

N° d'ordre : 09 / 2010 - M / phy

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE  
HOUARI BOUMEDIENNE  
FACULTE DE PHYSIQUE



## MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de Magister

En physique

**Spécialité : Physique Théorique des Basses et Moyennes Energies**

Par : BOUFAS Samia

Sujet :

**Application de l'inégalité de Bertlmann et Martin  
aux systèmes avec spin**

Soutenue publiquement, le 01 / 02 / 2010 devant le Jury composé de :

|                 |              |                      |                     |
|-----------------|--------------|----------------------|---------------------|
| M               | S. KESSAL    | Professeur à L'USTHB | Président           |
| M <sup>me</sup> | F.Z. IGHEZOU | Professeur à L'USTHB | Directrice de thèse |
| M <sup>me</sup> | A.H. HAMICI  | M.C à L'USTHB        | Examinatrice        |
| M <sup>me</sup> | F. CHAFA     | Professeur à L'USTHB | Examinatrice        |
| M               | M. HACHEMANE | Professeur à L'USTHB | Examinateur         |

## Remerciements

Je tiens avant tout à exprimer ma très grande gratitude à ma directrice de thèse Madame F.Z. IGHEZOU, Professeur à l'USTHB, pour avoir non seulement accepté de gérer ce travail mais aussi pour la confiance qu'elle m'a témoignée en me confiant ce travail, ainsi que pour l'aide constante et les conseils judicieux qu'elle m'a donnés tout au long de ce travail. Je la remercie pour ses qualités humaines, pédagogiques et scientifiques.

J'aimerais remercier Monsieur R. J. Lombard, pour son aide et toutes les discussions que l'on a eues tout au long de ce travail.

Je tiens à remercier tout particulièrement Monsieur S. KESSAL, Professeur à l'USTHB, pour l'honneur qu'il m'a fait de présider ce jury et d'avoir accepté de juger ce travail.

J'adresse de grands remerciements à Madame F. CHAFA, Professeur à l'USTHB d'avoir accepté d'être membre du jury de ce mémoire.

J'adresse ma plus profonde gratitude à Madame A. H. HAMICI, Maître de conférences à l'USTHB pour son aide et les conseils judicieux qu'elle m'a donnés tout au long de ce travail. Je la remercie pour ses qualités humaines et pour avoir accepté de juger ce travail.

J'exprime mes vifs remerciements à Monsieur M. HACHEMANE, Professeur à l'USTHB d'avoir accepté d'être membre du jury de ce mémoire.

Je remercie aussi tous les enseignants qui ont contribué à ma formation durant l'année théorique.

Mes remerciements et ma gratitude s'adressent aussi à Monsieur A. SMIDA, Professeur à l'USTHB pour son encouragement.

Tout au long de ces deux ans, j'ai eu le plaisir de partager mes journées avec les collègues du laboratoire de physique théorique de l'USTHB, M<sup>r</sup> D. Benrabia, M<sup>elle</sup> R. Yekken, M<sup>r</sup> S. Slimatni, M<sup>elle</sup> K. Ghazal, M<sup>elle</sup> N. Boubalou qui ont tous contribué à leur manière.

Enfin, mes vifs remerciements à toutes mes amies pour leur sympathie et l'aide qu'elles m'ont apportée tout au long de ce travail ; je remercie tout spécialement la famille Laraba.

Je remercie Allah le tout puissant de nous donner la volonté et la santé

A celui qui m'a indiqué la bonne voie en me  
rappelant que l'espoir donne toujours la victoire

A mon Père.

A celle qui à attendu avec patience  
les fruits de sa bonne éducation

A ma Mère.

A mes frères et mon unique sœur  
à Mohamed, Hocine, Kamel, ELamine et tout spécialement Fatima

A vous tous, du fond du cœur Merci

## SOMMAIRE

|  |               |
|--|---------------|
| <b>INTRODUCTION.....</b>   | <b>3</b>      |
| <b>CHAPITRE I : Introduction aux inégalités de Bertlmann et Martin.....</b>  | <b>5</b>      |
| I Inégalités de Bertlmann et Martin dans le problème à deux corps.....   | 5             |
| I.1 Inégalités de Bertlmann et Martin généralisées (IBMG).....   | 5             |
| I.2 Facteur correctif.....   | 6             |
| II Quelques applications des IBMG dans le cas de problèmes à deux corps.....   | 7             |
| II.1 Potentiels en loi de puissance.....   | 8             |
| II.2 Systèmes liés avec un nombre infini d'états.....  | 8             |
| II.3 Potentiels complexes.....   | 9             |
| II.4 Application à l'atome d'hélium.....   | 9             |
| II.5 Inégalités de Bertlmann et Martin dans un problème à trois corps.....   | 9             |
| III Rappel sur l'inégalité de Bertlmann et Martin à une dimension sans tenir compte<br>du spin.....                  | 10            |
| III.1 L'inégalité de Bertlmann et Martin pour un oscillateur harmonique à une<br>dimension.....                      | 10            |
| III.2 L'inégalité de Bertlmann et Martin pour deux oscillateurs harmoniques sans<br>interaction à une dimension..... | 13            |
| <br><b>CHAPITRE II : Inégalité de Bertlmann et Martin pour des systèmes indépendants<br/>avec spin.....</b>          | <br><b>14</b> |
| I Cas d'une particule.....   | 15            |
| I.1 Sans renversement de spin.....   | 15            |
| I.2 Avec renversement de spin.....   | 16            |
| II Rappels sur les problèmes physiques à deux corps.....   | 18            |
| II.1 Fonction de spin.....   | 19            |
| II.2 Fonction d'onde spatiale.....   | 19            |
| II.3 Fonction d'onde totale.....   | 20            |
| III Inégalité de Bertlmann et Martin dans le cas de deux oscillateurs harmoniques avec<br>spin.....                  | 20            |

|  |    |
|--|----|
| III.1 Sans renversement de spin .....  | 21 |
| III.1.1 Avec échange des particules.....   | 21 |
| III.1.2 Sans échange des particules.....   | 23 |
| III.2 Avec renversement de spin .....  | 24 |
| III.2.1 Avec échange des particules.....   | 24 |
| III.2.2 Sans échange des particules.....   | 26 |
| <br>   |    |
| <b>CHAPITRE III : Inégalité de Bertlmann et Martin pour des systèmes en interaction</b>  |    |
| <b>avec spin</b> .....   | 30 |
| I Cas de deux oscillateurs harmoniques interagissant par une interaction harmonique..... | 31 |
| I.1 Interaction indépendante des spins.....  | 31 |
| I.1.1 Sans renversement de spin.....   | 32 |
| I.1.1.1 Avec échange des particules.....   | 32 |
| I.1.1.2 Sans échange des particules.....   | 34 |
| I.1.2 Avec renversement de spin.....   | 35 |
| I.1.2.1 Avec échange des particules.....   | 36 |
| I.1.2.2 Sans échange des particules.....   | 37 |
| I.2 Interaction dépendante des spins.....  | 39 |
| I.2.1 Sans renversement de spin.....   | 39 |
| I.2.2 Avec renversement de spin.....   | 40 |
| I.2.2.1 Avec échange des particules.....   | 40 |
| I.2.2.2 Sans échange des particules.....   | 42 |
| I.2.3 Résolution par la méthode des perturbations.....                                   | 44 |
| I.2.3.1 Avec renversement de spin et avec échange des particules.....                    | 45 |
| I.2.3.2 Avec renversement de spin et sans échange des particules.....                    | 46 |
| II Cas de deux oscillateurs harmoniques interagissant par une interaction gaussienne     |    |
| indépendante des spins.....  | 47 |
| II.1 Avec renversement de spin et échange des particules.....                            | 48 |
| II.2 Avec renversement de spin et sans échange des particules.....                       | 49 |
| <br>   |    |
| <b>CONCLUSION GENERALE</b> .....   | 51 |
| <b>APPENDICES</b> .....  | 53 |
| <b>BIBLIOGRAPHIE</b> .....   | 67 |

# INTRODUCTION

## **INTRODUCTION**

Dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, Bertlmann et Martin ont introduit des inégalités, notées IBM, dérivées de la règle de somme de Thomas-Reiche-Kuhn (TRK). Ces inégalités, généralisées dans le cas de problèmes à symétrie sphérique, sont une suite de relations récurrentes entre les moments de la densité du fondamental et les différences d'énergie entre le fondamental et la ligne yrast.

Les IBM ne donnent qu'une limite supérieure aux moments de la densité du fondamental ou aux énergies. En général, une relation n'est pas utilisable à moins d'être proche d'une égalité. Aussi, pour obtenir des égalités, Bertlmann et Martin ont proposé une première forme de facteur correctif à introduire dans les IBM. Ce facteur a été généralisé par la suite. Bien que déterminé de façon empirique, le facteur correctif a permis de reproduire les énergies de la ligne yrast ou les moments de la densité du fondamental avec une précision allant jusqu'à moins de 1% dans le cas des potentiels confinants.

Différentes applications, basées sur les IBM, ont été entreprises, notamment celles qui permettent de reconstruire la densité du fondamental à partir d'un spectre de niveaux d'énergie et d'en déduire le potentiel équivalent dans lequel baigne le système.

Notons que toutes les applications entreprises afin de tester la fiabilité et la validité des IBM ne prenaient pas en compte les degrés de liberté de spin des systèmes étudiés. Aussi, le but de notre travail consistera en l'étude de l'applicabilité de la méthode des IBM dans le cas où les degrés de liberté de spin seront pris en considération.

Une des inégalités de Bertlmann et Martin lie le moment d'ordre 2 de la densité du fondamental (appelé aussi rayon carré moyen) à la différence d'énergie entre le fondamental et le premier état excité vers lequel on considère une transition dipolaire. Cette inégalité est dérivée en calculant la valeur moyenne, dans le fondamental, du double commutateur entre l'hamiltonien du système et l'opérateur de transition dipolaire considéré; la règle de somme ainsi établie est ensuite minorée en remplaçant toutes les énergies des états excités par celle du premier état. Pour l'oscillateur harmonique, cette inégalité est saturée c.à.d que l'on a une égalité stricte (le facteur correctif étant égal à 1); ceci implique que le premier état excité emporte toute la règle de somme. Pour cela, nous nous intéresserons particulièrement à cette

inégalité et nous chercherons à vérifier si la propriété de saturation établie pour des particules dans un champ harmonique reste vraie.

Pour des raisons de simplicité, nous travaillerons dans un espace à une dimension.

Ce mémoire sera organisé comme suit : dans un premier chapitre, nous rappellerons brièvement en quoi consistent les IBM, les conditions de leur applicabilité et nous résumerons l'ensemble des travaux réalisés par notre groupe dans le cadre des IBM. Nous rappellerons, particulièrement, « l'égalité » obtenue pour un potentiel d'oscillateur harmonique sans spin.

La suite du travail sera consacrée à l'étude de l'influence des degrés de liberté de spin sur la règle de somme et sur la relation qui en découle dans les différents cas étudiés.

Dans le deuxième chapitre, après un bref rappel sur la construction des fonctions d'onde d'espace, de spin et totale pour des systèmes à 2 particules de spin  $\frac{1}{2}$ , nous nous intéresserons au cas où ces particules sont indépendantes et baignent dans des champs harmoniques. Nous tiendront compte des spins et nous considérerons des transitions avec et sans renversement de spin (c.à.d. avec et sans changement d'orientation des spins).

Le troisième chapitre sera consacré à l'établissement de l'inégalité de Bertlmann et Martin dans le cas où les particules considérées interagissent entre elles : dans un premier stade, nous supposerons une interaction harmonique pouvant ou non dépendre des spins puis nous introduirons une interaction « gaussienne ». Comme, pour cette interaction, il n'est pas possible de résoudre l'équation de Schrödinger analytiquement, nous utiliserons la méthode des perturbations.

Nous chercherons, également, à déterminer l'influence des propriétés d'antisymétrie de la fonction d'onde sur la règle de somme et sur la saturation de l'IBM qui en découle.

L'ensemble des résultats auxquels nous serons parvenus seront résumés dans une conclusion générale.

Les détails de calculs et démonstrations abordés dans ce mémoire, seront explicités dans les appendices A, B, C et D.

# CHAPITRE I

## **INTRODUCTION AUX INEGALITES DE BERTLMANN ET MARTIN**

Dans une première étape, nous allons rappeler brièvement en quoi consistent les inégalités de Bertlmann et Martin, les conditions de leur applicabilité ainsi que les domaines dans lesquels notre groupe de travail les a appliquées avec succès.

Notons que, jusqu'à présent, le spin des systèmes étudiés n'a pas été pris en compte.

### **I Inégalité de Bertlmann et Martin dans le problème à deux corps**

Dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, Bertlmann et Martin [1,2] ont établi une inégalité intéressante, à partir de la règle de somme de Thomas-Reich-Kuhn (TRK). Cette inégalité est valable dans le cas des potentiels locaux ; elle lie le rayon carré moyen de la densité de l'état fondamental à la différence d'énergie ( $E_1 - E_0$ ).

$$\langle r^2 \rangle \leq \frac{DA^2}{2m(E_1 - E_0)} \quad (\text{I.1})$$

où :

$\langle r^2 \rangle$  est le rayon carré moyen de l'orbite fondamentale,  $D$ , le nombre de dimensions de l'espace et  $m$ , la masse de la particule dans un champ de potentiel (remplacée par la masse réduite dans un problème à deux corps).  $E_1$  est l'énergie de l'état le plus bas atteint par l'opérateur de transition dipolaire alors que  $E_0$  est celle de l'état fondamental.

#### **I.1 Inégalité de Bertlmann et Martin généralisée (IBMG)**

Pour  $D = 3$ , l'inégalité a été généralisée à partir des règles de sommes multipolaires linéaires en énergie [3]. En considérant le double commutateur de l'hamiltonien  $H$  avec l'opérateur de transition multipolaire  $Q_l^0(\vec{r}) = r^l Y_l^0(\theta, \varphi)$  puis, en calculant sa valeur moyenne dans l'état fondamental  $1s$  (noté  $|0\rangle$ ), nous obtenons :

$$\sum_n (E_n - E_{1s}) |\langle 0 | Q_l^0 | n \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m} l(2l+1) \langle r^{2l-2} \rangle_{1s} \quad (\text{I.2})$$

$|n\rangle$  représente un état excité et  $E_n$  son énergie. La somme porte sur tous les états excités.

En tenant compte de la relation de fermeture sur les états du système  $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$  et en remplaçant  $E_n$  par  $E_{1l}$  dans (I.2) nous sousestimons la somme et nous aboutissons à l'inégalité de Bertlmann et Martin généralisée (IBMG).

$$\langle r^{2l} \rangle_{1s} \leq \frac{\hbar^2}{2m(E_{1l} - E_{1s})} l(2l+1) \langle r^{2l-2} \rangle_{1s} \quad (\text{I.3})$$

Notons que :

- l'inégalité (I.3) est valable dans le cas de problèmes à symétrie sphérique.
- $E_{1l}$  est l'énergie du niveau le plus bas de moment angulaire  $l$  et  $\langle r^{2l} \rangle_{1s}$  est le moment d'ordre  $k$  ( $k = 2l$ ) de la densité du fondamental défini par :

$$\langle r^{2l} \rangle_{1s} = \frac{\int r^{2l} |\psi_{1s}(\vec{r})|^2 d^3r}{\int |\psi_{1s}(\vec{r})|^2 d^3r} \quad (\text{I.4})$$

$\psi_{1s}(\vec{r})$  étant la fonction d'onde du fondamental.

## I.2 Facteur correctif

A partir de (I.3), nous pouvons dire que cette inégalité généralisée ne donne qu'une limite supérieure aux moments d'ordre  $2l$  de la densité du fondamental ou aux énergies de la ligne yrast. Pour obtenir des égalités, un facteur correctif a été introduit. Il est difficile de déterminer une forme analytique générale pour ce facteur correctif, mais il est possible de trouver des approximations satisfaisantes. Bertlmann et Martin [1] ont proposé une première forme telle que la relation (I.3) devient :

$$\langle r^{2l} \rangle_{1s} \cong \frac{\hbar^2}{2m(E_{1l} - E_{1s})} l(2l+1) \langle r^{2l-2} \rangle_{1s} \left(1 - \frac{1}{4}c\right) \quad (\text{I.5})$$

$c$  vaut 0 dans le cas de l'oscillateur harmonique et 1 dans le cas du potentiel coulombien.

Un ajustement, à partir des caractéristiques de ces deux potentiels, a permis de proposer l'expression suivante :

$$c = \left[ \frac{E_{2s} + E_{1s} - 2E_{1p}}{E_{2s} - E_{1s}} \right]^2 \quad (\text{I.6})$$

De nouvelles applications basées sur les IBMG ont été étudiées par Ighezou et Lombard [4] pour obtenir des rapports approximatifs reliant les moments de la densité du fondamental aux

différences d'énergies entre les états  $1p$  et  $1s$ . Ainsi, ils ont proposé un facteur correctif, beaucoup plus général, qui permet de corriger toutes les énergies de la ligne yrast pour une large classe de potentiels ; il a pour expression :

$$1 - \frac{l}{2(l+1)} c(l) \quad (\text{I.7})$$

avec :

$$c(l) = \left[ \frac{E_{(l+1)s} + E_{1s} - 2E_{1l}}{E_{(l+1)s} - E_{1s}} \right]^2 \quad (\text{I.8})$$

Ce travail a porté sur l'étude des énergies de trois potentiels : celui de Hulthén, de Pöschl-Teller et le puits carré. Les résultats obtenus ont été comparés aux valeurs exactes (analytiques ou numériques) : les énergies des premiers états de la ligne yrast obtenues avec les IBMG corrigées sont en très bon accord (mieux que 1% pour certaines valeurs) avec les valeurs exactes ; le facteur correctif permet une bonne amélioration de l'accord.

Dans ce cas, la relation (I.3) devient alors :

$$\langle r^{2l} \rangle_{1s} \cong \frac{\hbar^2}{2m(E_{1l} - E_{1s})} l(2l+1) \langle r^{2l-2} \rangle_{1s} \left[ 1 - \frac{l}{2(l+1)} c(l) \right] \quad (\text{I.9})$$

## **II Quelques applications des IBMG dans le cas de problèmes à deux corps**

Dans cette partie, nous présentons brièvement quelques applications étudiées par notre groupe de recherche afin de mettre en évidence la validité des inégalités de Bertlmann et Martin.

Une des applications a porté sur le problème inverse correspondant à la détermination du potentiel dans lequel baigne le système à partir de la connaissance de ses énergies. La question du problème inverse en physique a été largement abordée pour des problèmes de diffusion élastique; cependant, les méthodes développées à cet effet présentent l'inconvénient de nécessiter des calculs compliqués. Très peu de travaux traitent du cas des états liés d'où l'intérêt de notre groupe dans l'utilisation des IBMG de façon inverse : à partir du spectre de niveaux, la densité du fondamental est déterminée en utilisant la transformée de Fourier du facteur de forme  $F(q)$ . Notons que  $F(q)$  a été développé en fonction des moments de la

densité du fondamental tirés des IBMG puis calculé à l'aide de la technique des approximants de Padé. L'inversion de l'équation de Schrödinger permet alors de calculer le potentiel, ce qui constitue un nouveau test de l'efficacité des IBMG.

## **II.1 Potentiels en loi de puissance**

Ce travail a été réalisé par Mezhoud dans le cadre de sa thèse de magister [5]: il a testé la fiabilité et l'applicabilité des IBMG par l'étude des potentiels en loi de puissance d'expression générale :

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

Les résultats obtenus pour les énergies sont comparés aux valeurs exactes ainsi qu'à celles données par deux autres méthodes d'approximation : les méthodes variationnelle et du minimum parabolique.

La méthode variationnelle permet d'avoir des valeurs de l'énergie remarquablement proches des valeurs exactes alors que les énergies données par la méthode du minimum parabolique sont moins satisfaisantes que les énergies variationnelles; les énergies données par les IBMG corrigées et non corrigées, sont, en assez bon accord avec les valeurs exactes (avec des écarts relatifs ne dépassant pas quelques pour cent sans correction et 1% avec correction).

Par la suite, les différents moments d'ordre  $k$  de la densité du fondamental ont été calculés par la méthode des IBMG et la méthode variationnelle puis, comparés aux moments exacts. Les moments calculés par les IBMG sont meilleurs que ceux donnés par la méthode variationnelle (moins de 1 % d'écart).

L'intérêt que ces moments de la densité du fondamental calculés par les IBMG soient très proches des valeurs exactes est grand. En effet, comme nous l'avons précisé précédemment, ces moments serviront au calcul du facteur de forme  $F(q)$ .

## **II.2 Systèmes liés avec un nombre infini d'états**

Cette étude entreprise par Yekken dans le cadre de sa thèse de doctorat [6] a été consacrée au problème inverse dans le cas des états discrets d'une particule soumise à un potentiel à symétrie sphérique. Dans la première partie de ce travail, la méthode du problème inverse a été utilisée afin de dériver le potentiel correspondant à un spectre bien déterminé. À travers cette étude, il a été montré que ce potentiel est déterminé de façon satisfaisante si et seulement si, le spectre est connu pour un grand nombre d'états; la solution est unique lorsque ce nombre tend vers l'infini. Dans la deuxième partie, l'étude de quelques potentiels dépendant de

l'énergie, (notés  $V(r, E)$ ) a permis de déterminer analytiquement leurs spectres pour  $(n, l) \rightarrow \infty$ . Cette situation représente une occasion pour tester l'existence du potentiel local équivalent  $V(r)$  par l'application de la méthode du problème inverse basée sur les IBMG. À titre d'exemple, le potentiel coulombien et celui de l'oscillateur harmonique ont été traités et il a été montré que l'existence d'un potentiel local équivalent est assurée dans le cas d'états discrets.

### **II.3 Potentiels complexes**

Après avoir testé la fiabilité et l'applicabilité des IBMG pour différents potentiels (réels), un nouveau travail a été réalisé par Mezhoud dans le cadre de la thèse de doctorat [7]; il concerne l'étude des potentiels complexes et de leurs propriétés. Dans le cas de potentiels admettant une résolution analytique en  $D = 1$  et  $3$ , certaines propriétés ont été établies ou illustrées: applicabilité des IBMG, comportement asymptotique du rayon carré moyen : les IBMG restent valables car la comparaison entre le calcul des moments de la densité du fondamental par l'application des IBMG, aux valeurs exactes, montre clairement que ces inégalités sont respectées.

### **II.4 Application à l'atome d'hélium**

Dans le cadre de sa thèse de magister [8], Gueribah a appliqué la méthode inverse au cas de l'atome d'hélium pour lequel le spectre expérimental est disponible. L'atome d'hélium a été considéré dans l'approche de Heisenberg (ion  $\text{He}^+$  plus un  $e^-$ ) et le potentiel équivalent dans lequel baigne le système a été reconstruit en utilisant, d'une part, la densité fournie par la transformée de Fourier du facteur de forme  $F(q)$  et, d'autre part, des densités d'essai  $\rho^{\text{ess}}(r)$ . De nouvelles énergies du spectre ont été évaluées à l'aide du potentiel reconstruit puis comparées aux valeurs expérimentales, l'accord obtenu est satisfaisant (moins de quelques pour cents d'erreur de façon générale).

### **II.5 Inégalités de Bertlmann et Martin dans un problème à trois corps**

L'étude des problèmes à trois corps dans la physique atomique et nucléaire n'est pas facile puisque la résolution de l'équation de Schrödinger qui permet de déterminer les énergies et les fonctions d'ondes n'est pas toujours possible de manière analytique. En général, on fait appel à des méthodes d'approximation. Dans cette optique, quelques travaux ont été effectués par

notre groupe; parmi ces travaux figure l'étude de l'applicabilité des IBMG aux problèmes à trois corps séparables et non séparables. Ce travail a été réalisé dans le cadre de la thèse de magister de Meftah [9]. Dans les cas séparables, on a calculé les moments d'ordre  $2l$  pour des systèmes à trois corps interagissant, dans un cas, par des potentiels d'oscillateurs harmoniques et dans l'autre par une force centrifuge en plus (potentiel de Calogero). On a trouvé que les IBMG sont fiables pour l'estimation des énergies de la ligne yrast et des moments de la densité du fondamental au même titre que dans le cas à deux corps. Pour les systèmes non séparables, on a calculé les énergies et les moments de la densité du fondamental dans le cas de l'atome d'hélium ; les valeurs obtenues ont été comparées à celles données par trois méthodes d'approximation : les méthodes des perturbations et variationnelle ainsi que l'approximation d'Hartree. Les résultats obtenus permettent de dire que l'utilisation de l'inégalité de Bertlmann et Martin permet d'avoir des moments relativement proches de ceux calculés par les méthodes d'approximation : le facteur correctif permet d'avoir une valeur du moment en bon accord avec la valeur variationnelle (moins de 5 % d'écart).

Le travail de Kerris [10] a consisté en l'étude des propriétés générales des inégalités de Bertlmann et Martin dans les problèmes à trois corps interagissant par des potentiels scalaires comme, par exemple, trois oscillateurs harmoniques à une dimension interagissant par un potentiel gaussien. Deux méthodes ont été appliquées : l'approximation d'Hartree et la méthode des hypersphériques. Les résultats obtenus ont été comparés aux résultats exacts et sont satisfaisants (moins de quelques pour cents d'erreur).

### **III Rappel sur l'inégalité de Bertlmann et Martin à une dimension sans tenir compte du spin**

Le but de notre travail consiste en l'étude de l'applicabilité de la méthode des IBM dans le cas où le spin est pris en compte. Nous commencerons par des problèmes à une dimension. Aussi, nous rappellerons plus explicitement les résultats obtenus dans les cas sans spin afin de pouvoir les comparer avec ceux que l'on obtiendrait en tenant compte du spin.

#### **III.1 L'inégalité de Bertlmann et Martin pour un oscillateur harmonique à une dimension**

Considérons un système à une dimension sans spin, d'hamiltonien  $H_0$

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (\text{I.10})$$

Afin de rester dans le même cadre d'application que tous les travaux entreprises par notre groupe, nous avons posé  $\hbar = 1 = 2m$ .

En calculant le commutateur et le double commutateur entre  $H_0$  et l'opérateur de transition dipolaire  $\hat{x}$ ,  $[[H_0, \hat{x}], \hat{x}]$ , nous obtenons [11] :

$$\begin{aligned} [H_0, \hat{x}] &= [\hat{P}_x^2, \hat{x}] = -2i\hat{p}_x \\ [[H_0, \hat{x}], \hat{x}] &= -2i[\hat{P}_x, \hat{x}] = -2 \end{aligned} \quad \text{(I.11)}$$

D'autre part, le double commutateur  $[[H_0, \hat{x}], \hat{x}]$  s'écrit aussi :

$$[[H_0, \hat{x}], \hat{x}] = -2\hat{x}H_0\hat{x} + \hat{x}^2H_0 + H_0\hat{x}^2 \quad \text{(I.12)}$$

Après introduction de la relation de fermeture sur les états propres  $|\psi_n\rangle$  de  $H_0$ , le calcul de la valeur moyenne, dans  $|\psi_0\rangle$ , du double commutateur précédent donne la règle de somme de Thomas-Reiche-Kuhn :

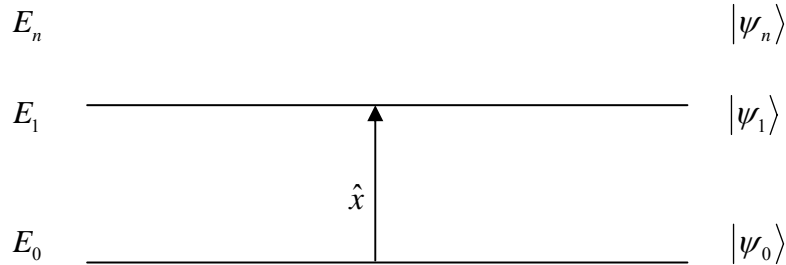
$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | [[H_0, \hat{x}], \hat{x}] | \psi_0 \rangle &= -2 \sum_n (E_n - E_0) |\langle \psi_0 | \hat{x} | \psi_n \rangle|^2 \\ \sum_n (E_n - E_0) |\langle \psi_n | \hat{x} | \psi_0 \rangle|^2 &= 1 \end{aligned} \quad \text{(I.13)}$$

En remplaçant  $(E_n - E_0)$  par la plus basse valeur  $(E_1 - E_0)$  et en utilisant, de nouveau, la relation de fermeture, nous déduisons une limite supérieure pour le rayon carré moyen de la densité du fondamental [12-15] :

$$\langle \psi_0 | \hat{x}^2 | \psi_0 \rangle \leq \frac{1}{(E_1 - E_0)} \quad \text{(I.14)}$$

$E_1$  est l'énergie du 1<sup>er</sup> état excité atteint par l'opérateur de transition dipolaire et  $E_0$ , celle du fondamental.

La figure (I.1) montre le schéma des deux premiers niveaux d'énergie du système d'hamiltonien  $H_0$  et la transition dipolaire possible. Nous indiquons l'opérateur  $\hat{x}$  qui permet la transition entre le fondamental  $|\psi_0\rangle$  et le 1<sup>er</sup> état excité  $|\psi_1\rangle$



**Figure (I.1)** : Spectre des 1<sup>ères</sup> énergies de  $H_0$

Nous nous plaçons dans le cas où  $V(x) = \omega_0^2 x^2$ , ce qui nous donne pour la fonction d'onde du fondamental [16]:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\omega_0}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{\omega_0}{2}x^2} \quad (\text{I.15})$$

et pour le 1<sup>er</sup> état excité :

$$\psi_1(x) = \left(\frac{4\omega_0^3}{\pi}\right)^{1/4} x e^{-\frac{\omega_0}{2}x^2} \quad (\text{I.16})$$

Les énergies sont données par [16]:  $E_n = 2\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right)$  (I.17)

Calculons la valeur moyenne de  $x^2$  dans l'état fondamental :

$$\langle x^2 \rangle_{|0\rangle} = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi_0(x)|^2 dx \quad (\text{I.18})$$

Soit [17]:  $\langle x^2 \rangle_{|0\rangle} = \frac{1}{2\omega_0}$  (I.19)

Sachant que, dans ce cas,  $E_1 - E_0 = 2\omega_0$ , alors, la relation (I.14) nous donne :

$$\frac{1}{2\omega_0} = \frac{1}{2\omega_0} \quad (\text{I.20})$$

Nous remarquons que nous aboutissons à une égalité (il n'y a donc pas de facteur correctif car l'inégalité (I.14) est saturée).

### **III.2 L'inégalité de Bertlmann et Martin pour deux oscillateurs harmoniques sans interaction**

Dans ce cas, l'hamiltonien s'écrit comme suit:

$$H_0 = p_{x_1}^2 + p_{x_2}^2 + \omega_0^2 x_1^2 + \omega_0^2 x_2^2 \quad (\text{I.21})$$

Les états propres sont notés  $|n_1 n_2\rangle$  et les fonctions d'onde correspondantes  $\psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2)$  [16].

Les énergies sont données par  $E_{N=n_1+n_2} = 2\omega_0(n_1 + n_2 + 1)$ .

De la même façon, en calculant la valeur moyenne du double commutateur entre  $H_0$  et l'opérateur de transition dipolaire  $\hat{o}_1 = \hat{x}_1$  (ou  $\hat{o}_2 = \hat{x}_2$ ) dans l'état fondamental du système  $|\psi_0\rangle \equiv |00\rangle$ , puis en minorant la relation obtenue comme dans le cas précédent, nous aboutissons à une inégalité équivalente à (I.14):

$$\langle \psi_0 | \hat{x}_1^2 | \psi_0 \rangle \leq 1 / (E_1 - E_0) \quad (\text{I.22})$$

$$\langle x_1^2 \rangle_{|00\rangle} = \langle x_2^2 \rangle_{|00\rangle} = \frac{1}{2\omega_0} \quad (\text{I.23})$$

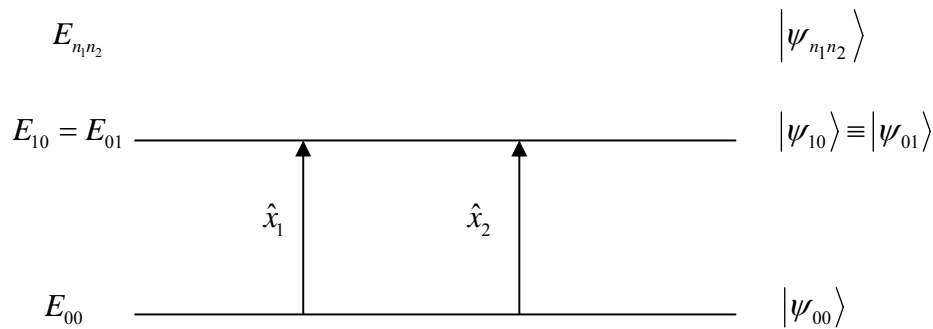
Signalons que nous ne considérons que la transition d'une particule à la fois.

Sachant que, dans ce cas,  $E_1 - E_0 = 2\omega_0$ , la relation (I.22) donne :

$$\frac{1}{2\omega_0} = \frac{1}{2\omega_0} \quad (\text{I.24})$$

Nous aboutissons là aussi à une égalité (l'inégalité est donc saturée).

La figure (I.2) montre un schéma des deux premiers niveaux d'énergie du système d'hamiltonien  $H_0$  et quelques transitions dipolaires possibles. Nous indiquons les opérateurs  $\hat{x}_1$  et  $\hat{x}_2$  ;  $\hat{x}_1$  permet la transition entre le fondamental et le 1<sup>er</sup> état excité  $|\psi_{10}\rangle$  et  $\hat{x}_2$  permet la transition entre le fondamental et le 1<sup>er</sup> état excité  $|\psi_{01}\rangle$ .



**Figure (I.2) :** Spectre des 1<sup>ères</sup> énergies de  $H_0$  - Cas de 2 oscillateurs indépendants

# CHAPITRE II

## **INEGALITE DE BERGLMANN ET MARTIN POUR DES SYSTEMES INDEPENDANTS AVEC SPIN**

Nous avons vu que, lors de l'application des inégalités de Bertlmann et Martin à des systèmes physiques à deux et à trois corps considérés sans spin, les résultats obtenus pour le calcul des moments étaient satisfaisants [4, 5,8-10,13-15].

Pour l'oscillateur harmonique, l'inégalité de Bertlmann et Martin reliant le rayon carré moyen de la densité du fondamental à la différence d'énergie ( $E_1 - E_0$ ) est, en réalité, exacte c.à.d. que l'on obtient une égalité (rappelons que  $E_1$  est l'énergie de l'état le plus bas atteint par l'opérateur de transition dipolaire alors que  $E_0$  est celle de l'état fondamental).

Aussi, nous nous proposons, dans ce qui suit, de vérifier si cette propriété reste vraie dans le cas où les degrés de liberté de spin ne sont pas négligés.

Nous considérerons tout d'abord le cas d'une particule avec spin puis celui de deux fermions indépendants de spin  $\frac{1}{2}$  dans un champ harmonique.

Nous étudierons l'effet du renversement de spin c.à.d. du changement d'orientation du spin sur la saturation de l'inégalité recherchée ainsi que l'influence de l'antisymétrie de la fonction d'onde totale dans l'échange des fermions.

## I Cas d'une particule

Examinons tout d'abord le cas d'une particule de spin  $\frac{1}{2}$  dans un potentiel d'oscillateur harmonique et vérifions ce que devient la relation (I.14)

$$\text{Soit :} \quad H_0 = p_x^2 + \omega_0^2 x^2 \quad (\text{II.1})$$

Rappelons que nous posons :  $\hbar = 1 = 2m$ .

Les états propres du fondamental de ce système sont donnés par [18] :

$$|\psi_{0+}\rangle = |\psi_0\rangle_{esp} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = |\psi_0\rangle_{esp} |+\rangle_{sp} \quad (\text{II.2})$$

ou

$$|\psi_{0-}\rangle = |\psi_0\rangle_{esp} \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle = |\psi_0\rangle_{esp} |-\rangle_{sp}$$

«  $sp$  » désigne la partie spinorielle de la fonction d'onde  $\psi_{0\pm}(x)$  et «  $esp$  », sa partie spatiale.

Les énergies sont données par [16]  $E_n = 2\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right)$  et les états propres associés par

$$|\psi_{n m_s}\rangle = |\psi_{n+}\rangle \text{ ou } |\psi_{n-}\rangle.$$

Remarquons que tous les états sont dégénérés deux fois ; nous choisissons, par exemple, l'état  $|\psi_{0+}\rangle$  comme fondamental. Il est possible de refaire les mêmes calculs avec  $|\psi_{0-}\rangle$ .

### I.1 Sans renversement de spin

Nous reprenons les différentes étapes du calcul du paragraphe III.1 du chapitre I afin de dériver la règle de somme équivalente à (I.13). La valeur moyenne du double commutateur de l'hamiltonien avec l'opérateur de transition dipolaire  $\hat{x}$ , dans l'état fondamental,  $|\psi_{0+}\rangle$ , est donnée par :

$$\langle \psi_{0+} | [[H_0, \hat{x}], \hat{x}] | \psi_{0+} \rangle = -2 \quad (\text{II.3})$$

Rappelons que le double commutateur est donné par l'expression (I.12) et calculons sa valeur moyenne dans  $|\psi_{0+}\rangle$ ; après introduction de la relation de fermeture suivante :

$$\sum_{n m_s} |\psi_{n m_s}\rangle \langle \psi_{n m_s} | = 1 \quad (\text{II.4})$$

Nous trouvons :

$$\langle \psi_{0+} | [[H_0, \hat{x}], \hat{x}] | \psi_{0+} \rangle = -2 \sum_{n m_s} (E_n - E_0) |\langle \psi_{0+} | \hat{x} | \psi_{n m_s} \rangle|^2 \quad (\text{II.5})$$

Compte tenu de (II.3), il s'ensuit la règle de somme suivante:

$$\sum_{n m_s} (E_n - E_0) |\langle \psi_{0+} | \hat{x} | \psi_{n m_s} \rangle|^2 = 1 \quad (\text{II.6})$$

En remplaçant  $(E_n - E_0)$  par  $(E_1 - E_0)$ , nous obtenons :

$$(E_1 - E_0) \sum_{n m_s} |\langle \psi_{0+} | \hat{x} | \psi_{n m_s} \rangle|^2 \leq 1 \quad (\text{II.7})$$

Compte tenu de (II.4), nous avons :

$$\sum_{n m_s} |\langle \psi_{0+} | \hat{x} | \psi_{n m_s} \rangle|^2 = \langle \psi_{0+} | \hat{x}^2 | \psi_{0+} \rangle \quad (\text{II.8})$$

La relation (II.7) devient :

$$(E_1 - E_0) \langle \psi_{0+} | \hat{x}^2 | \psi_{0+} \rangle \leq 1 \quad (\text{II.9})$$

L'état propre  $|\psi_{0+}\rangle$  étant défini par (II.2), le calcul de  $\langle \psi_{0+} | \hat{x}^2 | \psi_{0+} \rangle$  [17] nous donne :

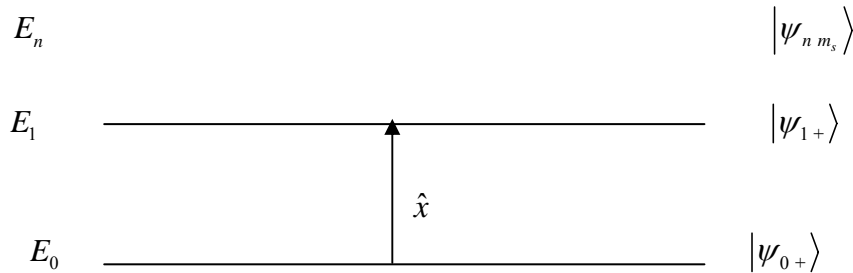
$$\langle \psi_{0+} | \hat{x}^2 | \psi_{0+} \rangle = {}_{esp} \langle \psi_0 | \hat{x}^2 | \psi_0 \rangle_{esp} = \frac{1}{2\omega_0} \quad (\text{II.10})$$

En utilisant  $E_1 - E_0 = 2\omega_0$  et en portant (II.10) dans (II.9), nous aboutissons à :

$$2\omega_0 \frac{1}{2\omega_0} = 1 \quad (\text{II.11})$$

L'inégalité recherchée est donc saturée dans ce cas.

La figure (II.1) montre le schéma des deux premiers niveaux d'énergie du système d'hamiltonien  $H_0$  et la transition dipolaire possible effectuée par l'opérateur de transition  $\hat{x}$ .



**Figure (II.1)** : Spectre des 1<sup>ères</sup> énergies de  $H_0$  (cas d'une transition dipolaire sans renversement de spin).

## I.2 Avec renversement de spin

L'opérateur  $\hat{o}$  susceptible de décrire une transition dipolaire de l'état fondamental vers le 1<sup>er</sup> état excité (ou l'inverse) accompagnée d'un changement (renversement) d'orientation du spin est donné par :

$$\hat{o} = \hat{\sigma}_x \hat{x} \quad (\text{II.12})$$

$\hat{\sigma}_x$  étant l'opérateur de Pauli où [19]:  $\hat{\sigma}_x |\pm\rangle_{sp} = |C\rangle_{sp}$

Calculons le commutateur et le double commutateur entre  $H_0$  et l'opérateur  $\hat{o}$  afin de retrouver la règle de somme équivalente à (II.6).

$$[H_0, \hat{o}] = -2i\hat{\sigma}_x \hat{p}_x \quad (\text{II.13})$$

$$\text{et :} \quad [[H_0, \hat{o}], \hat{o}] = -2\hat{\sigma}_x^2 = -2 \quad \text{car} \quad \hat{\sigma}_x^2 = 1 \quad (\text{II.14})$$

La valeur moyenne de (II.14) dans l'état fondamental  $|\psi_{0+}\rangle$  est donnée par :

$$\langle \psi_{0+} | [[H_0, \hat{o}], \hat{o}] | \psi_{0+} \rangle = -2 \quad (\text{II.15})$$

D'autre part, le double commutateur  $[[H_0, \hat{o}], \hat{o}]$  s'écrit aussi :

$$[[H_0, \hat{o}], \hat{o}] = -2\hat{o}H_0\hat{o} + \hat{o}^2H_0 + H_0\hat{o}^2 \quad (\text{II.16})$$

Le calcul de la valeur moyenne de (II.16) dans  $|\psi_{0+}\rangle$ , après introduction de la relation de fermeture (II.4), est donné par :

$$\langle \psi_{0+} | [[H_0, \hat{o}], \hat{o}] | \psi_{0+} \rangle = -2 \sum_{n m_s} (E_n - E_0) \left| \langle \psi_{0+} | \hat{o} | \psi_{n m_s} \rangle \right|^2 \quad (\text{II.17})$$

En comparant (II.15) avec (II.17), il s'ensuit :

$$\sum_{n m_s} (E_n - E_0) \left| \langle \psi_{0+} | \hat{o} | \psi_{n m_s} \rangle \right|^2 = 1 \quad (\text{II.18})$$

En remplaçant  $(E_n - E_0)$  par  $(E_1 - E_0)$ , nous aboutissons à :

$$(E_1 - E_0) \sum_{n m_s} \left| \langle \psi_{0+} | \hat{o} | \psi_{n m_s} \rangle \right|^2 \leq 1 \quad (\text{II.19})$$

Compte tenu de (II.4), la relation (II.19) peut être écrite sous la forme :

$$(E_1 - E_0) \langle \psi_{0+} | \hat{\sigma}^2 | \psi_{0+} \rangle \leq 1 \tag{II.20}$$

Nous avons :

$$\langle \psi_{0+} | \hat{\sigma}^2 | \psi_{0+} \rangle = \langle \psi_{0+} | \sigma_x^2 \hat{x}^2 | \psi_{0+} \rangle =_{esp} \langle \psi_0 | \hat{x}^2 | \psi_0 \rangle_{esp} \tag{II.21}$$

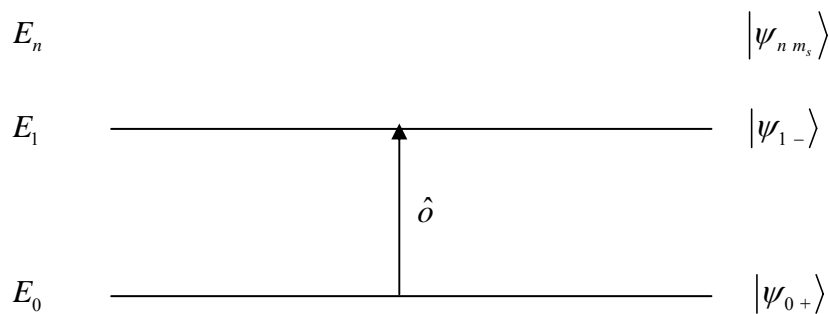
En utilisant le même calcul que (II.10), nous aboutissons à :

$$2\omega_0 \frac{1}{2\omega_0} = 1$$

Ce qui montre que l'inégalité recherchée pour une particule de spin 1/2 dans un champ harmonique est saturée dans le cas où l'on effectue un changement d'orientation du spin. Là encore, le premier niveau excité contribue totalement à la règle de somme.

Si l'on refait les calculs précédents avec, comme état fondamental  $|\psi_{0-}\rangle$ , on retrouve les mêmes résultats.

La figure (II.2) montre le schéma des deux premiers niveaux d'énergie du système d'hamiltonien  $H_0$  et la transition dipolaire possible effectuée par l'opérateur de transition  $\hat{\sigma}$ .



**Figure (II.2) :** Spectre des 1<sup>ères</sup> énergies de  $H_0$  (cas d'une transition dipolaire avec renversement de spin).

## II Rappels sur les problèmes à deux corps

Compte tenu du fait que nous considérons des systèmes de deux fermions et que nous tenons compte de leur spin, nous rappellerons, tout d'abord, très brièvement l'expression des fonctions de spin, d'espace et totales du système considéré avant d'étudier l'applicabilité des IBM à ces systèmes.

## II.1 Fonction de spin totale

Rappelons que, pour deux particules de spin  $\frac{1}{2}$ , nous avons 4 états possibles de spin total  $|s M_s\rangle : |00\rangle, |11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle$ , s'écrivant comme suit [19] :

- Etat singulet :  $|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_2 - \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_2 \right)$  **(II.22)**

La fonction d'onde de spin dans cet état sera notée :  $\chi_0^0$

- Etat triplet :  $|11\rangle = \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_2$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_2 + \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_2 \right)$$
 **(II.23)**

$$|1-1\rangle = \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_2$$

Les fonctions d'onde de spin dans ces états seront notées :  $\chi_1^{M_s}$

Nous avons indicé les états par (1) et (2) pour indiquer qu'il s'agit des particules (1) ou (2). Remarquons que  $\chi_0^0$  est antisymétrique dans l'échange des spins des deux particules, alors que  $\chi_1^{M_s}$  est symétrique.

## II.2 Fonction d'onde spatiale

Considérons un système de deux particules avec spin dans des potentiels d'oscillateur harmonique et n'interagissant pas entre elles ; l'hamiltonien de ce système s'écrit comme (I.21) :

$$H_0 = p_{x_1}^2 + p_{x_2}^2 + \omega_0^2 x_1^2 + \omega_0^2 x_2^2$$

Les états propres sont notés  $|n_1 n_2\rangle$ . La fonction d'onde spatiale  $\psi_{n_1 n_2}^{esp}(x_1, x_2)$  est donnée par [16] :

- pour le fondamental :  $\psi_{00}^{esp}(x_1, x_2) = \left( \frac{\omega_0}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\frac{\omega_0}{2}(x_1^2 + x_2^2)}$  **(II.24a)**

Remarquons que  $\psi_{00}^{esp}(x_1, x_2) \equiv \psi_0(x_1, x_2)$  est symétrique dans l'échange des deux particules.

- pour le 1<sup>er</sup> état excité :  $\psi_{10}^{esp}(x_1, x_2) = \left( \frac{2\omega_0^2}{\pi} \right)^{1/2} x_1 e^{-\frac{\omega_0}{2}(x_1^2 + x_2^2)}$

$$\psi_{01}^{esp}(x_1, x_2) = \left( \frac{2\omega_0^2}{\pi} \right)^{1/2} x_2 e^{-\frac{\omega_0}{2}(x_1^2 + x_2^2)}$$
 **(II.24b)**

$\psi_{10}^{esp}(x_1, x_2)$  et  $\psi_{01}^{esp}(x_1, x_2)$  n'ont pas de parité bien définie dans l'échange des deux particules.

Il existe deux combinaisons possibles de ces deux fonctions dont l'une est symétrique et l'autre antisymétrique dans l'échange des deux particules :

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{10}^{esp} + \psi_{01}^{esp}) = \left(\frac{2\omega_0^2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}} e^{-\frac{\omega_0}{2}(x_1^2 + x_2^2)} \equiv \psi_1(x_1, x_2) = \psi_{sym}(x_1, x_2) \quad (\text{II.25})$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{10}^{esp} - \psi_{01}^{esp}) = \left(\frac{2\omega_0^2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{x_1 - x_2}{\sqrt{2}} e^{-\frac{\omega_0}{2}(x_1^2 + x_2^2)} = \psi_1'(x_1, x_2) = \psi_{antisym}(x_1, x_2)$$

### II.3 Fonction d'onde totale

La fonction d'onde totale s'écrit :

$$\psi_{N SM_s}(x_1, x_2) = \chi_S^{M_s} \psi_{n_1 n_2}^{esp}(x_1, x_2) \quad \text{avec } N = n_1 + n_2 \quad (\text{II.26})$$

Si nous devons tenir compte de l'antisymétrie de la fonction d'onde totale [20], alors nous l'écrivons de la façon suivante :

$$\text{Pour le fondamental : } \psi_{0 00}(x_1, x_2) = \chi_0^0 \psi_0(x_1, x_2)$$

$$\text{Pour le 1<sup>er</sup> état excité : } \psi_{1 00}(x_1, x_2) = \chi_0^0 \psi_1(x_1, x_2) \quad (\text{II.27})$$

$$\psi_{1 1M_s}(x_1, x_2) = \chi_1^{M_s} \psi_1'(x_1, x_2)$$

où  $\psi_0(x_1, x_2)$  est définie par (II.24a), alors que  $\psi_1(x_1, x_2)$  et  $\psi_1'(x_1, x_2)$  sont définies par (II.25)

## III Inégalité de Bertlmann et Martin dans le cas de deux oscillateurs harmoniques avec spin

Considérons un système de deux particules de spin  $\frac{1}{2}$  dont l'hamiltonien s'écrit comme (I.21):

$$H_0 = p_{x_1}^2 + p_{x_2}^2 + \omega_0^2 x_1^2 + \omega_0^2 x_2^2$$

Comme les énergies ne dépendent pas du spin des deux particules, il existe une dégénérescence (d'ordre 4) due au spin.

Rappelons que les énergies sont données par [16] :

$$E_N = 2\omega_0(N+1) \quad \text{avec } N = n_1 + n_2$$

Pour le fondamental et le 1<sup>er</sup> état excité, les énergies s'écrivent comme suit :

$$E_{fond} = 2\omega_0, \quad \text{notée } E_0 \equiv E_{00}$$

$$E_{1exc} = 4\omega_0, \quad \text{notée } E_1 \equiv E_{10} = E_{01}$$

### **III.1 Sans renversement de spin**

#### **III.1.1 Avec échange des particules**

Comme on tient compte des propriétés d'antisymétrie de la fonction d'onde et en utilisant (II.24), (II.25) et (II.26), les états propres seront notés comme suit :

$$\text{Pour le fondamental: } |\psi_{0\ 00}\rangle = |00\rangle_{esp} |00\rangle_{sp}$$

$$\text{Pour le 1}^{\text{er}} \text{ état excité : } |\psi_{1\ S=0, M_S=0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|10\rangle + |01\rangle]_{esp} |00\rangle_{sp} \quad \text{(II.28)}$$

$$\text{ou : } |\psi'_{1\ S=1, M_S}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|10\rangle - |01\rangle]_{esp} |1M_S\rangle_{sp}$$

Rappelons que nous nous intéressons à la transition d'une particule à la fois, ce qui nous permet d'écrire pour l'opérateur de transition dipolaire  $\hat{o} = \hat{x}_1$  ou  $\hat{x}_2$ .

La relation recherchée dans ce cas est établie en calculant la valeur moyenne du double commutateur entre l'hamiltonien du système et l'opérateur  $\hat{o}$  dans l'état fondamental puis en introduisant la relation de fermeture, nous aboutissons alors à la règle de somme suivante:

$$\sum_{N\ SM_S} (E_N - E_0) \left| \langle \psi_{0\ 00} | \hat{x}_1 | \psi_{N\ SM_S} \rangle \right|^2 = 1 \quad \text{(II.29)}$$

La sommation précédente porte aussi bien sur les états symétriques qu'antisymétriques. Nous nous proposons de vérifier ce que vaut la règle de somme (II.29) dans le cas où l'on ne considère que les états antisymétriques, soit donc à calculer :

$$\sum_{N\ SM_S, antisym} (E_N - E_0) \left| \langle \psi_{0\ 00} | \hat{x}_1 | \psi_{N\ SM_S} \rangle \right|^2 \quad \text{(II.30)}$$

Tous les éléments de matrice de la relation (II.30) s'annulent sauf celui correspondant à  $(N, SM_S) \equiv (1, 00)$  c.à.d.  $(E_1 - E_0) \left| \langle \psi_{0\ 00} | \hat{x}_1 | \psi_{1\ 00} \rangle \right|^2$ .

En effet :

- le calcul de  $\left| \langle \psi_{000} | \hat{x}_1 | \psi_{100} \rangle \right|^2$  [17] nous donne :

$$\left| \langle \psi_{000} | \hat{x}_1 | \psi_{100} \rangle \right|^2 = \frac{1}{4\omega_0} \quad (\text{II.31})$$

et en utilisant  $(E_1 - E_0) = 2\omega_0$ , nous obtenons alors :

$$2\omega_0 \frac{1}{4\omega_0} = \frac{1}{2}$$

Nous en déduisons donc que :

$$\sum_{N \text{ SM}_s, \text{antisym}} (E_N - E_0) \left| \langle \psi_{000} | \hat{x}_1 | \psi_{N \text{ SM}_s} \rangle \right|^2 = \frac{1}{2} \quad (\text{II.32})$$

De la même façon que précédemment, la relation (II.32) devient en remplaçant  $(E_N - E_0)$  par  $(E_1 - E_0)$  :

$$(E_1 - E_0) \sum_{N \text{ SM}_s, \text{antisym}} \left| \langle \psi_{000} | \hat{x}_1 | \psi_{N \text{ SM}_s} \rangle \right|^2 \leq \frac{1}{2} \quad (\text{II.33})$$

où  $E_1$  est l'énergie de l'état excité le plus bas atteint par l'opérateur de transition  $\hat{x}_1$ .

Puisque nous ne savons pas ce que vaut la relation de fermeture portant uniquement sur les états antisymétriques, nous ne pouvons pas tirer directement l'inégalité recherchée.

Notons, toutefois, que le calcul de la valeur moyenne de  $\hat{x}_1^2$  dans l'état fondamental antisymétrique donne cette valeur :

$$\langle \psi_{000} | \hat{x}_1^2 | \psi_{000} \rangle = \frac{1}{2\omega_0} \quad (\text{II.34})$$

et comme  $E_1 - E_0 = 2\omega_0$ , nous pouvons alors écrire ceci :

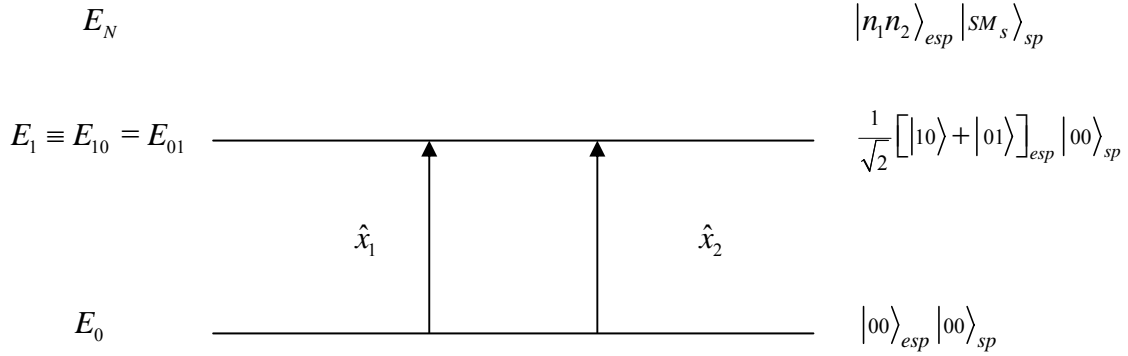
$$2\omega_0 \frac{1}{2\omega_0} = 1$$

Soit :

$$(E_1 - E_0) \langle \psi_{000} | \hat{x}_1^2 | \psi_{000} \rangle = 1 \quad (\text{II.35})$$

Nous aboutissons à une égalité qui ressemble à celle que nous voulions trouver à partir de la règle de somme portant sur les états antisymétriques.

La figure (II.3) montre le schéma des deux premiers niveaux d'énergie du système d'hamiltonien  $H_0$  et les transitions dipolaires possibles. Nous indiquons les opérateurs  $\hat{x}_1$  et  $\hat{x}_2$  ;  $\hat{x}_1$ , par exemple, permet la transition entre le fondamental et le 1<sup>er</sup> état excité  $|\psi_{100}\rangle$ .



**Figure (II.3)** : Spectre des 1<sup>ères</sup> énergies de  $H_0$  - Cas de 2 oscillateurs indépendants.

(Transition dipolaire avec échange des deux particules et sans changement d'orientation du spin).

### III.1.2 Sans échange des particules

Si l'on ne tient pas compte des propriétés d'antisymétrie de la fonction d'onde, les états correspondants sont quelconques et seront notés comme suit :

- pour le fondamental :  $|\psi_{0 SM_S}\rangle = |00\rangle_{esp} |SM_S\rangle_{sp}$
  - pour le 1<sup>er</sup> état excité :  $|\psi_{1 SM_S}\rangle = |10\rangle_{esp} |SM_S\rangle_{sp}$  (II.36)
- et :  $|\psi'_{1 SM_S}\rangle = |01\rangle_{esp} |SM_S\rangle_{sp}$

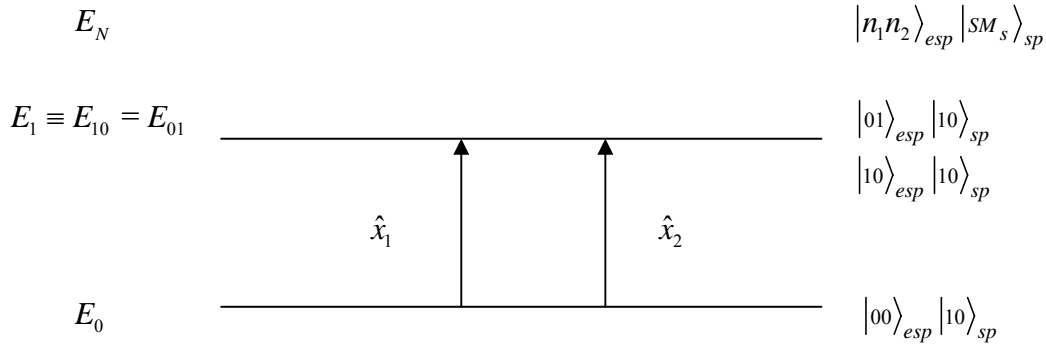
Puisqu'il y a une dégénérescence due au spin choisissons de façon arbitraire l'état de spin  $|SM_S\rangle_{sp} = |10\rangle_{sp}$

Nous reprenons les mêmes étapes de calcul que dans la partie (III.1.1). La règle de somme recherchée s'écrit comme :

$$\sum_{N SM_S} (E_N - E_0) \left| \langle \psi_{010} | \hat{x}_1 | \psi_{N SM_S} \rangle \right|^2 = 1 \quad \text{(II.37)}$$

Notons que dans ce cas, on retrouve le même calcul que pour, une particule avec spin, sans changement d'orientation de spin (la 2<sup>ème</sup> particule n'étant pas "concernée" par la transition).

La figure (II.4) montre un schéma des deux premiers niveaux d'énergie du système d'hamiltonien  $H_0$  et quelques transitions dipolaires possibles. Nous indiquons les opérateurs  $\hat{x}_1$  et  $\hat{x}_2$  ;  $\hat{x}_1$  permet la transition entre le fondamental et le 1<sup>er</sup> état excité  $|\psi_{110}\rangle$  et  $\hat{x}_2$  permet la transition entre le fondamental et le 1<sup>er</sup> état excité  $|\psi'_{110}\rangle$ .



**Figure (II.4) :** Spectre des 1<sup>ères</sup> énergies de  $H_0$  - Cas de 2 oscillateurs indépendants.

(Transition dipolaire sans échange des deux particules et sans changement d'orientation du spin).

Nous avons considéré précédemment des transitions dipolaires de particule entre le fondamental et le 1<sup>er</sup> état excité sans renversement de spin, nous nous proposons maintenant d'en tenir compte.

### III.2 Avec renversement de spin

Nous effectuons les mêmes calculs que précédemment en prenant comme opérateur de transition:  $\hat{o} = \hat{o}_1$  ou  $\hat{o}_2$  avec  $\hat{o}_1 = \sigma_{1x} \hat{x}_1$  et  $\hat{o}_2 = \sigma_{2x} \hat{x}_2$

#### III.2.1 Avec échange des particules

Les états propres pour le fondamental et le 1<sup>er</sup> excité sont donnés déjà par (II.28).

Examinons ce que devient la règle de somme dans ce cas ; nous résumons brièvement les calculs intermédiaires permettant de déterminer  $[[H_0, \hat{o}_1], \hat{o}_1]$  et  $[[H_0, \hat{o}_2], \hat{o}_2]$ .

$$\begin{aligned}
 [H_0, \hat{o}_1] &= -2i\hat{\sigma}_{1x}\hat{p}_{x_1} & [H_0, \hat{o}_2] &= -2i\hat{\sigma}_{2x}\hat{p}_{x_2} & \text{(II.38)} \\
 [[H_0, \hat{o}_1], \hat{o}_1] &= -2\hat{\sigma}_{1x}^2 = -2 & [[H_0, \hat{o}_2], \hat{o}_2] &= -2\hat{\sigma}_{2x}^2 = -2
 \end{aligned}$$

Dans ce cas, la relation cherchée s'écrit, en ne tenant compte que des états antisymétriques :

$$\sum_{N \text{ } SM_S, \text{antisym}} (E_N - E_0) \left| \langle \psi_{0 \ 00} | \hat{o}_1 | \psi_{N \ SM_S} \rangle \right|^2 \quad (\text{II.39})$$

Vérifions là aussi ce que vaut la règle de somme (II.39). Signalons que tous les termes de  $\langle \psi_{0 \ 00} | \hat{o}_1 | \psi_{N \ SM_S} \rangle$  s'annulent sauf ceux qui correspondent à  $|\psi_{N \ M_S}\rangle \equiv |\psi'_{1 \ 11}\rangle$  ou  $|\psi'_{1 \ 1-1}\rangle$  c.à.d :

$$(E_1 - E_0) \left( \left| \langle \psi_{0 \ 00} | \hat{o}_1 | \psi'_{1 \ 11} \rangle \right|^2 + \left| \langle \psi_{0 \ 00} | \hat{o}_1 | \psi'_{1 \ 1-1} \rangle \right|^2 \right) \quad (\text{II.40})$$

Calculons le facteur de  $(E_1 - E_0)$  dans (II.40) [17] :

$$\begin{aligned} & \left| \langle \psi_{0 \ 00} | \hat{o}_1 | \psi'_{1 \ 11} \rangle \right|^2 + \left| \langle \psi_{0 \ 00} | \hat{o}_1 | \psi'_{1 \ 1-1} \rangle \right|^2 = \\ & \left( \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \langle 00 | \hat{x}_1 | 10 \rangle - \langle 01 | \rangle \right]_{\text{esp}} \right|^2 \right) \left( \left| \langle 00 | \hat{\sigma}_{1x} | 1+1 \rangle_{\text{sp}} \right|^2 + \left| \langle 00 | \hat{\sigma}_{1x} | 1-1 \rangle_{\text{sp}} \right|^2 \right) \\ & \left| \langle 00 | \hat{\sigma}_{1x} | 1+1 \rangle_{\text{sp}} \right|^2 = \left| \langle 00 | \hat{\sigma}_{1x} | 1-1 \rangle_{\text{sp}} \right|^2 = \frac{1}{2} \quad \text{et} \quad \left| \langle 00 | \hat{x}_1 | 10 \rangle_{\text{esp}} \right|^2 = \frac{1}{2\omega_0} \\ & \left| \langle \psi_{0 \ 00} | \hat{o}_1 | \psi'_{1 \ 11} \rangle \right|^2 + \left| \langle \psi_{0 \ 00} | \hat{o}_1 | \psi'_{1 \ 1-1} \rangle \right|^2 = \frac{1}{4\omega_0} \end{aligned} \quad (\text{II.41})$$

Comme  $E_1 - E_0 = 2\omega_0$ , en portant (II.41) dans (II.40), nous obtenons :

$$2\omega_0 \frac{1}{4\omega_0} = \frac{1}{2}$$

Nous en déduisons donc que :

$$\sum_{N \text{ } SM_S, \text{antisym}} (E_N - E_0) \left| \langle \psi_{0 \ 00} | \hat{o}_1 | \psi_{N \ SM_S} \rangle \right|^2 = \frac{1}{2} \quad (\text{II.42})$$

Nous minorons la règle de somme précédente, en remplaçant  $(E_N - E_0)$  par  $(E_1 - E_0)$ , nous obtenons :

$$(E_1 - E_0) \sum_{N \text{ } SM_S, \text{antisym}} \left| \langle \psi_{0 \ 00} | \hat{o}_1 | \psi_{N \ SM_S} \rangle \right|^2 \leq \frac{1}{2} \quad (\text{II.43})$$

De la même façon que précédemment, comme la sommation précédente porte seulement sur les états antisymétriques, nous ne pouvons pas tirer directement l'inégalité recherchée, puisque nous ne savons pas ce que vaut dans ce cas la relation de fermeture.

Notons, toutefois, que le calcul de la valeur moyenne de  $\hat{o}_1^2$  dans l'état fondamental antisymétrique donne cette valeur :

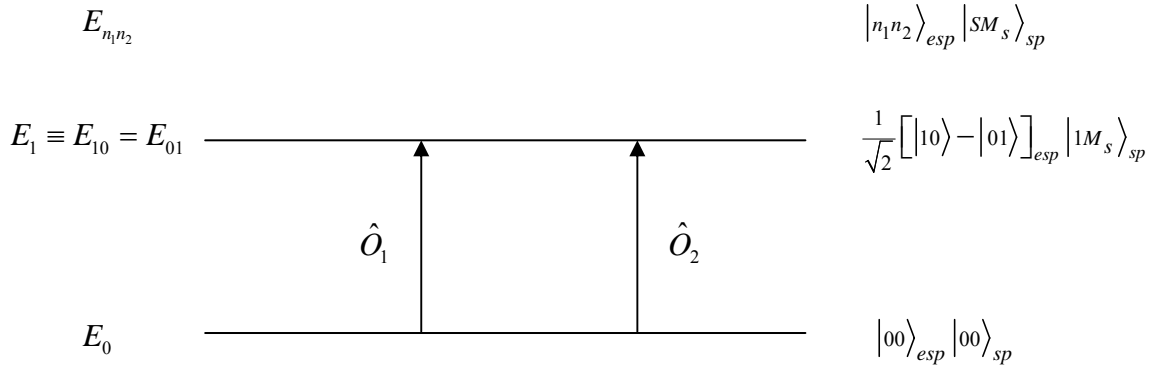
$$\langle \psi_{0 \ 00} | \hat{o}_1^2 | \psi_{0 \ 00} \rangle = \frac{1}{2\omega_0} \quad (\text{II.44})$$

et comme  $E_1 - E_0 = 2\omega_0$ , nous pouvons alors écrire ceci :

$$(E_1 - E_0) \langle \psi_{0 \ 00} | \hat{o}_1^2 | \psi_{0 \ 00} \rangle = 1 \quad (\text{II.45})$$

Nous aboutissons à une égalité qui ressemble à celle qui nous voulions trouver à partir de la règle de somme portant sur les états antisymétriques.

La figure (II.5) montre le schéma des 2 premiers niveaux d'énergie du système représenté par l'hamiltonien  $H_0$  et les transitions dipolaires possibles. Nous indiquons les opérateurs  $\hat{O}_1$  et  $\hat{O}_2$  permettant les transitions entre le fondamental et le 1<sup>er</sup> état excité.



**Figure (II.5)** : Spectre des 1<sup>ères</sup> énergies de  $H_0$  - Cas de 2 oscillateurs indépendants.

(Transition dipolaire avec échange des deux particules et avec changement d'orientation du spin).

### III.2.2 Sans échange des particules

Si l'on ne tient pas compte de l'antisymétrie de la fonction d'onde, les états propres associés sont donnés par (II.36); nous choisissons arbitrairement pour le fondamental l'état de spin  $|SM_s\rangle_{sp} = |10\rangle$  ; pour le 1<sup>er</sup> excité, exprimons l'état  $|SM_s\rangle_{sp}$  vers lequel la transition de spin peut être effectuée, nous écrivons alors :

$$|\psi_{111}\rangle = |10\rangle_{esp} |11\rangle_{sp} \quad \text{ou} \quad |\psi_{11-1}\rangle = |10\rangle_{esp} |1-1\rangle_{sp} \quad (\text{II.46})$$

$$|\psi'_{111}\rangle = |01\rangle_{esp} |11\rangle_{sp} \quad \text{ou} \quad |\psi'_{11-1}\rangle = |01\rangle_{esp} |1-1\rangle_{sp}$$

Nous aboutissons à un calcul semblable à celui effectué dans le cas d'une particule avec spin quand on tient compte du changement d'orientation du spin (rappelons que l'on s'intéresse à la transition d'une particule à la fois) :

$$\sum_{N SM_s} (E_N - E_0) \left| \langle \psi_{010} | \hat{O}_1 | \psi_{N SM_s} \rangle \right|^2 = 1 \quad (\text{II.47})$$

En remplaçant  $(E_N - E_0)$  par  $(E_1 - E_0)$  et tenant compte de la relation de fermeture, nous écrivons:

$$(E_1 - E_0) \langle \psi_{010} | \hat{\sigma}_1^2 | \psi_{010} \rangle \leq 1 \quad \text{(II.48)}$$

Calculons  $\langle \psi_{010} | \hat{\sigma}_1^2 | \psi_{010} \rangle$  [17] et prenons  $E_1 - E_0 = 2\omega_0$ ; la relation (II.48) donne :

$$2\omega_0 \frac{1}{2\omega_0} = 1$$

Vérifions la règle de somme (II.47) : tous les termes  $\langle \psi_{010} | \hat{\sigma}_1 | \psi_{N SM_s} \rangle$  s'annulent sauf ceux qui correspondent à  $|\psi_{N SM_s}\rangle \equiv |\psi_{111}\rangle$  ou  $|\psi_{11-1}\rangle$

$$(E_1 - E_0) \left( |\langle \psi_{010} | \hat{\sigma}_1 | \psi_{111} \rangle|^2 + |\langle \psi_{010} | \hat{\sigma}_1 | \psi_{11-1} \rangle|^2 \right) = 1 \quad \text{(II.49)}$$

Calculons le facteur de  $(E_1 - E_0)$  [17]:

$$|\langle \psi_{010} | \hat{\sigma}_1 | \psi_{111} \rangle|^2 + |\langle \psi_{010} | \hat{\sigma}_1 | \psi_{11-1} \rangle|^2 = \left| \langle 00 | \hat{x}_1 | 10 \rangle_{esp} \right|^2 \left( \left| \langle 10 | \hat{\sigma}_{1x} | 1+1 \rangle_{sp} \right|^2 + \left| \langle 10 | \hat{\sigma}_{1x} | 1-1 \rangle_{sp} \right|^2 \right)$$

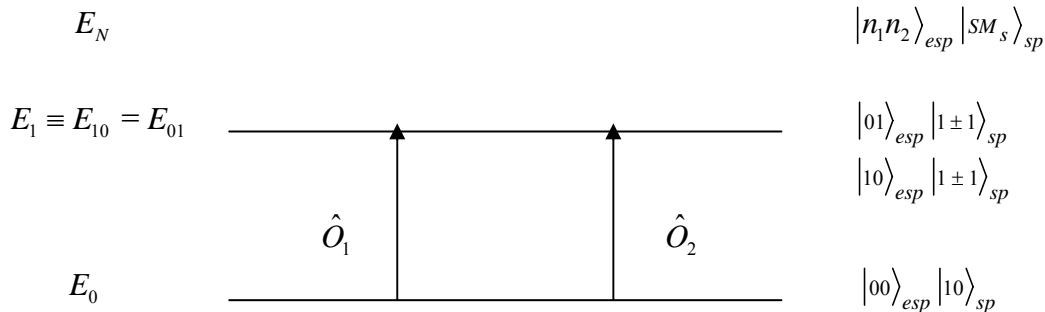
$$\left| \langle 10 | \hat{\sigma}_{1x} | 1+1 \rangle_{sp} \right|^2 = \left| \langle 10 | \hat{\sigma}_{1x} | 1-1 \rangle_{sp} \right|^2 = \frac{1}{2} \quad \text{et} \quad \left| \langle 00 | \hat{x}_1 | 10 \rangle_{esp} \right|^2 = \frac{1}{2\omega_0} \quad \text{(II.50)}$$

$$\text{Nous avons :} \quad |\langle \psi_{010} | \hat{\sigma}_1 | \psi_{111} \rangle|^2 + |\langle \psi_{010} | \hat{\sigma}_1 | \psi_{11-1} \rangle|^2 = \frac{1}{2\omega_0} \quad \text{et} \quad E_1 - E_0 = 2\omega_0 \quad \text{(II.51)}$$

Compte tenu de (II.51), la relation (II.49) est bien vérifiée :

$$2\omega_0 \frac{1}{2\omega_0} = 1$$

La figure (II.6) montre le schéma des deux premiers niveaux d'énergie du système d'hamiltonien  $H_0$  et quelques transitions dipolaires possibles. Nous indiquons les opérateurs  $\hat{\sigma}_1$  et  $\hat{\sigma}_2$  permettant les transitions entre le fondamental et le 1<sup>er</sup> état excité.



**Figure (II.6) :** Spectre des 1<sup>ères</sup> énergies de  $H_0$  - Cas de 2 oscillateurs indépendants.

(Transition dipolaire sans échange des deux particules et avec changement d'orientation du spin).

Avant de passer au chapitre suivant dans lequel nous chercherons à vérifier la saturation de la même inégalité pour des fermions en interaction, nous allons introduire un changement de variables inutile au niveau de ce chapitre mais qui nous permettra de tirer quelques conclusions afin de pouvoir les appliquer par la suite.

Considérons le changement de variables suivant :

$$x = \frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}}; \quad y = \frac{x_1 - x_2}{\sqrt{2}} \quad (\text{II.52})$$

L'hamiltonien  $H_0$  s'écrit dans ce cas comme suit (voir appendice A):

$$H_0 = H_0(x, y) = p_x^2 + p_y^2 + \omega_0^2 x^2 + \omega_0^2 y^2 \quad (\text{II.53})$$

La fonction d'onde spatiale  $\psi_{n_x n_y}^{esp}(x, y)$  est donnée par :

- pour le fondamental :  $\psi_{00}^{esp}(x, y) = \left(\frac{\omega_0}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\frac{\omega_0}{2}(x^2+y^2)}$
- pour le 1<sup>er</sup> état excité :  $\psi_{10}^{esp}(x, y) = \left(\frac{2\omega_0^2}{\pi}\right)^{1/2} x e^{-\frac{\omega_0}{2}(x^2+y^2)}$

$$\quad (\text{II.54})$$

$$\psi_{01}^{esp}(x, y) = \left(\frac{2\omega_0^2}{\pi}\right)^{1/2} y e^{-\frac{\omega_0}{2}(x^2+y^2)}$$

La fonction d'onde totale s'écrit comme suit :  $\psi_{N SM_s}(x, y) = \chi_S^{M_s} \psi_{n_x n_y}^{esp}(x, y)$  avec  $N = n_x + n_y$  ; les énergies s'expriment de la même façon que précédemment.

- pour le fondamental :  $\psi_{000}(x, y) = \chi_0^0 \psi_{00}^{esp}(x, y)$
- pour le 1<sup>er</sup> état excité :  $\psi_{100}(x, y) = \chi_0^0 \psi_{10}^{esp}(x, y)$

$$\quad (\text{II.55})$$

$$\psi_{11M_s}(x, y) = \chi_1^{M_s} \psi_{01}^{esp}(x, y)$$

Comme dans le cas précédent, calculons le commutateur et le double commutateur de  $H_0$  avec l'opérateur de transition  $\hat{x}_1$  exprimé en fonction de  $\hat{x}$  et  $\hat{y}$ .

$$[H_0, \hat{x}_1] = \frac{1}{\sqrt{2}} [H_0, \hat{x} + \hat{y}] = \sqrt{2}i(\hat{p}_x + \hat{p}_y) \quad (\text{II.56})$$

et 
$$[[H_0, \hat{x}_1], \hat{x}_1] = -i[(\hat{p}_x + \hat{p}_y), (\hat{x} + \hat{y})] = -2 \quad (\text{II.57})$$

La valeur moyenne du double commutateur  $[[H_0, \hat{x}_1], \hat{x}_1]$  peut être donnée sous la forme :

$$\langle \psi_{0\ 00} | [[H_0, \hat{x}_1], \hat{x}_1] | \psi_{0\ 00} \rangle = - \sum_{N\ SM_s} (E_N - E_0) \left| \langle \psi_{0\ 00} | (\hat{x} + \hat{y}) | \psi_{N\ SM_s} \rangle \right|^2 \quad (\text{II.58})$$

On obtient :

$$\sum_{N\ SM_s} (E_N - E_0) \left| \langle \psi_{0\ 00} | (\hat{x} + \hat{y}) | \psi_{N\ SM_s} \rangle \right|^2 = 2 \quad (\text{II.59})$$

Comme nous ne prenons en considération que les états antisymétriques et que dans ce cas la transition dipolaire est induite par l'opérateur de transition  $\hat{x}$ , nous écrivons alors :

$$\sum_{N\ SM_s, \text{antisy}} (E_N - E_0) \left| \langle \psi_{0\ 00} | \hat{x} | \psi_{N\ SM_s} \rangle \right|^2 = 1 \quad (\text{II.60})$$

Vérifions cette règle de somme, pour cela, minorons (II.60) en remplaçant  $(E_N - E_0)$  par  $(E_1 - E_0)$ , nous obtenons :

$$(E_1 - E_0) \sum_{N\ SM_s, \text{antisy}} \left| \langle \psi_{0\ 00} | \hat{x} | \psi_{N\ SM_s} \rangle \right|^2 \leq 1 \quad (\text{II.61})$$

Le calcul de la valeur moyenne de  $\hat{x}^2$  dans l'état fondamental antisymétrique nous donne:

$$\langle \psi_{0\ 00} | \hat{x}^2 | \psi_{0\ 00} \rangle = \frac{1}{2\omega_0} \quad (\text{II.62})$$

et comme  $E_1 - E_0 = 2\omega_0$ , ce qui nous permet d'écrire :

$$\langle \psi_{0\ 00} | \hat{x}^2 | \psi_{0\ 00} \rangle = 1 / (E_1 - E_0) \quad (\text{II.63})$$

Nous aboutissons à une égalité qui ressemble à celle qui nous voulions trouver à partir de la règle de somme portant sur les états antisymétriques.

Remarquons, toutefois, qu'à aucun moment, nous ne précisons le type de transition dipolaire que nous considérons ; en effet, du fait que les énergies sont dégénérées, cela n'apportera pas de changement dans les relations précédentes.

# CHAPITRE III

## **INEGALITE DE BERGLMANN ET MARTIN POUR DES SYSTEMES** **EN INTERACTION AVEC SPIN**

Nous avons cherché des relations semblables aux IBM dans le cas où les degrés de liberté de spin sont pris en compte : pour cela, nous avons considéré le cas des particules dans des champs harmoniques sans interaction, nous avons pu vérifier que l'inégalité cherchée est saturée c.à.d. que l'on obtient une égalité, ce qui implique que la règle de somme est totalement emportée par le 1<sup>er</sup> niveau excité.

Nous allons, dans cette partie [21], considérer deux fermions de spin  $\frac{1}{2}$  dans des champs harmoniques interagissant entre eux. Dans un premier stade, l'interaction est supposée harmonique et indépendante du spin puis nous lui ajouterons un terme exprimé en fonction des deux spins. Enfin, nous introduirons une interaction gaussienne. Nous chercherons à établir les relations dérivées dans ces cas et vérifier si elles sont saturées ou non.

Nous étudierons également l'effet du renversement de spin et l'influence de l'antisymétrie de la fonction d'onde totale dans l'échange des fermions sur la saturation de l'inégalité cherchée.

## I. Cas de deux oscillateurs harmoniques interagissant par une interaction harmonique

### I.1. Interaction indépendante des spins

Nous considérons deux particules de spin  $\frac{1}{2}$  interagissant par une force harmonique.

$$H'_0 = p_{x_1}^2 + p_{x_2}^2 + \omega_0^2 x_1^2 + \omega_0^2 x_2^2 + \Omega^2 (x_1 - x_2)^2 \quad (\text{III.1})$$

En utilisant le changement de variables suivant :

$$x = \frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}}; \quad y = \frac{x_1 - x_2}{\sqrt{2}} \quad (\text{III.2})$$

l'hamiltonien s'écrit alors (voir appendice A):

$$H'_0 = p_x^2 + p_y^2 + \omega_0^2 x^2 + \omega_0^2 y^2 + 2\Omega^2 y^2$$

$$H'_0 = p_x^2 + p_y^2 + \omega_0^2 x^2 + \omega_1^2 y^2 \text{ avec : } \omega_1^2 = \omega_0^2 + 2\Omega^2 \quad (\text{III.3})$$

Les énergies sont données par [16] :

$$E_{n_x n_y} = 2\omega_0 \left( n_x + \frac{1}{2} \right) + 2\omega_1 \left( n_y + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{III.4})$$

Pour le fondamental et les 1<sup>ers</sup> états excités, ces énergies sont données, respectivement, comme suit :

$$E_{n_x=0 \ n_y=0} = \omega_0 + \omega_1$$

$$E_{n_x=1 \ n_y=0} = 3\omega_0 + \omega_1$$

$$E_{n_x=0 \ n_y=1} = \omega_0 + 3\omega_1$$

Les états propres sont notés  $|n_x n_y\rangle$ , la fonction d'onde spatiale  $\psi_{n_x n_y}^{esp}(x, y)$  est donnée par [16]:

- pour le fondamental :  $\psi_{00}^{esp}(x, y) = \left( \frac{\omega_0 \omega_1}{\pi^2} \right)^{1/4} e^{-\frac{\omega_0}{2} x^2} e^{-\frac{\omega_1}{2} y^2}$
- pour le 1<sup>er</sup> état excité :  $\psi_{10}^{esp}(x, y) = \left( \frac{4\omega_0^3 \omega_1}{\pi^2} \right)^{1/4} x e^{-\frac{\omega_0}{2} x^2} e^{-\frac{\omega_1}{2} y^2} \quad (\text{III.5})$
- pour le 2<sup>ème</sup> état excité :  $\psi_{01}^{esp}(x, y) = \left( \frac{4\omega_0 \omega_1^3}{\pi^2} \right)^{1/4} y e^{-\frac{\omega_0}{2} x^2} e^{-\frac{\omega_1}{2} y^2}$

Nous écrivons les fonctions d'ondes spatiales (III.5) en fonction de  $x_1$  et  $x_2$  pour déterminer la parité de ces fonctions dans l'échange des deux particules.

- pour le fondamental :

$$\psi_{00}^{esp}(x_1, x_2) = \left( \frac{\omega_0 \omega_1}{\pi^2} \right)^{1/4} e^{-\frac{\omega_0}{2}(x_1+x_2)^2} e^{-\frac{\omega_1}{2}(x_1-x_2)^2} \quad (\text{III.6.a})$$

- pour le 1<sup>er</sup> état excité :

$$\psi_{10}^{esp}(x_1, x_2) = \left( \frac{\omega_0^3 \omega_1}{\pi^2} \right)^{1/4} (x_1 + x_2) e^{-\frac{1}{4}(\omega_0 + \omega_1)x_1^2} e^{-\frac{1}{4}(\omega_0 + \omega_1)x_2^2} e^{-\frac{1}{2}(\omega_0 - \omega_1)x_1 x_2} \quad (\text{III.6.b})$$

- pour le 2<sup>ème</sup> état excité :

$$\psi_{01}^{esp}(x_1, x_2) = \left( \frac{\omega_0 \omega_1^3}{\pi^2} \right)^{1/4} (x_1 - x_2) e^{-\frac{1}{4}(\omega_0 + \omega_1)x_1^2} e^{-\frac{1}{4}(\omega_0 + \omega_1)x_2^2} e^{-\frac{1}{2}(\omega_0 - \omega_1)x_1 x_2}$$

Nous remarquons que :

$\psi_{00}^{esp}(x_1, x_2)$  et  $\psi_{10}^{esp}(x_1, x_2)$  sont symétriques dans l'échange des deux particules alors que  $\psi_{01}^{esp}(x_1, x_2)$  est antisymétrique.

### I.1.1. Sans renversement de spin

#### I.1.1.1. Avec échange des particules

La fonction d'onde totale s'écrit comme suit :

$$\psi_{n_x n_y SM_S}(x, y) = \chi_S^{M_S} \psi_{n_x n_y}^{esp}(x, y) \quad (\text{III.7})$$

Les états étant antisymétriques, le fondamental et les 1<sup>ers</sup> excités sont donnés par :

$$|\psi_{00\ 00}\rangle = |00\rangle_{esp} |00\rangle_{sp} ; |\psi_{10\ 00}\rangle = |10\rangle_{esp} |00\rangle_{sp} \text{ et } |\psi_{01\ 1\pm 1}\rangle = |01\rangle_{esp} |1\pm 1\rangle_{sp} \quad (\text{III.8})$$

Nous nous intéressons à la relation qu'il est possible d'établir à partir de la règle de somme tirée de la valeur moyenne du double commutateur ; nous écrivons (voir appendice B):

$$\sum_{n_x n_y SM_S} (E_{n_x} - E_{n_x=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \hat{x} | \psi_{n_x n_y SM_S} \rangle \right|^2 + \sum_{n_x n_y SM_S} (E_{n_y} - E_{n_y=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \hat{y} | \psi_{n_x n_y SM_S} \rangle \right|^2 = 2 \quad (\text{III.9})$$

Notons que nous obtenons 2 règles de somme, l'une en  $\hat{x}$  et l'autre en  $\hat{y}$  saturées séparément :

$$\sum_{n_x n_y SM_S} (E_{n_x} - E_{n_x=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \hat{x} | \psi_{n_x n_y SM_S} \rangle \right|^2 = 1 \quad (\text{III.10})$$

$$\sum_{n_x n_y SM_S} (E_{n_y} - E_{n_y=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \hat{y} | \psi_{n_x n_y SM_S} \rangle \right|^2 = 1$$

On peut « minorer » la 1<sup>ère</sup> somme en remplaçant  $E_{n_x}$  par  $E_{n_x=1}$  où  $E_{n_x=1}$  est l'énergie de l'état le plus bas atteint par l'opérateur de transition  $\hat{x}$  ; la transition induite par l'opérateur  $\hat{y}$  n'étant pas possible, on obtient alors après introduction de la relation de fermeture:

$$(E_{n_x=1} - E_{n_x=0}) \langle \psi_{00\ 00} | \hat{x}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle \leq 1 \quad (\text{III.11})$$

Nous vérifions la relation précédente en calculant le facteur de  $(E_{n_x=1} - E_{n_x=0})$  [17] :

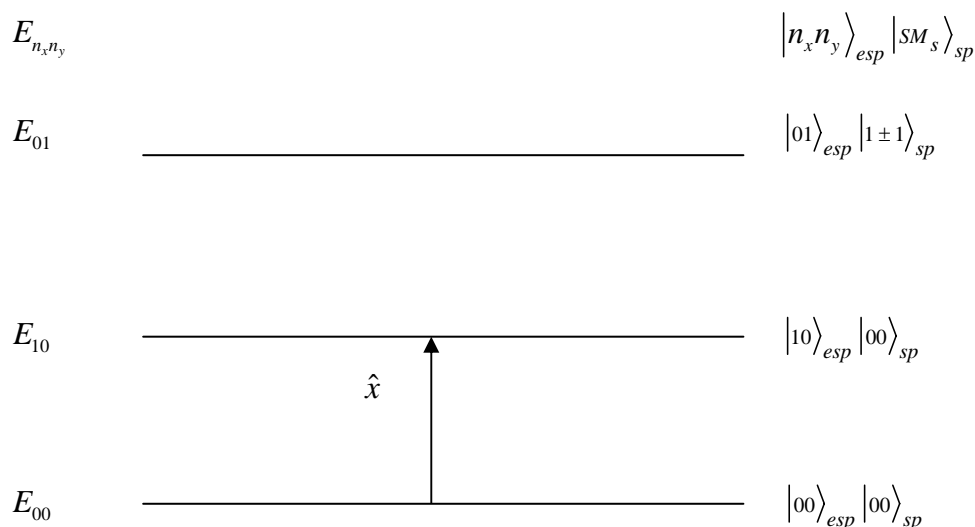
$$\langle \psi_{00\ 00} | \hat{x}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle = \frac{1}{2\omega_0} \quad (\text{III.12})$$

et en remplaçant  $(E_{n_x=1} - E_{n_x=0}) = 2\omega_0$  dans (III.11) ; nous obtenons:

$$2\omega_0 \frac{1}{2\omega_0} = 1 \quad (\text{III.13})$$

La relation cherchée est donc une égalité stricte dans le cas où il n'y a pas de renversement de spin; ceci permet de conclure que l'interaction harmonique entre les deux fermions ne modifie pas la saturation de l'inégalité (III.11) et que le 1<sup>er</sup> état excité emporte toute la règle de somme. Dans ce cas, on retrouve la même situation que celle d'une particule avec spin sans changement d'orientation du spin (la 2<sup>ème</sup> particule n'étant pas « concernée » par la transition)

La figure (III.1) montre le schéma des trois premiers niveaux d'énergie du système d'hamiltonien  $H'_0$  et la transition dipolaire possible.



**Figure (III.1) :** Spectre des énergies de  $H'_0$

(Transition avec échange des particules et sans renversement de spin)

### I.1.1.2. Sans échange des particules

Les états étant quelconques, le fondamental et les 1<sup>ers</sup> excités sont donnés par :

$$|\psi_{00 SM_S}\rangle = |00\rangle_{esp} |SM_S\rangle_{sp}, \quad |\psi_{10 SM_S}\rangle = |10\rangle_{esp} |SM_S\rangle_{sp} \quad \text{et} \quad |\psi_{01 SM_S}\rangle = |01\rangle_{esp} |SM_S\rangle_{sp} \quad \text{(III.14)}$$

Puisqu'il y a une dégénérescence due au spin, choisissons de façon arbitraire l'état de spin  $|SM_S\rangle_{sp} = |10\rangle_{sp}$ .

La relation recherchée, dans ce cas, est établie de la même façon que dans le calcul effectué dans la partie précédente et la règle de somme cherchée s'écrit comme suit (III.9):

$$\sum_{n_x n_y SM_S} (E_{n_x} - E_{n_x=0}) \left| \langle \psi_{00 10} | \hat{x} | \psi_{n_x n_y SM_S} \rangle \right|^2 + \sum_{n_x n_y SM_S} (E_{n_y} - E_{n_y=0}) \left| \langle \psi_{00 10} | \hat{y} | \psi_{n_x n_y SM_S} \rangle \right|^2 = 2$$

Là encore, on peut écrire 2 règles de somme comme dans (III.10). On peut « minorer » ces sommes en remplaçant  $E_{n_x}$  par  $E_{n_x=1}$  et  $E_{n_y}$  par  $E_{n_y=1}$  où  $E_{n_x=1}$  est l'énergie de l'état le plus

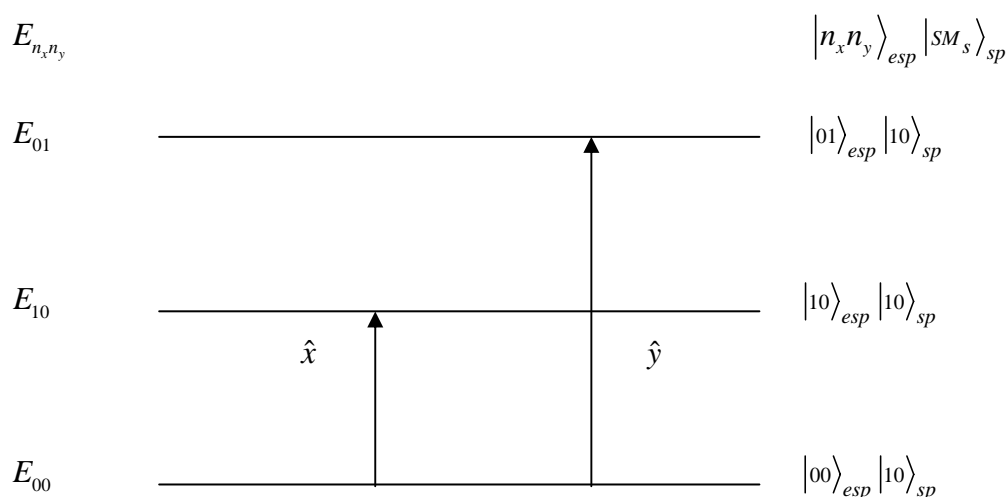
bas atteint par l'opérateur de transition  $\hat{x}$  et  $E_{n_x=1}$  l'énergie de l'état le plus bas atteint par l'opérateur de transition  $\hat{y}$ , on obtient alors en introduisant la relation de fermeture :

$$\left(E_{n_x=1} - E_{n_x=0}\right) \langle \psi_{00\ 00} | \hat{x}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle \leq 1 \tag{III.15}$$

$$\left(E_{n_y=1} - E_{n_y=0}\right) \langle \psi_{00\ 00} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle \leq 1$$

Si l'on remplace les différentes énergies ainsi que les valeurs moyennes de  $\hat{x}^2$  et  $\hat{y}^2$  nous vérifions aisément la saturation des 2 inégalités, ce qui montre que la règle de somme est totalement emportée par les 2 transitions considérées en  $\hat{x}$  et en  $\hat{y}$ .

La figure (III.2) montre le schéma des trois premiers niveaux d'énergie du système d'hamiltonien  $H'_0$  et les transitions dipolaires possibles.



**Figure (III.2) :** Spectre des énergies de  $H'_0$

(Transition dipolaire sans échange des particules et sans changement d'orientation du spin)

### I.1.2. Avec renversement de spin

Nous reprenons les calculs précédents en prenant comme opérateur de transition:  $\hat{o} = \hat{o}_1$  ou

$\hat{o}_2$  avec  $\hat{o}_1 = \sigma_{1x} \hat{x}_1$  et  $\hat{o}_2 = \sigma_{2x} \hat{x}_2$ .

### I.1.2.1. Avec échange des particules

Quand on tient compte des propriétés d'antisymétrie de la fonction d'onde, les états associés à ces fonctions sont ceux donnés par (III.8). La règle de somme totale s'écrit comme (III.10):

$$\sum_{n_x n_y SM_S} (E_{n_x} - E_{n_x=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \sigma_{1x} \hat{x} | \psi_{n_x n_y SM_S} \rangle \right|^2 + \sum_{n_x n_y SM_S} (E_{n_y} - E_{n_y=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \sigma_{1x} \hat{y} | \psi_{n_x n_y SM_S} \rangle \right|^2 = 1 \quad \text{(III.16)}$$

De la même façon, la règle de somme précédente se décompose en 2 règles de somme comme (III.10). La règle en  $\sigma_{1x} \hat{y}$  est « minorée » en remplaçant  $(E_{n_y} - E_{n_y=0})$  par  $(E_{n_y=1} - E_{n_y=0})$  où  $E_{n_y=1}$  est l'énergie de l'état le plus bas atteint par l'opérateur de transition (remarquons que, dans ce cas, la transition induite par l'opérateur  $\sigma_{1x} \hat{x}$  n'est pas possible), ce qui entraîne alors:

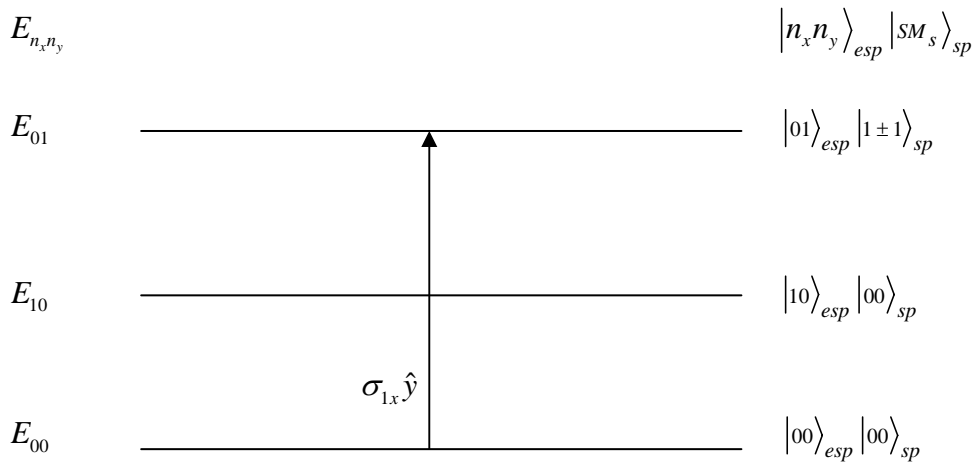
$$(E_{n_y=1} - E_{n_y=0}) \langle \psi_{00\ 00} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle \leq 1 \quad \text{(III.17)}$$

Nous avons :  $\langle \psi_{00\ 00} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle = \frac{1}{2\omega_1}$  et  $E_{n_y=1} - E_{n_y=0} = 2\omega_1$  (III.18)

En portant (III.18) dans (III.17), on vérifie aisément que cette dernière est saturée et nous tirons les mêmes conclusions que précédemment :

$$2\omega_1 \frac{1}{2\omega_1} = 1 \quad \text{(III.19)}$$

La figure (III.3) montre le schéma des trois premiers niveaux d'énergie du système d'hamiltonien  $H'_0$  et la transition dipolaire possible avec renversement de spin.



**Figure (III.3) :** Spectre des énergies de  $H'_0$

(Transition dipolaire avec échange des particules et renversement de spin).

### I.1.2.2. Sans échange des particules

Les états sont ceux donnés par (III.14). Pour le fondamental, choisissons arbitrairement l'état  $|SM_s\rangle_{sp} = |10\rangle_{sp}$ . Pour le 1<sup>er</sup> état excité, nous indiquons uniquement les états de spin  $|SM_s\rangle_{sp}$  vers lesquels un renversement de spin a lieu ; de cette façon, les états excités correspondants s'écrivent comme suit :  $|\psi_{1\pm 1}\rangle = |10\rangle_{esp} |1\pm 1\rangle_{sp}$  et  $|\psi'_{1\pm 1}\rangle = |01\rangle_{esp} |1\pm 1\rangle_{sp}$

La règle de somme totale est donnée par (III.9)

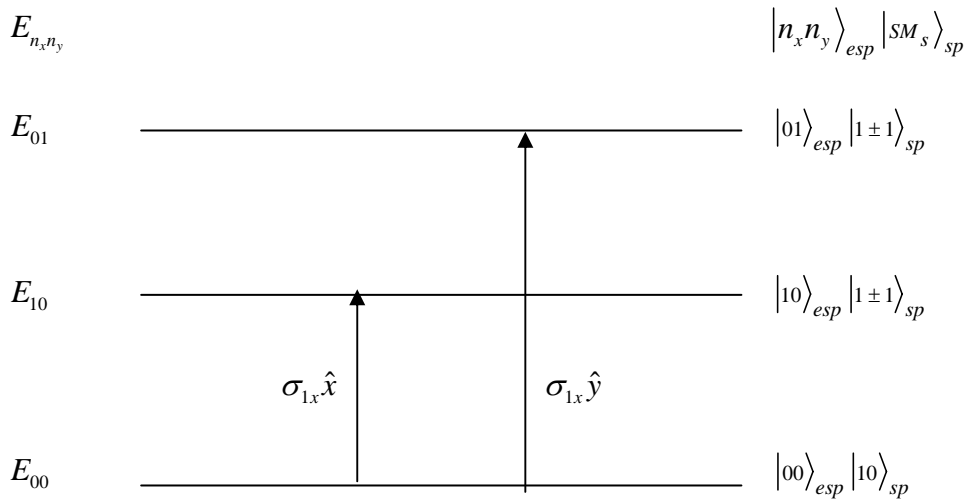
$$\sum_{n_x n_y SM_s} (E_{n_x} - E_{n_x=0}) \left| \langle \psi_{00\ 10} | \sigma_{1x} \hat{x} | \psi_{n_x n_y SM_s} \rangle \right|^2 + \sum_{n_x n_y SM_s} (E_{n_y} - E_{n_y=0}) \left| \langle \psi_{00\ 10} | \sigma_{1y} \hat{y} | \psi_{n_x n_y SM_s} \rangle \right|^2 = 2$$

Il est possible de tirer 2 règles de somme que l'on minore en remplaçant  $E_{n_x}$  par  $E_{n_x=1}$  et  $E_{n_y}$  par  $E_{n_y=1}$  où  $E_{n_x=1}$  est l'énergie de l'état le plus bas atteint par l'opérateur de transition  $\sigma_{1x} \hat{x}$  et  $E_{n_y=1}$  l'énergie de l'état le plus bas atteint par l'opérateur de transition  $\sigma_{1x} \hat{y}$ , on obtient alors :

$$\begin{aligned} (E_{n_x=1} - E_{n_x=0}) \langle \psi_{00\ 00} | \hat{x}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle &\leq 1 \\ (E_{n_y=1} - E_{n_y=0}) \langle \psi_{00\ 00} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle &\leq 1 \end{aligned} \quad \text{(III.20)}$$

Si l'on remplace les différentes énergies ainsi que les valeurs moyennes de  $\hat{x}^2$  et  $\hat{y}^2$  nous aboutissons à 2 égalités strictes.

La figure (III.4) montre le schéma des trois premiers niveaux d'énergie du système d'hamiltonien  $H'_0$  et les transitions dipolaires possibles.



**Figure (III.4) :** Spectre des énergies de  $H'_0$

(Transition sans échange des particules et avec renversement de spin).

## I.2. Interaction dépendante des spins

Nous ajoutons à l'hamiltonien  $H_0$  un terme  $H_s$  représentant l'interaction magnétique de spin entre les deux fermions de spin  $\frac{1}{2}$  (nous introduisons là aussi le changement de variables (III.2))

$$H = H_0 + H_s \quad (\text{III.21})$$

$$\text{avec : } H_s = \lambda_s \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} (\hat{x}_1 - \hat{x}_2)^2 = 2 \lambda_s \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} y^2 \quad (\text{III.22})$$

Notons que  $\hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z}$  est diagonal dans la base  $|SM_s\rangle$  avec les valeurs propres (+1) et (-1) respectivement associées à  $M_s = \pm 1$  et  $M_s = 0$ .

Suivant les états de spin total  $|SM_s\rangle$ , nous avons deux formes possibles pour l'hamiltonien  $H$  [22] et donc 2 équations « spatiales » à résoudre; les 2 hamiltoniens diffèrent par leur partie potentielle.

L'hamiltonien  $H$  s'écrit comme suit :

$$* \text{ Si } |SM_s\rangle = |00\rangle \text{ ou } |10\rangle \longrightarrow H = P_x^2 + P_y^2 + \omega_0^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 \quad (\text{III.23})$$

$$\text{avec : } \omega_2^2 = \omega_0^2 - 2\lambda_s$$

La fonction d'onde spatiale  $\psi_{n_x n_y}^{esp}(x, y)$  dans ce cas est donnée par [16] et elle s'écrit comme suit pour les 1<sup>ers</sup> états:

$$\begin{aligned} \psi_{00}^{esp}(x, y) &= \left( \frac{\omega_0 \omega_2}{\pi^2} \right)^{1/4} e^{-\frac{\omega_0}{2} x^2} e^{-\frac{\omega_2}{2} y^2} \\ \psi_{10}^{esp}(x, y) &= \left( \frac{4\omega_0^3 \omega_2}{\pi^2} \right)^{1/4} x e^{-\frac{\omega_0}{2} x^2} e^{-\frac{\omega_2}{2} y^2} \\ \psi_{01}^{esp}(x, y) &= \left( \frac{4\omega_0 \omega_2^3}{\pi^2} \right)^{1/4} y e^{-\frac{\omega_0}{2} x^2} e^{-\frac{\omega_2}{2} y^2} \end{aligned} \quad (\text{III.24})$$

Les énergies peuvent être déduites de la relation suivante [16] :

$$E_{n_x n_y} = 2\omega_0 \left( n_x + \frac{1}{2} \right) + 2\omega_2 \left( n_y + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{III.25})$$

Soit :

$$E_{n_x=0 \ n_y=0} = \omega_0 + \omega_2$$

$$E_{n_x=1 \ n_y=0} = 3\omega_0 + \omega_2$$

$$E_{n_x=0 \ n_y=1} = \omega_0 + 3\omega_2$$

$$* \text{ Si } |SM_s\rangle = |11\rangle \text{ ou } |1-1\rangle \longrightarrow H' = P_x^2 + P_y^2 + \omega_0^2 x^2 + \omega_3^2 y^2 \quad (\text{III.26})$$

$$\text{avec : } \omega_3^2 = \omega_0^2 + 2\lambda_s$$

La fonction d'onde spatiale  $\psi'_{n_x n_y}{}^{esp}(x, y)$  est donnée par [16]:

$$\begin{aligned} \psi'_{00}{}^{esp}(x, y) &= \left(\frac{\omega_0 \omega_3}{\pi^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{\omega_0}{2} x^2} e^{-\frac{\omega_3}{2} y^2} \\ \psi'_{10}{}^{esp}(x, y) &= \left(\frac{4\omega_0^3 \omega_3}{\pi^2}\right)^{1/4} x e^{-\frac{\omega_0}{2} x^2} e^{-\frac{\omega_3}{2} y^2} \\ \psi'_{01}{}^{esp}(x, y) &= \left(\frac{4\omega_0 \omega_3^3}{\pi^2}\right)^{1/4} y e^{-\frac{\omega_0}{2} x^2} e^{-\frac{\omega_3}{2} y^2} \end{aligned} \quad (\text{III.27})$$

Les énergies sont tirées de la relation suivante [16]:

$$E'_{n_x n_y} = 2\omega_0 \left(n_x + \frac{1}{2}\right) + 2\omega_3 \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \quad (\text{III.28})$$

Soit :

$$E'_{n_x=0 \ n_y=0} = \omega_0 + \omega_3$$

$$E'_{n_x=1 \ n_y=0} = 3\omega_0 + \omega_3$$

$$E'_{n_x=0 \ n_y=1} = \omega_0 + 3\omega_3$$

Remarquons que le système peut occuper chacun des états précédemment cités suivant l'état de spin total ; signalons, toutefois, que le fondamental correspond à  $|\psi_{00\ 00}\rangle$  ou  $|\psi_{00\ 10}\rangle$ .

### **I.2.1. Sans renversement de spin**

Rappelons que nous nous intéressons, dans notre travail, à la relation qui décrit la transition d'une particule à la fois de l'état fondamental vers le 1<sup>er</sup> état excité ; pour cela, nous calculons la valeur moyenne du double commutateur de  $H$  avec l'opérateur de transition  $\hat{o}_1 = \hat{x}_1$  (ou  $\hat{o}_2 = \hat{x}_2$ ) :

$$\left[\left[H, \hat{x}_1\right], \hat{x}_1\right] = \left[\left[H_0 + H_s, \hat{x}_1\right], \hat{x}_1\right] = \left[\left[H_0, \hat{x}_1\right], \hat{x}_1\right] + \left[\left[H_s, \hat{x}_1\right], \hat{x}_1\right] \quad (\text{III.29})$$

Le calcul de  $\left[\left[H_s, \hat{x}_1\right], \hat{x}_1\right]$  nous donne :

$$\left[\left[H_s, \hat{x}_1\right], \hat{x}_1\right] = 0 \quad (\text{III.30})$$

Puisque:  $[[H_0, \hat{x}_1], \hat{x}_1] = -2$ , la valeur moyenne de  $[[H, \hat{x}_1], \hat{x}_1]$  dans  $|\psi_{00\ 00}\rangle$  ou  $|\psi_{00\ 10}\rangle$  s'écrit alors:

$$\langle \psi_{00\ 00} | [[H, \hat{x}_1], \hat{x}_1] | \psi_{00\ 00} \rangle = \langle \psi_{00\ 10} | [[H, \hat{x}_1], \hat{x}_1] | \psi_{00\ 10} \rangle = -2 \quad (\text{III.31})$$

On se retrouve dans la même situation que celle du paragraphe III.1 du chapitre précédent (deux oscillateurs harmoniques indépendants avec spin), l'espace singulet se présentant comme un espace ordinaire.

### **I.2.2. Avec renversement de spin**

Nous calculons le double commutateur de  $H$  avec l'opérateur de transition  $\hat{o}_1 = \sigma_{1x} \hat{x}_1$  (ou  $\hat{o}_2 = \sigma_{2x} \hat{x}_2$ ),

$$[[H, \hat{o}_1], \hat{o}_1] = [[H_0 + H_s, \hat{o}_1], \hat{o}_1] = [[H_0, \hat{o}_1], \hat{o}_1] + [[H_s, \hat{o}_1], \hat{o}_1] \quad (\text{III.32})$$

Nous avons  $[[H_0, \hat{o}_1], \hat{o}_1] = -2\hat{\sigma}_{1x}^2 = -2$  et le calcul de  $[[H_s, \hat{o}_1], \hat{o}_1]$  nous donne (voir appendice C) :

$$[[H_s, \hat{o}_1], \hat{o}_1] = 4 \lambda_s \hat{y}^2 (\hat{x} + \hat{y})^2 \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} \quad (\text{III.33})$$

La valeur moyenne du double commutateur  $[[H_s, \hat{o}_1], \hat{o}_1]$  dans l'état fondamental  $|\psi_{00\ 00}\rangle$  ou  $|\psi_{00\ 10}\rangle$  est déterminée comme suit :

$$\langle \psi_{00\ 00} | [[H_s, \hat{o}_1], \hat{o}_1] | \psi_{00\ 00} \rangle = \langle \psi_{00\ 10} | [[H_s, \hat{o}_1], \hat{o}_1] | \psi_{00\ 10} \rangle = -\lambda_s \left( \frac{1}{\omega_0 \omega_2} + \frac{3}{\omega_2^2} \right) \quad (\text{III.34})$$

La valeur moyenne de  $[[H, \hat{o}_1], \hat{o}_1]$  dans  $|\psi_{00\ 00}\rangle$  s'écrit :

$$\langle \psi_{00\ 00} | [[H, \hat{o}_1], \hat{o}_1] | \psi_{00\ 00} \rangle = \langle \psi_{00\ 10} | [[H, \hat{o}_1], \hat{o}_1] | \psi_{00\ 10} \rangle = -2 - \lambda_s \left( \frac{1}{\omega_0 \omega_2} + \frac{3}{\omega_2^2} \right) \quad (\text{III.35})$$

Là encore, il est possible de décomposer cette règle de somme totale en les 2 règles suivantes :

$$\sum_{n_x n_y SM_S} (E_{n_x} - E_{n_x=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \sigma_{1x} \hat{x} | \psi_{n_x n_y SM_S} \rangle \right|^2 = 1$$

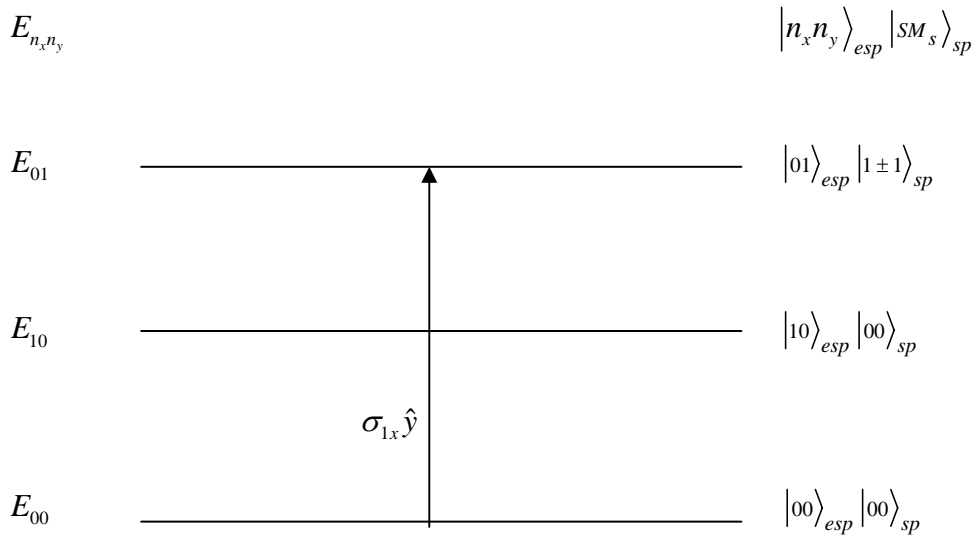
$$\sum_{n_x n_y SM_S} (E_{n_y} - E_{n_y=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \sigma_{1x} \hat{y} | \psi_{n_x n_y SM_S} \rangle \right|^2 = 1 + \lambda_s \left( \frac{1}{\omega_0 \omega_2} + \frac{3}{\omega_2^2} \right) \quad (\text{III.36})$$

I.2.2.1. Avec échange des particules

Si l'on tient compte des propriétés d'antisymétrie de la fonction d'onde, les états correspondants sont notés par (III.8),

La figure (III.5) montre le schéma des trois premiers niveaux d'énergie du système d'hamiltonien  $H$  et la transition dipolaire possible avec renversement de spin.

Remarquons qu'une transition avec changement d'orientation de spin de la particule fait passer de l'espace singulet à l'espace triplet.



**Figure (III.5) :** Spectre des énergies de  $H$   
(Avec échange des particules et renversement de spin).

En minorant la règle de somme précédente, en remplaçant  $(E_{n_y} - E_{n_y=0})$  par  $(E'_{n_y=1} - E_{n_y=0})$  où  $E'_{n_y=1}$  est l'énergie de l'état le plus bas atteint par l'opérateur de transition  $\sigma_{1x} \hat{y}$  (la transition induite par l'opérateur  $\sigma_{1x} \hat{x}$  n'est pas possible), la relation (III.36) devient :

$$(E'_{n_y=1} - E_{n_y=0}) \langle \psi_{00\ 00} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle \leq 1 + \lambda_s \left( \frac{1}{\omega_0 \omega_2} + \frac{3}{\omega_2^2} \right) \quad \text{(III.37)}$$

Remplaçons  $\langle \psi_{00\ 00} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle = \frac{1}{2\omega_2}$  et  $E'_{n_x=0\ n_y=1} - E_{n_x=0\ n_y=0} = 3\omega_3 - \omega_2$  dans (III.37), nous obtenons :

$$\frac{3\omega_3 - \omega_2}{2\omega_2} \leq 1 + \lambda_s \left( \frac{1}{\omega_0 \omega_2} + \frac{3}{\omega_2^2} \right) \quad \text{(III.38)}$$

Pour avoir une idée de l'ordre de grandeur des valeurs intervenant dans cette relation, faisons des approximations au 2<sup>ème</sup> ordre concernant  $\omega_2$  et  $\omega_3$  en considérant que  $\lambda_s = \omega_0^2$  [17]:

$$\begin{aligned}\omega_2^2 &= \omega_0^2 - 2\lambda_s = \omega_0^2 \left(1 - \frac{2\lambda_s}{\omega_0^2}\right) \rightarrow \omega_2 = \omega_0 \left(1 - \frac{\lambda_s}{\omega_0^2} - \frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^4}\right) \\ \omega_3^2 &= \omega_0^2 + 2\lambda_s = \omega_0^2 \left(1 + \frac{2\lambda_s}{\omega_0^2}\right) \rightarrow \omega_3 = \omega_0 \left(1 + \frac{\lambda_s}{\omega_0^2} - \frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^4}\right)\end{aligned}\tag{III.39}$$

En portant les approximations (III.39) dans (III.38), nous obtenons :

$$\frac{3\omega_3 - \omega_2}{2\omega_2} = 1 + \frac{3\lambda_s}{\omega_0^2} + \frac{3\lambda_s^2}{\omega_0^4}, \quad \frac{\lambda_s}{\omega_0\omega_2} = \frac{\lambda_s}{\omega_0^2} + \frac{\lambda_s^2}{\omega_0^4} \quad \text{et} \quad \frac{3\lambda_s}{\omega_2^2} = \frac{3\lambda_s}{\omega_0^2} + \frac{6\lambda_s^2}{\omega_0^4}\tag{III.40}$$

Ce qui implique, pour la relation recherchée :

$$1 + \frac{3\lambda_s}{\omega_0^2} + \frac{3\lambda_s^2}{\omega_0^4} \leq 1 + \frac{4\lambda_s}{\omega_0^2} + \frac{7\lambda_s^2}{\omega_0^4}\tag{III.41}$$

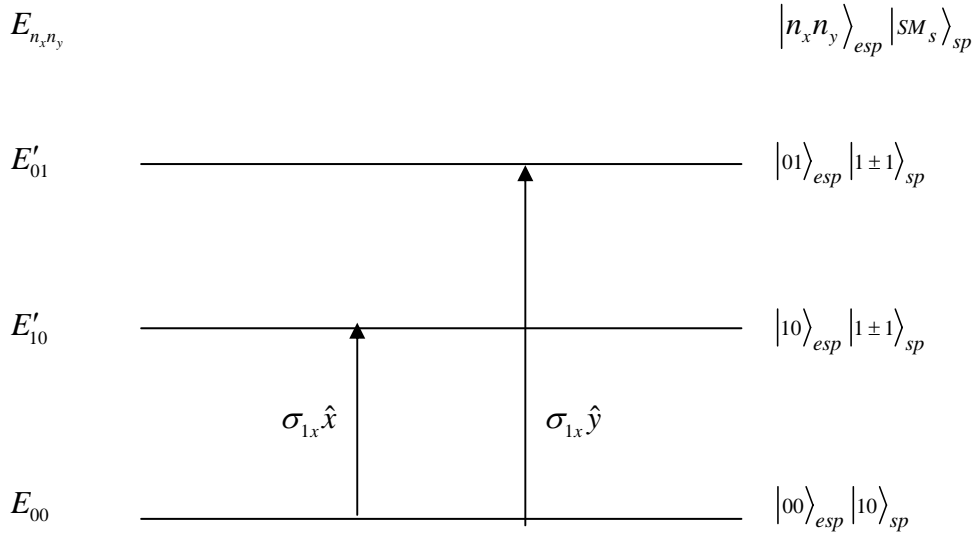
La relation cherchée est une inégalité (elle n'est pas saturée) s'il y a renversement de spin; ceci permet de conclure que l'interaction magnétique de spin entre les deux fermions de spin  $\frac{1}{2}$  modifie la saturation de l'inégalité (III.38). Remarquons que, si  $\lambda_s$  est nul, nous retrouvons la saturation comme dans le cas d'une interaction indépendante des spins.

Rappelons que la transition dipolaire avec changement d'orientation de spin implique le passage de l'espace singulet à l'espace triplet et fait intervenir des fonctions d'onde qui ne sont pas orthogonales entre elles.

### I.2.2.2. Sans échange des particules

Considérons que les états propres dans ce cas sont quelconques ; le fondamental est donné par (III.14). Puisque nous tenons compte de la transition de spin, choisissons arbitrairement pour le fondamental l'état de spin  $|SM_s\rangle = |10\rangle_{sp}$ , le 1<sup>er</sup> excité vers lequel la transition de spin peut être effectuée est donc l'état  $|SM_s\rangle = |1\pm 1\rangle_{sp}$ .

La figure (III.6) montre le schéma des trois premiers niveaux d'énergie du système d'hamiltonien  $H$  et les transitions dipolaires possibles.



**Figure (III.6) :** Spectre des énergies de  $H$

(Transition sans échange des particules et avec renversement de spin).

La règle de somme est donnée déjà par (III.36)

$$\begin{aligned} \sum_{n_x n_y, SM_S} (E_{n_x} - E_{n_x=0}) \left| \langle \psi_{00\ 10} | \sigma_{1x} \hat{x} | \psi_{n_x n_y, SM_S} \rangle \right|^2 + \sum_{n_x n_y, SM_S} (E_{n_y} - E_{n_y=0}) \left| \langle \psi_{00\ 10} | \sigma_{1x} \hat{y} | \psi_{n_x n_y, SM_S} \rangle \right|^2 \\ = 2 + \lambda_s \left( \frac{1}{\omega_0 \omega_2} + \frac{3}{\omega_2^2} \right) \end{aligned}$$

En remplaçant  $E_{n_x}$  par  $E'_{n_x=1}$  et  $E_{n_y}$  par  $E'_{n_y=1}$  sachant que  $E'_{n_x=1}$  est l'énergie de l'état le plus bas atteint par l'opérateur de transition  $\sigma_{1x} \hat{x}$  et  $E'_{n_y=1}$  celle de l'état le plus bas atteint par l'opérateur de transition  $\sigma_{1x} \hat{y}$ , nous écrivons alors :

$$\begin{aligned} \left( (E'_{n_x=1} - E_{n_x=0}) \langle \psi_{00\ 10} | \hat{x}^2 | \psi_{00\ 10} \rangle + (E'_{n_y=1} - E_{n_y=0}) \langle \psi_{00\ 10} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 10} \rangle \right) \leq \\ 2 + \lambda_s \left( \frac{1}{\omega_0 \omega_2} + \frac{3}{\omega_2^2} \right) \quad \text{(III.42)} \end{aligned}$$

$$\text{Nous avons [17]: } \langle \psi_{00\ 10} | \hat{x}^2 | \psi_{00\ 10} \rangle = \frac{1}{2\omega_0}, \quad \langle \psi_{00\ 10} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 10} \rangle = \frac{1}{2\omega_2} \quad \text{(III.43)}$$

$$\text{et : } E'_{n_x=1} - E_{n_x=0} = 2\omega_0 + \omega_3 - \omega_2, \quad E'_{n_y=1} - E_{n_y=0} = 3\omega_3 - \omega_2$$

Portant (III.43) dans (III.42), nous aboutissons à :

$$1 + \frac{\omega_3 - \omega_2}{2\omega_0} + \frac{3\omega_3 - \omega_2}{2\omega_2} \leq 2 + \lambda_s \left( \frac{1}{\omega_0 \omega_2} + \frac{3}{\omega_2^2} \right) \quad (\text{III.44})$$

En tenant compte de (III.39), nous écrivons :  $\frac{\omega_3 - \omega_2}{2\omega_0} = \frac{\lambda_s}{\omega_0^2}$  et en prenant en considération les résultats (III.40), l'inégalité (III.44) est vérifiée sans être saturée :

$$2 + \frac{4\lambda_s}{\omega_0^2} + \frac{3\lambda_s^2}{\omega_0^4} \leq 2 + \frac{4\lambda_s}{\omega_0^2} + \frac{7\lambda_s^2}{\omega_0^4} \quad (\text{III.45})$$

Nous abordons, à présent, l'établissement de la relation cherchée par la méthode des perturbations puisqu'on a été amené à poser des approximations pour  $\omega_2$  et  $\omega_3$  pour vérifier le caractère des relations déduites de la valeur moyenne du double commutateur entre l'hamiltonien et l'opérateur de transition considéré.

### I.2.3. Résolution par la méthode des perturbations

Si nous considérons que  $\lambda_s = \omega_0^2$ , l'hamiltonien s'écrit comme suit :

$$H = H_0 + W \quad (W = \text{perturbation}) \quad (\text{III.46})$$

avec :  $W = H_s = 2 \lambda_s \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} y^2$

Supposons que la perturbation est telle que l'on pousse le calcul des corrections jusqu'au 2<sup>ème</sup> ordre.

\* Les énergies de ce système sont données par l'expression suivante [23] :

$$E_{n_x n_y} = E_{n_x n_y}^D + \Delta E_{n_x n_y}^1 + \Delta E_{n_x n_y}^2 \quad (\text{III.47})$$

où  $E_{n_x n_y}^D$  sont représentées par (II.28).

Les corrections au 1<sup>er</sup> et 2<sup>ème</sup> ordres s'écrivent respectivement [23]:

$$\Delta E_{n_x n_y}^1 = \left\langle \psi_{n_x n_y, SM_s} \left| W \right| \psi_{n_x n_y, SM_s} \right\rangle \quad (\text{III.48})$$

$$\Delta E_{n_x n_y}^2 = \sum_{n_x n_y \neq m_x m_y} \frac{\left| \left\langle \psi_{n_x n_y, SM_s} \left| W \right| \psi_{m_x m_y, SM_s} \right\rangle \right|^2}{E_{n_x n_y}^D - E_{m_x m_y}^D}$$

\* Le fondamental corrigé, au 1<sup>er</sup> ordre des perturbations, est donné par l'expression suivante (voir appendice D) :

$$|\psi_{00\ 00}\rangle' = |00\rangle_{esp} |00\rangle_{sp} + \frac{\lambda_s}{2\sqrt{2}\omega_0^2} |02\rangle_{esp} |00\rangle_{sp} \quad (\text{III.49})$$

Reprenons la détermination, dans l'état fondamental, de la valeur moyenne du double commutateur qui nous intéresse pour différents cas de transition dipolaire.

- Si nous considérons l'échange entre les deux particules, les énergies  $E_{n_x n_y}$  sont données par (voir appendice D) :

$$\begin{aligned} E_{n_x=0\ n_y=0} &= 2\omega_0 - \frac{\lambda_s}{\omega_0} - \frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \\ E_{n_x=1\ n_y=0} &= 4\omega_0 - \frac{\lambda_s}{\omega_0} - \frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \\ E_{n_x=0\ n_y=1} &= 4\omega_0 - \frac{3\lambda_s}{\omega_0} - \frac{3\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \\ E'_{n_x=0\ n_y=1} &= 4\omega_0 + \frac{3\lambda_s}{\omega_0} - \frac{3\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \end{aligned} \quad (\text{III.50})$$

- Si nous ne considérons pas l'échange entre les deux particules (les états sont quelconques), les énergies  $E'_{n_x n_y}$  sont données par (voir appendice D) :

$$\begin{aligned} E_{n_x=0\ n_y=0} &= 2\omega_0 - \frac{\lambda_s}{\omega_0} - \frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \\ E_{n_x=1\ n_y=0} &= 4\omega_0 - \frac{\lambda_s}{\omega_0} - \frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \\ E'_{n_x=1\ n_y=0} &= 4\omega_0 + \frac{\lambda_s}{\omega_0} - \frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \\ E_{n_x=0\ n_y=1} &= 4\omega_0 - \frac{3\lambda_s}{\omega_0} - \frac{3\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \end{aligned} \quad (\text{III.51})$$

### I.2.3.1. Avec renversement de spin et avec échange des deux particules

Le calcul de  $\left[ [H_s, \hat{\sigma}_1], \hat{\sigma}_1 \right]$  nous donne (III.33):

$$\left[ [H_s, \hat{\sigma}_1], \hat{\sigma}_1 \right] = 4 \lambda_s \hat{y}^2 (\hat{x} + \hat{y})^2 \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z}$$

La valeur moyenne de  $\left[ \left[ H_s, \hat{\sigma}_1 \right], \hat{\sigma}_1 \right]$  donnée par (III.33) dans l'état fondamental corrigé  $|\psi_{00\ 00}\rangle$  est donnée comme suit :

$$\langle \psi_{00\ 00} | \left[ \left[ H_s, \hat{\sigma}_1 \right], \hat{\sigma}_1 \right] | \psi_{00\ 00} \rangle = -\frac{4\lambda_s}{\omega_0^2} - \frac{7\lambda_s^2}{\omega_0^4} \quad (\text{III.52})$$

Nous avons:  $\left[ \left[ H_0, \hat{\sigma}_1 \right], \hat{\sigma}_1 \right] = -2$  et la valeur moyenne de  $\left[ \left[ H, \hat{\sigma}_1 \right], \hat{\sigma}_1 \right]$  dans  $|\psi_{00\ 00}\rangle$  s'écrit :

$$\langle \psi_{00\ 00} | \left[ \left[ H, \hat{\sigma}_1 \right], \hat{\sigma}_1 \right] | \psi_{00\ 00} \rangle = -2 - \frac{4\lambda_s}{\omega_0^2} - \frac{29\lambda_s^2}{4\omega_0^4} \quad (\text{III.53})$$

La règle de somme recherchée dans ce cas s'écrit comme suit:

$$\sum_{n_x n_y, SM_S} (E_{n_x} - E_{n_x=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \sigma_{1x} \hat{x} | \psi_{n_x n_y, SM_S} \rangle \right|^2 + \sum_{n_x n_y, SM_S} (E_{n_y} - E_{n_y=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \sigma_{1x} \hat{y} | \psi_{n_x n_y, SM_S} \rangle \right|^2 = 2 + \frac{4\lambda_s}{\omega_0^2} + \frac{29\lambda_s^2}{4\omega_0^4} \quad (\text{III.54})$$

En séparant en 2 règles de somme et en les minorant, on obtient:

$$(E'_{n_y=1} - E_{n_y=0}) \langle \psi_{00\ 00} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle \leq 1 + \frac{4\lambda_s}{\omega_0^2} + \frac{29\lambda_s^2}{4\omega_0^4} \quad (\text{III.55})$$

Remplaçons  $\langle \psi_{00\ 00} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle = \frac{1}{2\omega_0} + \frac{\lambda_s}{2\omega_0^3}$  et  $E'_{n_x=0\ n_y=1} - E_{n_x=0\ n_y=0} = 2\omega_0 + \frac{4\lambda_s}{\omega_0^2} - \frac{\lambda_s^2}{\omega_0^3}$  dans (III.55), nous obtenons une inégalité :

$$1 + \frac{3\lambda_s}{\omega_0^2} + \frac{3\lambda_s^2}{2\omega_0^4} \leq 1 + \frac{4\lambda_s}{\omega_0^2} + \frac{29\lambda_s^2}{4\omega_0^4} \quad (\text{III.56})$$

### I.2.3.2. Avec renversement de spin et sans échange des deux particules

Si l'on considère que les états propres sont quelconques, la règle de somme recherchée dans ce cas s'écrit comme suit (III.54):

$$\sum_{n_x n_y, SM_S} (E_{n_x} - E_{n_x=0}) \left| \langle \psi_{00\ 10} | \sigma_{1x} \hat{x} | \psi_{n_x n_y, SM_S} \rangle \right|^2 + \sum_{n_x n_y, SM_S} (E_{n_y} - E_{n_y=0}) \left| \langle \psi_{00\ 10} | \sigma_{1x} \hat{y} | \psi_{n_x n_y, SM_S} \rangle \right|^2 = 2 + \frac{4\lambda_s}{\omega_0^2} + \frac{29\lambda_s^2}{4\omega_0^4}$$

On peut « minorer » cette somme en remplaçant  $E_{n_x}$  par  $E'_{n_x=1}$  et  $E_{n_y}$  par  $E'_{n_y=1}$ , on obtient alors :

$$\left( (E'_{n_x=1} - E_{n_x=0}) \langle \psi_{00\ 10} | \hat{x}^2 | \psi_{00\ 10} \rangle + (E'_{n_y=1} - E_{n_y=0}) \langle \psi_{00\ 10} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 10} \rangle \right) \leq 2 + \frac{4\lambda_s}{\omega_0^2} + \frac{29\lambda_s^2}{4\omega_0^4} \quad (\text{III.57})$$

En portant  $\langle \psi_{00\ 10} | \hat{x}^2 | \psi_{00\ 10} \rangle = \frac{1}{2\omega_0}$ ,  $\langle \psi_{00\ 10} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 10} \rangle = \frac{1}{2\omega_0} + \frac{\lambda_s}{2\omega_0^3}$

et  $E'_{n_x=1} - E_{n_x=0} = 2\omega_0 + \frac{2\lambda_s}{\omega_0}$ ,  $E'_{n_x=0\ n_y=1} - E_{n_x=0\ n_y=0} = 2\omega_0 + \frac{4\lambda_s}{\omega_0^2} - \frac{\lambda_s^2}{\omega_0^3}$

dans (III.57), nous aboutissons à :

$$2 + \frac{4\lambda_s}{\omega_0^2} + \frac{3\lambda_s^2}{2\omega_0^4} \leq 2 + \frac{4\lambda_s}{\omega_0^2} + \frac{29\lambda_s^2}{4\omega_0^4} \quad (\text{III.58})$$

L'inégalité (III.58) est bien vérifiée mais non saturée. Notons que nous retombons sur la saturation de l'inégalité si  $\lambda_s$  est nul c.à.d. dans le cas où l'interaction est indépendante des spins.

Ce calcul faisant intervenir la méthode des perturbations fait bien ressortir la non saturation de l'inégalité de Bertlmann et Martin qui nous intéresse et ceci parce que le changement d'orientation du spin fait passer de l'espace singulet à l'espace triplet associés à des hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques avec des fréquences différentes ; les transitions mises en jeu font intervenir des fonctions d'onde non orthogonales entre elles.

## **II. Cas de deux oscillateurs harmoniques interagissant par une interaction gaussienne indépendante des spins**

Nous ajoutons à l'hamiltonien  $H_0$  un terme  $H_g$  représentant l'interaction gaussienne entre les deux particules et nous introduisons là aussi le changement de variables (III.2)

$$H' = p_x^2 + p_y^2 + \omega_0^2 x^2 + \omega_0^2 y^2 + \lambda e^{-2y^2}$$

$$H' = H_0 + H_g \quad (\text{III.59})$$

avec :  $H_g = \lambda e^{-(x_1+x_2)^2} = \lambda e^{-2y^2}$

Comme nous ne pouvons pas traiter ce problème par un calcul exact, nous utilisons la méthode des perturbations où nous considérons que  $\lambda \leq \omega_0^2$ .

$$H' = H_0 + W' \quad (W' = H_g : \text{perturbation})$$

Si nous poussons les corrections au 2<sup>ème</sup> ordre du calcul des perturbations, les énergies de ce système sont alors données par l'expression suivante (III.47) :

$$E_{n_x n_y} = E_{n_x n_y}^D + \Delta E_{n_x n_y}^1 + \Delta E_{n_x n_y}^2$$

Les énergies de l'état fondamental et des 1<sup>ers</sup> excités sont données respectivement par (voir appendice D) :

$$\begin{aligned} E_{n_x=0 n_y=0} &= 2\omega_0 + \lambda \left( 1 - \frac{1}{\omega_0} + \frac{3}{2\omega_0^2} \right) - \frac{\lambda^2}{2\omega_0^3} + \frac{3\lambda^2}{\omega_0^4} \\ E_{n_x=1 n_y=0} &= 4\omega_0 + \lambda \left( 1 - \frac{1}{\omega_0} + \frac{3}{2\omega_0^2} \right) - \frac{\lambda^2}{2\omega_0^3} + \frac{3\lambda^2}{\omega_0^4} \\ E_{n_x=0 n_y=1} &= 4\omega_0 + \lambda \left( 1 - \frac{3}{\omega_0} + \frac{15}{2\omega_0^2} \right) - \frac{3\lambda^2}{2\omega_0^3} + \frac{15\lambda^2}{\omega_0^4} \end{aligned} \quad \text{(III.60)}$$

L'état propre du fondamental corrigé s'écrit (voir appendice D) :

$$|\psi_{00\ 00}\rangle' = |00\rangle_{esp} |00\rangle_{sp} - \frac{\lambda}{2\sqrt{2}} \left( -\frac{1}{\omega_0^2} + \frac{3}{\omega_0^3} \right) |02\rangle_{esp} |00\rangle_{sp} - \frac{\sqrt{6}\lambda}{8} \frac{1}{\omega_0^3} |04\rangle_{esp} |00\rangle_{sp} \quad \text{(III.61)}$$

Nous nous intéressons à la saturation de l'IBM dans le cas d'une interaction gaussienne en considérant différentes transitions dipolaires possibles.

## II.1. Avec renversement de spin et échange des particules

Nous effectuons les mêmes calculs que pour l'interaction harmonique en prenant comme opérateur de transition:  $\hat{o} = \hat{o}_1$  ou  $\hat{o}_2$  avec  $\hat{o}_1 = \sigma_{1x} \hat{x}_1$  et  $\hat{o}_2 = \sigma_{2x} \hat{x}_2$

Les états propres non corrigés sont donnés par (III.8).

Calculons la valeur moyenne du double commutateur de  $H'$  avec  $\hat{o}_1$  pour obtenir la règle de somme recherchée dans ce cas.

Puisque  $\left[ \left[ H', \hat{o}_1 \right], \hat{o}_1 \right] = \left[ \left[ H_0, \hat{o}_1 \right], \hat{o}_1 \right] = -2\sigma_{1x}^2 = -2$ , la valeur moyenne de ce double commutateur dans l'état  $|\psi_{00\ 00}\rangle'$  est donnée par :

$$\langle \psi_{00\ 00} | \left[ \left[ H', \hat{o}_1 \right], \hat{o}_1 \right] | \psi_{00\ 00} \rangle' = -2 - \frac{\lambda^2}{4\omega_0^4} \quad \text{(III.62)}$$

La relation recherchée dans ce cas est établie de la même façon que dans (III.54), d'où :

$$\sum_{n_x n_y SM_S} (E_{n_x} - E_{n_x=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \sigma_{1x} \hat{x} | \psi_{n_x n_y SM_S} \rangle \right|^2 + \sum_{n_x n_y SM_S} (E_{n_y} - E_{n_y=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \sigma_{1x} \hat{y} | \psi_{n_x n_y SM_S} \rangle \right|^2 = 2 + \frac{\lambda^2}{4\omega_0^4} \quad (\text{III.63})$$

Elle peut être décomposée en 2 relations que l'on minore en remplaçant  $E_{n_y}$  par  $E_{n_y=1}$  où  $E_{n_y=1}$  est l'énergie de l'état le plus bas atteint par l'opérateur de transition  $\sigma_{1x} \hat{y}$  (la transition suivant l'opérateur  $\sigma_{1x} \hat{x}$  n'est pas possible) on obtient alors :

$$(E_{n_y=1} - E_{n_y=0}) \langle \psi_{00\ 00} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle \leq 1 + \frac{\lambda^2}{4\omega_0^4} \quad (\text{III.64})$$

Nous vérifions la relation précédente en calculant le facteur de  $(E_{n_y=1} - E_{n_y=0})$  [17] :

$$\langle \psi_{00\ 00} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle = \frac{1}{2\omega_0} + \frac{\lambda}{2\omega_0^3} - \frac{3\lambda}{2\omega_0^4} \quad (\text{III.65})$$

et en remplaçant  $(E_{n_y=1} - E_{n_y=0}) = 2\omega_0 - \lambda \left( \frac{2}{\omega_0} - \frac{6}{\omega_0^2} \right) - \lambda^2 \left( \frac{1}{\omega_0^3} - \frac{12}{\omega_0^4} \right)$  dans (III.64) ; nous obtenons à une inégalité vérifiée mais non saturée :

$$1 - \frac{3\lambda^2}{2\omega_0^4} \leq 1 + \frac{\lambda^2}{4\omega_0^4} \quad (\text{III.66})$$

## II.2. Avec renversement de spin et sans échange des particules

Les états sont ceux donnés par (III.14).

La règle de somme est la même que dans le cas précédent (III.63). On peut « minorer » cette somme en remplaçant  $E_{n_x}$  par  $E_{n_x=1}$  et  $E_{n_y}$  par  $E_{n_y=1}$ ,

$$\left( (E_{n_x=1} - E_{n_x=0}) \langle \psi_{00\ 10} | \hat{x}^2 | \psi_{00\ 10} \rangle + (E_{n_y=1} - E_{n_y=0}) \langle \psi_{00\ 10} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 10} \rangle \right) \leq 2 + \frac{\lambda^2}{4\omega_0^4} \quad (\text{III.67})$$

Nous avons :

$$E_{n_x=1} - E_{n_x=0} = 2\omega_0 \text{ et } E_{n_y=1} - E_{n_y=0} = 2\omega_0 - \lambda \left( \frac{2}{\omega_0} - \frac{6}{\omega_0^2} \right) - \lambda^2 \left( \frac{1}{\omega_0^3} - \frac{12}{\omega_0^4} \right) \quad (\text{III.68})$$

$$\text{et : } \langle \psi_{00\ 10} | \hat{x}^2 | \psi_{00\ 10} \rangle = \frac{1}{2\omega_0}$$

Compte tenu de (III.65) nous obtenons:

$$2 - \frac{3\lambda^2}{2\omega_0^4} \leq 2 + \frac{\lambda^2}{4\omega_0^4} \quad \text{(III.69)}$$

Nous aboutissons aux mêmes conclusions que dans le cas d'une interaction harmonique dépendante des spins et ceci pour les mêmes raisons dues à la transition dipolaire avec changement d'orientation du spin : le renversement du spin entraîne une perte du caractère de saturation de l'IBM à cause de la transition d'un espace des états permis à l'autre, ces espaces n'étant plus orthogonaux.

# CONCLUSION GENERALE

## **CONCLUSION GENERALE**

Au cours de ce travail, nous avons étudié les propriétés d'une inégalité de Bertlmann et Martin (IBM) pour des systèmes où les degrés de liberté de spin sont pris en compte. Cette inégalité lie le rayon carré moyen du fondamental à la différence d'énergie entre le fondamental et le premier état excité vers lequel on considère une transition dipolaire.

Pour une meilleure illustration, nous avons brièvement rappelé, dans le premier chapitre, en quoi consistent les inégalités de Bertlmann et Martin, les conditions de leur applicabilité ainsi que les domaines dans lesquels notre groupe de travail les a appliquées.

Pour l'oscillateur harmonique, l'inégalité de Bertlmann et Martin est en réalité exacte (c'est une égalité) et il n'est pas nécessaire d'introduire un facteur correctif.

Nous nous sommes intéressés à des particules avec spin dans des champs harmoniques à une dimension indépendants et en interaction afin de vérifier si cette propriété reste vraie dans le cas où les degrés de liberté de spin sont introduits. Nous avons défini l'opérateur de transition dipolaire dans les cas où l'on tient compte ou non du renversement de spin ; nous avons également étudié l'influence des propriétés d'antisymétrie de la fonction d'onde sur la relation recherchée. Nous avons trouvé que la règle de somme portant uniquement sur les états antisymétriques devient égale à  $1/2$  et que nous ne pouvons pas tirer l'inégalité de Bertlmann et Martin à partir de cette règle de somme puisque nous ne savons pas ce que vaut la relation de fermeture sur les états antisymétriques. Cependant, à partir d'un calcul analytique (portant sur  $\langle \hat{x}^2 \rangle$  et  $(E_1 - E_0)$ ) il est possible d'écrire une égalité qui ressemble à celle que nous voulions déduire de la règle de somme portant sur les états antisymétriques.

Par la suite, nous avons introduit une interaction harmonique dépendante du spin que nous avons traitée, d'une part, de façon analytique en utilisant des approximations pour simplifier le calcul et, d'autre part, par la méthode des perturbations poussée jusqu'au 2<sup>ème</sup> ordre.

Là aussi, nous avons considéré le cas où l'on tient compte ou non du changement d'orientation du spin ainsi que l'influence des propriétés d'antisymétrie de la fonction d'onde totale sur la relation établie.

Cette étude montre que l'inégalité de Bertlmann et Martin est saturée dans le cas où il n'y a pas de renversement de spin et comme, le fondamental est un état singulet, on se retrouve comme dans l'espace ordinaire de l'oscillateur harmonique.

La relation cherchée est une inégalité non saturée s'il y a changement d'orientation du spin.

Dans une dernière application, nous avons repris les calculs avec la méthode des perturbations pour étudier le cas d'une interaction gaussienne indépendante des spins entre les deux fermions considérés. La relation établie, dans ce cas, n'est pas saturée comme dans le cas de l'interaction harmonique dépendante du spin avec renversement du spin.

Compte tenu de l'ensemble des résultats obtenus, nous concluons que, dans le cas des champs harmoniques indépendants où les degrés de liberté de spin sont introduits, l'inégalité de Bertlmann et Martin qui lie le rayon carré moyen à la différence d'énergie la plus basse reste saturée et que donc le 1<sup>er</sup> état excité emporte toute la règle de somme dans le cas où nous ne tenons pas compte de l'antisymétrie de la fonction d'onde totale. Il en est de même pour des oscillateurs harmoniques en interaction tant qu'il n'y a pas de renversement de spin.

A cause de la dépendance en spin de l'interaction, les potentiels et donc les fréquences ne sont pas identiques pour les ensembles triplet et singulet. L'espace triplet ne peut être atteint, à partir du fondamental du système, que par une transition avec renversement de spin. Donc, les transitions d'un espace à l'autre fait intervenir des fonctions d'onde qui ne sont plus orthogonales et les éléments de matrice apparaissant dans les règles de somme ne sont plus nuls car ils font intervenir la transition de spin. Ceci explique pourquoi l'IBM cherchée n'est plus saturée bien qu'elle soit vérifiée.

Comme perspectives, nous pourrions également reprendre notre étude à trois dimensions. Dans ce cas, il faudrait redéfinir l'interaction entre les particules ainsi que l'opérateur de transition. Nous pourrions alors traiter le cas du potentiel coulombien pour lequel nous essaierions de retrouver le facteur correctif qui, dans le cas où les spins sont négligés, vaut  $1/4$ .

# APPENDICES

## Appendice A

### Expression de l'hamiltonien de deux oscillateurs harmoniques sans interaction lors d'un changement de variables

Dans ce système, l'hamiltonien  $H_0$  s'écrit comme suit :

$$H_0 = -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \omega_0^2 x_1^2 + \omega_0^2 x_2^2 \quad (\text{A.1})$$

Signalons que nous avons posé  $\hbar = 1 = 2m$  et que :  $\omega_0 = \frac{\omega}{2}$  ( $\omega$  étant la fréquence habituellement adopté dans la littérature avec :  $H_0 = p_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ ).

Ecrivons l'hamiltonien  $H_0$  en fonction de  $x$  et  $y$

Considérons le changement de variables suivant :

$$x = \frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}}; \quad y = \frac{x_1 - x_2}{\sqrt{2}} \quad (\text{A.2})$$

Utilisons (A.2), nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} &= \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_1} & \frac{\partial}{\partial x_1} &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial x_1} \\ \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} &= \frac{\partial}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial x_2} & \frac{\partial}{\partial x_2} &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial x_2} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

et :

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial x_1} &= \frac{\partial y}{\partial x_1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{\partial x}{\partial x_2} &= -\frac{\partial y}{\partial x_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Portons (A.4) dans (A.3)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_1} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) & \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \right) & \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Nous aboutissons à :

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad (\text{A.6})$$

En tenant compte de (A.6), l'hamiltonien  $H_0$  devient :

$$H_0 = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \omega_0^2 x^2 + \omega_0^2 y^2 \quad (\text{A.7})$$

Nous nous plaçons dans le cas où  $V(x) = \omega_0^2 x^2$  et  $V(y) = \omega_0^2 y^2$ , ce qui nous donne pour les fonctions d'onde spatiales correspondantes  $\psi_{n_x n_y}^{esp}(x, y)$  [18]:

$$\psi_{n_x n_y}^{esp}(x, y) = \left( \frac{1}{(2\omega_0)^{n_1+n_2} n_1! n_2!} \right)^{1/2} \left( \frac{\omega_0}{\pi} \right)^{1/2} \left( \omega_0 x - \frac{\partial}{\partial x} \right)^{n_1} \left( \omega_0 y - \frac{\partial}{\partial y} \right)^{n_2} e^{-\frac{1}{2}\omega_0(x^2+y^2)} \quad (\text{A.8})$$

“esp” désigne la partie spatiale de la fonction d'onde.

Les énergies sont données par :

$$E_{N = n_x + n_y} = 2\omega_0 (N + 1) \quad (\text{A.9})$$

## Appendice B

### Calcul de la valeur moyenne du double commutateur de $H'_0$ avec l'opérateur de transition dipolaire

Considérons un système de deux oscillateurs harmoniques à une dimension, l'hamiltonien  $H'_0$  s'écrit comme suit :

$$H'_0 = p_{x_1}^2 + p_{x_2}^2 + \omega_0^2 x_1^2 + \omega_0^2 x_2^2 + \Omega^2 (x_1 - x_2)^2$$

En utilisant le changement de variables suivant (A.2):

$$x = \frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}}; \quad y = \frac{x_1 - x_2}{\sqrt{2}}$$

L'hamiltonien  $H'_0$  devient :

$$H'_0 = p_x^2 + p_y^2 + \omega_0^2 x^2 + \omega_0^2 y^2 + 2\Omega^2 y^2 \quad (\text{B.1})$$

Nous pouvons écrire :

$$H'_0 = H'_{0_x} + H'_{0_y}$$

Avec :  $H'_{0_x} = p_x^2 + \omega_0^2 x^2$  et  $H'_{0_y} = p_y^2 + \omega_1^2 y^2$  où :  $\omega_1^2 = \omega_0^2 + 2\Omega^2$

Nous cherchons à calculer la valeur moyenne du double commutateur de l'hamiltonien  $H'_0$  avec l'opérateur de transition dipolaire  $\hat{o}_1$  qui peut être défini de deux façons :

$\hat{o}_1 = \hat{x}_1$  si l'on ne considère pas le changement d'orientation des spins.

ou :

$\hat{o}_1 = \sigma_{1x} \hat{x}_1$  quand il y a changement d'orientation des spins.

Rappelons que nous considérons la transition d'une particule à la fois.

$|\psi_{n_x n_y, SM_s}\rangle = |n_x n_y\rangle_{esp} |SM_s\rangle_{sp}$  l'état propre de  $H'_0$

#### 1/ Sans renversement de spin

Calculons le commutateur et le double commutateur entre  $H'_0$  et l'opérateur  $\hat{x}_1$

$$[H'_0, \hat{x}_1] = \frac{1}{\sqrt{2}} [H'_{0_x} + H'_{0_y}, \hat{x} + \hat{y}] = \frac{1}{\sqrt{2}} [H'_{0_x}, \hat{x}] + \frac{1}{\sqrt{2}} [H'_{0_y}, \hat{y}] \quad (\text{B.2})$$

$$[[H'_0, \hat{x}_1], \hat{x}_1] = \frac{1}{2} [[H'_{0_x}, \hat{x}], \hat{x} + \hat{y}] + \frac{1}{2} [[H'_{0_y}, \hat{y}], \hat{x} + \hat{y}] = \frac{1}{2} [[H'_{0_x}, \hat{x}], \hat{x}] + \frac{1}{2} [[H'_{0_y}, \hat{y}], \hat{y}] \quad (\text{B.3})$$

Comme  $[[H'_{0_x}, \hat{x}], \hat{x}] = [[H'_{0_y}, \hat{y}], \hat{y}] = -2$ , nous aboutissons à :

$$[[H'_0, \hat{x}_1], \hat{x}_1] = -2 \quad (\text{B.4})$$

La valeur moyenne de ce double commutateur dans l'état fondamental  $|\psi_{00\ 00}\rangle = |00\rangle_{esp} |00\rangle_{sp}$  est donnée par :

$$\langle \psi_{00\ 00} | [[H'_0, \hat{x}_1], \hat{x}_1] | \psi_{00\ 00} \rangle = -2 \quad (\text{B.5})$$

D'autre part, le double commutateur de  $H'_0$  avec l'opérateur  $\hat{x}_1$  peut être donné sous une autre forme, nous écrivons :

$$\begin{aligned} [[H'_0, \hat{x}_1], \hat{x}_1] &= \frac{1}{2} [[H'_{0_x}, \hat{x}], \hat{x}] + \frac{1}{2} [[H'_{0_y}, \hat{y}], \hat{y}] \\ &= \frac{1}{2} [H'_{0_x} \hat{x}^2 - 2 \hat{x} H'_{0_x} \hat{x} + \hat{x}^2 H'_{0_x}] + \frac{1}{2} [H'_{0_y} \hat{y}^2 - 2 \hat{y} H'_{0_y} \hat{y} + \hat{y}^2 H'_{0_y}] \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

La valeur moyenne de ce double commutateur dans l'état fondamental  $|\psi_{00\ 00}\rangle$  s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned} \langle \psi_{00\ 00} | [[H'_0, \hat{x}_1], \hat{x}_1] | \psi_{00\ 00} \rangle &= \frac{1}{2} \langle \psi_{00\ 00} | H'_{0_x} \hat{x}^2 - 2 \hat{x} H'_{0_x} \hat{x} + \hat{x}^2 H'_{0_x} | \psi_{00\ 00} \rangle \\ &\quad + \frac{1}{2} \langle \psi_{00\ 00} | H'_{0_y} \hat{y}^2 - 2 \hat{y} H'_{0_y} \hat{y} + \hat{y}^2 H'_{0_y} | \psi_{00\ 00} \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

La relation (B.7) donne :

$$\begin{aligned} \langle \psi_{00\ 00} | [[H'_0, \hat{x}_1], \hat{x}_1] | \psi_{00\ 00} \rangle &= \frac{1}{2} [2 E_{n_x=0} \langle \psi_{00\ 00} | \hat{x}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle - 2 \langle \psi_{00\ 00} | \hat{x} H'_{0_x} \hat{x} | \psi_{00\ 00} \rangle] \\ &\quad + \frac{1}{2} [2 E_{n_y=0} \langle \psi_{00\ 00} | \hat{y}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle - 2 \langle \psi_{00\ 00} | \hat{y} H'_{0_y} \hat{y} | \psi_{00\ 00} \rangle] \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Introduisons la relation de fermeture  $\sum_{n_x n_y SM_s} |\psi_{n_x n_y SM_s}\rangle \langle \psi_{n_x n_y SM_s}| = 1$

$$\begin{aligned} \langle \psi_{00\ 00} | [[H'_0, \hat{x}_1], \hat{x}_1] | \psi_{00\ 00} \rangle &= \sum_{n_x n_y SM_s} E_{n_x=0} \left| \langle \psi_{00\ 00} | \hat{x} | \psi_{n_x n_y SM_s} \rangle \right|^2 - \sum_{n_x n_y SM_s} E_{n_x} \left| \langle \psi_{00\ 00} | \hat{x} | \psi_{n_x n_y SM_s} \rangle \right|^2 \\ &\quad + \sum_{n_x n_y SM_s} E_{n_y=0} \left| \langle \psi_{00\ 00} | \hat{y} | \psi_{n_x n_y SM_s} \rangle \right|^2 - \sum_{n_x n_y SM_s} E_{n_y} \left| \langle \psi_{00\ 00} | \hat{y} | \psi_{n_x n_y SM_s} \rangle \right|^2 \\ &= - \sum_{n_x n_y SM_s} (E_{n_x} - E_{n_x=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \hat{x} | \psi_{n_x n_y SM_s} \rangle \right|^2 - \sum_{n_x n_y SM_s} (E_{n_y} - E_{n_y=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \hat{y} | \psi_{n_x n_y SM_s} \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Nous comparons (B.5) avec (B.9), nous obtenons une règle de somme se mettant sous la forme ;

$$\sum_{n_x n_y SM_s} (E_{n_x} - E_{n_x=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \hat{x} | \psi_{n_x n_y SM_s} \rangle \right|^2 + \sum_{n_x n_y SM_s} (E_{n_y} - E_{n_y=0}) \left| \langle \psi_{00\ 00} | \hat{y} | \psi_{n_x n_y SM_s} \rangle \right|^2 = 2 \quad (\text{B.10})$$

2/ Avec renversement de spin

Rappelons que l'opérateur de transition dipolaire s'écrit dans ce cas :

$$\hat{\sigma}_1 = \hat{\sigma}_{1x} \hat{x}_1 = \hat{\sigma}_{1x} \left( \frac{\hat{x} + \hat{y}}{\sqrt{2}} \right) \quad (\text{B.11})$$

Calculons le commutateur et le double commutateur entre  $H'_0$  et l'opérateur  $\hat{\sigma}_1$

$$[H'_0, \hat{\sigma}_1] = \frac{1}{\sqrt{2}} [H'_{0x}, \sigma_{1x} \hat{x}] + \frac{1}{\sqrt{2}} [H'_{0y}, \sigma_{1x} \hat{y}] = \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_{1x} [H'_{0x}, \hat{x}] + \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_{1x} [H'_{0y}, \hat{y}] \quad (\text{B.12})$$

et :

$$[[H'_0, \hat{\sigma}_1], \hat{\sigma}_1] = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_{1x} [[H'_{0x}, \hat{x}], \hat{\sigma}_{1x} \hat{x}] + \frac{1}{2} \hat{\sigma}_{1x} [[H'_{0y}, \hat{y}], \hat{\sigma}_{1x} \hat{y}] = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_{1x}^2 [[H'_{0x}, \hat{x}], \hat{x}] + \frac{1}{2} \hat{\sigma}_{1x}^2 [[H'_{0y}, \hat{y}], \hat{y}] \quad (\text{B.13})$$

Comme  $\hat{\sigma}_{1x}^2 = 1$ , nous aboutissons au même calcul que (B.4)

$$[[H'_0, \hat{\sigma}_1], \hat{\sigma}_1] = -2 \quad (\text{B.14})$$

D'autre part, le double commutateur de  $H'_0$  avec l'opérateur  $\hat{\sigma}_1$  peut être donné sous une autre forme, nous écrivons :

$$\begin{aligned} [[H'_0, \hat{\sigma}_1], \hat{\sigma}_1] &= \frac{1}{2} \hat{\sigma}_{1x}^2 [[H'_{0x}, \hat{x}], \hat{x}] + \frac{1}{2} \hat{\sigma}_{1x}^2 [[H'_{0y}, \hat{y}], \hat{y}] \\ &= \frac{1}{2} \hat{\sigma}_{1x}^2 [H'_{0x} \hat{x}^2 - 2 \hat{x} H'_{0x} \hat{x} + \hat{x}^2 H'_{0x}] + \frac{1}{2} \hat{\sigma}_{1x}^2 [H'_{0y} \hat{y}^2 - 2 \hat{y} H'_{0y} \hat{y} + \hat{y}^2 H'_{0y}] \end{aligned}$$

Puisque  $\langle \psi_{00\ 00} | \hat{\sigma}_{1x}^2 | \psi_{00\ 00} \rangle = 1$ , nous aboutissons à la même règle de somme donnée par (B.10).

## Appendice C

### Calcul du double commutateur de $H_s$ avec $\hat{\sigma}_1$

L'hamiltonien  $H_s$  est donné par :

$$H_s = \lambda_s \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} (\hat{x}_1 - \hat{x}_2)^2 = 2 \lambda_s \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} \hat{y}^2 \quad (\text{C.1})$$

Calculons le commutateur et le double commutateur entre  $H_s$  et l'opérateur  $\hat{\sigma}_1$

$$[H_s, \hat{\sigma}_1] = 2 \lambda_s \hat{y}^2 [\hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z}, \hat{\sigma}_{1x}] \frac{\hat{x} + \hat{y}}{\sqrt{2}} = 2 \sqrt{2} i \lambda_s \hat{y}^2 (\hat{x} + \hat{y}) \hat{\sigma}_{1y} \hat{\sigma}_{2z} \quad (\text{C.2})$$

$$[[H_s, \hat{\sigma}_1], \hat{\sigma}_1] = 2 \sqrt{2} i \lambda_s \hat{y}^2 (\hat{x} + \hat{y}) [\hat{\sigma}_{1y} \hat{\sigma}_{2z}, \hat{\sigma}_{1x}] \frac{\hat{x} + \hat{y}}{\sqrt{2}} = 4 \lambda_s \hat{y}^2 (\hat{x} + \hat{y})^2 \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} \quad (\text{C.3})$$

Rappelons que :  $[\hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z}, \hat{\sigma}_{1x}] = 2 i \hat{\sigma}_{1y} \hat{\sigma}_{2z}$

## Appendice D

### Méthode des perturbations

#### 1. Interaction harmonique

Considérons un système d'hamiltonien  $H$  donné par :

$$H = H_0 + H_s \quad (H_s = \text{perturbation}) \quad (\text{D.1})$$

$$\text{avec : } H_s = W = 2 \lambda_s \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} y^2$$

Au 2<sup>ème</sup> ordre, les énergies de ce système sont données par l'expression suivante :

$$E_N = E_{n_1 n_2} = E_{n_1 n_2}^0 + \Delta E_{n_1 n_2}^1 + \Delta E_{n_1 n_2}^2 \quad (\text{D.2})$$

Les énergies  $E_{n_1 n_2}^0$  sont données par (A.10)

$$\text{avec : } \Delta E_{n_1 n_2}^1 = \langle \psi_{n_1 n_2} | W | \psi_{n_1 n_2} \rangle \quad \text{et : } \Delta E_{n_1 n_2}^2 = \sum_{n_1 n_2 \neq m_1 m_2} \frac{|\langle \psi_{n_1 n_2} | W | \psi_{m_1 m_2} \rangle|^2}{E_{n_1 n_2}^0 - E_{m_1 m_2}^0} \quad (\text{D.3})$$

Cherchons les énergies de l'état fondamental  $E_0 \equiv E_{00}$  et le 1<sup>er</sup> excité  $E_1 \equiv E_{10} = E_{01}$  dans le cas où nous prenons comme états propres de ce système les états antisymétriques qui s'écrivent comme suit :

$$|\psi_{00\ 00}\rangle = |00\rangle_{\text{esp}} |00\rangle_{\text{sp}} \quad \text{et} \quad |\psi_{10\ 00}\rangle = |10\rangle_{\text{esp}} |00\rangle_{\text{sp}} \quad \text{ou} \quad |\psi_{01\ 1M_s}\rangle = |01\rangle_{\text{esp}} |1M_s\rangle_{\text{sp}}$$

- **Pour le fondamental :**  $E_{00}^0 = 2\omega_0$

Déterminons la correction en énergie  $\Delta E_{00}^1$  :

$$\begin{aligned} \Delta E_{00}^1 &= \langle \psi_{00\ 00} | W | \psi_{00\ 00} \rangle = 2\lambda_s \langle \psi_{00\ 00} | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} y^2 | \psi_{00\ 00} \rangle \\ &= 2\lambda_s \langle \psi_{00} | y^2 | \psi_{00} \rangle_{\text{esp}} \langle \psi_{00} | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} | \psi_{00} \rangle_{\text{sp}} \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

Calculons  $\langle \psi_{00} | y^2 | \psi_{00} \rangle_{\text{esp}}$  et  $\langle \psi_{00} | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} | \psi_{00} \rangle_{\text{sp}}$  :

$$\begin{aligned} {}_{\text{sp}} \langle \psi_{00} | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} | \psi_{00} \rangle_{\text{sp}} &= {}_{\text{sp}} \langle 00 | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} | 00 \rangle_{\text{sp}} \\ &= \frac{1}{2} (\langle ++ | \langle +- | - \langle +- | \langle ++ \rangle \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} (|++\rangle |+-\rangle - |-+\rangle |++\rangle)) \\ &= \frac{1}{2} (\langle ++ | \langle +- | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} | ++ \rangle |+-\rangle + \langle +- | \langle ++ | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} | +- \rangle |++\rangle) \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Rappelons que :

$$\hat{\sigma}_{1z} |++\rangle = |++\rangle \quad \text{et} \quad \hat{\sigma}_{1z} |--\rangle = -|--\rangle \quad (\text{D.6})$$

Nous aboutissons à

$${}_{sp} \langle \psi_{00} | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} | \psi_{00} \rangle_{sp} = -1 \quad (\text{D.7})$$

${}_{esp} \langle \psi_{00} | y^2 | \psi_{00} \rangle_{esp} = \frac{1}{2\omega_0}$  et en portant (D.7) dans (D.4), nous obtenons :

$$\Delta E_{00}^1 = 2\lambda_s \frac{1}{2\omega_0} (-1) = -\frac{\lambda_s}{\omega_0}$$

Calculons ensuite la correction en énergie  $\Delta E_{00}^2$  :

$$\Delta E_{00}^2 = \sum_{m_1 m_2, SM_s \neq 00} \frac{|\langle \psi_{00} | \mathbf{W} | \psi_{m_1 m_2, SM_s} \rangle|^2}{E_{00}^0 - E_{m_1 m_2}^0} \quad (\text{D.8})$$

$\mathbf{W}$  comporte  $\hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z}$  qui admet  $|00\rangle_{sp}$  comme vecteur propre, d'où :  $|SM_s\rangle = |00\rangle_{sp}$

Il reste à calculer  ${}_{esp} \langle 00 | \hat{y}^2 | m_1 m_2 \rangle_{esp}$  ; cet élément de matrice est nul si  $m_1 \neq 0$  et  $m_2 \neq 2$

d'où :

$$\Delta E_{00}^2 = \frac{|\langle \psi_{00} | \mathbf{W} | \psi_{02} \rangle|^2}{E_{00}^0 - E_{02}^0} = \frac{2\lambda_s^2 / \omega_0^2}{-4\omega_0} = -\frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^3}$$

L'énergie corrigée du fondamental  $E_{00}$  est donnée par :

$$E_{00} = 2\omega_0 - \frac{\lambda_s}{\omega_0} - \frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \quad (\text{D.9})$$

- **Pour le 1<sup>er</sup> excité** :  $E_{10}^0 = E_{01}^0 = 4\omega_0$  (dégénérée 2 fois)

Calculons la correction en énergie  $\Delta E_{10}^1$  :

$$\begin{aligned} \Delta E_{10}^1 &= \langle \psi_{10} | \mathbf{W} | \psi_{10} \rangle = 2\lambda_s \langle \psi_{10} | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} y^2 | \psi_{10} \rangle \\ &= 2\lambda_s {}_{esp} \langle \psi_{10} | y^2 | \psi_{10} \rangle_{esp} {}_{sp} \langle \psi_{00} | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} | \psi_{00} \rangle_{sp} \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

Nous obtenons :

$$\Delta E_{10}^1 = 2\lambda_s \frac{1}{2\omega_0} (-1) = -\frac{\lambda_s}{\omega_0}$$

Calculons la correction en énergie  $\Delta E_{10}^2$  :

$$\Delta E_{10}^2 = \sum_{m_1 m_2 \neq 10} \frac{|\langle \psi_{10\ 00} | \mathbf{W} | \psi_{m_1 m_2\ SM_s} \rangle|^2}{E_{10}^0 - E_{m_1 m_2}^0} = \frac{|\langle \psi_{10\ 00} | \mathbf{W} | \psi_{12\ 00} \rangle|^2}{E_{10}^0 - E_{12}^0} = \frac{2\lambda_s^2 / \omega_0^2}{-4\omega_0} = -\frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \quad (\text{D.11})$$

L'énergie corrigée du 1<sup>er</sup> excité  $E_{10}$  est donnée par :

$$E_{10} = 4\omega_0 - \frac{\lambda_s}{\omega_0} - \frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \quad (\text{D.12})$$

**Energie du 1<sup>er</sup> excité  $E_{01}$  :**

Calculons  $\Delta E_{01}^1$  :

$$\begin{aligned} \Delta E_{01}^1 &= \langle \psi_{01\ 1M_s} | \mathbf{W} | \psi_{01\ 1M_s} \rangle = 2\lambda_s \langle \psi_{01\ 1M_s} | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} y^2 | \psi_{01\ 1M_s} \rangle \\ &= 2\lambda_s \langle \psi_{01} | y^2 | \psi_{01} \rangle_{esp\ sp} \langle \psi_{1M_s} | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} | \psi_{1M_s} \rangle_{sp} \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

Nous obtenons :

$$M_s = 0 : \Delta E_{01}^1 = 2\lambda_s \frac{3}{2\omega_0} (-1) = -\frac{3\lambda_s}{\omega_0} \quad \text{et} \quad M_s = \pm 1 : \Delta E_{01}^1 = 2\lambda_s \frac{3}{2\omega_0} (+1) = +\frac{3\lambda_s}{\omega_0}$$

Calculons la correction en énergie  $\Delta E_{01}^2$  :

$$\Delta E_{01}^2 = \sum_{m_1 m_2 \neq 01} \frac{|\langle \psi_{01\ 1M_s} | \mathbf{W} | \psi_{m_1 m_2\ SM_s} \rangle|^2}{E_{01}^0 - E_{m_1 m_2}^0} = \frac{|\langle \psi_{01\ 1M_s} | \mathbf{W} | \psi_{03\ 1M_s} \rangle|^2}{E_{01}^0 - E_{03}^0} = \frac{6\lambda_s^2 / \omega_0^2}{-4\omega_0} = -\frac{3\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \quad (\text{D.14})$$

L'énergie corrigée du 1<sup>er</sup> excité  $E_{01}$  est donnée par :

$$M_s = 0 \quad E_{01} = 4\omega_0 - \frac{3\lambda_s}{\omega_0} - \frac{3\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \quad \text{et} \quad M_s = \pm 1 \quad E'_{01} = 4\omega_0 + \frac{3\lambda_s}{\omega_0} - \frac{3\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \quad (\text{D.15})$$

Si nous considérons que les états propres totaux de ce système sont quelconques, nous pouvons les écrire comme suit :

$$|\psi_{00\ 10}\rangle = |00\rangle_{esp} |10\rangle_{sp}, \quad |\psi_{10\ 1M_s}\rangle = |10\rangle_{esp} |1M_s\rangle_{sp} \quad \text{et} \quad |\psi_{01\ 10}\rangle = |01\rangle_{esp} |10\rangle_{sp}$$

Calculons les énergies de 1<sup>er</sup> et de 2<sup>ème</sup> état excité

- **Pour le fondamental :**  $E_{00}^0 = 2\omega_0$

Calculons la correction en énergie  $\Delta E_{00}^1$  :

$$\begin{aligned} \Delta E_{00}^1 &= \langle \psi_{00\ 10} | \mathbf{W} | \psi_{00\ 10} \rangle = 2\lambda_s \langle \psi_{00\ 10} | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} y^2 | \psi_{00\ 10} \rangle \\ &= 2\lambda_s \langle \psi_{00} | y^2 | \psi_{00} \rangle_{esp\ sp} \langle \psi_{10} | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} | \psi_{10} \rangle_{sp} \end{aligned} \quad (\text{D.16})$$

Nous obtenons :

$$\Delta E_{00}^1 = 2\lambda_s \frac{1}{2\omega_0} (-1) = -\frac{\lambda_s}{\omega_0}$$

Calculons la correction en énergie  $\Delta E_{10}^2$  :

$$\Delta E_{00}^2 = \sum_{m_1 m_2 \neq 00} \frac{|\langle \psi_{00 \ 10} | \mathbf{W} | \psi_{m_1 m_2 \ 5M_s} \rangle|^2}{E_{00}^o - E_{m_1 m_2}^o} = \frac{|\langle \psi_{00 \ 10} | \mathbf{W} | \psi_{02 \ 10} \rangle|^2}{E_{00}^o - E_{02}^o} = \frac{2\lambda_s^2 / \omega_0^2}{-4\omega_0} = -\frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \quad (\text{D.17})$$

L'énergie  $E_{00}$  corrigée est donnée par :

$$E_{00} = 2\omega_0 - \frac{\lambda_s}{\omega_0} - \frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \quad (\text{D.18})$$

- **Pour le 1<sup>er</sup> excité : (dégénéré 2 fois)**  $E_{10}^o = E_{01}^o = 4\omega_0$

Calculons la correction en énergie  $\Delta E_{10}^1$  :

$$\begin{aligned} \Delta E_{10}^1 &= \langle \psi_{10 \ 1M_s} | \mathbf{W} | \psi_{10 \ 1M_s} \rangle = 2\lambda_s \langle \psi_{10 \ 1M_s} | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} y^2 | \psi_{10 \ 1M_s} \rangle \\ &= 2\lambda_s \text{ esp} \langle \psi_{10} | y^2 | \psi_{10} \rangle_{\text{esp}} \text{ sp} \langle \psi_{1M_s} | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} | \psi_{1M_s} \rangle_{\text{sp}} \end{aligned} \quad (\text{D.19})$$

Nous obtenons :

$$M_s = 0: \Delta E_{10}^1 = 2\lambda_s \frac{1}{2\omega_0} (-1) = -\frac{\lambda_s}{\omega_0}$$

$$M_s = \pm 1: \Delta E_{10}^1 = 2\lambda_s \frac{1}{2\omega_0} (+1) = +\frac{\lambda_s}{\omega_0}$$

Calculons la correction en énergie  $\Delta E_{10}^2$  :

$$\Delta E_{10}^2 = \sum_{m_1 m_2 \neq 10} \frac{|\langle \psi_{10 \ 10} | \mathbf{W} | \psi_{m_1 m_2 \ 5M_s} \rangle|^2}{E_{10}^o - E_{m_1 m_2}^o} = \frac{|\langle \psi_{10 \ 10} | \mathbf{W} | \psi_{12 \ 10} \rangle|^2}{E_{10}^o - E_{12}^o} = \frac{2\lambda_s^2 / \omega_0^2}{-4\omega_0} = -\frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \quad (\text{D.20})$$

L'énergie  $E_{10}$  est donnée par :

$$E_{10} = 4\omega_0 - \frac{\lambda_s}{\omega_0} - \frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \quad (\text{D.21})$$

$$E'_{10} = 4\omega_0 + \frac{\lambda_s}{\omega_0} - \frac{\lambda_s^2}{2\omega_0^3}$$

**Energie du 1<sup>er</sup> excité  $E_{01}$  :**

Calculons  $\Delta E_{01}^1$  :

$$\begin{aligned} \Delta E_{01}^1 &= \langle \psi_{01 \ 10} | \mathbf{W} | \psi_{01 \ 10} \rangle = 2\lambda_s \langle \psi_{01 \ 10} | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} y^2 | \psi_{01 \ 10} \rangle \\ &= 2\lambda_s \text{ esp} \langle \psi_{01} | y^2 | \psi_{01} \rangle_{\text{esp}} \text{ sp} \langle \psi_{10} | \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z} | \psi_{10} \rangle_{\text{sp}} \end{aligned} \quad (\text{D.22})$$

Nous obtenons :  $\Delta E_{10}^1 = 2\lambda_s \frac{3}{2\omega_0} (-1) = -\frac{3\lambda_s}{\omega_0}$

Calculons la correction en énergie  $\Delta E_{01}^2$  :

$$\Delta E_{01}^2 = \sum_{m_1 m_2 \neq 01} \frac{|\langle \psi_{01 10} | \mathbf{W} | \psi_{m_1 m_2 SM_s} \rangle|^2}{E_{01}^o - E_{m_1 m_2}^o} = \frac{|\langle \psi_{01 10} | \mathbf{W} | \psi_{03 10} \rangle|^2}{E_{01}^o - E_{03}^o} = \frac{6\lambda_s^2 / \omega_0^2}{-4\omega_0} = -\frac{3\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \quad (\text{D.23})$$

L'énergie corrigée  $E_{01}$  est donnée par :

$$E_{01} = 4\omega_0 - \frac{3\lambda_s}{\omega_0} - \frac{3\lambda_s^2}{2\omega_0^3} \quad (\text{D.24})$$

Déterminons l'état propre de fondamental corrigé, au 2<sup>ème</sup> ordre, elle est donnée par:

$$|\psi_{n_1 n_2 SM_s}\rangle' = |\psi_{n_1 n_2 SM_s}\rangle^o + |\psi_{n_1 n_2 SM_s}\rangle^1 \quad (\text{D.25})$$

$$\text{avec : } |\psi_{n_1 n_2 SM_s}\rangle^1 = \sum_{n_1 n_2 SM_s \neq m_1 m_2 SM_s} \frac{\langle \psi_{n_1 n_2 SM_s} | \mathbf{W} | \psi_{m_1 m_2 SM_s} \rangle}{E_{n_1 n_2}^o - E_{m_1 m_2}^o} |\psi_{m_1 m_2 SM_s}\rangle \quad (\text{D.26})$$

- Pour le fondamental :  $|\psi_{n_1 n_2 SM_s}\rangle^o = |\psi_{00 00}\rangle^o = |00\rangle_{esp} |00\rangle_{sp} \quad (\text{D.27})$

$$\text{Calculons } |\psi_{n_1 n_2 SM_s}\rangle^1 = |\psi_{00 SM_s}\rangle^1 : |\psi_{00 SM_s}\rangle^1 = |\psi_{00}\rangle_{esp}^1 |\psi_{SM_s}\rangle_{sp}^1$$

$\mathbf{W}$  comporte  $\hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z}$  qui admet  $|00\rangle_{sp}$  comme vecteur propre, d'où :  $|SM_s\rangle = |00\rangle_{sp}$

Il reste à calculer  ${}_{esp}\langle 00 | \hat{y}^2 | m_1 m_2 \rangle_{esp}$  ; cet élément de matrice est nul si  $m_1 \neq 0$  et  $m_2 \neq 2$

$$|\psi_{00 00}\rangle_{esp}^1 = |\psi_{02}\rangle_{esp} \frac{{}_{esp}\langle \psi_{00} | \mathbf{W} | \psi_{02} \rangle_{esp}}{E_{00}^o - E_{02}^o} = |\psi_{02}\rangle_{esp} \frac{\sqrt{2}\lambda_s / \omega_0}{-4\omega_0} = -\frac{\sqrt{2}\lambda_s}{4\omega_0^2} |\psi_{02}\rangle_{esp} \quad (\text{D.28})$$

d'où :

$$|\psi_{00 00}\rangle^1 = \frac{\sqrt{2}\lambda_s}{4\omega_0^2} |\psi_{02}\rangle_{esp} |\psi_{00}\rangle_{sp} \quad (\text{D.29})$$

Compte tenu de (D.27) est (D.29), l'état propre de fondamental est donné par :

$$|\psi_{00 00}\rangle' = |\psi_{00}\rangle_{esp} |\psi_{00}\rangle_{sp} + \frac{\lambda_s}{2\sqrt{2}\omega_0^2} |\psi_{02}\rangle_{esp} |\psi_{00}\rangle_{sp} \quad (\text{D.30})$$

## 2. Interaction gaussienne

Considérons un autre système d'hamiltonien  $H'$  donné par :

$$H' = H_0 + H_g \quad (H_g = \text{perturbation}) \quad (\text{D.31})$$

avec :  $H_g = \lambda e^{-(x_1+x_2)^2} = \lambda e^{-2y^2}$

Effectuons les mêmes calculs que dans le cas précédent,

\* Au 2<sup>ème</sup> ordre, les énergies de ce système sont données par l'expression (D.2)

$$E_N = E_{n_1 n_2} = E_{n_1 n_2}^0 + \Delta E_{n_1 n_2}^1 + \Delta E_{n_1 n_2}^2$$

avec (D.3):  $\Delta E_{n_1 n_2}^1 = \langle \psi_{n_1 n_2 SM_s} | \mathbf{W}' | \psi_{n_1 n_2 SM_s} \rangle$  et :  $\Delta E_{n_1 n_2}^2 = \sum_{n_1 n_2 \neq m_1 m_2} \frac{|\langle \psi_{n_1 n_2 SM_s} | \mathbf{W}' | \psi_{m_1 m_2 SM_s} \rangle|^2}{E_{n_1 n_2}^0 - E_{m_1 m_2}^0}$

- Pour le fondamental :  $E_{00}^0 = 2\omega_0$

Déterminons la correction en énergie  $\Delta E_{00}^1$  :

$$\Delta E_{00}^1 = \langle \psi_{00 00} | \mathbf{W}' | \psi_{00 00} \rangle = \lambda \langle \psi_{00 00} | e^{-2y^2} | \psi_{00 00} \rangle = \lambda_{\text{esp}} \langle \psi_{00} | e^{-2y^2} | \psi_{00} \rangle_{\text{esp}} \quad (\text{D.32})$$

Nous avons :  $\langle \psi_{00} | e^{-2y^2} | \psi_{00} \rangle_{\text{esp}} = 1 - \frac{1}{\omega_0} + \frac{3}{2\omega_0^2}$ , nous obtenons alors :

$$\Delta E_{00}^1 = \lambda \left( 1 - \frac{1}{\omega_0} + \frac{3}{2\omega_0^2} \right)$$

Calculons ensuite la correction en énergie  $\Delta E_{00}^2$  (D.8):

$$\Delta E_{00}^2 = \sum_{m_1 m_2 SM_s \neq 00 00} \frac{|\langle \psi_{00 00} | \mathbf{W}' | \psi_{m_1 m_2 SM_s} \rangle|^2}{E_{00}^0 - E_{m_1 m_2}^0}$$

$\mathbf{W}'$  ne comporte pas de terme en spin, d'où :  $|SM_s\rangle = |00\rangle_{sp}$

Il reste à calculer  $\langle \psi_{00} | e^{-2y^2} | \psi_{m_1 m_2} \rangle_{\text{esp}}$  ; cet élément de matrice n'est nul si  $m_1 \neq 0$  et  $m_2 \neq 0$ , notons que l'ordre de calcul sur  $\omega_0$  est effectué jusqu'à 4, au delà de cet ordre tous les termes sont négligés.

$$\Delta E_{00}^2 = \frac{|\langle \psi_{00 00} | \mathbf{W}' | \psi_{02 00} \rangle|^2}{E_{00}^0 - E_{02}^0} = \frac{2\lambda^2}{-4\omega_0} \left( \frac{1}{\omega_0^2} - \frac{6}{\omega_0^3} \right) = -\frac{\lambda^2}{2\omega_0^3} + \frac{3\lambda^2}{\omega_0^4} \quad (\text{D.33})$$

L'énergie de fondamental  $E_{00}$  est donnée par :

$$E_{00} = 2\omega_0 + \lambda \left( 1 - \frac{1}{\omega_0} + \frac{3}{2\omega_0^2} \right) - \frac{\lambda^2}{2\omega_0^3} + \frac{3\lambda^2}{\omega_0^4} \quad (\text{D.34})$$

- Pour le 1<sup>er</sup> excité : (dégénéré 2 fois)  $E_{10}^0 = E_{01}^0 = 4\omega_0$

**Pour l'énergie  $E_{10}$  :**

Pour la correction en énergie  $\Delta E_{10}^1$  et  $\Delta E_{10}^2$  nous trouvons les mêmes résultats que (D.32) et (D.33), nous écrivons alors :

$$E_{10} = 4\omega_0 + \lambda \left( 1 - \frac{1}{\omega_0} + \frac{3}{2\omega_0^2} \right) - \frac{\lambda^2}{2\omega_0^3} + \frac{3\lambda^2}{\omega_0^4} \quad (\text{D.35})$$

**Pour l'énergie  $E_{01}$  :**

Déterminons la correction en énergie  $\Delta E_{01}^1$  :

$$\Delta E_{01}^1 = \langle \psi_{01\ 00} | \mathbf{W} | \psi_{01\ 00} \rangle = \lambda_{\text{esp}} \langle \psi_{01} | e^{-2y^2} | \psi_{01} \rangle_{\text{esp}} \quad (\text{D.36})$$

Nous avons :  ${}_{\text{esp}} \langle \psi_{01} | e^{-2y^2} | \psi_{01} \rangle_{\text{esp}} = 1 - \frac{3}{\omega_0} + \frac{15}{2\omega_0^2}$ , nous obtenons alors :

$$\Delta E_{01}^1 = \lambda \left( 1 - \frac{3}{\omega_0} + \frac{15}{2\omega_0^2} \right)$$

Calculons ensuite la correction en énergie  $\Delta E_{00}^2$  :

$$\Delta E_{01}^2 = \sum_{m_1 m_2 \ SM_s \neq 01\ 00} \frac{|\langle \psi_{01\ 00} | \mathbf{W} | \psi_{m_1 m_2 \ SM_s} \rangle|^2}{E_{01}^0 - E_{m_1 m_2}^0} \quad (\text{D.37})$$

$\mathbf{W}'$  ne comporte pas de terme en spin, d'où :  $|SM_s\rangle = |00\rangle_{\text{sp}}$

Il reste à calculer  ${}_{\text{esp}} \langle 01 | e^{-2y^2} | m_1 m_2 \rangle_{\text{esp}}$  ; cet élément de matrice n'est nul si  $m_1 \neq 0$  et  $m_2 \neq 1$  ; rappelons que l'ordre de calcul sur  $\omega_0$  est effectué jusqu'à 4, au delà de cet ordre tous les termes sont négligés.

$$\Delta E_{01}^2 = \frac{|\langle \psi_{01\ 00} | \mathbf{W} | \psi_{03\ 00} \rangle|^2}{E_{01}^0 - E_{03}^0} = \frac{3\lambda^2}{-8\omega_0} \left( \frac{4}{\omega_0^2} - \frac{40}{\omega_0^3} \right) = -\frac{3\lambda_s^2}{2\omega_0^3} + \frac{15\lambda_s^2}{\omega_0^4}$$

d'où l'énergie  $E_{01}$  est donnée par :

$$E_{01} = 4\omega_0 + \lambda \left( 1 - \frac{3}{\omega_0} + \frac{15}{2\omega_0^2} \right) - \frac{3\lambda_s^2}{2\omega_0^3} + \frac{15\lambda_s^2}{\omega_0^4} \quad (\text{D.38})$$

Déterminons l'état propre de fondamental corrigé, au 2<sup>ème</sup> ordre. La correction est donnée par (D.26) :

$$|\psi_{n_1 n_2 SM_s}\rangle' = |\psi_{n_1 n_2 SM_s}\rangle^o + |\psi_{n_1 n_2 SM_s}\rangle^1$$

$$\text{avec : } |\psi_{n_1 n_2 SM_s}\rangle^1 = \sum_{n_1 n_2 SM_s \neq m_1 m_2 SM_s} \frac{\langle \psi_{n_1 n_2 SM_s} | \mathbf{W} | \psi_{m_1 m_2 SM_s} \rangle}{E_{n_1 n_2}^o - E_{m_1 m_2}^o} |\psi_{m_1 m_2 SM_s}\rangle$$

- Pour le fondamental :  $|\psi_{n_1 n_2 SM_s}\rangle^o = |\psi_{00\ 00}\rangle^o = |00\rangle_{esp} |00\rangle_{sp}$  **(D.39)**

Calculons  $|\psi_{n_1 n_2 SM_s}\rangle^1 = |\psi_{00 SM_s}\rangle^1$  :

$$|\psi_{00 SM_s}\rangle^1 = |\psi_{00}\rangle_{esp}^1 |\psi_{SM_s}\rangle_{sp}^1$$

$\mathbf{W}'$  ne comporte pas de terme en spin, d'où :  $|SM_s\rangle = |00\rangle_{sp}$

Il reste à calculer  ${}_{esp}\langle 00 | e^{-2y^2} |m_1 m_2\rangle_{esp}$  ; cet élément de matrice est nul si  $m_1 \neq 0$  et  $m_2 \neq 2$

$$\begin{aligned} |\psi_{00\ 00}\rangle_{esp}^1 &= |\psi_{02}\rangle_{esp} \frac{{}_{esp}\langle \psi_{00} | \mathbf{W} | \psi_{02} \rangle_{esp}}{E_{00}^o - E_{02}^o} + |\psi_{04}\rangle_{esp} \frac{{}_{esp}\langle \psi_{00} | \mathbf{W} | \psi_{04} \rangle_{esp}}{E_{00}^o - E_{04}^o} \\ &= -\frac{\lambda}{2\sqrt{2}} \left( -\frac{1}{\omega_0^2} + \frac{3}{\omega_0^3} \right) |\psi_{02}\rangle_{esp} - \frac{\sqrt{6}\lambda}{8} \frac{1}{\omega_0^3} |\psi_{04}\rangle_{esp} \end{aligned} \quad \text{(D.40)}$$

d'où :

$$|\psi_{00\ 00}\rangle^1 = -\frac{\lambda}{2\sqrt{2}} \left( -\frac{1}{\omega_0^2} + \frac{3}{\omega_0^3} \right) |\psi_{02}\rangle_{esp} |\psi_{00}\rangle_{sp} - \frac{\sqrt{6}\lambda}{8} \frac{1}{\omega_0^3} |\psi_{04}\rangle_{esp} |\psi_{00}\rangle_{sp} \quad \text{(D.41)}$$

Compte tenu de (D.39) est (D.41), l'état propre de fondamental est donnée par :

$$|\psi_{00\ 00}\rangle' = |\psi_{00}\rangle_{esp} |\psi_{00}\rangle_{sp} - \frac{\lambda}{2\sqrt{2}} \left( -\frac{1}{\omega_0^2} + \frac{3}{\omega_0^3} \right) |\psi_{02}\rangle_{esp} |\psi_{00}\rangle_{sp} - \frac{\sqrt{6}\lambda}{8} \frac{1}{\omega_0^3} |\psi_{04}\rangle_{esp} |\psi_{00}\rangle_{sp} \quad \text{(D.42)}$$

# BIBLIOGRAPHIE

**BIBLIOGRAPHIE**

**[1] Inequalities on heavy quark-antiquark systems.**

B. A. Bertlmann, A. Martin, Nucl.Phys. **B 168** (1980) 111-136.

**[2] Bounds on radii and kinetic energies of N-particle systems.**

B. A. Bertlmann, A.Martin, Nucl. Phys. **B 282** (1981) 35-44.

**[3] Generalised Bertlmann-Martin inequalities for confining potentials.**

R. J. Lombard, J. Marès, Phys. Rev. **D 59** (1999) 076005.

**[4] A New Approximation Method for the Schrodinger Equation.**

F. Z. Ighezou, R. J.Lombard, Ann. Phys. (N.Y.) **278** (1999) 265.

**[5] Thèse de Magister.** R. Mezhoud, USTHB, (2002).

**[6] Thèse de Doctorat.** R. Yekken, , USTHB, (2009).

**[7] Thèse de Doctorat.** R. Mezhoud, USTHB, (2008).

**[8] Thèse de Magister.** S. Gueribah, USTHB, (2007).

**[9] Thèse de Magister.** A. Meftah, USTHB, (2003).

**[10]The Bertlmann-Martin Inequalities in the Three-Body Problem.**

A. T. Kerris, F. Z.Ighezou, R. J. Lombard, H. Ngo, Few-Body Syst. **38**, (2006)1-15.

**[11] Bertlmann-Martin inequalities in hypernuclei.**

R. J. Lombard, S. Marcos, J. Marès, Phys. Rev. **C 50**, N° **6** (1994) 2900.

**[12] Towards a model independent analysis of single particles spectra: Application to hypernuclei.** R. J. Lombard, J. Marès, Phys. Rev. **C 52**, N° **1** (1995) 170.

- [13] **Spectral analysis of  $^{208}\text{Pb}$  muonic atom.**  
F. Z. Ighezou, R. J. Lombard and J. Marès, Eur.Phys. J.A **11** (2001) 79.
- [14] **Generalized Bertlmann-Martin inequalities and power-law potentials.**  
R. Mezhoud, F. Z. Ighezou, A. Chouchaoui, A. T. Kerris, R. J. Lombard, Ann. Phys. (NY) **308** (2003) 143
- [15] **Connecting the ground state mean square radius to the dipole excitation.**  
R. Mezhoud, F. Z. Ighezou and R. J. Lombard, Physica Spectra **75** (2006)1.
- [16] **Mécanique Quantique.** E. ELBAZ, Paris (15<sup>e</sup>) (1995)
- [17] **Tables of Integrals, Series and Products.** I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, Academic Press, New York (1980)
- [18] **Mécanique Quantique Tome I.** C.C. Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, Hermann, Paris (1973)
- [19] **Mécanique Quantique Tome II.** A. Messiah, Dunod, Paris (1972)
- [20] **Quantum Mechanics.** A. S. Davydov, Pergamon Press, Oxford, (1965)
- [21] **Application of the Bertlmann –Martin inequality to systems with spin.**  
F. Z. Ighezou, 7<sup>th</sup> conference on Nuclear and Particle Physics (NUPPAC'09), 11-15 Nov 2009, Sharm EL-Sheikh, Egypt.
- [22] **Problems in Quantum Mechanics.** F. Constantinescu and E. Magyari, Pergamon Press, Oxford (1985)
- [23] **Mécanique Quantique Tome II.** C.C. Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, Hermann, Paris (1973)