

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

UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE
FACULTE DES SCIENCES EXACTES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° d'ordre :

Série :

THESE

PRESENTEE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE DOCTORAT D'ETAT EN PHYSIQUE
SPECIALITE : PHYSIQUE THEORIQUE

THEME

QUELQUES RESULTATS RIGoureux POUR LES SYSTEMES A
PETIT NOMBRE DE CORPS ET LEURS APPLICATIONS

Soutenu le : 25/12/2007

Par

BACHKHAZNADJI ABDELMALIK

Devant le jury :

Président :	L. GUECHI	Prof. Université Mentouri Constantine
Rapporteur :	S.R. ZOUZOU	Prof. Université Mentouri Constantine
Examineurs :	A. AMGHAR	Prof. Université M. Bouguerra Boumerdas
	F. BENAMIRA	MC. Université Mentouri Constantine
	S. HASANI	DR. Centre de Recherche Nucléaire d'Alger

Table des matières

Introduction	2
1 L'oscillateur harmonique à 3 et à 4 corps	8
1.1 Méthodologie	9
1.2 L'oscillateur harmonique à 3 corps	11
1.2.1 Configuration $(3 \times m)$	11
1.2.2 Configuration $(2 \times m_1, 1 \times m_3)$	13
1.2.3 Configuration $(1 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$	15
1.3 L'oscillateur harmonique à 4 corps	18
1.3.1 Configuration $(4 \times m_1)$	18
1.3.2 Configuration $(3 \times m_1, 1 \times m_4)$	20
1.3.3 Configuration $(2 \times m_1, 2 \times m_3)$	22
1.3.4 Configuration $(2 \times m_1, 1 \times m_3, 1 \times m_4)$	24
2 Ancienne borne inférieure optimisée	29
2.1 Méthodologie	29
2.2 Systèmes à 3 corps	30
2.2.1 Contrainte dynamique universelle	33
2.2.2 Configurations spéciales de masse	35
configuration $(3 \times m_1)$	35
configuration $(2 \times m_1, 1 \times m_3)$	36
2.3 systèmes à 4 corps	36
2.3.1 Contrainte dynamique universelle	40
2.3.2 Configurations spéciales de masse	42
Configuration $(4 \times m_1)$	42
Configuration $(3 \times m_1, 1 \times m_4)$	42
Configuration $(2 \times m_1, 2 \times m_3)$	42
Configuration $(2 \times m_1, 1 \times m_3, 1 \times m_4)$	43

3	Nouvelle borne inférieure optimisée	44
3.1	Méthodologie	44
3.2	Systèmes à 3 corps	45
3.2.1	Contrainte dynamique universelle	50
3.3	systèmes à 4 corps	51
3.3.1	Contraintes dynamiques universelles	55
3.3.2	Configurations spéciales de masse	60
	Configuration $(4 \times m_1)$	60
	Configuration $(3 \times m_1, 1 \times m_4)$	60
	Configuration $(2 \times m_1, 2 \times m_3)$	61
	Configuration $(2 \times m_1, 1 \times m_3, 1 \times m_4)$	61
4	Résultats numériques	64
4.1	Borne inférieure naïve	64
4.2	Borne inférieure améliorée	66
4.3	Développement systématique sur des Gaussiennes corrélées	68
4.4	Résultats numériques	69
5	Un problème à 2 corps de type "Calogero" exactement soluble	77
5.1	Le modèle unidimensionnel	77
5.1.1	Position du problème	77
5.1.2	Résolution de l'équation angulaire	79
5.1.3	Résolution de l'équation radiale	82
5.1.4	Solutions de l'équation de Schrödinger pour l'Hamiltonien à deux corps	84
5.2	Le modèle à la dimension d'espace $D = 2$	87
5.2.1	Position du problème	87
5.2.2	résolution de l'équation angulaire	89
5.2.3	Résolution de l'équation radiale	90
5.2.4	Solutions de l'équation de Schrödinger	91
5.3	Le modèle à la dimension d'espace $D = 3$	93
5.3.1	résolution de l'équation angulaire	94
5.3.2	Résolution de l'équation radiale	96
5.3.3	Solutions de l'équation de Schrödinger	97
5.4	Le modèle à la dimension d'espace D	98
5.4.1	Résolution de l'équation angulaire	99
5.4.2	Résolution de l'équation radiale	100
5.4.3	Solutions de l'équation de Schrödinger	102
5.5	Exacte solubilité et propriétés intrinsèques du modèle	102
5.5.1	Supersymétrie et invariance de forme des potentiels radial et angulaire	103

	Supersymétrie et invariance de forme du potentiel angulaire	105
	Supersymétrie et invariance de forme du potentiel radial	107
5.5.2	Symétrie $SU(1, 1)$	108
6	Quelques problèmes à 3 corps exactement solubles	111
6.1	Une généralisation du problème à trois corps de Calogero	111
6.1.1	Exposé du problème	111
6.1.2	Résolution de l'équation de Schrödinger dans le cas où la coordonnée du centre de masse $R = 0$	114
	résolution de l'équation angulaire	115
	Résolution de l'équation radiale	118
	Solutions de l'équation de Schrödinger	119
6.1.3	Résolution de l'équation de Schrödinger dans le cas où la coordonnée du centre de masse $R \neq 0$	120
	Résolution de l'équation angulaire d'angle azimutal φ	122
	Résolution de l'équation angulaire d'angle polaire θ	124
	Résolution de l'équation radiale	126
	Solutions de l'équation de Schrödinger	127
6.2	Une généralisation du problème à trois corps de Calogero-Marchioro-Wolfes (CMW)	129
	Résolution de l'équation angulaire d'angle azimutal φ	130
	Résolution de l'équation angulaire d'angle polaire θ	133
	Résolution de l'équation radiale	133
	Solution de la généralisation du problème à trois corps de (CMW)	134
6.3	Une autre généralisation du problème à trois corps	135
	Conclusion	141
	Bibliographie	145

Introduction

Cette thèse se compose de deux parties distinctes quoique s'inscrivant toutes deux dans le domaine des systèmes à petit nombre de corps.

La première partie de la thèse concerne deux bornes inférieures pour l'énergie de l'état fondamental d'Hamiltoniens à 3 et à 4 corps gouvernés par une cinématique relativiste et interagissant par des forces à deux corps invariantes par translation. Comme chacun le sait, le problème à N corps est extrêmement difficile. Déjà, le problème le plus simple, à savoir le problème à 1 corps invariant par rotation, ou, ce qui revient au même, le problème à deux corps avec une interaction invariante par translation et par rotation, ne sont résolubles que pour des classes très particulières de potentiel. En dehors de cas très particuliers, il faut recourir à des méthodes de résolution numérique de l'équation de Schrödinger. Si le problème à un corps avec un potentiel central est résoluble quasi-exactement, c'est à dire avec n'importe quel degré de précision fixé à l'avance, la résolution se complique très rapidement avec N et requiert des moyens de calcul considérables. Plusieurs méthodes de résolution approchée de l'équation de Schrödinger à N corps ont été mises au point, dont la méthode, d'essence variationnelle, de développement systématique sur des Gaussiennes corrélées [1, 2, 3, 4]. Une alternative aux calculs numériques est l'obtention de résultats exacts. Les bornes inférieures pour l'énergie constituent un chapitre important des résultats exacts. On peut même combiner ces bornes inférieures avec des calculs variationnels, utilisant par exemple le développement sur des Gaussiennes corrélées [1, 2, 3, 4], qui eux fournissent des bornes supérieures, pour obtenir un encadrement de l'énergie. Les deux bornes inférieures que nous allons considérer dans la première partie de cette thèse possèdent la particularité de résulter d'un processus d'optimisation et sont appelées pour cette raison l'une ancienne borne inférieure optimisée et l'autre nouvelle borne inférieure optimisée. Comme leurs noms l'indiquent l'ancienne borne inférieure optimisée est chronologiquement antérieure à la nouvelle borne inférieure optimisée. Historiquement, la première borne inférieure pour l'énergie de l'état fondamental d'un système à N corps à être inventée a été la borne inférieure naïve [5, 6, 7, 8, 9, 10]. Les imperfections de cette borne ont motivé le développement de la borne inférieure améliorée [11, 12, 13]. Cette entreprise n'a rencontré qu'un succès partiel, c'est à dire que la borne inférieure améliorée n'est pas toujours meilleure que la borne inférieure naïve [14, 4]. Ceci a mené au dévelop-

pement de l'ancienne borne inférieure optimisée initialement pour le cas à trois corps [14], où elle s'est avérée supérieure et de manière absolue, c'est à dire dans tous les cas de figure, Aux deux bornes inférieures naïve et améliorée [14]. Cependant la généralisation directe de l'ancienne borne inférieure optimisée au cas à 4 corps [15] a montré que si l'ancienne borne inférieure optimisée est dans tous les cas de figure meilleure que la borne inférieure améliorée, il y'a cependant des cas où la borne inférieure naïve est meilleure que l'ancienne borne inférieure optimisée. De plus, il y'a une propriété essentielle de l'ancienne borne inférieure optimisée valable pour le cas à 3 corps, qui est partiellement perdu lors du passage au cas à 4 corps. Il s'agit de la propriété dite de saturabilité, c'est à dire du fait que l'ancienne borne inférieure optimisée coïncide exactement avec l'énergie exacte de l'état fondamental du système dans le cas d'interactions harmoniques. Cette propriété de saturabilité qui est réalisée dans tous les cas de figure pour des systèmes à trois corps, n'est réalisée dans le cas à quatre corps que dans certains cas de figure [15]. Il se trouve que c'est précisément dans les autres cas de figure que la borne inférieure naïve peut être meilleure que l'ancienne borne inférieure optimisée. Cette corrélation suggère que la propriété de saturabilité est en quelque sorte un label de qualité pour une borne inférieure. Ces constatations ont montré que l'ancienne borne inférieure optimisée n'est pas complètement satisfaisante pour le cas à 4 corps, ce qui a motivé la recherche d'une autre borne inférieure et a abouti sur la nouvelle borne inférieure optimisée pour le cas à 4 corps. Il se trouve premièrement que la version à 3 corps que cette nouvelle borne inférieure est complètement équivalente à la version à 3 corps de l'ancienne borne inférieure optimisée [15]. Mais, la version à 4 corps est intrinséquement supérieure à l'ancienne borne inférieure optimisée pour le cas à 4 corps [15]. Deuxièmement, cette nouvelle borne inférieure optimisée s'avère meilleure que toute les autres bornes disponibles jusqu'ici sur le marché [15]. Et troisièmement, il se trouve que la propriété de saturabilité est réalisée dans tous les cas de figure [15]. Ces succès de la nouvelle borne inférieure optimisée ont été confirmé pour un nombre quelconque de corps N par les travaux de Boudjema et Zouzou [4, 16, 17, 18, 19]. Notre contribution au développement des ancienne et nouvelle bornes inférieure optimisées se situent au niveau du 4 corps. Nous avons aussi considéré le cas à 3 corps, qui a été traité par d'autres auteurs [14].

La deuxième partie de cette thèse s'intéresse à une classe de problèmes exactement solubles. Résoudre exactement des problèmes en physique est affaire d'exception. Jusqu'au XX^{ième} siècle, la quête de telles solutions constitue pourtant une part importante de la recherche en physique et en mathématique. Cependant, des travaux du début du siècle, comme ceux de Poincaré, montrent clairement que la possibilité d'intégrer les équations (différentielles) du mouvement ne se présente que dans de rares cas. En particulier, Poincaré souligne qu'il est mathématiquement impossible d'obtenir des solutions pour un problème gravitationnel à trois corps. Le développement de théories plus complexes, telles la mécanique quantique ou la théorie quantique des champs, contribue par la suite au déclin de l'intérêt pour les systèmes intégrables, à savoir, les systèmes pour lesquels on peut

en principe intégrer les équations du mouvement. Enfin, le développement de la théorie du chaos, dès le début des années 60, démontre que certains modèles physiques non linéaires même très simples, c'est à dire comprenant peu de degrés de liberté, présentent une telle sensibilité aux conditions initiales que tout espoir de leur trouver des solutions analytiques reste illusoire.

Ce portrait négatif change considérablement vers la fin des années 60. C'est d'abord dans le cadre de la théorie classique des champs (en fait, pour des équations hydrodynamiques) qu'une véritable révolution pour la dynamique non linéaire s'amorce. En 1967, Gardner, Greene, Kruskal et Miura initient le mouvement en inventant la méthode de diffusion inverse (ou déformation isospectrale), une nouvelle méthode d'intégration des équations non linéaires aux dérivées partielles. On la considère comme une généralisation de la transformée de Fourier. Appliquée à l'origine pour résoudre l'équation de Korteweg-de Vries, elle est ensuite généralisée pour solutionner les équations de Schrödinger non linéaire et Sine-Gordon. Tous ces travaux sont reliés à la découverte des solitons. La méthode de diffusion inverse est mise sous forme algébrique par Lax en 1968 [20]. Peu de temps après, c'est de ce point de vue qu'on démontre l'intégrabilité de nombreux modèles classiques comportant un nombre arbitraire de particules. Par contre, ces problèmes à N corps intégrables sont d'abord découverts dans le cadre de la mécanique quantique.

Jusqu'en 1969, les seuls problèmes à N corps quantiques connus sont d'une part, l'exemple trivial des oscillateurs harmoniques découplés et, d'autre part, le modèle avec interaction ponctuelle par paire (potentiel sous forme de fonction delta de Dirac). Ce modèle est formulé par Berezin en 1964 [21]. En 1969, Calogero [22] résout exactement un problème quantique à trois corps non trivial en trouvant les fonctions propres et les valeurs propres associées à l'équation de Schrödinger (stationnaire) du problème. Les particules identiques de ce modèle interagissent par paire et à longue portée, sur une ligne infinie, selon un potentiel répulsif inversement proportionnel à la distance au carré ($\frac{1}{r^2}$) ajouté à un potentiel attracteur harmonique (r^2). Peu de temps après, Calogero [23] complète sa surprenante découverte par la résolution exacte du même modèle généralisé à un nombre de particules N arbitraire, en trouvant tout le spectre et en caractérisant les fonctions d'ondes.

Sutherland [24, 25] considère ensuite le problème à N corps avec un potentiel répulsif en $\frac{1}{r^2}$, mais cette fois, sur un cercle. En plus du spectre du modèle, Sutherland obtient une base complète de fonctions d'ondes. On comprend plus tard, en particulier suite aux articles de Stanley [26] et de Forrester [27] datant respectivement de 1988 et 1992, que les fonctions propres obtenues par Sutherland correspondent aux polynômes symétriques de Jack, découverts par ce dernier au début des années 1970 [28, 29].

Jusqu'à très récemment [30], aucune formule explicite n'était encore connue pour les polynômes de Jack. On pouvait cependant les générer grâce à des opérateurs différentiels obtenus par Lapointe et Vinet au milieu des années 1990 [31, 32, 33]. Les opérateurs différentiels en question sont des opérateurs de Dunkl [34]. On peut également obtenir les

polynômes de Jack à l'aide de formules intégrales proposées par Awata, Matsuo et Odake, à la même période [35]. Ces dernières formules ont dévoilé un lien entre les polynômes de Jack et l'algèbre de Virasoro. Notons aussi qu'une approche alternative a été proposée par Langmann [36] en 2001 pour solutionner le problème de Sutherland et très récemment un "algorithme" pour le problème de Calogero a été proposé dont le résultat essentiel est d'obtenir une formule explicite pour les polynômes symétriques de Jack [37].

En mécanique classique, le développement des modèles en $\frac{1}{r^2}$ connaît un essor considérable lorsque le célèbre mathématicien Moser prouve leur intégrabilité à l'aide de la méthode de Lax en 1974 [38]. Dans un article paru en 1977 [39], Airault, Moser et McKean, montrent que les pôles des solutions rationnelles de l'équation de Korteweg-de Vries ont une dynamique semblable à celle des particules du problème à N corps découvert par Calogero. Il s'agit donc d'un lien surprenant entre un modèle ayant un nombre infini de degrés de liberté (Korteweg-de Vries) et un autre n'en comptant qu'un nombre fini (Calogero-Moser-Sutherland).

Les travaux fondateurs de Calogero, Moser et Sutherland ont eu un impact certain en physique. Soulignons que les modèles Calogero-Moser-Sutherland se retrouvent dans des branches de la physique aussi diverses que le chaos quantique [40], l'effet Hall quantique [41], les systèmes « mésoscopiques » (conduction électronique dans de petits canaux) [42], les trous noirs [43], les anyons [44], les théories de jauge (Seiberg-Witten) [45], etc. Une liste plus exhaustive des applications physiques et des références pertinentes se trouve dans [46].

Le domaine des recherches mathématiques engendré par les modèles Calogero-Moser-Sutherland s'est aussi considérablement développé. Parmi les travaux les plus originaux, mentionnons ceux de Olshanetsky et Perelomov [47] (pour le cas classique) et [48] (pour le cas quantique), dans lesquels ils généralisent les modèles Calogero-Moser-Sutherland en associant un modèle à chaque réseau de racines des algèbres de Lie. En 1988, Haldane [49] et Shastry [50] découvrent une chaîne de spins intégrable avec interaction à longue portée, de type $\frac{1}{r^2}$, sur une ligne ou un cercle. Le lien explicite entre le modèle avec spins et le modèle dynamique Calogero-Moser-Sutherland est découvert par Polychronakos [51] au moyen de son formalisme avec opérateurs d'échange. Plus tard, Frahm [52] et Polychronakos [53] formulent une chaîne de spins intégrable sur une ligne avec interaction à longue portée, de type $\frac{1}{r^2}$, augmentée d'une force de confinement harmonique. Parmi les autres développements très influents, mentionnons les généralisations relativistes (avec algèbre de Poincaré) des modèles Calogero-Moser-Sutherland (cas classiques) proposées par Ruijsenaars et Schneider en 1986 [54, 55]. Au niveau quantique, ces généralisations ont pour fonctions propres les polynômes de Macdonald [56], polynômes symétriques connus en mathématique et qui constituent une généralisation des polynômes de Jack. Des extensions des modèles Calogero-Moser-Sutherland dans le plan et en trois dimensions, comportant une ou plusieurs espèces de particules, ont également été formulées [57]. Enfin, les premières versions supersymétriques sont découvertes au tout début des années 1990 par

Freedman et Mende [58] ainsi que par Shastry et Sutherland [59]. Signalons également les travaux récents de Derosiers, Lapointe et Mathieu [60] sur des versions supersymétriques des modèles de Calogero-Sutherland.

Pour les systèmes à petit nombre de corps plusieurs résultats explicites pour les fonctions d'ondes du modèle de Calogero existent dans la littérature. Comme déjà mentionné Calogero obtena ses résultats pour les cas $N = 2, 3$ [22]. En exploitant une structure de groupe sous-jacente de l'Hamiltonien, Perelemov [61] pour $N = 4$ and Gambardella pour $N = 5$ [62] ont obtenu les fonctions propres en fonction des opérateurs de 'création' agissant sur l'état fondamental. Plus récemment, ces solutions opératoriels furent généralisées pour tout N [63, 64, 65, 66]. Des solutions explicites pour le modèle trigonométrique de Sutherland ont été obtenues dans [66] pour $N=3$.

Notons finalement que très récemment de nouveaux modèles de type Calogero (généralisations du modèle original) pour le cas unidimensionnel à $N=2$ ont été solutionnés [68] et [69] et qui faisaient apparaître des propriétés telles que la supersymétrie et la symétrie sous-jacente conforme $SU(1, 1)$. Étant donné l'étendue considérable des domaines d'application des modèles Calogero-Sutherland en physique et en mathématique, il nous paraissait utile de généraliser ces derniers modèles de type Calogero à des dimensions d'espace quelconque ainsi qu'au cas $N=3$ et de généraliser ainsi les modèles à trois corps connus de Calogero [22] et de Wolfes [71]. Le reste de cette thèse est organisé comme suit : le chapitre 1 traite d'un problème à N corps exactement soluble : L'oscillateur hamonique à N corps, appelé aussi système de N oscillateurs. Plusieurs configurations de masse sont considérées dans le cas de systèmes à 3 et à 4 corps. Dans chacun des cas une expression du niveau fondamental du système est dérivée. Le chapitre 2 est consacré à l'ancienne borne inférieure optimisée. Les cas à 3 et à 4 corps sont successivement considérés. Le chapitre 3 est consacré à la nouvelle borne inférieure optimisée. De nouveau, les cas à 3 corps et à 4 corps sont considérés tour à tour. Le chapitre 4 est dévolu à la présentation des résultats numériques. Le chapitre 5 traite de la généralisation à une dimension d'espace quelconque d'un nouveau problème à 2 corps de type Calogero. Le dernier chapitre traite de quelques problèmes à 3 corps et à 1 dimension généralisant le problème à trois corps de Calogero et de Calogero-Marchioro-Wolfes. La thèse s'achève par une conclusion.

Chapitre 1

L'oscillateur harmonique à 3 et à 4 corps

Nous nous plaçons d'emblée dans le cas de systèmes à N corps gouvernés par une cinématique non relativiste avec des interactions à 2 corps invariantes par translation, c'est à dire des systèmes gouvernés par un Hamiltonien de la forme

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

où m_i , \vec{r}_i , \vec{p}_i désignent respectivement la masse, le vecteur position, l'impulsion de la i ème particule. $\vec{r}_{ij} := \vec{r}_i - \vec{r}_j$. On remarquera que le potentiel $v^{(ij)}$ peut dépendre des deux particules impliquées. Dans toute la suite, lorsque nous parlerons de problème à N corps nous sous-entendrons par là des systèmes gouvernés par des Hamiltoniens du type défini par l'équation (3.1). Il faut souligner que le problème à N corps est particulièrement difficile. L'oscillateur harmonique à N corps (désigné aussi sous le nom de système de N oscillateurs harmoniques) est l'un des très rares exemples qui se prêtent à une résolution analytique exacte. Ce qu'on entend par oscillateur harmonique à N corps est un système de N particules interagissant par des forces harmoniques à deux corps, i.e., un système décrit par un Hamiltonien du type

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i<j=1}^N k_{ij} r_{ij}^2, \quad (1.2)$$

où les constantes d'oscillateur k_{ij} , qui peuvent dépendre des deux particules impliquées, sont par définition positives. Nous allons dans ce qui suit préciser la méthodologie à suivre pour résoudre l'oscillateur harmonique à N corps, que nous allons appliquer concrètement pour résoudre l'oscillateur harmonique à 3 et à 4 corps pour différentes configurations de masse.

1.1 Méthodologie

On commence d'abord par introduire des coordonnées de Jacobi, qui sont au nombre de $N - 1$, ainsi que la coordonnée du centre de masse. Par définition, une coordonnée de Jacobi est une combinaison linéaire des coordonnées individuelles, qui doit être invariante par translation. Les $N - 1$ coordonnées de Jacobi introduites doivent satisfaire à l'unique condition d'être linéairement indépendantes. On peut alors exprimer les coordonnées individuelles comme des combinaisons linéaires des coordonnées de Jacobi et de la coordonnée du centre de masse, puis réexprimer l'énergie potentielle en termes des coordonnées de Jacobi, la coordonnée du centre de masse est absente de cette expression, car l'énergie potentielle, tout comme l'Hamiltonien, est invariante par translation. Dans le cas de l'oscillateur harmonique à N corps, l'énergie potentielle se présente sous la forme d'une forme quadratique en les coordonnées de Jacobi, une forme quadratique qui est généralement non diagonale, sauf si le système possède des propriétés de symétrie très particulières et/ou si on a fait un choix très judicieux des coordonnées de Jacobi, ce qui montre l'importance d'un choix convenable des coordonnées de Jacobi.

A partir des coordonnées de Jacobi, on peut construire de manière naturelle ou canonique des moments conjugués associés aux coordonnées de Jacobi. Par conjugué, nous voulons signifier que la coordonnée de Jacobi et son moment conjugué satisfont aux relations de commutation canoniques. Nous pouvons alors inverser les relations donnant les moments conjugués des coordonnées de Jacobi ainsi que l'impulsion totale du système en termes des impulsions individuelles pour exprimer ces dernières en termes des moments conjugués des coordonnées de Jacobi et de l'impulsion totale du système. On peut alors réexprimer le terme d'énergie cinétique en termes des moments conjugués des coordonnées de Jacobi et de l'impulsion totale. Plus explicitement, le terme d'énergie cinétique se présente comme la somme de l'énergie cinétique du centre de masse et d'une forme quadratique, généralement diagonale, en les impulsions associées aux coordonnées de Jacobi.

L'Hamiltonien du système est obtenu en additionnant les deux expressions obtenues pour l'énergie cinétique et l'énergie potentielle, mais ce qui nous intéresse en réalité ce n'est pas l'Hamiltonien total du système, mais l'Hamiltonien relatif, c'est à dire l'Hamiltonien auquel on a soustrait l'énergie cinétique du centre de masse. Il s'ensuit que l'Hamiltonien relatif du système se présente sous la forme d'une somme de deux termes, une forme quadratique, qu'on peut considérer sans perte de généralité comme diagonale, en les moments conjugués des coordonnées de Jacobi, qu'on désignera aussi par la suite, pour abréger, moments de Jacobi ou impulsions de Jacobi, et une forme quadratique, généralement non diagonale, en les coordonnées de Jacobi. On est alors en face de l'une des deux situations. Soit que le terme d'énergie potentielle est diagonal, soit qu'il ne l'est pas.

Si le terme d'énergie potentielle est une forme quadratique diagonale en les coordonnées de Jacobi, alors l'Hamiltonien relatif se présente sous la forme d'une somme de $N - 1$ oscillateurs harmoniques à trois dimensions et isotropes. Les vecteurs propres et

les valeurs propres de l'Hamiltonien relatif s'en déduisent immédiatement. Les vecteurs propres de l'Hamiltonien relatif sont les produits tensoriels des vecteurs propres des $N - 1$ oscillateurs découplés et les valeurs propres correspondantes sont les somme des valeurs propres des $N - 1$ oscillateurs.

Si le terme d'énergie potentielle est une forme quadratique non diagonale en les coordonnées de Jacobi, on a alors affaire à $N - 1$ oscillateurs couplés qu'il va falloir découpler. Pour ce faire, on procède en deux étapes. D'abord, on fait une transformation d'échelle séparée, ou homothétie, sur chaque impulsion de Jacobi et bien sûr la tranformation d'échelle inverse sur la coordonnée de Jacobi correspondante en vue de préserver les relations de commutation canoniques. On peut toujours choisir ces transformations d'échelle, mieux encore il y'a une multitude de manières de faire ce choix, de telle manière que le terme d'énergie cinétique se présente comme une forme diagonale en les nouvelles impulsions de Jacobi associée à une matrice proportionnelle à la matrice identité. Autrement dit, l'énergie cinétique s'écrit, à un facteur multiplicatif près, comme la somme des carrés des nouvelles impulsions de Jacobi. Quand au terme d'énergie potentielle, il s'écrit comme une nouvelle forme quadratique en les nouvelles coordonnées de Jacobi. La deuxième étape consiste à effectuer une transformation orthogonale sur les nouvelles coordonnées de Jacobi, et évidemment la transformation orthogonale inverse sur les impulsions de Jacobi. Comme il est bien connu, une transformation orthogonale préserve une forme quadratique associée à une matrice proportionnelle à la matrice identité. Il en résulte que le terme d'énergie cinétique s'exprime de la même manière en termes des impulsions de Jacobi transformées qu'en termes des impulsions de Jacobi originales. Le terme d'énergie potentielle lui est une nouvelle forme quadratique en les coordonnées de Jacobi transformées. Il est toujours possible de faire le choix d'une transformation orthogonale, de telle manière à rendre le terme d'énergie potentielle quadratique diagonal en les coordonnées de Jacobi transformées. On est alors ramené au cas précédent, c'est à dire que notre Hamiltonien relatif se présente sous la forme d'une somme de $N - 1$ oscillateurs harmoniques découplés, et les vecteurs propres et les valeurs propres se déduisent alors de manière similaire. Le problème revient en fait à diagonaliser une matrice carrée $(N - 1) \times (N - 1)$ réelle symétrique définie positive, la matrice associée à la forme quadratique exprimant l'énergie potentielle en termes des coordonnées de Jacobi transformées. Comme les valeurs propres d'une matrice réelle symétrique définie positive sont nécessairement réelles positives, ceci nous garantit que les constantes d'oscillateur des oscillateurs découplés sont positives, comme il se doit. Comme il est bien connu, diagonaliser une matrice carrée $(N - 1) \times (N - 1)$ revient à résoudre une équation algébrique de degré $N - 1$, ce qu'on sait faire exactement dans le cas le plus général jusqu'au quatrième degré, c'est a dire pour $N \leq 5$. Donc, tant que $N \leq 5$, on peut résoudre exactement l'oscillateur harmonique à N corps. Pour $N > 5$, on ne sait pas résoudre exactement l'oscillateur harmonique à N corps analytiquement, mais on sait le faire numériquement avec n'importe quel degré de précision fixée à l'avance. De toute façon cette question ne nous concerne pas ici, car nous nous limiterons aux cas à 3 et à

4 corps. Mettons maintenant en œuvre la méthodologie exposée ci-dessus pour différentes configurations de masse à 3 et à 4 corps.

1.2 L'oscillateur harmonique à 3 corps

Pour toutes les configurations considérées, nous prendrons comme coordonnées de Jacobi, qui sont au nombre de 2, la coordonnée relative des deux premières particules, que nous noterons $\vec{\rho}$, et la séparation relative de la troisième particule et du centre de masse des deux premières particules, que nous noterons $\vec{\lambda}$.

1.2.1 Configuration ($3 \times m$)

Cette configuration correspond au cas où les 3 masses du système sont toutes égales. Les coordonnées de Jacobi $\vec{\rho}$ et $\vec{\lambda}$ sont définies par

$$\vec{\rho} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1, \quad (1.3)$$

$$\vec{\lambda} = \vec{r}_3 - \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}. \quad (1.4)$$

En adjoignant aux coordonnées de Jacobi $\vec{\rho}$ et $\vec{\lambda}$, (1.3) et (1.4), la coordonnée du centre de masse \vec{R} définie par

$$\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3}{3}, \quad (1.5)$$

on peut inverser les équations (1.3), (1.4) et (1.5) pour exprimer les coordonnées individuelles \vec{r}_1 , \vec{r}_2 et \vec{r}_3 en termes des coordonnées de Jacobi $\vec{\rho}$ et $\vec{\lambda}$, et de la coordonnée du centre de masse \vec{R} . Nous obtenons

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= -\frac{1}{2}\vec{\rho} - \frac{1}{3}\vec{\lambda} + \vec{R}, \\ \vec{r}_2 &= \frac{1}{2}\vec{\rho} - \frac{1}{3}\vec{\lambda} + \vec{R}, \\ \vec{r}_3 &= \frac{2}{3}\vec{\lambda} + \vec{R}. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Il s'ensuit que les coordonnées relatives $\vec{r}_{ij} := \vec{r}_j - \vec{r}_i$ et leurs carrés ont pour expressions

$$\begin{aligned} \vec{r}_{12} &= -\vec{\rho}, \\ \vec{r}_{13} &= -\frac{1}{2}\vec{\rho} - \vec{\lambda}, \\ \vec{r}_{23} &= \frac{1}{2}\vec{\rho} - \vec{\lambda} \end{aligned} \quad (1.7)$$

et

$$\begin{aligned}
r_{12}^2 &= \rho^2, \\
r_{13}^2 &= \frac{1}{4}\rho^2 + \lambda^2 + \vec{\rho} \cdot \vec{\lambda}, \\
r_{23}^2 &= \frac{1}{4}\rho^2 + \lambda^2 - \vec{\rho} \cdot \vec{\lambda}.
\end{aligned} \tag{1.8}$$

On en déduit alors l'expression de l'énergie potentielle V

$$V = k_{12} (r_{12}^2 + r_{13}^2 + r_{23}^2) = \frac{3}{2}k_{12}\rho^2 + 2k_{12}\lambda^2. \tag{1.9}$$

Les moments conjugués associés aux coordonnées de Jacobi sont, en utilisant une notation évidente

$$\begin{aligned}
\vec{p}_\rho &= \frac{1}{2}\vec{p}_2 - \frac{1}{2}\vec{p}_1, \\
\vec{p}_\lambda &= \frac{2}{3}\vec{p}_3 - \frac{1}{3}\vec{p}_2 - \frac{1}{3}\vec{p}_1.
\end{aligned} \tag{1.10}$$

L'impulsion totale ou, autrement dit, le moment conjugué associé à la coordonnée du centre de masse \vec{R} , est donnée par

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3. \tag{1.11}$$

En inversant les relations (1.10) et (1.11), on obtient les impulsions individuelles \vec{p}_1 , \vec{p}_2 et \vec{p}_3 puis leurs carrés en fonction des moments conjugués associés aux coordonnées de Jacobi \vec{p}_ρ et \vec{p}_λ et de l'impulsion totale \vec{P}

$$\begin{aligned}
\vec{p}_1 &= -\vec{p}_\rho - \frac{1}{2}\vec{p}_\lambda + \frac{1}{3}\vec{P} \\
\vec{p}_2 &= \vec{p}_\rho - \frac{1}{2}\vec{p}_\lambda + \frac{1}{3}\vec{P} \\
\vec{p}_3 &= \vec{p}_\lambda + \frac{1}{3}\vec{P}.
\end{aligned} \tag{1.12}$$

et

$$\begin{aligned}
\vec{p}_1^2 &= \vec{p}_\rho^2 + \frac{1}{4}\vec{p}_\lambda^2 + \frac{1}{9}\vec{P}^2 + \vec{p}_\rho \cdot \vec{p}_\lambda - \frac{2}{3}\vec{p}_\rho \cdot \vec{P} - \frac{1}{3}\vec{p}_\lambda \cdot \vec{P}, \\
\vec{p}_2^2 &= \vec{p}_\rho^2 + \frac{1}{4}\vec{p}_\lambda^2 + \frac{1}{9}\vec{P}^2 - \vec{p}_\rho \cdot \vec{p}_\lambda + \frac{2}{3}\vec{p}_\rho \cdot \vec{P} - \frac{1}{3}\vec{p}_\lambda \cdot \vec{P}, \\
\vec{p}_3^2 &= \vec{p}_\lambda^2 + \frac{1}{9}\vec{P}^2 + \frac{2}{3}\vec{p}_\lambda \cdot \vec{P}.
\end{aligned} \tag{1.13}$$

L'énergie cinétique T prend alors la forme

$$T = \frac{1}{2m_1} (\vec{p}_1^2 + \vec{p}_2^2 + \vec{p}_3^2) = \frac{1}{m_1} \vec{p}_\rho^2 + \frac{3}{4m_1} \vec{p}_\lambda^2 + \frac{1}{6m_1} \vec{P}^2. \quad (1.14)$$

Ce qui nous intéresse réellement n'est pas l'Hamiltonien H , mais l'Hamiltonien relatif H_R obtenu à partir de H en soustrayant l'énergie cinétique du centre de masse

$$H_R =: H - \frac{1}{6m_1} \vec{P}^2 = \frac{1}{m_1} \vec{p}_\rho^2 + \frac{3}{2} k_{12} \rho^2 + \frac{3}{4m_1} \vec{p}_\lambda^2 + 2k_{12} \lambda^2. \quad (1.15)$$

L'Hamiltonien relatif se présente comme la somme de deux oscillateurs harmoniques tri-dimensionnels isotropes découplés. Les vecteurs propres s'obtiennent alors comme des produits tensoriels des vecteurs propres des deux oscillateurs et les valeurs propres, ou niveaux d'énergie, comme des sommes des valeurs propres des deux oscillateurs. Comme ce qui nous intéresse ici est le niveau fondamental du système, nous allons nous contenter ici d'en donner l'expression, qui est simplement la somme des énergies des états fondamentaux des deux oscillateurs harmoniques. Par conséquent, l'énergie E de l'état fondamental du système est donnée par

$$E = 3\sqrt{\frac{3k_{12}}{2m_1}} + 3\sqrt{\frac{6k_{12}}{4m_1}} = 6\sqrt{\frac{3k_{12}}{2m_1}}. \quad (1.16)$$

1.2.2 Configuration ($2 \times m_1, 1 \times m_3$)

Le système considéré ici est formé de deux particules de même masse m_1 et d'une troisième particule de masse m_3 . Les coordonnées de Jacobi $\vec{\rho}$ et $\vec{\lambda}$ sont définies de la même manière que dans le cas de masses toutes égales, équations (1.3) et (1.4), et la coordonnée du centre de masse \vec{R} est cette fois-ci donnée par

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2 + m_3 \vec{r}_3}{2m_1 + m_3}. \quad (1.17)$$

En inversant les relations (1.3), (1.4) et (1.17), on obtient l'expression des coordonnées individuelles en termes des coordonnées de Jacobi et de la coordonnée du centre de masse

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= -\frac{1}{2} \vec{\rho} - \frac{m_3}{2m_1 + m_3} \vec{\lambda} + \vec{R}, \\ \vec{r}_2 &= \frac{1}{2} \vec{\rho} - \frac{m_3}{2m_1 + m_3} \vec{\lambda} + \vec{R}, \\ \vec{r}_3 &= \frac{2m_1}{2m_1 + m_3} \vec{\lambda} + \vec{R}. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Les expressions des coordonnées relatives et par conséquent celles de leurs carrés restent inchangées par rapport au cas de trois masses toutes égales, (1.7) et (1.8). On en déduit l'expression de l'énergie potentielle V

$$V = k_{12} (r_{12}^2) + k_{13} (r_{13}^2 + r_{23}^2) = \left(k_{12} + \frac{1}{2}k_{13} \right) \rho^2 + 2k_{13}\lambda^2. \quad (1.19)$$

Les moments conjugués associés aux coordonnées de Jacobi sont donnés par

$$\begin{aligned} \vec{p}_\rho &= \frac{1}{2}\vec{p}_2 - \frac{1}{2}\vec{p}_1, \\ \vec{p}_\lambda &= \frac{2m_1}{2m_1 + m_3}\vec{p}_3 - \frac{m_3}{2m_1 + m_3}\vec{p}_2 - \frac{m_3}{2m_1 + m_3}\vec{p}_2. \end{aligned} \quad (1.20)$$

On peut inverser les relations (1.20) et (1.11) pour obtenir les impulsions individuelles en fonction des moments conjugués associés aux coordonnées de Jacobi et de l'impulsion totale avec comme résultat

$$\begin{aligned} \vec{p}_1 &= -\vec{p}_\rho - \frac{1}{2}\vec{p}_\lambda + \frac{m_1}{2m_1 + m_3}\vec{P} \\ \vec{p}_2 &= \vec{p}_\rho - \frac{1}{2}\vec{p}_\lambda + \frac{m_1}{2m_1 + m_3}\vec{P} \\ \vec{p}_3 &= \vec{p}_\lambda + \frac{m_3}{2m_1 + m_3}\vec{P}. \end{aligned} \quad (1.21)$$

En élevant au carré les expressions des différentes impulsions individuelles, (1.21), et en multipliant dans chaque cas par l'inverse du double de la masse considérée, on obtient l'expression de l'énergie cinétique T du système

$$T = \frac{1}{2m_1} (\vec{p}_1^2 + \vec{p}_2^2) + \frac{1}{2m_3} \vec{p}_3^2 = \frac{1}{m_1} \vec{p}_\rho^2 + \frac{2m_1 + m_3}{4m_1 m_3} \vec{p}_\lambda^2 + \frac{1}{2(2m_1 + m_3)} \vec{P}^2. \quad (1.22)$$

En additionnant les expressions des énergies cinétique, (1.22), et potentielle, (1.19), et en retranchant l'énergie cinétique du système, on obtient l'expression de l'Hamiltonien relatif H_R

$$H_R = H - \frac{1}{2(2m_1 + m_3)} \vec{P}^2 = \frac{1}{m_1} \vec{p}_\rho^2 + \left(k_{12} + \frac{1}{2}k_{13} \right) \rho^2 + \frac{2m_1 + m_3}{4m_1 m_3} \vec{p}_\lambda^2 + 2k_{13}\lambda^2. \quad (1.23)$$

L'hamiltonien relatif se présente donc comme la somme de deux oscillateurs harmoniques à trois dimensions isotropes. Les valeurs propres et les vecteurs propres s'en déduisent immédiatement. En particulier, le niveau fondamental E est donné par

$$E = 3\sqrt{\frac{2k_{12} + k_{13}}{2m_1}} + 3\sqrt{\frac{(2m_1 + m_3)k_{13}}{2m_1 m_3}}. \quad (1.24)$$

1.2.3 Configuration $(1 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$

Dans ce cas, les coordonnées de Jacobi $\vec{\rho}$ et $\vec{\lambda}$ sont définies par

$$\vec{\rho} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1, \quad (1.25)$$

$$\vec{\lambda} = \vec{r}_3 - \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}. \quad (1.26)$$

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

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2 + m_3 \vec{r}_3}{m_1 + m_2 + m_3}. \quad (1.27)$$

En inversant les relations (1.25), (1.26) et (1.27), on obtient les expressions de \vec{r}_1 , \vec{r}_2 et \vec{r}_3 en termes des coordonnées de Jacobi $\vec{\rho}$ et $\vec{\lambda}$ et de la coordonnée du centre de masse \vec{R}

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= -\frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{\rho} - \frac{m_3}{m_1 + m_2 + m_3} \vec{\lambda} + \vec{R}, \\ \vec{r}_2 &= \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{\rho} - \frac{m_3}{m_1 + m_2 + m_3} \vec{\lambda} + \vec{R}, \\ \vec{r}_3 &= \frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2 + m_3} \vec{\lambda} + \vec{R}. \end{aligned} \quad (1.28)$$

On en déduit que les coordonnées relatives et leurs carrés sont donnés par

$$\begin{aligned} \vec{r}_{12} &= -\vec{\rho}, \\ \vec{r}_{13} &= -\frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{\rho} - \vec{\lambda}, \\ \vec{r}_{23} &= \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{\rho} - \vec{\lambda}, \end{aligned} \quad (1.29)$$

et

$$\begin{aligned} r_{12}^2 &= \rho^2 \\ r_{13}^2 &= \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} \rho^2 + \lambda^2 + \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \vec{\rho} \cdot \vec{\lambda} \\ r_{23}^2 &= \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \rho^2 + \lambda^2 - \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \vec{\rho} \cdot \vec{\lambda}. \end{aligned} \quad (1.30)$$

En faisant usage des relations (1.30) on arrive à l'expression de l'énergie potentielle V en termes des coordonnées de Jacobi

$$V = \left(k_{12} + \frac{k_{13}m_2^2 + k_{23}m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \right) \rho^2 + (k_{13} + k_{23}) \lambda^2 + 2 \frac{m_2 k_{13} - m_1 k_{23}}{m_1 + m_2} \vec{\rho} \cdot \vec{\lambda}. \quad (1.31)$$

Les moments de Jacobi sont donnés par

$$\begin{aligned}\vec{p}_\rho &= \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{p}_2 - \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{p}_1, \\ \vec{p}_\lambda &= \frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2 + m_3} \vec{p}_3 - \frac{m_3}{m_1 + m_2 + m_3} (\vec{p}_1 + \vec{p}_2).\end{aligned}\quad (1.32)$$

En inversant les relations (1.32) et (1.11), on obtient les expressions des impulsions individuelles en termes des moments de Jacobi et de l'impulsion totale

$$\begin{aligned}\vec{p}_1 &= -\vec{p}_\rho - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{p}_\lambda + \frac{m_1}{m_1 + m_2 + m_3} \vec{P}, \\ \vec{p}_2 &= \vec{p}_\rho - \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{p}_\lambda + \frac{m_2}{m_1 + m_2 + m_3} \vec{P}, \\ \vec{p}_3 &= \vec{p}_\lambda + \frac{m_3}{m_1 + m_2 + m_3} \vec{P}.\end{aligned}\quad (1.33)$$

En élevant au carré les expressions des impulsions individuelles (1.33) et en multipliant par des inverses de carrés de masses, on obtient l'expression de l'énergie cinétique T en termes des moments de Jacobi et de l'impulsion totale

$$T = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} = \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \vec{p}_\rho^2 + \frac{m_1 + m_2 + m_3}{(m_1 + m_2) m_3} \vec{p}_\lambda^2 + \frac{1}{2(m_1 + m_2 + m_3)} \vec{P}^2. \quad (1.34)$$

On en déduit l'Hamiltonien relatif H_R , en faisant usage des relations (1.31) et (1.34),

$$\begin{aligned}H_R &= H - \frac{1}{2(m_1 + m_2 + m_3)} \vec{P}^2 \\ &= \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \vec{p}_\rho^2 + \frac{m_1 + m_2 + m_3}{(m_1 + m_2) m_3} \vec{p}_\lambda^2 + \left(k_{12} + \frac{k_{13} m_2^2 + k_{23} m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \right) \rho^2 + \\ &\quad (k_{13} + k_{23}) \lambda^2 + 2 \frac{m_2 k_{13} - m_1 k_{23}}{m_1 + m_2} \vec{\rho} \cdot \vec{\lambda}.\end{aligned}\quad (1.35)$$

On a deux oscillateurs qui sont cette fois-ci couplés. Pour les découpler effectuons d'abord une transformation d'échelle sur le moment de Jacobi \vec{p}_λ et bien sûr pour, pour préserver les relations de commutation canoniques, la transformation inverse sur la coordonnée de Jacobi $\vec{\lambda}$. Le but de cette transformation est de mettre le même facteur devant \vec{p}_ρ^2 et le carré du transformé de \vec{p}_λ . Définissons $\vec{\xi}$ et \vec{p}_ξ en termes de $\vec{\lambda}$ et \vec{p}_λ respectivement par

$$\vec{\xi} = \frac{m_3 (m_1 + m_2)}{\sqrt{m_1 m_2 m_3 (m_1 + m_2 + m_3)}} \vec{\lambda} \quad (1.36)$$

et

$$\vec{p}_\xi = \frac{\sqrt{m_1 m_2 m_3 (m_1 + m_2 + m_3)}}{m_3 (m_1 + m_2)} \vec{p}_\lambda. \quad (1.37)$$

Alors H_R prend la forme suivante en termes de $\vec{p}_\rho, \vec{p}_\xi, \vec{\rho}$ et $\vec{\xi}$

$$\begin{aligned}
H_R = & \frac{m_1 + m_2}{2m_1m_2} (\vec{p}_\rho^2 + \vec{p}_\xi^2) + \left(k_{12} + \frac{k_{13}m_2^2 + k_{23}m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \right) \rho^2 + \\
& \frac{m_1m_2m_3(m_1 + m_2 + m_3)}{m_3^2(m_1 + m_2)^2} (k_{13} + k_{23}) \xi^2 + \\
& 2 \frac{\sqrt{m_1m_2m_3(m_1 + m_2 + m_3)}}{m_3(m_1 + m_2)^2} (m_2k_{13} - m_1k_{23}) \vec{\rho} \cdot \vec{\xi}. \quad (1.38)
\end{aligned}$$

Faisons une transformation orthogonale sur les coordonnées de Jacobi $\vec{\rho}$ et $\vec{\xi}$ et la transformation orthogonale inverse, en vu de préserver les relations de commutation, sur \vec{p}_ρ et \vec{p}_ξ . Dans cette transformation le terme d'énergie cinétique reste invariant, c'est à dire

$$\frac{m_1 + m_2}{2m_1m_2} (\vec{p}_\rho^2 + \vec{p}_\xi^2) = \frac{m_1 + m_2}{2m_1m_2} (\vec{p}_{\rho'}^2 + \vec{p}_{\xi'}^2).$$

Fixons cette transformation orthogonale de telle manière que le terme d'énergie potentielle soit une forme quadratique diagonale dans les nouvelles coordonnées $\vec{\rho}'$ et $\vec{\xi}'$. Ceci revient à diagonaliser la matrice réelle symétrique associée à l'énergie potentielle \tilde{V}

$$\tilde{V} = \begin{pmatrix} \frac{(m_1+m_2)^2k_{12}+m_3^2k_{13}+m_1^2k_{23}}{(m_1+m_2)^2} & \frac{\sqrt{m_1m_2m_3(m_1+m_2+m_3)}}{m_3(m_1+m_2)^2} (m_2k_{13} - m_1k_{23}) \\ \frac{\sqrt{m_1m_2m_3(m_1+m_2+m_3)}}{m_3(m_1+m_2)^2} (m_2k_{13} - m_1k_{23}) & \frac{m_1m_2m_3(m_1+m_2+m_3)}{m_3^2(m_1+m_2)^2} (k_{13} + k_{23}) \end{pmatrix}. \quad (1.39)$$

Si on note B_1 et B_2 les deux valeurs propres de la matrice \tilde{V} , alors l'Hamiltonien relatif H_R se réécrit comme

$$H_R = \frac{m_1 + m_2}{2m_1m_2} (\vec{p}_{\rho'}^2 + \vec{p}_{\xi'}^2) + B_1\rho'^2 + B_2\xi'^2. \quad (1.40)$$

L'énergie de l'état fondamental s'écrit comme

$$E = 3\sqrt{\frac{(m_1 + m_2)}{2m_1m_2}} (\sqrt{B_1} + \sqrt{B_2}). \quad (1.41)$$

Mais, en utilisant les propriétés des matrices

$$(\sqrt{B_1} + \sqrt{B_2})^2 = B_1 + B_2 + 2\sqrt{B_1B_2} = \text{tr}\tilde{V} + 2\sqrt{\det\tilde{V}}. \quad (1.42)$$

Donc

$$E = 3\sqrt{\frac{(m_1 + m_2)}{2m_1m_2}} \sqrt{\text{tr}\tilde{V} + 2\sqrt{\det\tilde{V}}}. \quad (1.43)$$

Comme

$$\text{tr} \tilde{V} = \frac{m_3 (m_1 + m_2) k_{12} + m_2 (m_1 + m_3) k_{13} + m_1 (m_2 + m_3) k_{23}}{m_3 (m_1 + m_2)} \quad (1.44)$$

et

$$\det \tilde{V} = \frac{m_1 m_2 m_3 (m_1 + m_2 + m_3)}{m_3^2 (m_1 + m_2)^2} (k_{12} k_{13} + k_{12} k_{23} + k_{13} k_{23}), \quad (1.45)$$

l'énergie E de l'état fondamental du système peut être mise sous la forme

$$E = 3 \sqrt{\frac{m_3 (m_1 + m_2) k_{12} + m_2 (m_1 + m_3) k_{13} + m_1 (m_2 + m_3) k_{23}}{2m_1 m_2 m_3} + \sqrt{\frac{(m_1 + m_2 + m_3) (k_{12} k_{13} + k_{12} k_{23} + k_{13} k_{23})}{m_1 m_2 m_3}}} \quad (1.46)$$

1.3 L'oscillateur harmonique à 4 corps

Dans le cas à 4 corps, nous devons pour chaque configuration de masses faire le choix de 3 coordonnées de Jacobi, que nous noterons $\vec{\rho}$, $\vec{\lambda}$ et $\vec{\sigma}$.

1.3.1 Configuration ($4 \times m_1$)

Un choix possible des coordonnées de Jacobi est le suivant :

$$\vec{\rho} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1, \quad (1.47)$$

$$\vec{\lambda} = \vec{r}_3 - \frac{1}{2} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \quad (1.48)$$

$$\vec{\sigma} = \vec{r}_4 - \frac{1}{3} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3), \quad (1.49)$$

La coordonnée du centre de masse est elle définie par

$$\vec{R} = \frac{1}{4} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3 + \vec{r}_4) \quad (1.50)$$

En inversant les relations (1.47), (1.48), (1.49) et (1.50), 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 et de la coordonnée du centre de masse

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= -\frac{1}{2} \vec{\rho} - \frac{1}{3} \vec{\lambda} - \frac{1}{4} \vec{\sigma} + \vec{R}, \\ \vec{r}_2 &= \frac{1}{2} \vec{\rho} - \frac{1}{3} \vec{\lambda} - \frac{1}{4} \vec{\sigma} + \vec{R}, \\ \vec{r}_3 &= +\frac{2}{3} \vec{\lambda} - \frac{1}{4} \vec{\sigma} + \vec{R}, \\ \vec{r}_4 &= \frac{3}{4} \vec{\sigma} + \vec{R}. \end{aligned} \quad (1.51)$$

On en déduit les séparations relatives

$$\begin{aligned}
\vec{r}_{12} &= -\vec{\rho}, \\
\vec{r}_{13} &= -\frac{1}{2}\vec{\rho} - \vec{\lambda}, \\
\vec{r}_{14} &= -\frac{1}{2}\vec{\rho} - \frac{1}{3}\vec{\lambda} - \vec{\sigma}, \\
\vec{r}_{23} &= \frac{1}{2}\vec{\rho} - \vec{\lambda}, \\
\vec{r}_{24} &= \frac{1}{2}\vec{\rho} - \frac{1}{3}\vec{\lambda} - \vec{\sigma}, \\
\vec{r}_{34} &= \frac{2}{3}\vec{\lambda} - \vec{\sigma},
\end{aligned} \tag{1.52}$$

puis en élevant au carré ces dernières, l'expression de l'énergie potentielle V

$$V := k_{12} (r_{12}^2 + r_{13}^2 + r_{14}^2 + r_{23}^2 + r_{24}^2 + r_{34}^2) = k_{12} \left(2\rho^2 + \frac{8}{3}\lambda^2 + 3\sigma^2 \right). \tag{1.53}$$

Les moments conjugués associés aux coordonnées de Jacobi sont donnés, en utilisant une notation évidente, par

$$\begin{aligned}
\vec{p}_\rho &= \frac{1}{2}\vec{p}_2 - \frac{1}{2}\vec{p}_1, \\
\vec{p}_\lambda &= \frac{2}{3}\vec{p}_3 - \frac{1}{3}\vec{p}_1 - \frac{1}{3}\vec{p}_2, \\
\vec{p}_\sigma &= \frac{3}{4}\vec{p}_4 - \frac{1}{4}\vec{p}_1 - \frac{1}{4}\vec{p}_2 - \frac{1}{4}\vec{p}_3.
\end{aligned} \tag{1.54}$$

Le moment conjugué associé à la coordonnée du centre de masse \vec{R} , c'est à dire l'impulsion totale, est donnée par

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4. \tag{1.55}$$

En inversant les relations (1.54) et (1.55), on obtient les expressions des impulsions individuelles en termes des moments de Jacobi, \vec{p}_ρ , \vec{p}_λ et \vec{p}_σ , et de l'impulsion totale \vec{P}

$$\begin{aligned}
\vec{p}_1 &= -\vec{p}_\rho - \frac{1}{2}\vec{p}_\lambda - \frac{1}{3}\vec{p}_\sigma + \frac{1}{4}\vec{P}, \\
\vec{p}_2 &= \vec{p}_\rho - \frac{1}{2}\vec{p}_\lambda - \frac{1}{3}\vec{p}_\sigma + \frac{1}{4}\vec{P}, \\
\vec{p}_3 &= \vec{p}_\lambda - \frac{1}{3}\vec{p}_\sigma + \frac{1}{4}\vec{P}, \\
\vec{p}_4 &= \vec{p}_\sigma + \frac{1}{4}\vec{P}.
\end{aligned} \tag{1.56}$$

On en déduit, en élevant au carré les expressions des impulsions individuelles, l'expression de l'énergie cinétique T

$$T := \frac{1}{2m_1} (\vec{p}_1^2 + \vec{p}_2^2 + \vec{p}_3^2 + \vec{p}_4^2) = \frac{1}{m_1} \vec{p}_\rho^2 + \frac{3}{4m_1} \vec{p}_\lambda^2 + \frac{2}{3m_1} \vec{p}_\sigma^2 + \frac{1}{8m_1} \vec{P}^2. \quad (1.57)$$

En additionnant énergies cinétique et potentielle et en retranchant l'énergie cinétique du centre de masse, on déduit l'expression de l'Hamiltonien relatif H_R

$$H_R := H - \frac{1}{8m_1} \vec{P}^2 = \frac{1}{m_1} \vec{p}_\rho^2 + 2k_{12}\rho^2 + \frac{3}{4m_1} \vec{p}_\lambda^2 + \frac{8}{3}k_{12}\lambda^2 + \frac{2}{3m_1} \vec{p}_\sigma^2 + 3k_{12}\sigma^2. \quad (1.58)$$

L'Hamiltonien H_R se présente donc sous la forme de la somme de trois oscillateurs harmoniques tridimensionnels et isotropes. Les états propres et les vecteurs propres du système s'en déduisent immédiatement. En particulier, le niveau fondamental E du système est donné par

$$E = 9\sqrt{\frac{2k_{12}}{m_1}} \quad (1.59)$$

1.3.2 Configuration ($3 \times m_1, 1 \times m_4$)

Pour cette configuration de masses, on fera le même choix de coordonnées de Jacobi que pour la configuration de masses ($4 \times m_1$), (1.47), (1.48), (1.49). La coordonnée du centre de masse \vec{R} est elle définie par

$$\vec{R} = \frac{m_1(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3) + m_4\vec{r}_4}{3m_1 + m_4} \quad (1.60)$$

En inversant les relations (1.47), (1.48), (1.49) et (1.60), on obtient les expressions des coordonnées individuelles en termes des coordonnées de Jacobi et de la coordonnée du centre de masse, avec comme résultat

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= -\frac{1}{2}\vec{\rho} - \frac{1}{3}\vec{\lambda} - \frac{m_4}{3m_1 + m_4}\vec{\sigma} + \vec{R}, \\ \vec{r}_2 &= \frac{1}{2}\vec{\rho} - \frac{1}{3}\vec{\lambda} - \frac{m_4}{3m_1 + m_4}\vec{\sigma} + \vec{R}, \\ \vec{r}_3 &= \frac{2}{3}\vec{\lambda} - \frac{m_4}{3m_1 + m_4}\vec{\sigma} + \vec{R}, \\ \vec{r}_4 &= \frac{3m_1}{3m_1 + m_4}\vec{\sigma} + \vec{R}. \end{aligned} \quad (1.61)$$

Il s'ensuit que les séparations relatives ont pour expressions

$$\begin{aligned}
\vec{r}_{12} &= -\vec{\rho}, \\
\vec{r}_{13} &= -\frac{1}{2}\vec{\rho} - \vec{\lambda}, \\
\vec{r}_{14} &= -\frac{1}{2}\vec{\rho} - \frac{1}{3}\vec{\lambda} - \vec{\sigma}, \\
\vec{r}_{23} &= \frac{1}{2}\vec{\rho} - \vec{\lambda}, \\
\vec{r}_{24} &= \frac{1}{2}\vec{\rho} - \frac{1}{3}\vec{\lambda} - \vec{\sigma}, \\
\vec{r}_{34} &= \frac{2}{3}\vec{\lambda} - \vec{\sigma},
\end{aligned} \tag{1.62}$$

et l'énergie potentielle prend la forme

$$\begin{aligned}
V &:= k_{12} (r_{12}^2 + r_{13}^2 + r_{23}^2) + k_{14} (r_{14}^2 + r_{24}^2 + r_{34}^2) \\
&= \left(\frac{3}{2}k_{12} + \frac{1}{2}k_{14} \right) \rho^2 + \left(2k_{12} + \frac{2}{3}k_{14} \right) \lambda^2 + 3k_{14}\sigma^2.
\end{aligned} \tag{1.63}$$

Les moments de Jacobi sont donnés par

$$\begin{aligned}
\vec{p}_\rho &= \frac{1}{2}\vec{p}_2 - \frac{1}{2}\vec{p}_1, \\
\vec{p}_\lambda &= \frac{2}{3}\vec{p}_3 - \frac{1}{3}\vec{p}_1 - \frac{1}{3}\vec{p}_2, \\
\vec{p}_\sigma &= \frac{3m_1}{3m_1 + m_4}\vec{p}_4 - \frac{m_4}{3m_1 + m_4}\vec{p}_1 - \frac{m_4}{3m_1 + m_4}\vec{p}_2 - \frac{m_4}{3m_1 + m_4}\vec{p}_3.
\end{aligned} \tag{1.64}$$

En inversant les relations (1.64) et (1.55), on arrive aux expressions des impulsions individuelles en termes des moments de Jacobi et de l'impulsion totale

$$\begin{aligned}
\vec{p}_1 &= -\vec{p}_\rho - \frac{1}{2}\vec{p}_\lambda - \frac{1}{3}\vec{p}_\sigma + \frac{m_1}{3m_1 + m_4}\vec{P}, \\
\vec{p}_2 &= \vec{p}_\rho - \frac{1}{2}\vec{p}_\lambda - \frac{1}{3}\vec{p}_\sigma + \frac{m_1}{3m_1 + m_4}\vec{P}, \\
\vec{p}_3 &= \vec{p}_\lambda - \frac{1}{3}\vec{p}_\sigma + \frac{m_1}{3m_1 + m_4}\vec{P}, \\
\vec{p}_4 &= \vec{p}_\sigma + \frac{m_4}{3m_1 + m_4}\vec{P}.
\end{aligned} \tag{1.65}$$

Les expressions précédentes des impulsions individuelles (1.65) permettent d'accéder à l'expression de l'énergie cinétique T

$$T := \frac{1}{2m_1} (\vec{p}_1^2 + \vec{p}_2^2 + \vec{p}_3^2) + \frac{1}{2m_4}\vec{p}_4^2 = \frac{1}{m_1}\vec{p}_\rho^2 + \frac{3}{4m_1}\vec{p}_\lambda^2 + \frac{3m_1 + m_4}{6m_1m_4}\vec{p}_\sigma^2 + \frac{1}{2(3m_1 + m_4)}\vec{P}^2. \tag{1.66}$$

En faisant usage des relations (1.63) et (1.66), on arrive à une expression pour l'Hamiltonien relatif H_R du système

$$\begin{aligned} H_R : &= H - \frac{1}{2(3m_1 + m_4)} \vec{P}^2 \\ &= \frac{1}{m_1} \vec{p}_\rho^2 + \left(\frac{3}{2} k_{12} + \frac{1}{2} k_{14} \right) \rho^2 + \frac{3}{4m_1} \vec{p}_\lambda^2 + \left(2k_{12} + \frac{2}{3} k_{14} \right) \lambda^2 + \frac{2}{3m_1} \vec{p}_\sigma^2 + 3k_{14} \sigma^2. \end{aligned} \quad (1.67)$$

L'Hamiltonien relatif H_R est la somme de trois oscillateurs harmoniques tridimensionnels et isotropes. Il s'ensuit que les vecteurs propres sont des produits tensoriels des vecteurs propres des trois oscillateurs et que les valeurs propres sont des sommes des valeurs propres des trois oscillateurs. En particulier, le niveau fondamental du système est donné par

$$E = 3 \left(2\sqrt{\frac{6k_{12} + 2k_{14}}{4m_1}} + \sqrt{\frac{(3m_1 + m_4) k_{14}}{2m_1 m_4}} \right). \quad (1.68)$$

1.3.3 Configuration ($2 \times m_1, 2 \times m_3$)

Ici un choix approprié de coordonnées de Jacobi sont les coordonnées de Jacobi dites en "haltères"

$$\vec{\rho} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1, \quad (1.69)$$

$$\vec{\lambda} = \vec{r}_4 - \vec{r}_3, \quad (1.70)$$

$$\vec{\sigma} = \frac{1}{2}(\vec{r}_3 + \vec{r}_4) - \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \quad (1.71)$$

avec la coordonnée du centre de masse \vec{R} définie cette fois-ci par

$$\vec{R} = \frac{m_1(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) + m_3(\vec{r}_3 + \vec{r}_4)}{2m_1 + 2m_3}. \quad (1.72)$$

En inversant les relations (1.69), (1.70), (1.71) et (1.72), on obtient des expressions des coordonnées individuelles en termes des coordonnées de Jacobi et de la coordonnée du centre de masse

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= -\frac{1}{2}\vec{\rho} - \frac{m_3}{m_1 + m_3}\vec{\sigma} + \vec{R}, \\ \vec{r}_2 &= \frac{1}{2}\vec{\rho} - \frac{m_3}{m_1 + m_3}\vec{\sigma} + \vec{R}, \\ \vec{r}_3 &= -\frac{1}{2}\vec{\lambda} + \frac{m_1}{m_1 + m_3}\vec{\sigma} + \vec{R}, \\ \vec{r}_4 &= \frac{1}{2}\vec{\lambda} + \frac{m_1}{m_1 + m_3}\vec{\sigma} + \vec{R}. \end{aligned} \quad (1.73)$$

Les expressions des séparations relatives se déduisent des relations (1.73)

$$\begin{aligned}
\vec{r}_{12} &= -\vec{\rho}, \\
\vec{r}_{13} &= -\frac{1}{2}\vec{\rho} + \frac{1}{2}\vec{\lambda} - \vec{\sigma}, \\
\vec{r}_{14} &= -\frac{1}{2}\vec{\rho} - \frac{1}{2}\vec{\lambda} - \vec{\sigma}, \\
\vec{r}_{23} &= \frac{1}{2}\vec{\rho} + \frac{1}{2}\vec{\lambda} - \vec{\sigma}, \\
\vec{r}_{24} &= \frac{1}{2}\vec{\rho} - \frac{1}{2}\vec{\lambda} - \vec{\sigma}, \\
\vec{r}_{34} &= -\vec{\lambda}.
\end{aligned} \tag{1.74}$$

En élevant au carré les relations (1.74) on arrive à l'expression de l'énergie potentielle

$$V := k_{12}r_{12}^2 + k_{13}(r_{13}^2 + r_{14}^2 + r_{23}^2 + r_{24}^2) + k_{34}r_{34}^2 = (k_{12} + k_{13})\rho^2 + (k_{13} + k_{34})\lambda^2 + 4k_{13}\sigma^2. \tag{1.75}$$

Les moments conjugués associés aux coordonnées de Jacobi sont donnés par

$$\begin{aligned}
\vec{p}_\rho &= \frac{1}{2}\vec{p}_2 - \frac{1}{2}\vec{p}_1, \\
\vec{p}_\lambda &= \frac{1}{2}\vec{p}_4 - \frac{1}{2}\vec{p}_3, \\
\vec{p}_\sigma &= \frac{m_1}{m_1 + m_3}(\vec{p}_3 + \vec{p}_4) - \frac{m_3}{m_1 + m_3}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2).
\end{aligned} \tag{1.76}$$

L'inversion des relations (1.76) et (1.55) permet d'obtenir les expressions des impulsions individuelles en termes des moments de Jacobi et de l'impulsion totale

$$\begin{aligned}
\vec{p}_1 &= -\vec{p}_\rho - \frac{1}{2}\vec{p}_\sigma + \frac{m_1}{2(m_1 + m_3)}\vec{P}, \\
\vec{p}_2 &= \vec{p}_\rho - \frac{1}{2}\vec{p}_\sigma + \frac{m_1}{2(m_1 + m_3)}\vec{P}, \\
\vec{p}_3 &= -\vec{p}_\lambda + \frac{1}{2}\vec{p}_\sigma + \frac{m_3}{2(m_1 + m_3)}\vec{P}, \\
\vec{p}_4 &= \vec{p}_\lambda + \frac{1}{2}\vec{p}_\sigma + \frac{m_3}{2(m_1 + m_3)}\vec{P},
\end{aligned} \tag{1.77}$$

puis l'expression de l'énergie cinétique T en élevant au carré les expressions des impulsions individuelles

$$T := \frac{1}{2m_1}(\vec{p}_1^2 + \vec{p}_2^2) + \frac{1}{2m_3}(\vec{p}_3^2 + \vec{p}_4^2) = \frac{1}{m_1}\vec{p}_\rho^2 + \frac{1}{m_3}\vec{p}_\lambda^2 + \frac{m_1 + m_3}{4m_1m_3}\vec{p}_\sigma^2 + \frac{1}{4(m_1 + m_3)}\vec{P}^2. \tag{1.78}$$

Les relations (1.75) et (1.78) permettent d'obtenir une expression pour l'Hamiltonien relatif H_R

$$H_R := H - \frac{1}{4(m_1 + m_3)} \vec{P}^2 = \frac{1}{m_1} \vec{p}_\rho^2 + (k_{12} + k_{13}) \rho^2 + \frac{1}{m_3} \vec{p}_\lambda^2 + (k_{13} + k_{34}) \lambda^2 + \frac{m_1 + m_3}{4m_1 m_3} \vec{p}_\sigma^2 + 4k_{13} \sigma^2. \quad (1.79)$$

L'expression précédente montre que l'Hamiltonien relatif H_R est la somme de trois oscillateurs harmoniques tridimensionnels et isotropes. Il en découle que les états propres et les niveaux d'énergie de H_R s'en déduisent immédiatement. En particulier le niveau fondamental E du système est donné par

$$E = 3 \left(\sqrt{\frac{k_{12} + k_{13}}{m_1}} + \sqrt{\frac{k_{13} + k_{34}}{m_3}} + \sqrt{\frac{(m_1 + m_3) k_{13}}{m_1 m_3}} \right). \quad (1.80)$$

1.3.4 Configuration $(2 \times m_1, 1 \times m_3, 1 \times m_4)$

Comme pour la configuration précédente, nous avons fait le choix d'un système de coordonnées de Jacobi en "haltères", c'est à dire

$$\vec{\rho} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1, \quad (1.81)$$

$$\vec{\lambda} = \vec{r}_4 - \vec{r}_3, \quad (1.82)$$

$$\vec{\sigma} = \frac{m_3 \vec{r}_3 + m_4 \vec{r}_4}{m_3 + m_4} - \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}. \quad (1.83)$$

La coordonnée du centre de masse \vec{R} est définie par

$$\vec{R} = \frac{m_1 (\vec{r}_1 + \vec{r}_2) + m_3 \vec{r}_3 + m_4 \vec{r}_4}{2m_1 + m_3 + m_4}. \quad (1.84)$$

On peut inverser les 4 relations (1.81), (1.82), (1.83) et (1.84) pour exprimer les coordonnées individuelles en termes des coordonnées de Jacobi et de la coordonnée du centre de masse. On obtient

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= -\frac{1}{2} \vec{\rho} - \frac{m_3 + m_4}{2m_1 + m_3 + m_4} \vec{\sigma} + \vec{R}, \\ \vec{r}_2 &= \frac{1}{2} \vec{\rho} - \frac{m_3 + m_4}{2m_1 + m_3 + m_4} \vec{\sigma} + \vec{R}, \\ \vec{r}_3 &= -\frac{m_4}{m_3 + m_4} \vec{\lambda} + \frac{2m_1}{2m_1 + m_3 + m_4} \vec{\sigma} + \vec{R}, \\ \vec{r}_4 &= \frac{m_3}{m_3 + m_4} \vec{\lambda} + \frac{2m_1}{2m_1 + m_3 + m_4} \vec{\sigma} + \vec{R}. \end{aligned} \quad (1.85)$$

Pour obtenir l'expression de l'énergie potentielle en termes des coordonnées de Jacobi, on a besoin des expressions des séparations relatives en fonction des coordonnées de Jacobi

$$\begin{aligned}
\vec{r}_{12} &= -\vec{\rho}, \\
\vec{r}_{13} &= -\frac{1}{2}\vec{\rho} + \frac{m_4}{m_3 + m_4}\vec{\lambda} - \vec{\sigma}, \\
\vec{r}_{14} &= -\frac{1}{2}\vec{\rho} - \frac{m_3}{m_3 + m_4}\vec{\lambda} - \vec{\sigma}, \\
\vec{r}_{23} &= \frac{1}{2}\vec{\rho} + \frac{m_4}{m_3 + m_4}\vec{\lambda} - \vec{\sigma}, \\
\vec{r}_{24} &= \frac{1}{2}\vec{\rho} - \frac{m_3}{m_3 + m_4}\vec{\lambda} - \vec{\sigma}, \\
\vec{r}_{34} &= -\vec{\lambda}.
\end{aligned} \tag{1.86}$$

Tous calculs faits, on obtient pour l'énergie potentielle V l'expression suivante

$$\begin{aligned}
V : &= k_{12}r_{12}^2 + k_{13}(r_{13}^2 + r_{23}^2) + k_{14}(r_{14}^2 + r_{24}^2) + k_{34}r_{34}^2 = \left(k_{12} + \frac{1}{2}k_{13} + \frac{1}{2}k_{14}\right)\rho^2 + \\
&\left(2\frac{m_4^2}{(m_3 + m_4)^2}k_{13} + 2\frac{m_3^2}{(m_3 + m_4)^2}k_{14} + k_{34}\right)\lambda^2 + 2(k_{13} + k_{14})\sigma^2 + 4\frac{m_3k_{14} - m_4k_{13}}{m_3 + m_4}\vec{\lambda} \cdot \vec{\sigma}.
\end{aligned} \tag{1.87}$$

A la différence des cas précédents, on voit s'introduire un terme de couplage entre les coordonnées de Jacobi $\vec{\lambda}$ et $\vec{\sigma}$. Les moments conjugués des coordonnées de Jacobi sont donnés, en faisant usage d'une notation évidente, par

$$\begin{aligned}
\vec{p}_\rho &= \frac{1}{2}\vec{p}_2 - \frac{1}{2}\vec{p}_1, \\
\vec{p}_\lambda &= \frac{m_3}{m_3 + m_4}\vec{p}_4 - \frac{m_4}{m_3 + m_4}\vec{p}_3, \\
\vec{p}_\sigma &= \frac{2m_1}{2m_1 + m_3 + m_4}(\vec{p}_3 + \vec{p}_4) - \frac{m_3 + m_4}{2m_1 + m_3 + m_4}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2).
\end{aligned} \tag{1.88}$$

En inversant les relations (1.88) et (1.55), on arrive aux expressions des impulsions individuelles en termes des moments de Jacobi et de l'impulsion totale

$$\begin{aligned}
\vec{p}_1 &= -\vec{p}_\rho - \frac{1}{2}\vec{p}_\sigma + \frac{m_1}{2m_1 + m_3 + m_4}\vec{P}, \\
\vec{p}_2 &= \vec{p}_\rho - \frac{1}{2}\vec{p}_\sigma + \frac{m_1}{2m_1 + m_3 + m_4}\vec{P}, \\
\vec{p}_3 &= -\vec{p}_\lambda + \frac{m_3}{m_3 + m_4}\vec{p}_\sigma + \frac{m_3}{2m_1 + m_3 + m_4}\vec{P}, \\
\vec{p}_4 &= \vec{p}_\lambda + \frac{m_4}{m_3 + m_4}\vec{p}_\sigma + \frac{m_4}{2m_1 + m_3 + m_4}\vec{P}.
\end{aligned} \tag{1.89}$$

En partant des relations (1.89) on peut obtenir une expression pour l'énergie cinétique du système en termes des moments de Jacobi et de l'impulsion totale, avec comme résultat

$$\begin{aligned} T : &= \frac{1}{2m_1} (\vec{p}_1^2 + \vec{p}_2^2) + \frac{1}{2m_3} \vec{p}_3^2 + \frac{1}{2m_4} \vec{p}_4^2 \\ &= \frac{1}{m_1} \vec{p}_\rho^2 + \frac{m_3 + m_4}{2m_3m_4} \vec{p}_\lambda^2 + \frac{2m_1 + m_3 + m_4}{4m_1(m_3 + m_4)} \vec{p}_\sigma^2 + \frac{1}{2(2m_1 + m_3 + m_4)} \vec{P}^2. \end{aligned} \quad (1.90)$$

En additionnant énergie cinétique T , (1.90), et énergie potentielle, (1.87), puis en retranchant l'énergie cinétique du centre de masse, $\frac{1}{2(2m_1 + m_3 + m_4)} \vec{P}^2$, on obtient l'expression de l'Hamiltonien relatif H_R du système en fonction des coordonnées de Jacobi et des moments conjugués associés

$$\begin{aligned} H_R : &= H - \frac{1}{2(2m_1 + m_3 + m_4)} \vec{P}^2 = \frac{1}{m_1} \vec{p}_\rho^2 + \left(k_{12} + \frac{1}{2} k_{13} + \frac{1}{2} k_{14} \right) \rho^2 + \frac{m_3 + m_4}{2m_3m_4} \vec{p}_\lambda^2 + \\ &\frac{2m_1 + m_3 + m_4}{4m_1(m_3 + m_4)} \vec{p}_\sigma^2 + \left(2 \frac{m_4^2}{(m_3 + m_4)^2} k_{13} + 2 \frac{m_3^2}{(m_3 + m_4)^2} k_{14} + k_{34} \right) \lambda^2 + \\ &2(k_{13} + k_{14}) \sigma^2 + 4 \frac{m_3 k_{14} - m_4 k_{13}}{m_3 + m_4} \vec{\lambda} \cdot \vec{\sigma}. \end{aligned} \quad (1.91)$$

Nous avons ici un couplage entre les deux coordonnées de Jacobi $\vec{\lambda}$ et $\vec{\sigma}$. Pour découpler les coordonnées de Jacobi, on va comme dans le cas à trois corps, pour la configuration $(1 \times m_1, 1 \times m_2, 1 \times m_3)$, procéder en deux étapes. Faisons d'abord une transformation d'échelle sur la coordonnée de Jacobi $\vec{\sigma}$ et la transformation inverse sur le moment conjugué associé

$$\vec{\xi} = \sqrt{\frac{2m_1}{m_3m_4(2m_1 + m_3 + m_4)}} (m_3 + m_4) \vec{\sigma}, \quad (1.92)$$

$$\vec{p}_\xi = \sqrt{\frac{m_3m_4(2m_1 + m_3 + m_4)}{2m_1}} \frac{1}{(m_3 + m_4)} \vec{p}_\sigma. \quad (1.93)$$

H_R peut alors se réécrire comme

$$\begin{aligned} H_R &= \frac{1}{m_1} \vec{p}_\rho^2 + \left(k_{12} + \frac{1}{2} k_{13} + \frac{1}{2} k_{14} \right) \rho^2 + \frac{m_3 + m_4}{2m_3m_4} \vec{p}_\lambda^2 + \frac{m_3 + m_4}{2m_3m_4} \vec{p}_\xi^2 \\ &\left(2 \frac{m_4^2}{(m_3 + m_4)^2} k_{13} + 2 \frac{m_3^2}{(m_3 + m_4)^2} k_{14} + k_{34} \right) \lambda^2 + 2 \frac{m_3m_4(2m_1 + m_3 + m_4)}{2m_1(m_3 + m_4)^2} (k_{13} + k_{14}) \xi^2 + \\ &4 \sqrt{\frac{m_3m_4(2m_1 + m_3 + m_4)}{2m_1}} \frac{1}{(m_3 + m_4)^2} (m_3 k_{14} - m_4 k_{13}) \vec{\lambda} \cdot \vec{\xi}. \end{aligned} \quad (1.94)$$

Faisons maintenant une transformation orthogonale sur les variables $\vec{\lambda}$ et $\vec{\xi}$, et en vue de préserver les relations de commutation canoniques, la transformation orthogonale inverse sur les moments de Jacobi \vec{p}_λ et \vec{p}_ξ . Dans une telle transformation orthogonale la partie du terme d'énergie cinétique concernant \vec{p}_λ et \vec{p}_ξ va garder la même forme puisque la matrice associée à la forme quadratique de la partie de l'énergie cinétique en \vec{p}_λ et \vec{p}_ξ est proportionnelle à la matrice identité 2×2 (avec $\frac{m_3+m_4}{2m_3m_4}$ comme facteur de proportionnalité). Donc

$$\frac{m_3 + m_4}{2m_3m_4} \vec{p}_\lambda^2 + \frac{m_3 + m_4}{2m_3m_4} \vec{p}_\xi^2 = \frac{m_3 + m_4}{2m_3m_4} \vec{p}_{\lambda'}^2 + \frac{m_3 + m_4}{2m_3m_4} \vec{p}_{\xi'}^2 \quad (1.95)$$

Choisissons cette transformation orthogonale de manière à diagonaliser la forme quadratique de la partie de l'énergie potentielle concernant les variables de Jacobi $\vec{\lambda}$ et $\vec{\xi}$, c'est à dire de telle manière que la partie de l'énergie potentielle concernant les variables de Jacobi $\vec{\lambda}$ et $\vec{\xi}$ soit diagonale dans les nouvelles variables $\vec{\lambda}'$ et $\vec{\xi}'$. Il est clair que ceci revient à diagonaliser la matrice 2×2 \tilde{V}_2

$$\tilde{V}_2 = \begin{pmatrix} 2\frac{m_4^2}{(m_3+m_4)^2}k_{13} + 2\frac{m_3^2}{(m_3+m_4)^2}k_{14} + k_{34} & 2\sqrt{\frac{m_3m_4(2m_1+m_3+m_4)}{2m_1}}\frac{1}{(m_3+m_4)^2}(m_3k_{14} - m_4k_{13}) \\ 2\sqrt{\frac{m_3m_4(2m_1+m_3+m_4)}{2m_1}}\frac{1}{(m_3+m_4)^2}(m_3k_{14} - m_4k_{13}) & 2\frac{m_3m_4(2m_1+m_3+m_4)}{2m_1(m_3+m_4)^2}(k_{13} + k_{14}) \end{pmatrix}, \quad (1.96)$$

associée à la forme quadratique de la partie de l'énergie potentielle impliquant les variables de Jacobi $\vec{\lambda}$ et $\vec{\xi}$. Si nous désignons par C_1 et C_2 les deux valeurs propres de la matrice réelle symétrique \tilde{V}_2 . Nous savons à l'avance que les deux valeurs propres C_1 et C_2 sont nécessairement positives car la matrice \tilde{V}_2 est définie positive- alors l'Hamiltonien H_R prend la forme suivante en termes de la variable de Jacobi $\vec{\rho}$, des nouvelles variables de Jacobi $\vec{\lambda}'$ et $\vec{\xi}'$ et de leurs moments conjugués \vec{p}_ρ , $\vec{p}_{\lambda'}$ et $\vec{p}_{\xi'}$

$$H_R = \frac{1}{m_1} \vec{p}_\rho^2 + \left(k_{12} + \frac{1}{2}k_{13} + \frac{1}{2}k_{14} \right) \rho^2 + \frac{m_3 + m_4}{2m_3m_4} \vec{p}_{\lambda'}^2 + C_1 \lambda'^2 + \frac{m_3 + m_4}{2m_3m_4} \vec{p}_{\xi'}^2 + C_2 \xi'^2. \quad (1.97)$$

Il est clair à l'examen de l'expression précédente, (1.97), que nous avons la somme de trois oscillateurs harmoniques tridimensionnels, isotropes et découplés. Par conséquent, les valeurs propres et les vecteurs propres peuvent se mettre sous la forme habituelle. En particulier, l'état fondamental du système a pour énergie

$$E = 3\sqrt{\frac{2k_{12} + k_{13} + k_{14}}{2m_1}} + 3\sqrt{\frac{m_3 + m_4}{2m_3m_4}} \left(\sqrt{C_1} + \sqrt{C_2} \right). \quad (1.98)$$

Mais

$$\left(\sqrt{C_1} + \sqrt{C_2} \right) = C_1 + C_2 + 2\sqrt{C_1 C_2}. \quad (1.99)$$

En utilisant le fait que la somme des valeurs propres et le produit des valeurs propres de la matrice \tilde{V}_2 ne sont rien d'autre respectivement que la trace et le déterminant de la matrice

\tilde{V}_2 , nous avons

$$\left(\sqrt{C_1} + \sqrt{C_2}\right) = \sqrt{\text{tr}\tilde{V}_2 + 2\sqrt{\det\tilde{V}_2}}. \quad (1.100)$$

Mais

$$\text{tr}\tilde{V}_2 = \frac{m_1(m_3 + m_4)}{m_1(m_3 + m_4)}k_{34} + \frac{m_4(2m_1 + m_3)}{m_1(m_3 + m_4)}k_{13} + \frac{m_3(2m_1 + m_4)}{m_1(m_3 + m_4)}k_{14} \quad (1.101)$$

et

$$\det\tilde{V}_2 = \frac{m_3m_4(2m_1 + m_3 + m_4)}{m_1(m_3 + m_4)^2} (2k_{13}k_{14} + k_{13}k_{34} + k_{14}k_{34}). \quad (1.102)$$

Il s'ensuit que le niveau fondamental E peut se mettre sous la forme

$$E = 3\sqrt{\frac{2k_{12} + k_{13} + k_{14}}{2m_1}} + 3\sqrt{\frac{m_1(m_3 + m_4)}{2m_1m_3m_4}k_{34} + \frac{m_4(2m_1 + m_3)}{2m_1m_3m_4}k_{13} + \frac{m_3(2m_1 + m_4)}{2m_1m_3m_4}k_{14} + \sqrt{\frac{(2m_1 + m_3 + m_4)}{m_1m_3m_4}(2k_{13}k_{14} + k_{13}k_{34} + k_{14}k_{34})}}. \quad (1.103)$$

Il est bon de remarquer que les expressions obtenues pour les énergies des états fondamentaux des systèmes à 3 et à 4 corps pour les configurations de masse envisagées plus haut s'inscrivent comme cas particuliers dans le cadre beaucoup plus général de l'étude effectuée ultérieurement dans le chapitre 5 de la référence [4].

Chapitre 2

Ancienne borne inférieure optimisée

Nous considérons toujours le cas de systèmes à N corps gouvernés par une cinématique non relativiste avec des interactions à 2 corps invariante par translation. Autrement dit, nous traitons de systèmes à N particules gouvernés par un Hamiltonien de la forme

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i<j=1}^N v^{(ij)}(\vec{r}_{ij}), \quad (2.1)$$

où m_i , \vec{r}_i , \vec{p}_i désignent respectivement la masse, le vecteur position, l'impulsion de la i ème particule. $\vec{r}_{ij} := \vec{r}_i - \vec{r}_j$. On remarquera que le potentiel $v^{(ij)}$ peut dépendre des deux particules impliquées. Dans toute la suite, lorsque nous parlerons de problème à N corps nous sous-entendrons par là des systèmes gouvernés par des Hamiltoniens du type défini par l'équation (3.1).

2.1 Méthodologie

Le point de départ de l'ancienne borne inférieure optimisée est la décomposition suivante du terme d'énergie cinétique

$$\sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} = \left(\sum_{i=1}^N b_i \vec{p}_i \right) \left(\sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) + \sum_{i<j=1}^N a_{ij} \left(\frac{\vec{p}_i - y_{ij} \vec{p}_j}{1 + y_{ij}} \right)^2. \quad (2.2)$$

La décomposition précédente fait intervenir N paramètres b_i , $N(N-1)/2$ paramètres a_{ij} et $N(N-1)/2$ paramètres y_{ij} . L'identification des deux membres de l'équation (2.2) fournit $N + N(N-1)/2$ équations, qui peuvent être utilisées pour éliminer les b_i et les a_{ij}

en faveur des y_{ij} . Dorénavant, les b_i et les a_{ij} seront considérés comme des fonctions des y_{ij} . Donc une caractéristique remarquable de la décomposition (2.2) de l'énergie cinétique est qu'elle fait intervenir des paramètres libres qui sont au nombre de $N(N-1)/2$. On peut dire que chaque jeu de valeurs des paramètres y_{ij} correspond à une décomposition particulière de l'énergie cinétique du système. Cependant les valeurs des paramètres y_{ij} sont soumises à une restriction. Les jeux de valeurs permis pour les paramètres y_{ij} doivent conduire à des valeurs positives pour tous les paramètres a_{ij} . Cette condition est facile à comprendre car les paramètres a_{ij} jouent le rôle d'inverses de doubles de masses réduites et par conséquent doivent être positives. Il vaut la peine de noter que $\vec{p}_{ij} := \frac{\vec{p}_i - y_{ij}\vec{p}_j}{1+y_{ij}}$ est un moment conjugué de $\vec{r}_{ij} := \vec{r}_i - \vec{r}_j$, au sens que \vec{r}_{ij} et \vec{p}_{ij} satisfont aux relations de commutation canoniques

$$[r_{ij,k}, p_{ij,\ell}] = i\hbar\delta_{k,\ell}, \quad (2.3)$$

où $r_{ij,k}$ et $p_{ij,\ell}$ désignent respectivement la k ème composante de \vec{r}_{ij} et la ℓ ème composante de \vec{p}_{ij} . Considérons maintenant tour à tour les systèmes à 3 et à 4 corps.

2.2 Systèmes à 3 corps

La décomposition du terme d'énergie cinétique (2.2) s'écrit dans le cas à 3 corps comme

$$\begin{aligned} \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} &= (b_1\vec{p}_1 + b_2\vec{p}_2 + b_3\vec{p}_3)(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3) + \\ &a_{12} \left(\frac{\vec{p}_1 - y_{12}\vec{p}_2}{1+y_{12}} \right)^2 + a_{13} \left(\frac{\vec{p}_1 - y_{13}\vec{p}_3}{1+y_{13}} \right)^2 + \\ &a_{23} \left(\frac{\vec{p}_2 - y_{23}\vec{p}_3}{1+y_{23}} \right)^2. \end{aligned} \quad (2.4)$$

En identifiant les deux membres de l'équation (2.4), on obtient un système linéaire de 6 équations à 6 inconnues, les trois a_{ij} et les trois b_i , avec les trois y_{ij} comme paramètres

$$\begin{aligned}
b_1 + \frac{a_{12}}{(1+y_{12})^2} + \frac{a_{13}}{(1+y_{13})^2} &= \frac{1}{2m_1}, \\
b_2 + \frac{a_{12}y_{12}^2}{(1+y_{12})^2} + \frac{a_{23}}{(1+y_{23})^2} &= \frac{1}{2m_2}, \\
b_3 + \frac{a_{13}y_{13}^2}{(1+y_{13})^2} + \frac{a_{23}y_{23}^2}{(1+y_{23})^2} &= \frac{1}{2m_3}, \\
b_1 + b_2 - 2a_{12}\frac{y_{12}}{(1+y_{12})^2} &= 0, \\
b_1 + b_3 - 2a_{13}\frac{y_{13}}{(1+y_{13})^2} &= 0, \\
b_2 + b_3 - 2a_{23}\frac{y_{23}}{(1+y_{23})^2} &= 0.
\end{aligned} \tag{2.5}$$

On peut éliminer les trois b_i entre les équations précédentes pour obtenir un système linéaire de trois équations impliquant les a_{ij} seuls

$$\begin{aligned}
a_{12} + \frac{1}{(1+y_{13})^2}a_{13} + \frac{1}{(1+y_{23})^2}a_{23} &= \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_2}, \\
\frac{1}{(1+y_{12})^2}a_{12} + a_{13} + \frac{y_{23}^2}{(1+y_{23})^2}a_{23} &= \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_3}, \\
\frac{y_{12}^2}{(1+y_{12})^2}a_{12} + \frac{y_{13}^2}{(1+y_{13})^2}a_{13} + a_{23} &= \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3},
\end{aligned} \tag{2.6}$$

qu'on peut écrire sous forme matricielle comme

$$\tilde{\mathbf{D}}\mathbf{A} = \boldsymbol{\alpha}, \tag{2.7}$$

où $\tilde{\mathbf{D}}$ est une matrice carrée 3×3

$$\tilde{\mathbf{D}} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{(1+y_{13})^2} & \frac{1}{(1+y_{23})^2} \\ \frac{1}{(1+y_{12})^2} & 1 & \frac{y_{23}^2}{(1+y_{23})^2} \\ \frac{y_{12}^2}{(1+y_{12})^2} & \frac{y_{13}^2}{(1+y_{13})^2} & 1 \end{pmatrix}, \tag{2.8}$$

\mathbf{A} et $\boldsymbol{\alpha}$ sont des matrices unicolonnes 3×1

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ a_{23} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_2} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_3} \\ \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \end{pmatrix}. \tag{2.9}$$

On résoud alors le système d'équations (2.6) ou, ce qui revient au même, on inverse la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$, (2.8), ce qui donne formellement

$$\mathbf{A} = \tilde{\mathbf{D}}^{-1}\boldsymbol{\alpha}, \quad (2.10)$$

où $\tilde{\mathbf{D}}^{-1}$ désigne l'inverse de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$. L'inversion de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ n'est pas chose aisée dans le cas général. Ceci est dû au nombre relativement élevé de paramètres qui interviennent dans l'expression de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$: les trois paramètres y_{ij} et les trois masses m_i , ce qui rend l'inversion de la matrice particulièrement ardue à tel point que nous n'avons pu aboutir à des expressions relativement compactes pour la matrice $\tilde{\mathbf{D}}^{-1}$ que pour des configurations de masse spéciales.

À la décomposition du terme d'énergie cinétique, (2.4), correspond la décomposition suivante de l'Hamiltonien du système H

$$\begin{aligned} H = & (b_1\vec{p}_1 + b_2\vec{p}_2 + b_3\vec{p}_3)(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3) + \\ & a_{12} \left(\frac{\vec{p}_1 - y_{12}\vec{p}_2}{1 + y_{12}} \right)^2 + v^{(12)}(\vec{r}_{12}) \\ & a_{13} \left(\frac{\vec{p}_1 - y_{13}\vec{p}_3}{1 + y_{13}} \right)^2 + v^{(13)}(\vec{r}_{13}) \\ & a_{23} \left(\frac{\vec{p}_2 - y_{23}\vec{p}_3}{1 + y_{23}} \right)^2 + v^{(23)}(\vec{r}_{23}). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Soit $|\Psi\rangle$ l'état fondamental, qu'on pourra toujours, sans perte de généralité, supposer normalisé, du système et E l'énergie correspondante. Comme il est bien connu l'état fondamental d'un système possède les mêmes propriétés d'invariance que l'Hamiltonien. Il existe bien des situations exceptionnelles où cette propriété n'est pas vérifiée, mais nous supposons que nous sommes en dehors de telles situations. Nous avons

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \langle \Psi | \left(\sum_{i=1}^3 b_i \vec{p}_i \right) \left(\sum_{i=1}^3 \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle + \sum_{i < j=1}^3 \langle \Psi | H_2^{(ij)} | \Psi \rangle, \quad (2.12)$$

où $H_2^{(ij)}$ est l'Hamiltonien à deux corps défini par

$$H_2^{(ij)} = a_{ij} \left(\frac{\vec{p}_i - y_{ij}\vec{p}_j}{1 + y_{ij}} \right)^2 + v^{(ij)}(\vec{r}_{ij}). \quad (2.13)$$

comme $|\Psi\rangle$ est invariant par translation, il s'ensuit que

$$\sum_{i=1}^3 \vec{p}_i | \Psi \rangle = 0, \quad (2.14)$$

et par conséquent $\langle \Psi | \left(\sum_{i=1}^3 b_i \vec{p}_i \right) \left(\sum_{i=1}^3 \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle = 0$. Il en résulte que

$$E = \sum_{i < j = 1}^3 \langle \Psi | H_2^{(ij)} | \Psi \rangle. \quad (2.15)$$

Si $E_2^{(ij)}(a_{ij})$ désigne l'état fondamental de l'hamiltonien à deux corps défini par l'équation (2.13), alors en vertu du principe variationnel $\langle \Psi | H_2^{(ij)} | \Psi \rangle \geq E_2^{(ij)}(a_{ij})$ et par conséquent

$$E \geq \sum_{i < j = 1}^3 E_2^{(ij)}(a_{ij}). \quad (2.16)$$

Comme les a_{ij} sont des fonctions des y_{ij} , la borne inférieure obtenue (2.16) dépend des valeurs des paramètres y_{ij} . Donc à chaque jeu de valeurs pour les paramètres y_{ij} correspond une borne inférieure (2.16) pour l'énergie E de l'état fondamental. La meilleure de ces bornes inférieures est bien entendu celle qui correspond au jeu de valeurs des paramètres y_{ij} qui maximisent $\sum_{i < j = 1}^3 E_2^{(ij)}(a_{ij})$. Cette borne inférieure qui résulte d'un processus d'optimisation est appelée ancienne borne inférieure optimisée (pour le système à trois corps) et est notée E_{oolb} . Donc

$$E_{oolb} = \max_{\{y_{kl}\}} \sum_{i < j = 1}^3 E_2^{(ij)}(a_{ij}\{y_{kl}\}). \quad (2.17)$$

2.2.1 Contrainte dynamique universelle

Lorsque l'ancienne borne inférieure optimisée est atteinte (2.17), les valeurs des paramètres y_{ij} correspondants ¹ annulent les dérivées premières de $\sum_{i < j = 1}^3 E_2^{(ij)}(a_{ij})$ par rapport aux y_{ij} . Donc

$$\frac{\partial \sum_{i < j = 1}^3 E_2^{(ij)}(a_{ij})}{\partial y_{kl}} = \sum_{i < j = 1}^3 \frac{\partial E_2^{(ij)}(a_{ij})}{\partial a_{ij}} \frac{\partial a_{ij}}{\partial y_{kl}} = 0. \quad (2.18)$$

Comme les $\frac{\partial E_2^{(ij)}(a_{ij})}{\partial a_{ij}}$ ne sont pas tous nuls, il en résulte que la matrice carrée 3×3 $\tilde{\mathbf{B}}$ d'éléments de matrice $\frac{\partial a_{ij}}{\partial y_{kl}}$, où ij , $i < j = 1, 2, 3$, désigne l'indice de ligne, et kl , $k < l = 1, 2, 3$, désigne l'indice de colonne doit être de déterminant nul. Ceci va se traduire

¹Il existe toutefois des situations où l'ancienne borne inférieure optimisée correspond à des valeurs des paramètres y_{ij} situées sur la frontière du domaine de définition des y_{ij} car n'oublions pas que les a_{ij} doivent toujours rester positifs

inévitablement par une relation entre les valeurs des trois paramètres y_{ij} correspondant à l'ancienne borne inférieure optimisée. Cette relation n'est pas de nature cinématique, ce qui signifie qu'on peut même l'ignorer, effectuer le processus d'optimisation et vérifier numériquement, a posteriori, que cette relation est bien satisfaite pour les valeurs des paramètres y_{ij} qui maximisent $\sum_{i<j=1}^3 E_2^{(ij)}(a_{ij})$. Cependant, la connaissance de cette relation et sa prise en compte peut produire une grande simplification dans le processus d'optimisation surtout si on a à l'esprit que l'on a affaire à une optimisation non linéaire, un paramètre d'optimisation en plus pouvant mener à des complications insoupçonnables. Ceci d'une part. D'autre part, cette relation entre les valeurs des paramètres y_{ij} résulte de l'application d'un principe dynamique, le principe variationnel en l'occurrence, et elle est également indépendante de la forme particulière du potentiel car seule la décomposition du terme d'énergie cinétique importe. Pour ces deux raisons cette relation est appelée contrainte dynamique universelle. Il semblerait à première vue que nous ayons besoin de l'expression des a_{ij} en termes des paramètres y_{ij} , donc que nous ayons à inverser la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$, (2.8), dont nous avons dit que l'inversion est une chose ardue dans le cas général. Il semblerait donc que nous ayons ici affaire à un sérieux problème pour pouvoir déterminer explicitement la contrainte dynamique universelle. En fait, il n'en est rien et pour déterminer la contrainte dynamique universelle, on n'a pas besoin de connaître l'expression explicite des a_{ij} en termes des y_{ij} comme on va le montrer dans ce qui suit. Pour cela partons de la relation (2.7) et dérivons les deux membres par rapport aux y_{kl} . En tenant compte du fait que α est indépendant des y_{kl} , on obtient

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{D}}}{\partial y_{kl}} \mathbf{A} + \tilde{\mathbf{D}} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial y_{kl}} = 0, \quad (2.19)$$

d'où l'on déduit que

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial y_{kl}} = -\tilde{\mathbf{D}}^{-1} \frac{\partial \tilde{\mathbf{D}}}{\partial y_{kl}} \mathbf{A}. \quad (2.20)$$

Il est facile de voir à partir de l'expression explicite de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$, (2.8), que la colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$ correspondant à l'indice kl se présente sous la forme de moins le produit de l'inverse de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ par l'unique colonne non nulle de $\frac{\partial \tilde{\mathbf{D}}}{\partial y_{kl}}$ multipliée par a_{kl} . Donc la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$ est moins le produit de l'inverse de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ par une matrice carrée 3×3 $\tilde{\mathbf{M}}'$

$$\tilde{\mathbf{B}} = -\tilde{\mathbf{D}}^{-1} \tilde{\mathbf{M}}', \quad (2.21)$$

où la matrice $\tilde{\mathbf{M}}'$ est construite de la manière suivante : dériver l'unique colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ qui dépend de y_{kl} par rapport à celui-ci puis multiplier la colonne ainsi obtenue par a_{kl} . Le résultat ainsi obtenu n'est autre que la colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{M}}'$ correspondant à l'indice de colonne kl . On déduit de la relation (2.21) que la condition de déterminant nul pour la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$ est équivalente à imposer la même condition pour la matrice $\tilde{\mathbf{M}}'$.

D'après la construction même de la matrice $\tilde{\mathbf{M}}'$ et d'après les propriétés des déterminants, [72], le déterminant de la matrice $\tilde{\mathbf{M}}'$ est le produit des trois a_{ij} par le déterminant d'une matrice $\tilde{\mathbf{M}}$ construite à partir de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ par la procédure suivante : prendre l'unique colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ qui dépend du paramètre y_{kl} et la dériver par rapport à ce dernier. La colonne obtenue de cette façon n'est autre que la colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$ correspondant à l'indice de colonne kl . La condition de déterminant nul pour la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$ est donc équivalente à la même condition sur la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$. Il nous reste donc pour obtenir la contrainte dynamique universelle pour l'ancienne borne inférieure optimisée qu'à construire la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$, ce qui est très facile à faire, puis à imposer la condition de déterminant nul. On a

$$\tilde{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-2}{(1+y_{13})^3} & \frac{-2}{(1+y_{23})^3} \\ \frac{-2}{(1+y_{12})^3} & 0 & \frac{2y_{23}}{(1+y_{23})^3} \\ \frac{2y_{12}}{(1+y_{12})^3} & \frac{2y_{13}}{(1+y_{13})^3} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

En faisant usage des propriétés des déterminants, [72], imposer à la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$ d'avoir un déterminant nul revient, en faisant usage de propriétés bien connus des déterminants, à imposer la condition

$$\begin{vmatrix} 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & y_{23} \\ y_{12} & y_{13} & 0 \end{vmatrix} = 0, \quad (2.23)$$

ce qui donne la contrainte dynamique universelle pour l'ancienne borne inférieure optimisée dans le cas des systèmes à trois corps

$$y_{13} - y_{12}y_{23} = 0. \quad (2.24)$$

2.2.2 Configurations spéciales de masse

Voyons maintenant comment les choses se simplifient lorsque le système présente des symétries dans l'hypothèse où les symétries du terme d'énergie cinétique ne sont pas remises en cause par le terme d'énergie potentielle. Ceci revient à faire l'hypothèse d'une interaction à 2 corps entre particules i et j , $v^{(ij)}$, qui ne dépend que des masses des deux particules m_i et m_j .

configuration ($3 \times m_1$)

Les symétries du problème impliquent que tous les a_{ij} sont égaux et tous les y_{ij} sont égaux à 1 et la relation (2.24) est automatiquement satisfaite. Le système linéaire d'équations (2.6) se réduit à une seule équation qui permet de tirer l'expression de a_{ij}

$$a_{ij} = \frac{2}{3m_1}. \quad (2.25)$$

configuration $(2 \times m_1, 1 \times m_3)$

Les symétries du problème impliquent que

$$a_{13} = a_{23}, \quad y_{12} = 1, \quad y_{13} = y_{23}. \quad (2.26)$$

On a donc deux a_{ij} indépendants et un seul y_{ij} indépendant et la contrainte dynamique universelle (2.24) est automatiquement satisfaite. Le système d'équations (2.6) se réduit à un système de deux équations à deux inconnues, dont on tire les expressions de a_{12} et de a_{13} en fonction de y_{13} et des masses m_1 et m_3

$$\begin{aligned} a_{12} &= 2 \frac{(1 + y_{13}) m_3 - m_1}{(2y_{13} + 1)^2 m_1 m_3} \\ a_{13} &= \frac{1}{2} (1 + y_{13})^2 \frac{2m_1 + m_3}{(2y_{13} + 1)^2 m_1 m_3}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

2.3 systèmes à 4 corps

En explicitant la décomposition du terme d'énergie cinétique, (2.2), dans ce cas, on arrive à

$$\begin{aligned} \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_4} &= (b_1 \vec{p}_1 + b_2 \vec{p}_2 + b_3 \vec{p}_3 + b_4 \vec{p}_4) (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4) + \\ &a_{12} \left(\frac{\vec{p}_1 - y_{12} \vec{p}_2}{1 + y_{12}} \right)^2 + a_{13} \left(\frac{\vec{p}_1 - y_{13} \vec{p}_3}{1 + y_{13}} \right)^2 + \\ &a_{14} \left(\frac{\vec{p}_1 - y_{14} \vec{p}_4}{1 + y_{14}} \right)^2 + a_{23} \left(\frac{\vec{p}_2 - y_{23} \vec{p}_3}{1 + y_{23}} \right)^2 + \\ &a_{24} \left(\frac{\vec{p}_2 - y_{24} \vec{p}_4}{1 + y_{24}} \right)^2 + a_{34} \left(\frac{\vec{p}_3 - y_{34} \vec{p}_4}{1 + y_{34}} \right)^2. \end{aligned} \quad (2.28)$$

En identifiant les deux membres de l'équation (2.28), on obtient un système linéaire de 10 équations à 10 inconnues, les six a_{ij} et les quatre b_i , avec les six y_{ij} comme paramètres

$$\begin{aligned}
b_1 + \frac{a_{12}}{(1+y_{12})^2} + \frac{a_{13}}{(1+y_{13})^2} + \frac{a_{14}}{(1+y_{14})^2} &= \frac{1}{2m_1}, \\
b_2 + \frac{a_{12}y_{12}^2}{(1+y_{12})^2} + \frac{a_{23}}{(1+y_{23})^2} + \frac{a_{24}}{(1+y_{24})^2} &= \frac{1}{2m_2}, \\
b_3 + \frac{a_{13}y_{13}^2}{(1+y_{13})^2} + \frac{a_{23}y_{23}^2}{(1+y_{23})^2} + \frac{a_{34}}{(1+y_{34})^2} &= \frac{1}{2m_3}, \\
b_4 + \frac{a_{14}y_{14}^2}{(1+y_{14})^2} + \frac{a_{24}y_{24}^2}{(1+y_{24})^2} + \frac{a_{34}y_{34}^2}{(1+y_{34})^2} &= \frac{1}{2m_3}, \\
b_1 + b_2 - 2a_{12}\frac{y_{12}}{(1+y_{12})^2} &= 0, \\
b_1 + b_3 - 2a_{13}\frac{y_{13}}{(1+y_{13})^2} &= 0, \\
b_1 + b_4 - 2a_{14}\frac{y_{14}}{(1+y_{14})^2} &= 0, \\
b_2 + b_3 - 2a_{23}\frac{y_{23}}{(1+y_{23})^2} &= 0, \\
b_2 + b_4 - 2a_{24}\frac{y_{24}}{(1+y_{24})^2} &= 0, \\
b_3 + b_4 - 2a_{34}\frac{y_{34}}{(1+y_{34})^2} &= 0.
\end{aligned} \tag{2.29}$$

On peut éliminer les b entre les équations (2.29). On obtient alors un système linéaire de six équations impliquant les six a_{ij} uniquement, avec les y_{ij} comme paramètres

$$\begin{aligned}
a_{12} + \frac{1}{(1+y_{13})^2}a_{13} + \frac{1}{(1+y_{14})^2}a_{14} + \frac{1}{(1+y_{23})^2}a_{23} + \frac{1}{(1+y_{24})^2}a_{24} &= \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_2}, \\
\frac{1}{(1+y_{12})^2}a_{12} + a_{13} + \frac{1}{(1+y_{14})^2}a_{14} + \frac{y_{23}^2}{(1+y_{23})^2}a_{23} + \frac{1}{(1+y_{34})^2}a_{34} &= \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_3}, \\
\frac{1}{(1+y_{12})^2}a_{12} + \frac{1}{(1+y_{13})^2}a_{13} + a_{14} + \frac{y_{24}^2}{(1+y_{24})^2}a_{24} + \frac{y_{34}^2}{(1+y_{34})^2}a_{34} &= \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_4}, \\
\frac{y_{12}^2}{(1+y_{12})^2}a_{12} + \frac{y_{13}^2}{(1+y_{13})^2}a_{13} + a_{23} + \frac{1}{(1+y_{24})^2}a_{24} + \frac{1}{(1+y_{34})^2}a_{34} &= \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3}, \\
\frac{y_{12}^2}{(1+y_{12})^2}a_{12} + \frac{y_{14}^2}{(1+y_{14})^2}a_{14} + \frac{1}{(1+y_{23})^2}a_{23} + a_{24} + \frac{y_{34}^2}{(1+y_{34})^2}a_{34} &= \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_4}, \\
\frac{y_{13}^2}{(1+y_{13})^2}a_{13} + \frac{y_{14}^2}{(1+y_{14})^2}a_{14} + \frac{y_{23}^2}{(1+y_{23})^2}a_{23} + \frac{y_{24}^2}{(1+y_{24})^2}a_{24} + a_{34} &= \frac{1}{2m_3} + \frac{1}{2m_4},
\end{aligned} \tag{2.30}$$

qu'on peut écrire sous forme matricielle

$$\tilde{\mathbf{D}}\mathbf{A} = \boldsymbol{\alpha}, \tag{2.31}$$

où cette fois-ci, $\tilde{\mathbf{D}}$ est une matrice carrée 6×6

$$\tilde{\mathbf{D}} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{(1+y_{13})^2} & \frac{1}{(1+y_{14})^2} & \frac{1}{(1+y_{23})^2} & \frac{1}{(1+y_{24})^2} & 0 \\ \frac{1}{(1+y_{12})^2} & 1 & \frac{1}{(1+y_{14})^2} & \frac{y_{23}^2}{(1+y_{23})^2} & 0 & \frac{1}{(1+y_{34})^2} \\ \frac{1}{(1+y_{12})^2} & \frac{1}{(1+y_{13})^2} & 1 & 0 & \frac{y_{24}^2}{(1+y_{24})^2} & \frac{y_{34}^2}{(1+y_{34})^2} \\ \frac{y_{12}^2}{(1+y_{12})^2} & \frac{y_{13}^2}{(1+y_{13})^2} & 0 & 1 & \frac{1}{(1+y_{24})^2} & \frac{1}{(1+y_{34})^2} \\ \frac{y_{12}^2}{(1+y_{12})^2} & 0 & \frac{y_{14}^2}{(1+y_{14})^2} & \frac{1}{(1+y_{23})^2} & 1 & \frac{y_{34}^2}{(1+y_{34})^2} \\ 0 & \frac{y_{13}^2}{(1+y_{13})^2} & \frac{y_{14}^2}{(1+y_{14})^2} & \frac{y_{23}^2}{(1+y_{23})^2} & \frac{y_{24}^2}{(1+y_{24})^2} & 1 \end{pmatrix}, \tag{2.32}$$

\mathbf{A} et $\boldsymbol{\alpha}$ sont maintenant des matrices unicolonnes 6×1

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ a_{14} \\ a_{23} \\ a_{24} \\ a_{34} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_2} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_3} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_4} \\ \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \\ \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_4} \\ \frac{1}{2m_3} + \frac{1}{2m_4} \end{pmatrix} \tag{2.33}$$

Tout ce qui a été dit a propos du cas à trois corps peut être répété presque intégralement dans le cas à quatre corps. On résoud le système d'équations (2.30) ou, ce qui revient au même, on inverse la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$, (2.32), ce qui donne formellement

$$\mathbf{A} = \tilde{\mathbf{D}}^{-1}\boldsymbol{\alpha}, \quad (2.34)$$

où $\tilde{\mathbf{D}}^{-1}$ désigne l'inverse de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$, qui dans le cas de systèmes à 4 corps est une matrice 6×6 . L'inversion de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ est encore plus difficile dans le cas général comparativement au cas à trois corps. Ceci est dû au nombre plus élevé de paramètres y_{ij} (six au lieu de trois dans le cas à trois corps) et de masses m_i (quatre au lieu de trois dans le cas à trois corps) qui interviennent dans l'expression de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ et également à la dimension de cette dernière (six au lieu de trois dans le cas à trois corps). Comme dans le cas à trois corps, nous n'avons pu aboutir à des expressions relativement compactes pour la matrice $\tilde{\mathbf{D}}^{-1}$ que pour certaines configurations de masse.

Comme pour le cas à trois corps, à la décomposition du terme d'énergie cinétique, (2.28), correspond la décomposition suivante de l'Hamiltonien du système H

$$H = \left(\sum_{i=1}^4 b_i \vec{p}_i \right) \left(\sum_{i=1}^4 \vec{p}_i \right) + \sum_{i<j=1}^4 a_{ij} \left(\frac{\vec{p}_i - y_{ij} \vec{p}_j}{1 + y_{ij}} \right)^2 + v^{(ij)}(\vec{r}_{ij}). \quad (2.35)$$

Soit $|\Psi\rangle$ l'état fondamental, qu'on supposera, sans perte de généralité, normalisé, du système à quatre corps et E l'énergie correspondante. Comme dans le cas à trois corps, on se placera dans l'hypothèse peu restrictive d'un état fondamental invariant par translation. Nous avons

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \langle \Psi | \left(\sum_{i=1}^3 b_i \vec{p}_i \right) \left(\sum_{i=1}^3 \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle + \sum_{i<j=1}^3 \langle \Psi | H_2^{(ij)} | \Psi \rangle, \quad (2.36)$$

où $H_2^{(ij)}$ est l'Hamiltonien à deux corps défini par (2.13). Comme $|\Psi\rangle$ est invariant par translation, il s'ensuit que

$$\sum_{i=1}^4 \vec{p}_i | \Psi \rangle = 0, \quad (2.37)$$

et par conséquent $\langle \Psi | \left(\sum_{i=1}^3 b_i \vec{p}_i \right) \left(\sum_{i=1}^4 \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle = 0$. Il en résulte que

$$E = \sum_{i<j=1}^4 \langle \Psi | H_2^{(ij)} | \Psi \rangle. \quad (2.38)$$

Si $E_2^{(ij)}(a_{ij})$ désigne l'état fondamental de l'hamiltonien à deux corps défini par l'équation (2.13), alors en vertu du principe variationnel $\langle \Psi | H_2^{(ij)} | \Psi \rangle \geq E_2^{(ij)}(a_{ij})$ et par conséquent

$$E \geq \sum_{i < j=1}^4 E_2^{(ij)}(a_{ij}). \quad (2.39)$$

Comme les a_{ij} sont des fonctions des y_{ij} , la borne inférieure obtenue (2.39) dépend des valeurs des paramètres y_{ij} . Donc à chaque jeu de valeurs pour les paramètres y_{ij} correspond une borne inférieure (2.39) pour l'énergie E de l'état fondamental. La meilleure de ces bornes inférieures est bien entendu celle qui correspond au jeu de valeurs des paramètres y_{ij} qui maximisent $\sum_{i < j=1}^4 E_2^{(ij)}(a_{ij})$. Cette borne inférieure qui résulte d'un processus d'optimisation est appelée ancienne borne inférieure optimisée (pour le système à quatre corps) et est notée E_{oolb} . Donc

$$E_{oolb} = \max_{\{y_{kl}\}} \sum_{i < j=1}^4 E_2^{(ij)}(a_{ij}\{y_{kl}\}). \quad (2.40)$$

2.3.1 Contrainte dynamique universelle

Comme dans le cas à trois corps, lorsque l'ancienne borne inférieure optimisée est atteinte (2.40), les valeurs des paramètres y_{ij} correspondants annulent les dérivées premières de $\sum_{i < j=1}^4 E_2^{(ij)}(a_{ij})$ par rapport aux y_{ij} . Donc

$$\frac{\partial \sum_{i < j=1}^4 E_2^{(ij)}(a_{ij})}{\partial y_{kl}} = \sum_{i < j=1}^4 \frac{\partial E_2^{(ij)}(a_{ij})}{\partial a_{ij}} \frac{\partial a_{ij}}{\partial y_{kl}} = 0. \quad (2.41)$$

Comme les $\frac{\partial E_2^{(ij)}(a_{ij})}{\partial a_{ij}}$ ne sont pas tous nuls, il en résulte que la matrice carrée 6×6 $\tilde{\mathbf{B}}$ d'éléments de matrice $\frac{\partial a_{ij}}{\partial y_{kl}}$, où ij , $i < j = 1, 2, 3, 4$, désigne l'indice de ligne, et kl , $k < l = 1, 2, 3, 4$, désigne l'indice de colonne doit être de déterminant nul. Ceci va se traduire de nouveau par une relation entre les valeurs des six paramètres y_{ij} correspondant à l'ancienne borne inférieure optimisée. La remarque sur la nature cinématique de la relation reste vraie. On peut ignorer cette relation, effectuer le processus d'optimisation et vérifier numériquement, a posteriori, que cette relation est bien satisfaite pour les valeurs des paramètres y_{ij} qui maximisent $\sum_{i < j=1}^3 E_2^{(ij)}(a_{ij})$. Mais, ceci rend le processus d'optimisation beaucoup plus difficile surtout si on a à l'esprit que l'on a affaire à une optimisation non linéaire. Cette relation est également appelée contrainte dynamique universelle pour les mêmes raisons que dans le cas à trois corps. Comme dans le cas à trois corps, on n'a pas besoin de connaître l'expression explicite des a_{ij} en termes des y_{ij} pour accéder à la

contrainte dynamique universelle. La même démonstration peut être répétée dans le cas à quatre corps, en tout point identique à celle du cas à trois corps, sauf en ce qui concerne les dimensions des matrices qui sont cette fois-ci des matrices 6×6 , au lieu de matrices 3×3 dans le cas à trois corps, avec la même conclusion que dans le cas à 3 corps, à savoir qu'imposer à la matrice 6×6 $\tilde{\mathbf{B}}$ d'être de déterminant nul est équivalent à imposer la même condition à la matrice 6×6 $\tilde{\mathbf{M}}$ construite à partir de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ par la procédure suivante : prendre l'unique colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ qui dépend du paramètre y_{kl} et la dériver par rapport à ce dernier. La colonne obtenue de cette façon n'est autre que la colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$ correspondant à l'indice de colonne kl . Il nous reste donc pour obtenir la contrainte dynamique universelle pour l'ancienne borne inférieure optimisée qu'à construire la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$, ce qui est très facile à faire et donne

$$\tilde{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-2}{(1+y_{13})^3} & \frac{-2}{(1+y_{14})^3} & \frac{-2}{(1+y_{23})^3} & \frac{-2}{(1+y_{24})^3} & 0 \\ \frac{-2}{(1+y_{12})^3} & 0 & \frac{-2}{(1+y_{14})^3} & \frac{2y_{23}}{(1+y_{23})^3} & 0 & \frac{-2}{(1+y_{34})^3} \\ \frac{-2}{(1+y_{12})^3} & \frac{-2}{(1+y_{13})^3} & 0 & 0 & \frac{2y_{24}}{(1+y_{24})^3} & \frac{2y_{34}}{(1+y_{34})^3} \\ \frac{2y_{12}}{(1+y_{12})^3} & \frac{2y_{13}}{(1+y_{13})^3} & 0 & 0 & \frac{-2}{(1+y_{24})^3} & \frac{-2}{(1+y_{34})^3} \\ \frac{2y_{12}}{(1+y_{12})^3} & 0 & \frac{2y_{14}}{(1+y_{14})^3} & \frac{-2}{(1+y_{23})^3} & 0 & \frac{2y_{34}}{(1+y_{34})^3} \\ 0 & \frac{2y_{13}}{(1+y_{13})^3} & \frac{2y_{14}}{(1+y_{14})^3} & \frac{2y_{23}}{(1+y_{23})^3} & \frac{2y_{24}}{(1+y_{24})^3} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.42)$$

puis à imposer la condition de déterminant nul. En faisant usage des propriétés bien connus des déterminants, [72], imposer à la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$ d'avoir un déterminant nul revient à imposer la condition

$$\begin{vmatrix} 0 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & y_{23} & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & y_{24} & y_{34} \\ y_{12} & y_{13} & 0 & 0 & -1 & -1 \\ y_{12} & 0 & y_{14} & -1 & 0 & y_{34} \\ 0 & y_{13} & y_{14} & y_{23} & y_{24} & 0 \end{vmatrix} = 0, \quad (2.43)$$

ce qui donne la contrainte dynamique universelle pour l'ancienne borne inférieure optimisée dans le cas des systèmes à quatre corps

$$\begin{aligned} & 2y_{13} - 2y_{24} + 2y_{12}y_{14} - 2y_{12}y_{23} - 2y_{14}y_{34} + 2y_{23}y_{34} - \\ & 2y_{12}y_{13}y_{34} - 2y_{13}y_{14}y_{23} + 2y_{12}y_{24}y_{34} + 2y_{14}y_{23}y_{24} - \\ & 2y_{12}y_{13}y_{14}y_{24} + 2y_{12}y_{13}y_{23}y_{24} + 2y_{13}y_{14}y_{24}y_{34} - \\ & 2y_{13}y_{23}y_{24}y_{34} + 2y_{12}y_{13}y_{14}y_{23}y_{34} - 2y_{12}y_{14}y_{23}y_{24}y_{34} = 0. \end{aligned} \quad (2.44)$$

2.3.2 Configurations spéciales de masse

Configuration $(4 \times m_1)$

Dans le cas où toutes les particules sont de même masse m_1 , tous les a_{ij} sont identiques, tous les y_{ij} sont égaux à 1 et la contrainte dynamique universelle est automatiquement satisfaite. Le système d'équations (2.6) se réduit à une seule équation qui donne a_{ij}

$$a_{ij} = \frac{1}{2m_1}. \quad (2.45)$$

Configuration $(3 \times m_1, 1 \times m_4)$

Dans ce cas on a les relations

$$a_{12} = a_{13} = a_{23}, \quad a_{14} = a_{24} = a_{34} \quad (2.46)$$

et

$$y_{12} = y_{13} = y_{23} = 1, \quad y_{14} = y_{24} = y_{34}. \quad (2.47)$$

On a donc deux a_{ij} indépendants, un seul paramètre, y_{14} , est impliqué dans la procédure d'optimisation et la contrainte dynamique universelle est automatiquement satisfaite. Le système d'équations (2.6) se réduit à un système de deux équations à deux inconnues qui mènent à des expressions compactes pour a_{12} et a_{14} :

$$\begin{aligned} a_{12} &= 2 \frac{(2 + 3y_{14}) y_{14} m_4 - m_1}{(3y_{14} + 1)^2 m_1 m_4}, \\ a_{14} &= \frac{1}{2} (1 + y_{14})^2 \frac{3m_1 + m_4}{(3y_{14} + 1)^2 m_1 m_4}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Configuration $(2 \times m_1, 2 \times m_3)$

Dans ce cas où on a deux particules de masse m_1 et deux autres particules de masse m_3 , les symétries du problème impliquent les relations suivantes :

$$a_{13} = a_{14} = a_{23} = a_{24} \quad (2.49)$$

et

$$y_{12} = 1, \quad y_{34} = 1, \quad y_{13} = y_{14} = y_{23} = y_{24}. \quad (2.50)$$

On a donc 3 a_{ij} indépendants et un seul paramètre, y_{13} , sur lequel optimiser. La contrainte dynamique universelle se trouve automatiquement satisfaite et le système d'équations (2.6)

se réduit à un système de trois équations à trois inconnues, a_{12} , a_{34} et a_{13} , qui est suffisamment simple pour donner des expressions compactes pour les a_{ij} :

$$\begin{aligned} a_{12} &= \frac{-m_1 + (y_{13}^2 + 2y_{13}) m_3}{(1 + y_{13})^2 m_1 m_3}, \\ a_{13} &= \frac{m_1 + m_3}{4m_1 m_3}, \\ a_{24} &= \frac{(2y_{13} + 1) m_1 - y_{13}^2 m_3}{(1 + y_{13})^2 m_1 m_3}. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Configuration ($2 \times m_1, 1 \times m_3, 1 \times m_4$)

Ici nous avons deux particules de masse m_1 , une troisième particule de masse m_3 et une quatrième particule de masse m_4 . La symétrie du problème requiert les relations suivantes

$$a_{13} = a_{23}, \quad a_{14} = a_{24} \quad (2.52)$$

et

$$y_{12} = 0, \quad y_{13} = y_{23}, \quad y_{14} = y_{24}. \quad (2.53)$$

On a donc quatre a_{ij} indépendants et trois paramètres y_{ij} impliqués dans la procédure d'optimisation. La contrainte dynamique universelle est de nouveau automatiquement satisfaite. Le système d'équations (2.6) se réduit à un système de quatre équations à quatre inconnues, a_{12} , a_{13} , a_{14} et a_{34} , qui est encore trop complexe pour obtenir des expressions suffisamment simples pour les a_{ij} .

Chapitre 3

Nouvelle borne inférieure optimisée

Comme dans le chapitre précédent, nous considérons toujours le cas de systèmes à N corps gouvernés par une cinématique non relativiste avec des interactions à 2 corps invariantes par translation, c'est à dire des systèmes gouvernés par un Hamiltonien de la forme

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i<j=1}^N v^{(ij)}(\vec{r}_{ij}), \quad (3.1)$$

où m_i , \vec{r}_i , \vec{p}_i désignent respectivement la masse, le vecteur position, l'impulsion de la i ème particule. $\vec{r}_{ij} := \vec{r}_i - \vec{r}_j$. On remarquera que le potentiel $v^{(ij)}$ peut dépendre des deux particules impliquées. Dans toute la suite, lorsque nous parlerons de problème à N corps nous sous-entendrons par là des systèmes gouvernés par des Hamiltoniens du type défini par l'équation (3.1).

3.1 Méthodologie

Le point de départ de la nouvelle borne inférieure optimisée est la décomposition suivante du terme d'énergie cinétique

$$\sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} = \left(\sum_{i=1}^N b_i \vec{p}_i \right) \left(\sum_{i=1}^N \vec{p}_i \right) + \sum_{i<j=1}^N a_{ij} \vec{p}_{ij}^2, \quad (3.2)$$

où \vec{p}_{ij} est une combinaison linéaire des différentes impulsions individuelles \vec{p}_i , c'est à dire

$$\vec{p}_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^N x_{ij,k} \vec{p}_k}{2}, \quad (3.3)$$

où le facteur $1/2$ est introduit pour des raisons de convenance. En apparence, la décomposition (3.2) fait intervenir N paramètres b_i , $N(N-1)/2$ paramètres a_{ij} et, à travers les \vec{p}_{ij} , (3.3), $N(N-1)N/2$ paramètres $x_{ij,k}$. La décomposition de l'énergie cinétique du chapitre précédent, (2.2), est un cas particulier de la décomposition plus générale adoptée dans ce chapitre, (3.2), avec

$$x_{ij,i} = \frac{2}{1+y_{ij}}, \quad x_{ij,j} = -\frac{2y_{ij}}{1+y_{ij}}, \quad x_{ij,k} = 0 \quad \text{pour } k = 1, \dots, N, k \neq i, k \neq j. \quad (3.4)$$

On peut dorès et déjà affirmer que la borne inférieure qui va résulter de la décomposition (3.2) sera meilleure, ou au moins aussi bonne, que l'ancienne borne inférieure optimisée. En réalité, pour ij donné, on peut toujours, sans perte de généralité, choisir $x_{ij,i} = 1$, par une redéfinition de a_{ij} et des $x_{ij,k}$ pour $k = 1, \dots, N, k \neq i$. En imposant à \vec{p}_{ij} d'être le moment conjugué de \vec{r}_{ij} , c'est à dire en imposant les relations de commutation canonique

$$[r_{ij,k}, p_{ij,\ell}] = i\hbar\delta_{k,\ell}, \quad (3.5)$$

où $r_{ij,k}$ et $p_{ij,\ell}$ désignent respectivement la k ème composante de \vec{r}_{ij} et la ℓ ème composante de \vec{p}_{ij} , il est facile de voir que $x_{ij,j}$ doit être obligatoirement égal à -1 , $x_{ij,j} = -1$. Il s'ensuit que le nombre de paramètres $x_{ij,k}$ est de $N-2$ par paire ij donnée. Donc, contrairement aux apparences, nous avons $N(N-1)(N-2)/2$, et non $N(N-1)N/2$, paramètres $x_{ij,k}$. L'identification des deux membres de l'équation (3.2) fournit $N + N(N-1)/2$ équations, qui peuvent être utilisées pour éliminer les b_i et les a_{ij} au profit des $x_{ij,k}$. Dans la suite de ce chapitre les b_i et les a_{ij} seront considérés comme des fonctions des $x_{ij,k}$. Donc la décomposition de l'énergie cinétique (3.2) possède la propriété remarquable de faire intervenir des paramètres libres qui sont cette fois-ci au nombre de $N(N-1)(N-2)/2$. A chaque jeu de valeurs des paramètres $x_{ij,k}$ correspond une décomposition particulière de l'énergie cinétique du système. Cependant les valeurs des paramètres $x_{ij,k}$ sont soumises à la contrainte suivante : les jeux de valeurs permis pour les paramètres $x_{ij,k}$ doivent conduire à des valeurs positives pour tous les paramètres a_{ij} . Cette condition est facile à comprendre car les a_{ij} jouent le rôle d'inverses de doubles de masses réduites et par conséquent doivent être positifs. Considérons maintenant tour à tour les systèmes à 3 et à 4 corps.

3.2 Systèmes à 3 corps

La décomposition du terme d'énergie cinétique, (3.2), s'écrit dans le cas à 3 corps comme

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} = \left(\sum_{i=1}^3 b_i \vec{p}_i \right) \left(\sum_{i=1}^3 \vec{p}_i \right) + \sum_{i<j=1}^3 a_{ij} \vec{p}_{ij}^2, \quad (3.6)$$

où

$$\begin{aligned}
\vec{p}_{12} &= \frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + x_{12,3}\vec{p}_3}{2}, \\
\vec{p}_{13} &= \frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_3 + x_{13,2}\vec{p}_2}{2}, \\
\vec{p}_{23} &= \frac{\vec{p}_2 - \vec{p}_3 + x_{23,1}\vec{p}_1}{2}.
\end{aligned} \tag{3.7}$$

On voit ici qu'on a un paramètre $x_{ij,k}$ par paire, comme dans le cas de l'ancienne borne inférieure optimisée. En fait, on peut même montrer, c'est ce qu'on fera plus loin, l'équivalence des deux bornes inférieures optimisées nouvelle et ancienne dans le cas à 3 corps. En identifiant les deux membres de l'équation (3.6), on obtient un système linéaire de 6 équations à 6 inconnues, les trois a_{ij} et les trois b_i , avec les trois $x_{ij,k}$ comme paramètres

$$\begin{aligned}
b_1 + \frac{a_{12}}{4} + \frac{a_{13}}{4} + \frac{x_{23,1}^2}{4}a_{23} &= \frac{1}{2m_1}, \\
b_2 + \frac{a_{12}}{4} + \frac{x_{13,2}^2}{4}a_{13} + \frac{a_{23}}{4} &= \frac{1}{2m_2}, \\
b_3 + \frac{x_{12,3}^2}{4}a_{12} + \frac{a_{13}}{4} + \frac{a_{23}}{4} &= \frac{1}{2m_3}, \\
b_1 + b_2 - \frac{a_{12}}{2} + \frac{x_{13,2}}{2}a_{13} + \frac{x_{23,1}}{2}a_{23} &= 0, \\
b_1 + b_3 + \frac{x_{12,3}}{2}a_{12} - \frac{a_{13}}{2} - \frac{x_{23,1}}{2}a_{23} &= 0, \\
b_2 + b_3 - \frac{x_{12,3}}{2}a_{12} - \frac{x_{13,2}}{2}a_{13} - \frac{a_{23}}{2} &= 0.
\end{aligned} \tag{3.8}$$

On peut éliminer les trois b_i entre les équations précédentes pour obtenir un système linéaire de trois équations impliquant les a_{ij} seuls, avec les trois $x_{ij,k}$ comme paramètres.

$$\begin{aligned}
a_{12} + \left(\frac{1 - x_{13,2}}{2}\right)^2 a_{13} + \left(\frac{1 - x_{23,1}}{2}\right)^2 a_{23} &= \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_2}, \\
\left(\frac{1 - x_{12,3}}{2}\right)^2 a_{12} + a_{13} + \left(\frac{1 + x_{23,1}}{2}\right)^2 a_{23} &= \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_3}, \\
\left(\frac{1 + x_{12,3}}{2}\right)^2 a_{12} + \left(\frac{1 + x_{13,2}}{2}\right)^2 a_{13} + a_{23} &= \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3},
\end{aligned} \tag{3.9}$$

qu'on peut écrire sous forme matricielle comme

$$\tilde{\mathbf{D}}\mathbf{A} = \boldsymbol{\alpha}, \tag{3.10}$$

où $\tilde{\mathbf{D}}$ est une matrice carrée 3×3

$$\tilde{\mathbf{D}} = \begin{pmatrix} 1 & \left(\frac{1-x_{13,2}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1-x_{23,1}}{2}\right)^2 \\ \left(\frac{1-x_{12,3}}{2}\right)^2 & 1 & \left(\frac{1+x_{23,1}}{2}\right)^2 \\ \left(\frac{1+x_{12,3}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1+x_{13,2}}{2}\right)^2 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

\mathbf{A} et $\boldsymbol{\alpha}$ sont des matrices unicolonnes 3×1

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ a_{23} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_2} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_3} \\ \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

On résoud alors le système d'équations (3.9) ou, ce qui revient au même, on inverse la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$, (3.11), ce qui donne formellement

$$\mathbf{A} = \tilde{\mathbf{D}}^{-1}\boldsymbol{\alpha}, \quad (3.13)$$

où $\tilde{\mathbf{D}}^{-1}$ désigne l'inverse de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$. L'inversion de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ n'est pas chose aisée dans le cas général. Comme dans le cas de la décomposition de l'énergie cinétique menant à l'ancienne borne inférieure optimisée, ceci est dû au nombre relativement élevé de paramètres qui interviennent dans l'expression de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$: les trois paramètres $x_{ij,k}$ et les trois masses m_i , ce qui rend l'inversion de la matrice particulièrement ardue. De nouveau, nous n'avons pu aboutir à des expressions relativement compactes pour la matrice $\tilde{\mathbf{D}}^{-1}$ que pour des configurations de masse spéciales.

À la décomposition du terme d'énergie cinétique, (3.6), correspond la décomposition suivante de l'Hamiltonien du système H

$$\begin{aligned} H &= (b_1\vec{p}_1 + b_2\vec{p}_2 + b_3\vec{p}_3)(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3) + \\ & a_{12} \left(\frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + x_{12,3}\vec{p}_3}{2} \right)^2 + v^{(12)}(\vec{r}_{12}) \\ & a_{13} \left(\frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_3 + x_{13,2}\vec{p}_2}{2} \right)^2 + v^{(13)}(\vec{r}_{13}) \\ & a_{23} \left(\frac{\vec{p}_2 - \vec{p}_3 + x_{23,1}\vec{p}_1}{2} \right)^2 + v^{(23)}(\vec{r}_{23}) \end{aligned} \quad (3.14)$$

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

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \langle \Psi | \left(\sum_{i=1}^3 b_i \vec{p}_i \right) \left(\sum_{i=1}^3 \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle + \sum_{i < j=1}^3 \langle \Psi | H_2^{(ij)} | \Psi \rangle, \quad (3.15)$$

où $H_2^{(ij)}$ est l'Hamiltonien à deux corps défini par

$$H_2^{(ij)} = a_{ij}\vec{p}_{ij}^2 + v^{(ij)}(\vec{r}_{ij}), \quad (3.16)$$

avec les impulsions \vec{p}_{ij} définies par l'équation (3.7). L'invariance par translation de $|\Psi\rangle$

$$\sum_{i=1}^3 \vec{p}_i |\Psi\rangle = 0, \quad (3.17)$$

implique que $\langle \Psi | \left(\sum_{i=1}^3 b_i \vec{p}_i \right) \left(\sum_{i=1}^3 \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle = 0$. Par conséquent

$$E = \sum_{i<j=1}^3 \langle \Psi | H_2^{(ij)} | \Psi \rangle. \quad (3.18)$$

Si $E_2^{(ij)}(a_{ij})$ désigne l'état fondamental de l'hamiltonien à deux corps défini par l'équation (3.16), alors en vertu du principe variationnel $\langle \Psi | H_2^{(ij)} | \Psi \rangle \geq E_2^{(ij)}(a_{ij})$ et par conséquent

$$E \geq \sum_{i<j=1}^3 E_2^{(ij)}(a_{ij}\{x_{kl,p}\}). \quad (3.19)$$

Comme les a_{ij} sont des fonctions des $x_{ij,k}$, la borne inférieure obtenue (3.19) dépend des valeurs des paramètres $x_{ij,k}$, chaque jeu de valeurs pour les paramètres $x_{ij,k}$ correspondant à une borne inférieure (3.19) pour l'énergie E de l'état fondamental. Evidemment, la meilleure de ces bornes inférieures est celle qui correspond au jeu de valeurs des paramètres $x_{ij,k}$ qui maximisent $\sum_{i<j=1}^3 E_2^{(ij)}(a_{ij})$. Cette borne inférieure qui résulte également d'un processus d'optimisation est appelée nouvelle borne inférieure optimisée (pour le système à trois corps) et est notée E_{nolb} . Donc

$$E_{nolb} = \max_{\{x_{kl,p}\}} \sum_{i<j=1}^3 E_2^{(ij)}(a_{ij}\{x_{kl,p}\}). \quad (3.20)$$

Avant d'aller plus loin, montrons maintenant l'égalité de l'ancienne borne inférieure optimisée et de la nouvelle borne inférieure optimisée. Il y'a d'abord une chose qui rend cette égalité plausible. C'est que le nombre de paramètres sur lesquels on optimise est le même dans les deux cas (trois paramètres y_{ij} et également trois paramètres $x_{ij,k}$). Considérons la décomposition de l'énergie cinétique correspondant à la nouvelle borne inférieure optimisée, (3.6). Nous pouvons toujours écrire

$$\vec{p}_{12}^2 = (\vec{p}_{12} + \alpha_{12}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3))^2 - (2\alpha_{12}\vec{p}_{12} + \alpha_{12}^2(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3))(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3), \quad (3.21)$$

$$\vec{p}_{13}^2 = (\vec{p}_{13} + \alpha_{13}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3))^2 - (2\alpha_{13}\vec{p}_{12} + \alpha_{13}^2(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3))(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3), \quad (3.22)$$

$$\vec{p}_{23}^2 = (\vec{p}_{23} + \alpha_{23}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3))^2 - (2\alpha_{23}\vec{p}_{12} + \alpha_{23}^2(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3))(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3), \quad (3.23)$$

où les α_{ij} sont des coefficients réels, qui seront choisis plus tard pour les besoins de cause. Il est alors clair qu'on peut réécrire la décomposition de l'énergie cinétique correspondant à la nouvelle borne inférieure optimisée, (3.6), par une redéfinition appropriée des b_i comme

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} = \left(\sum_{i=1}^3 b_i \vec{p}_i \right) \left(\sum_{i=1}^3 \vec{p}_i \right) + \sum_{i < j=1}^3 \alpha_{ij} \vec{p}'_{ij}, \quad (3.24)$$

avec les \vec{p}'_{ij} donnés par

$$\vec{p}'_{12} = \left(\frac{1}{2} + \alpha_{12} \right) \vec{p}_1 + \left(-\frac{1}{2} + \alpha_{12} \right) \vec{p}_2 + \left(\frac{x_{12,3}}{2} + \alpha_{12} \right) \vec{p}_3, \quad (3.25)$$

$$\vec{p}'_{13} = \left(\frac{1}{2} + \alpha_{13} \right) \vec{p}_1 + \left(\frac{x_{13,2}}{2} + \alpha_{13} \right) \vec{p}_2 + \left(-\frac{1}{2} + \alpha_{13} \right) \vec{p}_3, \quad (3.26)$$

$$\vec{p}'_{23} = \left(\frac{x_{23,1}}{2} + \alpha_{23} \right) \vec{p}_1 + \left(\frac{1}{2} + \alpha_{23} \right) \vec{p}_2 + \left(-\frac{1}{2} + \alpha_{23} \right) \vec{p}_3. \quad (3.27)$$

Il est clair maintenant que nous pouvons donner à la décomposition de l'énergie cinétique correspondant à la nouvelle borne inférieure optimisée la même apparence que celle correspondant à l'ancienne borne inférieure optimisée par un choix convenable des coefficients α_{ij} . Plus explicitement, si on choisit

$$\alpha_{12} = -\frac{x_{12,3}}{2}, \quad \alpha_{13} = -\frac{x_{13,2}}{2}, \quad \alpha_{23} = -\frac{x_{23,1}}{2}, \quad (3.28)$$

les coefficients de \vec{p}_3 , \vec{p}_2 , \vec{p}_1 dans respectivement \vec{p}'_{12} , \vec{p}'_{13} , \vec{p}'_{23} s'annulent et \vec{p}'_{12} , \vec{p}'_{13} et \vec{p}'_{23} peuvent pour ce choix des α_{ij} , (3.28), s'écrire comme

$$\vec{p}'_{12} = \left(\frac{\vec{p}_1 - \left(\frac{1+x_{12,3}}{1-x_{12,3}} \right) \vec{p}_2}{\left(\frac{2}{1-x_{12,3}} \right)} \right), \quad (3.29)$$

$$\vec{p}'_{13} = \left(\frac{\vec{p}_1 - \left(\frac{1+x_{13,2}}{1-x_{13,2}} \right) \vec{p}_3}{\left(\frac{2}{1-x_{13,2}} \right)} \right), \quad (3.30)$$

$$\vec{p}'_{23} = \left(\frac{\vec{p}_2 - \left(\frac{1+x_{23,1}}{1-x_{23,1}} \right) \vec{p}_3}{\left(\frac{2}{1-x_{23,1}} \right)} \right), \quad (3.31)$$

qui sont de la forme

$$\begin{aligned}\vec{p}'_{12} &= \frac{\vec{p}_1 - y_{12}\vec{p}_2}{1 + y_{12}}, \\ \vec{p}'_{13} &= \frac{\vec{p}_1 - y_{13}\vec{p}_3}{1 + y_{13}}, \\ \vec{p}'_{23} &= \frac{\vec{p}_2 - y_{23}\vec{p}_3}{1 + y_{23}},\end{aligned}\tag{3.32}$$

avec

$$\begin{aligned}y_{12} &= \frac{1 + x_{12,3}}{1 - x_{12,3}}, \\ y_{13} &= \frac{1 + x_{13,2}}{1 - x_{13,2}}, \\ y_{23} &= \frac{1 + x_{23,1}}{1 - x_{23,1}}.\end{aligned}\tag{3.33}$$

Donc, dans le cas à trois corps, les deux decompositions de l'énergie cinétique correspondant à l'ancienne borne inférieure optimisée, (2.4), et à la nouvelle borne inférieure optimisée, (3.6), sont bien équivalentes, avec la correspondance entre les paramètres y_{ij} et $x_{ij,k}$ donnée par les relations précédentes, (3.33). Il s'ensuit l'égalité des bornes inférieures optimisées ancienne et nouvelle dans le cas à 3 corps.

3.2.1 Contrainte dynamique universelle

Lorsque la nouvelle borne inférieure optimisée est atteinte (3.20), les valeurs des paramètres $x_{ij,k}$ correspondants annulent les dérivées premières de $\sum_{i<j=1}^3 E_2^{(ij)}(a_{ij})$ par rapport aux $x_{ij,k}$. Donc

$$\frac{\partial \sum_{i<j=1}^3 E_2^{(ij)}(a_{ij})}{\partial x_{kl,p}} = \sum_{i<j=1}^3 \frac{\partial E_2^{(ij)}(a_{ij})}{\partial a_{ij}} \frac{\partial a_{ij}}{\partial x_{kl,p}} = 0.\tag{3.34}$$

Tout le raisonnement de la sous-section 2.1 du chapitre 2 peut être répété point par point sauf que les paramètres y_{ij} sont remplacés par les paramètres $x_{ij,k}$. On arrive à la conclusion que la contrainte dynamique universelle s'obtient en annulant le déterminant de la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$ définie par

$$\tilde{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{x_{13,2}-1}{2} & \frac{x_{23,1}-1}{2} \\ \frac{x_{12,3}-1}{2} & 0 & \frac{x_{23,1}+1}{2} \\ \frac{x_{12,3}+1}{2} & \frac{x_{13,2}+1}{2} & 0 \end{pmatrix},\tag{3.35}$$

$$\begin{vmatrix} 0 & \frac{x_{13,2}-1}{2} & \frac{x_{23,1}-1}{2} \\ \frac{x_{12,3}-1}{2} & 0 & \frac{x_{23,1}+1}{2} \\ \frac{x_{12,3}+1}{2} & \frac{x_{13,2}+1}{2} & 0 \end{vmatrix} = 0, \quad (3.36)$$

d'où la contrainte dynamique universelle pour la nouvelle borne inférieure optimisée dans des systèmes à trois corps

$$x_{23,1} = \frac{x_{13,2} - x_{12,3}}{1 - x_{12,3}x_{13,2}}. \quad (3.37)$$

En fait, pour déterminer la contrainte dynamique universelle on aurait pu faire autrement en utilisant d'une part l'expression de la contrainte dynamique universelle pour l'ancienne borne inférieure optimisée à trois corps, (2.24), et d'autre part la correspondance entre les paramètres y_{ij} et $x_{ij,k}$, (3.33). En appliquant cette procédure, on obtient, comme il se doit, la relation (3.37).

3.3 systèmes à 4 corps

En explicitant la décomposition du terme d'énergie cinétique (3.2) dans ce cas, on arrive à

$$\begin{aligned} \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\vec{p}_3^2}{2m_3} + \frac{\vec{p}_4^2}{2m_4} &= (b_1\vec{p}_1 + b_2\vec{p}_2 + b_3\vec{p}_3 + b_4\vec{p}_4)(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4) + \\ &a_{12} \left(\frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + x_{12,3}\vec{p}_3 + x_{12,4}\vec{p}_4}{2} \right)^2 + \\ &a_{13} \left(\frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_3 + x_{13,2}\vec{p}_2 + x_{13,4}\vec{p}_4}{2} \right)^2 + \\ &a_{14} \left(\frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_4 + x_{14,2}\vec{p}_2 + x_{14,3}\vec{p}_3}{2} \right)^2 + \\ &a_{23} \left(\frac{\vec{p}_2 - \vec{p}_3 + x_{23,1}\vec{p}_1 + x_{23,4}\vec{p}_4}{2} \right)^2 + \\ &a_{24} \left(\frac{\vec{p}_2 - \vec{p}_4 + x_{24,1}\vec{p}_1 + x_{24,3}\vec{p}_3}{2} \right)^2 + \\ &a_{34} \left(\frac{\vec{p}_3 - \vec{p}_4 + x_{34,1}\vec{p}_1 + x_{34,2}\vec{p}_2}{2} \right)^2 + . \end{aligned} \quad (3.38)$$

En identifiant les deux membres de l'équation (3.38), on obtient un système linéaire de 10 équations à 10 inconnues, les six a_{ij} et les quatre b_i , avec les douze $x_{ij,k}$ comme paramètres

$$\begin{aligned}
b_1 + \frac{a_{12}}{4} + \frac{a_{13}}{4} + \frac{a_{14}}{4} + \frac{x_{23,1}^2}{4}a_{23} + \frac{x_{24,1}}{4}a_{24} + \frac{x_{34,1}^2}{4}a_{34} &= \frac{1}{2m_1}, \\
b_2 + \frac{a_{12}}{4} + \frac{x_{13,2}^2}{4}a_{13} + \frac{x_{14,2}^2}{4}a_{14} + \frac{a_{23}}{4} + \frac{a_{24}}{4} + \frac{x_{34,2}^2}{4}a_{34} &= \frac{1}{2m_2}, \\
b_3 + \frac{x_{12,3}^2}{4}a_{12} + \frac{a_{13}}{4} + \frac{x_{14,3}^2}{4}a_{14} + \frac{a_{23}}{4} + \frac{x_{24,3}^2}{4}a_{24} + \frac{a_{34}}{4} &= \frac{1}{2m_3}, \\
b_4 + \frac{x_{12,4}^2}{4}a_{12} + \frac{x_{13,4}^2}{4}a_{13} + \frac{a_{14}}{4} + \frac{x_{23,4}^2}{4}a_{23} + \frac{a_{24}}{4} + \frac{a_{34}}{4} &= \frac{1}{2m_3}, \\
b_1 + b_2 - \frac{a_{12}}{2} + \frac{x_{13,2}}{2}a_{13} + \frac{x_{14,2}}{2}a_{14} + \frac{x_{23,1}}{2}a_{23} + \frac{x_{24,1}}{2}a_{24} + \frac{x_{34,1}x_{34,2}}{2}a_{34} &= 0, \\
b_1 + b_3 + \frac{x_{12,3}}{2}a_{12} - \frac{a_{13}}{2} + \frac{x_{14,3}}{2}a_{14} - \frac{x_{23,1}}{2}a_{23} + \frac{x_{24,1}x_{24,3}}{2}a_{24} + \frac{x_{34,1}}{2}a_{34} &= 0, \\
b_1 + b_4 + \frac{x_{12,4}}{2}a_{12} + \frac{x_{13,4}}{2}a_{13} - \frac{a_{14}}{2} + \frac{x_{23,1}x_{23,4}}{2}a_{23} - \frac{x_{24,1}}{2}a_{24} - \frac{x_{34,1}}{2}a_{34} &= 0, \\
b_2 + b_3 - \frac{x_{12,3}}{2}a_{12} - \frac{x_{13,2}}{2}a_{13} + \frac{x_{14,2}x_{14,3}}{2}a_{14} - \frac{a_{23}}{2} + \frac{x_{24,3}}{2}a_{24} + \frac{x_{34,2}}{2}a_{34} &= 0, \\
b_2 + b_4 - \frac{x_{12,4}}{2}a_{12} + \frac{x_{13,2}x_{13,4}}{2}a_{13} - \frac{x_{14,2}}{2}a_{14} + \frac{x_{23,4}}{2}a_{23} - \frac{a_{24}}{2} - \frac{x_{34,2}}{2}a_{34} &= 0, \\
b_3 + b_4 + \frac{x_{12,3}x_{12,4}}{2}a_{12} - \frac{x_{13,4}}{2}a_{13} - \frac{x_{14,3}}{2}a_{14} - \frac{x_{23,4}}{2}a_{23} - \frac{x_{24,3}}{2}a_{24} - \frac{a_{34}}{2} &= 0. \quad (3.39)
\end{aligned}$$

On peut éliminer les b entre les équations (3.39). On obtient alors un système linéaire de six équations impliquant uniquement les six a_{ij} , avec les $x_{ij,k}$ comme paramètres

$$\begin{aligned}
a_{12} + \left(\frac{1-x_{13,2}}{2}\right)^2 a_{13} + \left(\frac{1-x_{14,2}}{2}\right)^2 a_{14} + \left(\frac{1-x_{23,1}}{2}\right)^2 a_{23} + \left(\frac{1-x_{24,1}}{2}\right)^2 a_{24} + \left(\frac{x_{34,1}-x_{34,2}}{2}\right)^2 a_{34} &= \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_2}, \\
\left(\frac{1-x_{12,3}}{2}\right)^2 a_{12} + a_{13} + \left(\frac{1-x_{14,3}}{2}\right)^2 a_{14} + \left(\frac{1+x_{23,1}}{2}\right)^2 a_{23} + \left(\frac{x_{24,1}-x_{24,3}}{2}\right)^2 a_{24} + \left(\frac{1-x_{34,1}}{2}\right)^2 a_{34} &= \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_3}, \\
\left(\frac{1-x_{12,4}}{2}\right)^2 a_{12} + \left(\frac{1-x_{13,4}}{2}\right)^2 a_{13} + a_{14} + \left(\frac{x_{23,1}-x_{23,4}}{2}\right)^2 a_{23} + \left(\frac{1+x_{24,1}}{2}\right)^2 a_{24} + \left(\frac{1+x_{34,1}}{2}\right)^2 a_{34} &= \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_4}, \\
\left(\frac{1+x_{12,3}}{2}\right)^2 a_{12} + \left(\frac{1+x_{13,2}}{2}\right)^2 a_{13} + \left(\frac{x_{14,2}-x_{14,3}}{2}\right)^2 a_{14} + a_{23} + \left(\frac{1-x_{24,3}}{2}\right)^2 a_{24} + \left(\frac{1-x_{34,2}}{2}\right)^2 a_{34} &= \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3}, \\
\left(\frac{1+x_{12,4}}{2}\right)^2 a_{12} + \left(\frac{x_{13,2}-x_{13,4}}{2}\right)^2 a_{13} + \left(\frac{1+x_{14,2}}{2}\right)^2 a_{14} + \left(\frac{1-x_{23,4}}{2}\right)^2 a_{23} + a_{24} + \left(\frac{1+x_{34,2}}{2}\right)^2 a_{34} &= \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_4}, \\
\left(\frac{x_{12,3}-x_{12,4}}{2}\right)^2 a_{12} + \left(\frac{1+x_{13,4}}{2}\right)^2 a_{13} + \left(\frac{1+x_{14,3}}{2}\right)^2 a_{14} + \left(\frac{1+x_{23,4}}{2}\right)^2 a_{23} + \left(\frac{1+x_{24,3}}{2}\right)^2 a_{24} + a_{34} &= \frac{1}{2m_3} + \frac{1}{2m_4}. \quad (3.40)
\end{aligned}$$

Le système d'équations (3.40) peut être écrit sous forme matricielle

$$\tilde{\mathbf{D}}\mathbf{A} = \boldsymbol{\alpha}, \quad (3.41)$$

où $\tilde{\mathbf{D}}$ est une matrice carrée 6×6 donnée par

$$\tilde{\mathbf{D}} = \begin{pmatrix} 1 & \left(\frac{1-x_{13,2}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1-x_{14,2}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1-x_{23,1}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1-x_{24,1}}{2}\right)^2 & \left(\frac{x_{34,1}-x_{34,2}}{2}\right)^2 \\ \left(\frac{1-x_{12,3}}{2}\right)^2 & 1 & \left(\frac{1-x_{14,3}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1+x_{23,1}}{2}\right)^2 & \left(\frac{x_{24,1}-x_{24,3}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1-x_{34,1}}{2}\right)^2 \\ \left(\frac{1-x_{12,4}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1-x_{13,4}}{2}\right)^2 & 1 & \left(\frac{x_{23,1}-x_{23,4}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1+x_{24,1}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1+x_{34,1}}{2}\right)^2 \\ \left(\frac{1+x_{12,3}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1+x_{13,2}}{2}\right)^2 & \left(\frac{x_{14,2}-x_{14,3}}{2}\right)^2 & 1 & \left(\frac{1-x_{24,3}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1-x_{34,2}}{2}\right)^2 \\ \left(\frac{1+x_{12,4}}{2}\right)^2 & \left(\frac{x_{13,2}-x_{13,4}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1+x_{14,2}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1-x_{23,4}}{2}\right)^2 & 1 & \left(\frac{1+x_{34,2}}{2}\right)^2 \\ \left(\frac{x_{12,3}-x_{12,4}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1+x_{13,4}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1+x_{14,3}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1+x_{23,4}}{2}\right)^2 & \left(\frac{1+x_{24,3}}{2}\right)^2 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

\mathbf{A} et α sont des matrices unicolonnes 6×1

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ a_{14} \\ a_{23} \\ a_{24} \\ a_{34} \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_2} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_3} \\ \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_4} \\ \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \\ \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_4} \\ \frac{1}{2m_3} + \frac{1}{2m_4} \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

On a à résoudre le système d'équations (3.40) ou, ce qui revient au même, on a à inverser la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$, (3.42), ce qui donne formellement

$$\mathbf{A} = \tilde{\mathbf{D}}^{-1}\alpha, \quad (3.44)$$

où $\tilde{\mathbf{D}}^{-1}$ désigne l'inverse de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$, qui dans le cas de systèmes à 4 corps est une matrice 6×6 . Le nombre de paramètres intervenant dans l'inversion de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ est encore plus élevé que dans tous les cas rencontrés jusqu'ici : 16 paramètres au total (les douze $x_{ij,k}$ et les quatre masses m_i), ce qui rend la l'inversion de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ encore plus difficile dans le cas général. L'augmentation de la dimension de la matrice rend aussi l'inversion plus difficile, mais l'essentiel de la difficulté provient de la présence des paramètres. Pour preuve, si on donne aux paramètres des valeurs précises, l'inversion de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ devient une chose très aisée. Comme dans les cas précédents, nous n'avons pu aboutir à des expressions relativement compactes pour la matrice $\tilde{\mathbf{D}}^{-1}$ que pour certaines configurations de masse.

A la décomposition du terme d'énergie cinétique, (3.38), correspond la décomposition suivante de l'Hamiltonien du système H

$$H = \left(\sum_{i=1}^4 b_i \vec{p}_i \right) \left(\sum_{i=1}^4 \vec{p}_i \right) + \sum_{i < j=1}^4 a_{ij} \left(\sum_{k=1}^4 \frac{x_{ij,k} \vec{p}_k}{2} \right)^2 + v^{(ij)}(\vec{r}_{ij}). \quad (3.45)$$

Soit $|\Psi\rangle$ l'état fondamental normalisé du système. Alors

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \langle \Psi | \left(\sum_{i=1}^3 b_i \vec{p}_i \right) \left(\sum_{i=1}^3 \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle + \sum_{i<j=1}^3 \langle \Psi | H_2^{(ij)} | \Psi \rangle, \quad (3.46)$$

où $H_2^{(ij)}$ est l'Hamiltonien à deux corps défini par (3.16). comme $|\Psi\rangle$ est invariant par translation, il s'ensuit que

$$\sum_{i=1}^4 \vec{p}_i | \Psi \rangle = 0, \quad (3.47)$$

et par conséquent $\langle \Psi | \left(\sum_{i=1}^3 b_i \vec{p}_i \right) \left(\sum_{i=1}^4 \vec{p}_i \right) | \Psi \rangle = 0$. Il en résulte que

$$E = \sum_{i<j=1}^4 \langle \Psi | H_2^{(ij)} | \Psi \rangle. \quad (3.48)$$

Si $E_2^{(ij)}(a_{ij})$ désigne l'état fondamental de l'hamiltonien à deux corps défini par l'équation (3.16), alors en vertu du principe variationnel $\langle \Psi | H_2^{(ij)} | \Psi \rangle \geq E_2^{(ij)}(a_{ij})$ et par conséquent

$$E \geq \sum_{i<j=1}^4 E_2^{(ij)}(a_{ij}\{x_{kl,p}\}). \quad (3.49)$$

Comme les a_{ij} sont des fonctions des $x_{ij,k}$, la borne inférieure obtenue (3.49) dépend des valeurs des paramètres $x_{ij,k}$. Donc à chaque jeu de valeurs pour les paramètres $x_{ij,k}$ correspond une borne inférieure (3.49) pour l'énergie E de l'état fondamental. La meilleure de ces bornes inférieures, c'est à dire celle qui est la plus proche de l'énergie de l'état fondamental du système, ou dit autrement, celle qui constitue la meilleure approximation de l'énergie de l'état fondamental du système est celle qui correspond au jeu de valeurs des paramètres $x_{ij,k}$ qui maximisent $\sum_{i<j=1}^4 E_2^{(ij)}(a_{ij})$. Cette borne inférieure qui résulte d'un processus d'optimisation et qui, historiquement, a été proposée comme une amélioration de l'ancienne borne inférieure optimisée dans le cas à quatre corps (on a déjà vu que les deux bornes inférieures optimisées sont identiques dans le cas de systèmes à trois corps) est appelée nouvelle borne inférieure optimisée et est notée E_{nolb} . Donc

$$E_{nolb} = \max_{\{x_{kl,p}\}} \sum_{i<j=1}^4 E_2^{(ij)}(a_{ij}\{x_{kl,p}\}). \quad (3.50)$$

3.3.1 Contraintes dynamiques universelles

Lorsque la nouvelle borne inférieure optimisée est atteinte (3.50), les valeurs des paramètres $x_{ij,k}$ correspondants annulent les dérivées premières de $\sum_{i<j=1}^4 E_2^{(ij)}(a_{ij})$ par rapport aux $x_{ij,k}$. Donc, pour un $x_{kl,p}$ donné

$$\frac{\partial \sum_{i<j=1}^4 E_2^{(ij)}(a_{ij})}{\partial x_{kl,p}} = \sum_{i<j=1}^4 \frac{\partial E_2^{(ij)}(a_{ij})}{\partial a_{ij}} \frac{\partial a_{ij}}{\partial x_{kl,p}} = 0. \quad (3.51)$$

Donc on obtient de cette manière un système de 12 équations, qu'on peut interpréter comme un système linéaire homogène d'inconnues $\frac{\partial E_2^{(ij)}(a_{ij})}{\partial a_{ij}}$, soit 6 inconnues (autant d'inconnues que de a_{ij}). Il n'y'a aucune raison particulière, qui fasse que les inconnues, les $\frac{\partial E_2^{(ij)}(a_{ij})}{\partial a_{ij}}$, soient toutes nulles, ce qui signifie que le système linéaire homogène admet des solutions autres que la solution triviale, ce qui implique que la matrice associée au système linéaire homogène doit être de rang 5 au maximum. La matrice associée au système linéaire, qu'on notera comme dans les cas précédents, rencontrés dans ce chapitre et le chapitre précédent, par $\tilde{\mathbf{B}}$ est cette fois-ci une matrice rectangulaire 6×12 , d'éléments de matrice $\frac{\partial a_{ij}}{\partial x_{kl,p}}$, où ij correspond à l'indice de ligne et kl, p correspond à l'indice de colonne. Il y'a deux fois plus de colonnes que de lignes, car dans le cas à quatre corps à chaque paire de particules ij sont associés deux paramètres $x_{ij,k}$. La condition de rang sur la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$ signifie que toute matrice carrée 6×6 extraite de la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$ en sélectionnant 6 parmi ses 12 colonnes doit être de déterminant nul. Il est très clair que cette condition de rang est beaucoup plus contraignante que la condition de déterminant nul ¹ rencontrée précédemment et va déboucher sur plusieurs relations, contre une seule relation dans les cas précédents, entre les valeurs des paramètres correspondant à la nouvelle borne inférieure optimisée. Le nombre de relations entre les valeurs des paramètres correspondants à la nouvelle borne inférieure optimisée est égal à la différence entre le nombre de colonnes et le nombre de lignes de la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$ augmenté d'un unité. Comme la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$ est une matrice 6×12 , on s'attend donc à obtenir $7 (= 12 - 6 + 1)$ relations entre les valeurs des paramètres $x_{ij,k}$ correspondant à la nouvelle borne inférieure optimisée. Les remarques concernant la nature dynamique des relations entre les paramètres $x_{ij,k}$ et leur indépendance de la forme particulière du potentiel d'interaction à deux corps restent vraies, ce qui justifie l'appellation de contraintes dynamiques universelles employée pour désigner ces relations. La connaissance des contraintes dynamiques universelles en plus de son grand intérêt théorique a aussi un intérêt indiscutable sur le plan pratique. Cette connaissance permet de réduire le nombre de paramètres du processus d'optimisation à 5, au lieu de 12

¹Il vaut la peine de noter que la condition de déterminant nul peut être considérée comme un cas particulier de condition de rang. En effet, imposer la condition de déterminant nul à une matrice carrée $n \times n$ n'est en fait rien d'autre que d'imposer à la matrice considérée d'être de rang $n - 1$.

paramètres si on ne tient pas compte des contraintes dynamiques universelles. Ceci peut mener à une simplification spectaculaire des calculs, surtout si on a à l'esprit que nous sommes confrontés à des problèmes d'optimisation non linéaire. Encore une fois répétons qu'il n'est pas faux de ne pas tenir des contraintes dynamiques universelles, mais ceci peut mener à de grandes complications calculatoires. Pour résumer, il n'est pas obligatoire, mais très fortement recommandé de tenir compte des contraintes dynamiques universelles. Nous allons maintenant nous atteler au calcul de ces contraintes dynamiques universelles. Encore une fois et contrairement aux apparences, la connaissance des expressions détaillées des a_{ij} n'est pas nécessaire pour accéder aux contraintes dynamiques universelles. En partant de la relation (3.41), en dérivant les deux membres de la relation par rapport aux $x_{ij,k}$ et en remarquant que α est indépendant des paramètres $x_{ij,k}$, on arrive après des manipulations en tout point analogues à celles des sous-sections 2.1 et 3.1 du chapitre 2 à la relation

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_{kl,p}} = -\tilde{\mathbf{D}}^{-1} \frac{\partial \tilde{\mathbf{D}}}{\partial x_{kl,p}} \mathbf{A}. \quad (3.52)$$

L'inspection de l'expression explicite de la matrice carrée 6×6 $\tilde{\mathbf{D}}$, montre que la colonne correspondant l'indice kl ne dépend que des paramètres $x_{kl,p}$. Comme à chaque paire kl correspond deux paramètres, ceci signifie que chaque paramètre est présent uniquement dans une et une seule colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ et que les paramètres se regroupent par deux, chaque colonne contenant deux paramètres. Il s'ensuit que la colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$ correspondant à l'indice kl, p se présente sous la forme de moins le produit de l'inverse de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ par l'unique colonne non nulle de $\frac{\partial \tilde{\mathbf{D}}}{\partial x_{kl,p}}$ multipliée par a_{kl} . Par conséquent la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$ est moins le produit de l'inverse de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ par une matrice rectangulaire 6×12 $\tilde{\mathbf{M}}'$

$$\tilde{\mathbf{B}} = -\tilde{\mathbf{D}}^{-1} \tilde{\mathbf{M}}', \quad (3.53)$$

Imposer à la matrice rectangulaire 6×12 $\tilde{\mathbf{B}}$ d'être de rang 5 au plus est équivalent à imposer la même condition de rang à la matrice rectangulaire 6×12 $\tilde{\mathbf{M}}'$ construite à partir de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ par la procédure suivante : prendre l'unique colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ qui dépend du paramètre $x_{kl,p}$, la dériver par rapport à ce dernier et ensuite le multiplier par a_{kl} . La colonne obtenue de cette façon n'est autre que la colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{M}}'$ correspondant à l'indice de colonne kl, p . En faisant usage des propriétés des déterminants, [72], on peut voir que le déterminant d'une matrice carrée 6×6 extraite de la matrice $\tilde{\mathbf{M}}'$ en sélectionnant 6 de ses colonnes, peut se mettre sous la forme d'un produit de 6 facteurs a_{ij} , pas nécessairement tous différents, et du déterminant de la même matrice où tous les a_{ij} sont formellement posés égaux à 1. Il s'ensuit que la condition de rang sur la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$ est équivalente à la même condition de rang sur une matrice rectangulaire 6×12 encore plus simple $\tilde{\mathbf{M}}$, construite à partir de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ de la façon suivante : on considère l'unique colonne de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}$ qui dépend d'un paramètre donné $x_{kl,p}$ et on la dérive

par rapport au paramètre en question. On répète ensuite la procédure pour chacun des 12 paramètres $x_{k\ell,p}$. On obtient ainsi de cette manière les 12 colonnes de la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$. On peut toujours organiser les colonnes de la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$ de telle manière que ce soit l'indice p qui varie en premier, puis l'indice j puis l'indice i . Par exemple 12, 3 correspond à la première colonne, 12, 4 correspond à la deuxième colonne, 13, 2 correspond à la troisième colonne, etc.... Avant d'aller plus loin il est commode d'adopter la notation suggestive suivante pour les paramètres $x_{ij,k}$, introduite dans les références [4, 17],

$$\begin{aligned} x_{12,3} &=: c_3, & x_{12,4} &=: c_4, & x_{13,2} &=: d_2, & x_{13,4} &=: d_4, \\ x_{14,2} &=: e_2, & x_{14,3} &=: e_3, & x_{23,1} &=: f_1, & x_{23,4} &=: f_4, \\ x_{24,1} &=: g_1, & x_{24,3} &=: g_3, & x_{34,1} &=: h_1, & x_{34,2} &=: h_2. \end{aligned} \quad (3.54)$$

La construction de la matrice $\tilde{\mathbf{M}}$ nous conduit à

$$\tilde{\mathbf{M}} = \frac{1}{2} (C D E F G H), \quad (3.55)$$

avec C, D, E, F, G, H des matrices 6×2 définies par [4, 17]

$$\begin{aligned} C &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ c_3 - 1 & 0 \\ 0 & c_4 - 1 \\ c_3 + 1 & 0 \\ 0 & c_4 + 1 \\ c_3 - c_4 & c_4 - c_3 \end{pmatrix}, & D &= \begin{pmatrix} d_2 - 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & d_4 - 1 \\ d_2 + 1 & 0 \\ d_2 - d_4 & d_4 - d_2 \\ 0 & d_4 + 1 \end{pmatrix}, & E &= \begin{pmatrix} e_2 - 1 & 0 \\ 0 & e_3 - 1 \\ 0 & 0 \\ e_2 - e_3 & e_3 - e_2 \\ e_2 + 1 & 0 \\ 0 & e_3 + 1 \end{pmatrix}, \\ F &= \begin{pmatrix} f_1 - 1 & 0 \\ f_1 + 1 & 0 \\ f_1 - f_4 & f_4 - f_1 \\ 0 & 0 \\ 0 & f_4 - 1 \\ 0 & f_4 + 1 \end{pmatrix}, & G &= \begin{pmatrix} g_1 - 1 & 0 \\ g_1 - g_3 & g_3 - g_1 \\ g_1 + 1 & 0 \\ 0 & g_3 - 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & g_3 + 1 \end{pmatrix}, & H &= \begin{pmatrix} h_1 - h_2 & h_2 - h_1 \\ h_1 - 1 & 0 \\ h_1 + 1 & 0 \\ 0 & h_2 - 1 \\ 0 & h_2 + 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Pour dériver les contraintes dynamiques universelles, nous allons, comme on l'a déjà fait pour les notations adoptées ci-dessus, au lieu de la méthode plutôt pédestre de la référence [15] suivre la méthode plus élégante exposée dans les références [4, 17], avec la recette proposée et les critères de discrimination des solutions. Il faut d'abord se décider pour un choix donné de 5 paramètres indépendants. Les contraintes dynamiques universelles consisteront alors à exprimer les 7 paramètres restants en fonction des 5 paramètres indépendants. Il vaut la peine de noter qu'il existe une multitude de choix possibles pour les paramètres indépendants. Notre choix va se porter sur c_3, c_4, d_2, d_4 et e_2 comme paramètres indépendants. Donc les contraintes dynamiques universelles consisteront précisément à exprimer

les paramètres $e_3, f_1, f_4, g_1, g_3, h_1$ et h_2 comme des fonctions des paramètres c_3, c_4, d_2, d_4 et e_2 . Pour déterminer l'expression de e_3 considérons la matrice carrée 6×6 (CDE), calculons son déterminant

$$|CDE| = (c_3 - c_4 - d_2 + c_4d_2 + d_4 - c_3d_4 + e_2 - c_3e_2 - d_4e_2 + c_3d_4e_2 - e_3 + c_4e_3 + d_2e_3 - c_4d_2e_3) \\ (-4 - c_3 - c_4 - d_2 + 2c_3d_2 - c_4d_2 - d_4 - c_3d_4 - e_2 - c_3e_2 + 2c_4e_2 - d_4e_2 + c_3d_4e_2 - e_3 - c_4e_3 - d_2e_3 + c_4d_2e_3 + 2d_4e_3), \quad (3.57)$$

et imposons sa nullité, ce qui donne deux solutions possibles pour e_3 en termes de c_3, c_4, d_2, d_4 et e_2 . Une seule des deux solutions est conforme aux exigences de symétrie- par exemple les 12 paramètres doivent être tous nuls lorsque une seule masse est impliquée. En effet, à cause de la présence du -4 le facteur

$$(-4 - c_3 - c_4 - d_2 + 2c_3d_2 - c_4d_2 - d_4 - c_3d_4 - e_2 - c_3e_2 + 2c_4e_2 - d_4e_2 + c_3d_4e_2 - e_3 - c_4e_3 - d_2e_3 + c_4d_2e_3 + 2d_4e_3) \quad (3.58)$$

ne peut pas s'annuler dans le cas de masses toutes égales. Par contre, le facteur

$$(c_3 - c_4 - d_2 + c_4d_2 + d_4 - c_3d_4 + e_2 - c_3e_2 - d_4e_2 + c_3d_4e_2 - e_3 + c_4e_3 + d_2e_3 - c_4d_2e_3) \quad (3.59)$$

s'annule dans le cas de masses toutes égales, d'où l'expression de la première contrainte dynamique universelle

$$e_3 = \frac{c_3 - c_4 - d_2 + d_4 + e_2 + c_4d_2 - c_3d_4 - c_3e_2 - d_4e_2 + c_3d_4e_2}{1 - c_4 - d_2 + c_4d_2}. \quad (3.60)$$

On obtient deux autres contraintes dynamiques universelles en considérant les deux matrices 6×6 (CEF) et (DEF). En imposant

$$|CEF| = 0, \quad |DEF| = 0, \quad (3.61)$$

et en tenant compte de l'expression de e_3 , (3.60), on obtient une seule solution (f_1, f_4) qui satisfait aux conditions de symétrie et qui soit consistante avec le fait que c_3, c_4, d_2, d_4 et e_2 sont des paramètres indépendants.

$$f_1 = \frac{d_2 - c_3}{1 - c_3d_2} \quad (3.62)$$

et

$$f_4 = \frac{d_4 - c_4 + c_4d_2 - c_3d_4}{1 - c_3d_2}. \quad (3.63)$$

Considérons ensuite les deux matrices 6×6 (CDG) et (DEG). En imposant la nullité des déterminants

$$|CDG| = 0, \quad |DEG| = 0, \quad (3.64)$$

et en tenant compte de l'expression de e_3 , on obtient une solution unique (g_1, g_3) qui satisfait aux exigences de symétrie et qui est consistante avec le fait que c_3, c_4, d_2, d_4 et e_2 sont des paramètres indépendants, qui est baptisée condition de self-consistance dans la référence [4]. On obtient pour g_1 et g_3 les expressions suivantes

$$g_1 = \frac{e_2 - c_4}{1 - c_4 e_2} \quad (3.65)$$

et

$$g_3 = \frac{d_4 + e_2 - c_4 - d_2 + c_3 d_2 + c_4 d_2 - c_3 d_4 - d_4 e_2 - c_3 d_2 e_2 + c_3 d_4 e_2}{1 - d_2 - c_4 e_2 + c_4 d_2 e_2}. \quad (3.66)$$

Pour accéder aux deux dernières contraintes dynamiques universelles, on impose la nullité des déterminants

$$|CDH| = 0, \quad |CGH| = 0. \quad (3.67)$$

On obtient alors, en tenant compte des expressions de g_1 , (3.65), et de g_3 , (3.66), une seule solution (h_1, h_2) qui satisfait simultanément aux deux conditions de symétrie et de self-consistance, à savoir

$$h_1 = \frac{c_3 - c_4 - d_2 + e_2 + c_4 d_2 - c_3 e_2}{1 - c_4 - d_2 + d_4 + c_4 d_2 - c_3 d_4 - d_4 e_2 + c_3 d_4 e_2} \quad (3.68)$$

et

$$h_2 = \frac{e_2 - d_2 - c_4 e_2 + c_3 d_2 + c_4 d_2 e_2 - c_3 d_2 e_2}{1 - c_4 - d_2 + d_4 + c_4 d_2 - c_3 d_4 - d_4 e_2 + c_3 d_4 e_2}. \quad (3.69)$$

Pour résumer, les sept contraintes dynamiques universelles pour la nouvelle borne inférieure optimisée dans le cas à 4 corps s'écrivent

$$\begin{aligned} e_3 &= \frac{c_3 - c_4 - d_2 + d_4 + e_2 + c_4 d_2 - c_3 d_4 - c_3 e_2 - d_4 e_2 + c_3 d_4 e_2}{1 - c_4 - d_2 + c_4 d_2}, \\ f_1 &= \frac{d_2 - c_3}{1 - c_3 d_2}, \\ f_4 &= \frac{d_4 - c_4 + c_4 d_2 - c_3 d_4}{1 - c_3 d_2}, \\ g_1 &= \frac{e_2 - c_4}{1 - c_4 e_2}, \\ g_3 &= \frac{d_4 + e_2 - c_4 - d_2 + c_3 d_2 + c_4 d_2 - c_3 d_4 - d_4 e_2 - c_3 d_2 e_2 + c_3 d_4 e_2}{1 - d_2 - c_4 e_2 + c_4 d_2 e_2}, \\ h_1 &= \frac{c_3 - c_4 - d_2 + e_2 + c_4 d_2 - c_3 e_2}{1 - c_4 - d_2 + d_4 + c_4 d_2 - c_3 d_4 - d_4 e_2 + c_3 d_4 e_2}, \\ h_2 &= \frac{e_2 - d_2 - c_4 e_2 + c_3 d_2 + c_4 d_2 e_2 - c_3 d_2 e_2}{1 - c_4 - d_2 + d_4 + c_4 d_2 - c_3 d_4 - d_4 e_2 + c_3 d_4 e_2}. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Le lecteur intéressé par les détails de la dérivation des contraintes dynamiques universelles pourra consulter avec profit les références [4, 17, 18] où, entre autres, une recette pour l'obtention des contraintes dynamiques universelles dans le cas à N corps est proposée et est appliquée concrètement au cas à 4 corps.

3.3.2 Configurations spéciales de masse

On va considérer dans ce qui suit des configurations spéciales de masse. On va supposer que les propriétés de symétrie du terme d'énergie cinétique sont également satisfaites par le terme d'énergie potentielle, ce qui signifie que nous faisons l'hypothèse que l'interaction entre deux particules i et j $v^{(ij)}$ ne peut dépendre que des masses des particules m_i et m_j .

Configuration $(4 \times m_1)$

Lorsque toutes les masses sont égales, tous les a_{ij} sont égaux et le système d'équations (3.40) se réduit à une seule équation qui donne l'expression de a_{ij} , identique à l'expression correspondante dans le cas de l'ancienne borne inférieure optimisée, (2.45) et les paramètres sont tous forcément nuls

$$c_3 = c_4 = d_2 = d_4 = e_2 = e_3 = f_1 = f_4 = g_1 = g_3 = h_1 = h_2 = 0. \quad (3.71)$$

Les 7 contraintes dynamiques universelles sont automatiquement satisfaites et on n'a donc pas de paramètres sur lesquels optimiser.

Configuration $(3 \times m_1, 1 \times m_4)$

Ici, on a les relations (2.46) entre les a_{ij} et les paramètres $x_{ij,k}$ satisfont aux relations

$$\begin{aligned} c_3 &= c_4 = 0, & d_2 &= d_4 = 0, & f_1 &= f_4 = 0, \\ e_2 &= e_3 = g_1 = g_3 = h_1 = h_2. \end{aligned} \quad (3.72)$$

On a donc deux a_{ij} indépendants, un seul paramètre, e_2 , est impliqué dans la procédure d'optimisation et les 7 contraintes dynamiques universelles (??) sont automatiquement satisfaites. Le système d'équations (3.40) se réduit à un système de deux équations à deux inconnues qui permettent de déduire des expressions relativement simples pour a_{12} et a_{14}

$$\begin{aligned} a_{12} &= \frac{(e_2 + 1)(e_2 + 5)m_4 - (e_2 - 1)^2 m_1}{2(e_2 + 2)^2 m_1 m_4} \\ a_{14} &= \frac{m_4 + 3m_1}{2(e_2 + 2)^2 m_1 m_4}. \end{aligned} \quad (3.73)$$

Il y'a des éléments qui nous font penser que pour cette configuration de masse les deux bornes inférieures optimisées ancienne et nouvelle sont équivalentes. D'abord, il se trouve

que dans les deux cas nous avons à optimiser sur le même nombre de paramètres, 1 paramètre. Ensuite, les deux bornes sont saturées dans le cas d'interactions harmoniques. Il est en fait facile de se convaincre que pour cette configuration de masse les deux bornes inférieures optimisées ancienne et nouvelle sont équivalentes. Il suffit de remarquer que les expressions (3.73) se réduisent aux expressions (2.48) si on change e_2 en $\frac{y_{14}-1}{1+y_{14}}$. Donc, les deux bornes inférieures optimisées ancienne et nouvelle sont équivalentes avec la correspondance des paramètres e_2 et y_{14} tout juste mentionnée.

Configuration $(2 \times m_1, 2 \times m_3)$

Dans ce cas les a_{ij} sont liés par les relations (2.46) et les paramètres $x_{ij,k}$ doivent satisfaire aux relations

$$\begin{aligned} c_3 &= c_4 = 0, & h_1 &= h_2 = 0, \\ d_2 &= e_2 = f_1 = g_1, \\ d_4 &= e_3 = f_4 = g_3. \end{aligned} \tag{3.74}$$

On a toujours 3 a_{ij} indépendants mais deux paramètres, e_2 et e_3 , sur lesquels optimiser. Les 7 contraintes dynamiques universelles se trouvent automatiquement satisfaites et le système d'équations (3.40) se réduit à un système de trois équations à trois inconnues, a_{12} , a_{34} et a_{13} , qui permet de tirer des expressions suffisamment compactes pour les a_{ij} dépendant des deux paramètres e_2 et e_3

$$\begin{aligned} a_{12} &= \frac{(-e_3 + 3)(2e_2 - e_3 + 1)m_3 - (e_2 - 1)^2 m_1}{(e_2 - e_3 + 2)^2 m_1 m_3} \\ a_{13} &= \frac{m_1 + m_3}{(e_2 - e_3 + 2)^2 m_1 m_3} \\ a_{34} &= \frac{(e_2 - 2e_3 + 1)(e_2 + 3)m_1 - (e_3 + 1)^2 m_3}{(e_2 - e_3 + 2)^2 m_1 m_3} \end{aligned} \tag{3.75}$$

En se basant sur le nombre de paramètres, il est clair que la nouvelle borne inférieure optimisée est meilleure que l'ancienne borne inférieure optimisée. Ceci est conforté par nos calculs numériques. En particulier la propriété de saturabilité, qui est réalisée pour la nouvelle borne inférieure optimisée, ne l'est pas pour l'ancienne borne inférieure optimisée.

Configuration $(2 \times m_1, 1 \times m_3, 1 \times m_4)$

De nouveau les a_{ij} sont liés par les relations (2.52). Quand aux paramètres $x_{ij,k}$, ils satisfont aux relations

$$\begin{aligned} c_3 &= c_4 = 0, \\ d_2 &= f_1, & d_4 &= f_4, & e_2 &= g_1, & e_3 &= g_3, & h_1 &= h_2. \end{aligned} \tag{3.76}$$

On a donc quatre a_{ij} indépendants et 5 paramètres $x_{ij,k}$ impliqués dans la procédure d'optimisation. Cette fois-ci les 7 contraintes dynamiques universelles ne sont pas toutes automatiquement satisfaites. Ceci signifie que les contraintes dynamiques universelles ne sont pas toutes englobées dans les relations de symétrie. Plus précisément, nous avons deux contraintes dynamiques universelles qui ne sont pas automatiquement satisfaites, à savoir

$$\begin{aligned} e_3 &= \frac{d_2 - d_4 - e_2 + d_4 e_2}{d_2 - 1} \\ h_1 &= \frac{e_2 - d_2}{1 - d_2 + d_4 - d_4 e_2}. \end{aligned} \quad (3.77)$$

Avant d'aller plus loin, il vaut la peine de noter les travaux de Boudjema et Zouzou [4, 17] sur le sujet. Ces auteurs divisent les contraintes dynamiques universelles en deux types : les contraintes dynamiques universelles impliquées par les symétries du problème et les contraintes dynamiques universelles qui ne le sont pas et doivent donc être obtenues par le calcul. En tenant compte des symétries du problème considéré, on détermine le nombre de a_{ij} indépendants et également le nombre de paramètres indépendants. Le nombre de contraintes dynamiques universelles à calculer est égal au nombre de paramètres indépendants diminué du nombre de a_{ij} indépendants et augmenté d'une unité. Si le nombre de a_{ij} indépendants est supérieur au nombre de paramètres indépendants, alors les contraintes dynamiques universelles sont toutes englobées dans les relations de symétrie. Autrement dit, il n'y'a de contraintes dynamiques universelles à obtenir par voie de calcul que lorsque le nombre de paramètres indépendants est supérieur ou égal au nombre de a_{ij} indépendants. De plus, Boudjema et Zouzou [4, 17] ont dérivé une expression intéressante pour le nombre de contraintes dynamiques universelles à calculer. Le lecteur intéressé par les détails pourra consulter avec profit les références [4, 17]. Toutes ces règles se trouvent vérifiées pour toutes les configurations de masse à 3 et 4 corps que nous avons considéré dans le chapitre précédent, dans le cas de l'ancienne borne inférieure optimisée, et dans ce chapitre, à l'occasion de la nouvelle borne inférieure optimisée. On peut utiliser les deux relations (3.77) pour limiter la procédure d'optimisation à 3 paramètres, qu'on peut choisir comme étant e_2 , d_2 et d_4 . Comme dans le cas tout à fait général, c'est à dire lorsque le système n'a aucune propriété de symétrie, on n'est pas dans l'obligation de tenir compte des relations (3.77) car elles sont de nature dynamique et non cinématique. Cependant, sur le plan pratique, la prise en compte de ces relations peut mener à des simplifications insoupçonnables du processus d'optimisation numérique. Ceci se comprend d'autant plus que nous avons affaire à un problème d'optimisation non linéaire très friand en temps de calcul, la réduction du nombre de paramètres sur lesquels optimiser conduisant à un gain très considérable en temps de calcul. Comparée à l'ancienne borne inférieure optimisée, la nouvelle borne inférieure optimisée est meilleure. En particulier, la propriété de saturabilité est réalisée pour cette configuration de masse contrairement à ce qui se passe pour

l'ancienne borne inférieure optimisée. Ceci se comprend en se basant sur le nombre de paramètres sur lesquels on optimise, 5 paramètres² dans le cas de la nouvelle borne inférieure optimisée et 3 paramètres dans le cas de l'ancienne borne inférieure optimisée. Le système d'équations (3.40) se réduit à un système de quatre équations à quatre inconnues, a_{12} , a_{13} , a_{14} et a_{34} , mais les simplifications introduites sont insuffisantes pour obtenir des expressions compactes pour les a_{ij} .

²Dans le comptage du nombre de paramètres, on ne tient compte que des relations entre les paramètres impliquées par les considérations de symétrie.

Chapitre 4

Résultats numériques

Notons d'emblée que nous allons nous limiter dans ce chapitre au cas à 4 corps. Nous ne présenterons pas de résultats numériques relatifs aux systèmes à 3 corps vu que ceux-ci sont présentés ailleurs, [14]. Ceci d'une part. D'autre part, nous nous limiterons à la nouvelle borne inférieure optimisée, vu qu'on sait d'avance, par l'argument analytique exposé au chapitre 3, que cette dernière est toujours meilleure, ou au moins aussi bonne, que l'ancienne borne inférieure optimisée. Avant de présenter les résultats numériques, commençons d'abord par présenter deux bornes inférieures antérieures à la nouvelle borne inférieure optimisée, à savoir les bornes inférieures désignées dans la littérature sous les vocables de bornes inférieures naïve, [5, 6, 7, 8, 9, 10], et améliorée, [11, 12, 13]. Nous exposerons également et de manière très succincte une méthode de résolution de l'équation de Schrödinger à N corps d'essence variationnelle, [1, 2, 3, 4], que nous particulariserons au cas à quatre corps, à savoir la méthode de développement sur des Gaussiennes corrélées. La présentation des bornes inférieures naïve et améliorée est motivée par le fait que nous allons également présenter des résultats numériques concernant ces deux bornes inférieures, dans un but de comparaison avec la nouvelle borne inférieure optimisée. L'exposé de la méthode de développement sur des Gaussiennes corrélées se justifie par le fait que nous allons également présenter les résultats de calculs variationnels poussés utilisant comme fonctions d'onde d'essai des superpositions de Gaussiennes corrélées.

4.1 Borne inférieure naïve

Le point de départ de la borne inférieure naïve est la décomposition suivante de l'énergie cinétique

$$\sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} = \frac{1}{(N-1)} \sum_{i < j=1}^N \left\{ \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \frac{\vec{p}_j^2}{2m_j} \right\}. \quad (4.1)$$

A la décomposition (4.1) correspond une décomposition de l'Hamiltonien du système H ,

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i<j=1}^N v^{(ij)}(\vec{r}_{ij}), \quad (4.2)$$

sous la forme d'une somme d'Hamiltoniens à deux corps

$$H = \sum_{i<j=1}^N H_2^{(ij)}, \quad (4.3)$$

avec

$$H_2^{(ij)} = \frac{1}{(N-1)} \left\{ \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \frac{\vec{p}_j^2}{2m_j} \right\} + v^{(ij)}(\vec{r}_{ij}). \quad (4.4)$$

Désignons par $|\Psi\rangle$ l'état fondamental, qu'on pourra toujours supposer- sans perte de généralité- normalisé, du système et par E l'énergie correspondante. Autrement dit, E est le niveau fondamental du système. Nous avons

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_{i<j=1}^N \langle \Psi | H_2^{(ij)} | \Psi \rangle. \quad (4.5)$$

Si on désigne par $E_2^{(ij)}(\alpha_{ij})$, l'énergie de l'état fondamental de l'Hamiltonien relatif à deux corps

$$H_{2,r}^{(ij)} = \alpha_{ij} \vec{p}^2 + v^{(ij)}(\vec{r}), \quad (4.6)$$

alors en vertu du principe variationnel

$$\langle \Psi | H_2^{(ij)} | \Psi \rangle \geq E_2^{(ij)}(\alpha_{ij}), \quad (4.7)$$

avec

$$\alpha_{ij} = \frac{m_i + m_j}{2(N-1)m_i m_j}. \quad (4.8)$$

Il en résulte l'inégalité suivante :

$$E \geq \sum_{i<j=1}^N E_2^{(ij)}(\alpha_{ij}). \quad (4.9)$$

Donc

$$\sum_{i<j=1}^N E_2^{(ij)}(\alpha_{ij}), \quad (4.10)$$

avec α_{ij} donné par (4.8), constitue une borne inférieure pour le niveau fondamental du système baptisée borne inférieure naïve. Il s'est avéré, [5, 6, 7, 8, 9, 10], que la borne inférieure naïve n'est pas très précise. L'énergie de chaque paire $\{i, j\}$ est remplacée par le niveau fondamental de $H_2^{(ij)}$, (4.4), sans tenir compte du mouvement global de la paire en question à l'intérieur du système à N corps. Ce manque de précision a amené au développement d'une nouvelle borne inférieure, la borne inférieure désignée sous le nom de borne inférieure améliorée qui sera décrit dans la section suivante.

4.2 Borne inférieure améliorée

Une amélioration par rapport à la borne inférieure naïve consiste à séparer dans l'énergie cinétique l'énergie cinétique du centre de masse et l'énergie cinétique relative grâce à l'identité

$$\sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \sum_{i<j=1}^N \frac{(m_j\vec{p}_i - m_i\vec{p}_j)^2}{2m_i m_j M}, \quad (4.11)$$

où M est la masse totale du système et \vec{P} est l'impulsion totale du système

$$M = \sum_{i=1}^N m_i, \quad \vec{P} = \sum_{i=1}^N \vec{p}_i. \quad (4.12)$$

Il est clair que \vec{p}_{ij} défini par

$$\vec{p}_{ij} = \frac{m_j\vec{p}_i - m_i\vec{p}_j}{m_i + m_j} \quad (4.13)$$

est un moment conjugué de \vec{r}_{ij} , au sens que \vec{r}_{ij} et \vec{p}_{ij} satisfont aux relations de commutation canoniques

$$[r_{ij,k}, p_{ij,\ell}] = i\hbar\delta_{k,\ell}, \quad (4.14)$$

où $r_{ij,k}$ et $p_{ij,\ell}$ désignent respectivement la k^{eme} composante de \vec{r}_{ij} et la ℓ^{eme} composante de \vec{p}_{ij} . La décomposition du terme d'énergie cinétique, (4.11), peut être réécrite en termes des \vec{p}_{ij} comme

$$\sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \sum_{i<j=1}^N \frac{(m_i + m_j)^2}{2m_i m_j M} \vec{p}_{ij}^2. \quad (4.15)$$

À la décomposition précédente du terme d'énergie cinétique, (4.15), correspond la décomposition suivante de l'Hamiltonien H du système

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \sum_{i<j=1}^N \tilde{H}_2^{(ij)}, \quad (4.16)$$

où $\tilde{H}_2^{(ij)}$ est défini par

$$\tilde{H}_2^{(ij)} = \tilde{\alpha}_{ij} \vec{p}_{ij}^2 + v^{(ij)}(\vec{r}_{ij}), \quad (4.17)$$

avec $\tilde{\alpha}_{ij}$ défini par

$$\tilde{\alpha}_{ij} = \frac{(m_i + m_j)^2}{2m_i m_j M}. \quad (4.18)$$

Désignons toujours par $|\Psi\rangle$ l'état fondamental, supposé normalisé, du système et par E l'énergie correspondante. Alors

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \langle \Psi | \frac{\vec{P}^2}{2M} | \Psi \rangle + \sum_{i < j=1}^N \langle \Psi | \tilde{H}_2^{(ij)} | \Psi \rangle. \quad (4.19)$$

Mais l'état fondamental est invariant par translation, ce qui se traduit par

$$\vec{P} |\Psi\rangle = \vec{0} \quad (4.20)$$

et par conséquent

$$\langle \Psi | \frac{\vec{P}^2}{2M} | \Psi \rangle = 0. \quad (4.21)$$

Il s'ensuit que

$$E = \sum_{i < j=1}^N \langle \Psi | \tilde{H}_2^{(ij)} | \Psi \rangle. \quad (4.22)$$

Mais d'après le principe variationnel

$$\langle \Psi | \tilde{H}_2^{(ij)} | \Psi \rangle \geq \tilde{E}^{(2)}(\tilde{\alpha}_{ij}), \quad (4.23)$$

où $\tilde{E}_2^{(ij)}(\tilde{\alpha}_{ij})$ désigne l'énergie de l'état fondamental de l'Hamiltonien relatif à 2 corps $\tilde{H}_2^{(ij)}$, (4.17). Il est clair que $\tilde{E}_2^{(ij)}(\tilde{\alpha}_{ij}) = E_2^{(ij)}(\tilde{\alpha}_{ij})$. Nous en déduisons l'inégalité suivante satisfaite par l'énergie de l'état fondamental du système

$$E \geq \sum_{i < j=1}^N E_2^{(ij)}(\tilde{\alpha}_{ij}). \quad (4.24)$$

Donc

$$\sum_{i < j=1}^N E_2^{(ij)}(\tilde{\alpha}_{ij}), \quad (4.25)$$

avec $\tilde{\alpha}_{ij}$ donné par (4.18), constitue une borne inférieure appelée borne inférieure améliorée. Effectivement, la borne inférieure améliorée, (4.25), peut constituer une amélioration

par rapport à la borne inférieure naïve, (??). C'est le cas, par exemple, pour tout système constitué de particules avec des masses toutes égales. En effet dans ce cas

$$\tilde{\alpha}_{ij} = \frac{2}{Nm} > \alpha_{ij} = \frac{1}{(N-1)m}. \quad (4.26)$$

Ceci d'une part. D'autre part $E_2^{(ij)}(\alpha)$ est une fonction croissante. On peut voir cette propriété de croissance comme une conséquence du théorème de Feynman-Hellmann, [4]. On peut également également la relier au fait que l'inertie favorise la liaison, et par conséquent α , qui joue le rôle de l'inverse d'une masse, défavorise la liaison. Donc, en conclusion,

$$E_2^{(ij)}(\tilde{\alpha}_{ij}) \geq E_2^{(ij)}(\alpha_{ij}) \quad (4.27)$$

et par conséquent

$$\sum_{i<j=1}^N E_2^{(ij)}(\tilde{\alpha}_{ij}) \geq \sum_{i<j=1}^N E_2^{(ij)}(\alpha_{ij}). \quad (4.28)$$

Il s'ensuit que la borne inférieure améliorée est meilleure que la borne inférieure naïve dans le cas de masses toutes égales. Cependant il n'en est pas toujours ainsi, [14, 4]. Plus précisément, pour des masses inégales il y'a des cas où la borne inférieure naïve peut s'avérer meilleure que la borne inférieure améliorée. Ceci a motivé le développement des bornes inférieures optimisées ancienne et nouvelle décrites aux chapitres 2 et 3.

4.3 Développement systématique sur des Gaussiennes corrélées

Le développement sur des Gaussiennes corrélées est une méthode de résolution de l'équation de Schrödinger d'essence variationnelle. Si on particularise au cas à quatre corps, la méthode consiste à adopter comme fonction d'onde d'essai pour l'état fondamental du système une superposition de Gaussiennes corrélées

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = \sum_{i=1}^G k_i \{ \exp [-\frac{1}{2} (a_{11}^i \vec{x}_1^2 + 2a_{12}^i \vec{x}_1 \cdot \vec{x}_2 + \dots + a_{33}^i \vec{x}_3^2)] + \dots \}. \quad (4.29)$$

Pour chacune des G générations les pointillés à la fin signifient des termes supplémentaires déduits à partir de la première exponentielle par permutation des particules lorsque les exigences de symétrie l'impose. Les \vec{x}_i sont un ensemble de trois coordonnées de Jacobi (il faut se rappeler que le nombre de coordonnées de Jacobi est de trois pour un système à 4 corps). Les paramètres de poids k_i et les paramètres de portée $a_{11}^i, a_{22}^i, a_{33}^i, a_{12}^i, a_{13}^i$ et a_{23}^i sont des paramètres variationnels à déterminer par une procédure d'optimisation. Le lecteur intéressé par plus de détails pourra consulter avec profit les références [1, 2, 3, 4].

4.4 Résultats numériques

Nous avons considéré le cas d'un potentiel en loi de puissance

$$v^{(ij)}(\vec{r}_{ij}) = \text{sgn}(\beta)r_{ij}^\beta, \quad (4.30)$$

qui a été pris, dans un but de simplicité, le même pour toutes les paires. Ici sgn est la fonction signe introduite dans le but d'avoir toujours des potentiels attractifs. Le choix des potentiels en loi de puissance est motivé par le fait que ceux-ci possèdent des propriétés d'échelle [73, 74, 75, 4, 3] intéressantes pour les observables physiques. Par exemple pour l'énergie, si $E_2(\alpha, \beta)$ désigne l'état fondamental de l'Hamiltonien relatif à deux corps

$$H_2 = \alpha p^2 + \text{sgn}(\beta)r^\beta, \quad (4.31)$$

alors

$$E_2(\alpha, \beta) = (2\alpha)^{\frac{\beta}{(2+\beta)}} E_2(1/2, \beta). \quad (4.32)$$

La nouvelle borne inférieure optimisée (??) se réduit dans ce cas à

$$\frac{E}{E_2(1/2, \beta)} \geq \max_{x_{ij,k}} R(\{x_{ij,k}\}, \beta) \quad (4.33)$$

ou

$$\frac{E}{E_2(1/2, \beta)} \leq \min_{x_{ij,k}} R(\{x_{ij,k}\}, \beta), \quad (4.34)$$

selon que, respectivement, β est positif ou négatif, avec

$$R(\{x_{ij,k}\}, \beta) = \sum_{i < j=1}^4 (2a_{ij}\{x_{ij,k}\})^{\frac{\beta}{(\beta+2)}}. \quad (4.35)$$

Nous avons considéré diverses puissances de β , $\beta = -1, 0.1, 1, 2$ correspondant respectivement aux potentiels Coulombien, de Martin [76], linéaire et harmonique et de multiples configurations de masse, jusqu'à trois masses différentes. Dans le cas de deux masses distinctes, nos résultats sont consignés dans les tableaux 1 à 4 dans le cas où $m_1 = m_2 = m_3 = 1$ et m_4 variable et dans les tableaux 5 à 8 dans le cas où $m_1 = m_2 = 1$ et $m_3 = m_4$ variable. Dans le cas de trois masses distinctes $m_1 = m_2 = 1$, $m_3 = 2$ et m_4 variable, nos résultats sont consignés dans les tableaux 9 à 12. Nous avons également reporté les résultats correspondant à la borne inférieure naïve, à la borne inférieure améliorée et à un calcul variationnel utilisant le développement sur des Gaussiennes corrélées et incluant sept générations de Gaussiennes $G = 7$, ce qui est suffisant pour obtenir une bonne convergence, sauf dans le cas du potentiel Coulombien. Dans tous les cas, la nouvelle borne inférieure optimisée est meilleure que les bornes inférieures naïve et améliorée.

Nos investigations numériques ont été si intensives que nous avons la quasi-certitude de la supériorité absolue de la borne inférieure optimisée vis à vis des bornes inférieures naïve et améliorée dans le cas à quatre corps. Cette conclusion est confirmée par des travaux récents [4, 19], où les auteurs ont montré la supériorité absolue de la nouvelle borne inférieure vis à vis des bornes inférieures naïve et améliorée dans le cas général d'un système à N corps avec N arbitraire. Dans le cas où le calcul variationnel a atteint une bonne convergence, la borne inférieure optimisée est très proche de la valeur fournie par le calcul variationnel. La borne inférieure optimisée constitue alors une excellente approximation de l'énergie de l'état fondamental du système. Dans le cas où le calcul variationnel n'a pas atteint une bonne convergence comme c'est le cas pour le potentiel Coulombien, nous avons des raisons de penser que de la nouvelle borne inférieure optimisée est plus proche de l'énergie de l'état fondamental que ne l'est le résultat du calcul variationnel. Cette conclusion est également confirmée par les travaux exposés dans les références [4, 19], pour N arbitraire. Nos calculs montrent aussi que la nouvelle borne inférieure optimisée est saturée, c'est à dire coïncide avec l'énergie de l'état fondamental du système, pour des interactions harmoniques, c'est à dire dans le cas d'une énergie potentielle V de la forme

$$V = \sum_{i < j}^4 k_{ij} r_{ij}^2, \quad (4.36)$$

indépendamment de la configuration de masse considérée et des constantes de couplage k_{ij} . Mais à l'époque de la réalisation de ces travaux, nous avons uniquement une évidence numérique de cette propriété de saturabilité et la démonstration analytique de cette propriété faisait défaut. Il a fallu également attendre jusqu'à tout récemment les travaux de Boudjema et Zouzou [4, 16], qui ont confirmé la propriété de saturabilité de la borne inférieure optimisée pour un système à N corps, avec N arbitraire, pour avoir aussi une démonstration analytique partielle de la propriété de saturabilité. Plus précisément, la propriété de saturabilité est démontrée pour certaines configurations spéciales de masse, mais pour N arbitraire, [4, 16].

TAB. 4.1 – Rapport $\frac{E}{E^2(\frac{1}{2})}$ pour le potentiel Coulombien avec $m_1 = m_2 = m_3 = 1$ et m_4 variable

m_4	naïve	améliorée	optimisée	variationnel
0.01	4.58910	2.34603	2.34565	2.21657
0.1	5.31818	3.09359	3.08334	2.91603
0.5	7.50000	4.95833	4.95235	4.57714
1.0	9.00000	6.00000	6.00000	5.57524
3.0	11.2500	7.87500	7.46333	6.91106
10.0	12.6818	12.9731	8.41754	7.81651
100.0	13.4109	80.2791	8.93460	8.30862
500.0	13.4820	380.256	8.98677	8.35828
∞	13.5000	∞	9.00000	8.38517

TAB. 4.2 – Rapport $\frac{E}{E^2(\frac{1}{2})}$ pour le potentiel de Martin avec $m_1 = m_2 = m_3 = 1$ et m_4 variable

m_4	naïve	améliorée	optimisée	variationnel
0.01	6.48950	6.58887	6.58933	6.59210
0.1	6.13411	6.23762	6.24093	6.24492
0.5	5.94263	6.05525	6.05692	6.06184
1.0	5.88526	6.00000	6.00000	6.004483
3.0	5.82899	5.92585	5.93960	5.94442
10.0	5.80267	5.82603	5.90764	5.91232
100.0	5.79107	5.56867	5.89208	5.89668
500.0	5.79000	5.38283	5.89057	5.89517
∞	5.78972	3.00000	5.89019	5.89474

TAB. 4.3 – Rapport $\frac{E}{E^2(\frac{1}{2})}$ pour le potentiel linéaire avec $m_1 = m_2 = m_3 = 1$ et m_4 variable

m_4	naïve	améliorée	optimisée	variationnel
0.01	12.3077	13.0067	13.0871	13.0947
0.1	7.24681	7.98952	8.07072	8.07920
0.5	5.62074	6.39869	6.41725	6.42522
1.0	5.24148	6.00000	6.00000	6.00745
3.0	4.91017	5.50524	5.59668	5.60362
10.0	4.76797	4.95443	5.39804	5.40464
100.0	4.70774	4.00628	5.30476	5.31117
500.0	4.70221	3.59682	5.29582	5.30222
∞	4.70081	3.00000	5.29357	5.30000

TAB. 4.4 – Rapport $\frac{E}{E^2(\frac{1}{2})}$ pour le potentiel harmonique avec $m_1 = m_2 = m_3 = 1$ et m_4 variable

m_4	naïve	améliorée	optimisée	variationnel
0.01	19.8564	20.9230	21.3493	21.3493
0.1	8.19405	9.33475	9.56776	9.56776
0.5	5.44949	6.60882	6.64575	6.64575
1.0	4.89898	6.00000	6.00000	6.00000
3.0	4.44949	5.27792	5.41421	5.41421
10.0	4.26608	4.55839	5.14018	5.14018
100.0	4.19018	3.57675	5.01489	5.01489
500.0	4.18327	3.26455	5.00300	5.00300
∞	4.18153	3.00000	5.00000	5.00000

TAB. 4.5 – Rapport $\frac{E}{E^2(\frac{1}{2})}$ pour le potentiel Coulombien avec $m_1 = m_2 = 1$ et $m_3 = m_4$ variable

m_4	naïve	améliorée	optimisée	variationnel
0.001	1.51349	1.00899	0.51114	0.50984
0.002	1.52695	1.01797	0.52228	9.56776
0.005	1.56720	1.04480	0.55561	0.54920
0.010	1.63381	1.08921	0.61093	0.64806
0.050	2.14643	1.43095	1.03927	1.01006
0.100	2.74091	1.82727	1.52878	1.46160
0.200	3.80000	2.53333	2.35843	2.21950
0.500	6.25000	4.16667	4.12853	3.83733
0.800	8.03333	5.35556	5.35104	4.96187
1.000	9.00000	6.00000	6.00000	5.57473

TAB. 4.6 – Rapport $\frac{E}{E^2(\frac{1}{2})}$ pour le potentiel de Martin avec $m_1 = m_2 = 1$ et $m_3 = m_4$ variable

m_4	naïve	améliorée	optimisée	variationnel
0.001	7.61877	7.44482	7.72590	7.72870
0.002	7.40346	7.27034	7.47280	7.51186
0.005	7.12993	7.04858	7.23396	7.23684
0.010	6.93144	6.88751	7.03478	7.03478
0.050	6.50051	6.53623	6.60552	6.60942
0.100	6.33072	6.39601	6.43830	6.44262
0.200	6.17412	6.26408	6.28527	6.28994
0.500	5.99467	6.10557	6.10954	6.11444
0.800	5.91781	6.03256	6.03297	6.03788
1.000	5.88526	6.00000	6.00000	6.00482

TAB. 4.7 – Rapport $\frac{E}{E^2(\frac{1}{2})}$ pour le potentiel linéaire avec $m_1 = m_2 = 1$ et $m_3 = m_4$ variable

m_4	naïve	améliorée	optimisée	variationnel
0.001	37.3531	34.1776	39.9431	39.9727
0.002	29.8347	27.7334	31.9981	32.0226
0.005	22.2285	21.1129	23.9683	23.9877
0.010	17.8444	17.29666	19.3461	19.3628
0.050	10.8966	11.2382	12.0362	12.0362
0.100	8.92374	9.50174	9.96094	9.97197
0.200	7.40707	8.14026	8.35793	8.36774
0.500	5.97422	6.78014	6.81782	6.82623
0.800	5.44886	6.23166	6.23533	6.24310
1.000	5.24148	6.00000	6.00000	6.00745

TAB. 4.8 – Rapport $\frac{E}{E^2(\frac{1}{2})}$ pour le potentiel harmonique avec $m_1 = m_2 = 1$ et $m_3 = m_4$ variable

m_4	naïve	améliorée	optimisée	variationnel
0.001	99.7026	92.3145	109.989	109.989
0.002	70.7654	66.1345	78.3758	78.3758
0.005	45.1048	42.9211	50.3340	50.3340
0.010	32.1907	31.2397	36.2126	36.2126
0.050	15.0510	15.7218	17.4250	17.4250
0.100	11.0579	12.0776	13.0149	13.0149
0.200	8.29909	9.51019	9.93623	9.93623
0.500	5.9712	7.20838	7.27791	7.27791
0.800	5.19347	6.35083	6.35738	6.35738
1.000	4.89898	6.00000	6.00000	6.00000

TAB. 4.9 – Rapport $\frac{E}{E^2(\frac{1}{2})}$ pour le potentiel Coulombien avec $m_1 = m_2 = 1$, $m_3 = 2$ et m_4 variable

m_4	naïve	améliorée	optimisée	variationnel
0.01	5.58925	2.88321	2.85662	2.68888
0.1	6.33117	3.71085	3.59270	3.41014
0.5	8.70000	5.84500	5.69402	5.28086
1.0	10.5000	7.08333	6.97834	6.45405
3.0	13.6000	9.16611	8.92845	8.28250
10.0	15.9545	13.9807	10.3526	9.64941
100.0	17.3229	76.2605	11.2044	10.4725
500.0	17.4641	354.008	11.2944	10.5596
∞	17.5000	∞	11.3174	10.5990

TAB. 4.10 – Rapport $\frac{E}{E^2(\frac{1}{2})}$ pour le potentiel de Martin avec $m_1 = m_2 = 1$, $m_3 = 2$ et m_4 variable

m_4	naïve	améliorée	optimisée	variationnel
0.01	6.46253	6.54932	6.55845	6.56312
0.1	6.10506	6.19689	6.20922	6.21297
0.5	5.90730	6.01017	6.01882	6.02362
1.0	5.84523	5.95328	5.95782	5.96271
3.0	5.78101	5.88193	5.89040	5.89513
10.0	5.74886	5.79185	5.85249	5.85703
100.0	5.73398	5.54421	5.83300	5.83741
500.0	5.73257	5.35898	5.83104	5.83548
∞	5.73222	2.96753	5.83055	5.83492

TAB. 4.11 – Rapport $\frac{E}{E^2(\frac{1}{2})}$ pour le potentiel linéaire avec $m_1 = m_2 = 1$, $m_3 = 2$ et m_4 variable

m_4	naïve	améliorée	optimisée	variationnel
0.01	12.1426	12.6528	12.8629	12.8716
0.1	7.06332	7.67565	7.82830	7.83622
0.5	5.40202	6.07722	6.41763	6.15519
1.0	5.00184	5.68142	5.71437	5.72149
3.0	4.63975	5.22382	5.28364	5.29014
10.0	4.47727	4.73493	5.06160	5.06771
100.0	4.40628	3.82066	4.95269	4.95858
500.0	4.39968	3.40544	4.94202	4.94787
∞	4.39802	2.79370	4.93932	4.94516

TAB. 4.12 – Rapport $\frac{E}{E^2(\frac{1}{2})}$ pour le potentiel harmonique avec $m_1 = m_2 = 1$, $m_3 = 2$ et m_4 variable

m_4	naïve	améliorée	optimisée	variationnel
0.01	19.6232	20.3024	20.9773	20.9773
0.1	7.93125	8.83791	9.18406	9.18406
0.5	5.14358	6.12132	6.24090	6.24090
1.0	4.57081	5.52933	5.58114	5.58114
3.0	4.09109	4.87676	4.96993	4.96993
10.0	3.88898	4.24489	4.67332	4.67332
100.0	3.80348	3.30016	4.53267	4.53267
500.0	3.79563	2.98121	4.51907	4.51907
∞	3.79365	2.70711	4.51564	4.51564

Chapitre 5

Un problème à 2 corps de type "Calogero" exactement soluble

5.1 Le modèle unidimensionnel

5.1.1 Position du problème

Un nouveau modèle quantique, à deux corps, non relativiste, intégrable et exactement soluble a été récemment proposé [68]. L'Hamiltonien de ce système s'écrit :

$$H(x_1, x_2) = -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \omega^2(x_1^2 + x_2^2) + \lambda \frac{2x_1x_2}{(x_1^2 + x_2^2)(x_1 - x_2)^2}, \quad (5.1)$$

où les unités $2m = \hbar = 1$, sont utilisées. Cet Hamiltonien invariant sous la permutation des particules 1 et 2, décrit des systèmes de 2 particules en interaction mutuelle sur une ligne infinie et confinées dans un champ harmonique moyen généré par une troisième particule infiniment lourde. λ est la constante de couplage associée au potentiel d'interaction à deux corps et ω est la fréquence du champ harmonique isotrope. Les x_i ($i = 1, 2$) représentent les opérateurs de position des deux particules et les $-i\frac{\partial}{\partial x_i}$ ($i = 1, 2$) sont les opérateurs des moments conjugués (dans la représentation position) correspondants.

Le modèle décrit par (5.1) peut être vu comme étant une généralisation ou une "déformation" du modèle original de Calogero à 2 corps [22]. En effet on peut facilement vérifier que cet Hamiltonien peut être réécrit sous la forme :

$$H(x_1, x_2) = -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \omega^2(x_1^2 + x_2^2) + \lambda \left(\frac{1}{(x_1 - x_2)^2} - \frac{1}{x_1^2 + x_2^2} \right). \quad (5.2)$$

En remplaçant, dans (5.2), le terme $\omega^2(x_1^2 + x_2^2)$ par $\omega^2(x_1 - x_2)^2$, on retrouve le problème à deux corps de Calogero auquel a été additionné un potentiel à deux corps

non invariant par translation $\frac{-\lambda}{(x_1^2+x_2^2)}$. Notons, de plus, qu'une généralisation de ce modèle unidimensionnel (remplacer $-\lambda$ par μ dans le terme additionnel) a été introduite et étudiée dans [69].

L'Hamiltonien (5.2) n'est pas séparable dans les coordonnées d'espace (x_1, x_2) . En passant en coordonnées du centre de masse et de Jacobi, pour le problème à deux corps, définies par

$$R = \frac{1}{2}(x_1 + x_2), \quad u = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2), \quad (5.3)$$

l'Hamiltonien (5.2) s'écrit, maintenant, sous la forme

$$H(R, u) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \omega^2(2R^2 + u^2) + \lambda \left(\frac{1}{2u^2} - \frac{1}{2R^2 + u^2} \right). \quad (5.4)$$

L'équation (5.4) montre clairement que l'Hamiltonien $H(R, u)$ ne peut pas être séparé en un Hamiltonien "du centre de masse" $H_{cm} \equiv H(R)$ et un Hamiltonien "relatif" $H_{rel} \equiv H(u)$, comme ce fût le cas pour le problème à deux corps de Calogero [22], à cause de la présence du terme additionnel non invariant par translation $\frac{-\lambda}{(x_1^2+x_2^2)}$.

Cependant, pour contourner cette difficulté et dans l'espoir de résoudre ce problème, faisons la transformation des coordonnées d'espace (x_1, x_2) en coordonnées "polaires" comme suit :

$$\begin{aligned} x_1 &= r \sin \varphi, & x_2 &= r \cos \varphi, \\ r &\geq 0, & 0 &\leq \varphi \leq 2\pi. \end{aligned} \quad (5.5)$$

L'équation de Schrödinger stationnaire pour l'Hamiltonien (5.1) s'écrit, donc, dans les coordonnées (r, φ) comme :

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \omega^2 r^2 + \frac{M}{r^2} \right) \Psi(r, \varphi) = E \Psi(r, \varphi), \quad (5.6)$$

avec M un opérateur différentiel "angulaire" défini par

$$M = -\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \lambda \frac{\sin 2\varphi}{1 - \sin 2\varphi}, \quad (5.7)$$

et où $\Psi(r, \varphi)$ et E représentent, respectivement, les solutions propres et les énergies propres de l'Hamiltonien du problème considéré qui devient maintenant séparable dans les coordonnées (r, φ) . L'équation de Schrödinger (5.6) est, donc, soluble par séparation des variables.

Pour réaliser cela, transformons la fonction d'onde $\Psi(r, \varphi)$ selon l'"ansatz" suivant :

$$\Psi(r, \varphi) = R(r)\Phi(\varphi). \quad (5.8)$$

En remplaçant (5.8) dans (5.6) on obtient une paire de deux équations différentielles à une variable chacune ; l'équation "angulaire"

$$-\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} + \left(\lambda \frac{\sin 2\varphi}{1 - \sin 2\varphi} - B \right) \Phi(\varphi) = 0, \quad (5.9)$$

où B , la constante de séparation, dénote les valeurs propres de l'opérateur M (équation (5.7)) et Φ ses fonctions propres ; et l'équation "radiale"

$$-\frac{d^2R(r)}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \left(\omega^2 r^2 + \frac{B}{r^2} - E \right) R(r) = 0, \quad (5.10)$$

pour les fonctions d'onde radiales $R(r)$ correspondantes.

La résolution successive des équations (5.9) et (5.10) permet de solutionner complètement le problème.

5.1.2 Résolution de l'équation angulaire

Remarquons que le potentiel dans l'équation (5.9) a une périodicité de π et possède une singularité à $\varphi = \frac{\pi}{4} + k\pi$, ceci permet de restreindre l'étude de cette équation dans l'intervalle $[\frac{\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}]$. Par simple souci de commodité, l'équation angulaire (5.9) peut être réécrite en fonction d'une nouvelle variable θ , via le changement $\theta = \varphi - \frac{\pi}{4}$, comme suit :

$$-\frac{d^2\Phi(\theta)}{d\theta^2} + \left(\lambda \frac{\cos 2\theta}{1 - \cos 2\theta} - B \right) \Phi(\theta) = 0, \quad 0 \leq \theta \leq \pi. \quad (5.11)$$

Remarquons que pour les valeurs de $\theta \in [0, \pi]$, il correspond un certain ordre d'arrangement entre les positions des deux particules. En effet, on peut voir à partir de la relation

$$x_1 - x_2 = \sqrt{2}r \sin \theta, \quad (5.12)$$

que l'on a

$$x_1 > x_2, \quad 0 < \theta < \pi, \quad (5.13)$$

$$x_1 < x_2, \quad \pi < \theta < 2\pi. \quad (5.14)$$

Donc, Le passage du premier intervalle $[0, \pi]$ vers le deuxième intervalle $[\pi, 2\pi]$ correspond simplement à la permutation des deux particules. Par conséquent il suffit de trouver

les solutions de l'équation angulaire (5.11) dans l'intervalle $[0, \pi]$ et d'obtenir les solutions dans tout l'intervalle $[0, 2\pi]$ par la simple prescription

$$\Phi(\theta + \pi) = \pm\Phi(\theta), \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad (5.15)$$

le signe $+$ (respectivement $-$) correspond aux états symétriques (respectivement anti-symétriques) sous la permutation des deux particules.

Aux voisinages de 0 et de π les singularités sont analogues à celles d'une "barrière centrifuge" puisque $1 - \cos 2\theta \sim 2\theta^2$. Et pour éviter "la chute sur le centre"[22, 80] et traiter le problème, il faut et il suffit que $\frac{\lambda}{2} > -\frac{1}{4}$ [77].

Dans le but de trouver des solutions (dans l'intervalle $0 \leq \theta \leq \pi$) acceptables physiquement, avec les conditions aux limites de Dirichlet, en l'occurrence :

$$\Phi(0) = 0, \quad \Phi(\pi) = 0, \quad (5.16)$$

factorisons la fonction Φ de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \Phi &= (\sin \theta)^\nu f(z), \\ z &= \cos \theta. \end{aligned} \quad (5.17)$$

La Substitution de (5.17) dans (5.11), permet d'avoir l'équation différentielle pour les fonctions f ,

$$(1 - z^2) \frac{d^2 f(z)}{dz^2} - (2\nu + 1)z \frac{df(z)}{dz} + \left(B - \nu + \frac{\lambda}{2} + \frac{(2\nu(\nu - 1) - \lambda)z^2}{1 - z^2} \right) f(z) = 0. \quad (5.18)$$

Des solutions acceptables physiquement pour l'équation (5.18) émergent pour des choix bien déterminées, respectivement, des constantes de couplage et de séparation λ et B . En effet, si on suppose que la constante de couplage λ vérifie l'équation

$$\lambda = 2\nu(\nu - 1), \quad (5.19)$$

et que la constante de séparation B obéit à la condition de "quantification" suivante

$$B \equiv B_n = (n + \nu)^2 - 2\nu(\nu - 1) = (n + \nu)^2 - \lambda, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.20)$$

alors, dans ce cas là, l'équation (5.18) devient l'équation différentielle pour les polynômes de Gegenbauer $f_n(z) = C_n^{(\nu)}(z)$ [78]

$$(1 - z^2) \frac{d^2 f_n(z)}{dz^2} - (2\nu + 1)z \frac{df_n(z)}{dz} + n(n + 2\nu) f_n(z) = 0. \quad (5.21)$$

Remarquons qu'à partir de la valeur de λ , donnée par l'équation (5.19), on obtient deux racines pour ν :

$$\nu_{>} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1+2\lambda}, \quad (5.22)$$

$$\nu_{<} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1+2\lambda}. \quad (5.23)$$

Ici quelques remarques s'imposent. En effet pour que les solutions $\nu_{>}$ et $\nu_{<}$ soient réelles il faut et il suffit que $\lambda \geq -\frac{1}{2}$, ceci est justement la condition imposée au préalable à λ pour stopper "la chute sur le centre". En plus, pour que la fonction $\Phi_n(\theta)$ soit de carré sommable, en général seule la solution régulière est retenue ; c'est celle qui correspond à la racine positive de ν (la valeur supérieure $\nu_{>}$). Les solutions irrégulières (qui correspondent à la valeur inférieure $\nu_{<}$ selon la définition de [77] pour la barrière centrifuge) sont d'habitude exclues sur la base que les fonctions propres correspondantes ont en général un "mauvais" comportement aux points singuliers et ne sont, donc, pas de carré sommable. Cependant, il a été montré dans un contexte semblable au problème traité ici, que des solutions irrégulières de carré sommable peuvent exister [79]. En effet, pour $-\frac{1}{2} < \lambda < 0$ (interaction attractive entre les deux particules), la racine inférieure $\nu_{<}$ est positive. Donc, dans ce domaine des valeurs de λ , les deux solutions de l'équation (5.11) sont à considérer. Nous faisons donc face à une situation dans laquelle les solutions régulière et irrégulière sont toutes deux acceptables [79]. Les deux solutions de l'équation (5.19) coïncident, pour $\lambda = -\frac{1}{2}$, et prennent la valeur $\nu = \frac{1}{2}$.

Dans la cas général seule la solution régulière est retenue. Dans ce cas là, les solutions propres de l'équation angulaire (5.11) dans l'intervalle $0 \leq \theta \leq \pi$ et les valeurs propres sont données, respectivement, par

$$\Phi_n(\theta) = (\sin \theta)^{a+\frac{1}{2}} C_n^{(a+\frac{1}{2})}(\cos \theta), \quad (5.24)$$

$$B_n = \left(n + a + \frac{1}{2}\right)^2 - \lambda, \quad (5.25)$$

$$a = \frac{1}{2}\sqrt{1+2\lambda}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

En fonction de la variable φ les solutions Φ_n (5.24) s'écrivent (moyennant une constante multiplicative $2^{-\frac{\nu}{2}}$ qui pourra être absorbée dans la constante de normalisation) comme

$$\Phi_n(\varphi) = (1 - \sin 2\varphi)^{\frac{1}{2}(a+\frac{1}{2})} C_n^{(a+\frac{1}{2})} \left(\frac{\sin \varphi + \cos \varphi}{\sqrt{2}} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.26)$$

et s'annulent aux bornes de l'intervalle $[\frac{\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}]$.

5.1.3 Résolution de l'équation radiale

Transformons l'équation radiale (5.10) en posant que $R(r) = \frac{u(r)}{\sqrt{r}}$, ce qui permet d'écrire l'équation radiale réduite en fonction de $u(r)$ comme suit

$$-\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left(\omega^2 r^2 + \frac{B_n - \frac{1}{4}}{r^2} - E \right) u(r) = 0. \quad (5.27)$$

Il s'agit donc de trouver les énergies-propres E et les fonctions propres normalisables $u(r)$, dans l'intervalle $0 \leq r < +\infty$, qui vérifient les conditions aux limites

$$u(0) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow +\infty} u(r) = 0. \quad (5.28)$$

La présence d'une barrière centrifuge à l'origine ($r = 0$) requiert que [77] :

$$B_n = (n + \nu)^2 - \lambda = (n + \nu)^2 - 2\nu(\nu - 1) > 0, \quad \forall n \geq 0. \quad (5.29)$$

Remarquons que le terme élevé à au carré, dans l'expression précédente, est minimal pour $n = 0$, et donc l'inégalité (5.29) est vérifiée $\forall n \geq 0$ pour les valeurs de ν satisfaisant : $0 < \nu < 2$; ou encore, en combinant avec le fait que $\lambda > -\frac{1}{2}$ (voir les remarques concernant la résolution de l'équation angulaire), on obtient la condition $\frac{1}{2} < \lambda < 4$, qui détermine le domaine des valeurs de λ pour lesquelles on peut traiter le problème considéré. Sous cette contrainte pour λ , B_n est positive pour tout n , ce qui permet d'introduire une constante auxilliare b_n , définie par

$$B_n = b_n^2, \quad b_n = \sqrt{(n + \nu)^2 - \lambda} = \sqrt{\left(n + a + \frac{1}{2}\right)^2 - \lambda}. \quad (5.30)$$

En choisissant b_n comme étant seulement la racine positive de B_n , ceci va permettre d'écrire les solutions de carré sommable de l'équation radiale réduite (5.27). Pour ce faire, on introduit la transformation suivante

$$u(r) = r^{b_n + \frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{t}{2}\right) \chi(t), \quad (5.31)$$

avec $t = \omega r^2$.

En insérant cet "ansatz" de $u(r)$ dans l'équation radiale réduite (5.27), on obtient l'équation différentielle pour la fonction χ

$$t \frac{d^2 \chi(t)}{dt^2} + (b_n + 1 - t) \frac{d\chi(t)}{dt} - \left(\frac{b_n + 1}{2} - \frac{E}{4\omega} \right) \chi(t) = 0. \quad (5.32)$$

L'équation (5.32) est l'équation de Kummer dont la solution est donnée par la fonction hypergéométrique confluyente[78] ou encore appelée fonction hypergéométrique dégénérée [80]

$$\chi(t) = M \left(\frac{b_n + 1}{2} - \frac{E}{4\omega}, b_n + 1, t \right). \quad (5.33)$$

La solution (5.33) consiste en général en une série infinie de termes en puissances de t . Cependant, et pour obtenir une solution de carré sommable, la série doit se terminer à un ordre donné, c-à-d que $\chi(t)$ devient un polynôme de degré k en t ; ceci ne peut être réalisé que si

$$\frac{b_n + 1}{2} - \frac{E}{4\omega} = -k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (5.34)$$

La condition précédente (5.34) représente la condition de quantification du spectre de l'énergie E , qui sera donnée par l'équation

$$E \equiv E_k = 2\omega(2k + 1 + b_n), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (5.35)$$

En utilisant la relation (5.34) dans (5.32), on obtient l'équation suivante

$$t \frac{d^2\chi(t)}{dt^2} + (b_n + 1 - t) \frac{d\chi(t)}{dt} + k\chi(t) = 0, \quad (5.36)$$

qui n'est autre que l'équation différentielle des polynômes de Laguerre généralisés dont les solutions sont [78]

$$\chi(t) = L_k^{(b_n)}(t), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (5.37)$$

Finalement, les solutions propres de carré sommable de l'équation radiale réduite (5.27) s'écrivent donc comme

$$u_k(r) = r^{b_n + \frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\omega r^2}{2}\right) L_k^{(b_n)}(\omega r^2), \quad (5.38)$$

ou encore pour les fonctions radiales $R_{k,n}$, solutions propres de (5.10), qui prennent la forme

$$R_{k,n}(r) = r^{b_n} \exp\left(-\frac{\omega r^2}{2}\right) L_k^{(b_n)}(\omega r^2), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.39)$$

Remarquons que le choix de b_n comme étant la racine positive de B_n (équation (5.30)) permet à la fonction d'onde radiale $R_{k,n}$ d'être de carré sommable et d'avoir le bon comportement à l'origine.

5.1.4 Solutions de l'équation de Schrödinger pour l'Hamiltonien à deux corps

Nous pouvons donc conclure que les solutions propres normalisables de l'équation de Schrödinger (5.6) pour $-\frac{1}{2} < \lambda < 4$ sont données par

$$\begin{aligned} \Psi_{k,n}(r, \theta) &= r^{\sqrt{(n+a+\frac{1}{2})^2-\lambda}} \exp\left(-\frac{\omega r^2}{2}\right) L_k^{\left(\sqrt{(n+a+\frac{1}{2})^2-\lambda}\right)}(\omega r^2) \\ &\quad \times (\sin \theta)^{a+\frac{1}{2}} C_n^{(a+\frac{1}{2})}(\cos \theta), \\ &\quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad a = \frac{1}{2}\sqrt{1+2\lambda}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (5.40)$$

avec la prescription [22]

$$\Psi_{k,n}(r, \theta + \pi) = \pm (-1)^n \Psi_{k,n}(r, \theta), \quad 0 \leq \theta \leq \pi. \quad (5.41)$$

Les énergies propres de l'équation (5.6) sont, quant à eux, données par

$$E_{k,n} = 2\omega \left(2k + \sqrt{\left(n + a + \frac{1}{2}\right)^2 - \lambda + 1} \right), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.42)$$

Si les deux particules sont identiques alors seulement le signe + (respectivement $-$) sera pris en compte dans l'équation (5.41) pour le cas de la statistique de Bose (respectivement de Fermi). Notons que dans ces deux cas là une fonction d'onde unique correspond à chaque pair k, n . Si les particules sont distinctes, donc, correspondant à la statistique de Boltzmann alors les deux possibilités de signe sont permises et en plus dans chacun des deux secteurs "angulaires" ($p\pi \leq \theta \leq (p+1)\pi$, $p = 0, 1$) la fonction d'onde peut être définie par (5.40) et considéré comme étant nulle dans l'autre secteur, ce qui donne deux états différents pour chaque pair k, n [22]. Par conséquent, les niveaux d'énergie ne sont pas dégénérés dans le cas de particules identiques mais le deviennent, avec une dégénérescence égale à deux, dans le cas de particules distinctes.

Pour calculer, enfin, les constantes de normalisation des fonctions d'onde (5.40), remarquons que celles-ci sont orthogonales pour $0 \leq \theta \leq \pi$ dans le sens où

$$\int_0^{+\infty} r dr \int_0^\pi d\theta \Psi_{k,n}(r, \theta) \Psi_{k',n'}(r, \theta) = \delta_{n,n'} \delta_{k,k'} N_{k,n}. \quad (5.43)$$

En utilisant les propriétés de normalisation des polynômes de Laguerre généralisés et de Gegenbauer [78], la constante de normalisation $N_{k,n}$ sera donnée par

$$N_{k,n} = 4^{\frac{a}{2}-\frac{1}{4}} \frac{\Gamma\left(\sqrt{(n+a+\frac{1}{2})^2-\lambda+1+k}\right)}{\omega\sqrt{(n+a+\frac{1}{2})^2-\lambda+1}k!} \frac{\Gamma(n+a+1)^2}{n!(n+a+\frac{1}{2})\Gamma(n+2a+1)}. \quad (5.44)$$

Ceci permet d'écrire, finalement, la version normalisée des fonctions propres (5.40) de l'Hamiltonien (5.1) comme

$$\begin{aligned} \Psi_{k,n}(r, \theta) = & \left[\frac{\omega\sqrt{(n+a+\frac{1}{2})^2-\lambda+1}k!n!(n+a+\frac{1}{2})\Gamma(n+2a+1)}{4^{\frac{a}{2}-\frac{1}{4}}\Gamma\left(\sqrt{(n+a+\frac{1}{2})^2-\lambda+1+k}\right)\Gamma(n+a+1)^2} \right]^{\frac{1}{2}} r\sqrt{(n+a+\frac{1}{2})^2-\lambda} e^{-\frac{\omega r^2}{2}} \\ & \times (\sin\theta)^{a+\frac{1}{2}} C_n^{(a+\frac{1}{2})}(\cos\theta) L_k^{\left(\sqrt{(n+a+\frac{1}{2})^2-\lambda}\right)}(\omega r^2) \end{aligned} \quad (5.45)$$

Notons, donc, que dû au fait qu'il y'a eu séparation des variables et, qu'en outre, les solutions ont été exprimées à l'aide des polynômes de Laguerre et de Jacobi, on est assuré que les solutions propres (5.45) constituent une base complète orthonormée.

Exprimées en fonction de la variable $\varphi = \theta - \frac{\pi}{4}$, les solutions propres (5.45) s'écrivent comme

$$\begin{aligned} \Psi_{k,n}(r, \varphi) = & \left[\frac{\omega\sqrt{(n+a+\frac{1}{2})^2-\lambda+1}k!n!(n+a+\frac{1}{2})\Gamma(n+2a+1)}{4^{a-\frac{1}{2}}\Gamma\left(\sqrt{(n+a+\frac{1}{2})^2-\lambda+1+k}\right)\Gamma(n+a+1)^2} \right]^{\frac{1}{2}} r\sqrt{(n+a+\frac{1}{2})^2-\lambda} e^{-\frac{\omega r^2}{2}} \\ & \times (1-\sin 2\varphi)^{\frac{a}{2}+\frac{1}{4}} C_n^{(a+\frac{1}{2})}\left(\frac{\sin\varphi+\cos\varphi}{\sqrt{2}}\right) L_k^{\left(\sqrt{(n+a+\frac{1}{2})^2-\lambda}\right)}(\omega r^2) \end{aligned} \quad (5.46)$$

Rappelons que les variables r et φ sont reliées aux coordonnées des deux particules par

$$r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}, \quad (5.47)$$

$$\varphi = \arctan\left(\frac{x_1}{x_2}\right). \quad (5.48)$$

Terminons ce paragraphe par une brève discussion sur le spectre correspondant aux solutions régulières (correspondant à $\nu_{>} = \frac{1}{2} + a$, voir équation (5.22)) et les solutions

non régulières (correspondant à $\nu_{<} = \frac{1}{2} - a$, voir équation (5.23)), lorsque toutes les deux solutions sont acceptables, c-à-d, dans le cas où $-\frac{1}{2} < \lambda < 0$. En effet d'après l'équation (5.42) la forme du spectre d'énergie, correspondant aux deux valeurs de ν s'écrit, respectivement, comme

$$E_{k,n}^{>} = 2\omega \left(2k + 1 + \sqrt{\left(n + \frac{1}{2} + a\right)^2 - \lambda} \right), \quad (5.49)$$

$$E_{k,n}^{<} = 2\omega \left(2k + 1 + \sqrt{\left(n + \frac{1}{2} - a\right)^2 - \lambda} \right). \quad (5.50)$$

On remarque, donc, que pour une valeur fixée de λ les énergies des solutions irrégulières sont inférieures à celles des solutions régulières.

Pour $\lambda = 0$, la barrière centrifuge dans l'équation angulaire (5.11) disparaît et les solutions s'étendent sur tout l'intervalle $[0, 2\pi]$, et l'Hamiltonien (5.1) devient équivalent à celui de l'oscillateur harmonique isotrope dans la dimension d'espace $D = 2$.

Notons, en plus, que pour la valeur de $\lambda = 0$ ($a = \frac{1}{2}$), correspondent deux valeurs de ν à savoir $\nu_{>} = 1$ et $\nu_{<} = 0$ (voir équation (5.19)). La valeur $\nu_{<} = 0$ donne le spectre usuel

$$E_{k,n}^{<} = 2\omega(2k + n + 1), \quad (5.51)$$

et les solutions propres correspondantes sont proportionnelles à $\sin(n\theta)$. Pour $\nu_{>} = 1$, nous avons

$$E_{k,n}^{>} = 2\omega(2k + n + 2), \quad (5.52)$$

et les solutions propres correspondantes sont proportionnelles à $\cos(n\theta)$. Remarquons, donc, que le spectre $E_{k,n}^{>}$ est décalé vers le haut par rapport au spectre d'énergie $E_{k,n}^{<}$. Plus explicitement l'énergie du fondamental pour $\nu_{>} = 1$ (équation (5.52) avec $n = 0$) est égale à l'énergie du premier état excité pour $\nu_{<} = 0$ (équation (5.51) avec $n = 1$).

Notons, finalement, que l'ensemble des solutions $\{\cos(n\theta), \sin(n\theta)\}$ avec n un entier positif permet de donner les harmoniques $\exp(in\theta)$ avec $\theta \in [0, 2\pi]$.

Le modèle unidimensionnel, étudié dans cette section, représentant un système quantique de deux particules décrit par l'Hamiltonien (5.1) a été récemment généralisé à la dimension d'espace D quelconque ($D \geq 2$) [81]. L'analyse détaillée de cette étude fait l'objet des prochains paragraphes.

5.2 Le modèle à la dimension d'espace $D = 2$

5.2.1 Position du problème

On considère, donc, le problème à deux corps, décrit dans la section précédente, mais cette fois-ci dans la dimension d'espace $D = 2$. L'Hamiltonien du système s'écrit comme suit

$$H(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\Delta_{\vec{r}_1} - \Delta_{\vec{r}_2} + \omega^2 (\vec{r}_1^2 + \vec{r}_2^2) + 4\lambda \frac{2\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2}{(\vec{r}_1^2 + \vec{r}_2^2) |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2}, \quad (5.53)$$

où $\Delta_{\vec{r}_i}$ ($i = 1, 2$) représentent les Laplaciens, dans la dimension d'espace $D = 2$, agissant, respectivement, dans les espaces de Hilbert des particules 1 et 2, dont les positions sont repérées par les "vecteurs position" \vec{r}_1 et \vec{r}_2 et $\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2$ désigne le produit scalaire des deux vecteurs. λ est la constante de couplage du potentiel d'interaction mutuelle entre les deux particules (le facteur 4 a été introduit pour des raisons de commodité).

l'Hamiltonien (5.53) représente, donc, une généralisation directe du problème unidimensionnel décrit par (5.1). Pour trouver les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire correspondante, opérons, au préalable, une transformation introduisant les variables (vectorielles) du centre de masse et relative comme suit

$$\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{\sqrt{2}}, \quad \vec{s} = \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{\sqrt{2}}. \quad (5.54)$$

Ceci va permettre d'écrire l'équation de Schrödinger sous la forme

$$\left(-\Delta_{\vec{R}} - \Delta_{\vec{s}} + \omega^2 (R^2 + s^2) + 2\lambda \frac{R^2 - s^2}{(R^2 + s^2)s^2} \right) \Psi(\vec{R}, \vec{s}) = E\Psi(\vec{R}, \vec{s}). \quad (5.55)$$

Dans l'équation (5.55) R et s désignent, respectivement, les modules des deux vecteurs \vec{R} et \vec{s} . Les fonctions d'onde $\Psi(\vec{R}, \vec{s})$ représentent les solutions propres de (5.55) et E les énergies propres.

Comme le potentiel, dans l'équation de Schrödinger, ne dépend pas de l'angle entre les deux vecteurs \vec{R} et \vec{s} et ne dépend que des modules, alors le problème peut être résolu par séparation des variables radiales (en l'occurrence les modules R et s) et les variables angulaires (relatives à chaque vecteur). Pour ce faire considérons la transformation suivante de la fonction d'onde

$$\Psi(\vec{R}, \vec{s}) = \frac{1}{2\pi} \frac{\psi^{(\ell, \ell')}(R, s)}{\sqrt{R}\sqrt{s}} \exp(i\ell\alpha_R) \exp(i\ell'\alpha_s), \quad (5.56)$$

où les fonctions "angulaires"

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(i\ell\alpha), \quad \ell \in \mathbb{Z}, \quad \alpha \in [0, 2\pi] \quad (5.57)$$

sont les Harmoniques circulaires qui représentent les fonctions propres de la partie angulaire du Laplacien, dans la dimension $D = 2$, avec les valeurs propres $\ell^2 - \frac{1}{4}$.

En insérant, maintenant, l'"ansatz" (5.56) dans (5.55), on peut écrire l'équation de Schrödinger radiale, pour les fonctions $\psi^{(\ell, \ell')}(R, s)$, comme suit

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \omega^2 (R^2 + s^2) + \frac{\ell^2 - \frac{1}{4}}{R^2} + \frac{\ell'^2 - \frac{1}{4}}{s^2} + 2\lambda \frac{R^2 - s^2}{(R^2 + s^2)s^2} - E \right) \psi^{(\ell, \ell')}(R, s) = 0. \quad (5.58)$$

Notre but, maintenant, est de résoudre l'équation aux valeurs propres (5.58) pour des valeurs fixées de ℓ et ℓ' . Cependant, cette équation n'est pas séparable dans les variables réelles et positives R et s . Pour contourner cette difficulté passons en coordonnées "polaires" grâce à la transformation

$$\begin{aligned} R &= r \cos \theta, & s &= r \sin \theta, \\ 0 &\leq r < \infty, & 0 &\leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \end{aligned} \quad (5.59)$$

où le domaine de variation de θ est du au fait que R et s sont toutes deux positives. En outre, posons que $\psi^{(\ell, \ell')}(R, s) = \Phi(r, \theta)$ pour des valeurs fixées de ℓ et ℓ' . L'équation (5.58) peut donc se mettre sous la forme suivante

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \omega^2 r^2 + \frac{1}{r^2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\ell^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2 \theta} + \frac{\ell'^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2 \theta} + 2\lambda \frac{\cos^2 \theta - \sin^2 \theta}{\sin^2 \theta} \right] - E \right) \Phi(r, \theta) = 0. \quad (5.60)$$

Il est clair que l'équation de Schrödinger (5.60) est soluble par séparation des variables (r, θ) . Pour réaliser cela, transformons, donc, la fonction d'onde $\Phi(r, \theta)$ selon l'"ansatz" suivant

$$\Phi(r, \theta) = \frac{F(r)}{\sqrt{r}} \Theta(\theta), \quad (5.61)$$

ce qui permet d'obtenir deux équations différentielles, à résoudre, à une variable chacune. La première équation est l'équation "angulaire" donnée par

$$\left(-\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{\ell^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2 \theta} + \frac{\ell'^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2 \theta} + 2\lambda \frac{\cos^2 \theta - \sin^2 \theta}{\sin^2 \theta} \right) \Theta(\theta) = C \Theta(\theta), \quad (5.62)$$

et la seconde équation est l'équation radiale réduite qui s'écrit comme

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \omega^2 r^2 + \frac{C - \frac{1}{4}}{r^2}\right) F(r) = E F(r). \quad (5.63)$$

5.2.2 résolution de l'équation angulaire

Réécrivons l'équation angulaire (5.62) sous la forme suivante

$$\left(-\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{\ell^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2 \theta} + \frac{\ell'^2 + 2\lambda - \frac{1}{4}}{\sin^2 \theta} - 4\lambda - C\right) \Theta(\theta) = 0, \quad (5.64)$$

où, elle sera résolue dans l'intervalle $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$, avec les singularités apparaissant pour $\theta = k\frac{\pi}{2}$ ($k = 0, 1$). Au voisinage de $\theta = 0$, la singularité de $\sin^2 \theta$ se comporte comme une barrière centrifuge ($\sin^2 \theta \sim \theta^2$). Le problème peut être traité si et seulement si $\ell'^2 + 2\lambda > 0 \forall \ell'$, ce qui implique la condition : $\lambda > 0$. Au voisinage de $\frac{\pi}{2}$, la barrière centrifuge $(\ell^2 - \frac{1}{4}) / \cos^2 \theta$, ne présente aucune difficulté pour tout $\ell \neq 0$.

Introduisons maintenant le nombre $\tilde{\ell}$ défini par

$$\tilde{\ell}^2 = \ell'^2 + 2\lambda, \quad \tilde{\ell} = \sqrt{\ell'^2 + 2\lambda}. \quad (5.65)$$

où seule la racine positive a été retenue pour assurer que $\tilde{\ell} = \ell'$ pour $\lambda = 0$. L'équation (5.64) s'écrit, donc, comme

$$\left(-\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{\ell^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2 \theta} + \frac{\tilde{\ell}^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2 \theta} - 4\lambda - C\right) \Theta(\theta) = 0. \quad (5.66)$$

une équation similaire à (5.66) a été étudiée dans [48, 82]. Elle ressemble à l'équation de Pöschl-Teller.

Des solutions, acceptables physiquement, de l'équation (5.66) dans l'intervalle $[0, \frac{\pi}{2}]$ avec les conditions aux limites de Dirichlet peuvent être obtenues en fonction de polynômes orthogonaux. En effet, ceci peut être réalisé grâce à la transformation de la fonction $\Theta(\theta)$ comme suit [82]

$$\begin{aligned} \Theta(\theta) &= (\sin \theta)^{\tilde{\ell} + \frac{1}{2}} (\cos \theta)^{\ell + \frac{1}{2}} f(z), \\ z &= \cos 2\theta. \end{aligned} \quad (5.67)$$

Remarquons que la définition de $\tilde{\ell}$ (voir équation (5.65)) assure que l'exposant de $\sin \theta$, dans (5.67), est positif pour tout ℓ' . En insérant l'"ansatz" (5.67) dans (5.66) on obtient l'équation différentielle pour les fonctions $f(z)$

$$(1 - z^2) \frac{d^2 f(z)}{dz^2} + \left(\ell - \tilde{\ell} - (2 + \ell + \tilde{\ell}) z \right) \frac{df(z)}{dz} + \left(\frac{C}{4} + \lambda - \frac{(\ell + \tilde{\ell} + 1)^2}{4} \right) f(z) = 0. \quad (5.68)$$

L'équation (5.68) aura pour solutions générales les polynômes de Jacobi $f(z) = P_n^{(\tilde{\ell}, \ell)}$ [78] si la constante de séparation C vérifie la condition de "quantification" suivante

$$C \equiv C_n = 4n \left(n + \ell + \tilde{\ell} + 1 \right) + (\ell + \tilde{\ell} + 1)^2 - 4\lambda = \left(2n + \ell + \tilde{\ell} + 1 \right)^2 - 4\lambda, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.69)$$

avec λ donnée par (voir équation (5.65))

$$\lambda = \frac{(\tilde{\ell} - \ell') (\tilde{\ell} + \ell')}{2}. \quad (5.70)$$

Les solutions, acceptables physiquement, de l'équation angulaire (5.66) s'écrivent donc comme

$$\Theta(\theta) = (\sin \theta)^{\tilde{\ell} + \frac{1}{2}} (\cos \theta)^{\ell + \frac{1}{2}} P_n^{(\tilde{\ell}, \ell)}(\cos 2\theta). \quad (5.71)$$

Le choix de $\tilde{\ell}$ comme étant la racine positive de l'équation (5.65) permet à la solution (5.71) d'avoir le "bon" comportement au niveau de la singularité $\theta = 0$.

5.2.3 Résolution de l'équation radiale

Connaissant la valeur de la constante de séparation $C \equiv C_n$ (équation (5.69)), on est en mesure, maintenant, de résoudre l'équation radiale (5.63) dans l'intervalle $0 \leq r < \infty$, avec les conditions aux limites pour la fonction $F(r)$

$$F(0) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow +\infty} F(r) = 0. \quad (5.72)$$

Pour traiter le problème, la constante C_n doit être strictement positive pour tout entier positif n . Cette condition est satisfaite si

$$(\ell + \tilde{\ell} + 1)^2 - 4\lambda > 0, \quad \forall \ell, \ell'. \quad (5.73)$$

La valeur minimale de $\tilde{\ell}$ (voir équation (5.65)), qu'on désigne par $\tilde{\ell}_c$, est donnée

$$\tilde{\ell}_c = \sqrt{2\lambda}. \quad (5.74)$$

Par conséquent, la constante $C_n > 0$ pour tout n, ℓ et ℓ' si

$$\left(\tilde{\ell}_c + 1\right)^2 - 4\lambda > 0, \quad (5.75)$$

inégalité vérifiée pour

$$0 \leq \lambda < \frac{3}{2} + \sqrt{2}. \quad (5.76)$$

En conclusion, le problème sera traité pour les valeurs "acceptables" de λ incluses dans le domaine donné par (5.76). Maintenant que la condition $C_n > 0$ étant satisfaite, définissons une constante auxilliare b_n comme suit

$$C_n = b_n^2, \quad b_n = \sqrt{\left(2n + \ell + \tilde{\ell} + 1\right)^2 - 4\lambda}, \quad (5.77)$$

ce qui permet d'écrire les solutions de l'équation radiale (5.63) sous la forme

$$F(r) = r^{b_n + \frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{t}{2}\right)g(t), \quad t = \omega r^2. \quad (5.78)$$

Il est évident que b_n a été choisie comme étant la racine positive de C_n pour assurer que les solutions soient de carré sommable et avoir le comportement "correct" à l'origine.

En insérant l'"ansatz" (5.78) dans (5.63), on obtient l'équation différentielle pour les fonctions $g(t)$

$$t \frac{d^2 g(t)}{dt^2} + (b_n + 1 - t) \frac{dg(t)}{dt} + \left(\frac{E}{4\omega} - \frac{b_n}{2} - \frac{1}{2}\right) g(t) = 0. \quad (5.79)$$

Les solutions de l'équation (5.79) sont les polynômes de Laguerre généralisés

$$g(t) = L_k^{(b_n)}(t), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.80)$$

si les énergies propres E vérifient la relation

$$E \equiv E_k = 2\omega (2k + b_n + 1), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (5.81)$$

5.2.4 Solutions de l'équation de Schrödinger

Pour l'équation de Schrödinger (5.60), les solutions-propres non normalisées peuvent s'écrire, maintenant, comme

$$\begin{aligned}
\Phi_{k,n}(r, \theta) &= r \sqrt{(2n+\ell+\tilde{\ell}+1)^2-4\lambda} \exp\left(-\frac{\omega r^2}{2}\right) L_k\left(\sqrt{(2n+\ell+\tilde{\ell}+1)^2-4\lambda}\right) (\omega r^2) \\
&\quad \times (\sin \theta)^{\tilde{\ell}+\frac{1}{2}} (\cos \theta)^{\ell+\frac{1}{2}} P_n^{(\tilde{\ell}, \ell)}(\cos 2\theta) \\
k &= 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \\
\tilde{\ell} &= \sqrt{\ell'^2 + 2\lambda}, \quad 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2},
\end{aligned} \tag{5.82}$$

et les énergies-propres comme

$$\begin{aligned}
E_{k,n}(\ell, \tilde{\ell}) &= 2\omega \left(2k + \sqrt{(2n + \ell + \tilde{\ell} + 1)^2 - 4\lambda + 1} \right), \\
k &= 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots
\end{aligned} \tag{5.83}$$

Pour calculer la constante de normalisation, il suffit d'observer que les fonctions d'onde sont orthogonales pour $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}]$ dans les sens où

$$\int_0^{+\infty} r dr \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \Phi_{k,n}(r, \theta) \Phi_{k',n'}(r, \theta) = \delta_{n,n'} \delta_{k,k'} N_{k,n}, \tag{5.84}$$

ce qui permet de calculer la constante de normalisation comme suit

$$N_{k,n} = \frac{1}{\omega^{b_n+1}} \frac{\Gamma(k + b_n + 1) \Gamma(n + \ell + 1) \Gamma(n + \tilde{\ell} + 1)}{4k! n! (2n + \ell + \tilde{\ell} + 1) \Gamma(n + \ell + \tilde{\ell} + 1)}, \tag{5.85}$$

avec $\tilde{\ell}$ et b_n données, respectivement, par (5.65) et (5.77).

Finalement, les solutions propres s'écrivent, en fonction des variables R et s , de la manière suivante

$$\begin{aligned}
\Psi_{k,n}^{(\ell, \ell')}(R, s) &= (R^2 + s^2)^{\frac{(b_n - (\ell + \tilde{\ell} + 1))}{2}} \exp\left(-\frac{\omega}{2}(R^2 + s^2)\right) L_k^{(b_n)}(\omega(R^2 + s^2)) \\
&\quad \times s^{\tilde{\ell}+\frac{1}{2}} R^{\ell+\frac{1}{2}} P_n^{(\tilde{\ell}, \ell)}\left(\frac{R^2 - s^2}{R^2 + s^2}\right).
\end{aligned} \tag{5.86}$$

Rappelons que les variables R et s sont reliées aux vecteurs position des deux particules \vec{r}_1 et \vec{r}_2 par les relations

$$R = \frac{|\vec{r}_1 + \vec{r}_2|}{\sqrt{2}}, \quad s = \frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{\sqrt{2}}. \tag{5.87}$$

En l'absence d'interaction entre les deux particules, c'est à dire, pour $\lambda = 0$, on a $\tilde{\ell} = \ell'$ et $b_n = 2n + \ell + \ell' + 1$. Dans ce cas là, les fonctions d'onde sont données par

$$\begin{aligned} \Psi_{k,n}^{(\ell,\ell')}(R, s) &= (R^2 + s^2)^n \exp\left(-\frac{\omega}{2}(R^2 + s^2)\right) L_k^{(2n+\ell+\ell'+1)}(\omega(R^2 + s^2)) \\ &\quad \times s^{\ell'+\frac{1}{2}} R^{\ell+\frac{1}{2}} P_n^{(\ell',\ell)}\left(\frac{R^2 - s^2}{R^2 + s^2}\right), \end{aligned} \quad (5.88)$$

et le spectre d'énergie correspondant devient linéaire et s'écrit comme

$$E_{k,n}(\lambda = 0) = 2\omega(2k + 2n + \ell + \ell' + 2). \quad (5.89)$$

5.3 Le modèle à la dimension d'espace $D = 3$

On considère maintenant le problème à deux corps décrit, dans la section précédente, par l'équation (5.53) mais cette fois-ci dans la dimension d'espace $D = 3$. Donc les équations (5.53), (5.54) et (5.55) restent valables, sauf que les vecteurs \vec{r}_1 et \vec{r}_2 ainsi que les opérateurs Laplaciens sont exprimés dans l'espace à trois dimensions ($D = 3$).

A prime abord, considérons la transformation de la fonction d'onde $\Psi(\vec{R}, \vec{s})$ comme suit

$$\Psi(\vec{R}, \vec{s}) = \frac{\psi^{(\ell,\ell')}(R, s)}{R s} Y_{\ell,m}(\theta_R, \varphi_R) Y_{\ell',m'}(\theta_s, \varphi_s), \quad (5.90)$$

où les fonctions "angulaires" à deux variables $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ sont les fonctions harmoniques sphériques qui représentent les fonctions propres de la partie angulaire du Laplacien, dans la dimension $D = 3$, avec les valeurs propres $\ell(\ell + 1)$ avec $\ell \in \mathbb{N}$.

L'équation de Schrödinger, équivalente à (5.58), s'écrit maintenant comme suit

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \omega^2(R^2 + s^2) + \frac{\ell(\ell + 1)}{R^2} + \frac{\ell'(\ell' + 1)}{s^2} + 2\lambda \frac{R^2 - s^2}{(R^2 + s^2)s^2} - E\right) \psi^{(\ell,\ell')}(R, s) = 0. \quad (5.91)$$

En passant en coordonnées polaires, équation (5.59), et en utilisant que $\psi^{(\ell,\ell')}(R, s) = \Phi(r, \theta)$, pour des valeurs fixées de ℓ et ℓ' , l'équation (5.91) devient

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \omega^2 r^2 + \frac{M}{r^2} - E\right) \Phi(r, \theta) = 0, \quad (5.92)$$

où l'opérateur différentiel "angulaire" M est donné par

$$M = -\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{\cos^2 \theta} + \frac{\ell'(\ell'+1)}{\sin^2 \theta} + 2\lambda \frac{\cos^2 \theta - \sin^2 \theta}{\sin^2 \theta}. \quad (5.93)$$

Il est clair que l'équation de Schrödinger (5.92) est aussi soluble par séparation des variables (r, θ) . La transformation de la fonction d'onde $\Phi(r, \theta)$ selon l'équation (5.61) permet d'obtenir deux équations différentielles. La première équation est l'équation "angulaire" donnée par

$$\left(-\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{\cos^2 \theta} + \frac{\ell'(\ell'+1)}{\sin^2 \theta} + 2\lambda \frac{\cos^2 \theta - \sin^2 \theta}{\sin^2 \theta} \right) \Theta(\theta) = C \Theta(\theta), \quad (5.94)$$

et résolue dans l'intervalle $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$; et la seconde équation est l'équation radiale réduite

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \omega^2 r^2 + \frac{C - \frac{1}{4}}{r^2} \right) F(r) = E F(r), \quad (5.95)$$

résolue dans l'intervalle $0 \leq r < \infty$.

5.3.1 résolution de l'équation angulaire

L'équation angulaire (5.94) est réécrite de la manière suivante

$$\left(-\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{\cos^2 \theta} + \frac{\ell'(\ell'+1) + 2\lambda}{\sin^2 \theta} - 4\lambda - C \right) \Theta(\theta) = 0. \quad (5.96)$$

Pour traiter le problème il faut et il suffit, à cause de la présence de la "barrière centrifuge" au voisinage de la singularité $\theta = 0$, que $\ell'(\ell'+1) + 2\lambda > -\frac{1}{4}$, pour tout $\ell' \geq 0$. Cette condition n'est satisfaite que pour les valeurs de $\lambda > -\frac{1}{8}$. En ce qui concerne la barrière centrifuge au voisinage de la singularité $\theta = \frac{\pi}{2}$, elle ne présente aucune difficulté dans le sens où la condition $\ell(\ell+1) - \frac{1}{4} > 0$ est satisfaite $\forall \ell \geq 0$, puisque $\ell(\ell+1) = (\ell + \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{4}$.

Introduisons maintenant le nombre $\tilde{\ell}$ défini par

$$\tilde{\ell}(\tilde{\ell}+1) = \ell'(\ell'+1) + 2\lambda. \quad (5.97)$$

L'équation (5.97) possède deux solutions pour $\tilde{\ell}$, données par

$$\tilde{\ell}_{\pm} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(\ell' + \frac{1}{2}\right)^2 + 2\lambda}, \quad (5.98)$$

où seule la racine positive $\tilde{\ell} = \tilde{\ell}_+$ sera retenue pour s'assurer de retrouver $\tilde{\ell} = \ell'$ pour $\lambda = 0$. L'équation (5.96) s'écrit, donc, comme

$$\left(-\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{\cos^2\theta} + \frac{\tilde{\ell}(\tilde{\ell}+1)}{\sin^2\theta} - 4\lambda - C \right) \Theta(\theta) = 0. \quad (5.99)$$

Des solutions, acceptables physiquement, de l'équation (5.99) dans l'intervalle $[0, \frac{\pi}{2}]$ avec les conditions aux limites de Dirichlet, exprimées en fonction de polynômes orthogonaux, peuvent être obtenues en utilisant la transformation de la fonction $\Theta(\theta)$

$$\begin{aligned} \Theta(\theta) &= (\sin\theta)^{\tilde{\ell}+1} (\cos\theta)^{\ell+1} f(z), \\ z &= \cos 2\theta. \end{aligned} \quad (5.100)$$

En insérant l'"ansatz" (5.100) dans (5.99) on obtient l'équation différentielle pour les fonctions $f(z)$

$$(1-z^2) \frac{d^2 f(z)}{dz^2} + (\ell - \tilde{\ell} - (\ell + \tilde{\ell} + 3)z) \frac{df(z)}{dz} + \left(\frac{C}{4} + \lambda - \frac{(\ell + \tilde{\ell} + 2)^2}{4} \right) f(z) = 0. \quad (5.101)$$

Les solutions de l'équation (5.101) sont les polynômes de Jacobi $f(z) = P_n^{(\tilde{\ell}+\frac{1}{2}, \ell+\frac{1}{2})}$ [78] si la constante de séparation C obéit à la condition de "quantification" suivante

$$C \equiv C_n = 4n(n + \ell + \tilde{\ell} + 2) + (\ell + \tilde{\ell} + 2)^2 - 4\lambda = (2n + \ell + \tilde{\ell} + 2)^2 - 4\lambda, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.102)$$

avec λ donnée par (voir équation (5.97))

$$\lambda = \frac{(\tilde{\ell} - \ell')(\tilde{\ell} + \ell' + 1)}{2}. \quad (5.103)$$

Les solutions, acceptables physiquement, de l'équation angulaire (5.99) s'écrivent, donc, comme suit

$$\Theta(\theta) = (\sin\theta)^{\tilde{\ell}+1} (\cos\theta)^{\ell+1} P_n^{(\tilde{\ell}+\frac{1}{2}, \ell+\frac{1}{2})}(\cos 2\theta). \quad (5.104)$$

Le choix de $\tilde{\ell} = \tilde{\ell}_+$ permet à la solution (5.104) d'avoir le "bon" comportement au niveau de la singularité $\theta = 0$.

5.3.2 Résolution de l'équation radiale

Dans l'équation radiale réduite

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \omega^2 r^2 + \frac{C_n - \frac{1}{4}}{r^2} - E \right) F(r) = 0, \quad (5.105)$$

la constante de séparation C_n (voir équation (5.102)) doit être strictement positive pour tout entier positif n . Comme le terme $n(n + \ell + \tilde{\ell} + 2)$ atteint sa limite inférieure pour $n = 0$, ceci permet d'avoir la condition

$$(\ell + \tilde{\ell} + 2)^2 - 4\lambda > 0, \quad \forall \ell, \ell'. \quad (5.106)$$

En utilisant la définition de $\tilde{\ell} = \tilde{\ell}_+$ (voir équation (5.98)), on a que la valeur minimale de $\tilde{\ell}$, notée par $\tilde{\ell}_c$, est donnée par

$$\tilde{\ell}_c = -\frac{1}{2} + \sqrt{2\lambda + \frac{1}{4}} \quad (5.107)$$

Dans l'inégalité (5.106), le terme élevé au carré est minimal pour $\ell = 0$ et $\tilde{\ell} = \tilde{\ell}_c$, ce qui permet, enfin, de conclure que $C_n > 0$ pour tout n, ℓ et ℓ' si

$$(\tilde{\ell}_c + 2)^2 - 4\lambda > 0, \quad (5.108)$$

inégalité satisfaite pour tout λ vérifiant

$$-\frac{1}{8} < \lambda < \frac{7}{2} + \frac{3}{2}\sqrt{5}. \quad (5.109)$$

Notons, donc, que l'intervalle pour les valeurs de λ "acceptables", dans la dimension d'espace $D = 2$ (voir (5.76)), est inclus dans celui correspondant à la dimension d'espace $D = 3$ donné par (5.109).

Introduisons maintenant la constante auxiliaire b_n définie par

$$C_n = b_n^2, \quad b_n = \sqrt{(2n + \ell + \tilde{\ell} + 2)^2 - 4\lambda}, \quad (5.110)$$

et transformons les solutions de l'équation radiale (5.105) selon l'"ansatz" suivant :

$$F(r) = r^{b_n + \frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{t}{2}\right) g(t), \quad t = \omega r^2. \quad (5.111)$$

En remplaçant (5.111) dans (5.105), on obtient l'équation différentielle pour les fonctions $g(t)$ qui s'écrit comme

$$t \frac{d^2 g(t)}{dt^2} + (b_n + 1 - t) \frac{dg(t)}{dt} + \left(\frac{E}{4\omega} - \frac{b_n}{2} - \frac{1}{2} \right) g(t) = 0. \quad (5.112)$$

L'équation (5.112) admettra comme solutions les polynômes de Laguerre généralisés $g(t) = L_k^{(b_n)}(t)$ si les énergies propres E vérifient la condition suivante

$$\frac{E}{4\omega} - \frac{b_n}{2} - \frac{1}{2} = k, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.113)$$

ou encore, de manière équivalente

$$E \equiv E_k = 2\omega (2k + b_n + 1), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (5.114)$$

5.3.3 Solutions de l'équation de Schrödinger

En regroupant les solutions obtenues pour l'équation angulaire (5.96) et l'équation radiale (5.105), les solutions de l'équation de Schrödinger (5.60), dans la dimension d'espace $D = 3$, peuvent être écrites comme suit :

Les solutions propres normalisées

$$\begin{aligned} \Phi_{k,n}(r, \theta) &= N_{k,n}^{-\frac{1}{2}} r \sqrt{(2n + \ell + \tilde{\ell} + 2)^2 - 4\lambda} \exp\left(-\frac{\omega r^2}{2}\right) L_k^{\left(\sqrt{(2n + \ell + \tilde{\ell} + 2)^2 - 4\lambda}\right)}(\omega r^2) \\ &\quad \times (\sin \theta)^{\tilde{\ell} + 1} (\cos \theta)^{\ell + 1} P_n^{(\tilde{\ell} + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2})}(\cos 2\theta), \\ k &= 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \\ \tilde{\ell} &= -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 + 2\lambda}, \quad 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \end{aligned} \quad (5.115)$$

et les énergies propres

$$\begin{aligned} E_{k,n}(\ell, \tilde{\ell}) &= 2\omega \left(2k + \sqrt{(2n + \ell + \tilde{\ell} + 2)^2 - 4\lambda + 1} \right), \\ k &= 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (5.116)$$

La constante de normalisation $N_{k,n}$, calculée selon (5.84), est donnée par

$$N_{k,n} = \frac{1}{\omega^{b_n + 1}} \frac{\Gamma(k + b_n + 1) \Gamma(n + \ell + \frac{3}{2}) \Gamma(n + \tilde{\ell} + \frac{3}{2})}{4k! n! (2n + \ell + \tilde{\ell} + 2) \Gamma(n + \ell + \tilde{\ell} + 2)}, \quad (5.117)$$

où $\tilde{\ell} = \tilde{\ell}_+$ et b_n sont données, respectivement, par (5.98) et (5.110).

Les solutions propres s'écrivent en fonction des variables R et s comme

$$\begin{aligned} \Psi_{k,n}^{(\ell,\ell')}(R,s) &= (R^2 + s^2)^{\frac{(b_n - (\ell + \tilde{\ell} + 2))}{2}} \exp\left(-\frac{\omega}{2}(R^2 + s^2)\right) L_k^{(b_n)}(\omega(R^2 + s^2)) \\ &\quad \times s^{\tilde{\ell}+1} R^{\ell+1} P_n^{(\tilde{\ell}+\frac{1}{2}, \ell+\frac{1}{2})}\left(\frac{R^2 - s^2}{R^2 + s^2}\right). \end{aligned} \quad (5.118)$$

Pour $\lambda = 0$, on a que $\tilde{\ell} = \ell'$ et $b_n = 2n + \ell + \ell' + 2$. Les fonctions d'onde sont données, dans ce cas là, par

$$\begin{aligned} \Psi_{k,n}^{(\ell,\ell')}(R,s) &= (R^2 + s^2)^n \exp\left(-\frac{\omega}{2}(R^2 + s^2)\right) L_k^{(2(n+1)+\ell+\ell')}(\omega(R^2 + s^2)) \\ &\quad \times s^{\ell'+1} R^{\ell+1} P_n^{(\tilde{\ell}+\frac{1}{2}, \ell+\frac{1}{2})}\left(\frac{R^2 - s^2}{R^2 + s^2}\right), \end{aligned} \quad (5.119)$$

et les énergies propres par

$$E_{k,n}(\lambda = 0) = 2\omega(2k + 2n + \ell + \ell' + 3). \quad (5.120)$$

5.4 Le modèle à la dimension d'espace D

La généralisation du problème à la dimension d'espace D quelconque, suit la même procédure que dans les deux sections précédentes relatives, respectivement, à $D = 2$ et $D = 3$. La première étape consiste, donc, en l'utilisation de la transformation dans les coordonnées du centre de masse et de la variable relative (voir (5.54)). La deuxième étape réside dans la transformation de la fonction d'onde $\Psi(\vec{R}, \vec{s})$ avec l'utilisation des harmoniques hypersphériques [83]

$$\Psi(\vec{R}, \vec{s}) = \frac{\psi^{(\ell,\ell')}(R,s)}{(Rs)^{\frac{(D-1)}{2}}} Y_{\ell,[M]}(\Omega_R) Y_{\ell',[M']}(\Omega_s), \quad (5.121)$$

où $[M]$ désigne l'ensemble des valeurs $[M] = \{m_1, m_2, \dots, m_p\}$, $p = D - 2$, qui satisfont $\ell = m_0 \geq m_1 \geq m_2 \geq \dots \geq m_p \geq 0$ et les harmoniques hypersphériques sont données par [83]

$$Y_{\ell,[M]} = e^{\pm i m_p \phi} \prod_{k=1}^p (\sin \theta_k)^{m_k} \prod_{k=0}^{p-1} C_{m_k - m_{k+1}}^{(m_{k+1} + \frac{p}{2} - \frac{k}{2})}(\cos \theta_{k+1}). \quad (5.122)$$

Les $C_n^{(a)}(z)$ sont les polynômes de Gegenbauer [78].

Rappelons que les coordonnées hypersphériques sont données par

$$\begin{aligned}
x_1 &= r \cos \theta_1, \\
x_2 &= r \sin \theta_1 \cos \theta_2, \\
x_3 &= r \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos \theta_3, \\
&\dots \\
x_{p+1} &= r \sin \theta_1 \sin \theta_2 \dots \sin \theta_p \cos \phi, \\
x_{p+2} &= r \sin \theta_1 \sin \theta_2 \dots \sin \theta_p \sin \phi,
\end{aligned} \tag{5.123}$$

avec $\theta_k \in [0, \pi]$, $k = 1, 2, \dots, p$ et $\phi \in [0, 2\pi]$.

La troisième étape est l'écriture de l'équation de Schrödinger dans les variables (R, s) , équivalent de l'équation (5.91), comme suit

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \omega^2 (R^2 + s^2) + \frac{L(L+1)}{R^2} + \frac{L'(L'+1)}{s^2} + 2\lambda \frac{R^2 - s^2}{(R^2 + s^2)s^2} - E \right) \psi^{(\ell, \ell')} = 0, \tag{5.124}$$

où les nombres L et L' sont définis par

$$L \equiv \ell + \frac{D-3}{2}, \quad L' \equiv \ell' + \frac{D-3}{2}, \quad \frac{D-3}{2} \geq 0. \tag{5.125}$$

La ressemblance des deux équations (5.91) et (5.124) va permettre d'utiliser les résultats obtenus dans le cas $D = 3$, où il suffira de remplacer, respectivement, ℓ par L et ℓ' par L' . En effet, en passant en coordonnées polaires (r, θ) , équation (5.59), et en réécrivant que $\psi^{(\ell, \ell')}(R, s) = \Phi(r, \theta)$, l'équation (5.124) va se scinder en deux équations, découplées dans les variables (r, θ) , l'une angulaire et l'autre radiale. Les solutions propres de chacune des équations permettront de calculer la fonction d'onde totale $\Phi(r, \theta)$ selon l'équation de transformation (5.61).

5.4.1 Résolution de l'équation angulaire

L'équation angulaire, qui sera résolue dans $[0, \frac{\pi}{2}]$ avec les conditions $\Theta(0) = \Theta(\frac{\pi}{2}) = 0$, s'écrit dans ce cas (voir équation (5.96))

$$\left(-\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{L(L+1)}{\cos^2 \theta} + \frac{L'(L'+1) + 2\lambda}{\sin^2 \theta} - 4\lambda - C \right) \Theta(\theta) = 0. \tag{5.126}$$

La barrière centrifuge au voisinage de $\theta = 0$, peut être "traitée" pour tout ℓ' si et seulement si $L'(L'+1) + 2\lambda - \frac{1}{4} > 0$ ou de manière équivalente $\lambda > -\frac{1}{8}(D-2)^2$. Remar-

quons que l'on retrouve les conditions sur la constante de couplage λ , pour les cas $D = 2$ et $D = 3$, permettant de traiter la barrière centrifuge au voisinage de $\theta = 0$.

Introduisons, maintenant, le nombre \tilde{L} défini par l'équation

$$\tilde{L}(\tilde{L} + 1) = L'(L' + 1) + 2\lambda, \quad (5.127)$$

ou encore par

$$\tilde{L} = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(L' + \frac{1}{2}\right)^2 + 2\lambda}. \quad (5.128)$$

On ne retient que la racine positive de l'équation (5.127) pour s'assurer d'avoir $\tilde{L} = L'$ quand $\lambda = 0$. Finalement, l'équation (5.126) s'écrit comme suit

$$\left(-\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{L(L+1)}{\cos^2\theta} + \frac{\tilde{L}(\tilde{L}+1)}{\sin^2\theta} - 4\lambda - C\right) \Theta(\theta) = 0. \quad (5.129)$$

Par analogie avec l'équation (5.99) et en suivant la même démarche que pour le cas $D = 3$, nous pouvons conclure que les solutions propres et les valeurs propres de l'équation angulaire (5.129) sont données, respectivement, par

$$\Theta_n(\theta) = (\sin\theta)^{\tilde{L}+1} (\cos\theta)^{L+1} P_n^{\left(\tilde{L}+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}\right)}(\cos 2\theta), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.130)$$

$$C_n = (2n + L + \tilde{L} + 2)^2 - 4\lambda, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.131)$$

avec

$$\lambda = \frac{(\tilde{L} - L')(\tilde{L} + L' + 1)}{2}. \quad (5.132)$$

5.4.2 Résolution de l'équation radiale

L'équation radiale

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \omega^2 r^2 + \frac{C_n - \frac{1}{4}}{r^2}\right) F(r) = E F(r), \quad (5.133)$$

est résolue dans l'intervalle $0 \leq r < \infty$ avec les conditions aux limites (5.72), et la condition que la constante de séparation C_n , équation (5.131), doit être strictement positive pour tout n, ℓ et ℓ' . Dans l'expression de C_n le terme élevé à la puissance deux est minimal pour

$n = 0$, $L = \frac{D-3}{2}$ (voir équation (5.125)) et $\tilde{L} = \tilde{L}_{\text{inf}}$ où \tilde{L}_{inf} est la limite inférieure de \tilde{L} (pour D fixée) obtenue pour $\ell' = 0$ (voir équation (5.128)) et donnée par

$$\tilde{L}_{\text{inf}} = \frac{1}{2} \left(-1 + \sqrt{(D-2)^2 + 8\lambda} \right). \quad (5.134)$$

La condition $C_n > 0$ implique, donc, que $(\frac{D+1}{2} + \tilde{L}_{\text{inf}})^2 - 4\lambda > 0$, ou de manière équivalente

$$-4\lambda + 2 + D^2 + D \left(-2 + \sqrt{(D-2)^2 + 8\lambda} \right) > 0. \quad (5.135)$$

En combinant la condition (5.135) avec celle obtenue lors de la résolution de l'équation angulaire, ceci nous permet d'obtenir l'intervalle pour les valeurs "acceptables" de la constante de couplage λ

$$-\frac{1}{8}(D-2)^2 < \lambda < \frac{1}{2} \left(1 + D^2 + D \left(-1 + \sqrt{2 - 2D + D^2} \right) \right). \quad (5.136)$$

Remarquons que la longueur de l'intervalle (5.136) pour les valeurs de λ , augmente avec la dimension d'espace D . Ceci peut se voir, aisément, pour quelques valeurs de $D \geq 2$:

$$\begin{aligned} D = 2 : & \quad 0 < \lambda < \frac{3}{2} + \sqrt{2}, \\ D = 3 : & \quad -\frac{1}{8} < \lambda < \frac{7}{2} + \frac{3}{2}\sqrt{5}, \\ D = 4 : & \quad -\frac{1}{2} < \lambda < \frac{13}{2} + 2\sqrt{10}, \\ D = 5 : & \quad -\frac{9}{8} < \lambda < \frac{21}{2} + \frac{5}{2}\sqrt{17}. \end{aligned}$$

L'introduction du paramètre auxiliaire b_n ,

$$C_n = b_n^2, \quad b_n = \sqrt{(2n + L + \tilde{L} + 2)^2 - 4\lambda}, \quad (5.137)$$

permet d'écrire les solutions propres de l'équation radiale (5.133), en fonction des polynômes de Laguerre généralisées $L_k^{(b_n)}$, sous la forme

$$F(r) = r^{b_n + \frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\omega r^2}{2}\right) L_k^{(b_n)}(\omega r^2), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.138)$$

et les énergies-propres comme

$$E \equiv E_k = 2\omega(2k + b_n + 1), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (5.139)$$

5.4.3 Solutions de l'équation de Schrödinger

La forme générale de l'équation de Schrödinger, dans une dimension d'espace quelconque $D \geq 2$, dans les coordonnées "polaires" (r, θ) et pour ℓ et ℓ' fixées, s'écrit

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \omega^2 r^2 + \frac{M}{r^2} - E \right) \Phi(r, \theta) = 0, \quad (5.140)$$

avec l'opérateur M donné par

$$M = -\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{L(L+1)}{\cos^2 \theta} + \frac{L'(L'+1)}{\sin^2 \theta} + 2\lambda \frac{\cos^2 \theta - \sin^2 \theta}{\sin^2 \theta}. \quad (5.141)$$

Les solutions-propres de (5.140) s'écrivent comme suit

$$\begin{aligned} \Phi_{k,n}(r, \theta) &= N_{k,n}^{-\frac{1}{2}} r^{\sqrt{(2n+L+\tilde{L}+2)^2-4\lambda}} \exp\left(-\frac{\omega r^2}{2}\right) L_k^{\left(\sqrt{(2n+L+\tilde{L}+2)^2-4\lambda}\right)}(\omega r^2) \\ &\quad \times (\sin \theta)^{\tilde{L}+1} (\cos \theta)^{L+1} P_n^{\left(\tilde{L}+\frac{1}{2}, L+\frac{1}{2}\right)}(\cos 2\theta), \\ k &= 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \\ \tilde{L} &= -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(\ell' + \frac{D-2}{2}\right)^2 + 2\lambda}, \quad L = \ell + \frac{D-3}{2} \end{aligned} \quad (5.142)$$

et le spectre d'énergie discret est donné par

$$\begin{aligned} E_{k,n}(L, \tilde{L}) &= 2\omega \left(2k + \sqrt{(2n+L+\tilde{L}+2)^2 - 4\lambda + 1} \right), \\ k &= 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (5.143)$$

La constante de normalisation $N_{k,n}$ est calculée à partir de l'équation (5.117) où il faut remplacer, respectivement, ℓ par L et $\tilde{\ell}$ par \tilde{L} et où la constante b_n est donnée par (5.137).

5.5 Exacte solubilité et propriétés intrinsèques du modèle

Dans le problème à deux corps étudié dans ce chapitre, l'Hamiltonien a pu être séparé dans les variables "polaires" (r, θ) et le spectre d'énergie a été obtenu ainsi que les solutions propres des états liés qui ont été exprimées à l'aide de polynômes orthogonaux, aussi bien dans le cas unidimensionnel que le dans le cas $D \geq 2$. Cette situation fait resurgir la

question de l'origine de l'exacte solubilité du modèle et son lien avec certaines de ses propriétés intrinsèques probables (superintégrabilité, symétries cachées,...etc).

En effet, un Hamiltonien est dit exactement soluble selon la définition dans [84] si son spectre peut être calculé algébriquement. Ceci peut se réaliser dans certaines circonstances [84] :

1. Il existe une transformation de jauge et un changement de variables permettant à l'Hamiltonien transformé d'avoir comme solutions propres des polynômes (comme l'oscillateur harmonique ou l'atome d'hydrogène en tant que modèles exactement solubles) exprimées dans les nouvelles variables

2. L'Hamiltonien transformé de jauge est un élément de l'algèbre enveloppante d'une certaine algèbre de Lie affine. Notons que dans ce contexte il a été démontré que l'exacte solubilité de certains modèles était liée à certaines symétries cachées reliées à des algèbres de Lie, par exemple, dans [67] pour le problème à trois corps de Sutherland et dans [85] pour différents modèles à trois corps de type Calogero-Sutherland.

Récemment, une version modifiée du problème à deux corps traité dans ce chapitre (remplacer $-\lambda$ par μ dans le terme du potentiel $\frac{1}{x_1^2+x_2^2}$ dans l'équation (5.2)) a été étudiée dans [69] où il a été montré que ce modèle appartenait à la classe des systèmes possédant comme symétrie sous-jacente la symétrie conforme $SU(1,1)$.

En outre, il est connu que dans le cadre de la mécanique quantique supersymétrique (MQSM) [86], le spectre d'énergie d'un Hamiltonien, dans le cas unidimensionnel ou les cas à potentiel central (un problème à potentiel central peut être considéré comme un problème unidimensionnel dans la demi ligne positive) est calculé algébriquement si le potentiel appartient à la classe de potentiels dits "invariants de forme" [87].

Il est donc justifié de vouloir investiguer sur l'origine de l'exacte solubilité du modèle à deux corps étudié ici, quant au fait, d'une part, qu'il est supersymétrique ou non dans le sens où les potentiels radial et angulaire sont tous deux "invariants de forme", et d'appartenir, d'autre part, à la classe des systèmes invariants sous la symétrie conforme $SU(1,1)$ dans les cas où la dimension d'espace $D \geq 2$. Nous allons exposer ces deux points dans les paragraphes ci-dessous.

5.5.1 Supersymétrie et invariance de forme des potentiels radial et angulaire

Dans le formalisme de la mécanique quantique supersymétrique [86], les Hamiltoniens de deux systèmes sont connectés l'un à l'autre par des transformations algébriques "supersymétriques". En raison de cette symétrie les spectres des deux Hamiltoniens sont identiques à l'exception de l'énergie du fondamental. Un important développement fut l'introduction du concept d'invariance de forme [87]. Si les deux Hamiltoniens, reliés par la supersymétrie, satisfont à la condition d'invariance de forme, alors le spectre ainsi que les fonctions d'onde peuvent être déterminés par des calculs algébriques simples. Il s'est

avéré que la plupart des potentiels solubles connus étaient invariants de forme. Une liste de ce genre de potentiels unidimensionnels est disponible dans la littérature [89, 90, 91]. Néanmoins, il a été montré que l'invariance de forme n'était pas une caractéristique générale des potentiels exactement solubles [88]. Il a été montré aussi que l'invariance de forme et la (MQSM) sont étroitement reliées à la méthode de factorisation de Infeld et Hull [92].

Pour le cas de notre problème à deux corps, obtenir une solution algébrique pour tout le problème requiert que les potentiels dans les variables radial et angulaires soient, tous deux, séparément supersymétriques et invariants de forme. Pour apprécier ce qui est signifié par invariance de forme (pour une analyse plus complète et détaillée du sujet se référer à [89]), considérons un "super-potentiel" $W(s)$ où la variable s peut désigner la variable radiale r ou la variable angulaire θ . La paire de potentiels partenaires supersymétriques est donnée par

$$V_{\pm}(s) = W^2(s) \pm \frac{dW(s)}{ds}. \quad (5.144)$$

Les Hamiltoniens partenaires sont factorisés de la manière suivante

$$H_-(s) = A^\dagger A \quad H_+(s) = AA^\dagger, \quad (5.145)$$

où

$$A = \frac{d}{ds} + W(s), \quad (5.146)$$

$$A^\dagger = -\frac{d}{ds} + W(s). \quad (5.147)$$

Si la paire V_{\pm} de potentiels ont la même forme mais différent seulement dans les paramètres qui apparaissent en eux, alors ils sont dits invariants de forme. Par exemple, considérons $V_{\pm}(s, a_0)$, où a_0 est un ensemble de paramètres. L'invariance de forme implique que

$$V_+(s, a_0) = V_-(s, a_1) + R(a_1) \quad (5.148)$$

où a_1 une fonction arbitraire de a_0 ($a_1 = f(a_0)$), et le reste $R(a_1)$ est indépendant de la variable s . Dans ce cas le spectre d'énergie de l'Hamiltonien H_- est donné par

$$E_n^{(-)}(a_0) = \sum_{k=1}^n R(a_k), \quad n = 1, 2, \dots, \quad E_0^{(-)}(a_0) = 0, \quad (5.149)$$

avec $a_k = f^k(a_0)$, c-à-d que la fonction f s'applique k fois. Le spectre de l'Hamiltonien H_+ est identique à celui de H_- sauf pour le fondamental

$$E_n^{(+)} = E_{n+1}^{(-)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.150)$$

Les fonctions propres de H_- peuvent aussi être obtenues algébriquement [89] et exprimées sous une forme simple

$$\Psi_n^{(-)}(s, a_0) = N_0 A^\dagger(s, a_0) A^\dagger(s, a_1) \dots A^\dagger(s, a_{n-1}) \Psi_n^{(-)}(s, a_n), \quad (5.151)$$

et les fonctions propres de H_- et H_+ sont reliées par les opérateurs A^\dagger et A :

$$\Psi_{n+1}^{(-)}(s) = (E_n^{(+)})^{-\frac{1}{2}} A^\dagger \Psi_n^{(+)}(s), \quad (5.152)$$

$$\Psi_n^{(+)}(s) = (E_{n+1}^{(-)})^{-\frac{1}{2}} A \Psi_{n+1}^{(-)}(s). \quad (5.153)$$

Supersymétrie et invariance de forme du potentiel angulaire

Considérons, dans le cas général de la dimension d'espace $D \geq 2$, le potentiel angulaire (voir équation (5.129))

$$V_\theta \equiv \frac{L(L+1)}{\cos^2 \theta} + \frac{\tilde{L}(\tilde{L}+1)}{\sin^2 \theta}. \quad (5.154)$$

Ce potentiel est supersymétrique et invariant de forme. Pour voir cela, introduisons le superpotentiel

$$W(\theta) = A \tan \theta - B \cot \theta, \quad (5.155)$$

où A et B sont des constantes. Les potentiels $V_\pm(\theta)$ invariants de forme correspondants sont calculés à partir de (5.144)

$$V_\pm(\theta) = -(A+B)^2 + \frac{A(A \pm 1)}{\cos^2 \theta} + \frac{B(B \pm 1)}{\sin^2 \theta}. \quad (5.156)$$

Donc on remarque que

$$V_+(A, B, \theta) = V_-(A+1, B+1, \theta) + (A+B+2)^2 - (A+B)^2. \quad (5.157)$$

Les solutions propres et les valeurs propres pour l'équation de Schrödinger avec le potentiel invariant de forme V_- sont connues et ont été répertoriées dans le tableau 1 de la référence [90]. Les valeurs propres sont données par

$$E_n^{(-)} \equiv b_n^2 = (A+B+2n)^2 - (A+B)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.158)$$

et les fonctions propres par

$$\Psi_n^{(-)}(\theta) = (1-g)^{\frac{B}{2}}(1+g)^{\frac{A}{2}}P_n^{(B-\frac{1}{2}, A-\frac{1}{2})}(g), \quad g = \cos(2\theta), \quad (5.159)$$

où $P_n^{(m)}(g)$ représentent les polynômes de Jacobi. En comparant maintenant le potentiel V_θ (équation (5.154)) et le potentiel V_- (équation (5.156)), on voit qu'ils seront identiques (à la constante additive $-(A+B)^2$ près), c-à-d

$$V_\theta = V_- + (A+B)^2, \quad (5.160)$$

si on pose que

$$A = L + 1, \quad B = \tilde{L} + 1. \quad (5.161)$$

Donc le potentiel V_θ est un potentiel supersymétrique et invariant de forme. Les solutions de l'équation de Schödinger (équation (5.129) pour le potentiel angulaire peuvent être, donc, déduites en utilisant les équations (5.158), (5.159), (5.160) et (5.161).

Concernant le potentiel angulaire correspondant au cas unidimensionnel (voir équation (5.9)), il apparaît que ce potentiel n'a pas été, déjà, répertorié dans la littérature comme étant un potentiel supersymétrique et invariant de forme. Cependant, l'invariance de forme de ce potentiel a été montrée récemment dans [68].

En effet, considérons le superpotentiel

$$W(\varphi) = A \frac{\cos(2\varphi)}{1 - \sin(2\varphi)}, \quad (5.162)$$

où A est une constante. Les potentiels partenaires supersymétriques et invariants de forme $V_\pm(\varphi)$ s'écrivent, donc, comme

$$V_\pm(\varphi) = A(A \pm 2) + 2A(A \pm 1) \frac{\sin(2\varphi)}{1 - \sin(2\varphi)}, \quad (5.163)$$

ce qui implique que

$$V_+(A, \theta) = V_-(A+1, \theta) - (A^2 - 1) + A(A+2)$$

On remarque que le potentiel angulaire dans l'équation (5.9) est identique à V_- (à une constante additive près égale à $A(A-2)$) si on pose que $\lambda = 2A(A-1)$. Sous cette condition le potentiel angulaire (équation (5.9)) est donc supersymétrique et invariant de forme.

Supersymétrie et invariance de forme du potentiel radial

En ce qui concerne le potentiel de l'équation radiale, dont la forme est identique pour tous les cas étudiés (voir équations (5.27), (5.63), (5.95) et (5.133)), il s'écrit de manière générale comme

$$V_r(r) = \omega^2 r^2 + \frac{b_n^2 - \frac{1}{4}}{r^2}, \quad r \geq 0, \quad (5.164)$$

où la constante b_n^2 représente la valeur propre de l'équation angulaire apparaissant dans le problème. Le potentiel (5.164) est connu dans la littérature comme appartenant à la classe des potentiels invariants de forme et que les solutions correspondantes peuvent être obtenues algébriquement (voir par exemple [89, 90]). Cette propriété d'invariance de forme peut être mise en évidence si l'on considère le superpotentiel suivant

$$W(r) = Ar - \frac{B+1}{r}, \quad (5.165)$$

avec A et B des constantes. Les équations (5.144) donnent les potentiels partenaires V_{\pm}

$$V_+(r) = Ar^2 + \frac{(B+1)(B+2)}{r^2} - A(2B+1), \quad (5.166)$$

$$V_-(r) = Ar^2 + \frac{B(B+1)}{r^2} - A(2B+3). \quad (5.167)$$

un calcul simple montre que V_+ et V_- sont invariants de forme puisqu'ils vérifient

$$V_+(A, B, r) = V_-(A, B+1, r) + A(2B+5) - A(2B+1). \quad (5.168)$$

Les solutions propres et les énergies propres de l'Hamiltonien avec le potentiel $V_-(r)$ (équation (5.167)) sont données, respectivement, par (voir tableau 1 de la référence [90])

$$E_n^{(-)} = 4kA, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.169)$$

$$\Psi_n^{(-)}(r) = g^{\frac{B+1}{2}} \exp\left(-\frac{g}{2}\right) L_k^{(B+\frac{1}{2})}(g), \quad g = Ar^2, \quad (5.170)$$

où $L_k^{(m)}$ désignent les polynômes de Laguerre généralisés. Notre potentiel radial V_r (équation (5.164)) sera identique à V_- (équation (5.167)) à une constante additive près, c-à-d

$$V_r(r) = V_-(r) + A(2B+3), \quad (5.171)$$

si l'on pose

$$A = \omega, \quad B = b_n - \frac{1}{2}. \quad (5.172)$$

On arrive donc à la conclusion que le potentiel radial V_r est aussi un potentiel supersymétrique et invariant de forme et les solutions des équations radiales (5.27), (5.63), (5.95) et (5.133), sont simplement obtenues en utilisant les résultats (5.169), (5.170) et les relations (5.171) et (5.172).

En conclusion, pour le problème à deux corps de type Calogero étudié dans ce chapitre, dans n'importe quelle dimension d'espace $D \geq 1$, la propriété de supersymétrie du modèle tout entier (dans le sens où les potentiels angulaires et radial rencontrés appartiennent à la classe des potentiels invariants de forme) peut constituer l'origine de son exacte solubilité. Notons que la supersymétrie du problème pourrait ne pas être la seule raison de l'exacte solubilité dans la mesure où d'autres symétries "cachées" peuvent constituer des raisons suffisantes pour que le modèle soit exactement soluble.

5.5.2 Symétrie $SU(1, 1)$

On a déjà mentionné au début de cette section qu'une version "légèrement" modifiée du modèle unidimensionnel à deux corps, étudié dans ce chapitre, possédait comme symétrie sous-jacente la symétrie conforme $SU(1, 1)$ [69]. On pourrait se demander si le modèle dans la dimension d'espace $D \geq 2$ conservait toujours cette propriété et pourrait, donc, constituer une autre raison expliquant son exacte solubilité.

Notons que, récemment, une procédure générale pour intégrer des systèmes quantiques à plusieurs corps ayant comme symétrie cachée la symétrie $SU(1, 1)$ a été mise en place [93]. Cette procédure est basée sur le fait qu'un système quantique à N corps, possédant la symétrie conforme, peut être rendu équivalent, grâce à la transition à la représentation dite de Bargmann [93], à un système de N oscillateurs harmoniques avec une fréquence commune et dans une dimension d'espace arbitraire.

Pour le problème à deux corps ($N=2$) et pour l'Hamiltonien (5.2), considérons l'ensemble des trois opérateurs [69] :

$$\begin{aligned} T_+ &= \sum_{i=1}^2 x_i^2 = r^2, \\ T_- &= \sum_{i=1}^2 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - V(x_1, x_2) = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) - V, \\ T_0 &= \sum_{i=1}^2 x_i \frac{\partial}{\partial x_i} + 1 = r \frac{\partial}{\partial r} + 1, \end{aligned} \quad (5.173)$$

où V est donné par

$$V = \frac{\lambda}{(x_1 - x_2)^2} - \frac{\lambda}{x_1^2 + x_2^2}. \quad (5.174)$$

Les opérateurs T_+, T_- et T_0 , exprimées dans (5.173) en coordonnées polaires (équation (5.5)), constituent les générateurs du groupe de symétrie conforme $SU(1, 1)$ puisqu'ils obéissent à l'algèbre

$$[T_-, T_+] = 2T_0, \quad [T_0, T_\pm] = \pm T_\pm, \quad (5.175)$$

avec le potentiel V une fonction réelle homogène d'ordre -2 , c'est à dire satisfaisant la relation

$$\left[\sum_{i=1}^2 x_i \frac{\partial}{\partial x_i}, V \right] = -2V. \quad (5.176)$$

L'Hamiltonien (5.2) peut être représenté en fonction des générateurs comme $H = \omega^2 T_+ - T_-$ (H est un élément de l'algèbre (5.175)) et l'opérateur de Casimir C de l'algèbre $SU(1, 1)$ est donné par [69] $C = T_0(T_0 - 1) - T_+ T_-$. Comme L'Hamiltonien et l'opérateur de Casimir commutent, ils constituent alors tous deux des quantités conservées. Donc le système étudié est intégrable.

Le problème consistant à résoudre l'équation aux valeurs propres pour l'Hamiltonien (5.2) est transformé, via le passage à la représentation de Bargmann, à un problème aux valeurs propres pour un Hamiltonien, de deux oscillateurs "déformés", donné par $2\omega T_0$. Le spectre d'énergie et les fonctions d'ondes sont déterminés selon la démarche explicitée dans [69].

Il est légitime de se poser la question sur le rôle de la symétrie conforme dans l'exacte solubilité du modèle dans le cas de la dimension d'espace $D \geq 2$. Intuitivement il est suspecté que le modèle à la dimension d'espace D possède la symétrie conforme $SU(1, 1)$ comme symétrie sous-jacente à cause du fait que le potentiel, dans ces cas aussi, admet la séparation entre les variables radial et angulaire. En plus le potentiel d'interaction mutuelle entre les deux corps ne dépend que de l'angle azimutal θ . Cependant, ceci n'est pas suffisant. Pour avoir la réponse correcte, utilisons les équations (5.173) avec V , dans les coordonnées polaires, donné cette fois ci par

$$V(r, \theta) = \frac{L(L+1)}{r^2 \cos^2 \theta} + \frac{L'(L'+1)}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{2\lambda \cos^2 \theta - \sin^2 \theta}{r^2 \sin^2 \theta}, \quad (5.177)$$

avec L et L' définies par (5.125). Les deux relations de commutation

$$[T_0, T_+] = T_+, \quad [T_-, T_+] = 2T_0, \quad (5.178)$$

sont vérifiées quel que soit $V(r, \theta)$. Par contre, la relation de commutation

$$[T_0, T_-] = -T_-, \quad (5.179)$$

est satisfaite si et seulement si

$$2V(r, \theta) + r \frac{\partial}{\partial r} V(r, \theta) = 0. \quad (5.180)$$

Une fois l'équation (5.180) intégrée, elle est équivalente à

$$V(r, \theta) = \frac{C(\theta)}{r^2}, \quad (5.181)$$

où C est une fonction quelconque de θ . Il est clair, maintenant, que $V(r, \theta)$, donné par l'équation (5.177), satisfait à la condition (5.181) et vérifie à *fortiori* l'équation (5.180), c-à-d que $V(r, \theta)$ est une fonction homogène d'ordre -2 comme déjà mentionné dans [69].

En conclusion notre Hamiltonien dans la dimension d'espace D quelconque, appartient à la classe des systèmes invariants sous la symétrie conforme $SU(1, 1)$, ce qui donne une raison plus formelle pour expliquer l'exacte solubilité du modèle.

Chapitre 6

Quelques problèmes à 3 corps exactement solubles

6.1 Une généralisation du problème à trois corps de Calogero

6.1.1 Exposé du problème

Considérons l'Hamiltonien suivant

$$H = \sum_{i=1}^3 \left(-\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \omega^2 x_i^2 \right) + \lambda \sum_{i<j}^3 \frac{1}{(x_i - x_j)^2} + \frac{\mu}{\sum_{i=1}^3 x_i^2}, \quad (6.1)$$

ou plus explicitement

$$H = -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + \omega^2(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) + \frac{\mu}{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} + \lambda \left(\frac{1}{(x_1 - x_2)^2} + \frac{1}{(x_1 - x_3)^2} + \frac{1}{(x_2 - x_3)^2} \right). \quad (6.2)$$

Cet Hamiltonien représente un système de 3 particules linéaires de mêmes masse m , (avec $2m = \hbar = 1$) confinées dans un champ harmonique et interagissant entre elles par paire, via des potentiels à deux corps invariants par translation de type Calogero, c-à-d en $\frac{1}{|x_i - x_j|^2}$, et auxquels on additionne un potentiel à trois corps, non invariant par translation, de type $\frac{1}{\sum_{i=1}^3 x_i^2}$. Ici ω est la fréquence de l'oscillateur harmonique et λ et μ sont les constantes de couplage associées, respectivement, aux potentiels d'interaction à deux et trois corps.

Les x_i , et les $-i\frac{\partial}{\partial x_i}$ ($i = 1, 2, 3$) désignent, respectivement, les opérateurs de position et les opérateurs moments conjugués correspondants des trois particules.

Pour $\mu = 0$, L'Hamiltonien (6.1) coïncide avec celui du modèle intégrable A_2 (le cas rationnel) [48] équivalent au problème exactement soluble à trois corps de Calogero (avec la différence que les termes $\sum_{i=1}^3 \omega^2 x_i^2$ dans (6.1) sont remplacés par $\sum_{i<j}^3 \omega^2 (x_i - x_j)^2$) [22]. Pour $\mu = -\lambda$, cet Hamiltonien représente la généralisation à trois corps du récent modèle à deux corps étudié dans [68] (voir le chapitre 5). Notons de plus que ce modèle à trois corps, étudié par Meljanac et al., n'a pas été complètement résolu par eux, à cause du problème de non séparabilité complète de l'Hamiltonien dans un système de coordonnées "sphériques" [69].

Ceci peut se voir facilement de la manière suivante :

En transformant les coordonnées " cartésiennes" des trois particules x_1, x_2 , et x_3 en coordonnées "sphériques" selon les relations

$$\begin{aligned} x_1 &= r \sin \theta \cos \varphi, & x_2 &= r \sin \theta \sin \varphi, & x_3 &= r \cos \theta, \\ 0 &\leq r < \infty, & 0 &\leq \theta \leq \pi, & 0 &\leq \varphi \leq 2\pi, \end{aligned} \quad (6.3)$$

le potentiel dans l'Hamiltonien (6.1) prendra la forme suivante

$$V(r, \theta, \varphi) = \omega^2 r^2 + \frac{\mu}{r^2} + \frac{1}{r^2} G(\theta, \varphi), \quad (6.4)$$

$$\begin{aligned} G(\theta, \varphi) &= \frac{1}{\sin^2 \theta (1 - \sin 2\varphi)} + \frac{1}{(\cos \theta - \sin \theta \cos \varphi)^2} \\ &+ \frac{1}{(\cos \theta - \sin \theta \sin \varphi)^2}. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Nous remarquons, donc, que malgré la séparation du potentiel (6.4) en une partie radiale et une partie angulaire, le problème ne peut être résolu complètement à cause de la non séparabilité de la partie angulaire (6.5). Ce problème a été lié par Meljanac et al. à la question de la superintégrabilité de l'Hamiltonien à trois corps (6.1) et par conséquent à la notion de séparabilité de l'équation de Schrödinger stationnaire correspondante [70]. Néanmoins, le spectre d'énergie a été calculé et la forme de la solution radiale a été donnée [69].

On propose, dans ce qui suit, de réétudier ce modèle à trois corps décrit par l'Hamiltonien (6.1) en résolvant l'équation de Schrödinger stationnaire correspondante. Une solution à ce problème pourrait être atteinte par l'introduction, au préalable, des coordonnées du centre de masse et les coordonnées de "Jacobi" invariants par translation pour un système de trois particules

$$R = \frac{1}{3}(x_1 + x_2 + x_3), \quad u = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2), \quad v = \frac{1}{\sqrt{6}}(x_1 + x_2 - 2x_3). \quad (6.6)$$

Dans ces coordonnées le potentiel s'écrira comme

$$V(R, u, v) = \omega^2(3R^2 + u^2 + v^2) + \frac{9\lambda(u^2 + v^2)^2}{2(u^3 - 3uv^2)^2} + \frac{\mu}{3R^2 + u^2 + v^2}. \quad (6.7)$$

Il est clair, qu'ici aussi l'Hamiltonien (6.1) ne peut être séparé en un Hamiltonien du centre de masse $H_{c.m} \equiv H_{c.m}(R)$ et un Hamiltonien "relatif" $H_{rel} \equiv H_{rel}(u, v)$, comme ce fut le cas du problème à trois corps de Calogero [22], à cause de la présence du terme $\frac{\mu}{3R^2 + u^2 + v^2}$, sauf dans le cas où la coordonnée du centre de masse coïnciderait avec l'origine de l'axe des x , c-à-d que $x_1 + x_2 + x_3 = 0$. Dans ce cas là et après élimination du mouvement du centre de masse (le problème devient un problème à deux degrés de liberté u et v) et en introduisant la transformation en coordonnées "polaires" (r, φ)

$$\begin{aligned} u &= r \sin \varphi, & v &= r \cos \varphi, \\ r &\geq 0, & \varphi &\in [0, 2\pi]. \end{aligned} \quad (6.8)$$

l'Hamiltonien (6.1) s'écrit, donc, comme suit

$$H \equiv H_{rel} = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \omega^2 r^2 + \frac{\mu}{r^2} + \frac{1}{r^2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{9\lambda}{2 \sin^2(3\varphi)} \right). \quad (6.9)$$

La forme de l'Hamiltonien (6.9) montre clairement une séparation entre la partie radiale et la partie angulaire. En plus la forme de l'équation de Schrödinger correspondante, est similaire à celle du problème à deux corps traité dans [68] (voir le chapitre 5). La seule différence résidant seulement dans l'expression du "potentiel angulaire" et par conséquent le problème devient, donc, exactement soluble par séparation des variables.

Dans le cas où la coordonnée du centre de masse $R \neq 0$, introduisons encore une fois les coordonnées du centre de masse et de Jacobi définies de la manière suivante

$$\tilde{R} = \frac{1}{\sqrt{3}}(x_1 + x_2 + x_3), \quad u = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2), \quad v = \frac{1}{\sqrt{6}}(x_1 + x_2 - 2x_3). \quad (6.10)$$

Le potentiel s'écrirait alors, dans les coordonnées (\tilde{R}, u, v) , comme

$$V(\tilde{R}, u, v) = \omega^2(\tilde{R}^2 + u^2 + v^2) + \frac{9\lambda(u^2 + v^2)^2}{2(u^3 - 3uv^2)^2} + \frac{\mu}{\tilde{R}^2 + u^2 + v^2}. \quad (6.11)$$

Passons maintenant en "coordonnées sphériques" (r, θ, φ) via- la transformation :

$$\begin{aligned}\tilde{R} &= r \cos \theta, & u &= r \sin \theta \cos \varphi, & v &= r \sin \theta \sin \varphi, \\ 0 &\leq r < \infty, & 0 &\leq \theta \leq \pi, & 0 &\leq \varphi \leq 2\pi.\end{aligned}\tag{6.12}$$

Cette transformation permet au potentiel (6.11) de s'écrire, ainsi, sous une forme complètement séparable dans les trois coordonnées (r, θ, φ) comme le montre l'équation

$$V(r, \theta, \varphi) = \omega^2 r^2 + \frac{\mu}{r^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{9\lambda}{2 \cos^2(3\varphi)} \right).\tag{6.13}$$

L'équation de Schrödinger correspondante $H\Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi)$, dans les coordonnées sphériques, devrait être, donc, soluble par séparation des variables.

Dans ce qui suit nous allons, donc, résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire dans les deux cas $R = 0$ et $R \neq 0$.

6.1.2 Résolution de l'équation de Schrödinger dans le cas où la coordonnée du centre de masse $R = 0$

Nous nous intéressons, donc, à la résolution de l'équation de Schrödinger exprimée dans les coordonnées polaires (r, φ) comme suit

$$\begin{aligned}&\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \omega^2 r^2 + \frac{\mu}{r^2} + \frac{1}{r^2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{9\lambda}{2 \sin^2(3\varphi)} \right) \right) \Psi(r, \varphi) \\ &= E\Psi(r, \varphi),\end{aligned}\tag{6.14}$$

dans les domaines $0 \leq r < \infty, 0 \leq \varphi \leq 2\pi$ et où E désigne l'énergie propre exprimée dans le système du centre de masse des trois particules, et $\Psi(r, \varphi)$ les solutions propres.

Remarquons que ce problème est identique à celui traité dans la résolution du problème à deux corps, et nous suivrons, donc, la même démarche et procédure pour trouver les solutions.

L'équation (6.14) se scinde par le biais de la transformation

$$\Psi(r, \varphi) = \frac{F(r)}{\sqrt{r}} \Phi(\varphi),\tag{6.15}$$

en deux équations différentielles. En effet, si on suppose qu'on a l'équation angulaire suivante

$$-\frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} + \left(\frac{9\lambda}{2 \sin^2(3\varphi)} \right) \Phi(\varphi) = B\Phi(\varphi),\tag{6.16}$$

alors, on obtient l'équation radiale réduite qui s'écrit comme suit

$$-\frac{d^2 F(r)}{dr^2} + \left(\omega^2 r^2 + \frac{\mu + B - \frac{1}{4}}{r^2} - E \right) F(r) = 0. \quad (6.17)$$

où B , la constante de séparation, est la valeur propre de l'équation angulaire (6.16).

résolution de l'équation angulaire

Il s'agit donc de résoudre l'équation aux valeurs propres

$$\left(-\frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{9\lambda}{2\sin^2(3\varphi)} - B \right) \Phi(\varphi) = 0. \quad (6.18)$$

Cette équation est identique à celle obtenue par Calogero lors de la solution de son problème à trois corps [22]. Remarquons que le potentiel dans l'équation (6.18) a une périodicité de $\frac{\pi}{3}$ et possède des singularités à $\varphi = k\frac{\pi}{3}, k = 0, 1, \dots, 6$, ceci va nous permettre de restreindre l'étude de cette équation dans l'intervalle $[0, \frac{\pi}{3}]$. De plus, cet intervalle correspond, dans l'espace de configuration des trois particules, à un certain ordre entre les positions des trois particules en l'occurrence $x_1 > x_2 > x_3$. En effet, à partir des équations (6.6) (avec $R = 0$) et (6.8), nous avons que

$$\begin{aligned} x_1 - x_2 &= \sqrt{2}r \sin \varphi, \\ x_1 - x_3 &= \sqrt{2}r \sin \left(\varphi + \frac{\pi}{3} \right), \\ x_2 - x_3 &= \sqrt{2}r \sin \left(\varphi + \frac{2\pi}{3} \right), \end{aligned} \quad (6.19)$$

et comme les trois coordonnées $x_i (i = 1, 2, 3)$ sont colinéaires alors on vérifie facilement, d'après les équations (6.19), que dans l'intervalle $[0, \frac{\pi}{3}]$ nous avons les inégalités suivantes : $x_1 > x_2, x_1 > x_3$ et $x_2 > x_3$. On peut voir, donc, que si on divise le cercle trigonométrique pour les valeurs de φ en six secteurs de $\frac{\pi}{3}$ chacun, qu'on peut étiquetter par un indice $p = 0, 1, 2, \dots, 5$, alors à chaque valeur de φ correspond un et un seul ordre des trois particules comme suit :

$$\begin{aligned}
p = 0 : & \quad 0 < \varphi < \frac{1}{3}\pi, & x_1 > x_2 > x_3, \\
p = 1 : & \quad \frac{1}{3}\pi < \varphi < \frac{2}{3}\pi, & x_1 > x_3 > x_2, \\
p = 2 : & \quad \frac{2}{3}\pi < \varphi < \pi, & x_3 > x_1 > x_2, \\
p = 3 : & \quad \pi < \varphi < \frac{4}{3}\pi, & x_3 > x_2 > x_1, \\
p = 4 : & \quad \frac{4}{3}\pi < \varphi < \frac{5}{3}\pi, & x_2 > x_3 > x_1, \\
p = 5 : & \quad \frac{5}{3}\pi < \varphi < 2\pi, & x_2 > x_1 > x_3.
\end{aligned} \tag{6.20}$$

Remarquons, donc, que lors du passage d'un secteur p_i vers un secteur p_{i+1} ($i = 0, 1, \dots, 4$) seulement une particule conserve son ordre alors que les deux autres peuvent permuter. Ainsi les solutions obtenues dans l'intervalle $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{3}$ seront étendues dans tout l'intervalle $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ par la prescription [22]

$$\Phi(\varphi + p\frac{\pi}{3}) = \pm\Phi(\varphi), \quad 0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{3}, \quad p = 1, 2, 3, 4, 5. \tag{6.21}$$

Dans l'équation (6.21) le signe $+$ correspond à la statistique de Bose ou à la statistique de Fermi avec p pair (associé à un nombre pair p de transpositions) et le signe $-$ correspond à la statistique de Fermi avec p impair (associé à un nombre impair p de transpositions).

Aux voisinage de 0 (respectivement de $\frac{\pi}{3}$) la singularité est analogue à celles d'une "barrière centrifuge" puisque $\sin^2(3\varphi) \sim 9\varphi^2$ (respectivement $\sin^2(3\varphi) \sim 9(\varphi - \frac{\pi}{3})^2$). Donc pour traiter le problème, et "stopper la chute sur le centre" [22] il faut et il suffit que $\lambda > -\frac{1}{2}$.

Dans le but de trouver des solutions de l'équation angulaire (6.18) (dans l'intervalle $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{3}$), en fonction de polynômes orthogonaux, avec les conditions aux limites de Dirichlet, faisons une factorisation appropriée de la fonction Φ de la manière suivante

$$\begin{aligned}
\Phi &= (\sin 3\varphi)^\nu f(z), \\
z &= \cos 3\varphi.
\end{aligned} \tag{6.22}$$

La substitution de (6.22) dans (6.18) permet, après les simplifications nécessaires, d'avoir l'équation différentielle pour les fonctions f ,

$$(1 - z^2)\frac{d^2 f(z)}{dz^2} - (2\nu + 1)z\frac{df(z)}{dz} + \left(\frac{B}{9} - \nu - \frac{\lambda - 2\nu(\nu - 1)z^2}{2(1 - z^2)}\right) f(z) = 0. \tag{6.23}$$

Des solutions acceptables physiquement pour l'équation (6.23) émergent pour des choix bien déterminés, respectivement, des constantes de couplage et de séparation λ et B , à savoir

$$\lambda = 2\nu(\nu - 1), \quad (6.24)$$

$$B \equiv B_n = 9(n + \nu)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.25)$$

dans ce cas là, l'équation (6.23) devient l'équation différentielle pour les polynômes de Gegenbauer $f(x) \equiv f_n(x) = C_n^{(\nu)}$ [78]

$$(1 - z^2) \frac{d^2 f_n(z)}{dz^2} - (2\nu + 1)z \frac{df_n(z)}{dz} + n(n + 2\nu)f_n(z) = 0. \quad (6.26)$$

Remarquons que l'équation (6.24) donne deux valeurs pour ν , à savoir

$$\nu_{>} = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + 2\lambda} \right), \quad (6.27)$$

$$\nu_{<} = \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 + 2\lambda} \right). \quad (6.28)$$

Les deux valeurs $\nu_{>}$ et $\nu_{<}$ correspondront, respectivement, aux solutions "régulières" et "non-régulières" de l'équation (6.18).

Finalement, les solutions propres non normalisées (solutions "régulières" qui correspondent à $\nu = \nu_{>}$ et qui s'annulent aux bords de l'intervalle $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{3}$) et les valeurs propres de l'équation angulaire (6.18) de l'angle azimutal φ sont données, respectivement, par

$$\Phi_n(\varphi) = (\sin 3\varphi)^{a+\frac{1}{2}} C_n^{(a+\frac{1}{2})}(\cos 3\varphi), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.29)$$

$$a = \frac{1}{2} \sqrt{1 + 2\lambda}, \quad 0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{3},$$

$$B_n = 9(n + \nu_{>})^2 = 9 \left(n + a + \frac{1}{2} \right)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.30)$$

Les solutions (6.29) sont identiques à celles trouvées par Calogero et obtenues en transformant l'équation (6.18), par des substitutions appropriées, en une équation de type hypergéométrique [22].

Les solutions irrégulières correspondant à $\nu_{<} = \frac{1}{2} - a$, ont été écartées car elles ne sont pas, en général, acceptables à cause de leur comportement aux points singuliers, sauf pour un certain domaine des valeurs de la constante de couplage λ (se référer à la discussion similaire dans le cas du problème à deux corps).

Résolution de l'équation radiale

L'équation radiale réduite

$$-\frac{d^2 F(r)}{dr^2} + \left(\omega^2 r^2 + \frac{\mu + B_n - \frac{1}{4}}{r^2} - E \right) F(r) = 0, \quad (6.31)$$

est résolue dans l'intervalle $0 \leq r < \infty$, avec la condition que les solutions doivent s'annuler à l'origine et tendre exponentiellement vers zéro à l'infini pour assurer qu'elles soient de carré sommable. A cause de la présence de la "barrière centrifuge" à l'origine $r = 0$, et pour traiter le problème, on doit avoir

$$\mu + B_n = \mu + 9 \left(n + a + \frac{1}{2} \right)^2 > 0, \quad \forall n \geq 0. \quad (6.32)$$

le terme entre parenthèses, dans l'inégalité (6.32), est minimal pour $n = 0$ et $a = 0$ ($a > 0$), par conséquent l'inégalité $\mu + B_n > 0$ est vérifiée pour tout $n \geq 0$ si $\mu > -\frac{9}{4}$.

La condition pour μ étant satisfaite, introduisons alors un paramètre auxiliaire b_n défini par

$$b_n^2 = \mu + B_n, \quad b_n = \sqrt{\mu + B_n} = \sqrt{\mu + 9 \left(n + a + \frac{1}{2} \right)^2} \quad (6.33)$$

En choisissant b_n comme étant la racine positive de $(\mu + B_n)$, ceci va nous permettre d'écrire les solutions de carré sommable de l'équation radiale (6.31). Pour cela, on réalise la transformation suivante

$$\begin{aligned} F(r) &= r^{b_n + \frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\omega r^2}{2}\right) g(t), \\ t &= \omega r^2. \end{aligned} \quad (6.34)$$

En remplaçant l'ansatz (6.34) dans l'équation radiale (6.31), on obtient l'équation différentielle pour la fonction $g(t)$ comme suit

$$t \frac{d^2 g(t)}{dt^2} + (b_n + 1 - t) \frac{dg(t)}{dt} + \left(\frac{E}{4\omega} - \frac{1}{2} - \frac{b_n}{2} \right) g(t) = 0. \quad (6.35)$$

L'équation différentielle (6.35) possède une solution exacte donnée par les polynômes de Laguerre généralisés $L_k^{(b_n)}(t)$ [78], si le facteur $(\frac{E}{4\omega} - \frac{1}{2} - \frac{b_n}{2})$ dans (6.35) est quantifié, c-à-d si :

$$\left(\frac{E}{4\omega} - \frac{1}{2} - \frac{b_n}{2} \right) = k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (6.36)$$

Dans ce cas là, les solutions non normalisées de l'équation radiale (6.31) s'écriront, donc, comme

$$F_k(r) = r^{b_n + \frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\omega r^2}{2}\right) L_k^{(b_n)}(\omega r^2), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.37)$$

et les énergies propres correspondantes sont données par

$$E_k = 2\omega(2k + b_n + 1), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (6.38)$$

Solutions de l'équation de Schrödinger

Finalement nous pouvons, après avoir regroupé tous les résultats, écrire les solutions propres normalisables et les énergies propres de l'équation de Schrödinger stationnaire (6.14) pour le problème à trois corps dans le cas où la coordonnée du centre de masse est nulle : $R = 0$.

Les solutions propres sont données par

$$\begin{aligned} \Psi_{k,n}(r, \varphi) &= r^{\sqrt{\mu+9(n+a+\frac{1}{2})^2}} \exp\left(-\frac{\omega r^2}{2}\right) L_k^{(\sqrt{\mu+9(n+a+\frac{1}{2})^2})}(\omega r^2) \\ &\quad \times (\sin 3\varphi)^{a+\frac{1}{2}} C_n^{(a+\frac{1}{2})}(\cos 3\varphi), \\ k &= 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \\ 0 &\leq \varphi \leq \frac{\pi}{3}, \quad a = \frac{1}{2}\sqrt{1+2\lambda}, \end{aligned} \quad (6.39)$$

avec la prescription [22]

$$\begin{aligned} \Psi_{k,n}(r, \varphi + \frac{1}{3}p\pi) &= (-1)^{pn} \Psi_{k,n}(r, \varphi), \\ 0 &\leq \varphi \leq \frac{\pi}{3}, \quad p = 1, 2, 3, 4, 5, \end{aligned} \quad (6.40)$$

pour la statistique de Bose, et

$$\begin{aligned} \Psi_{k,n}(r, \varphi + \frac{1}{3}p\pi) &= (-1)^{p(n+1)} \Psi_{k,n}(r, \varphi), \\ 0 &\leq \varphi \leq \frac{\pi}{3}, \quad p = 1, 2, 3, 4, 5, \end{aligned} \quad (6.41)$$

pour la statistique de Fermi.

Les variables (r, φ) sont liées aux coordonnées des trois particules par

$$r^2 = u^2 + v^2 = \frac{1}{3} \left[(x_1 - x_2)^2 + (x_1 - x_3)^2 + (x_2 - x_3)^2 \right], \quad (6.42)$$

$$\varphi = \arctan\left(\frac{u}{v}\right) = \arctan\left(\sqrt{3} \frac{x_1 - x_2}{x_1 + x_2 - 2x_3}\right). \quad (6.43)$$

Les énergies propres, dans le système du centre de masse, sont données par

$$E_{k,n} = 2\omega \left(2k + \sqrt{\mu + 9 \left(n + a + \frac{1}{2} \right)^2} + 1 \right), \quad (6.44)$$

$$k = 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Pour $\mu = 0$, on retrouve bien les résultats du problème à trois corps de Calogero [22].

Pour le cas des particules identiques, une fonction d'onde unique (symétrisée) correspond à chaque couple k, n . Pour le cas de particules non identiques correspondant à la statistique de Boltzmann, on pourra définir, dans chacun des six secteurs "angulaires" ($p\frac{\pi}{3} \leq \varphi \leq (p+1)\frac{\pi}{3}$, $p = 0, 1, 2, 3, 4, 5$), la fonction d'onde par les équations (6.39), (6.40) et (??) et la considérer comme étant nulle dans les cinq autres secteurs restants, ce qui permet d'avoir un ensemble de six états différents correspondant à chaque couple k, n [22].

Notons, aussi, que le spectre d'énergie $E_{k,n}$ (6.44) n'est pas dégénéré dans le cas de particules identiques et possède une dégénérescence égale à six dans les cas de particules non identiques. Ce résultat contraste avec celui du problème de Calogero (cas où $\mu = 0$). En effet, en posant $\mu = 0$ dans (6.44) on obtient

$$E_{k,n}^{(Cal)} \equiv E_{k,n}(\mu = 0) = 2\omega \left(2k + 3n + 3a + \frac{5}{2} \right). \quad (6.45)$$

Remarquons, donc, que le spectre d'énergie $E_{k,n}^{(Cal)}$, en plus de sa linéarité, possède pour les particules identiques une dégénérescence égale à la partie entière du nombre $\frac{1}{6}(N+6)$ où l'entier $N = 2k + 3n$. Cette dégénérescence est, évidemment, multipliée par six dans le cas de particules distinctes.

6.1.3 Résolution de l'équation de Schrödinger dans le cas où la coordonnée du centre de masse $R \neq 0$

A prime abord remarquons, à partir des transformations (6.10), que les coordonnées des trois particules sont données par

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 1 & \sqrt{2} \\ -\sqrt{3} & 1 & \sqrt{2} \\ 0 & -2 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ \tilde{R} \end{pmatrix}. \quad (6.46)$$

La transformation (6.46) est similaire à celle utilisée dans [70] pour montrer la séparabilité du potentiel de Calogero dans un système de coordonnées "sphériques".

L'Hamiltonien (6.1) s'écrit, dans le système des coordonnées (\tilde{R}, u, v) , comme suit

$$H = -\frac{\partial^2}{\tilde{R}^2} - \frac{\partial^2}{\partial u^2} - \frac{\partial^2}{\partial v^2} + \omega^2(\tilde{R}^2 + u^2 + v^2) + \frac{9\lambda(u^2 + v^2)^2}{2(u^3 - 3uv^2)^2} + \frac{\mu}{\tilde{R}^2 + u^2 + v^2}. \quad (6.47)$$

Passons maintenant en coordonnées "sphériques" via les transformations (6.12). Ceci permet d'écrire l'équation de Schrödinger stationnaire $H\Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi)$ sous la forme

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \omega^2 r^2 + \frac{\mu}{r^2} \right] \Psi + \frac{1}{r^2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{9\lambda}{2 \cos^2(3\varphi)} \right) \right] \Psi = E\Psi, \quad (6.48)$$

où $\Psi \equiv \Psi(r, \theta, \varphi)$ représentent les solutions propres et E l'énergie propre.

Le problème à trois corps, représenté par l'équation de Schrödinger (6.48), peut être considéré comme équivalent à celui d'une particule, dans l'espace à trois dimensions, plongée dans un potentiel non central de la forme

$$V(r, \theta, \varphi) = f_1(r) + \frac{f_2(\varphi)}{r^2 \sin^2 \theta}. \quad (6.49)$$

Il est clair que l'équation de Schrödinger stationnaire (6.48) est, donc, soluble par séparation des variables.

Pour ce faire, effectuons la factorisation suivante :

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \frac{F(r)}{r} \frac{\Theta(\theta)}{\sqrt{\sin \theta}} \Phi(\varphi), \quad (6.50)$$

et en remplaçant (6.50) dans (6.48) on obtient 3 équations différentielles à résoudre.

la première équation angulaire pour l'angle azimutal φ

$$\left(-\frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{9\lambda}{2\cos^2(3\varphi)}\right)\Phi(\varphi) = B\Phi(\varphi), \quad (6.51)$$

la seconde équation angulaire pour l'angle polaire θ :

$$\left(-\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{(B - \frac{1}{4})}{\sin^2\theta}\right)\Theta(\theta) = D\Theta(\theta), \quad (6.52)$$

et finalement, l'équation radiale réduite

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \omega^2 r^2 + \frac{\mu + D - \frac{1}{4}}{r^2}\right)F(r) = EF(r). \quad (6.53)$$

Les résolutions successives des équations différentielles (6.51), (6.52) et (6.53) permettront de trouver les solutions complètes du problème.

Résolution de l'équation angulaire d'angle azimutal φ

Il s'agit donc de résoudre l'équation aux valeurs propres

$$\left(-\frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{9\lambda}{2\cos^2(3\varphi)} - B\right)\Phi(\varphi) = 0. \quad (6.54)$$

Dans l'intervalle $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ le potentiel dans l'équation (6.54) a une périodicité de $\frac{\pi}{3}$ et possède des singularités à $\varphi = (2k + 1)\frac{\pi}{6}$, $k = 0, 1, \dots, 5$. Ceci permet, d'une part, de restreindre l'étude de cette équation dans l'intervalle $[-\frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{6}]$ et, d'autre part, de partager l'intervalle entier en six secteurs $p = 0, 1, 2, \dots, 5$ de $\frac{\pi}{3}$ chacun et à chaque secteur correspond un et un seul ordre entre les positions des trois particules.

En effet, en utilisant les équations (6.12) et (6.46), ceci permet de voir que

$$\begin{aligned} x_1 - x_2 &= \sqrt{2}r \sin\theta \cos\varphi, \\ x_1 - x_3 &= \sqrt{2}r \sin\theta \cos\left(\varphi - \frac{\pi}{3}\right), \\ x_2 - x_3 &= \sqrt{2}r \sin\theta \cos\left(\varphi - \frac{2\pi}{3}\right). \end{aligned} \quad (6.55)$$

et comme $r \geq 0$ et $\sin\theta \geq 0$ pour $\theta \in [0, \pi]$, alors à chaque secteur p correspondent les relations d'ordre suivantes

$$\begin{aligned}
p = 0 : & \quad \frac{-\pi}{6} < \varphi < \frac{1}{6}\pi, & x_1 > x_3 > x_2, \\
p = 1 : & \quad \frac{1}{6}\pi < \varphi < \frac{1}{2}\pi, & x_1 > x_2 > x_3, \\
p = 2 : & \quad \frac{1}{2}\pi < \varphi < \frac{5}{6}\pi, & x_2 > x_1 > x_3, \\
p = 3 : & \quad \frac{5}{6}\pi < \varphi < \frac{7}{6}\pi, & x_2 > x_3 > x_1, \\
p = 4 : & \quad \frac{7}{6}\pi < \varphi < \frac{9}{6}\pi, & x_3 > x_2 > x_1, \\
p = 5 : & \quad \frac{9}{6}\pi < \varphi < \frac{11}{6}\pi, & x_3 > x_1 > x_2.
\end{aligned} \tag{6.56}$$

$$\begin{aligned}
p = 2 : & \quad \frac{1}{2}\pi < \varphi < \frac{5}{6}\pi, & x_2 > x_1 > x_3, \\
p = 3 : & \quad \frac{5}{6}\pi < \varphi < \frac{7}{6}\pi, & x_2 > x_3 > x_1, \\
p = 4 : & \quad \frac{7}{6}\pi < \varphi < \frac{9}{6}\pi, & x_3 > x_2 > x_1, \\
p = 5 : & \quad \frac{9}{6}\pi < \varphi < \frac{11}{6}\pi, & x_3 > x_1 > x_2.
\end{aligned} \tag{6.57}$$

Nous retrouvons, donc, les mêmes résultats obtenus dans le paragraphe précédent, où dans deux secteurs successifs seul change l'ordre de deux particules alors que pour la troisième il est conservé. Ainsi, les solutions obtenues dans l'intervalle $-\frac{\pi}{6} \leq \varphi \leq \frac{\pi}{6}$ seront étendues dans tout l'intervalle $-\frac{\pi}{6} \leq \varphi \leq \frac{11\pi}{6}$ par la même prescription (6.21) que précédemment.

Comme au voisinage $-\frac{\pi}{6}$ (respectivement $\frac{\pi}{6}$) on a que $\cos^2(3\varphi) \sim 9(\varphi + \frac{\pi}{6})^2$ (respectivement $\cos^2(3\varphi) \sim 9(\varphi - \frac{\pi}{6})^2$) les singularités sont identiques à une "barrière centrifuge" et donc pour traiter le problème on posera que $\lambda > -\frac{1}{2}$.

Pour trouver les solutions acceptables physiquement de l'équation angulaire (6.54), exprimées à l'aide de polynômes orthogonaux, et qui s'annulent aux bords l'intervalle $[-\frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{6}]$, l'équation (6.54) peut être transformée par la factorisation suivante

$$\begin{aligned}
\Phi &= (\cos 3\varphi)^\nu f(z), \\
z &= \sin 3\varphi,
\end{aligned} \tag{6.58}$$

en l'équation différentielle pour la fonction f ,

$$(1 - z^2) \frac{d^2 f(z)}{dz^2} - (2\nu + 1)z \frac{df(z)}{dz} + \left(\frac{B}{9} - \nu - \frac{\lambda - 2\nu(\nu - 1)z^2}{2(1 - z^2)} \right) f(z) = 0. \tag{6.59}$$

Des solutions acceptables physiquement pour l'équation (6.59) émergent pour des choix bien déterminés, respectivement, des constantes de couplage et de séparation λ et B ,

$$\lambda = 2\nu(\nu - 1), \tag{6.60}$$

$$B \equiv B_n = 9(n + \nu)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \tag{6.61}$$

dans ce cas là, l'équation (6.59) devient l'équation différentielle pour les polynômes de Gegenbauer $f_n(z) = C_n^{(\nu)}(z)$ [78]

$$(1 - z^2) \frac{d^2 f_n(z)}{dz^2} - (2\nu + 1)z \frac{df_n(z)}{dz} + n(n + 2\nu)f_n(z) = 0. \quad (6.62)$$

Finalement, pour l'équation angulaire (6.54) de l'angle azimutal φ , les solutions propres "régulières", non normamlisées, qui correspondent à la valeur de ν , donnée par

$$\nu = \frac{1}{2} + a, \quad a = \frac{1}{2} \sqrt{1 + 2\lambda}, \quad (6.63)$$

s'écrivent comme

$$\Phi_n(\varphi) = (\cos 3\varphi)^{a+\frac{1}{2}} C_n^{(a+\frac{1}{2})}(\sin 3\varphi), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.64)$$

et les valeurs propres sont données par

$$B_n = 9(n + \nu)^2 = 9 \left(n + a + \frac{1}{2} \right)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots. \quad (6.65)$$

La solution (6.64) est similaire à celle obtenue dans [71] où elle fut obtenue en transformant l'équation différentielle (6.54) en une équation de type hypergéométrique.

Résolution de l'équation angulaire d'angle polaire θ

La deuxième équation angulaire correspondant à l'angle polaire θ , peut s'écrire maintenant

$$\left(-\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{(b_n^2 - \frac{1}{4})}{\sin^2 \theta} - D \right) \Theta(\theta) = 0, \quad (6.66)$$

avec la constante auxiliaire b_n définie par

$$b_n^2 = B_n, \quad b_n = \sqrt{B_n} = 3n + 3a + \frac{3}{2}. \quad (6.67)$$

Ici, nous avons considéré uniquement la racine positive de B_n pour des raisons liées à l'obtention des solutions "régulières" de l'équation (6.66), qui sera résolue dans l'intervalle $0 \leq \theta \leq \pi$ avec les conditions aux limites de Dirichlet.

Considérons l'"ansatz" suivant pour la fonction Θ

$$\begin{aligned} \Theta(\theta) &= (\sin \theta)^\beta h(y), \\ y &= \cos \theta. \end{aligned} \quad (6.68)$$

La Substitution de (6.68) dans (6.66) permet, après les simplifications nécessaires, d'avoir l'équation différentielle pour la fonction h ,

$$(1 - y^2)h''(y) - (2\beta + 1)yh'(y) + \left(D - \beta + \frac{1 - 4b_n^2 + 4\beta(\beta - 1)y^2}{4(1 - y^2)} \right) h(y) = 0, \quad (6.69)$$

où le symbole prime désigne la dérivation par rapport à y .

Des solutions acceptables physiquement pour l'équation (6.69) émergent que si les constantes de séparation b_n et D vérifient, respectivement, les conditions suivantes

$$b_n^2 = \left(\beta - \frac{1}{2} \right)^2, \quad (6.70)$$

$$D \equiv D_l = (l + \beta)^2, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.71)$$

dans ce cas là, l'équation (6.69) devient l'équation différentielle

$$(1 - y^2) \frac{d^2 h_l(y)}{dy^2} - (2\beta + 1)y \frac{dh_l(y)}{dy} + l(l + 2\beta)h_l(y) = 0, \quad (6.72)$$

qui n'est autre que l'équation différentielle pour les polynômes de Gegenbauer $h_l(y) = C_l^{(\beta)}(y)$.

L'équation (6.70) fournit deux solutions pour β à savoir

$$\beta_{>} = \frac{1}{2} + b_n, \quad (6.73)$$

$$\beta_{<} = \frac{1}{2} - b_n. \quad (6.74)$$

La solution $\Theta_l(\theta)$ correspondant à $\beta_{>}$ est la solution régulière et celle correspondant à $\beta_{<}$ est la solution non régulière qui ne sera pas prise en considération à cause de son mauvais comportement, en général, au voisinage des singularités.

Finalement, les solutions propres (solutions régulières) et les valeurs propres de l'équation angulaire (6.66) pour l'angle polaire θ , dans l'intervalle $[0, \pi]$, s'écrivent, respectivement, comme

$$\Theta_l(\theta) = (\sin \theta)^{b_n + \frac{1}{2}} C_l^{(b_n + \frac{1}{2})}(\cos \theta), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.75)$$

$$D_l = \left(l + b_n + \frac{1}{2} \right)^2, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (6.76)$$

Remarquons que le choix de b_n comme étant la racine positive de B_n (voir équation (6.67)) permet à la solution $\Theta_l(\theta)$ d'être acceptable physiquement et d'avoir le bon comportement (c-à-d s'annuler) aux bords de l'intervalle $[0, \pi]$.

Résolution de l'équation radiale

L'équation radiale réduite

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \omega^2 r^2 + \frac{\mu + D_l - \frac{1}{4}}{r^2} - E \right) F(r) = 0, \quad (6.77)$$

est résolue dans l'intervalle $0 \leq r < \infty$, avec la condition que les solutions doivent s'annuler à l'origine et tendre exponentiellement vers zéro à l'infini pour assurer qu'elles soient de carré sommable. A cause de la présence de la "barrière centrifuge", et pour traiter le problème, on doit avoir que (voir les équations (6.67) et (6.76))

$$\mu + D_l = \mu + (l + b_n + \frac{1}{2})^2 = \mu + (l + 3n + 3a + 2)^2 > 0, \quad \forall n \geq 0, \quad \forall l \geq 0. \quad (6.78)$$

Le terme élevé au carré deux dans l'expression précédente est minimal pour les valeurs $n = 0, l = 0$ et $a = 0$ (a est un nombre réel positif, voir(6.63)). Dans ce cas là l'inégalité (6.78) implique qu'on doit avoir $\mu > -4$.

Introduisons, donc, un paramètre auxiliaire α_l défini par

$$\alpha_l^2 = \mu + D_l, \quad \alpha_l = \sqrt{\mu + D_l}. \quad (6.79)$$

Le choix de α_l comme étant la racine positive de $(\mu + D_l)$, est le choix approprié qui permet d'écrire les solutions de carré sommable de l'équation radiale (6.77). Pour cela, on réalise la transformation suivante

$$\begin{aligned} F(r) &= r^{\alpha_l + \frac{1}{2}} \exp(-\frac{\omega r^2}{2}) g(t), \\ t &= \omega r^2. \end{aligned} \quad (6.80)$$

En remplaçant l'"ansatz" (6.80) dans l'équation radiale (6.77), on obtient l'équation différentielle pour la fonction $g(t)$ comme suit

$$t \frac{d^2 g(t)}{dt^2} + (\alpha_l + 1 - t) \frac{dg(t)}{dt} + (\frac{E}{4\omega} - \frac{1}{2} - \frac{\alpha_l}{2}) g(t) = 0. \quad (6.81)$$

L'équation (6.81) est l'équation différentielle des polynômes de Laguerre généralisés $L_k^{(\alpha_l)}(t)$ [78], si le terme $(\frac{E}{4\omega} - \frac{1}{2} - \frac{\alpha_l}{2})$ dans (6.81) est égal à un entier non négatif, c-à-d :

$$(\frac{E}{4\omega} - \frac{1}{2} - \frac{\alpha_l}{2}) = k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (6.82)$$

Dans ce cas là, les solutions normalisables de l'équation radiale (6.77) s'écriront, donc, comme

$$F_k(r) = r^{\alpha_l + \frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\omega r^2}{2}\right) L_k^{(\alpha_l)}(\omega r^2), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.83)$$

et les énergies propres correspondantes sont données par

$$E_k = 2\omega(2k + \alpha_l + 1), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (6.84)$$

Solutions de l'équation de Schrödinger

En regroupant maintenant les résultats obtenus et à partir l'équation (6.50) nous pouvons, donc, conclure que les solutions propres (normalisables) de l'équation de Schrödinger (6.48) pour le problème à trois corps (6.1) dans le cas où la coordonnée du centre de masse n'est pas nulle : $R \neq 0$, sont données par

$$\begin{aligned} \Psi_{k,l,n}(r, \theta, \varphi) &= r^{\sqrt{\mu+(l+3n+3a+2)^2}-\frac{1}{2}} e^{-\frac{\omega r^2}{2}} L_k^{\left(\sqrt{\mu+(l+3n+3a+2)^2}\right)}(\omega r^2) \\ &\quad \times (\sin \theta)^{3n+3a+\frac{3}{2}} C_l^{(3n+3a+2)}(\cos \theta) \\ &\quad \times (\cos 3\varphi)^{a+\frac{1}{2}} C_n^{(a+\frac{1}{2})}(\sin 3\varphi), \\ k &= 0, 1, 2, \dots, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \\ -\frac{\pi}{6} &\leq \varphi \leq \frac{\pi}{6}, \quad a = \frac{1}{2}\sqrt{1+2\lambda}. \end{aligned} \quad (6.85)$$

avec la prescription

$$\begin{aligned} \Psi_{k,l,n}(r, \theta, \varphi + \frac{1}{3}p\pi) &= (-1)^{pn} \Psi_{k,l,n}(r, \theta, \varphi), \\ -\frac{\pi}{6} &\leq \varphi \leq \frac{\pi}{6}, \quad p = 1, 2, 3, 4, 5, \end{aligned} \quad (6.86)$$

pour la statistique de Bose ; et

$$\begin{aligned} \Psi_{k,l,n}(r, \theta, \varphi + \frac{1}{3}p\pi) &= (-1)^{p(n+1)} \Psi_{k,l,n}(r, \theta, \varphi), \\ -\frac{\pi}{6} &\leq \varphi \leq \frac{\pi}{6}, \quad p = 1, 2, 3, 4, 5, \end{aligned} \quad (6.87)$$

pour la statistique de Fermi.

Les constantes de normalisation $N_{k,l,n}$ pour les fonctions d'ondes (6.85) sont calculées à partir de

$$\int_0^{+\infty} r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_{-\frac{\pi}{6}}^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \Psi_{k,l,n}(r, \theta, \varphi) \Psi_{k',l',n'}(r, \theta, \varphi) = \delta_{k,k'} \delta_{l,l'} \delta_{n,n'} N_{k,l,n}, \quad (6.88)$$

et en utilisant les propriétés d'orthogonalité des polynômes de Gegenbauer et de Laguerre (voir [78]). L'intégration donne

$$\begin{aligned} N_{k,l,n} &= \frac{1}{\omega^{\mu+(\ell+3n+3a+2)^2+1}} \frac{\pi^2}{3} 4^{-(4a+3n+2)} \frac{\Gamma(n+2a+1)}{n!(n+a+1/2)\Gamma(a+1/2)^2} \\ &\times \frac{\Gamma(\ell+6n+6a+4) \Gamma[\mu+(\ell+3n+3a+2)^2+k+1]}{\ell!k!(\ell+3n+3a+2)\Gamma(3n+3a+2)^2}. \end{aligned} \quad (6.89)$$

Les énergies propres sont données par

$$\begin{aligned} E_{k,l,n} &\equiv E_{k,l+3n} = 2\omega \left(2k + \sqrt{\mu + (\ell + 3n + 3a + 2)^2 + 1} \right), \\ k &= 0, 1, 2, \dots, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (6.90)$$

Les variables (r, θ, φ) sont liées aux coordonnées des trois particules x_1, x_2 et x_3 par

$$r^2 = \tilde{R}^2 + u^2 + v^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2, \quad (6.91)$$

$$\theta = \arccos \left(\frac{\tilde{R}}{r} \right) = \arccos \left(\frac{x_1 + x_2 + x_3}{\sqrt{3(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)}} \right), \quad (6.92)$$

$$\varphi = \arctan \left(\frac{v}{u} \right) = \arctan \left(\frac{x_1 + x_2 - 2x_3}{\sqrt{3}(x_1 - x_2)} \right). \quad (6.93)$$

Pour le cas de particules identiques il correspond à chaque triplet k, l, n une fonction d'onde unique symétrisée. Par contre, pour des particules distinctes, on pourra définir dans chacun des six secteurs "angulaires" $(2p-1)\frac{\pi}{6} \leq \varphi \leq (2p+1)\frac{\pi}{6}, p = 0, 1, 2, 3, 4, 5$, la fonction d'onde par les équations (6.85), (6.86) et (6.87) et la considérer comme étant nulle dans les cinq secteurs restants, ce qui permet d'avoir un ensemble de six états différents correspondant à chaque triplet k, l, n .

En plus, la dégénérescence de chaque niveau d'énergie $E_{k,N}$, avec l'entier N défini par $N \equiv l + 3n$, est égale, dans le cas de particules identiques, à la partie entière de $\frac{1}{3}(N+3)$ et elle est multipliée, donc, par six dans le cas de particules distinctes.

6.2 Une généralisation du problème à trois corps de Calogero-Marchioro-Wolfes (CMW)

Considérons maintenant l'Hamiltonien, pour un système de trois particules de même masse en interaction sur une ligne infinie, comme suit

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{i=1}^3 \left(-\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \omega^2 x_i^2 \right) + g \sum_{i<j}^3 \frac{1}{(x_i - x_j)^2} + \frac{\mu}{\sum_{i=1}^3 x_i^2} \\
& + 3f \sum_{\substack{i<j \\ i,j \neq k}}^3 \frac{1}{(x_i + x_j - 2x_k)^2}. \tag{6.94}
\end{aligned}$$

Cet Hamiltonien ne diffère de celui du paragraphe précédent (voir éq. (6.1)) que par les trois termes additionnels de la forme $\frac{1}{(x_i + x_j - 2x_k)^2}$ représentant un potentiel à trois corps invariant par translation. Pour $\mu = 0$, le modèle représenté par (6.94) correspond au modèle intégrable G_2 (le cas rationnel) [48] équivalent au problème à trois corps résolue par Wolfes [71]. Et pour $\mu = 0$ et $\omega = 0$, l'Hamiltonien (6.94) devient celui du problème de diffusion résolue par Calogero et Marchioro [94]. Rappelons que dans ces deux cas cités les termes $\sum_{i=1}^3 \omega^2 x_i^2$ dans l'équation (6.94) sont remplacés par $\sum_{i<j}^3 \omega^2 (x_i - x_j)^2$.

Notre objectif est de résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire pour l'Hamiltonien (6.94) dans le cas général où la coordonnée du centre de masse des trois particules n'est pas nulle.

Après introduction des coordonnées du centre de masse et de Jacobi définies par l'équation (6.10), nous pouvons écrire l'équation de Schrödinger comme suit

$$\begin{aligned}
& \left[-\frac{\partial^2}{\partial \tilde{R}^2} - \frac{\partial^2}{\partial u^2} - \frac{\partial^2}{\partial v^2} + \omega^2 (\tilde{R}^2 + u^2 + v^2) + \frac{\mu}{\tilde{R}^2 + u^2 + v^2} \right] \Psi(\tilde{R}, u, v) \\
& + \left[\frac{9g(u^2 + v^2)^2}{2(u^3 - 3uv^2)^2} + \frac{9f(u^2 + v^2)^2}{2(v^3 - 3vu^2)^2} - E \right] \Psi(\tilde{R}, u, v) = 0. \tag{6.95}
\end{aligned}$$

Introduisons maintenant la transformation en coordonnées sphériques définies par les équations (6.12) et réécrivons l'équation de Schrödinger sous la forme suivante

$$\begin{aligned}
& \left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \omega^2 r^2 + \frac{\mu}{r^2} \right] \Psi(r, \theta, \varphi) \\
& + \frac{1}{r^2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{M}{\sin^2 \theta} \right] \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi), \tag{6.96}
\end{aligned}$$

où l'opérateur différentiel M est défini par

$$M \equiv -\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{9g}{2\cos^2(3\varphi)} + \frac{9f}{2\sin^2(3\varphi)}. \quad (6.97)$$

Comme l'équation de Schrödinger (6.96) est complètement séparable dans les coordonnées (r, θ, φ) , elle sera donc résolue en suivant la procédure utilisée dans le paragraphe précédent.

La transformation (6.50) de la fonction d'onde permet d'obtenir trois équations différentielles pour chaque variable r, θ et φ à intégrer séparément, en l'occurrence

$$\left(-\frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{9g}{2\cos^2(3\varphi)} + \frac{9f}{2\sin^2(3\varphi)}\right)\Phi(\varphi) = \tilde{B}\Phi(\varphi), \quad (6.98)$$

$$\left(-\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{(\tilde{B} - \frac{1}{4})}{\sin^2\theta}\right)\Theta(\theta) = \tilde{D}\Theta(\theta), \quad (6.99)$$

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \omega^2 r^2 + \frac{\mu + \tilde{D} - \frac{1}{4}}{r^2}\right)F(r) = EF(r). \quad (6.100)$$

Ici \tilde{B} et \tilde{D} représentent les constantes de séparation et E l'énergie propre du système. Remarquons que la forme des équations différentielles obtenues est identique à celle des équations différentielles obtenues au paragraphe précédent (voir les équations. (6.51),(6.52) et (6.53)) sauf pour l'équation différentielle correspondant à l'angle azimutal φ . Ceci va nous permettre d'utiliser des résultats déjà obtenus.

Résolution de l'équation angulaire d'angle azimutal φ

L'équation aux valeurs propres (6.98) est identique à celle obtenue dans [71, 94] et possède dans l'intervalle $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ des singularités à $\varphi = k\frac{\pi}{6}, k = 0, 1, 2, \dots, 11$. Cependant, dans ce cas çà, en plus du fait que dans chaque secteur "angulaire" de $\frac{\pi}{3}$ chacun un certain ordre est établi entre les positions des trois particules, il existe aussi une certaine "polarisation" entre les particules dans chaque secteur "angulaire" de $\frac{\pi}{6}$ chacun, due à la présence du potentiel à trois corps introduit dans ce problème, dans le sens où la particule du milieu sera plus proche de la particule de droite que de la particule de gauche ou vice-versa selon le cas. En effet on peut voir, à partir des équations (6.55), et des équations suivantes

$$\begin{aligned}
x_1 + x_2 - 2x_3 &\equiv (x_1 - x_3) + (x_2 - x_3) = \sqrt{6}r \sin \theta \sin \varphi, \\
x_1 + x_3 - 2x_2 &\equiv (x_1 - x_2) + (x_3 - x_2) = \sqrt{6}r \sin \theta \sin \left(\varphi + \frac{2\pi}{3} \right), \\
x_2 + x_3 - 2x_1 &\equiv (x_2 - x_1) + (x_3 - x_1) = \sqrt{6}r \sin \theta \sin \left(\varphi + \frac{4\pi}{3} \right).
\end{aligned} \tag{6.101}$$

que si on divise le cercle trigonométrique pour φ en 12 secteurs de $\frac{\pi}{6}$ chacun $q\frac{\pi}{6} < \varphi < (q+1)\frac{\pi}{6}$, $q = 0, 1, 2, \dots, 11$, alors on a ce qui suit

$$\begin{aligned}
q = 0 : & \quad 0 < \varphi < \frac{1}{6}\pi, & x_1 > x_3 > x_2, & x_1 - x_3 > x_3 - x_2, \\
q = 1 : & \quad \frac{1}{6}\pi < \varphi < \frac{1}{3}\pi, & x_1 > x_2 > x_3, & x_1 - x_2 > x_2 - x_3, \\
q = 2 : & \quad \frac{1}{3}\pi < \varphi < \frac{1}{2}\pi, & x_1 > x_2 > x_3, & x_1 - x_2 < x_2 - x_3, \\
q = 3 : & \quad \frac{1}{2}\pi < \varphi < \frac{2}{3}\pi, & x_2 > x_1 > x_3, & x_2 - x_1 < x_1 - x_3, \\
q = 4 : & \quad \frac{2}{3}\pi < \varphi < \frac{5}{6}\pi, & x_2 > x_1 > x_3, & x_2 - x_1 > x_1 - x_3, \\
q = 5 : & \quad \frac{5}{6}\pi < \varphi < \pi, & x_2 > x_3 > x_1, & x_2 - x_3 > x_3 - x_1, \\
q = 6 : & \quad \pi < \varphi < \frac{7}{6}\pi, & x_2 > x_3 > x_1, & x_2 - x_3 < x_3 - x_1, \\
q = 7 : & \quad \frac{7}{6}\pi < \varphi < \frac{4}{3}\pi, & x_3 > x_2 > x_1, & x_2 - x_1 > x_3 - x_2, \\
q = 8 : & \quad \frac{4}{3}\pi < \varphi < \frac{3}{2}\pi, & x_3 > x_2 > x_1, & x_2 - x_1 < x_3 - x_2, \\
q = 9 : & \quad \frac{3}{2}\pi < \varphi < \frac{5}{3}\pi, & x_3 > x_1 > x_2, & x_3 - x_1 > x_1 - x_2, \\
q = 10 : & \quad \frac{5}{3}\pi < \varphi < \frac{11}{6}\pi, & x_3 > x_1 > x_2, & x_3 - x_1 < x_1 - x_2, \\
q = 11 : & \quad \frac{11}{6}\pi < \varphi < 2\pi, & x_1 > x_3 > x_2, & x_1 - x_3 < x_3 - x_2.
\end{aligned} \tag{6.102}$$

Remarquons, donc, que le passage d'un secteur à un autre se traduit par la permutation de deux particules et/ou l'utilisation de la transformation de la parité (inversion de l'axe des x) $\Pi : x_i \longrightarrow -x_i (i = 1, 2, 3)$ [94].

On se restreint, donc, à résoudre l'équation (6.98) dans l'intervalle $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{6}$ avec la condition que $g > -\frac{1}{2}$ et $f > -\frac{1}{2}$. Pour cela on cherchera les solutions qui s'annulent aux

bords de l'intervalle et qui s'écrivent en fonction de polynômes orthogonaux. L'équation (6.98) aura des solutions acceptables physiquement si les constantes de couplage g et f ainsi que la constante de séparation \tilde{B} prennent des valeurs particulières. En effet, considérons la transformation suivante

$$\begin{aligned}\Phi(\varphi) &= (\cos 3\varphi)^\nu (\sin 3\varphi)^\beta h(z), \\ z &= \cos 6\varphi,\end{aligned}\tag{6.103}$$

et en supposant de plus que g et f prennent, respectivement, les valeurs

$$g = 2\nu(\nu - 1),\tag{6.104}$$

$$f = 2\beta(\beta - 1),\tag{6.105}$$

alors on obtient l'équation différentielle satisfaite par les fonctions $h(z)$

$$(1 - z^2)h''(z) + (\nu - \beta - (\nu + \beta + 1)z)h'(z) + \left(\frac{\tilde{B}}{36} - \frac{(\nu + \beta)^2}{4}\right)h(z) = 0,\tag{6.106}$$

où le symbole prime désigne la dérivation par rapport à z .

Maintenant, si en plus, la constante de séparation \tilde{B} vérifie la condition de "quantification" suivante

$$\tilde{B} \equiv \tilde{B}_n = 9(2n + \nu + \beta)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots,\tag{6.107}$$

alors, l'équation (6.106) prend la forme suivante

$$(1 - z^2)h''(z) + (\nu - \beta - (\nu + \beta + 1)z)h'(z) + n(n + \nu + \beta)h(z) = 0,\tag{6.108}$$

qui n'est autre que l'équation différentielle pour les polynômes de Jacobi $h(z) = P_n^{(\beta-\frac{1}{2}, \nu-\frac{1}{2})}(z)$.

Les solutions propres "régulières" non normalisées (correspondant aux solutions avec $\nu = \nu_{>} \equiv \frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 + 2g})$ et $\beta = \beta_{>} \equiv \frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 + 2f})$), de l'équation angulaire (6.98) s'écrivent, donc, comme

$$\begin{aligned}\Phi_n(\varphi) &= (\cos 3\varphi)^{a+\frac{1}{2}} (\sin 3\varphi)^{b+\frac{1}{2}} P_n^{(b,a)}(\cos 6\varphi), \\ 0 &\leq \varphi \leq \frac{\pi}{6}, \quad n = 0, 1, 2, \dots,\end{aligned}\tag{6.109}$$

$$a = \frac{1}{2}\sqrt{1 + 2g}, \quad b = \frac{1}{2}\sqrt{1 + 2f},\tag{6.110}$$

et les valeurs propres quantifiées sont données par

$$\tilde{B}_n = 9(2n + a + b + 1)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.111)$$

Résolution de l'équation angulaire d'angle polaire θ

L'équation angulaire pour l'angle polaire θ peut s'écrire aussi sous la forme

$$\left(-\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{\tilde{b}_n^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2 \theta} - \tilde{D} \right) \Theta(\theta) = 0, \quad (6.112)$$

avec le paramètre auxiliaire \tilde{b}_n défini par

$$\tilde{B}_n = \tilde{b}_n^2, \quad \tilde{b}_n = \sqrt{\tilde{B}_n} = 3(2n + a + b + 1). \quad (6.113)$$

Notons qu'ici, aussi, les mêmes arguments qu'auparavant plaident pour le choix de la racine positive de \tilde{B}_n .

Comme l'équation (6.112) est identique à (6.66) nous obtiendrons, donc, les mêmes solutions où il suffit simplement de remplacer b_n par \tilde{b}_n et D par \tilde{D} .

Enfin, les solutions propres, (dans l'intervalle $0 \leq \theta \leq \pi$), acceptables physiquement et les valeurs propres de l'équation angulaire (6.112) s'écrivent, respectivement, comme

$$\Theta_l(\theta) = (\sin \theta)^{\tilde{b}_n + \frac{1}{2}} C_l^{(\tilde{b}_n + \frac{1}{2})}(\cos \theta), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.114)$$

$$\tilde{D} \equiv \tilde{D}_l = \left(l + \tilde{b}_n + \frac{1}{2} \right)^2, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.115)$$

avec \tilde{b}_n donné par l'équation (6.113).

Résolution de l'équation radiale

L'équation radiale (6.100) est identique à l'équation (6.77) où la constante de séparation D_l est simplement remplacée par \tilde{D}_l . Notons qu'en plus, la condition

$$\mu + \tilde{D}_l = \mu + \left(l + 6n + 3a + 3b + \frac{7}{2} \right)^2 > 0, \quad (6.116)$$

due à la présence de la barrière centrifuge à l'origine, doit être vérifiée $\forall n \geq 0$, et $\forall l \geq 0$. La valeur minimale de l'expression entre parenthèse est atteinte pour $n = l = 0$ et $a = b = 0$ (voir éq.(6.110)), ce qui implique que (6.116) sera valable pour tout $\mu > -\frac{49}{4}$.

En définissant maintenant la constante $\tilde{\alpha}_l$ par

$$\tilde{\alpha}_l^2 = \mu + \tilde{D}_l, \quad \tilde{\alpha}_l = \sqrt{\mu + \tilde{D}_l}, \quad (6.117)$$

et par analogie avec l'équation (6.83), on peut écrire les solutions-propres et les énergies-propres de l'équation radiale (6.100), respectivement, comme suit

$$F_k(r) = r^{\tilde{\alpha}_l + \frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\omega r^2}{2}\right) L_k^{(\tilde{\alpha}_l)}(\omega r^2), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.118)$$

$$E \equiv E_k = 2\omega(2k + \tilde{\alpha}_l + 1), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (6.119)$$

où $L_k^{(\tilde{\alpha}_l)}$ désignent les polynômes de Laguerre généralisés.

Solution de la généralisation du problème à trois corps de (CMW)

Maintenant nous sommes en mesure d'écrire les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire pour l'Hamiltonien (6.94), représentant une généralisation du problème à trois corps de Calogero-Marchioro-Wolfes.

En effet, les solutions-propres, non normalisées, s'écrivent, donc, dans les coordonnées sphériques (r, θ, φ) comme

$$\begin{aligned} \Psi_{k,l,n} &= r^{\sqrt{\mu+(l+6n+3a+3b+\frac{7}{2})^2}-\frac{1}{2}} e^{-\frac{\omega r^2}{2}} L_k^{\left(\sqrt{\mu+(l+6n+3a+3b+\frac{7}{2})^2}\right)}(\omega r^2) \\ &\quad \times (\sin \theta)^{6n+3a+3b+3} C_l^{\left(6n+3a+3b+\frac{7}{2}\right)}(\cos \theta) \\ &\quad \times (\cos 3\varphi)^{a+\frac{1}{2}} (\sin 3\varphi)^{b+\frac{1}{2}} P_n^{(b,a)}(\cos 6\varphi), \quad (6.120) \\ k &= 0, 1, 2, \dots, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \\ 0 &\leq \varphi \leq \frac{\pi}{6}, \quad a = \frac{1}{2}\sqrt{1+2g}, \quad b = \frac{1}{2}\sqrt{1+2f}, \end{aligned}$$

Les constantes de normalisation $N_{k,l,n}$ pour les fonctions d'ondes sont calculées dans ce cas à partir de

$$\int_0^{+\infty} r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \Psi_{k,l,n}(r, \theta, \varphi) \Psi_{k',l',n'}(r, \theta, \varphi) = \delta_{k,k'} \delta_{l,l'} \delta_{n,n'} N_{k,l,n} \quad (6.121)$$

Les énergies propres de l'équation (6.96) sont données par

$$\begin{aligned}
E_{k,l,n} &\equiv E_{k,l+6n} = 2\omega \left(2k + \sqrt{\mu + \left(l + 6n + 3a + 3b + \frac{7}{2} \right)^2} + 1 \right), \\
k &= 0, 1, 2, \dots, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots .
\end{aligned} \tag{6.122}$$

La dégénérescence du spectre d'énergie (6.122) est égale à la partie entière de $\frac{1}{6}(N+6)$ où l'entier N est défini par $N \equiv l + 6n$, dans le cas des particules identiques (statistique de Bose ou de Fermi) et cette même dégénérescence est multipliée par douze dans le cas de particules distinctes (statistique de Boltzmann). Pour $\mu = 0$, le spectre d'énergie devient linéaire et est égal à

$$E_{k,l,n}(\mu = 0) \equiv E_{2k+l+6n} = 2\omega \left(2k + l + 6n + 3a + 3b + \frac{9}{2} \right), \tag{6.123}$$

dans ce cas là, la dégénérescence sera égale à la partie entière de $\frac{1}{2}(N' + 2)$ où l'entier N' est défini par $N' = 2k + n + 6l$ (cas de particules identiques).

L'extension des solutions (6.120) aux autres secteurs "angulaires" $q\frac{\pi}{6} \leq \varphi \leq (q+1)\frac{\pi}{6}$, $q = 1, 2, \dots, 11$, se fait grâce à l'utilisation de prescriptions prenant en compte des considérations de symétrie [71].

6.3 Une autre généralisation du problème à trois corps

Considérons maintenant l'Hamiltonien suivant qui décrit toujours un système de trois particules de même masse en interaction sur une ligne comme suit

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{i=1}^3 \left(-\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \omega^2 x_i^2 \right) + g \sum_{i<j}^3 \frac{1}{(x_i - x_j)^2} + \frac{\mu}{\sum_{i=1}^3 x_i^2} \\
&\quad + 3f \sum_{\substack{i<j \\ i,j \neq k}}^3 \frac{1}{(x_i + x_j - 2x_k)^2} + \frac{3\beta}{\left(\sum_{i=1}^3 x_i \right)^2}.
\end{aligned} \tag{6.124}$$

Pour $\beta = 0$, on retrouve le problème à trois corps étudié au paragraphe précédent. l'Hamiltonien décrit par (6.124) peut être considéré, donc, comme représentant, d'une part, une autre généralisation du problème à trois corps de Calogero-Marchioro-Wolfes [71] (pour $\mu = 0$) et d'autre part comme une généralisation du problème à trois corps exposé dans [69] (pour $f = 0$) et aussi comme une autre version à trois corps du problème à deux corps étudié dans [68] et exposé dans le dans le chapitre 5 (pour $f = 0$ et $\mu = -g$).

Dans les coordonnées du centre de masse et de Jacobi définies par les équations (6.10), cet Hamiltonien s'écrit comme

$$H = -\frac{\partial^2}{\partial \tilde{R}^2} - \frac{\partial^2}{\partial u^2} - \frac{\partial^2}{\partial v^2} + \omega^2(\tilde{R}^2 + u^2 + v^2) + \frac{\mu}{\tilde{R}^2 + u^2 + v^2} + \frac{9g(u^2 + v^2)^2}{2(u^3 - 3uv^2)^2} + \frac{9f(u^2 + v^2)^2}{2(v^3 - 3vu^2)^2} + \frac{\beta}{\tilde{R}^2}. \quad (6.125)$$

En passant, maintenant, dans les coordonnées sphériques définies par les équations (6.12) le potentiel s'écrit sous la forme

$$V(r, \theta, \varphi) = \omega^2 r^2 + \frac{\mu}{r^2} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{9g}{2 \cos^2(3\varphi)} + \frac{9f}{2 \sin^2(3\varphi)} \right) + \frac{\beta}{\cos^2 \theta} \right]. \quad (6.126)$$

On remarque que ce problème à trois corps avec le potentiel "non central" (6.126) est aussi soluble par séparation des variables. En utilisant donc la transformation (6.50) de la fonction d'onde, l'équation de Schrödinger stationnaire en coordonnées sphériques pour l'Hamiltonien (6.124) fournit trois équations différentielles, à une variable chacune.

L'équation angulaire pour l'angle φ est donnée par

$$\left(-\frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{9g}{2 \cos^2(3\varphi)} + \frac{9f}{2 \sin^2(3\varphi)} \right) \Phi(\varphi) = b_n^2 \Phi(\varphi), \quad (6.127)$$

et est identique à (6.98), donc, les solutions propres et les valeurs propres seront données, respectivement, par les équations (6.109) et (6.111); et l'équation radiale s'écrit comme

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \omega^2 r^2 + \frac{\mu + C_l - \frac{1}{4}}{r^2} \right) F(r) = EF(r), \quad (6.128)$$

dont les solutions propres et les énergies propres seront données, respectivement, par les équations (6.118) et (6.119) et où C_l représente les valeurs propres quantifiées de l'équation différentielle pour la variable angulaire θ , qui s'écrit sous la forme

$$\left(-\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{(b_n^2 - \frac{1}{4})}{\sin^2 \theta} + \frac{\beta}{\cos^2 \theta} \right) \Theta(\theta) = C_l \Theta(\theta), \quad (6.129)$$

Ici les b_n^2 désignent les valeurs propres positives de l'équation différentielle pour l'angle φ (6.127).

Dans l'intervalle $0 \leq \theta \leq \pi$, l'équation (6.129) possède trois points singuliers $k\frac{\pi}{2}$, $k = 0, 1, 2$. Remarquons que dans chacun des deux secteurs (de largeur de $\frac{\pi}{2}$ chacun) de

l'intervalle complet correspond une certaine configuration entre les coordonnées des trois particules comme suit

$$0 < \theta < \frac{1}{2}\pi, \quad \sqrt{3}r \cos \theta = x_1 + x_2 + x_3 > 0, \quad (6.130)$$

$$\frac{1}{2}\pi < \theta < \pi, \quad \sqrt{3}r \cos \theta = x_1 + x_2 + x_3 < 0. \quad (6.131)$$

Il est clair que cette nouvelle contrainte sur la cinématique des trois particules se rajoute à l'ordre et à la polarisation déjà établies dans l'espace de configuration (voir les éqs.(6.102)) et correspond tout simplement à ce que la coordonnée du centre de masse est positive dans le premier cas et négative dans le second.

L'équation (6.129) sera résolue, en premier lieu, dans l'intervalle $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$ avec les conditions aux limites de Dirichlet. La constante de couplage β doit satisfaire la condition $\beta > -\frac{1}{4}$ (car au voisinage de $\frac{\pi}{2}$ on a que $\cos^2 \theta \sim (\theta - \frac{\pi}{2})^2$ et se comporte, donc, comme une barrière centrifuge). Considérons la transformation suivante de la fonction angulaire $\Theta(\theta)$

$$\begin{aligned} \Theta(\theta) &= (\sin \theta)^\nu (\cos \theta)^\rho h(z), \\ z &= \cos 2\theta. \end{aligned} \quad (6.132)$$

En insérant (6.132) dans (6.129) et en supposant en plus que les constantes b_n et β vérifient, respectivement, les relations

$$b_n^2 = \left(\nu - \frac{1}{2}\right)^2, \quad (6.133)$$

$$\beta = \rho(\rho - 1), \quad (6.134)$$

on obtient l'équation différentielle pour la fonction $h(z)$ comme suit

$$(1 - z^2)h''(z) + (\rho - \nu - (\rho + \nu + 1)z)h'(z) + \left(\frac{C_l}{4} - \frac{(\nu + \rho)^2}{4}\right)h(z) = 0. \quad (6.135)$$

L'équation (6.135) aura des solutions acceptables physiquement si et seulement si la constante de séparation C_l vérifie la condition de "quantification" suivante

$$C_l = (2l + \rho + \nu)^2, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.136)$$

ce qui donne à l'équation différentielle (6.135) la forme

$$(1 - z^2)h''(z) + (\rho - \nu - (\rho + \nu + 1)z)h'(z) + l(l + \rho + \nu)h(z) = 0, \quad (6.137)$$

dont les solutions sont données par les polynômes de Jacobi $h(z) = P_l^{(\nu-\frac{1}{2}, \rho-\frac{1}{2})}(\cos 2\theta)$.

Les équations (6.133) et (6.134) donnent, respectivement, deux valeurs pour chacune des constantes ν et ρ à savoir

$$\nu_{>} = \frac{1}{2} + b_n, \quad (6.138)$$

$$\nu_{<} = \frac{1}{2} - b_n, \quad (6.139)$$

et

$$\rho_{>} = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 + 4\beta}), \quad (6.140)$$

$$\rho_{<} = \frac{1}{2}(1 - \sqrt{1 + 4\beta}). \quad (6.141)$$

Les solutions acceptables physiquement de l'équation angulaire (6.129) seront les solutions "régulières" qui correspondent aux valeurs de $\nu = \nu_{>}$ et $\rho = \rho_{>}$ et qui s'écriront, donc, comme suit

$$\Theta_l^{(+)}(\theta) = (\sin \theta)^{b_n + \frac{1}{2}} (\cos \theta)^{c + \frac{1}{2}} P_l^{(b_n, c)}(\cos 2\theta), \quad (6.142)$$

$$0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad c = \frac{1}{2}\sqrt{1 + 4\beta}. \quad (6.143)$$

L'indice + signifie que la coordonnée du centre de masse est positive.

Dans l'intervalle $\frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \pi$ les solutions acceptables physiquement seront obtenus en posant l'"ansatz" suivant pour la fonction

$$\Theta(\theta) = (\sin \theta)^\nu (-\cos \theta)^\rho h(z), \quad (6.144)$$

$$z = \cos 2\theta.$$

ce qui permet d'écrire les solutions

$$\Theta_{\ell, n}^{(-)}(\theta) = (\sin \theta)^{b_n + \frac{1}{2}} (-\cos \theta)^{c + \frac{1}{2}} P_\ell^{(b_n, c)}(\cos 2\theta), \quad (6.145)$$

$$\frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \pi, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

L'indice $-$ indique que la coordonnée du centre de masse est négative. Notons que dans l'intervalle $[\frac{\pi}{2}, \pi]$ nous avons $-\cos \theta \geq 0$ et $\sin \theta \geq 0$ de telle manière que des puissances réelles de ces valeurs positives sont définies.

Quant aux valeurs propres quantifiées C_l de l'équation (6.129), elles seront données, dans les deux cas, par

$$C_l = (2l + b_n + c + 1)^2, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (6.146)$$

Nous sommes maintenant en mesure d'écrire les solutions physiquement acceptables de l'équation de Schrödinger stationnaire $H\Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi)$ pour l'Hamiltonien (6.124). En utilisant la factorisation de la fonction d'onde (6.50), les fonctions-propres "régulières" (non normalisées) s'écrivent

$$\begin{aligned} \Psi_{k,n,l} &= r^{\sqrt{\mu+(2l+6n+3a+3b+c+4)^2}-\frac{1}{2}} e^{-\frac{\omega r^2}{2}} L_k^{\left(\sqrt{\mu+(2l+6n+3a+3b+c+4)^2}\right)}(\omega r^2) \\ &\quad \times (\sin \theta)^{6n+3a+3b+3} (\epsilon \cos \theta)^{c+\frac{1}{2}} P_n^{(6n+3a+3b+3,c)}(\cos 2\theta) \\ &\quad \times (\cos 3\varphi)^{a+\frac{1}{2}} (\sin 3\varphi)^{b+\frac{1}{2}} P_l^{(b,a)}(\cos 6\varphi), \\ k &= 0, 1, 2, \dots, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (6.147)$$

avec

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{2} \sqrt{1+2g}, \quad b = \frac{1}{2} \sqrt{1+2f}, \quad c = \frac{1}{2} \sqrt{1+4\beta}, \\ 0 &\leq \varphi \leq \frac{\pi}{6}, \quad \frac{1-\epsilon}{2} \frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \frac{3-\epsilon}{2} \frac{\pi}{2}, \quad \epsilon = \pm 1. \end{aligned}$$

L'intégrale

$$\int_0^{+\infty} r^2 dr \int_{(1-\epsilon)\pi/4}^{(3-\epsilon)\pi/4} \sin \theta d\theta \int_0^{\pi/6} d\varphi \Psi_{k,l,n}(r, \theta, \varphi) \Psi_{k',l',n'}(r, \theta, \varphi) = \delta_{k,k'} \delta_{l,l'} \delta_{n,n'} N_{k,l,n} \quad (6.148)$$

permet de calculer les constantes de normalisation $N_{k,l,n}$ pour les fonctions d'onde (6.147).

Les énergies propres sont données par

$$\begin{aligned} E_{k,l,n} &\equiv E_{k,2l+6n} = 2\omega \left(2k + \sqrt{\mu + (2l + 6n + 3a + 3b + c + 4)^2} + 1 \right), \\ k &= 0, 1, 2, \dots, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (6.149)$$

La dégénérescence du spectre d'énergie (6.149) est égale à la partie entière du nombre $\frac{1}{6}(N + 6)$ où l'entier pair N est défini par $N = 2(l + 3n)$. Cette dégénérescence vaut pour le cas des particules identiques et elle multipliée par 24 dans le cas de particules distinctes (voir les éqs. (6.147)).

Conclusion

Deux ensembles de travaux ont été exposés dans cette thèse. Concernant la première partie de cette thèse, nous avons présenté deux bornes inférieures optimisées pour des systèmes à 3 et à 4 corps gouvernés par une cinématique relativiste et interagissant par des forces à deux corps invariantes par translation. Les résultats originaux de cette thèse concernent les systèmes à 4 corps. Les résultats concernant les systèmes à 3 corps sont dus à d'autres auteurs [14] et n'ont été inclus que pour voir l'évolution de chacune des deux bornes inférieures optimisées lorsque l'on passe du 3 au 4 corps. Avant d'aborder ces bornes inférieures optimisées, il nous a paru utile de dériver les expressions exactes du niveau fondamental de l'oscillateur harmonique à 3 et à 4 corps pour différentes configurations de masse. Nous avons ensuite présenté successivement les deux bornes inférieures optimisées ancienne et nouvelle. A l'origine de chacune d'elle se trouve une décomposition particulière du terme d'énergie cinétique qui dépend d'un certain nombre de paramètres. Ensuite, en considérant la décomposition correspondante de l'Hamiltonien, en faisant usage de l'invariance par translation de l'état fondamental du système et en appliquant le principe variationnel, on arrive à une borne inférieure pour le niveau fondamental du système qui est une somme de contributions. A chaque paire est associée une contribution qui représente le niveau fondamental d'un Hamiltonien à 2 corps. Reflétant la présence de paramètres libres dans la décomposition sous-jacente de l'énergie cinétique, on obtient une borne inférieure pour chaque jeu de valeurs des paramètres. C'est la meilleure de ces bornes, qui est donc obtenue par un processus d'optimisation, qui porte, selon le cas, le nom d'ancienne ou de nouvelle borne inférieure optimisée. Dans le cas à 3 corps, les deux bornes inférieures optimisées ancienne et nouvelle sont complètement équivalentes. Cette équivalence transparaît au niveau de la décomposition de l'énergie cinétique. Pour $N = 4$, il n'y a plus d'équivalence. Même le nombre de paramètres est différent : 6 paramètres sont impliqués dans le cas de l'ancienne borne inférieure optimisée et 12 paramètres dans le cas de la nouvelle borne inférieure optimisée et on peut même montrer la supériorité de la nouvelle borne inférieure optimisée sur la base de la décomposition de l'énergie cinétique. Les jeux de valeurs des paramètres libres correspondant aux bornes inférieures optimisées satisfont un certain nombre de relations indépendantes de la forme du potentiel et de nature dynamique, baptisées pour ces deux raisons contraintes dynamiques universelles.

Leur nombre est de 1 pour l'ancienne borne inférieure optimisée, que ce soit pour le cas à 3 corps ou à 4 corps, ainsi que pour la nouvelle borne inférieure optimisée dans le cas à 3 corps. Ce nombre est de 7 lorsque il s'agit de la nouvelle borne inférieure optimisée dans le cas à 4 corps. Ces contraintes dynamiques universelles sont dérivées dans chacun des quatre cas. En plus de leur intérêt théorique, les contraintes dynamiques universelles ont un grand intérêt pratique, car leur connaissance et leur prise en compte peut faciliter le problème d'optimisation de manière spectaculaire. L'ancienne borne inférieure optimisée à 4 corps est toujours meilleure que la borne inférieure améliorée, mais elle n'est pas toujours meilleure que la borne inférieure naïve. En effet, il existe des cas de figure où c'est la borne inférieure naïve qui est meilleure que l'ancienne borne inférieure optimisée. La propriété de saturabilité, c'est à dire la coïncidence de l'ancienne borne inférieure optimisée et de l'énergie exacte pour des interactions harmoniques, n'est également pas toujours réalisée. En effet, il existe des cas de figure où la saturation de l'ancienne borne inférieure optimisée n'est pas réalisée. Quand à la nouvelle borne inférieure optimisée à 4 corps, elle est supérieure ou au moins aussi bonne, et de manière absolue, c'est à dire dans les cas de figure, à toutes les autres bornes : les bornes inférieures naïve et améliorée et l'ancienne borne inférieure optimisée. Ceci d'une part. D'autre part, la nouvelle borne inférieure optimisée est toujours saturée indépendamment des masses impliquées. En outre, la borne inférieure optimisée est de très bonne qualité. Elle est très proche des valeurs fournies par des calculs variationnels poussés à un haut degré de précision, au point de constituer une excellente approximation pour l'énergie de l'état fondamental du système. Les travaux de Boudjema et Zouzou [4, 16, 17, 18, 19] ont confirmé toutes ces conclusions en les étendant à des valeurs quelconques de N . Boudjema et Zouzou [4, 16] sont même parvenus à montrer la propriété de saturabilité analytiquement. Ce qui reste maintenant à faire, c'est de sonder les applications de la nouvelle borne inférieure optimisée, par exemple les applications aux systèmes borroméens et à l'estimation des niveaux d'énergie pour des systèmes physiques concrets.

Dans la seconde partie de la thèse, nous avons abordé et solutionné des généralisations des problèmes de type Calogero à deux ($N = 2$) et trois ($N = 3$) corps. Pour le problème à deux corps, après avoir exposé en détail les solutions exactes d'un nouveau modèle intégrable de type Calogero dont l'Hamiltonien représente un système de deux particules de même masse confinées dans un champ harmonique externe et interagissant, sur une ligne infinie, via un potentiel à deux corps considéré comme étant "déformation" du potentiel de Calogero, nous avons généralisé ce modèle à deux corps dans les dimensions d'espace $D = 2, 3$ et pour D quelconque. Après avoir montré que le problème tel qu'il est exposé se réduit à un problème à deux degrés de liberté, et que le potentiel était séparable dans les coordonnées "polaires" (r, θ) , nous obtenons, par la méthode de séparation des variables, les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire du problème en calculant explicitement les fonctions d'ondes normalisées et le spectre d'énergie discret (non linéaire). En outre, nous montrons que ce problème est soluble pour certaines valeurs de

la constante de couplage de l'interaction mutuelle entre les deux particules. Ces valeurs "permises" de la constante de couplage appartiennent à un intervalle dont la longueur augmente de façon monotone avec la dimension d'espace D . De plus, nous obtenons que dans la dimension $D = 2$ le potentiel est uniquement répulsif (constante de couplage positive), par contre dans la dimension une, trois ou quelconque ($D \neq 2$) le potentiel peut être attractif (la constante de couplage peut prendre des valeurs négatives). En étudiant la relation entre l'exacte solubilité du modèle étudié et certaines de ses propriétés intrinsèques (propriétés de symétries "cachées" essentiellement), nous avons montré que le modèle, dans la dimension d'espace D quelconque était supersymétrique, comme dans le cas de la dimension $D = 1$, dans le sens où les potentiels radial et angulaire sont tous deux séparément supersymétriques et invariants de forme et que les solutions (fonctions d'onde et spectre d'énergie) pouvaient être obtenues en utilisant les méthodes et les résultats connus dans la littérature dans le cadre de la mécanique quantique supersymétrique. Cette propriété de supersymétrie du modèle pourrait être à l'origine de son exacte solubilité. Nous avons aussi montré que l'Hamiltonien du système, dans une dimension d'espace D quelconque, appartenait à la classe des systèmes invariants dans la symétrie conforme $SU(1, 1)$ en vérifiant les relations de commutation de l'algèbre correspondante et en montrant que le potentiel d'interaction mutuelle entre les deux particules était une fonction homogène d'ordre -2 , condition nécessaire pour vérifier l'algèbre $SU(1, 1)$. Les solutions du problème peuvent être, donc, obtenues par des méthodes algébriques, via par exemple le passage à la représentation de Bargmann, comme cela fut exposé récemment dans la littérature pour un problème très similaire. La symétrie "cachée" conforme $SU(1, 1)$ constitue aussi une bonne raison pour expliquer l'exacte solubilité du modèle dans les différentes dimensions d'espace.

En ce qui concerne le problème à trois corps, nous avons considéré un ensemble de problèmes unidimensionnels, qui constituent des généralisations du problème à deux corps unidimensionnel exposé dans cette thèse. Plus explicitement, on introduit un potentiel d'interaction à trois corps, non invariant par translation, dans tous les problèmes étudiés. Dans le premier problème nous généralisons le problème de Calogero à trois corps. Nous avons solutionné le problème dans deux cas de figure. Le cas où la coordonnée du centre de masse est fixée et confondue avec l'origine des axes et en soustrayant le mouvement du centre de masse, le problème devient un problème à deux degrés de liberté et est solutionné dans un système de coordonnées polaires par la méthode de séparation des variables angulaire et radiale. Les solutions obtenues (fonctions d'ondes et spectre d'énergie) sont identiques à celles du problème de Calogero à trois corps dans le cas où le potentiel à trois corps introduit est "supprimé". Dans le deuxième cas de figure où la coordonnée du centre de masse n'est pas nulle (et non fixée), le problème ne peut plus être séparé en un mouvement du centre de masse et un mouvement "relatif", à cause de la présence du potentiel à trois corps non invariant par translation. Cependant, grâce à une transformation appropriée et au passage à un système de coordonnées "sphériques" (r, θ, φ) on obtient,

par la méthode de séparation des variables, les fonctions d'ondes et le spectre d'énergie des états liés. Notons que ce problème a été étudié très récemment dans la littérature mais n'a pas été solutionné complètement (seul le spectre d'énergie et la forme des fonctions radiales ont été donnés).

Dans le second problème à trois corps étudié nous généralisons le problème de Calogero-Marchioro-Wolfes et nous trouvons les solutions exactes de l'équation de Schrödinger pour les états liés du système. Enfin, on montre qu'un troisième problème, qui généralise les deux précédents, est exactement soluble et ses solutions sont explicitement calculées. Notons que tous les potentiels radial et angulaires rencontrés dans ces problèmes sont connus dans la littérature pour être supersymétriques et invariants de forme, ce qui indique que les modèles étudiés à trois corps sont supersymétriques et donc exactement solubles.

En conclusion, les solutions exactes apportées à quelques problèmes à petit nombre de corps ($N = 2$ et $N = 3$) de type Calogero contribuent humblement à élargir l'éventail des problèmes exactement solubles connus en mécanique quantique. Des perspectives intéressantes s'ouvrent à la suite de ce travail à savoir, par exemple, de généraliser les problèmes à trois corps étudiés à la dimension d'espace $D = 2, 3, \dots$ etc, de trouver d'autres généralisations au problème de Calogero à deux corps exactement solubles.

Bibliographie

- [1] K. Varga & Y. Suzuki, Phys. Rev. C **52** (1995) 2885.
- [2] S. Fleck & J.-M. Richard, Few-Body Systems **19** (1995) 19.
- [3] Kh. Boudjema, *Quelques Résultats pour les Systèmes à Petit Nombre de Corps*, thèse de Magister, Université Mentouri- Constantine (2000).
- [4] Kh. Boudjema, *Bornes Inférieures pour les Systèmes à Petit Nombre de Corps*, thèse de Doctorat en Sciences, Université Mentouri- Constantine (2007), en instance de soutenance.
- [5] M.E. Fisher & D. Ruelle, J. Math. Phys. **7** (1966), 260.
- [6] F.J. Dyson & A. Lenard, J. Math. Phys. **8** (1967), 423.
- [7] J.-M. Lévy-Leblond, J. Math. Phys. **10** (1969), 806.
- [8] J.-P. Ader, J.-M. Richard & P. Taxil, Phys. Rev. D **25** (1982) 2370.
- [9] S. Nussinov, Phys. Rev. Lett. **51** (1983) 2081.
- [10] J.-M. Richard, Phys. Lett. B **139** (1984) 408.
- [11] R.L. Hall & H.R. Post, Proc. Phys. Soc. **90** (1967) 381.
- [12] J.-L. Basdevant, A. Martin & J.-M. Richard, Nucl. Phys. B **343** (1990) 60.
- [13] J.-L. Basdevant, A. Martin & J.-M. Richard, Nucl. Phys. B **343** (1990) 69.
- [14] J.-L. Basdevant, A. Martin, J.-M. Richard & T.T. Wu, Nucl. Phys. B **393** (1993) 111.
- [15] A. Benslama, A. Metatla, A. Bachkhaznadj, A. Krikeb, J.-L. Basdevant, J.-M. Richard & T.T. Wu, Few-Body Syst. **24** (1998) 39.
- [16] Kh. Boudjema & S.R. Zouzou, J. Phys. A : Math. Gen. **39** (2006) 5857.
- [17] Kh. Boudjema & S.R. Zouzou, J. Phys. A : Math. Gen. **39** (2006) 7383.
- [18] Kh. Boudjema & S.R. Zouzou, *Optimized lower bound for five-body Hamiltonians*, en préparation.
- [19] Kh. Boudjema & S.R. Zouzou, *Comparison of lower bounds for N-body Hamiltonians*, en préparation.

- [20] P. D. Lax, *Comm. Pure Appl. Math.* **21** (1968) 467.
- [21] F. A. Berezin, G. P. Phophil & V. M. Finkelberg, *Vestnik Voskovoskogo Universiteta* **1** (1964) 21.
- [22] F. Calogero, *J. Math. Phys.* **10** (1969) 2191.
- [23] F. Calogero, *J. Math. Phys.* **12** (1971) 419.
- [24] B. Sutherland, *Phys. Rev. A* **4** (1971) 2019.
- [25] B. Sutherland, *Phys. Rev. A* **5** (1972) 1372.
- [26] R. P. Stanley, *Adv.Math.* **77**, (1988) 76.
- [27] P. J. Forrester, *Nucl. Phys. B* **388** (1992) 672.
- [28] H. Jack, *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect.A* **69** (1970/1971) 1.
- [29] H. Jack, *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect.A* **69** Part 4 (1972) 347.
- [30] L. Lapointe, A. Lascoux & J. Morse, *Electron. J. Combin.* **7** (2000) 1.
- [31] L. Lapointe & L. Vinet, *Comm. Math. Phys* **178** Number 2 (1996) 425.
- [32] L. Lapointe & L. Vinet, *Adv. Math.* **130** Number 2 (1997) 261.
- [33] L. Lapointe & L. Vinet, *Lett.Math. Phys.* **40** Number 3 (1997) 269.
- [34] C.F. Dunkl, *Tram. Amer. Math. Soc.* **311** (1989) 1.
- [35] H. Awata, Y. Matsuo, S. Odake & J. Shiraishi, *Nucl. Phys. B* **449** (1995) 347. (hep-th/9503043).
- [36] E. Langmann, *J. Math. Phys.* **41** (2001) 4148.
- [37] M. Hallnäs et E. Langmann, *J. Phys. A : Math. Gen.* **39** (2006) 3511.
- [38] J. Moser, *Surveys in Applied Mathematics, Proc. First Los Alamos Sympos. Math. in Natural Sci.* **1974** (1976) 235.
- [39] H. Airault, H.P. McKean & J . Moser, *Comm. Pure Appl. Math.***30** 1 (1977) 95.
- [40] B. D. Simons, P. A. Lee & B. L. Altshuler, *Phys. Rev. Lett.* **72** (1994) 64.
- [41] H . Azuma & S. Iso, *Phys. Lett. B* **331** (1994) 107.
- [42] M. Caselle, *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 2776.
- [43] G. W. Gibbons & P. K. Tomend, *Phys. Lett. B* **454**(1999) 187.
- [44] S. Ouvry, *On the relation between anyon and Calogero Models*, **cond-mat/9907239**.
- [45] E. D'Hoker & D. H. Phong, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **135** (1999) 75 (**hep-th/9906027**).
- [46] N. Gurappa & P. K. Panigrahi, *free harmonic oscillators, Jack polynomials and Calogero-Sutherland systems*, **hep-th/9910123**.
- [47] M. A. Olshanetsky & A. M. Perelomov, *Phys. Rep.* **71** (1981) 313.

- [48] M. A. Olshanetsky & A. M. Perelomov, Phys. Rep. **94** (1983) 313.
- [49] F. D. Haldane, Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 635.
- [50] B. Sriram Shastry, Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 639.
- [51] A. P. Polychronakos, Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 703 (**hep-th/9202057**).
- [52] H. Frahm, J. Phys. A : Math. Gen. **26** (1993) L473.
- [53] A. P. Polychronakos, Nucl. Phys. B **419** (1994) 553 (**hep-th/9310095**).
- [54] S. N. Ruijsenaars & H. Schneider, Ann. Phys. **170** (1986) 370.
- [55] S. N. Ruijsenaars, Comm. Math. Phys. **110** (1987) 191.
- [56] I. G. Macdonald, *Symmetric functions and Hall polynomials*, 2nd edition, The Clarendon Press Oxford University Press (London) (1995).
- [57] J. F. van Diejen & L. Vinet (eds), *Calogero-Moser-Sutherland Models*, Springer (2000).
- [58] D. Z. Freedman & P. F. Mende, Nucl. Phys. B **344** (1990) 317.
- [59] B. Sriram Shastry & B. Sutherland, Phys. Rev Lett. **70** (1993) 4029 (**cond-mat/9212029**).
- [60] P. Desrosiers, L. Lapointe & P. Mathieu, Nucl. Phys. B **606** [PM] (2001) 547.
- [61] A. M. Perelemov, Teor. Mat. Fiz. **6** (1971) 364.
- [62] P. J. Gambardella, J. Math. Phys. **16** (1975) 1172.
- [63] L. Brink, T. H. Hansson & M. A. Vasiliev, Phys. Lett.B **286** (1992) 109.
- [64] S. J. Kakei, J. Phys. A : Math.Gen. **29** (1996) 619.
- [65] H. Ujino & M. J. Wadati, J. Phys. Soc. Japan **64** (1995) 2703.
- [66] H. Ujino & M. J. Wadati, J. Phys. Soc. Japan **65** (1996) 653.
- [67] C. Quesne, Phys. Rev. A **55** (1997) 3931.
- [68] A. Diaf, A. T. Kerris, M. Lassaut & R. J. Lombard, J. Phys. A : Math. Gen. **39** (2006) 7305.
- [69] S. Meljanac, A. Samsarov, B. Basu-Mallick & K. S. Gupta, Eur. Phys. J. C **49** (2007) 875.
- [70] R. G. Smirnov & P. Winternitz, J. Math. Phys. **47** (2006) 093505.
- [71] J. Wolfes, J. Math. Phys. **15** (1974) 1420.
- [72] F.R. Gantmacher, *Théorie des matrices*, Dunod (Paris) 1966.
- [73] J.-M. Richard, Phys. Rep. **212** (1992) 1.
- [74] C. Quigg & J.L. Rosner, Phys. Rep. **56** (1979) 167.
- [75] C. Quigg, *Realizing the potential of quarkonium* Preprint Fermilab-conf 1997/266-T.

- [76] A. Martin, Phys. Lett. B **287** (1982) 251.
- [77] R. G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*, 2nd edition, Springer (New York) 1982.
- [78] M. Abramowitz et I A Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover (New York) 1972.
- [79] M. V. N. Murthy, J. Law, R. K. Bhaduri & G. Date, J. Phys. A : Math. Gen. **25** (1992) 6163.
- [80] L. Landau & E. Lifschitz, *Mécanique Quantique*, 2^{ième} édition, Editions Mir (Moscou) 1974.
- [81] A. Bachkhaznadj, M. Lassaut & R. J. Lombard, J. Phys. A : Math. Theor. **40** (2007) 8791.
- [82] V. Jakubsk'y, M. Znojil, E. A. Luis & F. Kleefeld, Phys. Lett. A **334** (2005) 154.
- [83] A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger & F. G. Tricomi, *Higher Transcendental Functions*, vol II, McGraw-Hill (NewYork) 1953.
- [84] M. A. Rodriguez & P. Winternitz, J. Math.Phys. **43** (2002) 1309.
- [85] A. Turbiner, Modern Physics Letters A **13** (1998) 1473.
- [86] F. Cooper, A. Khare & U. Sukhatme, Phys. Rep. **251** (1995) 267 ; P. K. Ghosh, A. Khare & M. Sivakumar, Phys. Rev. A **58** (1998) 821 ; C. J. Efthimiou & D. Spector, **quant-ph/9702017**.
- [87] L. Gandenshtein, JETP Lett. **38** (1983) 356.
- [88] F. Cooper, J. N. Ginocchio & A. Khare, Phys. Rev. D **36** (1987) 2458.
- [89] R. Dutt, A. Khare & U. Sukhatme, Am. J. Phys. **56** (1988) 163.
- [90] G. Lévai, J. Phys. A : Math. Gen. **22** (1989) 689.
- [91] A. Khare & J. McCabe, Phys. Lett. B **269** (1991) 330.
- [92] L. Infeld & T. E. Hull, Rev. Mod. Phys. **23** (1951) 21.
- [93] S. Meljanac, M. Milekovic & A. Samsarov, Phys. Lett. B **594** (2004) 241 ; S. Meljanac & A. Samsarov, Phys. Lett. B **613** (2005) 221 [Erratum-ibid. B **620** (2005) 221] ; S. Meljanac & A. Samsarov, Phys. Lett. A **351** (2006) 246.
- [94] F. Calogero & C. Marchioro, J. Math. Phys. **15** (1974) 1425.

Abstarct

This Thesis include two sets of distinct works but both of them are concerned with few body quantum systems.

The first part is a contribution to two optimized lower bounds for four body systems : the old and the new optimized lower bounds. The new optimized lower bound seems to be better than any other lower bound derived before. The saturability feature (equality between the exact value of the energy of the ground state and the value of the lower bound) is proven numerically for the harmonic interactions.

In the second part of the thesis, we pay attention to two kinds of problems. The first one is concerned with a generalisation of a new integrable one-dimensionnal two-body model of the Calogero type, in any dimension of space, where the exact solutions of the stationary Schrödinger equation are found explicitly (energy spectrum and normalisables waves functions). We show also that this D -dimensional model ($D \geq 2$) is supersymmetric and belongs to the class of conformal $SU(1,1)$ invariants systems. The second work is involved with the exact resolution of generalisations of three-body Calogero and Calogero-Marchioro-Wolfes problems.

Keys-words : harmonic oscillator, optimized lower bound, Schrödinger equation, Calogero model, supersymmetry, $SU(1,1)$ symmetry.

ملخص

هذه الرسالة تحتوي على مجموعتين من الأعمال المختلفة رغم كونهما تدرجان في إطار دراسة المجموعات الكوانتية ذات العدد الصغير من الجسيمات.

الجزء الأول هو عبارة عن مساهمة في إيجاد حدين سفليين "محسنين" لجمل ذات أربعة أجسام: الأولى الحد السفلي "المحسن" القديم و الثاني الحد السفلي "المحسن" الجديد. لقد ثبت أن الحد السفلي "المحسن" الجديد هو أحسن من باقي الحدود السفلي الموجودة و المعروفة حالياً. و لقد تم التأكد و البرهنة العددية من أن الحد الأسفل "المحسن" الجديد يطابق قيمة طاقة الحالة الأساسية للجمل في حالة التفاعلات التوافقية.

الجزء الثاني من الأعمال يهتم بنوعين من المسائل. النوع الأول يكمن في حساب الحلول التامة لمعادلة شرودينجر في بعد فضائي كفي الخاصة بجمل جسمين من صنف كالوجيرو. نبين أيضا أن هذه الجملة تحتوي على تناظر "سوبرسيمتري" و تنتمي كذلك إلى الجمل التي تملك تناظر $SU(1,1)$. النوع الثاني من المسائل يخص إيجاد حلول تامة لمسائل ذات 3 جسيمات معمة لمسائل من صنف كالوجيرو و كالوجيرو-مارشيور-وولف.

كلمات مفاتيح: هزاز توافقي، حد سفلي محسن، معادلة شرودينجر، نموذج كالوجيرو، سوبرسيمتري، تناظر $SU(1,1)$.

Résumé

Cette thèse comporte deux ensembles de travaux distincts quoique s'inscrivant tous deux dans le domaine des systèmes quantiques à petit nombre de corps.

La première partie est une contribution à des bornes inférieures optimisées ancienne et nouvelle pour des systèmes à quatre corps. La nouvelle borne inférieure optimisée s'avère supérieure à toutes les bornes inférieures existant sur le marché. La propriété de saturabilité (coïncidence de l'énergie exacte du niveau fondamental et de la nouvelle borne inférieure optimisée) est prouvée numériquement dans le cas des interactions harmoniques.

Dans la deuxième partie de la thèse, nous avons abordé deux types de problèmes. Le premier consiste essentiellement à généraliser à une dimension d'espace quelconque un nouveau modèle intégrable à deux corps de type Calogero. Les solutions exactes (spectre d'énergie et fonctions d'ondes normalisables) de l'équation de Schrödinger stationnaire sont explicitement calculées. On montre aussi que ce modèle pour une dimension d'espace $D \geq 2$ est supersymétrique et appartient à la classe des systèmes invariants sous la symétrie conforme $SU(1,1)$. Le second type de problème a trait à la résolution exacte de généralisations des problèmes à trois corps de Calogero et de Calogero-Marchioro-Wolfes.

Mots-cles : oscillateur harmonique, bornes inférieure optimisée, équation de Schrödinger, modèle de Calogero, supersymétrie, symétrie $SU(1,1)$.