mais pas forcément).

Les coordonnées de Jacobi  $\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2$  et  $\vec{\rho}_3$  sont définies de la même manière que dans le cas de masses toutes égales,

*Figure 4* : Coordonnées de Jacobi pour les système à quatre corps standard  $(m, m, M, M)$ .

Les expressions des coordonnées de Jacobi et de la coordonnée du centre de masse sont, dans ce cas :

$$\begin{aligned}\vec{\rho}_1 &= -\vec{r}_2 + \vec{r}_1, \\ \vec{\rho}_2 &= -\vec{r}_3 + \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \\ \vec{\rho}_3 &= -\vec{r}_4 + \frac{1}{2m+M}(m\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 + M\vec{r}_3)\end{aligned}\tag{3.30}$$

et

$$\vec{R} = \frac{1}{2M + 2m}(m\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 + M\vec{r}_3 + M\vec{r}_4).\tag{3.31}$$

Nous allons procéder de la même manière que pour les configurations précédentes. En inversant le système d'équations (3.30) et (3.31), 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  $\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2$  et  $\vec{\rho}_3$  et de la coordonnée du centre de masse  $\vec{R}$  avec le résultat :

$$\begin{aligned}\vec{r}_1 &= \vec{R} + \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{M}{M+2m}\vec{\rho}_2 + \frac{M}{2M+2m}\vec{\rho}_3, \\ \vec{r}_2 &= \vec{R} - \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{M}{M+2m}\vec{\rho}_2 + \frac{M}{2M+2m}\vec{\rho}_3, \\ \vec{r}_3 &= \vec{R} - \frac{2m}{M+2m}\vec{\rho}_2 + \frac{M}{2M+2m}\vec{\rho}_3, \\ \vec{r}_4 &= \vec{R} - \frac{M+2m}{2M+2m}\vec{\rho}_3.\end{aligned}\tag{3.32}$$

On en déduit alors l'expression de l'énergie cinétique dans l'hamiltonien exprimé en termes des vitesses,

$$T^{(4)} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_4} = \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_2^2 + \frac{1}{2}M\dot{\vec{r}}_3^2 + \frac{1}{2}M\dot{\vec{r}}_4^2,\tag{3.33}$$

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

$$T^{(4)} = \frac{1}{2}(2M + 2m)\dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2}\frac{m}{2}\dot{\vec{\rho}}_1^2 + \frac{1}{2}\frac{2Mm}{M+2m}\dot{\vec{\rho}}_2^2 + \frac{1}{2}\frac{M(M+2m)}{2(M+m)}\dot{\vec{\rho}}_3^2. \quad (3.34)$$

avec les masses réduites liées aux coordonnées de Jacobi

$$\mu_{\rho_1} = \frac{m}{2}, \quad \mu_{\rho_2} = \frac{2mM}{2m+M}, \quad \mu_{\rho_3} = M\frac{M+2m}{2(M+m)}. \quad (3.35)$$

La masse totale du système est  $\mathbf{M} = 2M + 2m$ .

En termes des moments conjugués  $\vec{P}_R, \vec{p}_{\rho_1}, \vec{p}_{\rho_2}$  et  $\vec{p}_{\rho_3}$  l'énergie cinétique s'écrit :

$$T^{(4)} = \frac{1}{2\mathbf{M}}\vec{P}_R^2 + \frac{1}{2\left(\frac{m}{2}\right)}\vec{p}_{\rho_1}^2 + \frac{1}{2\left(\frac{2Mm}{M+2m}\right)}\vec{p}_{\rho_2}^2 + \frac{1}{2\left(\frac{M(M+2m)}{2(M+m)}\right)}\vec{p}_{\rho_3}^2. \quad (3.36)$$

Pour cette configuration  $(m, m, M, M)$ ,  $m_1 = m_2 = m$  et  $m_3 = m_4 = M$ , les conditions (3.2) impliquent :

$$k = k_{13} = k_{14} = k_{23} = k_{24}. \quad (3.37)$$

L'expression de l'énergie potentielle  $V^{(4)}$  se réduit à :

$$\begin{aligned} V^{(4)} &= k_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + k(\vec{r}_1 - \vec{r}_3)^2 + k(\vec{r}_1 - \vec{r}_4)^2 + k(\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2 + k(\vec{r}_2 - \vec{r}_4)^2 + k_{34}(\vec{r}_3 - \vec{r}_4)^2, \\ &= (k + k_{12})\vec{\rho}_1^2 + \frac{4(M^2k + 2km^2 + m^2k_{34} + 2Mkm)}{(M+2m)^2}\vec{\rho}_2^2 + (2k + k_{34})\vec{\rho}_3^2 - 4\frac{mk_{34} - Mk}{M+2m}\vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3. \end{aligned} \quad (3.38)$$

C'est une forme quadratique en les variables  $\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2$  et  $\vec{\rho}_3$  qui n'est pas diagonale, justifiée par la présence du dernier terme en  $(\vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3)$ . L'hamiltonien relatif du système s'écrit donc sous forme de la somme de trois oscillateurs harmoniques couplés. On dit aussi que l'hamiltonien a une forme quadratique non diagonale :

$$\begin{aligned} \hat{H}_r^{(4)} &= \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_1}}\vec{p}_{\rho_1}^2 + (k + k_{12})\vec{\rho}_1^2 \right] + \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_2}}\vec{p}_{\rho_2}^2 + 4\frac{M^2k + 2km^2 + m^2k_{34} + 2Mkm}{(M+2m)^2}\vec{\rho}_2^2 \right] \\ &+ \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_3}}\vec{p}_{\rho_3}^2 + (2k + k_{34})\vec{\rho}_3^2 \right] - 4\frac{mk_{34} - Mk}{M+2m}\vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Par conséquent, le spectre d'énergie du système ne peut pas être déduit directement. Il faut éliminer le terme non diagonal en  $(\vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3)$ . En général, nous pouvons atteindre cet objectif

en effectuant des changements de variables ( $\vec{\rho}_i \rightarrow \vec{\rho}'_i$ ). Attention, en essayant d'éliminer le terme croisé dans l'expression de l'énergie potentielle, on risque de faire apparaître un autre terme croisé en  $(\vec{p}_{\rho_i} \cdot \vec{p}_{\rho_j})$  dans l'expression de l'énergie cinétique. La méthode adoptée pour diagonaliser l'hamiltonien est bien détaillée dans la référence [11].

Ce qui est important pour nous, est la forme de la fonction d'onde associée à l'état fondamental qui ne sera plus une gaussienne simple, mais plutôt une gaussienne corrélée :

$$\psi_0(\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{\rho}_3) \propto \exp(-\alpha \vec{\rho}_1^2 - \beta \vec{\rho}_2^2 - \gamma \vec{\rho}_3^2 + \delta \vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3). \quad (3.40)$$

### 3.3.3 Configuration $(m, m, M, M)$ : Autre choix de coordonnées de Jacobi

Comme expliqué ci-dessus, la diagonalisation de l'hamiltonien peut être réalisé en effectuant des changements de variables ( $\vec{\rho}_i \rightarrow \vec{\rho}'_i$ ). En d'autres termes, en adoptant des expressions des coordonnées de Jacobi différentes que (3.32) dites standard nous pouvons atteindre le résultat souhaité. Le choix approprié des coordonnées de Jacobi peut se faire depuis le début. Soit le choix suivant :

$$\begin{aligned} \vec{\rho}_1 &= -\vec{r}_2 + \vec{r}_1, \\ \vec{\rho}_2 &= -\vec{r}_3 + \vec{r}_4, \\ \vec{\rho}_3 &= \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) - \frac{1}{2}(\vec{r}_3 + \vec{r}_4), \end{aligned} \quad (3.41)$$

où la première coordonnée de Jacobi  $\vec{\rho}_1$  est définie comme la coordonnée relative entre la 1ere et la 2eme particule. La deuxième coordonnée de Jacobi  $\vec{\rho}_2$  est définie comme la coordonnée relative entre la 3eme et la 4eme particule. La troisième  $\vec{\rho}_3$  coordonnée de Jacobi sera la coordonnée relative entre le centre de masse des deux premières particules (1 et 2) et le centre de masse des deux dernières particules (3 et 4). La coordonnée du centre de masse est définie toujours par l'équation (3.31).

*Figure 3* : Coordonnées de Jacobi pour le système à quatre corps "haltères"  $(m, m, M, M)$ .

Nous allons procéder de la même façon que pour les configurations précédentes. En inversant le système d'équations (3.41) et (3.31), on obtient de nouvelles expressions des coordonnées individuelles  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3$  et  $\vec{r}_4$  en termes des nouvelles coordonnées de Jacobi  $\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2$  et  $\vec{\rho}_3$  et de la

coordonnée du centre de masse  $\vec{R}$  avec comme résultat :

$$\begin{aligned}
\vec{r}_1 &= \vec{R} + \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{M}{M+m}\vec{\rho}_3, \\
\vec{r}_2 &= \vec{R} - \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{M}{M+m}\vec{\rho}_3, \\
\vec{r}_3 &= \vec{R} - \frac{1}{2}\vec{\rho}_2 - \frac{m}{M+m}\vec{\rho}_3, \\
\vec{r}_4 &= \vec{R} + \frac{1}{2}\vec{\rho}_2 - \frac{m}{M+m}\vec{\rho}_3.
\end{aligned} \tag{3.42}$$

Avec ce choix des coordonnées de Jacobi, l'expression de l'énergie cinétique dans l'hamiltonien (3.3) se réduit à :

$$\begin{aligned}
T^{(4)} &= \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + \frac{\vec{p}_3^2}{2M} + \frac{\vec{p}_4^2}{2M} \\
&= \frac{1}{2}(2M + 2m)\dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{m}{2}\right)\dot{\vec{\rho}}_1^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{M}{2}\right)\dot{\vec{\rho}}_2^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{2mM}{m+M}\right)\dot{\vec{\rho}}_3^2.
\end{aligned} \tag{3.43}$$

Nous obtenons ainsi d'autres expressions pour les masses réduites relatives aux coordonnées  $\vec{\rho}_1$ ,  $\vec{\rho}_2$  et  $\vec{\rho}_3$  :

$$\mu_{\rho_1} = \frac{m}{2}, \quad \mu_{\rho_2} = \frac{M}{2}, \quad \mu_{\rho_3} = \frac{2mM}{m+M}. \tag{3.44}$$

Avec ces nouvelles coordonnées de Jacobi, nous avons abouti à la fois à une forme diagonale pour l'énergie cinétique et pour l'énergie potentielle :

$$T^{(4)} = \frac{1}{2\mathbf{M}}\vec{P}_R^2 + \frac{1}{2\left(\frac{m}{2}\right)}\vec{p}_{\rho_1}^2 + \frac{1}{2\left(\frac{M}{2}\right)}\vec{p}_{\rho_2}^2 + \frac{1}{2\left(\frac{2mM}{m+M}\right)}\vec{p}_{\rho_3}^2 \tag{3.45}$$

et

$$\begin{aligned}
V^{(4)} &= k_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + k(\vec{r}_1 - \vec{r}_3)^2 + k(\vec{r}_1 - \vec{r}_4)^2 + k(\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2 + k(\vec{r}_2 - \vec{r}_4)^2 + k_{34}(\vec{r}_3 - \vec{r}_4)^2, \\
&= \vec{\rho}_1^2(k + k_{12}) + \vec{\rho}_2^2(k + k_{34}) + 4k\vec{\rho}_3^2,
\end{aligned} \tag{3.46}$$

toujours dans les conditions (3.2).

L'hamiltonien relatif se réduit donc à :

$$H_r^{(4)} = \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_1}}\vec{p}_{\rho_1}^2 + (k + k_{12})\vec{\rho}_1^2 \right] + \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_2}}\vec{p}_{\rho_2}^2 + (k + k_{34})\vec{\rho}_2^2 \right] + \left[ \frac{1}{2\mu_{\rho_3}}\vec{p}_{\rho_3}^2 + 4k\vec{\rho}_3^2 \right], \tag{3.47}$$

qui n'est d'autre que l'hamiltonien d'un système composé de trois oscillateurs harmoniques découplés. L'énergie du système s'obtient en sommant les énergies des deux oscillateurs. Nous avons :

$$E_{n_1, n_2, n_3}^{(4)} = \hbar \sqrt{\frac{1}{2\mu_{\rho_1}} (k + k_{13})} (2n_1 + 3) + \hbar \sqrt{\frac{1}{2\mu_{\rho_2}} (k + k_{34})} (2n_2 + 3) + \hbar \sqrt{\frac{1}{2\mu_{\rho_3}} 4k} (2n_3 + 3), \quad (3.48)$$

où  $n_1, n_2, n_3$  et  $n$  des entiers positifs ou nuls.

### L'état fondamental

L'énergie du niveau fondamental  $E_0^{(4)}$  du système dans la configuration  $(m, m, M, M)$  est :

$$E_0^{(4)} = 3\hbar \left[ \sqrt{\frac{1}{m} (k + k_{13})} + \sqrt{\frac{1}{M} (k + k_{34})} + \sqrt{\frac{(M + m)}{mM} k} \right]. \quad (3.49)$$

Avec le nouveau choix des coordonnées de Jacobi, l'état fondamental sera décrit par une fonction d'onde de type gaussienne simple :

$$\psi_0(\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{\rho}_3) \propto \exp(-\alpha \vec{\rho}_1^2 - \beta \vec{\rho}_2^2 - \gamma \vec{\rho}_3^2). \quad (3.50)$$

## 3.4 Système ayant trois masses différentes

Nous avons ici un système composé de quatre particules dont deux ont des masses égales à  $m$ , une troisième particule de masse  $m_3$  et la quatrième particule de masse  $M$ .

Nous allons adopter ici le choix standard des coordonnées de Jacobi. Soit :

$$\begin{aligned} \vec{\rho}_1 &= -\vec{r}_2 + \vec{r}_1, \\ \vec{\rho}_2 &= -\vec{r}_3 + \frac{1}{2} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \\ \vec{\rho}_3 &= -\vec{r}_4 + \frac{1}{2m+m_3} (m\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 + m_3\vec{r}_3). \end{aligned} \quad (3.51)$$

Le centre de masse du système sera repéré par la coordonnée

$$\vec{R} = \frac{1}{2m + m_3 + M} (m\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 + m_3\vec{r}_3 + M\vec{r}_4). \quad (3.52)$$

Figure 5 : Coordonnées de Jacobi pour les système à quatre corps  $(m, m, m_3, M)$ .

Les expressions des coordonnées des particules individuelles  $\vec{r}_1$ ,  $\vec{r}_2$ ,  $\vec{r}_3$  et  $\vec{r}_4$  peuvent être obtenu en inversant le système d'équations (3.52) et (3.51). Nous obtenons :

$$\begin{aligned}\vec{r}_1 &= \vec{R} + \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{m_3}{2m+m_3}\vec{\rho}_2 + \frac{M}{2m+m_3+M}\vec{\rho}_3, \\ \vec{r}_2 &= \vec{R} - \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{m_3}{2m+m_3}\vec{\rho}_2 + \frac{M}{2m+m_3+M}\vec{\rho}_3, \\ \vec{r}_3 &= \vec{R} - \frac{2m}{2m+m_3}\vec{\rho}_2 + \frac{M}{2m+m_3+M}\vec{\rho}_3, \\ \vec{r}_4 &= \vec{R} - \frac{(2m+m_3)}{2m+m_3+M}\vec{\rho}_3.\end{aligned}\tag{3.53}$$

La partie cinétique et la partie potentielle dans l'hamiltonien se réduisent en termes des coordonnées de Jacobi en :

$$\begin{aligned}T^{(4)} &= \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_2^2 + \frac{1}{2}m_3\dot{\vec{r}}_3^2 + \frac{1}{2}M\dot{\vec{r}}_4^2, \\ &= \frac{1}{2}(2m + m_3 + M)\dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{m}{2}\right)\dot{\vec{\rho}}_1^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{2mm_3}{2m+m_3}\right)\dot{\vec{\rho}}_2^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{M(2m+m_3)}{2m+m_3+M}\right)\dot{\vec{\rho}}_3^2.\end{aligned}\tag{3.54}$$

et

$$\begin{aligned}V^{(4)} &= k_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + k(\vec{r}_1 - \vec{r}_3)^2 + k_{14}(\vec{r}_1 - \vec{r}_4)^2 + k(\vec{r}_2 - \vec{r}_3)^2 + k_{14}(\vec{r}_2 - \vec{r}_4)^2 + k(\vec{r}_3 - \vec{r}_4)^2. \\ &= \left(\frac{1}{2}k + k_{12} + \frac{1}{2}k_{14}\right)\vec{\rho}_1^2 + \frac{2k(2m+m_3)^2 + 4km^2 + 2k_{14}m_3}{(2m+m_3)^2}\vec{\rho}_2^2 + (k + 2k_{14})\vec{\rho}_3^2 + \left(4\frac{m_3k_{14} - km}{2m+m_3}\right)\vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3.\end{aligned}$$

L'hamiltonien relatif devient :

$$\begin{aligned}H_r^{(4)} &= \left[\frac{1}{2\mu_{\rho_1}}\vec{p}_{\rho_1}^2 + \left(\frac{1}{2}k + k_{12} + \frac{1}{2}k_{14}\right)\vec{\rho}_1^2\right] + \left[\frac{1}{2\mu_{\rho_2}}\vec{p}_{\rho_2}^2 + \frac{2k(2m+m_3)^2 + 4km^2 + 2k_{14}m_3}{(2m+m_3)^2}\vec{\rho}_2^2\right] \\ &+ \left[\frac{1}{2\mu_{\rho_3}}\vec{p}_{\rho_3}^2 + (k + 2k_{14})\vec{\rho}_3^2\right] + 4\frac{m_3k_{14} - km}{2m+m_3}\vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3,\end{aligned}\tag{3.55}$$

avec

$$\mu_{\rho_1} = \frac{m}{2}, \quad \mu_{\rho_2} = \frac{2mm_3}{2m+m_3}, \quad \mu_{\rho_3} = \frac{M(2m+m_3)}{2m+m_3+M},\tag{3.56}$$

les masses réduites associées aux coordonnées de Jacobi  $\vec{\rho}_1$ ,  $\vec{\rho}_2$  et  $\vec{\rho}_3$ .

L'hamiltonien apparait donc sous forme non diagonale. Pour déduire le spectre d'énergie, nous devons ramener l'hamiltonien à une forme diagonale en suivant les étapes indiquées dans la référence [11]. Cela dépasse le cadre de notre étude.

Ce qui nous intéresse ici, est la fonction d'onde. D'après ce qui apparaît dans l'expression (3.55), l'hamiltonien relatif est formé par trois oscillateurs, deux oscillateurs couplés (correspondent aux coordonnées  $\vec{\rho}_2$  et  $\vec{\rho}_3$ ) et un oscillateur indépendant (correspondent aux coordonnées  $\vec{\rho}_1$ ).

La fonction d'onde associée au niveau fondamental sera donc une gaussienne corrélée dont le terme de corrélation se présente dans le produit  $\vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3$ , (3.40).

## Chapitre 4

# Développement sur des gaussiennes corrélées

*Dans ce chapitre nous allons présenter en détail la méthode du développement sur des gaussiennes corrélées appliquée à des systèmes à quatre corps. Nous appliquons ensuite la méthode pour résoudre approximativement l'équation de Schrödinger en déterminant de manière approchée l'énergie et la fonction d'onde.*

### 4.1 Théorème variationnel de Ritz

La méthode des variations (ou la méthode variationnelle de Rayleigh-Ritz) est une méthode d'approximation utilisée le plus souvent pour calculer de façon approchée, l'énergie du niveau fondamental d'un système stationnaire [13].

Considérons un système décrit par un Hamiltonien  $H$  indépendant du temps dont les solutions ne sont pas connues a priori. Nous savons toutefois que cet hamiltonien possède des vecteurs propres qui forment une base complète de l'espace des états. Pour simplifier l'écriture nous admettrons que le spectre de  $H$  est discret (seules certaines fréquences apparaissent) et non dégénéré. Il vient :

$$H |u_n\rangle = E |u_n\rangle, \quad (4.1)$$

avec  $n = 0, 1, 2, \dots$  et :

$$E_0 \leq E_1 \leq \dots \leq E_n \leq \dots \quad (4.2)$$

Tout vecteur  $|\psi\rangle$  de l'espace des états peut être développé sur la base des vecteurs propres de  $H$ .

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle, \quad (4.3)$$

où les  $C_n$  sont les coefficients, complexes, du développement. La valeur moyenne de l'énergie du système dans l'état  $|\psi\rangle$  est :

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\sum_m (c_m^* \langle u_m |) \sum_n H(c_n | u_n \rangle)}{\sum_m \langle u_m | c_m^* \sum_n c_n | u_n \rangle}, \\ &= \frac{\sum_{m,n} c_m^* c_n E_n \langle u_m | u_n \rangle}{\sum_{m,n} c_m^* c_n E_n \langle u_m | u_n \rangle}. \end{aligned}$$

Sachant que  $\langle u_m | u_n \rangle = \delta_{m,n}$ , il vient que :

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_n |c_n|^2 E_n}{\sum_n |c_n|^2}. \quad (4.4)$$

En vertu de l'hypothèse (4.2) nous pouvons déduire que

$$\langle E \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0. \quad (4.5)$$

La formule (4.5) est l'équation maîtresse de la théorie des variations. Elle stipule que la valeur moyenne de  $H$  pour tout état  $|\psi\rangle$  constitue une valeur approchée par excès de l'énergie du niveau fondamental. Il y'a égalité stricte lorsque l'état  $|\psi\rangle$  est vecteur propre de  $H$  associé à l'énergie  $E_0$ . Autrement dit, la valeur moyenne de l'Hamiltonien dans un état quelconque  $|\psi\rangle$  est toujours supérieure à l'énergie du niveau fondamental.

## 4.2 La méthode variationnelle

La méthode variationnelle est une technique d'approximation très utile. Elle est basée sur le principe variationnel de Ritz [14]. Le résultat (4.5) est à la base de la méthode variationnelle. Une utilisation possible de ce résultat consiste à prendre une fonction d'onde, dépendant d'un certain nombre  $n$  de paramètres  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ , appelée *fonction d'onde d'essai*, à évaluer la valeur

moyenne de l'hamiltonien pour cette fonction d'onde d'essai. On obtient alors une famille de bornes supérieures pour l'énergie de l'état fondamental  $E_0$ , une borne, notée  $E(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ , pour chaque jeu de paramètres  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ . Le jeu de paramètres  $\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0$  tel que :

$$E(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0) = \min_{\lambda_1, \dots, \lambda_n} \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (4.6)$$

conduit à la valeur la plus proche de  $E_0$ , c'est-à-dire, la meilleure approximation pour l'énergie du niveau fondamental.  $E(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0)$  est appelée approximation variationnelle de  $E_0$ . Bien sûr  $E(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0)$  reste toujours au-dessus de  $E_0$  [15] :

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0) | H | \psi(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0) \rangle}{\langle \psi(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0) | \psi(\lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0) \rangle}. \quad (4.7)$$

### 4.3 Choix de la fonction d'onde d'essai

Soit un système de  $N$  particules de masses  $m_1, \dots, m_N$  interagissant par des forces ne dépendant que la distance entre ces corps, l'hamiltonien du système s'écrit :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i < j=1}^N V^{(ij)}(r_{ij}). \quad (4.8)$$

En faisant un choix de coordonnées de Jacobi  $\{\vec{\rho}_k\}$ , l'hamiltonien relatif peut se mettre sous la forme :

$$H_r = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\vec{p}_{\rho_i}^2}{2\mu_i} + \sum_{i < j=1}^N V^{(ij)}(r_{ij} \{\vec{\rho}_k\}). \quad (4.9)$$

où  $\vec{p}_{\rho_i}$  noté le moment conjugué de la  $i^{\text{ème}}$  coordonnée de Jacobi  $\vec{\rho}_i$  et  $\mu_i$  est une masse "réduite" relative à la coordonnée de Jacobi  $\vec{\rho}_i$ . Le potentiel  $V^{(ij)}(r_{ij} \{\vec{\rho}_k\})$  doit être bien entendu considéré comme une fonction des coordonnées de Jacobi  $\vec{\rho}_k$  :

$$\vec{r}_{ij} = \sum_{k=1}^{N-1} d_{ij}^k \vec{\rho}_k. \quad (4.10)$$

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

Sur la base des résultats obtenus dans le chapitre précédent, il est clair que la fonction d'onde associée à l'état fondamental de l'oscillateur harmonique à  $N$  corps doit être en générale une gaussienne corrélée. Par conséquent, choisir une gaussienne comme fonction d'onde d'essai paraît un choix convenable pour couvrir le résultat exact du cas de l'oscillateur harmonique à  $N$  corps (On parle toujours de l'état fondamental).

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

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

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

Si on adopte la notation suivante :

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

le vecteur d'état peut être mis sous la forme :

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

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

$$\langle \Lambda \rangle_\psi = \frac{\sum_{m,n=1}^g c_n^* c_m \langle n | \Lambda | m \rangle}{\sum_{m,n=1}^g c_n^* c_m \langle n | m \rangle}. \quad (4.14)$$

Donc, le calcul de la valeur moyenne d'une observable se ramène à celui des éléments de matrice de l'observable en question entre deux gaussiennes corrélées  $\langle n | \Lambda | m \rangle$  et à l'évolution des recouvrements de gaussiennes  $\langle n | m \rangle$ .

### 4.3.1 L'hamiltonien

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

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

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

#### L'énergie potentielle

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

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

En posant

$$A_{kl} = \frac{1}{2} (A_{kl}^{(n)} + A_{kl}^{(m)}), \quad (4.15)$$

l'expression précédente peut être mise sous la forme :

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = \int \cdots \int d^3\vec{\rho}_1 \cdots d^3\vec{\rho}_{N-1} f(\vec{r}_{ij}) \exp\left(-\sum_{k,l=1}^{N-1} A_{kl} \vec{\rho}_k \cdot \vec{\rho}_l\right). \quad (4.16)$$

Effectuons une transformation orthogonale  $R$  :

$$R^T R = R R^T = I, \quad (4.17)$$

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

$$R A R^T = \tilde{A}. \quad (4.18)$$

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

$$A = R^T \tilde{A} R. \quad (4.19)$$

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

$$\sum_{k,l=1}^{N-1} A_{kl} \vec{\rho}_k \cdot \vec{\rho}_l = \sum_{k,l,n,m=1}^{N-1} R_{km}^T \tilde{A}_{mn} R_{nl} \vec{\rho}_k \cdot \vec{\rho}_l = \sum_{n,m=1}^{N-1} \tilde{A}_{mn} \vec{y}_m \cdot \vec{y}_n = \sum_{n=1}^{N-1} \tilde{A}_{nn} \vec{y}_n^2, \quad (4.20)$$

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

$$\vec{y}_k = \sum_{l=1}^{N-1} R_{kl} \vec{\rho}_l, \quad (4.21)$$

c'est-à-dire, que les  $\{\vec{\rho}_k\}$  et les  $\{\vec{y}_k\}$  sont liées par une transformation orthogonale, celle qui a ramené  $A$  à sa forme diagonale  $\tilde{A}$ . Pour obtenir (4.20), on a également utilisé le fait que  $\tilde{A}$  est une matrice diagonale.

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

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

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

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = \int \dots \int d^3 \vec{y}_1 \dots d^3 \vec{y}_{N-1} f(\vec{r}_{ij}) \exp \left( - \sum_{k=1}^{N-1} \tilde{A}_{kk} \vec{y}_k^2 \right), \quad (4.22)$$

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

En inversant (4.21), on obtient les  $\vec{\rho}_k$  en termes des  $\vec{y}_l$

$$\vec{\rho}_k = \sum_{l=1}^{N-1} R_{kl}^T \vec{y}_l. \quad (4.23)$$

En reportant alors dans (4.10), on arrive à :

$$\vec{r}_{ij} = \sum_{l=1}^{N-1} \left( \sum_{k=1}^{N-1} d_{ij}^k R_{kl}^T \right) \vec{y}_l . \quad (4.24)$$

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

$$\vec{Z}_l = (\tilde{A}_{ll})^{1/2} \vec{y}_l . \quad (4.25)$$

Nous avons

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

et

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

L'élément de matrice  $\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle$  se met alors sous la forme :

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = (\Delta)^{-3/2} \int \dots \int d^3 \vec{Z}_1 \dots d^3 \vec{Z}_{N-1} f(\vec{r}_{ij}) \exp\left(-\sum_{k=1}^{N-1} \vec{Z}_k^2\right), \quad (4.26)$$

où  $\Delta$  désigne le déterminant de la matrice  $A$ . Il est à noter que  $\vec{r}_{ij}$  dans l'expression précédente doit être maintenant considéré comme fonction des  $\vec{Z}_k$

$$\vec{r}_{ij} = \sum_{l=1}^{N-1} \left( \sum_{k=1}^{N-1} d_{ij}^k R_{kl}^T \right) (\tilde{A}_{ll})^{-1/2} \vec{Z}_l . \quad (4.27)$$

Il est toujours possible de faire une transformation orthogonale sur les  $\vec{Z}_k$  ( $\{\vec{Z}_k\} \rightarrow \{\vec{W}_k\}$ ) de telle manière que  $\vec{r}_{ij}$  soit proportionnel à  $\vec{W}_1$ . Il est clair qu'en tenant compte du fait que

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

le facteur de proportionnalité est

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

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

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

Si on utilise le résultat

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

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

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = (\Delta)^{-3/2} (\pi)^{3(N-2)/2} \int d^3 \vec{W}_1 f\left((d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{1/2} \vec{W}_1\right) \exp\left(-\vec{W}_1^2\right). \quad (4.28)$$

Si on fait le changement de variables

$$\vec{W}'_1 = (d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{1/2} \vec{W}_1, \quad (4.29)$$

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

$$\begin{aligned} \langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle &= (\Delta)^{-3/2} (\pi)^{3(N-2)/2} (d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{-3/2} \\ &\times \int d^3 \vec{W}'_1 f(\vec{W}'_1) \exp\left(- (d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{-1} \vec{W}'_1{}^2\right). \end{aligned} \quad (4.30)$$

A partir de (4.28), on peut déduire le recouvrement de deux gaussiennes en posant  $f(\vec{r}_{ij})=1$ .

On obtient :

$$\langle n | m \rangle = (\pi^{N-1} / \Delta)^{3/2}. \quad (4.31)$$

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

$$\langle n | f(\vec{r}_{ij}) | m \rangle = \langle n | m \rangle \pi^{-3/2} \int d^3 \vec{W}_1 f\left((d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{1/2} \vec{W}_1\right) \exp\left(-\vec{W}_1^2\right). \quad (4.32)$$

Supposons maintenant que les interactions entre les particules du système sont décrites par des potentiels en loi de puissance :

$$V_{ij}(\vec{r}_{ij}) = \lambda_{ij} r_{ij}^{\nu_{ij}} . \quad (4.33)$$

L'expression (4.32) se réduit à

$$\langle n | \lambda_{ij} r_{ij}^{\nu_{ij}} | m \rangle = \langle n | m \rangle \pi^{-3/2} \lambda_{ij} (d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{\nu_{ij}/2} \int d^3 \vec{W}_1 W_1^{\nu_{ij}} \exp(-\vec{W}_1^2) . \quad (4.34)$$

En utilisant le résultat

$$\int d^3 \vec{W}_1 W_1^{\nu_{ij}} e^{-\vec{W}_1^2} = 4\pi \int_0^\infty dW_1 W_1^{\nu_{ij}+2} e^{-W_1^2} = 2\pi \Gamma\left(\frac{\nu_{ij}+3}{2}\right) \quad \text{pour } \nu_{ij} > -3, \quad (4.35)$$

on obtient finalement

$$\langle n | \lambda_{ij} r_{ij}^{\nu_{ij}} | m \rangle = \langle n | m \rangle \frac{2\lambda_{ij}}{\sqrt{\pi}} (d_{ij}^T A^{-1} d_{ij})^{\nu_{ij}/2} \Gamma\left(\frac{\nu_{ij}+3}{2}\right), \quad (4.36)$$

qui peut être réécrit comme

$$\langle n | \lambda_{ij} r_{ij}^{\nu_{ij}} | m \rangle = \langle n | m \rangle \frac{2\lambda_{ij}}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{\nu_{ij}+3}{2}\right) \gamma_{ij,ij}^{\nu_{ij}/2} \quad (4.37)$$

si on introduit la notation

$$\gamma_{ij,kl} = d_{ij}^T A^{-1} d_{kl}. \quad (4.38)$$

### Le terme cinétique

Calculons l'élément de matrice  $\langle n | \vec{p}_k^2 / (2\mu_k) | m \rangle$ . Nous avons

$$\langle n | \frac{\vec{p}_k^2}{2\mu_k} | m \rangle = \frac{1}{2\mu_k} (\langle n | \vec{p}_k \rangle (\vec{p}_k | m \rangle)). \quad (4.39)$$

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

$$\vec{p}_k | m \rangle = i\hbar \sum_{p=1}^{N-1} A_{kp}^m \vec{\rho}_p | m \rangle. \quad (4.40)$$

Il s'ensuit que

$$\langle n | \frac{\vec{p}_k^2}{2\mu_k} | m \rangle = \frac{\hbar^2}{2\mu_k} \sum_{q,p=1}^{N-1} A_{kq}^n A_{kp}^m \langle n | \vec{\rho}_q \cdot \vec{\rho}_p | m \rangle. \quad (4.41)$$

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

$$\langle n | \vec{\rho}_q \cdot \vec{\rho}_p | m \rangle = \int \cdots \int d^3 \vec{x}_1 \dots d^3 \vec{x}_{N-1} (\vec{\rho}_q \cdot \vec{\rho}_p) \exp \left( - \sum_{i,j=1}^{N-1} A_{ij} \vec{\rho}_i \cdot \vec{\rho}_j \right). \quad (4.42)$$

En termes des  $\vec{y}_k$ , (4.21) prend la forme suivante :

$$\langle n | \vec{\rho}_q \cdot \vec{\rho}_p | m \rangle = \sum_{i,j=1}^{N-1} R_{qi}^{-1} R_{pj}^{-1} \int \cdots \int d^3 \vec{y}_1 \dots d^3 \vec{y}_{N-1} (\vec{y}_i \cdot \vec{y}_j) \exp \left( - \sum_{k=1}^{N-1} \tilde{A}_{kk} \vec{y}_k^2 \right). \quad (4.43)$$

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

$$\langle n | \vec{\rho}_q \cdot \vec{\rho}_p | m \rangle = \sum_{j=1}^{N-1} R_{qj}^T R_{jp} \int \cdots \int d^3 \vec{y}_1 \dots d^3 \vec{y}_{N-1} \vec{y}_j^2 \exp \left( - \sum_{k=1}^{N-1} \tilde{A}_{kk} \vec{y}_k^2 \right). \quad (4.44)$$

En faisant usage du résultat

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \vec{r}^2 \exp(-a \vec{r}^2) d^3 \vec{r} = \frac{3}{2a} \left( \frac{\pi}{a} \right)^{3/2}, \quad (4.45)$$

Valable pour  $a > 0$ , on aboutit à

$$\begin{aligned} \langle n | \vec{\rho}_q \cdot \vec{\rho}_p | m \rangle &= \frac{3}{2} \left( \frac{\pi}{\Delta} \right)^{3/2} \pi^{\frac{3(N-2)}{2}} \sum_{j=1}^{N-1} R_{qj}^T \tilde{A}_{jj}^{-1} R_{jp} \\ &= \frac{3}{2} \left( \frac{\pi}{\Delta} \right)^{3/2} \pi^{\frac{3(N-2)}{2}} A_{qp}^{-1} \\ &= \frac{3}{2} \langle n | m \rangle A_{qp}^{-1}. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Finalement, en reportant dans l'expression (4.41), on obtient

$$\begin{aligned} \langle n | \frac{\vec{p}_k^2}{2\mu_k} | m \rangle &= \frac{3}{2} \langle n | m \rangle \frac{\hbar^2}{2\mu_k} \sum_{q,p=1}^{N-1} A_{kq}^n A_{qp}^{-1} A_{kp}^m, \\ &= \frac{3}{2} \langle n | m \rangle \frac{\hbar^2}{2\mu_k} (A^n A^{-1} A^m)_{kk}. \end{aligned} \quad (4.47)$$

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

$$\langle n|T|m\rangle = \frac{3}{2} \langle n|m\rangle \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\hbar^2}{2\mu_k} (A^n A^{-1} A^m)_{kk}. \quad (4.48)$$

L'élément de matrice de l'hamiltonien entre deux gaussiennes corrélées dans le cas de potentiels en loi de puissance (4.33) se réduit donc à :

$$\langle n|H|m\rangle = \langle n|m\rangle \left[ \frac{3}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\hbar^2}{2\mu_k} (A^n A^{-1} A^m)_{kk} + \frac{2\lambda_{ij}}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{\nu_{ij}+3}{2}\right) \gamma_{ij,ij}^{\nu_{ij}/2} \right]$$

Donnons à titre d'exemple la valeur moyenne de l'énergie pour une seule génération de gaussiennes dans le cas d'un potentiel en loi de puissance (4.33). Nous obtenons

$$E = \frac{3}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\hbar^2}{2\mu_k} A_{kk} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{i<j=1}^N \Gamma\left(\frac{\nu_{ij}+3}{2}\right) \lambda_{ij} \gamma_{ij,ij}^{\nu_{ij}/2}. \quad (4.49)$$

## 4.4 Application aux problèmes à quatre corps

Sachant que le traitement du problème à  $N$  corps nécessite l'introduction d'un ensemble de  $N - 1$  coordonnées de Jacobi, trois coordonnées de Jacobi sont requises pour traiter les problèmes à quatre corps. Soit :  $\vec{\rho}_1$ ,  $\vec{\rho}_2$  et  $\vec{\rho}_3$ . La fonction d'onde d'essai est donc choisie sous forme d'une série de gaussiennes corrélées (4.11) avec  $N = 4$  :

$$\begin{aligned} \langle \vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{\rho}_3 | \psi \rangle &\equiv \sum_{n=1}^g c_n \exp\left(\frac{-1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} A_{ij}^{(n)} \vec{\rho}_i \cdot \vec{\rho}_j\right), \\ &= \sum_{n=1}^g c_n \exp\left[\frac{-1}{2} (A_{11}^{(n)} \vec{\rho}_1^2 + A_{22}^{(n)} \vec{\rho}_2^2 + A_{33}^{(n)} \vec{\rho}_3^2 \right. \\ &\quad \left. + 2A_{12}^{(n)} \vec{\rho}_1 \cdot \vec{\rho}_2 + 2A_{13}^{(n)} \vec{\rho}_1 \cdot \vec{\rho}_3 + 2A_{23}^{(n)} \vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3)\right], \end{aligned} \quad (4.50)$$

où les paramètres de poids  $c_n$  et les paramètres de portée  $A_{11}^{(n)}$ ,  $A_{22}^{(n)}$ ,  $A_{33}^{(n)}$ ,  $A_{12}^{(n)}$ ,  $A_{23}^{(n)}$  et  $A_{13}^{(n)}$  sont considérés comme des paramètres variationnels.

Les paramètres de portée pour chaque gaussienne corrélée peuvent être considérés comme

des éléments d'une matrice symétrique d'ordre 3 :

$$A^{(n)} = \begin{pmatrix} A_{11}^{(n)} & A_{12}^{(n)} & A_{13}^{(n)} \\ A_{12}^{(n)} & A_{22}^{(n)} & A_{23}^{(n)} \\ A_{13}^{(n)} & A_{23}^{(n)} & A_{33}^{(n)} \end{pmatrix}. \quad (4.51)$$

L'élément de matrice de l'hamiltonien entre deux gaussiennes se réduit à :

$$\begin{aligned} \langle n | H | m \rangle &= \langle n | m \rangle \\ & \left[ \frac{3}{4} \frac{1}{\mu_1} [A^{(n)} A^{-1} A^{(m)}]_{11} + \frac{3}{4} \frac{1}{\mu_2} [A^{(n)} A^{-1} A^{(m)}]_{22} + \frac{3}{4} \frac{1}{\mu_3} [A^{(n)} A^{-1} A^{(m)}]_{33} \right. \\ & + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{\nu+3}{2}\right) \left[ \lambda_{12} \gamma_{12,12}^{\nu/2} + \lambda_{13} \gamma_{13,13}^{\nu/2} + \lambda_{14} \gamma_{14,14}^{\nu/2} \right] \\ & \left. + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{\nu+3}{2}\right) \left[ \lambda_{23} \gamma_{23,23}^{\nu/2} + \lambda_{24} \gamma_{24,24}^{\nu/2} + \lambda_{34} \gamma_{34,34}^{\nu/2} \right] \right] \end{aligned} \quad (4.52)$$

où  $A^{-1}$  est l'inverse de la matrice :

$$A = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} (A_{11}^{(n)} + A_{11}^{(m)}) & \frac{1}{2} (A_{12}^{(n)} + A_{12}^{(m)}) & \frac{1}{2} (A_{13}^{(n)} + A_{13}^{(m)}) \\ \frac{1}{2} (A_{12}^{(n)} + A_{12}^{(m)}) & \frac{1}{2} (A_{22}^{(n)} + A_{22}^{(m)}) & \frac{1}{2} (A_{23}^{(n)} + A_{23}^{(m)}) \\ \frac{1}{2} (A_{13}^{(n)} + A_{13}^{(m)}) & \frac{1}{2} (A_{23}^{(n)} + A_{23}^{(m)}) & \frac{1}{2} (A_{33}^{(n)} + A_{33}^{(m)}) \end{pmatrix}. \quad (4.53)$$

Les masses réduites  $\mu_1 := \mu_{\rho_1}$ ,  $\mu_2 := \mu_{\rho_2}$  et  $\mu_3 := \mu_{\rho_3}$  relatives aux coordonnées de Jacobi sont données respectivement par l'équations (3.56) et où on a supposé que l'interaction est de même loi pour toutes les paires de particules, c-à-d ;  $\nu_{ij} = \nu$ .

Les paramètres  $\gamma_{12,12}$ ,  $\gamma_{13,13}$ ,  $\gamma_{14,14}$ ,  $\gamma_{23,23}$ ,  $\gamma_{24,24}$  et  $\gamma_{34,34}$  sont les éléments diagonaux de la matrice  $\gamma = d^T A^{-1} d$  (4.38). Il faut donc trouver l'expression de la matrice  $d$ , eq.(3.51), qui lie les vecteurs relatifs  $\vec{r}_{ij}$  pour chaque paire de particules aux coordonnées de Jacobi.

#### 4.4.1 Choix standard des coordonnées de Jacobi

Dans notre étude, nous nous limiterons à des systèmes à quatre corps dont la diversité allant jusqu'à trois masses différentes. Il suffit donc de considérer le choix standard des coordonnées de Jacobi (3.51) de la configuration  $(m, m, m_3, M)$ . Toutes les autres configurations qu'on traité, à savoir,  $(m, m, m, m)$ ,  $(m, m, M, M)$  et  $(m, m, m, M)$ , seront des cas particulier de la configuration  $(m, m, m_3, M)$ .

Commençons par la dérivation de l'expression de la matrice  $d$  (4.38). Il faut tout d'abord exprimer les vecteurs relatifs  $\vec{r}_{ij}$ , ( $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_1 - \vec{r}_j$ ), en termes des coordonnées de Jacobi (3.51). Nous avons

$$\begin{aligned}
\vec{r}_1 - \vec{r}_2 &= \vec{\rho}_1 \\
\vec{r}_1 - \vec{r}_3 &= \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \vec{\rho}_2 \\
\vec{r}_1 - \vec{r}_4 &= \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{m_3}{2m+m_3}\vec{\rho}_2 + \vec{\rho}_3 \\
\vec{r}_2 - \vec{r}_3 &= -\frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \vec{\rho}_2 \\
\vec{r}_2 - \vec{r}_4 &= -\frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{m_3}{2m+m_3}\vec{\rho}_2 + \vec{\rho}_3 \\
\vec{r}_3 - \vec{r}_4 &= -\frac{2m}{2m+m_3}\vec{\rho}_2 + \vec{\rho}_3,
\end{aligned}$$

que l'on peut réécrire sous forme matricielle comme

$$\begin{pmatrix} \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \\ \vec{r}_1 - \vec{r}_3 \\ \vec{r}_1 - \vec{r}_4 \\ \vec{r}_2 - \vec{r}_3 \\ \vec{r}_2 - \vec{r}_4 \\ \vec{r}_3 - \vec{r}_4 \end{pmatrix} = d^T \cdot \begin{pmatrix} \vec{\rho}_1 \\ \vec{\rho}_2 \\ \vec{\rho}_3 \end{pmatrix}, \quad (4.54)$$

avec

$$d = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 1 & \frac{m_3}{2m+m_3} & 1 & \frac{m_3}{2m+m_3} & -2\frac{m}{2m+m_3} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.55)$$

La matrice  $\gamma$  se calcule directement à partir de cette dernière expression de la matrice  $d$  et de sa transposée  $d^T$ .

D'après les résultats du chapitre précédent, le choix standard des coordonnées de Jacobi permet de déduire directement l'énergie et la fonction d'onde exactes associés à l'état fondamental des configurations  $(m, m, m, m)$ , et  $(m, m, m, M)$  de l'oscillateur harmonique à 4 corps ; les fonctions d'onde exactes sont des gaussiennes non corrélées. Par contre, pour les configurations  $(m, m, M, M)$  et  $(m, m, m_3, M)$  l'état fondamental est une gaussienne corrélée. Par conséquent, pour atteindre le résultat exact de ces deux configurations, la fonction d'onde doit inclure le terme  $\vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3$ . Il vaut la peine de noter que, plus le nombre de paramètres variationnels est grand,

plus le calcul numérique est difficile. De ce fait, nous allons adopter le choix modifié des coordonnées de Jacobi pour la configuration  $(m, m, M, M)$  où nous nous contenterons du plus petit nombre de paramètres variationnels impliqués dans la fonction d'onde. C'est-à-dire,

$$\exp(-a_1\vec{\rho}_1^2 - b_1\vec{\rho}_2^2 - w_1\vec{\rho}_3^2)$$

au lieu de

$$\exp(-a_1\vec{\rho}_1^2 - b_1\vec{\rho}_2^2 - w_1\vec{\rho}_3^2 - u_1\vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3).$$

#### 4.4.2 Choix modifié des coordonnées de Jacobi

Nous avons vu dans la section 3.3.3 que le choix standard des coordonnées de Jacobi ne permet pas de déduire directement l'énergie et la fonction d'onde de la configuration  $(m, m, M, M)$  de l'oscillateur harmonique. Nous avons montré qu'un choix modifié des coordonnées de Jacobi mène directement à une forme diagonale de l'hamiltonien et donc une fonction de type gaussienne non corrélée pour la fonction d'onde.

Il faut tout d'abord exprimer le vecteur relatif  $\vec{r}_{ij}$  pour chaque paire de particules en termes des nouvelles coordonnées de Jacobi (3.41). Le calcul mène à :

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 - \vec{r}_2 &= \vec{\rho}_1 \\ \vec{r}_1 - \vec{r}_3 &= \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{1}{2}\vec{\rho}_2 + \vec{\rho}_3 \\ \vec{r}_1 - \vec{r}_4 &= \frac{1}{2}\vec{\rho}_1 - \frac{1}{2}\vec{\rho}_2 + \vec{\rho}_3 \\ \vec{r}_2 - \vec{r}_3 &= -\frac{1}{2}\vec{\rho}_1 + \frac{1}{2}\vec{\rho}_2 + \vec{\rho}_3 \\ \vec{r}_2 - \vec{r}_4 &= -\frac{1}{2}\vec{\rho}_1 - \frac{1}{2}\vec{\rho}_2 + \vec{\rho}_3 \\ \vec{r}_3 - \vec{r}_4 &= -\vec{\rho}_2 . \end{aligned} \tag{4.56}$$

où, sous forme matricielle, avec une nouvelle expression pour la matrice  $d$  :

$$d = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

La matrice  $\gamma$  se calcule directement à partir de cette dernière expression de la matrice  $d$  et de

sa transposée  $d^T$ .

Nous allons appliquer nos résultats pour obtenir une approximation de l'énergie de l'état fondamental d'un système à quatre corps. Vu la complexité du calcul numérique, nous allons procéder de manière progressive en commençant par choisir comme fonction d'onde d'essai une génération de gaussiennes puis deux générations de gaussiennes. Nous limiterons nos calculs aux cas des potentiels en lois de puissance (4.33).

#### 4.4.3 Une seule génération de gaussiennes corrélées

Nous allons adopter une seule gaussienne corrélée ( $g = 1$ ) pour être la fonction d'onde d'essai :

$$\begin{aligned} \psi(\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{\rho}_3) &= c_1 \exp\left(\frac{-1}{2} \sum_{i,j=1}^3 A_{ij}^{(n)} \vec{\rho}_i \cdot \vec{\rho}_j\right), \\ |1\rangle &\equiv c_1 \exp(-a_1 \vec{\rho}_1^2 - b_1 \vec{\rho}_2^2 - w_1 \vec{\rho}_3^2 - s_1 \vec{\rho}_1 \cdot \vec{\rho}_2 - u_1 \vec{\rho}_1 \cdot \vec{\rho}_3 - t_1 \vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3) \end{aligned} \quad (4.57)$$

où sont impliqués six paramètres variationnels :

$$\begin{aligned} a_1 &= A_{11}^{(1)}/2, & b_1 &= A_{22}^{(1)}/2, & w_1 &= A_{33}^{(1)}/2, \\ s_1 &= A_{12}^{(1)}, & u_1 &= A_{13}^{(1)}, & t_1 &= A_{23}^{(1)}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Nous n'avons à calculer qu'un seul élément de matrice. La valeur moyenne de l'hamiltonien se simplifie dans ce cas en :

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_\psi &= \frac{\langle 1 | H | 1 \rangle}{\langle 1 | 1 \rangle} \\ &= \frac{3}{4} \frac{1}{\mu_1} \left[ A^{(1)} A^{-1} A^{(1)} \right]_{11} + \frac{3}{4} \frac{1}{\mu_2} \left[ A^{(1)} A^{-1} A^{(1)} \right]_{22} + \frac{3}{4} \frac{1}{\mu_3} \left[ A^{(1)} A^{-1} A^{(1)} \right]_{33} \\ &\quad + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{\nu+3}{2}\right) \\ &\quad \left[ \lambda_{12} \gamma_{12,12}^{\nu/2} + \lambda_{13} \gamma_{13,13}^{\nu/2} + \lambda_{14} \gamma_{14,14}^{\nu/2} + \lambda_{23} \gamma_{23,23}^{\nu/2} + \lambda_{24} \gamma_{24,24}^{\nu/2} + \lambda_{34} \gamma_{34,34}^{\nu/2} \right]. \end{aligned} \quad (4.59)$$

Et comme la matrice  $A$  n'est d'autre que la matrice  $A^{(1)}$  elle-même, alors :  $A^{(1)} A^{-1} A^{(1)} = A^{(1)}$

. Donc l'expression (4.59) se réduit à :

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_\psi &= \frac{3}{4} \left[ \frac{1}{\mu_1} A_{11}^{(1)} + \frac{1}{\mu_2} A_{22}^{(1)} + \frac{1}{\mu_3} A_{33}^{(1)} \right] \\ &+ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{\nu+3}{2}\right) \\ &\left[ \lambda_{12} \gamma_{12,12}^{\nu/2} + \lambda_{13} \gamma_{13,13}^{\nu/2} + \lambda_{14} \gamma_{14,14}^{\nu/2} + \lambda_{23} \gamma_{23,23}^{\nu/2} + \lambda_{24} \gamma_{24,24}^{\nu/2} + \lambda_{34} \gamma_{34,34}^{\nu/2} \right]. \end{aligned} \quad (4.60)$$

Cette dernière expression de la valeur moyenne de l'hamiltonien est fonction de six paramètres libres,  $a_1, b_1, w_1, s_1, u_1$  et  $t_1$ . D'après le principe variationnel, on a, pour chaque jeu de ces paramètres une borne supérieure pour l'énergie de l'état fondamental du système. La borne la plus proche de l'énergie du fondamental est sans doute celle qui a la plus petite valeur. Donc la meilleur approximation de l'énergie du fondamental, notée par  $E_{0 \text{ var}}^{(1)}$ , sera obtenu par la minimisation de  $\langle H \rangle_\psi$  par rapport à six paramètres

$$E_{0 \text{ var}}^{(1)} := \min_{a_1, b_1, w_1, s_1, u_1, t_1} \langle H \rangle_\psi. \quad (4.61)$$

Notons que le paramètre  $c_1$  disparaît de cette formule (ce paramètres de normalisation ne joue aucun rôle lorsqu'on travail avec une seule gaussienne).

#### 4.4.4 Deux générations de gaussiennes corrélées

Si on utilise deux générations de gaussiennes  $|1\rangle$  et  $|2\rangle$  comme fonction d'onde d'essai :

$$|\psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle, \quad (4.62)$$

avec

$$\begin{aligned} |1\rangle &\equiv c_1 \exp\left(\frac{-1}{2}(A_{11}^1 \vec{\rho}_1^2 + A_{22}^1 \vec{\rho}_2^2 + A_{33}^1 \vec{\rho}_3^2 + 2A_{12}^1 \vec{\rho}_1 \cdot \vec{\rho}_2 + 2A_{23}^1 \vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3 + 2A_{13}^1 \vec{\rho}_1 \cdot \vec{\rho}_3)\right) + \\ &\equiv c_1 \exp(-a_1 \vec{\rho}_1^2 - b_1 \vec{\rho}_2^2 - w_1 \vec{\rho}_3^2 - s_1 \vec{\rho}_1 \cdot \vec{\rho}_2 - u_1 \vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3 - t_1 \vec{\rho}_1 \cdot \vec{\rho}_3) \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} |2\rangle &\equiv c_2 \exp\left(\frac{-1}{2}(A_{11}^2 \vec{\rho}_1^2 + A_{22}^2 \vec{\rho}_2^2 + A_{33}^2 \vec{\rho}_3^2 + 2A_{12}^2 \vec{\rho}_1 \cdot \vec{\rho}_2 + 2A_{23}^2 \vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3 + 2A_{13}^2 \vec{\rho}_1 \cdot \vec{\rho}_3)\right), \\ &\equiv c_2 \exp(-a_2 \vec{\rho}_1^2 - b_2 \vec{\rho}_2^2 - w_2 \vec{\rho}_3^2 - s_2 \vec{\rho}_1 \cdot \vec{\rho}_2 - u_2 \vec{\rho}_2 \cdot \vec{\rho}_3 - t_2 \vec{\rho}_1 \cdot \vec{\rho}_3) \end{aligned}$$

On a alors quatorze paramètres variationnels  $c_1, c_2, a_1, a_2, b_1, b_2, w_1, w_2, s_1, s_2, u_1, u_2, t_1$  et  $t_2$ . Notons que les exposants "1" ou "2" dans les éléments de la matrice  $A_{ij}^1$  ou  $A_{ij}^2$  n'indique pas une puissance de la matrice. Ils font référence à la gaussienne à laquelle ils appartiennent.

La meilleure approximation de l'énergie du fondamental en utilisant deux générations de gaussiennes (4.62), notée par  $E_{0 \text{ var}}^{(2)}$ , sera obtenu par la minimisation de  $\langle H \rangle_\psi$  par rapport à 14 paramètres :

$$E_{0 \text{ var}}^{(2)} := \min_{c_1, c_2, a_1, a_2, \dots, t_1, t_2} \langle H \rangle_\psi \quad (4.63)$$

avec

$$\langle H \rangle_\psi = \frac{c_1^2 \langle 1|H|1 \rangle + 2c_1c_2 \langle 1|H|2 \rangle + c_2^2 \langle 2|H|2 \rangle}{c_1^2 \langle 1|1 \rangle + 2c_1c_2 \langle 1|2 \rangle + c_2^2 \langle 2|2 \rangle}, \quad (4.64)$$

où  $\langle 1|H|1 \rangle, \langle 1|H|2 \rangle, \langle 2|H|2 \rangle$  sont donnés par l'équation (4.52).

Les recouvrements des gaussiennes  $\langle 1|1 \rangle, \langle 1|2 \rangle$  et  $\langle 2|2 \rangle$  seront calculés par l'équation (4.31) qui se réduit dans notre cas à :

$$\begin{aligned} \langle 1|1 \rangle &= \pi^3 \left\| \begin{array}{ccc} A_{11}^1 & A_{12}^1 & A_{13}^1 \\ A_{12}^1 & A_{22}^1 & A_{23}^1 \\ A_{13}^1 & A_{23}^1 & A_{33}^1 \end{array} \right\|^{-3/2}, \\ \langle 2|2 \rangle &= \pi^3 \left\| \begin{array}{ccc} A_{11}^2 & A_{12}^2 & A_{13}^2 \\ A_{12}^2 & A_{22}^2 & A_{23}^2 \\ A_{13}^2 & A_{23}^2 & A_{33}^2 \end{array} \right\|^{-3/2} \end{aligned}$$

et

$$\langle 1|2 \rangle = \pi^3 \left\| \begin{array}{ccc} \frac{1}{2} (A_{11}^1 + A_{11}^2) & \frac{1}{2} (A_{12}^1 + A_{12}^2) & \frac{1}{2} (A_{13}^1 + A_{13}^2) \\ \frac{1}{2} (A_{12}^1 + A_{12}^2) & \frac{1}{2} (A_{22}^1 + A_{22}^2) & \frac{1}{2} (A_{23}^1 + A_{23}^2) \\ \frac{1}{2} (A_{13}^1 + A_{13}^2) & \frac{1}{2} (A_{23}^1 + A_{23}^2) & \frac{1}{2} (A_{33}^1 + A_{33}^2) \end{array} \right\|^{-3/2}.$$

### Résultats numériques

Dans les tableaux suivants, nous avons reporté les valeurs approximatives des énergies des états fondamentaux  $E_{0 \text{ var}}^{(g)}$  ( $g = 1, 2$ ) de système à quatre corps en interaction et ce en utilisant  $g$  gaussiennes corrélées comme fonction d'onde d'essai. Nous avons considéré différentes configurations de masse  $(m_1, m_2, m_3, m_4)$ . Nous nous sommes limités aux interactions à deux corps dérivant de potentiels en loi puissance de même type (même exposant et même intensité) pour

toutes les paires de particules :

$$V^{(ij)}(r_{ij}) = \lambda r_{ij}^\nu. \quad (4.65)$$

avec  $\lambda = \text{signe}(\nu)$ . Autrement-dit,  $\lambda$  et  $\nu$  sont de même signe.

On a considéré toutes les configurations possibles jusqu'à la limite de 3 masses distinctes et quatre formes représentatives du potentiel en loi de puissance ont été choisis, à savoir le potentiel harmonique  $\nu = 2$  (Tableau 1, 2 et 3), le potentiel linéaire  $\nu = 1$  (Tableaux 4, 5 et 6) le potentiel de Martin  $\nu = 0.1$  "très utilisé dans la spectroscopie des mésons lourds" (Tableaux 7, 8 et 9) et le potentiel coulombien  $\nu = -1$  (Tableaux 10, 11 et 12,).

Tous les calculs numériques de minimisation, toujours dans un système d'unités ou  $\hbar = 1$ , ont été faits avec un logiciel dédié, le logiciel **Mathcad**.

Un exemple de calcul numérique sur **Mathcad** et illustré ci-dessous par une capture d'écran de la page **Mathcad** (figure 6) que nous avons créé pour calculer les approximations variationnelles de l'énergie de l'état fondamental du système à quatre corps en utilisant une seule gaussienne avec le choix standard des coordonnées de Jacobi. Nous avons considéré la configuration  $(m, m, m_3, M)$  et ce pour le potentiel linéaire  $\nu_{ij} = 1$  et  $\lambda_{ij} = 1$ .

Figure 6 : Page Mathcad pour le calcul de  $E_{0 \text{ var}}^{(1)}$   
 $\nu_{ij} = 1, \lambda_{ij} = 1. (m_1, m_2, m_3, m_4) = (1, 1, 2, 1)$

Nous allons présenter dans ce qui suit quelques résultats numériques pour des systèmes à 4 corps. Il s'agit des bornes supérieurs  $E_{0 \text{ var}}^{(1)}$  (4.61) et  $E_{0 \text{ var}}^{(2)}$  (4.63) obtenues par approximation variationnelle en utilisant une et deux générations de gaussiennes respectivement.

Notons que, en combinant notre borne supérieure  $E_{0 \text{ var}}$  à une borne inférieure  $E_{0 \text{ inf}}$  (voir référence [17]), nous pouvons obtenir un encadrement de l'énergie du niveau fondamental du système à 4 corps. Nous avons reporté dans les tableaux suivants les résultats numériques de  $E_{0 \text{ var}}^{(g)}$  et  $E_{0 \text{ inf}}$ . Les valeurs de  $E_{0 \text{ inf}}$  sont extraites de la référence [17]. Nous avons également reporté les valeurs exactes de l'énergie du fondamental lorsque ceci est disponible (seulement pour l'OH).

Tableau 1 :  $E_{exacte}$  et  $E_0^{(1)}_{var}$  pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à quatre corps dans un potentiel harmonique ( $v = 2$ ), pour cette configuration  $m_1 = m_2$ ,  $m_3 = m_4$  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)
$E_{exacte}$	76.8187	27.6089	21.07794	15.4388	12.7279
$E_0^{(1)}_{var}$	76.8187	27.6089	21.07794	15.4388	12.7279

Tableau 2 :  $E_{exacte}$  et  $E_0^{(1)}_{var}$  pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à quatre corps dans un potentiel harmonique ( $v = 2$ ), pour cette configuration  $m_1 = m_2 = m_3 = 1$ ,  $m_4$  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)
$E_{exacte}$	45.2888	20.2963	12.7279	11.4853	10.6382
$E_0^{(1)}_{var}$	45.2888	20.2963	12.7279	11.4853	10.6382

Tableau 3 :  $E_{exacte}$  et  $E_0^{(1)}_{var}$  pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à quatre corps dans un potentiel harmonique ( $v = 2$ ), pour cette configuration  $m_1 = m_2 = 1$ ,  $m_3 = 2$ ,  $m_4$  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)
$E_{exacte}$	44.4997	16.1412	11.8394	10.5428	9.61525
$E_0^{(1)}_{var}$	44.4997	16.1412	11.8394	10.5428	9.61525

Tableau 4 :  $E_{\text{inf}}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(1)}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(2)}$  pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à quatre corps dans un potentiel linéaire ( $v = 1$ ), pour cette configuration  $m_1 = m_2 = 1$ ,  $m_3 = m_4 \text{ variable}$

$(m_1, m_2, m_3, m_4)$	(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)
$E_{\text{inf}}$	35.9018	18.4851	15.5103	12.6522	11.1346
$E_{0 \text{ var}}^{(1)}$	36.0042	18.5378	15.5545	12.6883	11.1663
$E_{0 \text{ var}}^{(2)}$	35.9516	18.5145	15.5357	12.6734	11.1533

Tableau 5 :  $E_{\text{inf}}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(1)}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(2)}$  pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à quatre corps dans un potentiel linéaire ( $v = 1$ ), pour cette configuration  $m_1 = m_2 = m_3 = 1$ ,  $m_4 \text{ variable}$

$(m_1, m_2, m_3, m_4)$	(1, 1, 1, 0.01)	(1, 1, 1, 0.1)	(1, 1, 1, 1)	(1, 1, 1, 3)	(1, 1, 1, 100)
$E_{\text{inf}}$	24.2865	14.9773	11.1346	10.3861	9.84436
$E_{0 \text{ var}}^{(1)}$	24.3558	15.0200	11.1663	10.4157	9.87243
$E_{0 \text{ var}}^{(2)}$	24.3101	15.0005	11.1533	10.4035	9.86061

Tableau 6 :  $E_{\text{inf}}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(1)}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(2)}$  pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à quatre corps dans un potentiel linéaire ( $v = 1$ ), pour cette configuration  $m_1 = m_2 = 1$ ,  $m_3 = 2$ ,  $m_4 \text{ variable}$

$(m_1, m_2, m_3, m_4)$	(1, 1, 2, 0.01)	(1, 1, 2, 0.2)	(1, 1, 2, 1)	(1, 1, 2, 3)	(1, 1, 2, 100)
$E_{\text{inf}}$	23.8736	12.9355	10.6045	9.80518	9.19100
$E_{0 \text{ var}}^{(1)}$	23.9502	12.9857	10.6467	9.84296	9.22439
$E_{0 \text{ var}}^{(2)}$	23.94165	12.9724	10.6347	9.83314	9.21721

Tableau 7 :  $E_{\text{inf}}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(1)}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(2)}$  pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à quatre corps dans un potentiel de Martin ( $v = 0.1$ ), pour cette configuration  $m_1 = m_2 = 1$ ,  $m_3 = m_4$  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)
$E_{\text{inf}}$	8.41083	7.69779	7.51473	7.30462	7.17365
$E_{0 \text{ var}}^{(1)}$	8.42703	7.71262	7.52920	7.31869	7.18747
$E_{0 \text{ var}}^{(2)}$	8.41985	7.70677	7.52365	7.31340	7.18230

Tableau 8 :  $E_{\text{inf}}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(1)}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(2)}$  pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à quatre corps dans un potentiel de Martin ( $v = 0.1$ ), pour cette configuration  $m_1 = m_2 = m_3 = 1$ ,  $m_4$  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)
$E_{\text{inf}}$	7.87869	7.46170	7.17365	7.10144	7.04462
$E_{0 \text{ var}}^{(1)}$	7.89386	7.47608	7.18747	7.11511	7.05819
$E_{0 \text{ var}}^{(2)}$	7.88659	7.47036	7.18230	7.10997	7.05301

Tableau 9 :  $E_{\text{inf}}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(1)}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(2)}$  pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à quatre corps dans un potentiel de Martin ( $v = 0.1$ ), pour cette configuration  $m_1 = m_2 = 1$ ,  $m_3 = 2$ ,  $m_4$  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)
$E_{\text{inf}}$	7.84436	7.31692	7.12322	7.04262	6.97397
$E_{0 \text{ var}}^{(1)}$	7.85948	7.33101	7.13722	7.05618	6.98740
$E_{0 \text{ var}}^{(2)}$	7.85225	7.32622	7.13253	7.05160	6.98249

Tableau 10 :  $E_{\text{inf}}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(1)}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(2)}$  pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à quatre corps dans un potentiel Coulombien ( $v = -1$ ), pour cette configuration  $m_1 = m_2 = 1$ ,  $m_3 = m_4$  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)
$E_{\text{inf}}$	-0.30547	-0.76439	-1.17922	-2.06427	-3.00000
$E_{0 \text{ var}}^{(1)}$	-0.25929	-0.64884	-1.00095	-1.75221	-2.54648
$E_{0 \text{ var}}^{(2)}$	-0.25929	-0.68198	-1.05168	-1.84092	-2.67524

Tableau 11 :  $E_{\text{inf}}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(1)}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(2)}$  pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à quatre corps dans un potentiel Coulombien ( $v = -1$ ), pour cette configuration  $m_1 = m_2 = m_3 = 1$ ,  $m_4$  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)
$E_{\text{inf}}$	-1.16983	-1.54167	-3.00000	-3.73167	-4.46730
$E_{0 \text{ var}}^{(1)}$	-0.99298	-1.30861	-2.54648	-3.16754	-3.79196
$E_{0 \text{ var}}^{(2)}$	-1.06458	-1.38005	-2.65779	-3.32812	-3.98598

Tableau 12 :  $E_{\text{inf}}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(1)}$  et  $E_{0 \text{ var}}^{(2)}$  pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à quatre corps dans un potentiel Coulombien ( $v = -1$ ), pour cette configuration  $m_1 = m_2 = 1$ ,  $m_3 = 2$ ,  $m_4$  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)
$E_{\text{inf}}$	-1.41634	-2.14635	-3.48917	-4.46423	-5.60219
$E_{0 \text{ var}}^{(1)}$	-1.19485	-1.82091	-2.95901	-3.78906	-4.75115
$E_{0 \text{ var}}^{(2)}$	-1.28948	-1.91351	-3.10868	-3.98098	-4.99404

# Chapitre 5

## Application

*Dans ce chapitre nous allons essayer d'appliquer la méthode du développement sur des gaussiennes corrélées à un système physique à quatre corps concret qui est en l'occurrence la molécule dihydrogène.*

### 5.1 La molécule dihydrogène

La molécule  $H_2$  (*Dihydrogène*) est la forme moléculaire de l'élément hydrogène (l'hydrogène est l'élément chimique le plus simple, est constitué seulement d'un proton et d'un électron). La molécule comporte deux atomes d'hydrogène. Cette molécule peut être assimilée à un système à quatre corps dans la configuration  $(m, m, M, M)$  : deux électrons de masse  $m$  et de charge  $-q_e$  et deux noyaux de masse  $M$  et de charge  $+q_e$ . Il est clair que ce système peut être traité comme un cas particulier de la configuration  $(m, m, M, M)$  en utilisant le système de coordonnées de Jacobi modifié (section 3.3.3).

*Figure 6 : Coordonnées de Jacobi pour la molécule de dihydrogène ( $H_2$ ).*

Notons que, dans la limite non relativiste et en négligeant toutes interactions autres que l'interaction coulombienne entre les particules constituant la molécule, l'hamiltonien de la molécule

dihydrogène s'écrit :

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad (5.1)$$

où l'énergie cinétique,

$$\hat{T} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_e} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_e} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_p} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_p}, \quad (5.2)$$

$m_e$  et  $m_p$  désignent respectivement la masse de l'électron et celle du proton (noyau de l'atome d'hydrogène). L'énergie potentielle est dans ce cas :

$$\hat{V} = \frac{\lambda_{12}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + \frac{\lambda_{13}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_3|} + \frac{\lambda_{14}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_4|} + \frac{\lambda_{23}}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_3|} + \frac{\lambda_{24}}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_4|} + \frac{\lambda_{34}}{|\vec{r}_3 - \vec{r}_4|}, \quad (5.3)$$

où on a numéroté par 1 et 2 le premier et le deuxième électrons et par 3 et 4 le premier et le deuxième noyau. On doit donc attribuer à l'exposant du potentiel en loi de puissance la même valeur ( $\nu = -1$ ) pour toutes les interactions coulombiennes :

$$\nu_{12} = \nu_{13} = \nu_{14} = \nu_{23} = \nu_{24} = \nu_{34} = -1, \quad (5.4)$$

Sachant que l'interaction est répulsive entre les particules de mêmes charges électrique et attractive entre les particules de charges électrique opposées en signes. Ceci se traduit par des constantes de couplage  $\lambda_{ij}$  positives dans le premier cas et négative pour le deuxième. Autrement dit, on attribue des constantes de couplage positive pour les paires, *électron – noyau* et des constantes de couplage négative pour les paires, *électron – électron* et *noyau – noyau*. C'est-à-dire :

$$\begin{aligned} \lambda_{12} &= \lambda_{34} = 1, \\ \lambda_{13} &= \lambda_{14} = \lambda_{23} = \lambda_{24} = -1, \end{aligned} \quad (5.5)$$

où on a utilisé le fait que dans le système d'unité naturel (SUN),  $q_e^2/(4\pi\epsilon_0) = 1$ .

Nous allons chercher une approximation de la fonction d'onde associée à l'état fondamental de la molécule dihydrogène sous forme d'une série de gaussiennes corrélées (4.52).

On peut faire usage des résultats obtenus dans le chapitre précédent pour déterminer une approximation de l'énergie et la fonction d'onde associées à l'état de cette molécule. On doit donc procéder à la minimisation de la valeur moyenne de l'hamiltonien de la molécule. Les

éléments de matrice de l'hamiltonien se réduisent dans ce cas à :

$$\begin{aligned}
\langle n|H|m\rangle &= \langle n|m\rangle \\
&\left[ \frac{3}{4} \frac{1}{\mu_1} \left[ A^{(n)} A^{-1} A^{(m)} \right]_{11} + \frac{3}{4} \frac{1}{\mu_2} \left[ A^{(n)} A^{-1} A^{(m)} \right]_{22} + \frac{3}{4} \frac{1}{\mu_3} \left[ A^{(n)} A^{-1} A^{(m)} \right]_{33} \right. \\
&+ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \\
&\left. \left[ \gamma_{12,12}^{-1/2} - \gamma_{13,13}^{-1/2} - \gamma_{14,14}^{-1/2} - \gamma_{23,23}^{-1/2} - \gamma_{24,24}^{-1/2} + \gamma_{34,34}^{-1/2} \right] \right], \tag{5.6}
\end{aligned}$$

Puisque  $\Gamma((\nu + 3)/2) = \Gamma(1) = 1$  pour  $\nu = -1$ .

Rappelons que la minimisation de la valeur moyenne de la molécule se fait par rapport aux paramètres variationnels  $A_{ij}^{(n)}$  et  $c_n$ .

Après avoir terminé cette tâche d'optimisation, nous obtenons une valeur approximative pour l'énergie du fondamental de la molécule et des valeurs des paramètres variationnels  $A_{ij}^{(n)}$  et  $c_n$  qui définissent ainsi l'expression de la fonction d'onde approximative. Une fois la fonction d'onde déterminée, toutes les informations concernant la molécule peuvent être déduites. On peut notamment estimer les valeurs de certains paramètres de la molécule, comme la distance interatomique 'd'. La quantité qui exprime cette distance n'est d'autre que la valeur moyenne du module du vecteur liant les deux noyaux  $||\vec{r}_{34}|| = r_{34}$ . Pour calculer cette valeur moyenne, on pourrait s'inspirer des résultats obtenus pour l'élément de matrice  $\langle n | \lambda_{ij} r_{ij}^{\nu_{ij}} | m \rangle$ . Sans refaire de calculs, il suffit de remplacer  $ij$  par 34 et  $\lambda_{ij}$  par 1 et également  $\nu_{ij}$  par 1. Nous obtenons

$$\langle n | r_{34} | m \rangle = \langle n | m \rangle \frac{2}{\sqrt{\pi}} \gamma_{34,34}^{1/2}, \tag{5.7}$$

puisque  $\Gamma((\nu_{ij} + 3)/2) \Gamma(2) = 1$ ,

Dans le tableau 13 nous avons regroupé les résultats numériques concernant la valeur approximative de l'énergie du fondamental et celle de la distance interatomique 'd' de la molécules dihydrogène et contentons-nous d'utiliser jusqu'à trois gaussiennes ( $g = 1, 2$  et  $3$ ). Les valeurs exactes ont été également reportées. Notons que, dans le système SUN les masses sont mesurées en unité de la masse de l'électron  $m_e = 1$ , l'énergie en unité hartree (1 hartree  $\simeq 27.2$  eV) et les distance en unité du rayon de Bohr ( $a_0 = 0.5292 \text{ \AA}$ ). La masse du noyau de l'hydrogène doit

être prise égale à  $m_p/m_e \approx 1836$ , où  $m_p$  est la masse du proton.  $0.74/0.5292 = 1.3983$

*Tableau 13 :* Approximation variationnelle de l'énergie du niveau fondamental et de distance interatomique de la molécule dihydrogène ( $H_2$ ).

	$g = 1$	$g = 2$	$g = 3$	<i>exacte</i>
$E_0$	-0.779	-0.822	-0.940	-1.166
d	1.829	1.773	1.520	1.398

Nos résultats sont proches des valeurs exactes concernant l'énergie et la distance interatomique de la molécule dihydrogène dans son état fondamental, au point qu'elles constituent de bonnes approximations. On constate que la méthode converge vers les valeurs exactes en augmentant le nombre de gaussiennes.

# Conclusion

Nous nous sommes intéressés dans ce mémoire à la résolution approximative de l'équation de Schrödinger stationnaire pour des systèmes à quatre corps.

Nous avons commencé par une brève présentation de la physique quantique de Schrödinger. Nous avons mis l'accent sur les modifications à apporter pour généraliser l'étude d'un problème unidimensionnel lorsque cette étude s'étend à un espace à trois dimensions et en particulier pour des forces centrales à symétrie sphérique. La généralisation à trois dimensions sera immédiate dans le cas de forces centrales à symétrie sphérique. Pour ce dernier cas il suffit de considérer une fonction d'onde sphérique au lieu d'une fonction d'onde plane.

Nous avons ensuite présenté une étude analytique détaillée d'un cas exactement soluble. Il s'agit du problème de l'oscillateur harmonique. Nous avons adopté une méthode purement analytique où les opérateurs de création et d'annihilation ne sont pas exigés. Nous avons, d'une part, traité en détail l'oscillateur harmonique à une dimension. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde exactes sont dérivés. Pour l'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions il est préférable de travailler en coordonnées sphériques et d'appliquer les résultats déjà dérivés pour les problèmes de forces centrales. Nous avons suivi la même démarche pour déterminer analytiquement les expressions des fonctions d'ondes des états liés et les énergies propres correspondantes.

Nous avons repris le problème de l'oscillateur harmonique mais pour un système à quatre corps. Au lieu d'utiliser comme variables les vecteurs position des particules individuelles, nous avons employé la coordonnée du centre de masse du système avec trois autres coordonnées dites de Jacobi. Nous avons pu exprimer l'hamiltonien du système dans ce nouveau système de coordonnées ce qui nous a permis de déterminer le spectre d'énergie et les fonctions d'onde

associées. Nous avons montré que, de manière générale, la fonction d'onde exacte associée à l'état fondamental de l'oscillateur harmonique à quatre corps n'est plus une gaussienne simple mais une gaussienne corrélée en les coordonnées de Jacobi.

D'autre part, nous nous sommes focalisés sur la résolution approchée des problèmes à quatre corps en interaction non harmonique où généralement la résolution exacte est impossible. Pour cela nous avons utilisé la méthode de développement sur des gaussiennes corrélées qui est une méthode de nature variationnelle basée sur le principe variationnel de Ritz. Cette méthode consiste à minimiser la valeur moyenne de l'hamiltonien sur un certain nombre de paramètres libres impliqués dans une fonction d'onde appelée *fonction d'onde d'essai*. Nous nous sommes restreints aux problèmes à quatre corps interagissant par des forces à deux corps dérivant de potentiels en loi de puissance. La fonction d'onde d'essai est choisie sous forme d'une série de fonctions gaussiennes corrélées dont les variables sont les coordonnées de Jacobi. Nous avons calculé de manière analytique les éléments de matrice utiles pour le calcul de la valeur moyenne de l'hamiltonien du système. La méthode a été ensuite appliquée pour des problèmes à quatre corps et ce pour différentes configurations des masses. Il s'avère que la méthode converge vers les énergies exactes en augmentant le nombre de gaussiennes, mais ceci à un traitement variationnel de plus en plus compliqué. Il faut tenir compte du fait qu'on a un problème d'optimisation non linéaire avec contraintes et avec un nombre de paramètres variationnels qui augmente rapidement avec le nombre de gaussiennes utilisées et requiert donc des moyens de calculs numériques considérables.

Un système physique concret a été proposé pour tester la qualité de la méthode. Nous avons pour cela examiné le problème de l'état fondamental de la molécule dihydrogène où nous avons pu trouver des valeurs approximatives pour l'énergie et la distance interatomique de la molécule.

### 5.1.1

# Annexe A

## La Fonction gamma

### Définition

Au cours des années 1729 et 1730, Euler introduit une fonction analytique (notée par la lettre grecque  $\Gamma$ ) qui a la propriété d'interpoler la factorielle chaque fois que l'argument de la fonction est un entier :

$$\Gamma(n) = (n - 1)! = 1 \times 2 \times \dots \times (n - 1) \quad \text{pour } n > 0$$

Dans une lettre du 8 janvier 1730 à Christian Goldbach il a proposé la définition suivante :

$$\Gamma(x) = \int_0^{+\infty} (-\log(t))^{x-1} dt \quad \text{pour tout } x > 0$$

Par changements élémentaires de variables, cette définition historique prend le plus formes habituelles :

Pour  $x > 0$  :

$$\Gamma(x) = \int_0^{+\infty} t^{x-1} \exp(-t) dt.$$

La fonction gamma est entièrement caractérisée parmi les fonctions holomorphes du demi-plan complexe  $Re(s) > 0$  par les propriétés suivantes (théorème de Wielandt) :

- $\Gamma(1) = 1$
- $\Gamma(s + 1) = s\Gamma(s)$  , pour tout  $s$  tel que  $Re(s) > 0$ . Cette équation s'appelle relation fonctionnelle.
- $\Gamma(n + 1) = n!$  , pour  $n \in \mathbb{N}$ .

# Annexe B

## Relations de commutation canoniques

En mécanique quantique, la relation de commutation canonique est la relation fondamentale entre les grandeurs conjuguées canoniques (grandeurs qui sont liées par définition telles que l'une est la transformée de Fourier d'une autre). Par exemple :

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

Entre l'opérateur de position  $x$  et l'opérateur d'impulsion  $p_x$  dans la direction  $x$  d'une particule ponctuelle dans une dimension, où

$$[x, p_x] = xp_x - p_x x$$

est le commutateur de  $x$  et  $p_x$ ,  $i$  est l'unité imaginaire, et  $\hbar$  est la constante de Planck réduite  $h/2\pi$ .

En général, la position et l'impulsion sont des vecteurs d'opérateurs et leur relation de commutation entre les différentes composantes de la position et de l'impulsion peut être exprimée comme :

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = \hat{r}_i \hat{p}_j - \hat{p}_j \hat{r}_i = i\hbar \delta_{ij}, \quad (5.8)$$

où

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (5.9)$$

où  $\delta_{ij}$  est le **delta de Kronecker**.

Cette relation est attribuée à Max Born (1925), qui l'appelait une « condition quantique »

servant de postulat à la théorie, il a été noté par E. Kennard (1927) pour impliquer le principe d'incertitude de Heisenberg.

Le théorème de Stone-von Neumann donne un résultat d'unicité pour les opérateurs satisfaisant (une forme exponentielle de) la relation de commutation canonique.

**Propriété :**

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

pour vérifier la relation de commutation canonique(5.8) :

$$\left[ \alpha\hat{x}, \frac{1}{\alpha}\hat{p}_x \right] = [\hat{x}', \hat{p}'_x] = i\hbar. \quad (5.10)$$

# Annexe C

## **Systeme d'Unités naturelles**

Un système d'unités naturelles, noté SUN, est un système d'unités basé uniquement sur des constantes physiques universelles. Par exemple, la charge élémentaire  $e$  est une unité naturelle de charge électrique, et la vitesse de la lumière  $c$  est une unité naturelle de vitesse. Un système d'unités purement naturel à toutes ses unités définies de cette façon, ce qui implique que la valeur numérique des constantes physiques sélectionnées, exprimées dans ces unités, vaut exactement 1. Ces constantes sont par conséquent omises des expressions mathématiques des lois physiques, et si cela semble simplifier les choses, cela entraîne une perte de clarté due à la perte d'information nécessaire à l'analyse dimensionnelle. Il y a apparition de grandeurs sans dimension (nombre de Reynolds par exemple en hydrodynamique).

Les trois unités de base d'un système naturel sont : la vitesse de la lumière, pour la valeur de la vitesse ; la constante de Planck réduite, pour l'action ; et la masse de l'électron, pour la masse.

## **Systeme d'unités atomiques**

Les unités atomiques (ua) forment un système d'unités très utilisé pour simplifier les calculs formels ou numériques en physique quantique, notamment en physique atomique. Elles consistent à poser égales à 1 la constante de Planck réduite  $\hbar$ , la masse de l'électron au repos  $m_e$ , et la constante de la loi de Coulomb multipliée par  $e^2$  (où  $e^-$  est la charge de l'électron).

Dans un système d'unités atomiques, on a donc :

$$\hbar = m_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1.$$

où  $e^-$  est la charge de l'électron. Avec cette définition, on construit des quantités dont la

valeur est également 1 et qui possèdent la dimension physique de grandeurs fondamentales : on obtient ainsi une unité atomique de distance (incidence égale au rayon de Bohr  $a_0$ ) et une unité atomique d'énergie (unité aussi appelée Hartree) :

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{\hbar}{m_e \alpha c}, \\ E_H &= \alpha^2 m_e c^2. \end{aligned}$$

en faisant apparaître la constante de structure fine  $\alpha$ , sans dimension et donc de valeur indépendante du système d'unités dans lequel on l'exprime :

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \sim \frac{1}{137}.$$

On constate que  $\alpha c = 1ua$ , c'est-à-dire que la vitesse de la lumière dans le vide  $c$  vaut environ  $137ua$  (de vitesse, puisqu'on sait à l'avance qu'il s'agit d'une vitesse). De la même façon, toute grandeur calculée à partir de la définition des unités atomiques est naturellement et implicitement exprimée en unités atomiques.

Une expression formelle, donnant une grandeur physique en fonction de ces quantités, peut donc être réécrite en remplaçant celles-ci par une même quantité valant arbitrairement 1. Le résultat final des calculs, dont on doit connaître au préalable la dimension physique, est converti en utilisant les expressions ou valeurs numériques déjà établies pour l'unité **SI** correspondant à cette dimension. Par exemple lors d'une application numérique où l'on calcule une énergie - qu'on obtient dans un premier temps en unités atomiques - on utilise le fait que  $1ua$  d'énergie vaut environ  $27,2eV$ , pour convertir le résultat en unités atomiques vers les eV.

L'homogénéité, du point de vue des dimensions physiques, n'est pas respectée. Cette méthode ne tolère donc pas les erreurs de calcul, puisque le critère d'homogénéité n'est plus utilisable simplement pour vérifier les résultats.

Le tableau suivant résume les unités atomiques de base, dont seulement trois sont indépendantes. Le choix des trois grandeurs données en guise de définition est traditionnel. Toutes ces quantités valent 1 en unités atomiques.

Unités atomiques fondamentales

Quantité	Nom	Symbole
Masse	masse de l'électron au repos	$m_e$
Longueur	rayon de Bohr	$a_0 = (\hbar/m_e\alpha c)$
Énergie	Hartree	$E_H = \alpha^2 m_e c^2$
Temps	-	$\hbar/E_H$
Vitesse	-	$(a_0 E_H/\hbar) = \alpha c$

# Bibliographie

- [1] C.C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, *Mecanique Quantique-T1 et T2*- Hermann, Paris. (1977).
- [2] J.-M. Richard, *Phy. Rep.* **212** (1992) 1.
- [3] F.T. Smith, *Phys. Rev.***120**, (1960) 1058.
- [4] L.M. Deleves, *Nucl. Phys.* **9**,(1959) 391.
- [5] L. Messai et S. Hafsouli, *Résolution approximative de problèmes quantiques à trois corps par la méthode de développement sur des gaussiennes corrélées*, Mémoire de Master, Physique des matériaux, Univ. Khenchela (2015).
- [6] S.Fleck et j.-M. Richard, *Few-Body Systems* **19** (1995) 19.
- [7] C.Cohen-Tannoudji, B.Diu and F.Laloe, *Mécanique Quantique*, (Flammarion, 1989).
- [8] F.Seraiche, *La solution exacte de l'equation de Schrödinger stationnaire*, (2017,2018)
- [9] J.Hladik, M.Chrysos, P.Emmanuel Hladik, *Mécanique Quantique* (2006).
- [10] Pascal Degiovanni, *Physique quantique, information et calcul Des concepts aux applications* », CNRS ÉDITIONS, SAVOIRS ACTUELS, Paris (1998).
- [11] A. Boudjemaa et S. Keziz, *Résolution exacte du problème de l'oscillateur harmonique à N-corps*, Mémoire de Master, Physique des matériaux, Univ. Khenchela (2017).
- [12] Jean Hladik, *MÉCANIQUE QUANTIQUE, Atomes et noyaux, Applications technologiques*, Cours et exercices corrigés.
- [13] J.L.Basdevant, J.Dalibard. *Mécanique quantique* (Ecole polytechnique. 2008).
- [14] L. Landau et E. Lifchitz, *Mécanique quantique*, Edition Mir (1975).
- [15] M. Born, *The Statistical Interpretation of Quantum Mechanics*, nobel Lecture. December (1954).

- [16] Auteur ....., *Méthode des variations*, 13 Février 2014.
- [17] F. BOUDJELLAL et D. BENKHELIFA, *Bornes inférieures pour l'énergie de l'état fondamental d'un système quantique non relativiste à quatre corps*, Mémoire de Master, Physique des matériaux, Univ. Khenchela (2021).
- [18] Kh. Boudjemaa and S.R.Zouou, *J. Phys. A. Math Gen.* **39** (2006) 7383–7409.

# Résolution variationnelle du problème des états liés d'un système quantique non relativiste à quatre corps

## Résumé

Dans ce mémoire, nous avons appliqué la méthode de développement sur des gaussiennes corrélées qui est une méthode d'essence variationnelle basée sur le théorème de Ritz pour trouver une solution approximative de l'équation de Schrödinger stationnaire pour un système non relativiste à quatre corps sans spin et interagissant via des forces à deux corps.

Dans le but de tester la qualité de nos calculs, il aurait été préférable que nous fassions une étude de quelques problèmes à quatre corps qui nous donnerait des résultats exactes. Il s'agit d'une méthode basée sur des changements de coordonnées permettant de résoudre de manière exacte le problème à quatre corps en interaction de type harmonique.

En fin on a appliqué notre méthode à un système physique concret ; la molécule dihydrogène, pour confirmer nos résultats.

**Mots clés :** · Equation de Schrödinger · Hamiltonien · Coordonnées de Jacobi · Oscillateur harmonique · Fonction d'onde d'essai · Minimisation · Energie de l'état fondamental · Principe variationnel · Développement sur des gaussiennes corrélées.

# Variational resolution to the quantum non relativistic four body bound state problem

## **Abstract**

In this thesis, we applied the correlated Gaussians expansion method which is a method of variational nature based on the variational Ritz theorem to find an approximate solution of the stationary Schrödinger equation for a non-relativistic spinless four-body system and interacting via two-body forces.

In order to test the quality of our calculations, it would have been preferable that we made a study of some four-body problems which would give us exact results. It is about a method based on changes of coordinates allowing to solve in an exact way the four-body with harmonic interaction.

Finally we applied our method to concrete physical system ; the dihydrogen molecule, to confirm our results.

**Keywords** · Schrödinger equation · Hamiltonian · Jacobi coordinates · Harmonic oscillator · Trial wave function · Minimization · Ground state energy · Variational principle · Correlated Gaussians Expansion