

N⁰ d'ordre : 22 /2004- M /PH
République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene
Faculté de Physique



Mémoire

Présenté Pour l'obtention du diplôme de Magister

Spécialité : Physique Théorique

Par : M^{me} : Fatiha KADEM

Sujet

APPROCHE VARIATIONNELLE DES EQUATIONS DE FADDEEV

soutenu le : 21/09./2004, devant le jury suivant :

M^r A. SMIDA	Professeur (USTHB)	Président
M^{me} F. MEKIDECHE-CHAFA	MC(USTHB)	Rapporteur
M^r M. HACHMANE	MC(USTHB)	Examineur
M^{me} F.Z. IGHEZOU	MC(USTHB)	Examineur
M^{me} M. HADDAD	MC(USTHB)	Examineur
M^r M. BENTAIBA	MC(Univ. Blida)	Examineur

SOMMAIRE

Introduction.....	4
Chapitre I : Formalisme général de la théorie du champ moyen indépendant du temps.....	7
I-1 Introduction.....	8
I-2 Diagonalisation.....	11
I-3 Inversion.....	12
Chapitre II: Les équations de Faddeev.....	19
II-1 Introduction.....	20
II-2 Formalisme général.....	22
II-2-1 Equations de Faddeev en termes d'opérateurs de transition.....	22
II-2-2 Equations de Faddeev en termes d'opérateurs de Green.....	25
II-2-3 Equations de Faddeev en termes de fonctions d'ondes.....	27
Chapitre III : Résolution des équations de Faddeev par la théorie du champ moyen indépendant du temps -Problème à trois corps-.....	29
III-1 Introduction.....	30
III-2 Application de la TIMF pour la résolution des équations de Faddeev.....	30
III-3-1 Choix de la fonctionnelle.....	32

III-3-2 Factorisation des fonctions d'essai par rapport à une représentation du Système.....	36
III-3-3 Symétrisation entre les voies.....	45
Chapitre IV : Généralisation de l'application de la théorie du champ moyen indépendant du temps -problème à quatre corps et plus-.....	54
IV-1 Introduction.....	55
IV-2 Problème à quatre corps.....	55
IV-2-1 Méthode de la matrice des voies couplées.....	56
IV-3 Généralisation au problème à N corps et application de la TIMF.....	58
Conclusion.....	63
Annexe.....	65
Références.....	68

INTRODUCTION

INTRODUCTION

L'intérêt pour l'étude des problèmes de collision s'est particulièrement accru ces dernières années avec le développement des moyens de calcul.

Pour obtenir des solutions des équations de la mécanique quantique, le formalisme usuel de l'équation de Schrödinger est insuffisant lorsque le nombre N de particules qui composent un système est supérieur à deux ($N > 2$). En effet, il est, par exemple, impossible de décrire à l'aide d'une seule équation, les différents comportements que la physique autorise à partir de $N=2$.

Dans la théorie des collisions, l'équation de Lippmann-Schwinger est une équation fondamentale. Cette équation est équivalente à l'équation de Schrödinger avec un terme de source associé aux flux de particules de voies d'entrée et de sortie. Il est connu que, même avec l'équation de Lippmann-Schwinger des problèmes persistent lors de sa résolution pour des systèmes avec un nombre de corps supérieur ou égal à trois [1]. En effet, si pour un problème à deux corps, il est toujours possible de trouver une solution unique à cette équation, pour un problème à trois corps et plus, la situation est tout autre. Il devient très difficile, voire impossible, de solutionner cette équation de manière exacte.

Pour un nombre de corps $N=3$, Faddeev [2-5] a établi un cadre formel adéquat. Il a proposé des réarrangements de l'équation de Lippmann-Schwinger pour surmonter les différentes difficultés comme l'apparition d'une "dangereuse" fonction delta (due à la présence d'une particule spectatrice) ainsi que la multiplicité des solutions à la fin alors que le problème physique ne doit posséder qu'une seule solution unique. Dans ses réarrangements, Faddeev [2] a basé sa méthode principalement sur le développement de la fonction d'onde totale du système à trois corps en une somme de trois composantes associées aux différentes partitions possibles du système. Il a aussi introduit les opérateurs de transition et de Green et a utilisé leurs propriétés. Il est arrivé à la fin à un système d'équations des trois composantes de la fonction d'onde totale qu'il a présenté sous forme matricielle.

La résolution exacte de ce système de trois équations étant très difficile, il était donc nécessaire de faire appel à des méthodes approximatives [6-7]. L'une de ces méthodes qui nous semble très appropriée est la théorie du champ moyen indépendant du temps que l'on notera -TIMF-.

Giraud et collaborateurs[8-14] ont montré que le principe variationnel permet le calcul de résolvantes et que cette approche TIMF, basée sur ce principe variationnel facilite les calculs correspondants. Cette théorie microscopique semble particulièrement adaptée à l'étude des collisions nucléaires aux énergies intermédiaires. L'avantage de la TIMF par rapport aux autres approximations c'est le fait qu'elle satisfasse, tout comme la théorie d'Hartree, à la condition de réduction de dimension et qu'elle permette d'évaluer les amplitudes de diffusion. L'utilisation de la TIMF dans différents problèmes de collision a mis en évidence sa contribution à l'amélioration des descriptions et résolutions de ce type de problèmes en physique atomique [15] et physique nucléaire [16-21].

Dans ce travail, nous voulons simplifier les équations de Faddeev pour le problème à trois corps c'est-à-dire réduire la dimension de ces équations pour rendre leur résolution possible numériquement. Il s'agit, tout d'abord, de trouver une fonctionnelle dont les conditions de stationnarité seraient ces équations de Faddeev et ensuite introduire les principes de base de la TIMF qui sont :

- prendre une énergie totale du système complexe
- factoriser les fonctions d'essai et de voies sous forme de produits d'orbitales individuelles.

Ceci nous permettra d'arriver à des solutions approximées beaucoup plus simples à manier.

Nous avons choisi, dans un premier temps de factoriser nos fonctions d'essai par rapport à une représentation ou partition. Par la suite, et pour tenir compte de plus de symétrie dans le problème, nous avons introduit une représentation symétrique, plus adaptée aux trois partitions possibles.

Les nombreuses simplifications qu'a engendrés l'application de l'approche -TIMF- pour le problème à trois corps nous ont encouragés à faire une extension du domaine de validité de la théorie -TIMF- pour un problème à quatre corps et plus.

Pour cela, nous sommes partis des équations des fonctions d'onde obtenues par la méthode de la matrice des voies couplées pour un problème à N corps [22-27]. Le choix de cette méthode a été dicté par les faits que l'idée de base de cette approche est la même que celle de Faddeev (décomposition de la fonction d'onde totale en une somme de composantes) et que les équations finales obtenues ont la même forme que celles de Faddeev.

Le présent travail est découpé en quatre parties :

Dans la première partie, nous avons présenté un chapitre descriptif du formalisme de la théorie -TIMF-.

Dans la seconde partie, nous retrouvons les différentes étapes suivies par Faddeev pour réarranger l'équation de Lippmann-Schwinger et arriver à un système d'équations de fonctions d'ondes pour un problème à trois corps.

Dans le chapitre trois, nous présentons la partie essentielle de notre travail, à savoir l'application de la -TIMF- pour la simplification des équations de Faddeev pour un problème à trois corps.

La quatrième partie est consacrée à l'extension du domaine de validité de la -TIMF- pour un problème à quatre corps et plus. Avant d'appliquer notre approche, nous retrouvons tout d'abord les équations donnant les composantes de la fonction d'onde totale pour un problème à quatre corps par la méthode de la matrice des voies couplées. Nous présentons une généralisation de cette méthode pour un problème à N corps ($N > 4$) et nous expliquons, enfin, comment la TIMF peut simplifier ces équations et les rendre utilisables en pratique.

Enfin, nous terminerons notre travail par une conclusion générale et la présentation de quelques perspectives futures.

Chapitre I

*Formalisme de la Théorie du
Champ Moyen Indépendant du
Temps*

CHAPITRE I

FORMALISME DU CHAMP MOYEN INDEPENDANT DU TEMPS

I -1 Introduction

Considérons un système de N particules dont l'Hamiltonien s'écrit:

$$H = \sum_{i=1}^N t_i + \sum_{i>j} v_{ij} . \quad (\text{I-1})$$

où t_i représente l'énergie cinétique des particules et v_{ij} le potentiel d'interaction à deux corps.

Plusieurs travaux [28-30] ont été consacrés à la diagonalisation de l'Hamiltonien H. L'approximation de Hartree-Fock, qui utilise la notion de champ moyen, a permis la transformation d'une diagonalisation à N corps à N diagonalisations à un corps.

Dans la théorie des collisions, l'un de ses éléments clés est l'opérateur de Green $G=(E-H)^{-1}$. L'inversion de l'opérateur $(E -H)$ s'avère complexe dans le cas des systèmes où le nombre de particules N est supérieur ou égal à trois ($N \geq 3$). En effet, le calcul exact est souvent impossible dans ce cas et l'utilisation de théories approximatives devient nécessaire.

A cet effet, une théorie des collisions indépendante du temps a été développée par Giraud et ses collaborateurs [8-14]: Il s'agit de la théorie du champ moyen indépendant du temps, TIMF, qui est une théorie microscopique non linéaire. Elle s'adapte particulièrement à l'étude des collisions aux énergies intermédiaires. Cette théorie repose principalement sur:

- 1- Une méthode variationnelle pour la détermination de l'amplitude de collision.

- 2- Une représentation des états de voies par des paquets d'onde indépendants du temps. Ce choix facilite, en pratique, les calculs qui peuvent être faits avec des fonctions d'ondes de carré sommable.
- 3- Une énergie totale complexe dans le propagateur G. Ceci le rend borné et évite les problèmes de singularités liées à des calculs sur couche, c'est-à-dire avec une énergie totale réelle.
- 4- Un choix des fonctions de voies et des fonctions d'essai sous forme de produits de fonctions individuelles (ou de déterminant de Slater dans le cas d'une antisymétrisation).

I-2 Formalisme

L'amplitude de transition, T_{if} , entre les voies initiale i et finale f est définie comme une limite des éléments de matrice d'un opérateur de transition [31]:

$$T_{if} = \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \langle \Psi^f | T | \Psi^i \rangle, \quad (\text{I-2})$$

où

$$T = V + V' G V. \quad (\text{I-3})$$

avec G l'opérateur de Green que l'on prend comme :

$$G = (E - H)^{-1} \quad (\text{I-4})$$

E est l'énergie totale prise complexe avec Γ qui représente sa partie imaginaire que l'on fait tendre vers zéro à la fin des calculs numériques (limite sur couche).

$|\Psi\rangle$ et $|\Psi^f\rangle$ sont, respectivement, les fonctions d'ondes des voies initiale et finale et V , V' les potentiels d'interaction correspondant à ces mêmes voies, respectivement.

Le développement de l'élément de matrice de transition T_{if} , **Eq.(I-2)**, nous permet de le réécrire, en utilisant l'équation **Eq.(I-3)**, sous la forme d'une somme de deux termes :

$$T_{if} = T^{Born} + D. \quad \text{(I-5)}$$

Le premier terme:

$$T^{Born} = \langle \Psi' | V | \Psi \rangle \quad \text{(I-6)}$$

est le terme de Born et son calcul est simple.

Le second terme :

$$D = \langle \Psi' | V G V | \Psi \rangle. \quad \text{(I-7)}$$

représente l'amplitude de propagation ; son calcul est moins évident et nécessite plus d'efforts.

En écrivant les fonctions des voies initiale χ et finale χ' sous la forme suivante :

$$|\chi\rangle = V|\Psi\rangle, \quad |\chi'\rangle = V'|\Psi'\rangle, \quad \text{(I-8)}$$

l'équation **Eq.(I-7)** devient:

$$D = \langle \chi' | G | \chi \rangle. \quad \text{(I-9)}$$

Nous allons montrer, dans ce qui suit, qu'une légère modification des équations de Hartree-Fock permet de définir une approximation non perturbative des éléments de matrice de G, pris entre des états initial χ et final χ' .

I-2-a Diagonalisation

On considère la fonctionnelle de Rayleigh-Ritz donnée par :

$$F = \langle \Phi' | (H - E) | \Phi \rangle, \quad (\text{I-10})$$

où Φ, Φ' sont des fonctions flexibles et E est un multiplicateur de Lagrange.

On obtient l'équation de Schrödinger si les conditions de stationnarité de F par rapport à $|\Phi\rangle$ et par rapport à $\langle \Phi'|$ (à savoir que $\partial F / \partial |\Phi\rangle = 0$, $\partial F / \partial \langle \Phi'| = 0$) sont vérifiées :

$$\partial F / \partial \langle \Phi'| = (H - E) |\Phi\rangle = 0, \quad (\text{I-11a})$$

et

$$\partial F / \partial |\Phi\rangle = \langle \Phi'| (H - E) = 0. \quad (\text{I-11b})$$

Si l'on restreint les fonctions d'essai Φ et Φ' à des produits d'orbitales individuelles [32]:

$$|\Phi\rangle = \prod_i |\varphi_i\rangle, \quad (\text{I-12a})$$

$$\langle \Phi'| = \prod_i \langle \varphi_i'|, \quad \text{i=1, 2, \dots, N} \quad (\text{I-12b})$$

nous obtenons l'approximation de Hartree : l'équation de Schrödinger à N corps est remplacée par un système de N équations couplées à un corps.

$$(\eta_i - t_i - \mu_i) |\varphi_i\rangle = 0, \quad (\text{I-13a})$$

et aussi

$$\langle \varphi_i'| (\eta_i - t_i - \mu_i) = 0. \quad (\text{I-13b})$$

où les η_i sont les self-énergies de Hartree et les μ_i les champs moyens self consistants, qui peuvent se mettre sous la forme suivante:

$$\mu_i(\vec{r}) = \int d\vec{r}' v(\vec{r} - \vec{r}') \sum_{i \neq j} \frac{\varphi_i'^*(\vec{r}') \varphi_j(\vec{r}')}{\langle \varphi_j' | \varphi_j \rangle} \quad (\text{I-14})$$

où v est le potentiel local.

I-2-b Inversion

Comme nous l'avons déjà dit, il n'est pas aisé d'inverser l'opérateur (E-H) lorsque le nombre N des particules qui composent le système en interaction devient grand ($N \geq 3$). Donc pour le calcul de l'amplitude de propagation D , **Eq. (I-7)**, nous nous proposons de la calculer à l'aide d'une méthode variationnelle. A cet effet, considérons la fonctionnelle suivante:

$$\mathcal{F}(\Phi, \Phi') = \langle \Phi' | \chi \rangle + \langle \chi' | \Phi \rangle - \langle \Phi' | (E - H) | \Phi \rangle. \quad (\text{I-15})$$

Remarquons que le troisième terme de \mathcal{F} n'est autre que la fonctionnelle F avec E qui représente cette fois une énergie complexe.

Calculons les conditions de stationnarité de \mathcal{F} par rapport à $|\Phi\rangle$ et $\langle \Phi'|$:

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial |\Phi\rangle} = \langle \chi' | - \langle \Phi' | (E - H) = 0, \quad (\text{I-16a})$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \Phi'|} = |\chi\rangle - (E - H) |\Phi\rangle = 0 \quad (\text{I-16b})$$

et nous arrivons à

$$(E - H) |\Phi\rangle = |\chi\rangle, \quad (\text{I-17})$$

et

$$\langle \Phi' | (E - H) = \langle \chi' |,$$

dont les solutions stationnaires sont :

$$|\Phi_{Sta}\rangle = G|\chi\rangle,$$

(I-18)

$$\langle \Phi'_{Sta} | = \langle \chi' | G.$$

L'insertion de ces dernières dans la fonctionnelle \mathcal{F} donne l'amplitude de propagation D :

$$\mathcal{F}(\Phi, \Phi') = \langle \chi' | G | \chi \rangle \equiv D. \quad \textbf{(I-19)}$$

Nous pouvons aussi obtenir l'amplitude de propagation D, en considérant une autre fonctionnelle F' donnée par:

$$F'(\Phi, \Phi') = \frac{\langle \Phi' | \chi \rangle \langle \chi' | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | (E - H) | \Phi \rangle}. \quad \textbf{(I-20)}$$

Cette fonctionnelle F' présente un intérêt supplémentaire par rapport à la fonctionnelle \mathcal{F} car F' est indépendante des normes des fonctions Φ et Φ' .

Considérons les fonctions d'essai Φ et Φ' ainsi que les états de voies initiale χ et finale χ' comme des produits de N orbitales individuelles:

$$|\Phi\rangle = \prod_i |\varphi_i\rangle,$$

$$|\Phi'\rangle = \prod_i |\varphi'_i\rangle,$$

$$|\chi\rangle = \prod_i |\chi_i\rangle,$$

$$|\chi'\rangle = \prod_i |\chi'_i\rangle.$$

(I-21)

avec $i=1,2,\dots,N$

La fonctionnelle \mathcal{F} , Eq.(I-15), devient alors:

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = & \prod_i \langle \varphi'_i | \chi_i \rangle + \prod_i \langle \chi'_i | \varphi_i \rangle - E \langle \Phi' | \Phi \rangle \\ & + \sum_i \langle \varphi'_i | t | \varphi_i \rangle \frac{\langle \Phi' | \Phi \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} + \sum_{i>j} \langle \varphi'_i \varphi'_j | v | \varphi_i \varphi_j \rangle \frac{\langle \Phi' | \Phi \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle \langle \varphi'_j | \varphi_j \rangle}. \end{aligned} \quad (\text{I-22})$$

En dérivant \mathcal{F} par rapport à $|\varphi_i\rangle$ et par rapport à $\langle\varphi'_i|$, on arrive à 2N équations à un corps couplées:

$$(\eta_i - t_i - \mu_i) |\varphi_i\rangle = |\chi_i\rangle, \quad (\text{I-23a})$$

$$\langle\varphi'_i| (\eta_i - t_i - \mu_i) = \langle\chi'_i|. \quad (\text{I-23b})$$

où t_i représente l'énergie cinétique individuelle, μ_i est un champ self consistant et la self énergie complexe η_i est égale à l'énergie totale E moins les énergies cinétique (second terme) et potentielle (troisième terme) des spectateurs:

$$\eta_i = E - \sum_{j \neq i} \frac{\langle \varphi'_j | t | \varphi_j \rangle}{\langle \varphi'_j | \varphi_j \rangle} - \sum_{\substack{k > j \\ j \neq i, k \neq i}} \frac{\langle \varphi'_j \varphi'_k | v | \varphi_j \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_j | \varphi_j \rangle \langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle} \quad (\text{I-24})$$

En posant dans les équations Eqs. (I-23)

$$h_i = t_i + \mu_i, \quad (\text{I-25})$$

avec h_i l'Hamiltonien à une particule, les solutions de ces équations pourront s'écrire:

$$|\varphi_i\rangle = g_i |\chi_i\rangle, \quad (\text{I-26a})$$

et

$$\langle\varphi'_i| = \langle\chi'_i| g_i, \quad (\text{I-26b})$$

où

$$g_i = (\eta_i - h_i)^{-1}. \quad (\text{I-27})$$

g_i représente l'opérateur de Green à un corps.

Nous nous retrouvons donc avec l'inversion d'un opérateur à un corps, g_i , plutôt que l'inversion d'un opérateur, G , à plusieurs corps.

Nous pouvons affirmer, comme nous l'avons fait pour la diagonalisation, que les équations **(I-23)** variationnelles et non linéaires sont une généralisation des équations de Hartree dirigées par des termes de source χ_i et χ'_i .

Comme les équations de Hartree peuvent être résolues par itération, on peut penser que ces équations variationnelles pourront être résolues aussi par itérations successives jusqu'à convergence.

Il faut noter que la résolution de ces équations variationnelles conduit à plusieurs solutions self consistantes différentes alors que le problème initial est linéaire et possède une seule solution. Il s'agit donc de sélectionner la bonne solution physique.

Pour cela, nous faisons appel à un théorème asymptotique [33] quand la partie imaginaire de l'énergie totale est grande ($\Gamma \rightarrow \infty$): lorsque $\Gamma \rightarrow \infty$, on fait tendre la fonction d'essai vers la fonction de voie ($|\Phi\rangle \rightarrow |\chi\rangle$).

Pour la résolution des équations **(Eqs. I-23)** self consistantes nous commencerons donc avec un Γ grand et nous prendrons $|\varphi_i\rangle = |\chi_i\rangle$ et $\langle\varphi'_i| = \langle\chi'_i|$. Lorsque la self consistance est atteinte, les fonctions d'ondes $|\varphi_i\rangle$ et $\langle\varphi'_i|$ obtenues seront utilisées comme de nouvelles fonctions de départ avec une valeur de Γ plus réduite. Nous diminuons ensuite graduellement la valeur Γ jusqu'à arriver à la limite sur couche ($\Gamma = 0$) où l'énergie totale E est réelle.

En cas de multiplicité des solutions possibles, une étude plus poussée sera nécessaire pour isoler la solution physique.

Une fois que les selfs consistances des orbitales individuelles $|\varphi_i\rangle, |\varphi'_i\rangle$ sont atteintes et la solution physique sélectionnée, leur insertion dans la fonctionnelle \mathcal{F} (ou F') nous donnera une approximation \bar{D} de l'amplitude exacte D .

Pour conclure, nous pouvons dire que la -TIMF- possède une structure analytique compliquée, mais son utilisation numériquement est techniquement simple.

Plusieurs tests numériques ont montré la validité de la théorie du champ moyen indépendant du temps. Pour illustrer cela, citons à titre d'exemple, l'utilisation de la TIMF dans un problème à trois et à quatre corps [34].

Dans les figures (Fig. I-1, I-2) nous avons le cas du problème à trois corps avec un potentiel séparable. Un bon accord global apparaît entre l'amplitude exacte (Fig. I-1) et l'amplitude approximée par la TIMF (Fig. I-2) à l'exception de $\text{Re } D$ pour de grandes valeurs des constantes de couplage négatives où k_1 , k_2 et k_3 sont les vecteurs d'ondes et V_0 représente l'intensité de l'interaction. Dans la figure (I-3), nous avons le cas du problème à quatre corps, pour un potentiel séparable où là aussi, on observe une adéquation entre l'amplitude exacte et l'amplitude calculée par la TIMF en fonction des constantes de couplage.

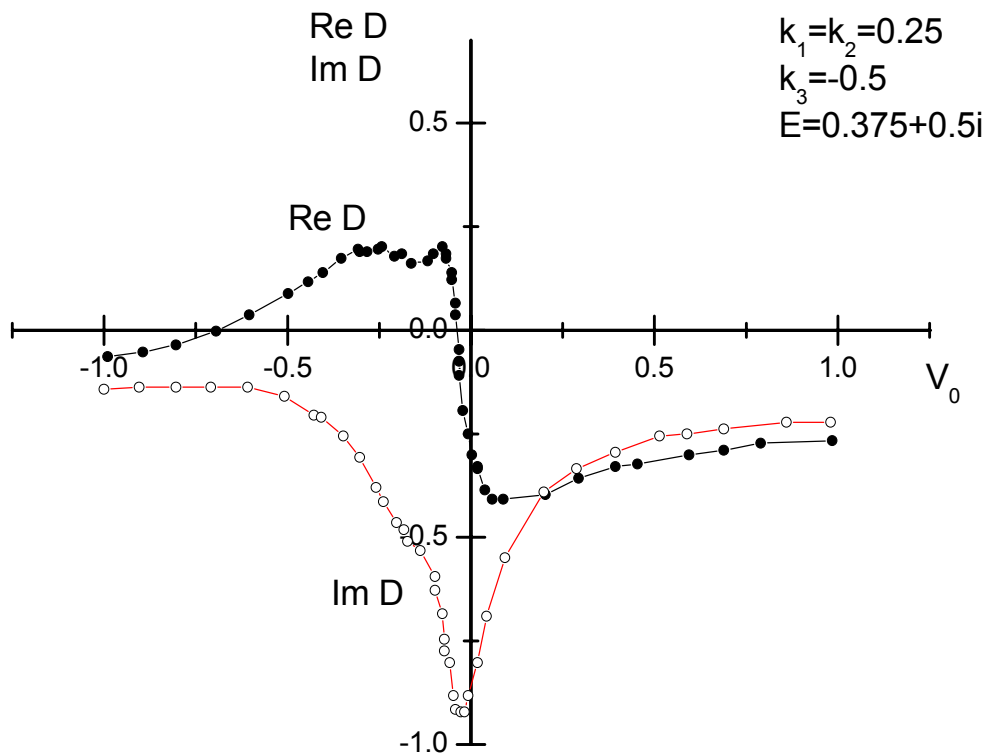


Fig.1-1 : parties réelle et imaginaire de l'amplitude exacte pour un problème à trois corps[34].

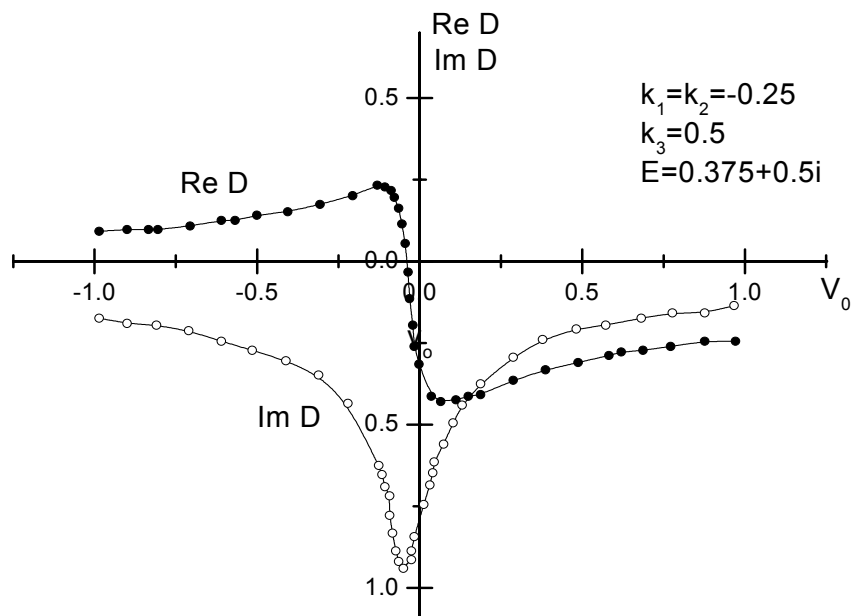


Fig.1-2 : parties réelle et imaginaire de l'amplitude approchée par la TIMF pour un problème à trois corps[34].

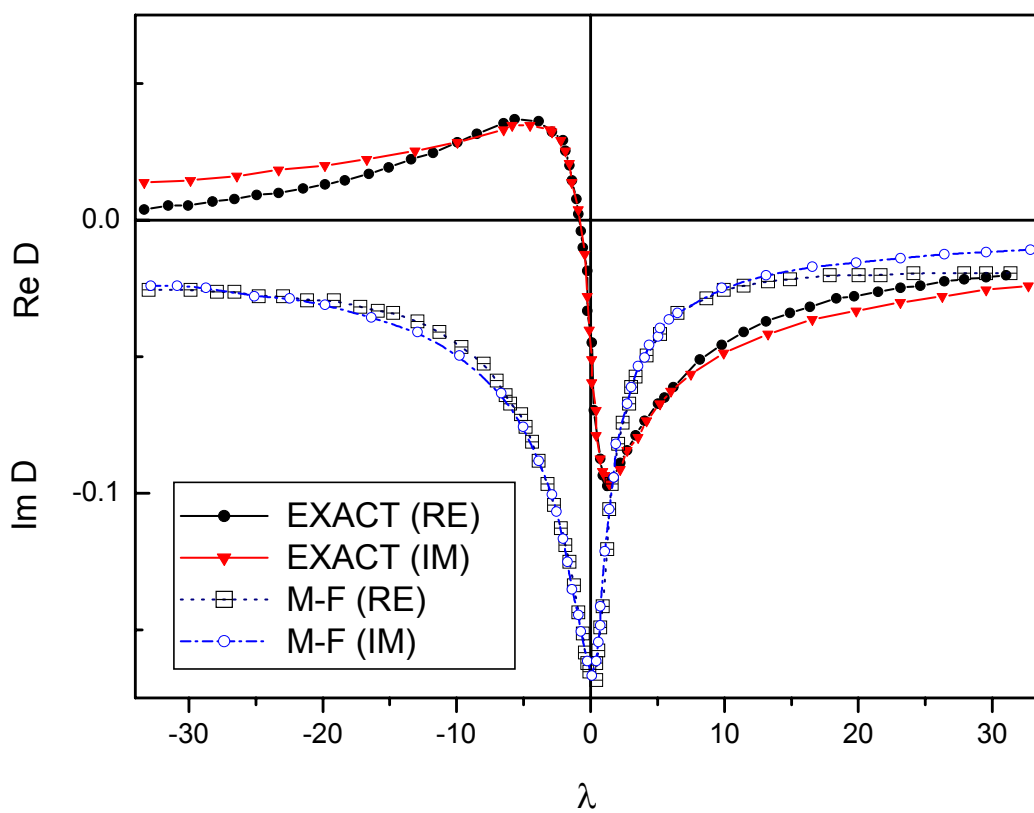


Fig I-3 : modèle à quatre corps avec un potentiel séparable, l'amplitude exacte (en trait plein) et l'amplitude approchée par TIMF (en pointillés) [34]

Chapitre II
Les équations de Faddeev

Chapitre II

LES EQUATIONS DE FADDEEV

II-1 Introduction

Le but de ce travail, comme nous l'avons spécifié dans l'introduction principale, est la résolution des équations de Faddeev par la théorie du champ moyen indépendant du temps. Il nous paraît indispensable, avant d'entamer cette résolution, de faire un rappel sur ces équations.

Dans la théorie de diffusion, l'équation de Lippmann-Schwinger est une équation fondamentale. Elle peut se mettre sous la forme suivante [1] :

$$\Psi = \chi + G_0 V \Psi \quad (\text{II-1})$$

ou encore

$$\Psi = \chi + G V \chi \quad (\text{II-2})$$

avec Ψ qui est la fonction d'onde totale de diffusion, χ la fonction d'onde incidente et V le potentiel total d'interaction. G_0 et G représentent les opérateurs de Green qui s'écrivent comme suit :

:

$$\begin{aligned} G_0 &= \frac{1}{E - H_0}, \\ G &= \frac{1}{E - H}. \end{aligned} \quad (\text{II-3})$$

où H est l'Hamiltonien du système en interaction, H_0 la partie cinétique du système et E l'énergie complexe dont la partie imaginaire est infinitésimale.

Pour un problème à deux corps, une solution de l'équation de Lippmann-Schwinger **Eq.(II-1)** peut être trouvée. Précisons néanmoins que le noyau $K = G_0V$ de cette équation n'est pas de carré sommable. Cependant, une simple manipulation (comme une itération ou une multiplication de l'équation par $V^{\frac{1}{2}}$) peut rendre ce noyau de carré sommable et la théorie de Fredholm [35] peut alors être appliquée et on arrive à une bonne solution de cette équation

Pour un problème à trois corps et plus, il est connu que des problèmes apparaissent lors de la résolution de l'équation de Lippmann-Schwinger. En effet, le développement du potentiel en termes d'interaction à deux corps mène à l'apparition d'une "dangereuse" fonction delta dans l'espace des impulsions ; En substituant la fonction d'onde Ψ par son expression dans le second membre de la relation **Eq.(II-1)** nous trouvons que le noyau peut s'écrire comme une série de G_0V infinie :

$$K = G_0V + G_0VG_0V + \dots \quad , \quad \text{(II-4)}$$

qui peut être schématisé par les diagrammes suivants :

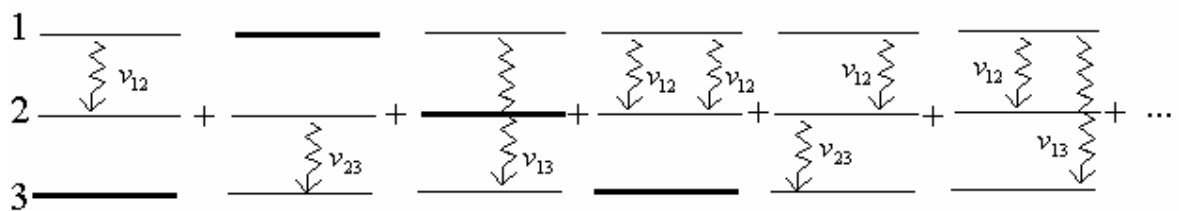


Fig.I-1 : Représentation graphique du noyau de l'équation de Lippmann- Schwinger pour un problème à trois corps.

Chaque diagramme montre l'interaction entre deux particules alors que la troisième (représentée en gras) n'interagit pas et est considérée comme spectatrice. C'est justement ce type de particule qui mène, dans les calculs, à l'apparition de la fonction δ .

En plus de l'apparition de la fonction delta, il faut aussi rajouter que, contrairement au problème à deux corps, dans le trois corps il n'y a pas de solution unique mais plutôt des solutions multiples.

Pour surmonter ces différentes difficultés, Faddeev [2-5] a proposé un réarrangement de l'équation de Lippmann-Schwinger et a pu montrer que le noyau de l'équation réarrangée devient compact.

II-2 Formalisme général

2-a- Equations de Faddeev en termes d'opérateurs de transitions

L'idée de base de cette méthode est d'introduire l'opérateur de transition et d'utiliser ses propriétés.

Dans un souci de compréhension, il nous paraît nécessaire d'explicitier les différentes étapes empruntées par Faddeev. Pour cela, considérons un système à trois corps distincts, non relativistes et de masses m_1, m_2 et m_3 respectivement.

L'Hamiltonien du système s'écrit :

$$H = H_0 + V \quad \text{(II-5)}$$

où H_0 représente l'opérateur énergie cinétique du système et V le potentiel d'interaction total, qui peut être développé sous la forme suivante :

$$V = v_{23} + v_{13} + v_{12} \quad \text{(II-6)}$$

où les v_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$ et $i \neq j$) sont des potentiels moyens à deux corps. Par exemple le potentiel v_{12} représente l'interaction entre les particules 1 et 2.

L'opérateur de transition total est défini par la relation suivante [1] :

$$T(E) = V + V G V \quad (\text{II-7})$$

et il satisfait aussi à l'équation de Lippmann-Schwinger :

$$T(E) = V + V G_0 T(E) \quad (\text{II-8})$$

Nous pouvons remarquer que le noyau de cette dernière équation est du même type que celui de l'équation **Eq.(II-1)**. Donc, il présente le même désavantage. Pour y palier, Faddeev a décomposé l'opérateur de transition total T en trois termes indépendants :

$$T(E) = T^{(1)}(E) + T^{(2)}(E) + T^{(3)}(E) \quad (\text{II-9})$$

Les expressions de ces trois termes sont obtenues en utilisant la définition **Eq.(II-8)** de T et en considérant, à chaque fois, les différentes interactions à deux corps possibles dans le système à trois particules. Par exemple, l'opérateur $T^{(1)}(E)$ s'écrit :

$$T^{(1)}(E) = v_{23} + v_{23} G_0 T(E), \quad (\text{II-10a})$$

De même

$$T^{(2)}(E) = v_{13} + v_{13} G_0 T(E), \quad (\text{II-10b})$$

et

$$T^{(3)}(E) = v_{12} + v_{12} G_0 T(E), \quad (\text{II-10c})$$

ou encore, en généralisant, on arrive à :

$$T^{(k)}(E) = v_{ij} + v_{ij} G_0 T(E). \quad (\text{II-11})$$

avec $(i, j, k = 1, 2, 3, \text{ et } i \neq j \neq k)$.

Nous pouvons reformuler $T^{(k)}$ en fonction des opérateurs de transition à deux corps T_{ij} ($i, j, k = 1, 2, 3$, et $i \neq j \neq k$) en utilisant la définition de T_{ij} qui est donnée par [1] :

$$T_{ij}(E) = v_{ij} + v_{ij}G_0 T_{ij}(E) \quad (\text{II-12})$$

et on obtient :

$$T^{(k)}(E) = T_{ij}(E) + T_{ij}(E)G_0[T^{(i)}(E) + T^{(j)}(E)] \quad (\text{II-13})$$

Cette équation est appelée équation de Faddeev et elle peut être réécrite pour chaque terme de T total. Ces trois équations de Faddeev exprimées en termes d'opérateurs de transition à deux corps et trois corps peuvent être présentées sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} T^{(1)}(E) \\ T^{(2)}(E) \\ T^{(3)}(E) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{23}(E) \\ T_{13}(E) \\ T_{12}(E) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & T_{23}(E) & T_{23}(E) \\ T_{13}(E) & 0 & T_{13}(E) \\ T_{12}(E) & T_{12}(E) & 0 \end{pmatrix} G_0 \begin{pmatrix} T^{(1)}(E) \\ T^{(2)}(E) \\ T^{(3)}(E) \end{pmatrix} \quad (\text{II-14})$$

Cette écriture est avantageuse dans la mesure où elle permet une meilleure présentation du problème et facilite ainsi sa résolution.

Dans cette équation **Eq.(II-14)**, le produit :

$$[K] = \begin{pmatrix} 0 & T_{23}(E) & T_{23}(E) \\ T_{13}(E) & 0 & T_{13}(E) \\ T_{12}(E) & T_{12}(E) & 0 \end{pmatrix} G_0 \quad (\text{II-15})$$

est appelé le noyau de Faddeev . Remarquons que ce noyau n'est toujours pas de carré sommable mais, une itération de cette même équation matricielle le rend de carré sommable. En effet, l'itération de l'équation **Eq.(II-15)**, nous donne :

$$\begin{pmatrix} T^{(1)}(E) \\ T^{(2)}(E) \\ T^{(3)}(E) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{23}(E) \\ T_{13}(E) \\ T_{12}(E) \end{pmatrix} + [K] \begin{pmatrix} T_{23}(E) \\ T_{13}(E) \\ T_{12}(E) \end{pmatrix} + [K^2] \begin{pmatrix} T^{(1)}(E) \\ T^{(2)}(E) \\ T^{(3)}(E) \end{pmatrix} \quad (\text{II-16})$$

avec

$$[K^2] = \begin{bmatrix} T_{23}G_0T_{31} + T_{23}G_0T_{12} & T_{23}G_0T_{12} & T_{23}G_0T_{31} \\ T_{31}G_0T_{12} & T_{31}G_0T_{23} + T_{31}G_0T_{12} & T_{31}G_0T_{23} \\ T_{12}G_0T_{31} & T_{12}G_0T_{23} & T_{12}G_0T_{23} + T_{12}G_0T_{31} \end{bmatrix} G_0 \quad (\text{II-17})$$

le nouveau noyau devient $[K^2]$ et il ne contient que des éléments liés comme par exemple, $K_{12}^2 = T_{23}G_0T_{12}G_0$. Ce noyau est compact ou de carré sommable et la solution de l'équation **Eq.(II-14)** devient unique.

2-b- Equations de Faddeev en termes d'opérateurs de Green

Des équations similaires peuvent être écrites également pour l'opérateur de Green total ainsi que pour les fonctions d'ondes Ψ .

L'équation de Lippmann-Schwinger satisfaite par les opérateurs de Green est donnée par cette expression [1] :

$$G = G_0 + GV G_0, \quad (\text{II-18})$$

ou encore, pour une interaction i, j , par :

$$G_{ij} = G_0 + G_0 T_{ij}(E) G_0. \quad (\text{II-19})$$

En suivant le même ordre d'idée que celui de l'équation **Eq.(II-9)**, Faddeev[2] a développé l'opérateur de Green sous la forme suivante :

$$G = G_0 + G^{(1)} + G^{(2)} + G^{(3)} \quad \text{(II-20)}$$

avec

$$G^{(k)} = G_0 T^{(k)}(E) G_0 \quad , \quad \text{(II-21)}$$

et $k = 1, 2, 3$.

En remplaçant $T^{(k)}$ par son expression (**Eq.II-13**), nous arrivons à une nouvelle forme de $G^{(k)}$:

$$G^{(k)} = G_{ij} - G_0 + G_0 T_{ij}(E) [G^{(i)} + G^{(j)}] \quad \text{(II-22)}$$

où les opérateurs de Green G_{ij} sont définis par :

$$G_{ij} = \frac{1}{E - H_k} \quad \text{(II-23a)}$$

avec

$$H_k = H_0 + v_{ij} \quad \text{(II-23b)}$$

L'équation **Eq.(II-22)** peut être écrite pour $k = 1, 2, 3$ et $i \neq j \neq k$. Ces trois équations peuvent se mettre sous une forme matricielle et on obtient ainsi les équations de Faddeev en fonction des opérateurs de Green et de transition à deux corps.

$$\begin{pmatrix} G^{(1)} \\ G^{(2)} \\ G^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{23} - G_0 \\ G_{31} - G_0 \\ G_{12} - G_0 \end{pmatrix} + G_0 \begin{pmatrix} 0 & T_{23}(E) & T_{23}(E) \\ T_{31}(E) & 0 & T_{31}(E) \\ T_{12}(E) & T_{12}(E) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G^{(1)} \\ G^{(2)} \\ G^{(3)} \end{pmatrix} \quad . \quad \text{(II-24)}$$

2-c- Equations de Faddeev en termes de fonctions d'ondes

De la même manière, on peut retrouver la fonction d'onde totale Ψ du système à trois particules dont les composantes $\Psi^{(k)}$ sont appelées les composantes de Faddeev. Ψ peut s'écrire :

$$\Psi = \Psi^{(1)} + \Psi^{(2)} + \Psi^{(3)} \quad (\text{II-25})$$

En utilisant les relations qui lient $\Psi^{(k)}$ ($k = 1, 2, 3$) à $G^{(k)}$ et donnée par l'expression ci après[2] :

$$\Psi^{(k)} = \lim_{\Gamma \rightarrow 0} G^{(k)}(E) \chi \quad (\text{II-26})$$

ainsi que l'équation **Eq.(II-24)**, nous arrivons à des équations des $\Psi^{(k)}$ présentées sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \\ \Psi^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + G_0 \begin{pmatrix} 0 & T_{23}(E) & T_{23}(E) \\ T_{31}(E) & 0 & T_{31}(E) \\ T_{12}(E) & T_{12}(E) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \\ \Psi^{(3)} \end{pmatrix} \quad (\text{II-27})$$

Notons que dans cette écriture **Eq.(II-27)**, la fonction χ est prise sous forme d'une colonne avec juste sa première composante car nous avons choisi comme voie de collision initiale la voie 1 où la particule 1, considérée comme particule libre, interagit avec un état lié formé par la paire formée par les particules 2 et 3.

Sachant que [1] :

$$G_{ij} v_{ij} = G_0 T_{ij} , \quad (\text{II-28})$$

Nous pouvons réécrire les équations de Faddeev **Eq.(II-27)**, pour les fonctions d'ondes $\Psi^{(k)}$ sous une nouvelle forme qui sera :

$$\begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \\ \Psi^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & G_{23}v_{23} & G_{23}v_{23} \\ G_{31}v_{31} & 0 & G_{31}v_{31} \\ G_{12}v_{12} & G_{12}v_{12} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \\ \Psi^{(3)} \end{pmatrix} \quad \text{(II-29)}$$

avec

$$G_{23} = (E - H_0 - v_{23})^{-1}, \quad G_{31} = (E - H_0 - v_{31})^{-1} \quad \text{et} \quad G_{12} = (E - H_0 - v_{12})^{-1}.$$

Il s'agit maintenant de résoudre ce type d'équations de Faddeev. Il est difficile de solutionner ces équations de façon exacte lorsque le nombre de particules N qui composent le système en interaction est supérieur ou égal à trois ($N \geq 3$). Donc, des méthodes approximatives s'avèrent nécessaires.

Chapitre III

*Résolution des Equations de
Faddeev par la Théorie du Champ
Moyen Indépendant du Temps
-Problème à trois Corps-*

CHAPITRE III

RESOLUTION DES EQUATIONS DE FADDEEV PAR LA THEORIE DU CHAMP MOYEN INDEPENDANT DU TEMPS -PROBLEME A TROIS CORPS-

III- 1 Introduction

Différentes approches [6,7] ont déjà été utilisées pour la résolution des équations de Faddeev. Nous nous proposons, dans ce qui va suivre, de présenter les solutions de ces équations, que nous avons obtenues pour un système à trois corps distincts à l'aide de l'approche variationnelle TIMF.

L'avantage de l'utilisation de la TIMF par rapport aux autres méthodes approximatives, réside dans la forme simplifiée des solutions que l'on obtient et surtout dans la possibilité d'estimer à partir de ces solutions, l'amplitude de diffusion à l'aide de la relation **Eq.(I-15)** de la fonctionnelle.

Nous nous proposons donc de trouver une fonctionnelle dont les conditions de stationnarité sont les équations de Faddeev.

III-2 Application de la TIMF pour la résolution des équations de Faddeev

Considérons un système à trois particules, que l'on notera 1,2 et 3 de masses m_1, m_2 et m_3 respectivement. Nous choisissons pour l'instant de traiter le cas de particules distinctes interagissant via des forces de " courte portée ". Les cas de particules identiques, des forces à " longue portée " (particules chargées), des diffusions inélastiques ainsi que d'autres complications peuvent être pris en considération après s'être familiarisé avec les nombreux calculs.

L'Hamiltonien H régissant ce système s'écrit :

$$H = H_0 + v_{23} + v_{13} + v_{12} \quad (\text{III-1})$$

où

H_0 est toujours l'opérateur énergie cinétique et le potentiel total est décomposé en potentiels à deux corps.

Comme nous l'avons spécifié dans le chapitre précédent, la fonction d'onde totale du système est décomposée en une somme de composantes $\Psi^{(\alpha)}$, avec α qui représente la partition considérée ; $\alpha = 1(\equiv 23)$, $2(\equiv 31)$, $3(\equiv 12)$. Ainsi pour $\alpha = 1(\equiv 23)$, nous considérons la particule 1 comme spectatrice libre et l'état lié de la cible est représenté pour la paire de particules 2 et 3.

Ces composantes $\Psi^{(\alpha)}$ ($\alpha = 1,2,3$), satisfont aux équations de Faddeev :

$$\begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \\ \Psi^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & G_1 v_1 & G_1 v_1 \\ G_2 v_2 & 0 & G_2 v_2 \\ G_3 v_3 & G_3 v_3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \\ \Psi^{(3)} \end{pmatrix} \quad (\text{III-2})$$

où

$$G_1 = \frac{1}{E - H_1} = \frac{1}{E - H_0 - v_1}, \quad v_1 = v_{23} \text{ (la particule 1 est spectatrice).}$$

$$G_2 = \frac{1}{E - H_2} = \frac{1}{E - H_0 - v_2}, \quad v_2 = v_{13} \text{ (la particule 2 est spectatrice).} \quad (\text{III-3a})$$

$$G_3 = \frac{1}{E - H_3} = \frac{1}{E - H_0 - v_3}, \quad v_3 = v_{12} \text{ (la particule 3 est spectatrice).}$$

avec

$$H_1 = H_0 + v_{23}, \quad H_2 = H_0 + v_{13} \quad \text{et} \quad H_3 = H_0 + v_{12}. \quad (\text{III-3b})$$

E est toujours l'énergie du système prise complexe.

Remarquons que nous choisissons la voie 1 comme voie d'entrée ; la composante χ_1 est solution de l'équation de Schrödinger satisfaite par la composante de la fonction d'onde $\Psi^{(1)}$ c'est-à-dire :

$$H_1\Psi^{(1)} = E\Psi^{(1)} \quad (\text{III-4})$$

III-3 -1 Choix de la fonctionnelle

Lorsqu'on soustrait à la fonction d'onde Ψ ses termes inhomogènes, on obtient de nouvelles fonctions qui seront des fonctions d'essai, ainsi :

$$\Phi^{(1)} = \Psi^{(1)} - \chi_1, \quad \Phi^{(2)} = \Psi^{(2)} \quad \text{et} \quad \Phi^{(3)} = \Psi^{(3)}, \quad (\text{III-5})$$

et l'équation **Eq.(III-2)** prend la nouvelle forme suivante :

$$\begin{pmatrix} \Phi^{(1)} \\ \Phi^{(2)} \\ \Phi^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ G_2 v_2 \chi_1 \\ G_3 v_3 \chi_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & G_1 v_1 & G_1 v_1 \\ G_2 v_2 & 0 & G_2 v_2 \\ G_3 v_3 & G_3 v_3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi^{(1)} \\ \Phi^{(2)} \\ \Phi^{(3)} \end{pmatrix} \quad (\text{III-6})$$

En multipliant chaque ligne α de l'équation précédente par $(G_\alpha)^{-1}$, nous obtenons :

$$\begin{pmatrix} E - H_1 & -v_1 & -v_1 \\ -v_2 & E - H_2 & -v_2 \\ -v_3 & -v_3 & E - H_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi^{(1)} \\ \Phi^{(2)} \\ \Phi^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ v_2 \chi_1 \\ v_3 \chi_1 \end{pmatrix} \quad (\text{III-7})$$

Si on pose :

$$\Phi = \begin{pmatrix} \Phi^{(1)} \\ \Phi^{(2)} \\ \Phi^{(3)} \end{pmatrix}, \quad \sigma = \begin{pmatrix} 0 \\ v_2 \chi_1 \\ v_3 \chi_1 \end{pmatrix}, \quad (\text{III-8a})$$

et

$$M = \begin{pmatrix} E - H_1 & -v_1 & -v_1 \\ -v_2 & E - H_2 & -v_2 \\ -v_3 & -v_3 & E - H_3 \end{pmatrix}, \quad (\text{III-8b})$$

l'équation **Eq.(III-7)** peut être formulée comme suit :

$$M \Phi = \sigma. \quad (\text{III-9})$$

Nous avons vu dans le chapitre I, que l'amplitude de propagation **Eq.(I-9)** est calculée à partir des fonctions d'essai Φ et Φ' que l'on obtient par les conditions de stationnarités de la fonctionnelle. Pour cela, considérons la fonctionnelle suivante :

$$\mathcal{F}(\Phi, \Phi') = \langle \Phi' | \sigma \rangle + \langle \sigma' | \Phi \rangle - \langle \Phi' | M | \Phi \rangle \quad (\text{III-10})$$

Cette fonctionnelle dépend des "vecteurs" de fonctions d'essai Φ et Φ' qu'il faudra choisir infiniment flexibles pour se rapprocher au maximum de l'amplitude de propagation exacte.

Pour trouver Φ , il faut résoudre l'équation **Eq.(III-9)**. Il s'agit donc d'inverser la matrice M

$$\Phi = M^{-1} \sigma. \quad (\text{III-11})$$

Cette solution Φ , un vecteur avec ses trois composantes, nous permettra d'obtenir l'amplitude de propagation approximée par la TIMF. En effet, l'amplitude de propagation exacte (terme de Born non compris) s'écrit comme [32] :

$$D = \langle \chi' | (v_2 + v_3) | \Psi - \chi \rangle, \quad (\text{III-12})$$

et si l'on tient compte des conditions de remplacement des équations **Eqs.(III-5)**, nous pouvons obtenir l'amplitude approchée par la TIMF :

$$\bar{D} = \langle \chi' | (v_2 + v_3) | \Phi \rangle, \quad \text{(III-13)}$$

ou encore

$$\bar{D} = (\langle \chi' | (v_2 + v_3), \langle \chi' | (v_2 + v_3), \langle \chi' | (v_2 + v_3)) \begin{pmatrix} \Phi^{(1)} \\ \Phi^{(2)} \\ \Phi^{(3)} \end{pmatrix}. \quad \text{(III-14)}$$

En posant :

$$\langle \sigma' | = \langle \chi' | (v_2 + v_3) (1,1,1), \quad \text{(III-15)}$$

où χ' est la fonction d'onde de la voie finale et en tenant compte des équations **Eqs.(III-11,13,15)**, l'amplitude de propagation s'écrit alors :

$$\bar{D} = \langle \sigma' | M^{-1} | \sigma \rangle. \quad \text{(III-16)}$$

En calculant les conditions de stationnarité de \mathcal{F} par rapport à Φ et Φ' nous arrivons à :

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \Phi |} = \langle \sigma' | - \langle \Phi' | M = 0, \quad \text{(III-17a)}$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \Phi' |} = | \sigma \rangle - M | \Phi \rangle = 0. \quad \text{(III-17b)}$$

qui nous donnent les deux solutions :

$$| \Phi \rangle = M^{-1} | \sigma \rangle,$$

et

$$\langle \Phi' | = \langle \sigma' | M^{-1}. \quad \text{(III-18)}$$

Notons, comme nous l'avons déjà expliqué dans le chapitre I, qu'il est aisé de vérifier que le remplacement de Φ et Φ' par leurs expressions dans la fonctionnelle, **Eq.(III-10)**, nous donnera bien l'amplitude de propagation \bar{D} approchée par la TIMF.

L'inversion de la matrice d'opérateurs M étant un calcul ardu, nous nous proposons de faciliter l'estimation des fonctions d'essai en les substituant par leurs composantes et réécrire ainsi de nouvelles conditions de stationnarités simplifiées. Substituons σ, σ' et M par leurs expressions dans la relation **Eq.(III-10)**, la fonctionnelle \mathcal{F} s'écrit alors plus explicitement en termes des composantes de Φ et Φ' :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\Phi, \Phi') = & \langle \Phi^{(2)} | v_2 | \chi \rangle + \langle \Phi^{(3)} | v_3 | \chi \rangle + \langle \chi' | v_2 + v_3 | \Phi^{(1)} \rangle + \langle \chi' | (v_2 + v_3) | \Phi^{(2)} \rangle + \\ & \langle \chi' | (v_2 + v_3) | \Phi^{(3)} \rangle - \langle \Phi^{(1)} | (E - H_1) | \Phi^{(1)} \rangle + \langle \Phi^{(1)} | v_1 | \Phi^{(2)} \rangle + \langle \Phi^{(1)} | v_1 | \Phi^{(3)} \rangle + \langle \Phi^{(2)} | v_2 | \Phi^{(1)} \rangle - \\ & \langle \Phi^{(2)} | (E - H_2) | \Phi^{(2)} \rangle + \langle \Phi^{(2)} | v_2 | \Phi^{(3)} \rangle + \langle \Phi^{(3)} | v_3 | \Phi^{(1)} \rangle + \langle \Phi^{(3)} | v_3 | \Phi^{(2)} \rangle - \langle \Phi^{(3)} | (E - H_3) | \Phi^{(3)} \rangle. \end{aligned} \quad \text{(III-19)}$$

Le calcul des conditions de stationnarité de \mathcal{F} par rapport à $\Phi^{(1)}, \Phi^{(2)}, \Phi^{(3)}$ nous donne le système d'équations suivantes :

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \Phi^{(1)} |} = 0, \quad \langle \Phi^{(1)} | (E - H_1) - \langle \Phi^{(2)} | v_2 - \langle \Phi^{(3)} | v_3 = \langle \chi' | (v_2 + v_3), \quad \text{(III-19a)}$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \Phi^{(2)} |} = 0, \quad -\langle \Phi^{(1)} | v_1 - \langle \Phi^{(2)} | (E - H_2) - \langle \Phi^{(3)} | v_3 = \langle \chi' | (v_2 + v_3), \quad \text{(III-19b)}$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \Phi^{(3)} |} = 0, \quad -\langle \Phi^{(1)} | v_1 - \langle \Phi^{(2)} | v_2 + \langle \Phi^{(3)} | (E - H_3) = \langle \chi' | (v_2 + v_3). \quad \text{(III-19c)}$$

Il est évident que ce système possède une solution unique :

$$\Phi^{(1)} = \Phi^{(2)} = \Phi^{(3)} \quad . \quad \text{(III-20)}$$

Appelons Ξ' cette fonction commune. Chacune des trois équations, **Eqs. (III-19)**, sera résolue si cette fonction Ξ' satisfait à la condition suivante :

$$\langle \Xi' | (E - H) = \langle \chi' | (v_2 + v_3) \quad \text{(III-21)}$$

Les variations de \mathcal{F} par rapport à $\Phi^{(1)}$, $\Phi^{(2)}$ et $\Phi^{(3)}$ nous donnent :

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \Phi^{(1)} |} = - (E - H_1) | \Phi^{(1)} \rangle + v_1 | \Phi^{(2)} \rangle + v_1 | \Phi^{(3)} \rangle = 0, \quad \text{(III-22a)}$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \Phi^{(2)} |} = v_2 | \chi \rangle + v_2 | \Phi^{(1)} \rangle - (E - H_2) | \Phi^{(2)} \rangle + v_2 | \Phi^{(3)} \rangle = 0, \quad \text{(III-22b)}$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \Phi^{(3)} |} = v_3 | \chi \rangle + v_3 | \Phi^{(1)} \rangle + v_3 | \Phi^{(2)} \rangle - (E - H_3) | \Phi^{(3)} \rangle = 0. \quad \text{(III-22c)}$$

III- 3-2 Factorisation des fonctions d'essai par rapport à une Représentation du système

L'un des principes de base de l'approximation TIMF consiste à prendre les fonctions d'essai $\Phi^{(1)}$, $\Phi^{(1)}$, $\Phi^{(2)}$, $\Phi^{(2)}$, $\Phi^{(3)}$, $\Phi^{(3)}$ comme des produits d'orbitales individuelles. De plus, nous choisissons de travailler dans la représentation des coordonnées de Jacobi $(\vec{\rho}, \vec{r})$, ces différentes fonctions d'essai s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} \Phi^{(1)}(\vec{\rho}, \vec{r}) &= \varphi_1(\vec{\rho}) \zeta_1(\vec{r}), & \Phi'^{(1)}(\vec{\rho}, \vec{r}) &= \varphi'_1(\vec{\rho}) \zeta'_1(\vec{r}), \\ \Phi^{(2)}(\vec{\rho}, \vec{r}) &= \varphi_2(\vec{\rho}) \zeta_2(\vec{r}), & \Phi'^{(2)}(\vec{\rho}, \vec{r}) &= \varphi'_2(\vec{\rho}) \zeta'_2(\vec{r}), \\ \Phi^{(3)}(\vec{\rho}, \vec{r}) &= \varphi_3(\vec{\rho}) \zeta_3(\vec{r}), & \Phi'^{(3)}(\vec{\rho}, \vec{r}) &= \varphi'_3(\vec{\rho}) \zeta'_3(\vec{r}). \end{aligned} \quad \text{(III-23)}$$

avec les coordonnées de Jacobi $\vec{\rho}$ et \vec{r} qui sont schématisées sur la figure suivante :

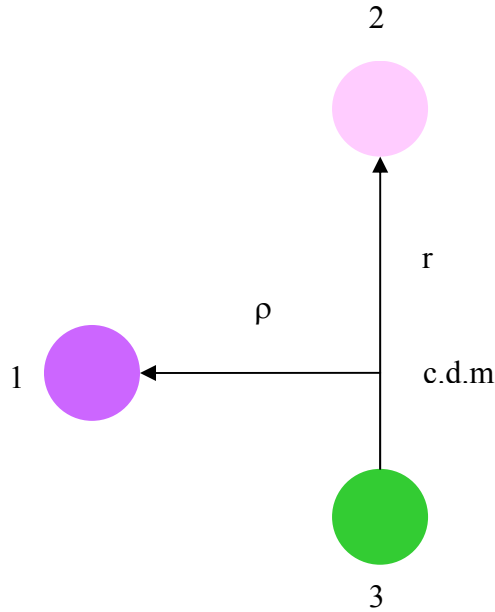


Fig.III-1 : représentation des coordonnées de Jacobi pour la partition 1.

Nous avons donc factorisé par rapport à une seule représentation. Il serait utile de remarquer que la factorisation en coordonnées de Jacobi brise la symétrie entre les particules et cette supposition peut rompre donc l'égalité **Eq.(III-20)**, entre $\Phi^{(1)}$, $\Phi^{(2)}$ et $\Phi^{(3)}$. Néanmoins, il est toujours possible d'imposer cette égalité en posant d'autres hypothèses restrictives.

De même que pour les fonctions d'essai, nous écrivons le terme de voie initial χ en fonction des coordonnées de Jacobi sous la forme d'un produit d'une onde plane ($e^{i\vec{k}\vec{\rho}}$) dont le vecteur d'onde initial est \vec{k} et d'une fonction d'onde liée ξ_b de la cible c'est-à-dire :

$$\langle \vec{\rho}, \vec{r} | \chi \rangle = \exp(i\vec{k}\vec{\rho}) \xi_b(\vec{r}). \quad \text{(III-24a)}$$

et le terme de voie finale χ' égal à :

$$\langle \chi' | \bar{\rho}, \bar{r} \rangle = \exp(i\bar{k}' \bar{\rho}) \xi_b(\bar{r}). \quad (\text{III-24b})$$

Nous remplaçons $\Phi^{(1)}, \Phi^{(1)}, \Phi^{(2)}, \Phi^{(2)}, \Phi^{(3)}, \Phi^{(3)}$ dans l'expression de la fonctionnelle \mathcal{F} , **Eq.(III-19)**, par leurs nouvelles formes, **Eqs.(III-23)**, et nous devons maintenant, réécrire les conditions de stationnarités de la fonctionnelle \mathcal{F} par rapport aux différentes fonctions d'essai ou plus précisément, les variations de la fonctionnelle par rapport à chaque orbitale individuelle. En effet, en tenant compte des différentes factorisations des fonctions d'essai **Eqs.(III-23)**, et de voies **Eqs.(III-24)**, les variations de \mathcal{F} doivent se faire par rapport aux orbitales individuelles.

Par exemple, pour calculer la condition $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial |\varphi_1\rangle} = 0$, il faut tout d'abord substituer dans la fonctionnelle \mathcal{F} , **Eq.(III-19)**, $\Phi^{(1)}$ par son produit, **Eq.(III-23)**, et ensuite dériver par rapport à φ_1 .

Les termes apparaissant dans \mathcal{F} contenant le $\Phi^{(1)}$ sont :

$$\begin{aligned} & [\langle \chi' | (v_2 + v_3) - \langle \Phi^{(1)} | (E - H_1) + \langle \Phi^{(2)} | v_2 + \langle \Phi^{(3)} | v_3] | \Phi^{(1)} \rangle = \langle \bar{k}' \xi_b | (v_2 + v_3) | \varphi_1 \zeta_1 \rangle + \\ & \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle [-E \langle \zeta_1' | \zeta_1 \rangle + \langle \zeta_1' | (h_r + v_1) | \zeta_1 \rangle] + \langle \varphi_2' \zeta_2' | v_2 | \varphi_1 \zeta_1 \rangle + \langle \varphi_3' \zeta_3' | v_3 | \varphi_1 \zeta_1 \rangle \end{aligned} \quad (\text{III-25})$$

La condition $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial |\varphi_1\rangle} = 0$, donnera alors (voir annexe) :

$$\langle \zeta_1' | \zeta_1 \rangle \langle \varphi_1' | (\eta_1 - h_\rho) - \langle \zeta_2' | \zeta_1 \rangle \langle \varphi_2' | U_{21} - \langle \zeta_3' | \zeta_1 \rangle \langle \varphi_3' | U_{31} = \langle \xi_b | \zeta_1 \rangle \langle \bar{k}' | (S'_{21} + S'_{31}), \quad (\text{III-25a})$$

avec les définitions suivantes des champs moyens :

$$U_{21}(\bar{\rho}) = \langle \zeta_2' | \zeta_1 \rangle^{-1} \int d\bar{r} \zeta_2^*(\bar{r}) \zeta_1(\bar{r}) v_2(\bar{\rho}, \bar{r}), \quad (\text{III-25b})$$

$$U_{31}(\bar{\rho}) = \langle \zeta_3' | \zeta_1 \rangle^{-1} \int d\bar{r} \zeta_3^*(\bar{r}) \zeta_1(\bar{r}) v_3(\bar{\rho}, \bar{r}), \quad (\text{III-25c})$$

$$S'_{21}(\vec{\rho}) = \langle \xi_b | \zeta_1 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \xi_b^*(\vec{r}) \zeta_1(\vec{r}) v_2(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad (\text{III-25d})$$

$$S'_{31}(\vec{\rho}) = \langle \xi_b | \zeta_1 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \xi_b^*(\vec{r}) \zeta_1(\vec{r}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad (\text{III-25e})$$

et l'énergie self consistante:

$$\eta_1 = E - \frac{\langle \zeta'_1 | (h_r + v_1) | \zeta_1 \rangle}{\langle \zeta'_1 | \zeta_1 \rangle}. \quad (\text{III-25f})$$

où h_r et h_ρ sont les opérateurs énergie cinétique :

$$h_\rho = \frac{p_\rho^2}{2\mu'}, \quad h_r = \frac{p_r^2}{2\mu} \quad (\text{III-26})$$

avec

$$\mu' = \frac{m_1(m_2 + m_3)}{(m_1 + m_2 + m_3)}, \quad \mu = \frac{m_2 m_3}{m_2 + m_3}. \quad (\text{III-26a})$$

Il est important de remarquer que nous avons transformé et simplifié l'équation **Eq.(III-19a)**, en une équation à un corps, **Eqs.(III-25)**. Cette équation est linéaire par rapport à $\langle \varphi'_1 |$, $\langle \varphi'_2 |$ et $\langle \varphi'_3 |$ et son terme inhomogène est dirigé par $\langle \vec{k}' |$.

Il devient donc plus facile de résoudre cette équation de Faddeev dans les espaces de ρ et r .

Nous pouvons de la même manière, calculer les conditions de stationnarité de \mathcal{F} par rapport à $\varphi'_1, \zeta_1, \zeta'_1, \varphi'_2, \zeta_2, \zeta'_2, \varphi'_3, \zeta_3, \zeta'_3$.

Ainsi, pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \varphi'_1 |} = 0$, nous avons:

$$\langle \zeta'_1 | \zeta_1 \rangle (\eta_1 - h_\rho) | \varphi_1 \rangle - \langle \zeta'_1 | \zeta_3 \rangle u_{13} | \varphi_3 \rangle - \langle \zeta'_1 | \zeta_2 \rangle u_{12} | \varphi_2 \rangle = 0, \quad (\text{III-27})$$

avec les champs moyens qui sont :

$$u_{13}(\vec{\rho}) = \langle \zeta'_1 | \zeta_3 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \zeta_1^*(\vec{r}) \zeta_3(\vec{r}) v_1(\vec{r}). \quad (\text{III-27a})$$

$$u_{12}(\bar{\rho}) = \langle \zeta'_1 | \zeta_2 \rangle^{-1} \int d\bar{r} \zeta_1^*(\bar{r}) \zeta_2(\bar{r}) v_1(\bar{r}), \quad (\text{III-27b})$$

et l'énergie self consistante :

$$\eta_1 = E - \frac{\langle \zeta'_1 | (h_r + v_1) | \zeta_1 \rangle}{\langle \zeta'_1 | \zeta_1 \rangle}. \quad (\text{III-27c})$$

Pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \zeta_1 \rangle} = 0$, on arrive à :

$$\langle \varphi'_1 | \varphi_1 \rangle \langle \zeta'_1 | (e_1 - h_r - v_1) \rangle - \langle \varphi'_2 | \varphi_1 \rangle \langle \zeta'_2 | \mu_{21} \rangle - \langle \varphi'_3 | \varphi_1 \rangle \langle \zeta'_3 | \mu_{31} \rangle = \langle \bar{k}' | \varphi_1 \rangle \langle \xi_b | (s'_{21} + s'_{31}), \quad (\text{III-28})$$

avec les champs moyens qui sont de la forme :

$$\mu_{31}(\bar{r}) = \langle \varphi'_3 | \varphi_1 \rangle^{-1} \int d\bar{\rho} \varphi_3^*(\bar{\rho}) \varphi_1(\bar{\rho}) v_3(\bar{\rho}, \bar{r}), \quad (\text{III-28a})$$

$$\mu_{21}(\bar{r}) = \langle \varphi'_2 | \varphi_1 \rangle^{-1} \int d\bar{\rho} \varphi_2^*(\bar{\rho}) \varphi_1(\bar{\rho}) v_2(\bar{\rho}, \bar{r}), \quad (\text{III-28b})$$

$$s'_{21}(\bar{r}) = \langle \bar{k}' | \varphi_1 \rangle^{-1} \int d\bar{\rho} \exp(-i\bar{k}' \cdot \bar{\rho}) \varphi_1(\bar{\rho}) v_2(\bar{\rho}, \bar{r}), \quad (\text{III-28c})$$

$$s'_{31}(\bar{r}) = \langle \bar{k}' | \varphi_1 \rangle^{-1} \int d\bar{\rho} \exp(-i\bar{k}' \cdot \bar{\rho}) \varphi_1(\bar{\rho}) v_3(\bar{\rho}, \bar{r}), \quad (\text{III-28d})$$

et l'énergie self consistante

$$e_1 = E - \frac{\langle \varphi'_1 | h_\rho | \varphi_1 \rangle}{\langle \varphi'_1 | \varphi_1 \rangle}. \quad (\text{III-28 e})$$

et pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \zeta'_1 \rangle} = 0$, nous obtenons :

$$\langle \varphi'_1 | \varphi_1 \rangle \langle e_1 - h_r - v_1 | \zeta_1 \rangle - \langle \varphi'_1 | \varphi_2 \rangle v_1 | \zeta_2 \rangle - \langle \varphi'_1 | \varphi_3 \rangle v_1 | \zeta_3 \rangle = 0. \quad (\text{III-29})$$

Pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \varphi_2 \rangle} = 0$, on a :

$$\langle \zeta'_2 | \zeta_2 \rangle \langle \varphi'_2 | (\eta_2 - h_\rho - U_{22}) \rangle - \langle \zeta'_1 | \zeta_2 \rangle \langle \varphi'_1 | u_{12} \rangle - \langle \zeta'_3 | \zeta_2 \rangle \langle \varphi'_3 | U_{32} \rangle = \langle \xi_b | \zeta_2 \rangle \langle \bar{k}' | (S'_{22} + S'_{32}),$$

(III-30)

où η_2 est la self énergie :

$$\eta_2 = E - \frac{\langle \zeta'_2 | h_r | \zeta_2 \rangle}{\langle \zeta'_2 | \zeta_2 \rangle}, \quad \text{(III-30a)}$$

Les champs moyens sont :

$$U_{22}(\vec{\rho}) = \langle \zeta'_2 | \zeta_2 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \zeta_2^*(\vec{r}) \zeta_2(\vec{r}) v_2(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad \text{(III-30b)}$$

$$U_{32}(\vec{\rho}) = \langle \zeta'_3 | \zeta_2 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \zeta_3^*(\vec{r}) \zeta_2(\vec{r}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad \text{(III-30c)}$$

$$S'_{22}(\vec{\rho}) = \langle \xi_b | \zeta_2 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \xi_b^*(\vec{r}) \zeta_2(\vec{r}) v_2(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad \text{(III-30d)}$$

$$S'_{32}(\vec{\rho}) = \langle \xi_b | \zeta_2 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \xi_b^*(\vec{r}) \zeta_2(\vec{r}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r}). \quad \text{(III-30f)}$$

Pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \varphi_2 |} = 0$, on arrive à :

$$\langle \zeta'_2 | \zeta_2 \rangle (\eta_2 - h_p - U_{22}) | \varphi_2 \rangle - \langle \zeta'_2 | \zeta_1 \rangle U_{21} | \varphi_1 \rangle - \langle \zeta'_2 | \zeta_3 \rangle U_{23} | \varphi_3 \rangle = \langle \zeta'_2 | \xi_b \rangle S_{22} | \vec{k} \rangle, \quad \text{(III-31)}$$

Les champs moyens sont :

$$U_{21}(\vec{\rho}) = \langle \zeta'_2 | \zeta_1 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \zeta_2^*(\vec{r}) \zeta_1(\vec{r}) v_2(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad \text{(III-31a)}$$

$$U_{23}(\vec{\rho}) = \langle \zeta'_2 | \zeta_3 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \zeta_2^*(\vec{r}) \zeta_3(\vec{r}) v_2(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad \text{(III-31b)}$$

$$S_{22}(\vec{\rho}) = \langle \zeta'_2 | \xi_b \rangle^{-1} \int d\vec{r} \zeta_2^*(\vec{r}) \xi_b(\vec{r}) v_2(\vec{\rho}, \vec{r}). \quad \text{(III-31c)}$$

La dérivée de \mathcal{F} par rapport à ζ_2 , on a :

$$\langle \varphi_2' | \varphi_2 \rangle \langle \zeta_2' | (e_2 - h_r - \mu_{22}) - \langle \varphi_3' | \varphi_2 \rangle \langle \zeta_3' | \mu_{32} - \langle \varphi_1' | \varphi_2 \rangle \langle \zeta_1' | v_1 = \langle \bar{k}' | \varphi_2 \rangle \langle \xi_b | (s'_{22} + s'_{32}), \quad (\text{III-32})$$

La self énergie est :

$$e_2 = E - \frac{\langle \varphi_2' | h_\rho | \varphi_2 \rangle}{\langle \varphi_2' | \varphi_2 \rangle}, \quad (\text{III-32a})$$

Les champs moyens sont :

$$\mu_{22}(\vec{r}) = \langle \varphi_2' | \varphi_2 \rangle^{-1} \int d\vec{\rho} \varphi_2^*(\vec{\rho}) \varphi_2(\vec{\rho}) v_2(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad (\text{III-32b})$$

$$\mu_{32}(\vec{r}) = \langle \varphi_3' | \varphi_2 \rangle^{-1} \int d\vec{\rho} \varphi_3^*(\vec{\rho}) \varphi_2(\vec{\rho}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad (\text{III-32c})$$

$$s'_{22}(\vec{r}) = \langle \bar{k}' | \varphi_2 \rangle^{-1} \int d\vec{\rho} \exp(-i\bar{k}' \vec{\rho}) \varphi_2(\vec{\rho}) v_2(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad (\text{III-32d})$$

$$s'_{32}(\vec{r}) = \langle \bar{k}' | \varphi_2 \rangle^{-1} \int d\vec{\rho} \exp(-i\bar{k}' \vec{\rho}) \varphi_2(\vec{\rho}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r}). \quad (\text{III-32f})$$

Pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \zeta_2' |} = 0$, nous avons :

$$\langle \varphi_2' | \varphi_2 \rangle (e_2 - h_r - \mu_{22}) | \zeta_2 \rangle - \langle \varphi_2' | \varphi_1 \rangle \mu_{21} | \zeta_1 \rangle - \langle \varphi_2' | \varphi_3 \rangle \mu_{23} | \zeta_3 \rangle = \langle \varphi_2' | \bar{k} \rangle s_{22} | \xi_b \rangle, \quad (\text{III-33})$$

Les champs moyens sont :

$$\mu_{23}(\vec{r}) = \langle \varphi_2' | \varphi_3 \rangle^{-1} \int d\vec{\rho} \varphi_2^*(\vec{\rho}) \varphi_3(\vec{\rho}) v_2(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad (\text{III-33a})$$

$$s_{22}(\vec{r}) = \langle \varphi_2' | \bar{k} \rangle^{-1} \int d\vec{\rho} \varphi_2^*(\vec{\rho}) \exp(i\bar{k} \vec{\rho}) v_2(\vec{\rho}, \vec{r}). \quad (\text{III-33b})$$

Pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \varphi_3 \rangle} = 0$, on arrive à :

$$\langle \zeta_3' | \zeta_3 \rangle \langle \varphi_3' | (\eta_3 - h_\rho - U_{33}) - \langle \zeta_1' | \zeta_3 \rangle \langle \varphi_1' | u_{13} - \langle \zeta_2' | \zeta_3 \rangle \langle \varphi_2' | U_{23} = \langle \xi_b | \zeta_3 \rangle \langle \bar{k}' | (S'_{23} + S'_{33}). \quad (\text{III-34})$$

où la self énergie est:

$$\eta_3 = E - \frac{\langle \zeta'_3 | h_r | \zeta_3 \rangle}{\langle \zeta'_3 | \zeta_3 \rangle}, \quad (\text{III-34a})$$

Les champs moyens U_{33} , S'_{23} , S'_{33} sont :

$$U_{33}(\vec{\rho}) = \langle \zeta'_3 | \zeta_3 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \zeta_3^*(\vec{r}) \zeta_3(\vec{r}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad (\text{III-34b})$$

$$S'_{23}(\vec{\rho}) = \langle \xi_b | \zeta_3 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \xi_b^*(\vec{r}) \zeta_3(\vec{r}) v_2(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad (\text{III-34c})$$

$$S'_{33}(\vec{\rho}) = \langle \xi_b | \zeta_3 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \xi_b^*(\vec{r}) \zeta_3(\vec{r}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r}). \quad (\text{III-34d})$$

Pour La dérivée de \mathcal{F} par rapport à φ'_3 , on obtient:

$$\langle \zeta'_3 | \zeta_3 \rangle (\eta_3 - h_p - U_{33}) | \varphi_3 \rangle - \langle \zeta'_3 | \zeta_1 \rangle U_{31} | \varphi_1 \rangle - \langle \zeta'_3 | \zeta_2 \rangle U_{32} | \varphi_2 \rangle = \langle \zeta'_3 | \xi_b \rangle S_{33} | \vec{k} \rangle, \quad (\text{III-35})$$

où les champs moyens sont :

$$U_{31}(\vec{\rho}) = \langle \zeta'_3 | \zeta_1 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \zeta_3^*(\vec{r}) \zeta_1(\vec{r}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad (\text{III-35a})$$

$$S_{33}(\vec{\rho}) = \langle \zeta'_3 | \xi_b \rangle^{-1} \int d\vec{r} \zeta_3^*(\vec{r}) \xi_b(\vec{r}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r}). \quad (\text{III-35b})$$

Pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \zeta_3 \rangle} = 0$, nous avons:

$$\langle \varphi'_3 | \varphi_3 \rangle \langle \zeta'_3 | (e_3 - h_r - \mu_{33}) \rangle - \langle \varphi'_1 | \varphi_3 \rangle \langle \zeta'_1 | v_1 \rangle - \langle \varphi'_2 | \varphi_3 \rangle \langle \zeta'_2 | \mu_{23} \rangle = \langle \vec{k}' | \varphi_3 \rangle \langle \xi_b | (s'_{23} + s'_{33}) \rangle, \quad (\text{III-36})$$

où la self énergie est :

$$e_3 = E - \frac{\langle \varphi_3' | h_\rho | \varphi_3 \rangle}{\langle \varphi_3' | \varphi_3 \rangle}, \quad \text{(III-36a)}$$

et les champs moyens sont :

$$\mu_{33}(\vec{r}) = \langle \varphi_3' | \varphi_3 \rangle^{-1} \int d\vec{\rho} \varphi_3'^*(\vec{\rho}) \varphi_3(\vec{\rho}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad \text{(III-36b)}$$

$$s'_{23}(\vec{r}) = \langle \vec{k}' | \varphi_3 \rangle^{-1} \int d\vec{\rho} \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{\rho}) \varphi_3(\vec{\rho}) v_2(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad \text{(III-36c)}$$

$$s'_{33}(\vec{r}) = \langle \vec{k}' | \varphi_3 \rangle^{-1} \int d\vec{\rho} \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{\rho}) \varphi_3(\vec{\rho}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r}). \quad \text{(III-36d)}$$

Pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \zeta_3' |} = 0$, on arrive à :

$$\langle \varphi_3' | \varphi_3 \rangle (e_3 - h_r - \mu_{33}) | \zeta_3 \rangle - \langle \varphi_3' | \varphi_2 \rangle \mu_{32} | \zeta_2 \rangle - \langle \varphi_3' | \varphi_1 \rangle \mu_{31} | \zeta_1 \rangle = \langle \varphi_3' | \vec{k} \rangle s_{33} | \xi_b \rangle, \quad \text{(III-37)}$$

avec .les champs moyens

$$\mu_{32}(\vec{r}) = \langle \varphi_3' | \varphi_2 \rangle^{-1} \int d\vec{\rho} \varphi_3'^*(\vec{\rho}) \varphi_2(\vec{\rho}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad \text{(III-37a)}$$

$$\mu_{31}(\vec{r}) = \langle \varphi_3' | \varphi_1 \rangle^{-1} \int d\vec{\rho} \varphi_3'^*(\vec{\rho}) \varphi_1(\vec{\rho}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r}), \quad \text{(III-37b)}$$

$$s_{33}(\vec{r}) = \langle \varphi_3' | \vec{k} \rangle^{-1} \int d\vec{\rho} \varphi_3'^*(\vec{\rho}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{\rho}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r}). \quad \text{(III-37c)}$$

Là aussi, la dimension de l'équation a diminuée et la résolution en est donc simplifiée.

Pour conclure, en ce qui concerne cette première partie, nous sommes arrivés à six composantes de Φ et Φ' , donc 12 orbitales variationnelles φ, φ', ζ et ζ' . Ceci nous génèrent six équations à un corps en "ket" et six équations à un corps en duales. La forme simplifiée de ces 12 équations couplées nous permet maintenant d'envisager une résolution numérique de ces équations.

L'insertion de ces différentes orbitales dans la fonctionnelle \mathcal{F} , nous permettra d'estimer l'amplitude de propagation D.

Il est toujours possible de réduire ce nombre de 12 équations variationnelles en partant d'autres hypothèses physiques.

III-3-3 Symétrisation entre les voies

Vu la forme de la matrice M d'opérateurs **Eq.(III-8b)**, il nous paraît plus judicieux d'introduire une représentation symétrique, plus adaptée aux trois partitions possibles. Donc, il s'agit de tenir compte de plus de symétrie dans le problème. Pour cela, nous écrivons, cette fois, les différentes composantes des fonctions d'essai sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}
 \Phi^{(1)}(\vec{\rho}_1, \vec{r}_1) &= \varphi_1(\vec{\rho}_1)\zeta_1(\vec{r}_1), & \Phi'^{(1)}(\vec{\rho}_1, \vec{r}_1) &= \varphi'_1(\vec{\rho}_1)\zeta'_1(\vec{r}_1), \\
 \Phi^{(2)}(\vec{\rho}_2, \vec{r}_2) &= \varphi_2(\vec{\rho}_2)\zeta_2(\vec{r}_2), & \Phi'^{(2)}(\vec{\rho}_2, \vec{r}_2) &= \varphi'_2(\vec{\rho}_2)\zeta'_2(\vec{r}_2), \\
 \Phi^{(3)}(\vec{\rho}_3, \vec{r}_3) &= \varphi_3(\vec{\rho}_3)\zeta_3(\vec{r}_3), & \Phi'^{(3)}(\vec{\rho}_3, \vec{r}_3) &= \varphi'_3(\vec{\rho}_3)\zeta'_3(\vec{r}_3).
 \end{aligned}
 \tag{III-38}$$

où $\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{\rho}_3, \vec{r}_1, \vec{r}_2$ et \vec{r}_3 sont les coordonnées de Jacobi représentées par les diagrammes suivants :

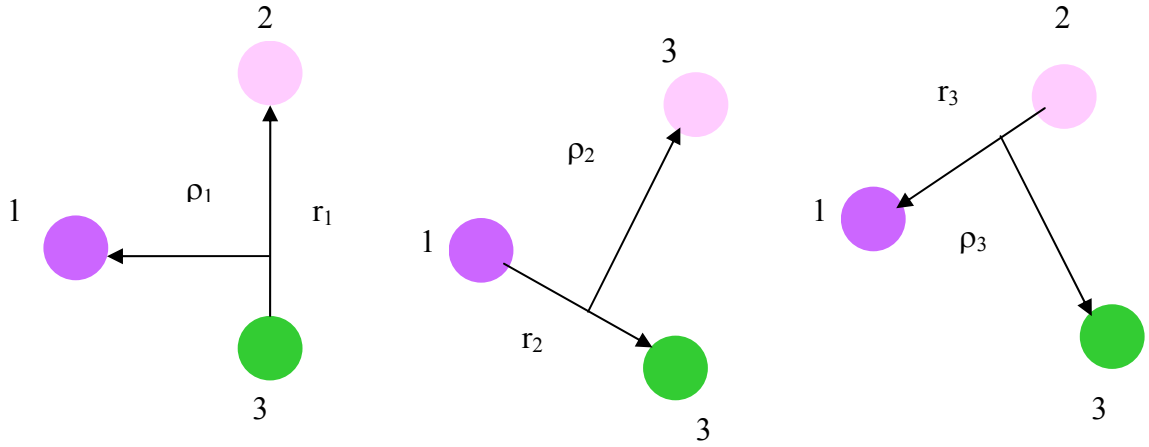


Schéma de partition 1

La particule 1 est spectatrice.

Schéma de partition 2

La particule 2 est spectatrice.

Schéma de partition 3

La particule 3 est spectatrice.

Fig .III-2

avec les coordonnées $\vec{\rho}_1$ et \vec{r}_1 qui se rapportent à la première partition de même $\vec{\rho}_2$ et \vec{r}_2 pour la deuxième partition ainsi que $\vec{\rho}_3$ et \vec{r}_3 pour la troisième partition.

Il est évident qu'un seul "jeu" $(\vec{\rho}_i, \vec{r}_i)$, de ces coordonnées est indépendant puisqu'il est toujours possible de les écrire les uns en fonction des autres. En effet, nous avons :

$$\begin{aligned}
 \vec{\rho}_1 &= a\vec{\rho}_2 + b\vec{r}_2, & \vec{\rho}_1 &= a'\vec{\rho}_3 + b'\vec{r}_3 \\
 \vec{r}_1 &= c\vec{\rho}_2 + d\vec{r}_2, & \vec{r}_1 &= c'\vec{\rho}_3 + d'\vec{r}_3, \\
 \\
 \vec{\rho}_2 &= a'\vec{\rho}_1 + b'\vec{r}_1, & \vec{\rho}_2 &= a\vec{\rho}_3 + b\vec{r}_3, \\
 \vec{r}_2 &= c'\vec{\rho}_1 + d'\vec{r}_1, & \vec{r}_2 &= c\vec{\rho}_3 + d\vec{r}_3, \\
 \\
 \vec{\rho}_3 &= a\vec{\rho}_1 + b\vec{r}_1, & \vec{\rho}_3 &= a'\vec{\rho}_2 + b'\vec{r}_2, \\
 \vec{r}_3 &= c\vec{\rho}_1 + d\vec{r}_1, & \vec{r}_3 &= c'\vec{\rho}_2 + d'\vec{r}_2.
 \end{aligned}
 \tag{III-39a}$$

avec

$$a = -\frac{1}{2}, b = -\frac{3}{4}, c = 1, d = -\frac{1}{2}, \quad (\text{III-39b})$$

$$a' = -\frac{1}{2}, b' = \frac{1}{2}, c' = -1, d' = -\frac{1}{2}.$$

Nous remplaçons $\Phi^{(1)}, \Phi'^{(1)}, \Phi^{(2)}, \Phi'^{(2)}, \Phi^{(3)}, \Phi'^{(3)}$ dans l'expression de la fonctionnelle \mathcal{F} , Eq.(III-19) par leurs nouvelles formes Eq.(III-38).

Recalculons les conditions de stationnarités de \mathcal{F} par rapport à $\varphi_1, \varphi'_1, \zeta_1, \zeta'_1, \varphi_2, \varphi'_2, \zeta_2, \zeta'_2, \varphi_3, \varphi'_3, \zeta_3, \zeta'_3$, nous avons .

Pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial |\varphi_1\rangle} = 0$, on obtient :

$$\langle \zeta'_1 | \zeta_1 \rangle \langle \varphi'_1 | (\varepsilon_1 - h_{\rho_1}) - \Lambda'_{21}(\bar{\rho}_1) - \Lambda'_{31}(\bar{\rho}_1) = \sigma'_{21}(\bar{\rho}_1) + \sigma'_{31}(\bar{\rho}_1), \quad (\text{III-40})$$

où ε_1 est la self énergie qui s'écrit :

$$\varepsilon_1 = E - \frac{\langle \zeta'_1 | (h_{r_1} + v_1) | \zeta_1 \rangle}{\langle \zeta'_1 | \zeta_1 \rangle}, \quad (\text{III-40a})$$

et $\Lambda'_{21}(\bar{\rho}_1), \Lambda'_{31}(\bar{\rho}_1), \sigma'_{21}(\bar{\rho}_1), \sigma'_{31}(\bar{\rho}_1)$ sont les champs moyens données par :

$$\Lambda'_{21}(\bar{\rho}_1) = \int d\vec{r}_1 \varphi_2^* (a' \bar{\rho}_1 + \bar{b}' r_1) \zeta_2'^* (c' \bar{\rho}_1 + d' \vec{r}_1) v_2 (c' \bar{\rho}_1 + d' \vec{r}_1) \zeta_1(\vec{r}_1), \quad (\text{III-40b})$$

$$\Lambda'_{31}(\bar{\rho}_1) = \int d\vec{r}_1 \varphi_3^* (a \bar{\rho}_1 + b \vec{r}_1) \zeta_3'^* (c \bar{\rho}_1 + d \vec{r}_1) v_3 (c \bar{\rho}_1 + d \vec{r}_1) \zeta_1(\vec{r}_1), \quad (\text{III-40c})$$

$$\sigma'_{21}(\bar{\rho}_1) = \int d\vec{r}_1 \exp(-i\vec{k}' \cdot \bar{\rho}_1) \xi_b^*(\vec{r}_1) v_2 (c' \bar{\rho}_1 + d' \vec{r}_1) \zeta_1(\vec{r}_1), \quad (\text{III-40d})$$

$$\sigma'_{31}(\bar{\rho}_1) = \int d\vec{r}_1 \exp(-i\vec{k}' \cdot \bar{\rho}_1) \xi_b^*(\vec{r}_1) v_3 (c \bar{\rho}_1 + d \vec{r}_1) \zeta_1(\vec{r}_1). \quad (\text{III-40f})$$

La dérivée de \mathcal{F} par rapport à φ_1' donne :

$$\langle \zeta_1' | \zeta_1 \rangle (\varepsilon_1 - h_{\rho_1}) | \varphi_1 \rangle - \Lambda_{12}(\bar{\rho}_1) - \Lambda_{13}(\bar{\rho}_1) = 0, \quad (\text{III-41})$$

Les champs moyens sont :

$$\Lambda_{12}(\bar{\rho}_1) = \int d\bar{r}_1 \zeta_1'^*(\bar{r}_1) v_1(\bar{r}_1) \varphi_2(a'\bar{\rho}_1 + b'\bar{r}_1) \zeta_2(c'\bar{\rho}_1 + d'\bar{r}_1), \quad (\text{III-41a})$$

$$\Lambda_{13}(\bar{\rho}_1) = \int d\bar{r}_1 \zeta_1'^*(\bar{r}_1) v_1(\bar{r}_1) \varphi_3(a\bar{\rho}_1 + b\bar{r}_1) \zeta_3(c\bar{\rho}_1 + d\bar{r}_1). \quad (\text{III-41b})$$

Pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial |\zeta_1\rangle} = 0$, on obtient:

$$\langle \varphi_1' | \varphi_1 \rangle \langle \zeta_1' | (e_1 - h_{r_1} - v_1) - \Omega_{21}'(\bar{r}_1) - \Omega_{31}'(\bar{r}_1) = \tau_{21}'(\bar{r}_1) + \tau_{31}'(\bar{r}_1), \quad (\text{III-42})$$

La self énergie est :

$$e_1 = E - \frac{\langle \varphi_1' | h_{\rho_1} | \varphi_1 \rangle}{\langle \varphi_1' | \varphi_1 \rangle}, \quad (\text{III-42a})$$

Nous obtenons les champs moyens de la forme :

$$\Omega_{21}'(\bar{r}_1) = \int d\bar{\rho}_1 \varphi_2^*(a'\bar{\rho}_1 + b'\bar{r}_1) \zeta_2'^*(c'\bar{\rho}_1 + d'\bar{r}_1) v_2(c'\bar{\rho}_1 + d'\bar{r}_1) \varphi_1(\bar{\rho}_1), \quad (\text{III-42b})$$

$$\Omega_{31}'(\bar{r}_1) = \int d\bar{\rho}_1 \varphi_3^*(a\bar{\rho}_1 + b\bar{r}_1) \zeta_3'^*(c\bar{\rho}_1 + d\bar{r}_1) v_3(c\bar{\rho}_1 + d\bar{r}_1) \varphi_1(\bar{\rho}_1), \quad (\text{III-42c})$$

$$\tau_{21}'(\bar{r}_1) = \int d\bar{\rho}_1 \exp(-i\bar{k}'\bar{\rho}_1) \xi_b^*(\bar{r}_1) v_2(c'\bar{\rho}_1 + d'\bar{r}_1) \varphi_1(\bar{\rho}_1), \quad (\text{III-42d})$$

$$\tau_{31}'(\bar{r}_1) = \int d\bar{\rho}_1 \exp(-i\bar{k}'\bar{\rho}_1) \xi_b^*(\bar{r}_1) v_3(c\bar{\rho}_1 + d\bar{r}_1) \varphi_1(\bar{\rho}_1). \quad (\text{III-42f})$$

Nous avons aussi pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \zeta'_1 |} = 0$:

$$\langle \varphi'_1 | \varphi_1 \rangle (e_1 - h_{r_1} - v_1) | \zeta_1 \rangle - \Omega_{12}(\vec{r}_1) - \Omega_{13}(\vec{r}_1) = 0, \quad (\text{III-43})$$

où Ω_{12}, Ω_{13} sont les champs moyens :

$$\Omega_{12}(\vec{r}_1) = v_1(\vec{r}_1) \int d\vec{\rho}_1 \varphi_1^*(\vec{\rho}_1) \varphi_2(a'\vec{\rho}_1 + b'\vec{r}_1) \zeta_2(c'\vec{\rho}_1 + d'\vec{r}_1), \quad (\text{III-43a})$$

$$\Omega_{13}(\vec{r}_1) = v_1(\vec{r}_1) \int d\vec{\rho}_1 \varphi_1^*(\vec{r}_1) \varphi_3(a\vec{\rho}_1 + b\vec{r}_1) \zeta_3(c\vec{\rho}_1 + d\vec{r}_1), \quad (\text{III-43b})$$

La condition $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial | \varphi_2 \rangle} = 0$, donne :

$$\langle \zeta'_2 | \zeta_2 \rangle \langle \varphi'_2 | (\varepsilon_2 - h_{\rho_2}) - \Lambda'_{12}(\vec{\rho}_2) - \Lambda'_{32}(\vec{\rho}_2) = \sigma'_{22}(\vec{\rho}_2) + \sigma'_{32}(\vec{\rho}_2), \quad (\text{III-44})$$

où l'énergie self consistante est :

$$\varepsilon_2 = E - \frac{\langle \zeta'_2 | (h_{r_2} + v_2) | \zeta_2 \rangle}{\langle \zeta'_2 | \zeta_2 \rangle}, \quad (\text{III-44a})$$

et les champs moyens sont :

$$\Lambda'_{12}(\vec{\rho}_2) = \int d\vec{r}_2 \varphi_1^*(a\vec{\rho}_2 + b\vec{r}_2) \zeta_1^*(c\vec{\rho}_2 + d\vec{r}_2) v_1(c\vec{\rho}_2 + d\vec{r}_2) \zeta_2(\vec{r}_2), \quad (\text{III-44b})$$

$$\Lambda'_{32}(\vec{\rho}_2) = \int d\vec{r}_2 \varphi_3^*(a'\vec{\rho}_2 + b'\vec{r}_2) \zeta_3^*(c'\vec{\rho}_2 + d'\vec{r}_2) v_3(c'\vec{\rho}_2 + d'\vec{r}_2) \zeta_2(\vec{r}_2), \quad (\text{III-44c})$$

$$\sigma'_{22}(\vec{\rho}_2) = \int d\vec{r}_2 \exp[-ik'(a\vec{\rho}_2 + b\vec{r}_2)] \xi_b^*(c\vec{\rho}_2 + d\vec{r}_2) v_2(\vec{r}_2) \zeta_2(\vec{r}_2), \quad (\text{III-44d})$$

$$\sigma'_{32}(\vec{\rho}_2) = \int d\vec{r}_2 \exp[-ik'(a'\vec{\rho}_2 + b'\vec{r}_2)] \xi_b^*(c'\vec{\rho}_2 + d'\vec{r}_2) v_3(c'\vec{\rho}_2 + d'\vec{r}_2) \zeta_2(\vec{r}_2). \quad (\text{III-44e})$$

Pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \varphi_2' |} = 0$, nous avons :

$$\langle \zeta_2' | \zeta_2 \rangle (\varepsilon_2 - h_{\rho_2}) | \varphi_2 \rangle - \Lambda_{21}(\bar{\rho}_2) - \Lambda_{23}(\bar{\rho}_2) = \sigma_{22}(\bar{\rho}_2), \quad (\text{III-45})$$

où les champs moyens sont :

$$\Lambda_{21}(\bar{\rho}_2) = \int d\bar{r}_2 \zeta_2'^*(\bar{r}_2) v_2(\bar{r}_2) \varphi_1(a\bar{\rho}_2 + b\bar{r}_2) \zeta_1(c\bar{\rho}_2 + d\bar{r}_2), \quad (\text{III-45a})$$

$$\Lambda_{23}(\bar{\rho}_2) = \int d\bar{r}_2 \zeta_2'^*(\bar{r}_2) v_2(\bar{r}_2) \varphi_3(a'\bar{\rho}_2 + b'\bar{r}_2) \zeta_3(c'\bar{\rho}_2 + d'\bar{r}_2), \quad (\text{III-45b})$$

$$\sigma_{22}(\bar{\rho}_2) = \int d\bar{r}_2 \zeta_2'^*(\bar{r}_2) v_2(\bar{r}_2) \exp[i\vec{k}(a\bar{\rho}_2 + b\bar{r}_2)] \xi_b(c\bar{\rho}_2 + d\bar{r}_2). \quad (\text{III-45c})$$

Pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial | \zeta_2 \rangle} = 0$, on obtient :

$$\langle \varphi_2' | \varphi_2 \rangle \langle \zeta_2' | (e_2 - h_{r_2} - v_2) - \Omega'_{12}(\bar{r}_2) - \Omega'_{32}(\bar{r}_2) = \tau'_{22}(\bar{r}_2) + \tau'_{32}(\bar{r}_2), \quad (\text{III-46})$$

où l'énergie self consistante est :

$$e_2 = E - \frac{\langle \varphi_2' | h_{\rho_2} | \varphi_2 \rangle}{\langle \varphi_2' | \varphi_2 \rangle}, \quad (\text{III-46a})$$

et les champs moyens sont :

$$\Omega'_{12}(\bar{r}_2) = \int d\bar{\rho}_2 \varphi_1^*(a\bar{\rho}_2 + b\bar{r}_2) \zeta_1'^*(c\bar{\rho}_2 + d\bar{r}_2) v_1(c\bar{\rho}_2 + d\bar{r}_2) \varphi_2(\bar{\rho}_2), \quad (\text{III-46b})$$

$$\Omega'_{32}(\bar{r}_2) = \int d\bar{\rho}_2 \varphi_3^*(a'\bar{\rho}_2 + b'\bar{r}_2) \zeta_3'^*(c'\bar{\rho}_2 + d'\bar{r}_2) v_3(c'\bar{\rho}_2 + d'\bar{r}_2) \varphi_2(\bar{\rho}_2), \quad (\text{III-46c})$$

$$\tau'_{22}(\bar{r}_2) = \int d\bar{\rho}_2 \exp[-i\vec{k}'(a\bar{\rho}_2 + b\bar{r}_2)] \xi_b^*(c\bar{\rho}_2 + d\bar{r}_2) v_2(\bar{r}_2) \varphi_2(\bar{\rho}_2), \quad (\text{III-46d})$$

$$\tau'_{32}(\bar{r}_2) = \int d\bar{\rho}_2 \exp[-i\vec{k}'(a\bar{\rho}_2 + b\bar{r}_2)] \xi_b^*(c\bar{\rho}_2 + d\bar{r}_2) v_3(c'\bar{\rho}_2 + d'\bar{r}_2) \varphi_2(\bar{\rho}_2). \quad (\text{III-46f})$$

en dérivant \mathcal{F} par rapport à ζ_2' , on obtient:

$$\langle \varphi_2' | \varphi_2 \rangle (e_2 - h_{r_2} - v_2) | \zeta_2 \rangle - \Omega_{21}(\vec{r}_2) - \Omega_{23}(\vec{r}_2) = \tau_{22}(\vec{r}_2), \quad (\text{III-47})$$

où Les champs moyens sont :

$$\Omega_{21}(\vec{r}_2) = v_2(\vec{r}_2) \int d\vec{\rho}_2 \varphi_2^*(\vec{\rho}_2) \varphi_1(a\vec{\rho}_2 + b\vec{r}_2) \zeta_1(c\vec{\rho}_2 + d\vec{r}_2), \quad (\text{III-47a})$$

$$\Omega_{23}(\vec{r}_2) = v_2(\vec{r}_2) \int d\vec{\rho}_2 \varphi_2^*(\vec{\rho}_2) \varphi_3(a'\vec{\rho}_2 + b'\vec{r}_2) \zeta_3(c'\vec{\rho}_2 + d'\vec{r}_2), \quad (\text{III-47b})$$

$$\tau_{22}(\vec{r}_2) = v_2(\vec{r}_2) \int d\vec{\rho}_2 \varphi_2^*(\vec{\rho}_2) \exp[i\vec{k}(a\vec{\rho}_2 + b\vec{r}_2)] \xi_b(c\vec{\rho}_2 + d\vec{r}_2). \quad (\text{III-47c})$$

Pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial |\varphi_3\rangle} = 0$, nous avons :

$$\langle \zeta_3' | \zeta_3 \rangle \langle \varphi_3' | (\varepsilon_3 - h_{\rho_3}) - \Lambda'_{13}(\vec{\rho}_3) - \Lambda'_{23}(\vec{\rho}_3) = \sigma'_{23}(\vec{\rho}_3) + \sigma'_{33}(\vec{\rho}_3), \quad (\text{III-48})$$

La self énergie est :

$$\varepsilon_3 = E - \frac{\langle \zeta_3' | (h_{r_3} + v_3) | \zeta_3 \rangle}{\langle \zeta_3' | \zeta_3 \rangle}, \quad (\text{III-48a})$$

Les champs moyens sont :

$$\Lambda'_{23}(\vec{\rho}_3) = \int d\vec{r}_3 \varphi_2^*(a\vec{\rho}_3 + b\vec{r}_3) \zeta_2^*(c\vec{\rho}_3 + d\vec{r}_3) v_2(c\vec{\rho}_3 + d\vec{r}_3) \zeta_3(\vec{r}_3), \quad (\text{III-48b})$$

$$\Lambda'_{13}(\vec{\rho}_3) = \int d\vec{r}_3 \varphi_1^*(a'\vec{\rho}_3 + b'\vec{r}_3) \zeta_1^*(c'\vec{\rho}_3 + d'\vec{r}_3) v_1(c'\vec{\rho}_3 + d'\vec{r}_3) \zeta_3(\vec{r}_3), \quad (\text{III-48c})$$

$$\sigma'_{23}(\vec{\rho}_3) = \int d\vec{r}_3 \exp[-i\vec{k}'(a'\vec{\rho}_3 + b'\vec{r}_3)] \xi_b^*(c'\vec{\rho}_3 + d'\vec{r}_3) v_2(c\vec{\rho}_3 + d\vec{r}_3) \zeta_3(\vec{r}_3), \quad (\text{III-48d})$$

$$\sigma'_{33}(\vec{\rho}_3) = \int d\vec{r}_3 \exp[-i\vec{k}'(a'\vec{\rho}_3 + b'\vec{r}_3)] \xi_b^*(c'\vec{\rho}_3 + d'\vec{r}_3) v_3(\vec{r}_3) \zeta_3(\vec{r}_3). \quad (\text{III-48f})$$

Pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \varphi_3' |} = 0$, on arrive a:

$$\langle \zeta'_3 | \zeta_3 \rangle (\varepsilon_3 - h_{\rho_3}) | \varphi_3 \rangle - \Lambda_{31}(\bar{\rho}_3) - \Lambda_{32}(\bar{\rho}_3) = \sigma_{33}(\bar{\rho}_3), \quad (\text{III-49})$$

Les champs moyens sont :

$$\Lambda_{31}(\bar{\rho}_3) = \int d\vec{r}_3 \zeta_3'^* (\vec{r}_3) v_3(\vec{r}_3) \varphi_1(a' \bar{\rho}_3 + b' \vec{r}_3) \zeta_1(c' \bar{\rho}_3 + d' \vec{r}_3), \quad (\text{III-49a})$$

$$\Lambda_{32}(\bar{\rho}_3) = \int d\vec{r}_3 \zeta_3'^* (\vec{r}_3) v_3(\vec{r}_3) \varphi_2(a \bar{\rho}_3 + b \vec{r}_3) \zeta_2(c \bar{\rho}_3 + d \vec{r}_3), \quad (\text{III-49b})$$

$$\sigma_{33}(\bar{\rho}_3) = \int d\vec{r}_3 \zeta_3'^* (\vec{r}_3) v_3(\vec{r}_3) \exp[i\vec{k}(a' \bar{\rho}_3 + b' \vec{r}_3)] \xi_b^*(c' \bar{\rho}_3 + d' \vec{r}_3). \quad (\text{III-49c})$$

La dérivée de \mathcal{F} par rapport à ζ_3 , nous donne :

$$\langle \varphi'_3 | \varphi_3 \rangle \langle \zeta'_3 | (e_3 - h_{r_3} - v_3) - \Omega'_{13}(\vec{r}_3) - \Omega'_{23}(\vec{r}_3) = \tau'_{23}(\vec{r}_3) + \tau'_{33}(\vec{r}_3), \quad (\text{III-50})$$

où e_3 est la self énergie :

$$e_3 = E - \frac{\langle \varphi'_3 | h_{\rho_3} | \varphi_3 \rangle}{\langle \varphi'_3 | \varphi_3 \rangle}, \quad (\text{III-50a})$$

et $\Omega'_{13}, \Omega'_{23}, \tau'_{23}, \tau'_{33}$, sont les champs moyens :

$$\Omega'_{13}(\vec{r}_3) = \int d\bar{\rho}_3 \varphi_1^*(a' \bar{\rho}_3 + b' \vec{r}_3) \zeta_1^*(c' \bar{\rho}_3 + d' \vec{r}_3) v_1(c' \bar{\rho}_3 + d' \vec{r}_3) \varphi_3(\bar{\rho}_3), \quad (\text{III-50b})$$

$$\Omega'_{23}(\vec{r}_3) = \int d\bar{\rho}_3 \varphi_2^*(a \bar{\rho}_3 + b \vec{r}_3) \zeta_2^*(c \bar{\rho}_3 + d \vec{r}_3) v_2(c \bar{\rho}_3 + d \vec{r}_3) \varphi_3(\bar{\rho}_3), \quad (\text{III-50c})$$

$$\tau'_{23}(\vec{r}_3) = \int d\bar{\rho}_3 \exp[-i\vec{k}'(a' \bar{\rho}_3 + b' \vec{r}_3)] \xi_b^*(c' \bar{\rho}_3 + d' \vec{r}_3) v_2(c \bar{\rho}_3 + d \vec{r}_3) \varphi_3(\bar{\rho}_3), \quad (\text{III-50d})$$

$$\tau'_{33}(\vec{r}_3) = \int d\bar{\rho}_3 \exp[-i\vec{k}(a' \bar{\rho}_3 + b' \vec{r}_3)] \xi_b^*(c' \bar{\rho}_3 + d' \vec{r}_3) v_3(\vec{r}_3) \varphi_3(\bar{\rho}_3). \quad (\text{III-50f})$$

enfin pour $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \zeta'_3 |} = 0$, on obtient :

$$\langle \varphi_3' | \varphi_3 \rangle (e_3 - h_{r_3} - v_3) | \zeta_3 \rangle - \Omega_{32}(\vec{r}_3) - \Omega_{31}(\vec{r}_3) = \tau_{33}(\vec{r}_3), \quad \text{(III-51)}$$

Les champs moyens sont :

$$\Omega_{32}(\vec{r}_3) = v_3(\vec{r}_3) \int d\vec{\rho}_3 \varphi_3^*(\vec{\rho}_3) \varphi_2(a\vec{\rho}_3 + b\vec{r}_3) \zeta_2(c\vec{\rho}_3 + d\vec{r}_3), \quad \text{(III-51a)}$$

$$\Omega_{31}(\vec{r}_3) = v_3(\vec{r}_3) \int d\vec{\rho}_3 \varphi_3^*(\vec{\rho}_3) \varphi_1(a'\vec{\rho}_3 + b'\vec{r}_3) \zeta_1(c'\vec{\rho}_3 + d'\vec{r}_3), \quad \text{(III-51b)}$$

$$\tau_{33}(\vec{r}_3) = v_3(\vec{r}_3) \int d\vec{\rho}_3 \varphi_3^*(\vec{\rho}_3) \exp[i\vec{k}(a'\vec{\rho}_3 + b'\vec{r}_3)] \zeta_b(c'\vec{\rho}_3 + d'\vec{r}_3). \quad \text{(III-51c)}$$

Cette version est plus symétrique que celle présentée dans la, partie III-3-1. Elle correspond à l'utilisation simultanée de tous les " jeux " des coordonnées de Jacobi et permet aussi, comme pour le premier cas, de simplifier les équations de Faddeev en les transformant en des équations à un corps.

Chapitre IV

*Généralisation de l'Application de
la Théorie du Champ Moyen
Indépendant du Temps
-Problème à Quatre Corps et Plus-*

CHAPITRE IV

GENERALISATION DE L'APPLICATION DE LA THEORIE DU CHAMP MOYEN INDEPENDANT DU TEMPS -PROBLEME A QUATRE CORPS ET PLUS-

IV-1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons constaté que l'application de la théorie du champ moyen indépendant du temps a permis de simplifier énormément la présentation des équations de Faddeev et donc leur résolution..

Dans le but d'étendre le champ d'application de la théorie TIMF, nous nous sommes intéressés au problème à N corps , N étant quelconque et supérieur à trois. Dans un souci pédagogique et pour faciliter le suivi des différentes étapes considérées dans cette généralisation, nous nous proposons, tout d'abord de présenter le cas à 4 corps où nous pouvons lister assez rapidement les différentes partitions possibles

IV-2 Problème à quatre corps

Considérons un système à quatre particules distinctes (1, 2,3 et 4). Nous ne retiendrons dans cette étude que les partitions à deux "fragments " (il n'est pas exclu de compléter ce travail par la considération d'autres partitions à trois fragments ou plus).

Pour chaque partition α , nous définissons les opérateurs V_α (potentiel externe), V^α (potentiel interne), H_α et G_α .

Par exemple, pour la partition $\alpha = 1$ correspondant à l'interaction de deux groupes de particules (1,2) avec (3,4), nous avons $V_1 = v_{13} + v_{14} + v_{23} + v_{24}$, $V^1 = v_{12} + v_{34}$, $H_1 = H_0 + V^1$ et $G_1 = (E - H_1)^{-1}$.

Pour ce problème à quatre corps, nous avons répertorié sept partitions possibles à deux groupes selon cette expression :

$$n = 2^{N-1} - 1 \quad \text{où } N \text{ est le nombre de particules}$$

Les sept partitions possibles sont données comme suit :

$\alpha = 1$	Correspondant à l'interaction	(1,2) avec (3,4)
$\alpha = 2$	" "	(1,3) avec (2,4)
$\alpha = 3$	" "	(1,4) avec (2,3)
$\alpha = 4$	" "	1 avec (2, 3,4)
$\alpha = 5$	" "	2 avec (1, 3,4)
$\alpha = 6$	" "	3 avec (1, 2,4)
$\alpha = 7$	" "	4 avec (1, 2,3)

Nous choisissons, comme dans les deux précédents chapitres, pour voie d'entrée la voie 1.

Nous pouvons, à titre d'exemple, schématiser deux partitions :

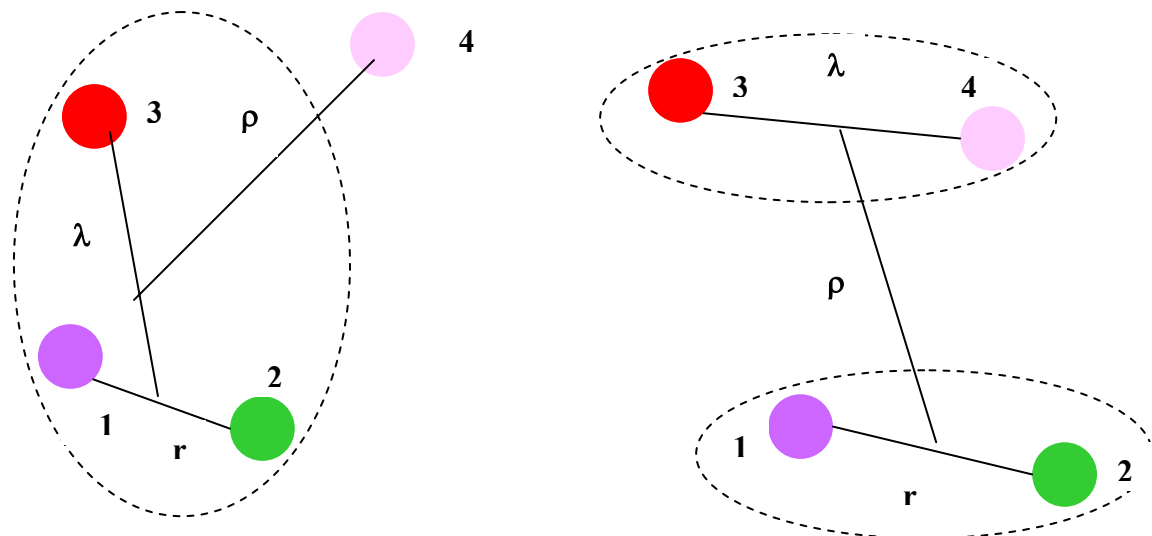


Fig. IV-1 : Deux partitions différentes pour un système à quatre particules.

IV-2-1 Méthode de la matrice des voies couplées

L'une des méthodes qui traite ce problème à quatre corps et qui permet d'arriver à des équations dont la forme est similaire à celle des équations de Faddeev, présentées dans le chapitre II **Eq.(II-29)**, est la méthode de la "Matrice des Voies Couplées" de Kouri, Levin et Tobocman ou encore méthode (KLT) [22-27]

La méthode - KLT - est particulièrement utilisée pour le traitement des processus de collision avec une multiplicité de voies. Cette méthode se base principalement sur deux points essentiels, qui sont l'écriture de la fonction d'onde total Ψ du système comme une somme de composantes associées aux différentes partitions possibles α . Donc la fonction d'onde totale Ψ s'écrit :

$$\Psi = \sum_{\alpha} \Psi^{(\alpha)}, \quad (\text{IV-1})$$

où les composantes $\Psi^{(\alpha)}$ satisfont à l'équation suivante[23] :

$$(E - H_{\alpha})\Psi^{(\alpha)} = \sum_{\beta} W_{\alpha\beta} V_{\beta} \Psi^{(\beta)} \quad (\text{IV-2})$$

Le second point essentiel est l'introduction du coefficient $W_{\alpha\beta}$ qui prend différentes valeurs [24] à savoir :

$$\begin{aligned} W_{\alpha, \alpha+1} &= 1, \\ W_{\alpha\beta(\alpha=\beta, \beta \neq \alpha+1, \beta \neq \alpha)} &= 0, \\ W_{n1} &= 1, \end{aligned} \quad (\text{IV-3})$$

avec $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, n-1$. et n le nombre total de partitions possibles.

Les composantes $\Psi^{(\alpha)}$ satisfont aussi l'équation intégrale de Lippmann-Schwinger et s'écrivent [24]:

$$\Psi^{(\alpha)} = \chi_k + G_{\alpha} \sum_{\beta} W_{\alpha\beta} V_{\beta} \Psi^{(\beta)} \quad (\text{IV-4})$$

Dans notre cas, $k = 1$ car nous nous plaçons dans la voie 1.

En tenant compte des sept partitions possibles pour le problème à quatre corps et en accord avec la méthode - KLT- **Eqs.(IV-3,4)** , les composantes de la fonction d'onde totale se mettent sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \\ \Psi^{(3)} \\ \Psi^{(4)} \\ \Psi^{(5)} \\ \Psi^{(6)} \\ \Psi^{(7)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & G_1V_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & G_2V_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & G_3V_4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & G_4V_5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & G_5V_6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & G_6V_7 \\ G_7V_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \\ \Psi^{(3)} \\ \Psi^{(4)} \\ \Psi^{(5)} \\ \Psi^{(6)} \\ \Psi^{(7)} \end{pmatrix} \quad \text{(IV-5)}$$

IV-3 Généralisation au problème à N corps et application de la TIMF

S'il l'on considère un problème à N corps et donc n partitions possibles à deux "fragments", nous pouvons obtenir ce jeu d'équations :

$$\begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \\ \Psi^{(3)} \\ \dots \\ \Psi^{(n-1)} \\ \Psi^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & G_1V_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & G_2V_3 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & G_{n-1}V_n \\ G_nV_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \\ \Psi^{(3)} \\ \dots \\ \Psi^{(n-1)} \\ \Psi^{(n)} \end{pmatrix} \quad \text{(IV-6)}$$

Notons que cette matrice est cyclique et que sa structure est paradiagonale avec les opérateurs $G_\alpha V_{\alpha+1}$ et l'opérateur final $G_n V_1$.

En réitérant les mêmes étapes que celles suivies dans le chapitre III, à savoir prendre les composantes des fonctions d'essai sous la forme suivante :

$$\Phi^{(1)} = \Psi^{(1)} - \chi_1, \Phi^{(2)} = \Psi^{(2)}, \Phi^{(3)} = \Psi^{(3)}, \dots, \Phi^{(n)} = \Psi^{(n)}, \quad \text{(IV-7)}$$

Le système d'équations **Eq.(IV-6)** devient :

$$\begin{pmatrix} \Phi^{(1)} \\ \Phi^{(2)} \\ \Phi^{(3)} \\ \dots \\ \Phi^{(n-1)} \\ \Phi^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ G_n V_1 \chi_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & G_1 V_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & G_2 V_3 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & G_{n-1} V_n \\ G_n V_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi^{(1)} \\ \Phi^{(2)} \\ \Phi^{(3)} \\ \dots \\ \Phi^{(n-1)} \\ \Phi^{(n)} \end{pmatrix} \quad \text{(IV-8)}$$

et en multipliant chaque ligne α par $(E - H_\alpha)$ ou G_α^{-1} , on obtient :

$$\begin{pmatrix} E - H_1 & -V_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & E - H_2 & -V_3 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & E - H_{n-1} & -V_n \\ -V_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & E - H_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi^{(1)} \\ \Phi^{(2)} \\ \Phi^{(3)} \\ \dots \\ \Phi^{(n-1)} \\ \Phi^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ V_1 \chi_1 \end{pmatrix} \quad \text{(IV-9)}$$

que l'on peut présenter sous une forme compacte.

$$M\Phi = \sigma \quad \text{(IV-10)}$$

où la matrice M est :

$$M = \begin{pmatrix} E - H_1 & -V_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & E - H_2 & -V_3 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & E - H_{n-1} & -V_n \\ -V_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & E - H_n \end{pmatrix} \quad \text{(IV-11)}$$

et σ , Φ qui sont des vecteurs colonnes :

$$\Phi = \begin{pmatrix} \Phi^{(1)} \\ \Phi^{(2)} \\ \dots \\ \Phi^{(n-1)} \\ \Phi^{(n)} \end{pmatrix}, \quad \sigma = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ V_1 \chi_1 \end{pmatrix} \quad (\text{IV-12})$$

Remarquons qu'en additionnant toutes les lignes dans le système d'équations **Eq.(IV-9)**, nous retrouvons bien notre équation de départ mais à l'aide des fonctions d'essai :

$$\sum_{\alpha=1}^n (E - H_{\alpha}) \Phi^{(\alpha)} - \sum_{\beta=1}^n V_{\beta} \Phi^{(\beta)} = V_1 \chi_1 \quad (\text{IV-13})$$

En faisant l'analogie avec les définitions du chapitre III, **Eqs.(III-8a, III-15)**, nous écrivons, pour les n partitions possibles, les vecteurs Φ' et σ' sous les formes suivantes :

$$\Phi' = \begin{pmatrix} \Phi'^{(1)} \\ \Phi'^{(2)} \\ \dots \\ \Phi'^{(n-1)} \\ \Phi'^{(n)} \end{pmatrix}, \quad \sigma' = \begin{pmatrix} V_{\delta} \chi'_{\delta} \\ V_{\delta} \chi'_{\delta} \\ \dots \\ V_{\delta} \chi'_{\delta} \\ V_{\delta} \chi'_{\delta} \end{pmatrix}, \quad (\text{IV-14})$$

pour arriver à l'amplitude de propagation (terme de Born non compris) de la partition (voie) 1 à la partition (voie) δ

$$D = \langle \chi'_{\delta} | V_{\delta} (E - H)^{-1} | \chi_1 \rangle, \quad (\text{IV-15})$$

où χ'_{δ} représente la fonction d'onde final dans la voie δ et χ_1 la fonction d'onde de la voie initiale.

Nous pouvons réécrire cette amplitude de propagation D sous la forme suivante :

$$D = \langle \sigma' | M^{-1} | \sigma \rangle . \quad (\text{IV-16})$$

qui peut être trouvée à partir des conditions de stationnarité de la fonctionnelle \mathcal{F} donnée dans le chapitre III par l'équation **Eq.(III-10)** :

$$\mathcal{F} (\Phi, \Phi') = \langle \Phi' | \sigma \rangle + \langle \sigma' | \Phi \rangle - \langle \Phi' | M | \Phi \rangle \quad (\text{IV-17})$$

Comme cela a été fait dans le chapitre III, nous partons des mêmes considérations pour les composantes des fonctions d'essai **Eqs.(III-23)**, ainsi que pour les fonctions de voies **Eqs.(III-24)**, à savoir leur factorisation qui est un des principes de base de la TIMF. Nous calculons toutes les dérivations de la fonctionnelle \mathcal{F} par rapport aux différentes orbitales individuelles et nous arriverons à des équations variationnelles en « bra » et en « ket » mais à un corps dont la résolution est grandement simplifiée. L'insertion de toutes ces orbitales dans l'expression de la fonctionnelle nous permettra d'obtenir l'amplitude de propagation. Si l'on rajoute le terme de Born à cette amplitude, nous arriverons à l'amplitude de transition totale du système en interaction considéré.

Conclusion

ANNEXE

On donne dans cette annexe, la méthode de calcul pour la condition de stationnarité de la fonctionnelle \mathcal{F} par rapport à φ_1 , pour un problème à trois corps.

De la même manière, on retrouve toutes les conditions de stationnarité par rapport à chaque orbitale variationnelle.

On remplace les expressions de $\Phi, \Phi', \sigma, \sigma'$ et M dans la fonctionnelle, on obtient :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\Phi, \Phi') = & \langle \varphi_2 \zeta_2' | v_2 | \chi \rangle + \langle \varphi_3 \zeta_3' | v_3 | \chi \rangle + \langle \chi' | v_2 + v_3 | \varphi_1 \zeta_1 \rangle + \langle \chi' | (v_2 + v_3) | \varphi_2 \zeta_2 \rangle + \\ & \langle \chi' | (v_2 + v_3) | \varphi_3 \zeta_3 \rangle - \langle \varphi_1 \zeta_1' | (E - H_1) | \varphi_1 \zeta_1 \rangle + \langle \varphi_1 \zeta_1' | v_1 | \varphi_2 \zeta_2 \rangle + \langle \varphi_1 \zeta_1' | v_1 | \varphi_3 \zeta_3 \rangle + \langle \varphi_2 \zeta_2' | v_2 | \varphi_1 \zeta_1 \rangle - \\ & \langle \varphi_2 \zeta_2' | (E - H_2) | \varphi_2 \zeta_2 \rangle + \langle \varphi_2 \zeta_2' | v_2 | \varphi_3 \zeta_3 \rangle + \langle \varphi_3 \zeta_3' | v_3 | \varphi_1 \zeta_1 \rangle + \langle \varphi_3 \zeta_3' | v_3 | \varphi_2 \zeta_2 \rangle - \langle \varphi_3 \zeta_3' | (E - H_3) | \varphi_3 \zeta_3 \rangle. \end{aligned}$$

La condition de stationnarité de \mathcal{F} par rapport à φ_1 , nous donne :

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \varphi_1} = \langle \chi' | (v_2 + v_3) | \zeta_1 \rangle - \langle \zeta_1' \varphi_1' | (E - h_r - h_\rho - v_1) | \zeta_1 \rangle + \langle \varphi_2 \zeta_2' | v_2 | \zeta_1 \rangle + \langle \varphi_3 \zeta_3' | v_3 | \zeta_1 \rangle = 0$$

Nous avons : $|\chi\rangle = |k\rangle |\xi_b\rangle$,

$$\begin{aligned} \langle \zeta_1' | \zeta_1 \rangle \langle \varphi_1' | (E - \frac{\langle \zeta_1' | (v_1 + h_r) | \zeta_1 \rangle}{\langle \zeta_1' | \zeta_1 \rangle} - h_\rho) - \langle \zeta_2' | \zeta_1 \rangle \langle \varphi_2' | \frac{\langle \zeta_2' | v_2 | \zeta_1 \rangle}{\langle \zeta_2' | \zeta_1 \rangle} - \\ \langle \zeta_3' | \zeta_1 \rangle \langle \varphi_3' | \frac{\langle \zeta_3' | v_3 | \zeta_1 \rangle}{\langle \zeta_3' | \zeta_1 \rangle} = \langle \xi_b | \zeta_1 \rangle \langle k' | (\frac{\langle \xi_b | v_2 | \zeta_1 \rangle}{\langle \xi_b | \zeta_1 \rangle} + \frac{\langle \xi_b | v_3 | \zeta_1 \rangle}{\langle \xi_b | \zeta_1 \rangle}) \end{aligned}$$

En posant les différentes définitions de l'énergie self consistante et des champs moyens :

$$\eta_1 = E - \frac{\langle \zeta_1' | (h_r + v_1) | \zeta_1 \rangle}{\langle \zeta_1' | \zeta_1 \rangle}$$

$$U_{21} = \frac{\langle \zeta_2' | v_2 | \zeta_1 \rangle}{\langle \zeta_2' | \zeta_1 \rangle}, \quad U_{31} = \frac{\langle \zeta_3' | v_3 | \zeta_1 \rangle}{\langle \zeta_3' | \zeta_1 \rangle}, \quad S'_{21} = \frac{\langle \xi_b | v_2 | \zeta_1 \rangle}{\langle \xi_b | \zeta_1 \rangle}, \quad S'_{31} = \frac{\langle \xi_b | v_3 | \zeta_1 \rangle}{\langle \xi_b | \zeta_1 \rangle}$$

Nous pouvons écrire ces expressions sous forme des équations intégrales comme suit :

$$U_{21}(\vec{\rho}) = \langle \zeta'_2 | \zeta_1 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \zeta_2^*(\vec{r}) \zeta_1(\vec{r}) v_2(\vec{\rho}, \vec{r})$$

$$U_{31}(\vec{\rho}) = \langle \zeta'_3 | \zeta_1 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \zeta_3^*(\vec{r}) \zeta_1(\vec{r}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r})$$

$$S'_{21}(\vec{\rho}) = \langle \xi_b | \zeta_1 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \xi_b^*(\vec{r}) \zeta_1(\vec{r}) v_2(\vec{\rho}, \vec{r})$$

$$S'_{31}(\vec{\rho}) = \langle \xi_b | \zeta_1 \rangle^{-1} \int d\vec{r} \xi_b^*(\vec{r}) \zeta_1(\vec{r}) v_3(\vec{\rho}, \vec{r})$$

Donc l'expression de la condition de stationnarité devient :

$$\langle \zeta'_1 | \zeta_1 \rangle \langle \varphi'_1 | (\eta_1 - h_\rho) - \langle \zeta'_2 | \zeta_1 \rangle \langle \varphi'_2 | U_{21} - \langle \zeta'_3 | \zeta_1 \rangle \langle \varphi'_3 | U_{31} = \langle \xi_b | \zeta_1 \rangle \langle \vec{k}' | (S'_{21} + S'_{31}),$$

Pour un problème à N corps, on substitue les nouvelles expressions de $\Phi, \Phi', \sigma, \sigma'$ et M dans la fonctionnelle \mathcal{F} , on arrive ainsi à :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\Phi, \Phi') = & \langle \Phi^{(n)} | V_n | \chi_1 \rangle + \langle \chi'_\delta | V_\delta | \Phi^{(1)} \rangle + \langle \chi'_\delta | V_\delta | \Phi^{(2)} \rangle + \dots + \langle \chi'_\delta | V_\delta | \Phi^{(n-1)} \rangle + \langle \chi'_\delta | V_\delta | \Phi^{(n)} \rangle - \\ & \langle \Phi^{(1)} | (E - H_1) | \Phi^{(1)} \rangle + \langle \Phi^{(1)} | V_2 | \Phi^{(2)} \rangle - \langle \Phi^{(2)} | (E - H_2) | \Phi^{(2)} \rangle + \langle \Phi^{(2)} | V_3 | \Phi^{(3)} \rangle - \dots - \\ & \langle \Phi^{(n-1)} | (E - H_{n-1}) | \Phi^{(n-1)} \rangle + \langle \Phi^{(n-1)} | V_n | \Phi^{(n)} \rangle + \langle \Phi^{(1)} | V_1 | \Phi^{(1)} \rangle - \langle \Phi^{(n-1)} | (E - H_n) | \Phi^{(n)} \rangle \end{aligned}$$

Les conditions de stationnarité de cette fonctionnelle par rapport aux fonctions d'essai, donnent :

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \Phi^{(1)} |} = 0, \quad \langle \chi'_\delta | V_\delta - \langle \Phi^{(1)} | (E - H_1) + \langle \Phi^{(1)} | V_1 = 0$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \Phi^{(2)} |} = 0, \quad \langle \chi'_\delta | V_\delta + \langle \Phi^{(1)} | V_2 - \langle \Phi^{(2)} | (E - H_2) = 0$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \Phi^{(n)} |} = 0, \quad V_1 | \chi_1 \rangle - (E - H_n) | \Phi^{(n)} \rangle = 0$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \Phi^{(n-1)} |} = 0, \quad -(E - H_{n-1}) | \Phi^{(n-1)} \rangle + V_n | \Phi^{(n)} \rangle = 0$$

Références

REFERENCES

- [1] Charles J. Joachain, Quantum collision theory
- [2] L. D. Faddeev, Soviet phys. JETP 12, 1014
- [3] L. D. Faddeev, Mathematical aspect of three body problem, (Davey New York, (1965)
- [4] C. Lovelace, Phys. Rev. 135, B1225 (1964)
- [5] L. D. Zh. Ekssp. Teor.Fiz. 39, 1459 (1960)
- [6] Ballot, J. L and Fabre de la Ripelle, M. Ann. Phys. 127, 62 (1980)
- [7] Kameyama, H., Kamimura, M. and Fukushima, Y, Phys. Rev. C40 ,974 (1989)
- [8] B. G. Giraud, M. A. Nagarajan: J. Phys. G4, 1739 (1978)
- [9] B. G. Giraud, M. A. Nagarajan: J. Physique (Paris) 41, 477 (1980)
- [10] M. A. Nagarajan, B. G. Giraud : Phys. Rev. C27, 232 (1983)
- [11] M. A. Nagarajan, B. G. Giraud : Phys. Rev. C28, 1918 (1983)
- [12] B. G. Giraud, M. A. Nagarajan, I. J. Thompson: Ann. of Phys. 152, 475 (1984)
- [13] Y. Abe, B. G. Giraud: Nucl. Phys. A440, 311 (1985)
- [14] B. G. Giraud: Physica D 19, 112 (1986)
- [15] B. G. Giraud, Y. Hann, F. Mekideche, J. Pascale: Z. Phys. D27, 295 (1993)
- [16] B. G. Giraud, F. Mekideche: J. Phys. G17, 1871 (1991)
- [17] Y. Abe, B. G. Giraud: Nucl. Phys. A 440, 311 (1985)
- [18] B. G. Giraud : Recent progress in many-Body theories, Y. Avishai, New York (1990)
- [19] B. G. Giraud: Physica D 19, 112 (1986)
- [20] B. G. Giraud, M. A. Nagarajan , A. Weiguny: Phys. Rev. C 35, 55 (1987)
- [21] P. Amiot, B. G. Giraud, M. A. Nagarajan: Phys. Rev. C29, 2374 (1984)
- [22] D. J. Kouri, and F. S. Levin . Phys. Rev. C16, 556 (1977)
- [23] D. J. Kouri, F. S. Levin, Physics, letters, a volume 50B, number 4 (1974)
- [24] Tobocman, W. Phys. Rev. C12, 741 (1975)
- {25} Tobocman, W. Phys. Rev. C 9.2, 2460 (1974)

- [26] Y. Hann. D.J. Kouri, F.S.Levin.Phys.Rev C10.5, 1615 (1974)
- [27] Y. Hann. D.J. Kouri, F.S.Levin.Phys.Rev C10.5, 1620 (1974)
- [28] B. H.Wildenthal, J.B.McGrory, T.T.S.Kuo: Phys.Rev.C4, 1266 (1971)
- [29] B.H.Wildenthal, J.B.McGrory, E.C.Halbert:Phys.Rev.C4, 1708 (1971)
- [30] J.B.McGrory, B.H.Wildenthal: Phys.Rev.C 7, 974 (1973)
- [31] A.K.Messiah. Mécanique Quantique T2, (North Holland, Amsterdam) (1962)
- [32] F.Mékideche, Thèse d'état, USTHB (1994)
- [33] B. G. Giraud, M.A. Nagarajan, A. Weiguny: Phys. Rev. C35, 55 (1987)
- [34] B.G. Giraud: Recent progress in many- Body Theories, Y. Aviashai, (1990)
- [35] Elements of applicable functional analysis. Charles W.Grosetsch P149
- [36] F. Kadem, F. Mékideche, Conférence national des rayonnements et leurs applications (CNRA), USTHB, Alger (2004)