

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA  
RECHERCHE SCIENTIFIQUE.

Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediène (U.S.T.H.B)  
Faculté des Sciences – Physique

**THESE**

Présentée pour l'obtention du grade de Magister en Physique

Spécialité : Physique Théorique

Par : **MEFTAH ALI**

**Thème :**

**Application des Inégalités de Bertlmann et  
Martin aux problèmes à deux et trois corps**

Soutenue le 18 / 09 / 2003 devant le jury composé de :

<b>M<sup>r</sup> M. DRIR</b>	<b>Professeur (U.S.T.H.B)</b>	<b>Président</b>
<b>M<sup>me</sup> F-Z. IGHEZOU</b>	<b>Maître de Conférence (U.S.T.H.B)</b>	<b>Directrice de thèse</b>
<b>M<sup>r</sup> S. KESSAL</b>	<b>Professeur (U.S.T.H.B)</b>	<b>Examineur</b>
<b>M<sup>r</sup> Y. BOUDOUMA</b>	<b>Maître de Conférence (U.S.T.H.B)</b>	<b>Examineur</b>
<b>M<sup>r</sup> A. CHOUCHAOU</b>	<b>Maître de Conférence (U.S.T.H.B)</b>	<b>Examineur</b>
<b>M<sup>r</sup> R. J. LOMBARD</b>	<b>Directeur de recherche (IPN, Orsay)</b>	<b>Invité</b>

## Remerciements

Ce travail a été réalisé au laboratoire de Physique Théorique de la faculté des sciences (physique) de l'USTHB, sous la direction de Madame F. Z. Ighezou, maître de conférence à l'USTHB. Je tiens à la remercier pour la confiance qu'elle m'a témoignée en me confiant ce travail, ainsi que pour l'aide constante et les conseils judicieux qu'elle m'a donnés tout au long de ce travail. Qu'elle trouve, ici l'expression de ma profonde gratitude.

Je remercie Monsieur M. Fellah, Professeur à l'U.S.T.H.B et directeur du laboratoire de Physique Théorique, de m'avoir accueilli au sein du laboratoire, et pour avoir fourni les moyens matériels à notre équipe de recherche, lui permettant d'avoir de meilleures conditions de travail.

J'exprime ma reconnaissance et mes plus vifs remerciements à M<sup>r</sup> M. Drir pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance et pour avoir accepté de juger ce travail.

Mes remerciements vont aussi à tous les membres du jury : M<sup>r</sup> S. Kessal, M<sup>r</sup> Y. Boudouma, M<sup>r</sup> A. Chouchaoui et M<sup>r</sup> R.J. Lombard, qui ont eu l'amabilité de juger ce travail.

J'aimerais remercier, tout particulièrement, M<sup>r</sup> R. J. Lombard, qui nous a fait profiter de son expérience concernant les inégalités de Bertlmann et Martin, ainsi que pour m'avoir invité dans son laboratoire à Orsay.

Je tiens également à remercier M<sup>r</sup> A. Chouchaoui, M<sup>r</sup> A. Kerris, M<sup>r</sup> R. Mezhoud et M<sup>elle</sup> R. Yekken dont les conseils m'ont été d'une grande utilité.

Mes remerciements sont aussi adressés à tous mes collègues du laboratoire de Physique Théorique ainsi qu'à tous mes amis pour leur sympathie, leur aide amicale qu'ils m'ont apportée tout au long de ce travail.

## SOMMAIRE

<b>INTRODUCTION.....</b>	<b>3</b>
<b>CHAPITRE I : Inégalités de Bertlmann et Martin.....</b>	<b>5</b>
<b>I.a) Introduction aux inégalités de Bertlmann et Martin.....</b>	<b>6</b>
<b>I.b) Facteur correctif.....</b>	<b>8</b>
<b>I.c) Application aux potentiels en loi de puissance.....</b>	<b>9</b>
<b>I.d) Méthode variationnelle et méthode du minimum</b>	
<b>parabolique.....</b>	<b>10</b>
<b>I.d.1) Méthode variationnelle.....</b>	<b>10</b>
<b>I.d.2) Méthode du minimum</b>	
<b>parabolique.....</b>	<b>11</b>
<b>I.e) Résultats et comparaison des trois méthodes.....</b>	<b>12</b>
<b>I.f) Facteur de forme de l'état fondamental.....</b>	<b>15</b>
<b>I.g) Conclusion.....</b>	<b>16</b>
<b>CHAPITRE II : Problèmes à trois corps séparables.....</b>	<b>17</b>
<b>II.a) Problèmes à trois corps.....</b>	<b>18</b>
<b>II.a.1) Trois corps de même masse interagissant par des</b>	
<b>potentiels d'oscillateurs harmoniques à trois</b>	
<b>dimensions.....</b>	<b>18</b>
<b>II.a.1) Trois corps interagissant par des potentiels</b>	
<b>d'oscillateurs harmoniques plus une force centrifuge</b>	
<b>à une dimension.....</b>	<b>18</b>
<b>II.b) Les coordonnées de Jacobi.....</b>	<b>19</b>
<b>II.c) Inégalités de Bertlmann et Martin.....</b>	<b>25</b>
<b>II.c.1) Trois corps interagissant par des potentiels</b>	
<b>d'oscillateurs harmoniques à trois dimensions.....</b>	<b>25</b>
<b>II.c.2) Trois corps interagissant par des potentiels</b>	



# Introduction

## **INTRODUCTION**

La plupart des problèmes à trois corps rencontrés en physique atomique ou nucléaire, par exemple, le noyau d'Hélium, l'ion  $H^-$ , les noyaux  $^3H$  et  $^3He$ , ne sont pas faciles à étudier, puisque la résolution de l'équation de Schrödinger, qui permet de déterminer les énergies et les fonctions d'onde n'est que très rarement possible de manière analytique. Dans ces conditions, on fait généralement appel à des méthodes d'approximation qui vont des plus simples, telles que la méthode des perturbations ou la méthode variationnelle, aux plus sophistiquées, qui englobent les équations de Fadéev et le formalisme hypersphérique. Mais là encore le problème n'est pas simple puisque même pour ces méthodes les calculs sont souvent longs et compliqués.

Nous allons dans ce travail, étudier l'applicabilité et la fiabilité des inégalités de Bertlmann et Martin aux problèmes à trois corps. Ces inégalités offrent, dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste pour les systèmes à deux corps un moyen de donner une estimation soit des énergies de la ligne yrast soit des moments de la densité du fondamental. En effet, ces inégalités, dérivées de règles de somme, fournissent des relations de récurrence entre les énergies des états de la ligne yrast et les moments de la densité du fondamental.

Pour une meilleure illustration, nous reprendrons leur application dans le cas des systèmes à deux corps pour calculer les énergies de la ligne yrast dans le cas des potentiels en loi de puissance.

Par la suite, nous nous intéresserons aux problèmes à trois corps séparables et non séparables.

Dans le cas séparable, nous commencerons par présenter les coordonnées de Jacobi qui offrent la possibilité de séparer les coordonnées relatives et celles du centre de masse. Nous établirons par la suite des règles de somme valables dans le problème à trois corps. Après avoir donné l'expression des inégalités de Bertlmann et Martin pour des systèmes à trois corps séparables, nous les utiliserons pour calculer les moments de la densité du fondamental, que nous comparerons avec les valeurs exactes.

A l'instar du cas à trois corps séparables, nous utiliserons les inégalités de Bertlmann et Martin pour calculer les moments de la densité du fondamental moyennant des énergies calculées par deux méthodes d'approximation pour

des systèmes à trois corps non séparables ; nous les comparerons avec les résultats donnés par les méthodes d'approximation. Nous établirons qu'un facteur correctif doit être introduit afin de faire converger les valeurs données par les inégalités de Bertlmann et Martin vers les valeurs obtenues par les différentes méthodes d'approximation.

Ce travail sera organisé de la façon suivante : dans le premier chapitre, nous reprendrons l'application des inégalités de Bertlmann et Martin à un système de deux corps après les avoir introduits brièvement. Nous verrons l'utilité du facteur correctif.

Le chapitre deux sera consacré à l'extension de l'utilisation des inégalités de Bertlmann et Martin dans les problèmes à trois corps séparables ; nous introduirons les coordonnées de Jacobi et nous chercherons les règles de somme valables à trois corps. Dans le troisième chapitre nous traiterons les systèmes à trois corps non séparables, nous commencerons par l'introduction de trois méthodes d'approximation qui nous permettront de calculer les moments de la densité du fondamental que nous comparerons avec ceux obtenus par la méthode des inégalités de Bertlmann et Martin. Nous montrerons le rôle du facteur correctif et nous discuterons la nécessité d'aller au delà de l'expression approchée dérivée dans le cas à deux corps. Dans une conclusion générale, nous résumerons l'ensemble des résultats obtenus.

Le détail des calculs et démonstrations, rencontrés dans ce travail, est donné dans les appendices.

# Chapitre 1

**Inégalités de Bertlmann et Martin**

## **INEGALITES DE BERTLMANN ET MARTIN**

Les inégalités de Bertlmann et Martin, sont une nouvelle méthode approximative (valide dans le cas des potentiels à symétrie sphérique), permettant la détermination des énergies des états de la ligne yrast (état  $1\ell$ ), ou des moments de la densité du fondamental, à partir des caractéristiques de l'état fondamental : énergie et fonction d'onde.

Les premiers travaux de Bertlmann et Martin remontent à une vingtaine d'années alors que la généralisation de ces inégalités est beaucoup plus récente.

Ces inégalités ont d'abord été étudiées dans le cas des systèmes physiques non relativistes à un corps, par la suite leur fiabilité a été testée avec succès dans le cas des systèmes à deux corps.

Les études faites dans le cas des potentiels à une dimension ont permis d'établir un certain nombre de relations utiles, mais, elles ont surtout contribué à faciliter l'approche des potentiels à trois dimensions. Ces derniers sont plus intéressants puisqu'ils permettent une application à des systèmes physiques réels. L'interaction de deux particules est réduite dans le système de centre de masse à une particule baignant dans un potentiel.

### **I. a) Introduction aux inégalités de Bertlmann et Martin**

Lors de l'étude des propriétés des mésons  $q\bar{q}$ , dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, Bertlmann et Martin [1,2] ont établi une inégalité intéressante, à partir de la règle de somme de Thomas – Reiche - Kuhn (TRK). Cette inégalité est valable dans le cas de potentiels locaux.

Ainsi le rayon carré moyen de l'orbite 1s est relié à l'énergie de transition dipolaire la plus basse, à savoir la différence d'énergie entre les états 1p et 1s.

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

où  $\langle r^2 \rangle_{1s}$  est la valeur moyenne de  $r^2$  dans l'état 1s, D le nombre de dimensions de l'espace, m la masse de la particule dans un champ de potentiel.  $E_{1p}$  est l'énergie de l'état p le plus bas, alors que  $E_{1s}$  est celle de l'état fondamental.

Pour  $D=3$ , l'inégalité (I.1) a été généralisée [3] à tous les états de la ligne yrast (les états  $1\ell$ ). En effet, partant du commutateur  $[H, Q_{\ell 0}]$ , où  $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})$  est l'hamiltonien du système et de l'opérateur de transition multipolaire donné par :

$$Q_{\ell 0}(r, \theta, \varphi) = r^\ell Y_{\ell 0}(\theta, \varphi) \quad (\text{I.2})$$

( $Y_{\ell 0}(\theta, \varphi)$  définit les fonctions harmoniques sphériques), nous obtenons [3] :

$$[H, Q_{\ell 0}] = -\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla} Q_{\ell 0}) \cdot \vec{\nabla} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta Q_{\ell 0} \quad (\text{I.3})$$

Calculons ensuite le double commutateur :

$$[Q_{\ell 0}, [H, Q_{\ell 0}]] = \frac{\hbar^2}{2m} \ell(2\ell + 1) r^{2\ell-2} Y_{\ell 0}^2 \quad (\text{I.4})$$

Sa valeur moyenne dans l'état fondamental noté  $|0\rangle$ , s'écrit :

$$\langle 0 | [Q_{\ell 0}, [H, Q_{\ell 0}]] | 0 \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \ell(2\ell + 1) \langle r^{2\ell-2} \rangle_{1s} \quad (\text{I.5})$$

Nous pouvons écrire le double commutateur précédent sous une autre forme :

$$[Q_{\ell 0}, [H, Q_{\ell 0}]] = 2Q_{\ell 0} H Q_{\ell 0} - Q_{\ell 0}^2 H - H Q_{\ell 0}^2 \quad (\text{I.6})$$

En prenant la valeur moyenne de (I.6) dans l'état fondamental et en introduisant une relation de fermeture sur les états propres  $|j\rangle$  de H, nous aboutissons à :

$$\langle 0 | [Q_{\ell 0}, [H, Q_{\ell 0}]] | 0 \rangle = 2 \sum_j (E_j - E_{1s}) |\langle 0 | Q_{\ell 0} | j \rangle|^2 \quad (\text{I.7})$$

Compte tenu de (I.5) :

$$\sum_j (E_j - E_{1s}) |\langle 0 | Q_{\ell 0} | j \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \ell(2\ell+1) \langle r^{2\ell-2} \rangle_{1s} \quad (\text{I.8})$$

En remplaçant  $(E_j - E_{1s})$  par  $(E_{1\ell} - E_{1s})$ , nous pouvons écrire :

$$\langle r^{2\ell} \rangle_{1s} \leq \frac{\hbar^2}{2m(E_{1\ell} - E_{1s})} \ell(2\ell+1) \langle r^{2\ell-2} \rangle_{1s} \quad (\text{I.9})$$

La relation (I.9) représente l'inégalité de Bertlmann–Martin généralisée (GBM) valable dans le cas des problèmes à deux corps.

où :

$$\langle r^{2\ell} \rangle_{1s} = \frac{\int r^{2\ell} |\psi_{1s}(r)|^2 d^3r}{\int |\psi_{1s}(r)|^2 d^3r} \quad (\text{I.10})$$

$E_{1\ell}$  est énergie de l'état le plus bas pouvant être atteint avec l'opérateur  $Q_{\ell 0}$  à partir de l'état fondamental et  $\langle r^{2\ell} \rangle_{1s}$  est le moment d'ordre  $2\ell$  de la densité du fondamental.

Notons que la notation utilisée ici est différente de la notation spectroscopique habituelle en physique atomique ;  $n\ell$  indique le  $n$  – ième niveau de moment angulaire orbital  $\ell$ .

On peut alors, à partir des caractéristiques du fondamental et connaissant les moments de la densité du fondamental, déterminer les énergies des différents

états de la ligne yrast ou au contraire, à partir de ces dernières, remonter aux différents moments. Cette méthode a l'avantage d'être simple d'application et relativement précise.

### **I. b) Facteur correctif**

Les inégalités généralisées de Bertlmann et Martin, telles que données par (I.9), n'offrent comme nous l'avons déjà mentionné qu'une limite supérieure aux moments de la densité du fondamental d'ordre  $2\ell$ , ou aux énergies de la ligne yrast ; cette limite ne présente un intérêt pratique que lorsqu'elle est proche de la valeur exacte.

Il est possible, du moins d'une façon formelle de transformer ces inégalités en une suite récurrente d'égalités par l'introduction d'un facteur correctif. S'il est difficile de déterminer une forme analytique générale pour ce facteur correctif, il est possible de trouver des approximations satisfaisantes. Une première forme a été proposée par Bertlmann et Martin [1] dans le cas de la relation (I.1), puis généralisée [4] dans le cas de la relation (I.9).

Les premiers résultats de Bertlmann et Martin ont montré que les rapports entre les valeurs exactes des moments de la densité du fondamental et celles données par (I.1) dans le cas de l'oscillateur harmonique et du potentiel coulombien valent respectivement 1 et 3/4, aussi ont-il proposé le facteur correctif suivant :

$$1 - \frac{1}{4}C \quad (\text{I.11})$$

par lequel il faut multiplier le membre de droite de la relation (I.1).

Un ajustement à partir des caractéristiques de ces deux potentiels a permis de proposer l'expression suivante de C [1] :

$$C = \left[ \frac{E_{2s} + E_{1s} - 2E_{1p}}{E_{2s} - E_{1s}} \right]^2 \quad (\text{I.12})$$

C vaut zéro dans le cas de l'oscillateur harmonique, et l'unité dans le cas du potentiel coulombien.

Un autre facteur correctif, beaucoup plus général, appliqué dans le cas de la relation (I.9), a été proposé par la suite par Lombard et Ighezou [4]. Il permet de saturer de façon satisfaisante les relations (I.9) et donc de corriger les énergies de la ligne yrast pour une large classe de potentiels.

Il a pour expression :

$$C(\ell) = \left[ \frac{E_{(\ell+1)s} + E_{1s} - 2E_{1\ell}}{E_{(\ell+1)s} - E_{1s}} \right]^2 \quad (\text{I.13})$$

la relation (I.9) devient alors :

$$\langle r^{2\ell} \rangle_{1s} \cong \frac{\hbar^2}{2m} \ell(2\ell+1) \frac{\langle r^{2\ell-2} \rangle_{1s}}{(E_{1\ell} - E_{1s})} \left[ 1 - \frac{\ell}{2(\ell+1)} C(\ell) \right] \quad (\text{I.14})$$

Bertlmann et Martin ont appliqué l'inégalité donnée par la relation (I.1) dans le cas de potentiels souvent utilisés en physique des particules, dans la description des systèmes de quarks,  $V(r) = A/r + Br$ , afin d'étudier leur fiabilité et ont trouvé qu'elles étaient saturées à près de 99%. D'autres tests [5,6] ont été effectués sur des potentiels à une dimension comme le potentiel de Pöschl-Teller modifié ou le puits carré infini.

Par la suite, les inégalités de Bertlmann et Martin généralisées, données par la relation (I.9) ont été testées [7,8,9] dans le cas des potentiels de Hulthén, Kratzer, logarithmique et les potentiels en lois de puissance.

Dans ce qui suit nous allons brièvement voir comment s'appliquent concrètement les inégalités de Bertlmann et Martin généralisées (GBM) dans le cas d'un potentiel en loi de puissance  $V(r) = \lambda r^{3/2}$ .

### **I.c) Application aux potentiels en loi de puissance**

Pour illustrer les inégalités de Bertlmann et Martin, nous allons reprendre leur application dans le cas des potentiels en loi de puissance  $V(r) = \lambda r^\alpha$ . Les énergies des différents niveaux de la ligne  $yrast$  sont déterminées à partir des moments de la densité du fondamental et les résultats obtenus sont comparés à ceux de deux méthodes d'approximation (méthodes variationnelle et du minimum parabolique), ainsi qu'aux valeurs exactes. La variation du rapport entre les moments d'ordre 2 (rayon carré moyen) exacts et ceux calculés par les GBM avec et sans correction est également étudiée pour cette classe de potentiels. Elle indique l'évolution du facteur correctif en fonction du potentiel et le taux de saturation.

## **I.d) Méthode variationnelle et méthode du minimum parabolique**

Les deux méthodes que nous présentons très brièvement nous serviront à mieux apprécier l'efficacité des GBM par rapport à elles.

L'étude est faite dans le cas des potentiels en loi de puissance définis par  $V(r) = \lambda r^\alpha$ . Cette famille de potentiels est souvent utilisée comme modèle dans la description de nombreux phénomènes physiques rencontrés notamment en physique des particules.

### **I.d.1) Méthode variationnelle**

Soit la fonction d'onde d'essai déduite à partir des caractéristiques du potentiel coulombien et de l'oscillateur harmonique, suivante :

$$R_\ell(r) = N_\ell r^\ell e^{-\beta r^\nu/2} \quad (\text{I.15})$$

où  $\beta$  et  $\nu$  sont des paramètres variationnels dépendant de  $\ell$ ,  $N_\ell$  est la constante de normalisation donnée par :

$$N_\ell^2 = \nu \beta^{\frac{2\ell+3}{\nu}} / \Gamma\left(\frac{2\ell+3}{\nu}\right) \quad (\text{I.16})$$

$\Gamma(x)$  étant la fonction Gamma d'Euler. On s'intéresse aux états de la ligne yrast c'est-à-dire ceux pour lesquels :  $n \ell \equiv 1 \ell$ .

Cette fonction d'essai permet, par sa simplicité, un calcul analytique de l'énergie à partir de l'équation de Schrödinger.

L'énergie est définie par la valeur moyenne de l'hamiltonien dans l'état  $R_{1\ell}(r)$ , ce qui donne :

$$E_{1\ell} \Gamma\left(\frac{2\ell+3}{\nu}\right) = \lambda \Gamma\left(\frac{2\ell+\alpha+3}{\nu}\right) \beta^{-\alpha/\nu} + \frac{\nu^2}{8} \Gamma\left(\frac{2\ell+2\nu+1}{\nu}\right) \quad (\text{I.17})$$

La minimisation de  $E_{1\ell}$  par rapport aux deux paramètres  $\nu$  et  $\beta$  permet d'obtenir la meilleure estimation des énergies variationnelles  $E_{1\ell}^\nu$  ( $\nu$  pour indiquer variationnelle). Comme application, nous avons choisi le cas du potentiel puissance  $r^{3/2}$ .

D'une part, les énergies de la ligne yrast sont déterminées en utilisant les moments exacts de la densité du fondamental, et d'autre part, ces mêmes moments sont déterminés en se servant des énergies exactes.

**I.d.2) Méthode du minimum parabolique**

Cette méthode consiste à approcher le potentiel effectif  $V_{\text{eff}}$  par un potentiel d'oscillateur harmonique autour de son minimum, soit :

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} + \lambda r^\alpha \approx \frac{1}{2}a(r-r_0)^2 + \frac{b}{2} \quad (\text{I.18})$$

où  $r_0$  est déterminé par le minimum de  $V_{\text{eff}}$ .

On peut alors montrer que :

$$r_0^{\alpha+2} = \frac{\ell(\ell+1)}{\alpha\lambda} \quad (\text{I.19})$$

et que l'énergie  $E_\ell^p$  (p pour designer parabolique) est donnée par :

$$E_\ell^p = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\lambda\alpha(\alpha+2)r_0^{\alpha-2}} + \lambda(\alpha+2)r_0^\alpha \right). \quad (\text{I.20})$$

### **I.e) Résultats et comparaison des trois méthodes**

Nous reportons dans le tableau I.1, les énergies de la ligne yrast calculées par les différentes méthodes.

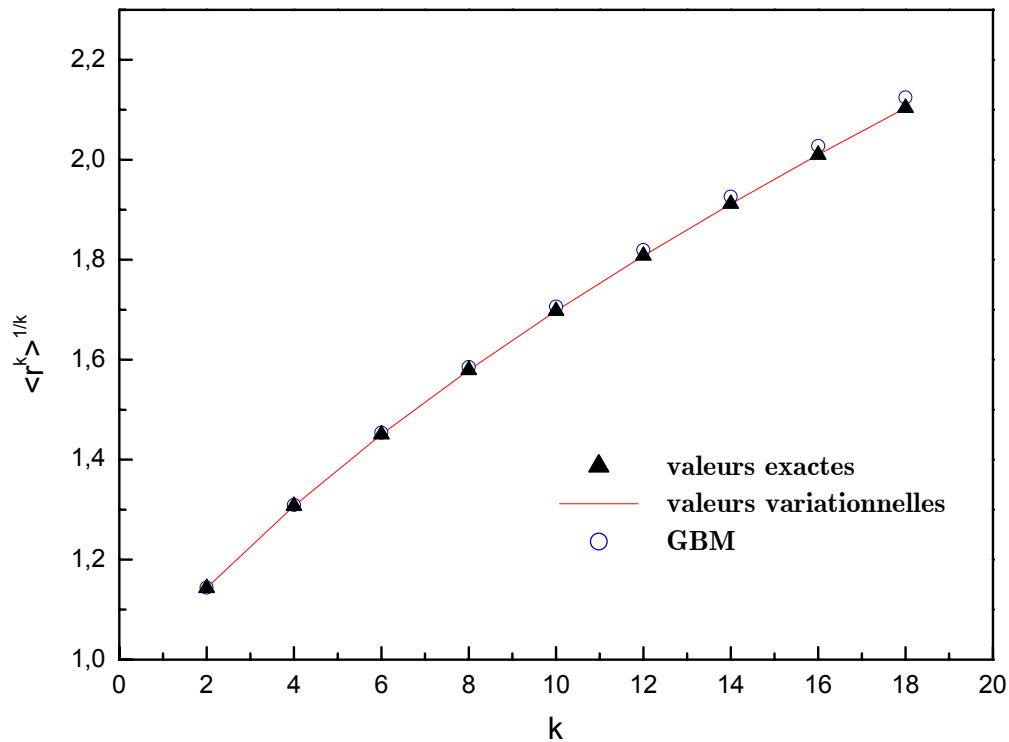
**Tableau I.1 :** Energies de la ligne yrast données par différentes méthodes dans le cas du potentiel  $V(r) \sim r^\alpha$ ,  $\alpha = 3/2$ .

$\ell$	Méthode Variationnelle	GBM non Corrigées	Méthode Parabolique	Valeurs Exactes
0	2.0121516			2.0121124
1	3.1583829	3.1597671	3.1019689	3.1583515
2	4.2389382	4.2491538	4.2076696	4.2389152
3	5.2753503	5.3066276	5.2540617	5.2753324
4	6.2788535	6.3426829	6.2628666	6.2788390
5	7.2562937	7.3625564	7.2435728	7.2562814

A partir du tableau précédent, on remarque que les GBM non corrigées permettent une estimation assez correcte de ces énergies avec des écarts inférieurs à 1% par rapport aux valeurs exactes. Nous constatons que la méthode variationnelle permet d'avoir des valeurs de l'énergie remarquablement proches des valeurs exactes, la différence portant sur la quatrième voir la cinquième décimale. Les énergies données par la méthode parabolique sont moins bonnes que les énergies variationnelles, surtout pour les états de faible moment orbital  $\ell$ .

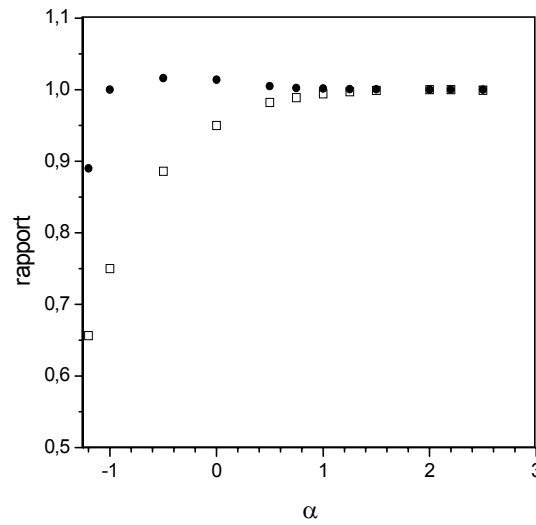
La figure (1) représente l'évolution des moments normalisés de la densité du fondamental  $\langle r^k \rangle^{1/k}$  calculés par différentes méthodes d'approximation des énergies, en fonction de l'ordre  $k$ .

Les moments GBM sont en bon accord avec les moments exacts avec lesquels ils restent confondus même lorsque  $k$  augmente.



**Fig.1** : Moments normalisés de la densité du fondamental en fonction de l'ordre  $k$  ( $k=2\ell$ ) dans le cas du potentiel  $r^{3/2}$ .

Nous nous sommes également intéressés à la variation du rapport entre les moments d'ordre 2 exacts  $\langle r^2 \rangle_{\text{ex}}$  et calculés par les GBM respectivement avec et sans correction  $\langle r^2 \rangle_{\text{GBM}}$  et  $\langle r^2 \rangle_{\text{GBMC}}$  ; le rayon carré moyen est, en effet, une grandeur intéressante à partir de laquelle on peut tirer des informations sur le système. Remarquons aussi que nous nous sommes limités à l'ordre 2 car ce rapport varie peu avec  $\ell$ . La figure (2) montre cette variation pour des valeurs de  $\alpha$  ( $V(r) = r^\alpha$ ) comprises entre  $-1$  et  $2.5$ .



**Fig.2** : Rapports entre  $\langle r^2 \rangle_{\text{EX}}$  et  $\langle r^2 \rangle_{\text{GBMC}}$  (●) et  $\langle r^2 \rangle_{\text{GBM}}$  (□) pour différents potentiels  $r^\alpha$ .

On note sur la figure (2), que les rapports entre les rayons carrés moyens exacts et ceux calculés par les GBM (inégalités de Bertlmann et Martin généralisées) corrigés (représentés par des cercles pleins) sont proches de 1, alors que les rayons carrés moyens calculés avec les GBM non corrigées, varient par rapport aux moments exacts de 75% (pour le coulombien  $\alpha = -1$ ) à l'unité (pour l'oscillateur harmonique  $\alpha = 2$ ).

Nous pouvons, par conséquent, conclure que les GBM ou GBMC sont fiables, dans le cas des potentiels en loi de puissance, et ont l'avantage d'être simples à utiliser.

### **I.f) Facteur de forme de l'état fondamental**

Les inégalités de Bertlmann et Martin nous permettent à partir des énergies de la ligne yrast, la détermination des moments de la densité du fondamental avec un accord acceptable. Ces moments peuvent être utilisés pour le calcul du facteur de forme de l'état fondamental, défini comme la transformée de Fourier [8] :

$$F(\mathbf{q}) = \int \exp(-\vec{q} \cdot \vec{r}) \rho(\vec{r}) d^3r \quad (\text{I.21})$$

C'est la quantité qui intervient dans la section efficace de diffusion élastique dans le cas de l'interaction électromagnétique. Il admet le développement formel

$$F(\mathbf{q}) = \sum_{n=0}^{\infty} (-)^n \frac{q^{2n}}{(2n+1)!} \langle r^{2n} \rangle_{1s} \quad (\text{I.22})$$

Par conséquent, à partir des moments de  $\rho(r)$ , on peut reconstruire  $F(\mathbf{q})$ .

Par ailleurs, il est possible également d'estimer la valeur de la densité du fondamental à l'origine [8], à partir de l'intégration de  $F(\mathbf{q})$ . On obtient :

$$\rho_{1s}(0) = |\psi_{1s}(0)|^2 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int F(\mathbf{q}) d^3q \quad (\text{I.23})$$

Il suffit alors d'injecter dans la relation (I.22) le facteur de forme donné par la méthode des inégalités de Bertlmann et Martin.

Les trois dernières équations montrent comment remonter à  $\rho(r)$  à partir des moments, eux mêmes déterminés par le spectre  $E_{1\ell}$ , au moyen de techniques utilisant l'analyse de Fourier.

**Conclusion :**

Nous concluons que les inégalités généralisées de Bertlmann et Martin sont une méthode fiable pour l'estimation des énergies de la ligne yrast et des moments de la densité du fondamental des systèmes à deux corps dans le cas de potentiels en loi de puissance. Dans les chapitres (II) et (III) nous étudierons leur extension aux systèmes à trois corps.

# Chapitre 2

**Systemes séparables**

Nous avons introduit dans le chapitre précédent les inégalités de Bertlmann et Martin généralisées, dont la fiabilité a été testée dans le cas des systèmes à deux corps.

Dans ce chapitre nous nous intéressons à des systèmes de trois corps interagissant dans un cas par des potentiels d'oscillateurs harmoniques à trois dimensions et dans l'autre par des potentiels du type Calogero à une dimension (oscillateurs harmoniques plus un terme centrifuge).

Nous commençons par présenter les coordonnées de Jacobi qui offrent la possibilité de séparer les coordonnées relatives et celles du centre de masse. Nous allons par la suite appliquer les inégalités de Bertlmann et Martin à trois corps ; pour cela nous cherchons dans quelle mesure il est possible de définir des opérateurs de transition entre les états d'énergies de ces systèmes et d'établir des règles de somme valables dans les problèmes à trois corps.

A l'instar du cas à deux corps, les inégalités de Bertlmann et Martin pourraient permettre soit de calculer les moments de la densité du fondamental à partir de certains états excités, soit de déterminer ces mêmes énergies en utilisant les moments de la densité du fondamental. Le dernier cas pourrait s'avérer très utile comme méthode de calcul d'une partie du spectre.

Le but de ce chapitre est de discuter l'applicabilité et la fiabilité des inégalités de Bertlmann et Martin dans le cas des systèmes à trois corps séparables. En effet, si les résultats obtenus par cette nouvelle méthode sont proches de ceux issus de la résolution exacte, alors nous pourrions confirmer la validité des inégalités de Bertlmann et Martin dans le cas des systèmes à trois corps séparables.

## **II.a) Problème à trois corps**

### **II.a.1) Trois corps de même masse interagissant par des potentiels d'oscillateurs harmoniques à trois dimensions :**

Bien que simple à résoudre le modèle de trois oscillateurs harmoniques joue un rôle essentiel dans le développement et la compréhension des systèmes à trois corps plus compliqués. Il s'agit de savoir si l'oscillateur harmonique tient le même rôle de limite que dans le cas à deux corps.

L'hamiltonien de trois particules de masses identiques interagissant par des potentiels d'oscillateurs harmoniques [10] s'écrit :

$$H_1 = \sum_{i=1}^3 \frac{P_i^2}{2m} + \frac{K}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j>i}^3 r_{ij}^2 \quad (\text{II.1})$$

$$\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$$

où :  $\vec{r}_i$  et  $\vec{P}_i$  représentent respectivement les vecteurs position et impulsion de la particule  $i$

$K = m\omega^2$ ,  $m$  étant la masse de la particule.

### **II.a.2) Trois corps interagissant par des potentiels d'oscillateurs harmoniques plus une force centrifuge à une dimension :**

Le système de trois particules de même masse interagissant par des potentiels d'oscillateurs harmoniques plus une force centrifuge à une dimension [11] est l'un des rares problèmes à trois corps qui a été résolu analytiquement ; son hamiltonien est donné par ( $2m = \hbar = 1$ ) :

$$H_2 = -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + \frac{1}{8} \omega^2 [(x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + (x_3 - x_1)^2] \\ + g_3 (x_1 - x_2)^{-2} + g_1 (x_2 - x_3)^{-2} + g_2 (x_3 - x_1)^{-2} \quad (\text{II.2})$$

où :  $x_1, x_2, x_3$  sont les coordonnées des trois particules

$g_1, g_2$  et  $g_3$  sont des constantes

## **II.b) Les coordonnées de Jacobi :**

Les coordonnées de Jacobi [10,11] sont une généralisation des coordonnées relatives et du centre de masse. Ces dernières sont appropriées pour la description d'un système à deux corps. Mais à quoi ressemble le traitement d'un problème à N corps ? Les coordonnées de Jacobi nous donnent la réponse.

Le premier vecteur de Jacobi est le vecteur relatif entre les particules 1 et 2. La deuxième coordonnée de Jacobi est définie comme le vecteur relatif entre le centre de masse des deux premières particules et la troisième. Le troisième vecteur de Jacobi relie la quatrième particule au centre de masse des trois premières et ainsi de suite. Par conséquent, pour les problèmes à trois corps :

- A trois dimensions, les coordonnées de Jacobi peuvent avoir pour expression [10] :

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

L'introduction de ces nouvelles coordonnées dans l'hamiltonien  $H_1$  permet d'avoir :

$$H_1 = \frac{\vec{p}_R^2}{6m} + \frac{\vec{p}_\rho^2}{m} + \frac{\vec{p}_\lambda^2}{m} + \frac{3K}{4}(\rho^2 + \lambda^2) \quad (\text{II.4})$$

où  $\vec{P}_R, \vec{P}_\rho$  et  $\vec{P}_\lambda$  sont les nouveaux moments cinétiques conjugués

En se plaçant dans le système du centre de masse ; l'équation (II-4) devient :

$$H_1 = \frac{\vec{p}_\rho^2}{m} + \frac{\vec{p}_\lambda^2}{m} + \frac{3K}{4}(\rho^2 + \lambda^2) = H_\rho + H_\lambda \quad (\text{II.5})$$

Ces coordonnées nous ont permis d'écrire  $H_1$  comme la somme de deux oscillateurs harmoniques à trois dimensions complètement indépendants.

Comme nous le savons déjà, les fonctions propres sont données par :

$$\Psi_{n_\rho, \ell_\rho, m_\rho, n_\lambda, \ell_\lambda, m_\lambda}(\alpha\rho, \alpha\lambda) = \alpha^{3/2} \phi_{n_\rho, \ell_\rho, m_\rho}(\alpha\rho) \phi_{n_\lambda, \ell_\lambda, m_\lambda}(\alpha\lambda) \quad (\text{II.6})$$

avec : 
$$\phi_{n,\ell,m}(x) = \pi^{-1/4} (2^n n!)^{-1/2} H_n(x) \exp(-x^2 / 2) \quad (\text{II.7})$$

$n_\rho, \ell_\rho, m_\rho, n_\lambda, \ell_\lambda, m_\lambda$  sont les nombres quantiques habituels relatifs aux deux oscillateurs harmoniques.

$\alpha = \sqrt{3K/4m}$ ,  $H_n(x)$  est le polynôme d'Hermite de degré  $n$ .

Explicitement, pour l'état fondamental, on a :

$$\phi_\alpha^0(\vec{\rho}, \vec{\lambda}) = (\alpha / \pi)^{3/2} \exp\left[-\frac{1}{2} \alpha(\rho^2 + \lambda^2)\right] \quad (\text{II.8})$$

Les valeurs propres correspondantes sont:

$$E_N = \alpha (6 + 2N) \quad (\text{II.9})$$

avec :  $N = 2n_\rho + \ell_\rho + 2n_\lambda + \ell_\lambda$

La figure (3) montre un schéma de quelques niveaux d'énergies du système représenté par l'hamiltonien  $H_1$  et quelques transitions. Ces dernières se font par l'intermédiaire d'opérateurs appelés opérateurs multipolaires de transition  $Q_{\ell,0}(\rho, \lambda)$  introduits dans le premier chapitre via la relation (I.2).

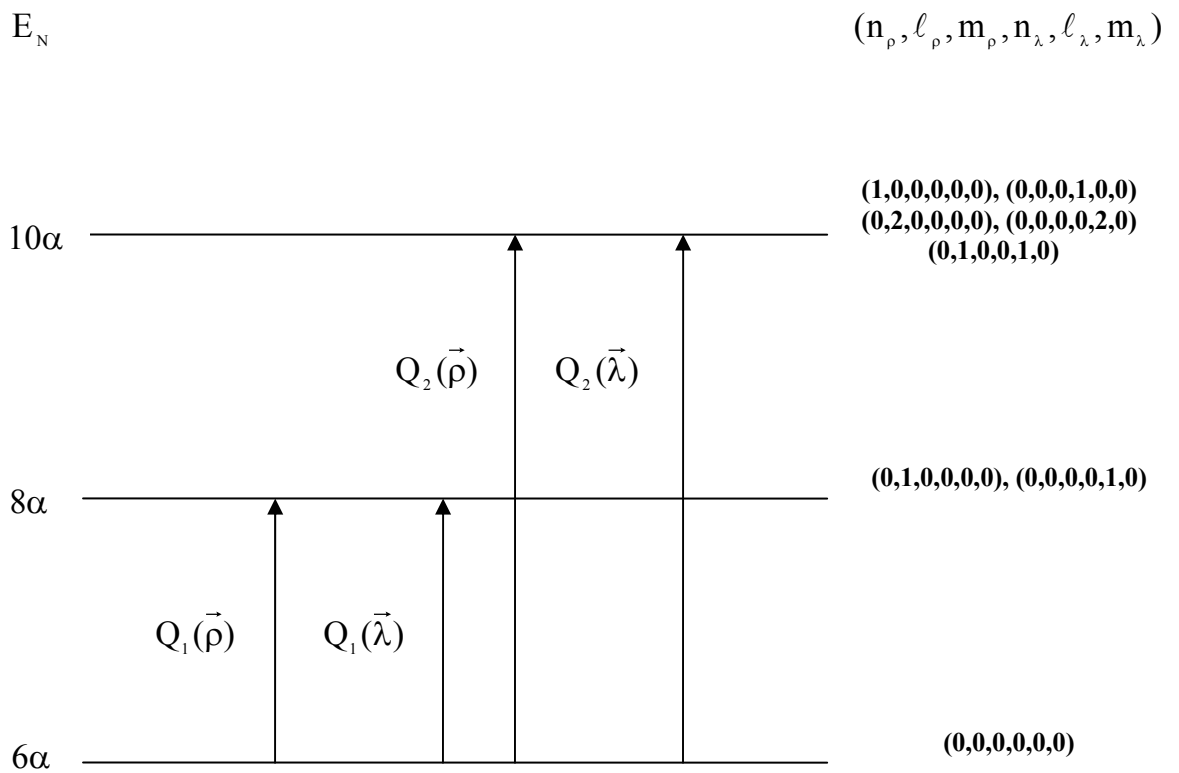


Fig (3) : Spectre des énergies de  $H_1$  (eq.II.5)

- A une dimension, les coordonnées de Jacobi ont pour expression [11] :

$$\begin{aligned}x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2) \\y &= \frac{1}{\sqrt{6}}(x_1 + x_2 - 2x_3) \\R &= \frac{1}{3}(x_1 + x_2 + x_3)\end{aligned}\tag{II.10}$$

L'introduction de ces nouvelles coordonnées dans l'hamiltonien  $H_2$  (eq.II.2) permet d'avoir, en se plaçant dans le centre de masse :

$$\begin{aligned}H_2 &= -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{3}{8}\omega^2(x^2 + y^2) + \frac{1}{2}g_3x^{-2} + \frac{1}{2}g_1[\sqrt{3}y - x]^2 \\&\quad + \frac{1}{2}g_2[\sqrt{3}y + x]^2\end{aligned}\tag{II.11}$$

L'hamiltonien donné par l'expression (II.11) n'est pas encore complètement séparable à cause des deux derniers termes. Nous allons l'écrire de nouveau en coordonnées polaires  $(r, \varphi)$  sous la forme définitive suivante :

$$H_2 = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{3}{8}\omega^2 r^2 + \frac{M}{r^2}\tag{II.12}$$

avec :

$$M = -\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{2} \left( \frac{g_3}{\sin^2 \varphi} + \frac{g_1}{\sin^2(\varphi + \frac{2}{3}\pi)} + \frac{g_2}{\sin^2(\varphi + \frac{4}{3}\pi)} \right)$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{3}{8}\omega^2 r^2 + \frac{M}{r^2} - E \right) \psi(r, \varphi) = 0\tag{II.13}$$

où :  $\psi(r, \varphi)$  représente la fonction d'onde totale du système décrit par  $H_2$ , telle que :

$$\psi(r, \varphi) = R(r)f(\varphi)$$

Calogero [11] s'est intéressé au cas où  $g_1 = g_2 = 0$  ;  $g_3 = g$ .

Dans ce cas l'équation (II.13) devient :

$$\left[ -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{3}{8} \omega^2 r^2 + \frac{1}{r^2} \left( -\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{g}{2 \sin^2 \varphi} \right) - E \right] \psi(r, \varphi) = 0 \quad (\text{II.14})$$

Les fonctions propres sont données par :

$$\begin{aligned} \psi_{n\ell}(r, \varphi) = & (N_{n\ell})^{-1/2} r^{\ell+a+1/2} \exp\left(-\frac{1}{4} \beta r^2\right) L_n^{\ell+a+1/2}\left(\frac{1}{2} \beta r^2\right) \\ & \times (\sin \varphi)^{a+1/2} C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) \end{aligned} \quad (\text{II.15})$$

$$N_{n\ell} = \sqrt{\pi} 2^\ell (2/\beta)^{\ell+a+3/2} \frac{\Gamma(a+\ell/2+1/2) \Gamma(a+\ell/2+1) \Gamma(a+\ell+n+3/2)}{\ell! n! (a+\ell+1/2) \Gamma^2(a+1/2)}$$

où :  $C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi)$  est un polynôme de Gegenbauer

$L_n^{\ell+a+1/2}(\beta r^2/2)$  est un polynôme de Laguerre

On a posé :  $a = \frac{1}{2}(1+2g)^{1/2}$ ,  $n$  et  $\ell$  sont respectivement les nombres quantiques radial et azimutal.

Pour l'état fondamental, la fonction d'onde s'écrit :

$$\psi_{0,0}(r, \varphi) = r^{a+1/2} \exp\left(-\frac{\beta r^2}{4}\right) (\sin \varphi)^{a+1/2} \quad (\text{II.16})$$

Les énergies des différents états ont pour expression [11] :

$$E_{2n+\ell} = \beta(2n + \ell + a + 3/2) \quad (\text{II.17})$$

avec :

$$\beta = (3/2)^{1/2} \omega$$

La figure (4) montre un schéma de quelques niveaux d'énergie du système représenté par l'hamiltonien  $H_2$  ainsi que quelques transitions.

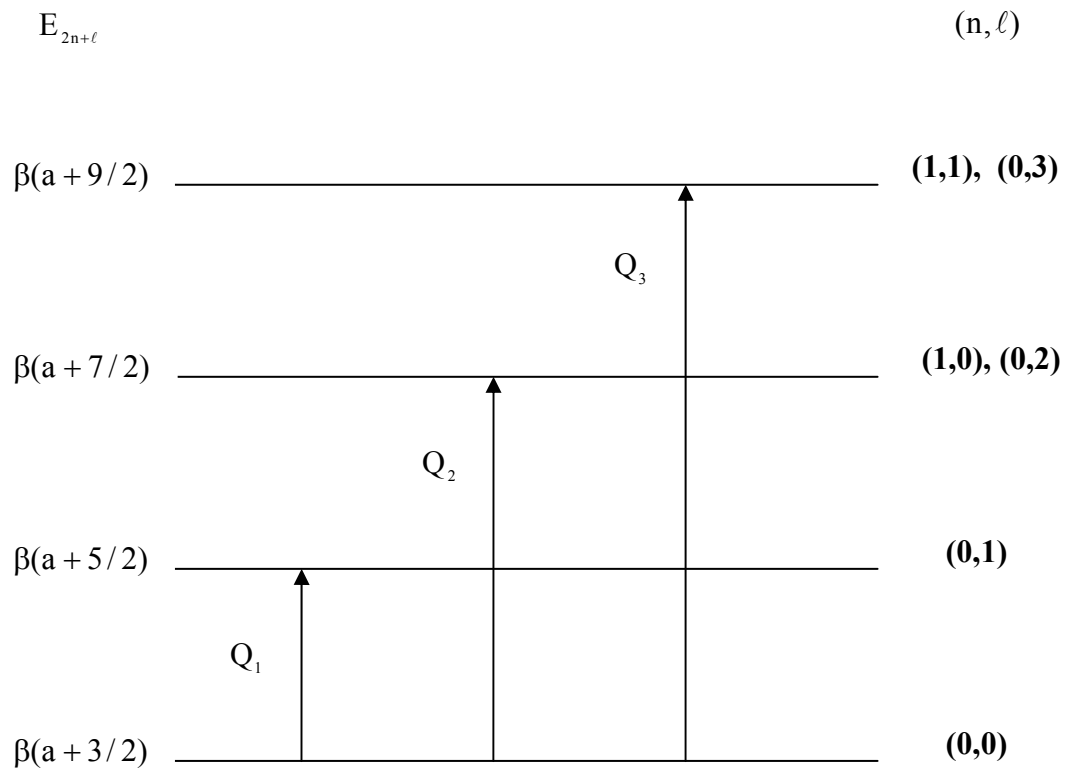


Fig (4) : Spectre des énergies de  $H_2$  (eq.II.12)

### **II.c) Inégalités de Bertlmann et Martin**

Pour vérifier l'applicabilité et la fiabilité des inégalités de Bertlmann et Martin dans le cas des systèmes à trois corps séparables, nous allons commencer par les établir et cela en procédant comme dans le cas des systèmes à deux corps.

#### **II.c.1) Trois corps interagissant par des potentiels d'oscillateurs harmoniques à trois dimensions :**

Nous commençons par chercher l'opérateur de transition qui fait passer le système représenté par l'hamiltonien  $H_1$  de l'état  $|0,0,0;0,0,0\rangle$  à l'état  $|n_\rho, \ell_\rho, m_\rho; n_\lambda, \ell_\lambda, m_\lambda\rangle$ ; on le note  $Q_{\ell_0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda})$ .

Le système étant séparable, nous avons :

$$Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}) = \rho^{\ell_\rho} Y_{\ell_\rho,0}(\theta_\rho, \varphi_\rho) \quad ; \quad Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) = \lambda^{\ell_\lambda} Y_{\ell_\lambda,0}(\theta_\lambda, \varphi_\lambda)$$

Compte tenu de ces considérations, l'opérateur de transition multipolaire du système représenté par l'hamiltonien  $H_1$  s'écrit :

$$\begin{aligned} Q_{\ell_0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda}) &= Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}) + Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) \\ &= \rho^{\ell_\rho} Y_{\ell_\rho,0}(\theta_\rho, \varphi_\rho) + \lambda^{\ell_\lambda} Y_{\ell_\lambda,0}(\theta_\lambda, \varphi_\lambda) \end{aligned} \quad (\text{II.18})$$

Les inégalités de Bertlmann et Martin sont dérivées de la règle de somme de Thomas – Reiche - Kuhn (TRK), cette dernière est obtenue en calculant commutateurs et doubles commutateurs de l'hamiltonien  $H_1$  et de l'opérateur de transition multipolaire  $Q_{\ell_0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda})$  ainsi que les valeurs moyennes de ces commutateurs dans l'état fondamental.

Le commutateur suivant  $[H_1, Q_{\ell_0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda})]$ , nous donne :

$$\begin{aligned} [H_1, Q_{\ell_0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda})] &= [H_\rho, Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho})] + [H_\lambda, Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda})] = -\frac{\hbar^2}{m} (\vec{\nabla}_\rho Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho})) \cdot \vec{\nabla}_\rho \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{m} \Delta_\rho Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}) - \frac{\hbar^2}{m} (\vec{\nabla}_\lambda Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda})) \cdot \vec{\nabla}_\lambda - \frac{\hbar^2}{m} \Delta_\lambda Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) \end{aligned} \quad (\text{II.19})$$

Le double commutateur est donné par (voir A.5) :

$$\begin{aligned} \left[ Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda}), [H_1, Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda})] \right] &= \left[ Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}), [H_\rho, Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho})] \right] + \left[ Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}), [H_\lambda, Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda})] \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{m} \ell_\rho (2\ell_\rho + 1) \rho^{2\ell_\rho - 2} (Y_{\ell_\rho,0}(\varphi_\rho, \theta_\rho))^2 + \frac{\hbar^2}{m} \ell_\lambda (2\ell_\lambda + 1) \lambda^{2\ell_\lambda - 2} (Y_{\ell_\lambda,0}(\varphi_\lambda, \theta_\lambda))^2 \quad (\text{II.20}) \end{aligned}$$

La valeur moyenne du double commutateur précédent dans l'état fondamental noté  $|0\rangle$  s'écrit (voir A.7 et A.8) :

$$\begin{aligned} \langle 0 | \left[ Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda}), [H_1, Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda})] \right] | 0 \rangle &= \frac{\hbar^2}{m} \ell_\rho (2\ell_\rho + 1) \langle \rho^{2\ell_\rho - 2} \rangle_0 \\ &\quad + \frac{\hbar^2}{m} \ell_\lambda (2\ell_\lambda + 1) \langle \lambda^{2\ell_\lambda - 2} \rangle_0 \quad (\text{II.21}) \end{aligned}$$

Or, (II.20) s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \left[ Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda}), [H_1, Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda})] \right] &= 2 Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}) H_\rho Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}) - (Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}))^2 H_\rho \\ &\quad - H_\rho (Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}))^2 + 2 Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) H_\lambda Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) - (Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}))^2 H_\lambda - H_\lambda (Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}))^2 \quad (\text{II.22}) \end{aligned}$$

En prenant la valeur moyenne de l'expression précédente dans l'état fondamental et en introduisant la relation de fermeture nous aurons la relation suivante (voir A.11) :

$$\begin{aligned} \langle 0 | \left[ Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda}), [H_1, Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda})] \right] | 0 \rangle &= 2 \sum_{j_\rho} (E_{j_\rho} - E_0) \left| \langle 0 | Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}) | j_\rho \rangle \right|^2 \\ &\quad + 2 \sum_{j_\lambda} (E_{j_\lambda} - E_0) \left| \langle 0 | Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) | j_\lambda \rangle \right|^2 \quad (\text{II.23}) \end{aligned}$$

Compte tenu de la relation (II.21), on a :

$$\begin{aligned} & \sum_{j_p} (E_{j_p} - E_0) \left| \langle 0 | Q_{\ell_p,0}(\vec{\rho}) | j_p \rangle \right|^2 + \sum_{j_\lambda} (E_{j_\lambda} - E_0) \left| \langle 0 | Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) | j_\lambda \rangle \right|^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{m} \ell_p (2\ell_p + 1) \langle \rho^{2\ell_p-2} \rangle_0 + \frac{\hbar^2}{m} \ell_\lambda (2\ell_\lambda + 1) \langle \lambda^{2\ell_\lambda-2} \rangle_0 \end{aligned} \quad (\text{II.24})$$

En remplaçant  $(E_{j_p} - E_0)$  et  $(E_{j_\lambda} - E_0)$  par  $(E_{1\ell_p} - E_0)$  et  $(E_{1\ell_\lambda} - E_0)$  dans la relation (II.24), nous aboutissons à l'inégalité suivante :

$$\langle \rho^{2\ell_p} \rangle_0 + \langle \lambda^{2\ell_\lambda} \rangle_0 \leq \frac{\hbar^2 \ell_p (2\ell_p + 1)}{m(E_{1\ell_p} - E_0)} \langle \rho^{2\ell_p-2} \rangle_0 + \frac{\hbar^2 \ell_\lambda (2\ell_\lambda + 1)}{m(E_{1\ell_\lambda} - E_0)} \langle \lambda^{2\ell_\lambda-2} \rangle_0 \quad (\text{II.25})$$

Elle se réduit à (II.26) dans le cas où :  $\ell_p = \ell_\lambda = 1$

$$\langle \rho^2 \rangle_0 + \langle \lambda^2 \rangle_0 \leq \frac{6\hbar^2}{m(E_1 - E_0)} \quad (\text{II.26})$$

Puisque :

$$\langle r^2 \rangle_0 = \langle r_1^2 \rangle_0 + \langle r_2^2 \rangle_0 + \langle r_3^2 \rangle_0 = \frac{1}{2} (\langle \rho^2 \rangle_0 + \langle \lambda^2 \rangle_0) \quad (\text{II.27})$$

Il s'en suit que :

$$\langle r^2 \rangle_0 \leq \frac{3\hbar^2}{m(E_1 - E_0)} \quad (\text{II.28})$$

La relation (II.28) représente l'inégalité de Bertlmann -Martin valable dans le cas des problèmes à trois corps de mêmes masses interagissant par des potentiels d'oscillateurs harmoniques.

$E_1$  est l'énergie de l'état le plus bas qui puisse être atteint avec l'opérateur  $Q_1$  à partir de l'état fondamental d'énergie  $E_0$ , et  $\langle r^2 \rangle_0$  est le rayon carré moyen du système, c'est aussi le moment d'ordre 2 de la densité du fondamental défini par :

$$\langle r^2 \rangle_0 = 4\pi \int r^2 |\phi_\alpha^0(\mathbf{r})|^2 r^2 d\mathbf{r} \quad (\text{II.29})$$

$\phi_\alpha^0$  : représente la fonction d'onde de l'état fondamental (équation (II.8)) du système représenté par l'hamiltonien  $H_1$ . Les détails de ces calculs sont apportés dans l'appendice A.

### **II.c.2) Trois corps interagissant par des potentiels d'oscillateurs harmoniques plus une force centrifuge à une dimension :**

Nous commençons par chercher l'opérateur de transition qui fait passer le système d'hamiltonien  $H_2$ , de l'état  $|00\rangle$  à l'état  $|0\ell\rangle$

$$Q_{\ell,0}|00\rangle = |0\ell\rangle \quad (\text{II.30})$$

Multiplions les deux membres de la relation (II.30) par le bras  $\langle 0\ell|$

$$\langle 0\ell|Q_{\ell,0}|00\rangle = \langle 0\ell|0\ell\rangle \quad (\text{II.31})$$

En utilisant les fonctions d'ondes données par l'expression (II.15), et par identification des deux membres de (II.31), l'opérateur multipolaire de transition prend la forme suivante :

$$Q_{\ell,0}(r, \varphi) = r^\ell C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) \quad (\text{II.32})$$

Rappelons que les inégalités de Bertlmann et Martin sont dérivées de la règle de somme de Thomas – Reiche - Kuhn (TRK), obtenue en calculant commutateur et double commutateur de l'hamiltonien  $H_2$  avec l'opérateur de transition multipolaire  $Q_{\ell,0}(r, \varphi)$ .

Déterminons pour cela le commutateur  $[H_2, Q_{\ell,0}(r, \varphi)]$  :

$$\begin{aligned} [H_2, Q_{\ell,0}(r, \varphi)] &= -\ell^2 r^{\ell-2} C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) - 2\ell r^{\ell-1} C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) \frac{\partial}{\partial r} - 2r^{\ell-2} \frac{\partial C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi)}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ &\quad - r^{\ell-2} \frac{\partial^2 C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi)}{\partial \varphi^2} \end{aligned} \quad (\text{II.33})$$

Calculons ensuite le double commutateur suivant (voir A.22) :

$$[Q_{\ell,0}(r, \varphi), [H_2, Q_{\ell,0}(r, \varphi)]] = 2\ell^2 r^{2\ell-2} (C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi))^2 + 2r^{2\ell-2} (\partial C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) / \partial \varphi)^2 \quad (\text{II.34})$$

La valeur moyenne dans l'état fondamental ( $n=0, \ell=0$ ) de l'expression (II.34), s'écrit :

$$\langle 00 | [Q_{\ell,0}(r, \varphi), [H_2, Q_{\ell,0}(r, \varphi)]] | 00 \rangle = \langle r^{2\ell-2} \rangle_0 [\ell^2 F_{\ell}^{a+1/2} + (2a+1)^2 F_{\ell-1}^{a+3/2}] \quad (\text{II.35})$$

On a posé [12] :

$$\begin{aligned} F_{\nu}^{\mu} &= 2 \int_0^{\pi} (\sin^{\mu} \varphi C_{\nu}^{\mu}(\cos \varphi))^2 d\varphi \\ &= \sqrt{\pi} 2^{\nu+1} \frac{\Gamma(\mu + \nu/2) \Gamma(\mu + \nu/2 + 1/2)}{\nu! (\nu + \mu) \Gamma^2(\mu)} \end{aligned}$$

où :  $C_{\nu}^{\mu}(\cos \varphi)$  est un polynôme de Gegenbauer

$$\langle r^{2\ell-2} \rangle_0 = \int_0^{\infty} r^{2\ell-2} r^{2a+1} \exp\left(-\frac{1}{2}(3/2)^{1/2} \omega r^2\right) r dr$$

le double commutateur de l'équation (II.34) s'écrit sous une autre forme :

$$[Q_{\ell,0}(r, \varphi), [H_2, Q_{\ell,0}(r, \varphi)]] = 2 Q_{\ell,0}(r, \varphi) H_2 Q_{\ell,0}(r, \varphi) - Q_{\ell,0}(r, \varphi)^2 H_2 - H_2 Q_{\ell,0}(r, \varphi)^2 \quad (\text{II.36})$$

En prenant la valeur moyenne de (II.36) dans l'état fondamental et en introduisant la relation de fermeture, nous aboutissons à (voir A.34) :

$$\langle 00 | [Q_{\ell,0}(r, \varphi), [H_2, Q_{\ell,0}(r, \varphi)]] | 00 \rangle = 2 \sum_j (E_j - E_{00}) |\langle j | Q_{\ell,0}(r, \varphi) | 00 \rangle|^2 \quad (\text{II.37})$$

Compte tenu de (II.35) :

$$\sum_j (E_j - E_{00}) |\langle 00 | Q_{\ell,0}(\cos \varphi) | j \rangle|^2 = \langle r^{2\ell-2} \rangle_0 [\ell^2 F_{\ell}^{a+1/2} + (2a+1)^2 F_{\ell-1}^{a+3/2}] \quad (\text{II.38})$$

En remplaçant  $(E_j - E_{00})$  par  $(E_{0\ell} - E_{00})$  la relation (II.38) devient :

$$(E_{0\ell} - E_{00}) \langle 00 | Q_{\ell,0}(\cos \varphi)^2 | 00 \rangle \leq \langle r^{2\ell-2} \rangle_0 [\ell^2 F_{\ell}^{a+1/2} + (2a+1)^2 F_{\ell-1}^{a+3/2}] \quad (\text{II.39})$$

Puisque :

$$\langle 00 | Q_{\ell,0}(\cos \varphi)^2 | 00 \rangle = \langle r^{2\ell} \rangle_0 F_{\ell}^{a+1/2}$$

et

$$\frac{F_{\ell-1}^{a+3/2}}{F_{\ell}^{a+1/2}} = \frac{\ell(a + \ell/2 + 1/2)}{(2a + 1/2)^2}$$

l'expression (II.39) prendra la forme suivante :

$$\langle r^{2\ell} \rangle_0 \leq \frac{2\ell(\ell + a + 1/2)}{(E_{0\ell} - E_{00})} \langle r^{2\ell-2} \rangle_0 \quad (\text{II.40})$$

$\langle r^{2\ell} \rangle_0$  : représente la valeur moyenne  $r^{2\ell}$  dans la partie radiale de l'état fondamental. En multipliant les deux membres de cette inégalité par :

$$2 \int_0^{\pi} \sin \varphi^{2a+1} d\varphi$$

on obtient :

$$\langle 00 | r^{2\ell} | 00 \rangle \leq \frac{2\ell(\ell + a + 1/2)}{(E_{0\ell} - E_{00})} \langle 00 | r^{2\ell-2} | 00 \rangle \quad (\text{II.41})$$

La relation (II.41) représente l'inégalité de Bertlmann -Martin valable dans le cas du potentiel de Calogero.

$E_{0\ell}$  est l'énergie de l'état le plus bas qui puisse être atteint avec l'opérateur  $Q_{\ell 0}$  à partir de l'état fondamental d'énergie  $E_{00}$ , et  $\langle 00 | r^{2\ell} | 00 \rangle$  est le moment d'ordre  $2\ell$  de la densité du fondamental défini par :

$$\langle 00 | r^{2\ell} | 00 \rangle = (N_{00})^{-1/2} \int r^{2\ell} |\psi_{00}(r, \varphi)|^2 r dr d\varphi \quad (\text{II.42})$$

$$= \left( \frac{2}{\beta} \right)^{\ell} \frac{\Gamma(a + \ell + 3/2)}{\Gamma(a + 3/2)}$$

avec :

$$N_{00} = \sqrt{\pi} \left( \frac{2}{\beta} \right)^{a+3/2} \Gamma(a + 1)$$

$\psi_{00}(r, \varphi)$  : est la fonction d'onde de l'état fondamental (équation (II.15)) du système décrit par hamiltonien  $H_2$ . Le détail de ces calculs est donné en appendice A.

## **II.d) Résultats et discussion :**

Nous avons d'abord introduit les coordonnées de Jacobi afin de séparer les hamiltoniens des deux problèmes à trois corps étudiés. Par la suite, nous avons cherché les opérateurs multipolaires de transition correspondant à chacun des deux systèmes. Les inégalités de Bertlmann et Martin ont été déduites du calcul des commutateurs et des doubles commutateurs des hamiltoniens avec ces opérateurs de transition multipolaires.

En utilisant les inégalités de Bertlmann et Martin à savoir l'inégalité (II.28) dans le cas de trois particules interagissant par des potentiels d'oscillateurs harmoniques et l'inégalité (II.41) pour le potentiel de Calogero, nous avons effectué le calcul des moments de la densité du fondamental  $\langle r^{2\ell} \rangle_0$ , à partir des énergies exactes de la ligne yrast données par les relations (II.9) et (II.17). Nous avons trouvé que les limites supérieures des moments données par les inégalités coïncident totalement avec les moments exacts donnés par les relations (II.29) et (II.42) (voir figures (5) et (6)). Nous reportons dans le tableau (II.1) les énergies de la ligne yrast des systèmes décrits par les hamiltoniens  $H_1$  et  $H_2$ . Les valeurs des moments de la densité du fondamental donnés par la méthode des inégalités de Bertlmann et Martin  $\langle r^{2\ell} \rangle_0$  (BM) des deux systèmes représentés par les hamiltoniens  $H_1$  et  $H_2$  sont portées dans le tableau (II.2).

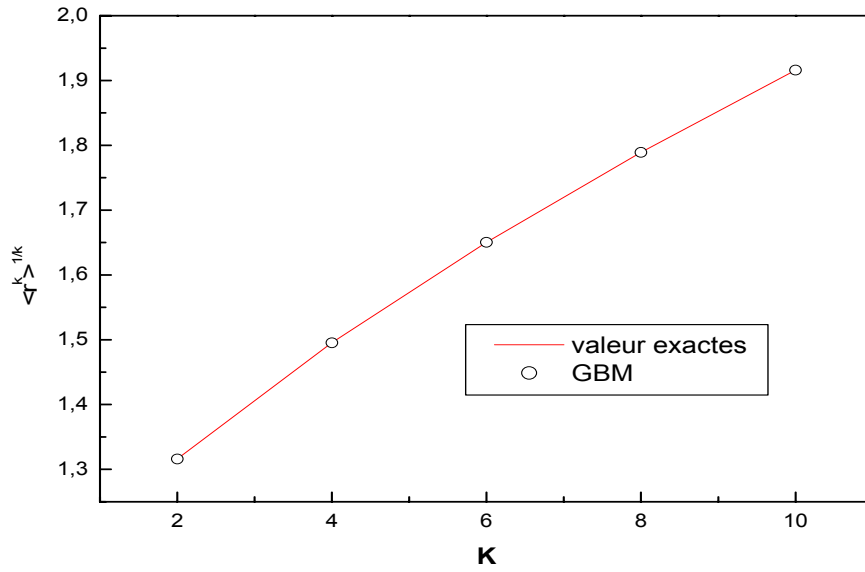
L'intérêt, que ces moments de la densité du fondamental calculés par les inégalités de Bertlmann et Martin soient identiques aux valeurs exactes, est grand. En effet, ceci nous amène à affirmer que les inégalités de Bertlmann - Martin sont saturées (c'est à dire que les valeurs des moments de la densité du fondamental exacts sont identiques aux limites supérieures des moments donnés par les inégalités de Bertlmann et Martin) donc fiables pour ces deux types de problèmes à trois corps ; de même cela nous permet de tester une nouvelle fois leur fiabilité dans le cas d'un système à trois corps décrit par un hamiltonien non séparable, ce que nous allons voir dans le troisième chapitre de ce travail.

**Tableau (II.1) :** Les énergies exactes de la ligne yrast des deux systèmes décrits par les hamiltoniens  $H_1(1)$  et  $H_2(2)$  ( $\alpha = (3K/4m)^{1/2}$  ;  $a = \frac{1}{2}(1+2g)^{1/2}$  ;  $\beta = (3/2)^{1/2}\omega$ ).

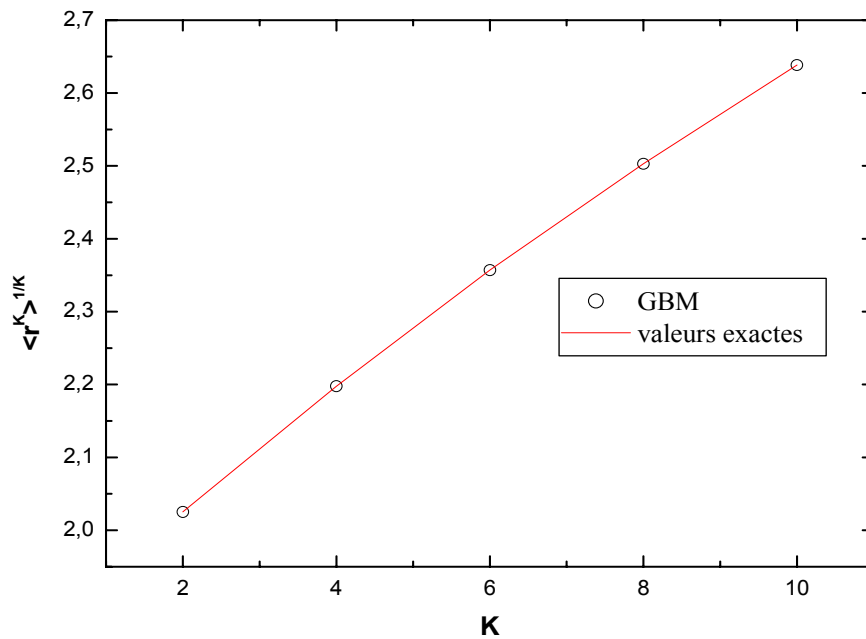
$\ell$	$E_{\text{exacte}}$	
	(1)	(2)
1	$6\alpha$	$\beta(a+3/2)$
2	$8\alpha$	$\beta(a+5/2)$
3	$10\alpha$	$\beta(a+7/2)$
4	$12\alpha$	$\beta(a+9/2)$
5	$14\alpha$	$\beta(a+11/2)$

**Tableau (II.2) :** Les moments de la densité du fondamental calculés par la méthode des inégalités de Bertlmann et Martin (GBM) des deux systèmes décrits par les hamiltoniens  $H_1(1)$  et  $H_2(2)$  ( $\alpha = (3K/4m)^{1/2}$  ;  $a = \frac{1}{2}(1+2g)^{1/2}$  ;  $\beta = (3/2)^{1/2}\omega$ ).

$\ell$	$\langle r^{2\ell} \rangle_0^{\text{GBM}}$	
	(1)	(2)
1	$(3/2\alpha)$	$(2a+3)/\beta$
2	$(15/4\alpha^2)$	$(2a+3)(2a+5)/\beta^2$
3	$(105/8\alpha^3)$	$(2a+3)(2a+5)(2a+7)/\beta^3$
4	$(945/32\alpha^4)$	$(2a+3)(2a+5)(2a+7)(2a+9)/\beta^4$
5	$(10395/32\alpha^5)$	$(2a+3)(2a+5)(2a+7)(2a+9)(2a+11)/\beta^5$



**Fig (5) :** Les moments normalisés de la densité du fondamental d'ordre  $k$  dans le cas de système décrit par l'hamiltonien  $H_1 (\alpha = (3/4)^{1/2})$ .



**Fig (6) :** Les moments normalisés de la densité du fondamental d'ordre  $k$  dans le cas de système décrit par l'hamiltonien  $H_2 (\beta = (3/2)^{1/2}, a = 1)$ .

# Chapitre 3

**Systemes non séparables**

Dans le chapitre précédent nous avons testé la fiabilité des inégalités de Bertlmann et Martin généralisées en calculant les moments d'ordre  $2\ell$  dans le cas des systèmes à trois corps interagissant, dans un cas, par des potentiels d'oscillateurs harmoniques et dans l'autre par une force centrifuge en plus (potentiel de Calogero). Nous avons trouvé que ces moments de la densité du fondamental coïncident avec les moments exacts. Nous allons tester l'applicabilité et la fiabilité de ces inégalités, dans le cas de problèmes à trois corps dont l'hamiltonien n'est pas séparable, en particulier dans le cas d'atomes à deux électrons.

Nous utiliserons les inégalités de Bertlmann et Martin pour calculer les moments de la densité du fondamental. Comme il n'est pas possible d'avoir les valeurs exactes, car ces types de problèmes ne sont pas résolus analytiquement, nous allons les comparer aux valeurs données par trois méthodes d'approximation : la méthode des perturbations, la méthode variationnelle et la méthode de Hartree. Dans la méthode des perturbations, l'hamiltonien du système se sépare en deux parties : une première partie prépondérante dont les fonctions d'onde sont connues et une interaction supplémentaire supposée faible. La méthode variationnelle, qui est sans doute la plus connue et la plus utilisée, donne d'excellents résultats, surtout lorsque le choix de la fonction d'essai est judicieux. La méthode de Hartree consiste à remplacer la vraie perturbation par une perturbation dite moyenne, cette valeur moyenne dépendant des fonctions d'onde du système.

Notre but dans ce chapitre consiste à situer les valeurs des moments de la densité du fondamental calculées à partir des inégalités de Bertlmann et Martin généralisées (en utilisant les énergies trouvées par les trois méthodes d'approximation) par rapport aux moments trouvés avec les trois méthodes d'approximation que nous allons expliciter brièvement par la suite.

### **III) Problème à trois corps non séparable**

Le problème qui nous intéresse est absolument analogue au problème de trois corps de la mécanique céleste : deux planètes attirées par le soleil suivant la loi d'attraction de Newton interagissant également entre elles. La prise en compte de cette interaction correspondant à la solution exacte du problème de trois corps se heurte, comme on le sait, à des difficultés mathématiques souvent insurmontables. Toutefois, en mécanique classique, on a depuis longtemps développé des méthodes approximatives excellentes qui permettent d'obtenir des résultats avec une précision suffisante pour les objectifs pratiques de l'astronomie.

Dans les systèmes atomiques auxquels nous nous intéresserons c'est à dire les systèmes pour lesquels l'hamiltonien s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{R_0} - \sum_{i=1}^2 \frac{\hbar^2}{2m_i}\Delta_{R_i} + \left( \sum_{i=1}^2 V(\vec{R}_0 - \vec{R}_i) + \sum_{i=1}^2 \sum_{j>i} V(\vec{R}_i - \vec{R}_j) \right) \quad (\text{III.1})$$

$\Delta_{R_0}$  : est le laplacien se rapportant aux coordonnées  $R_0$  qui repèrent la position de la particule 3 de masse  $M$ .

$\Delta_{R_i}$  : est le laplacien se rapportant aux coordonnées  $R_i$  qui repèrent la position de la particule  $i$  de masse  $m_i$  ( $i=1,2$ ).

$V(\vec{R}_0 - \vec{R}_i)$  : potentiel d'interaction de la particule  $i$  avec la particule 3

$V(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$  : potentiel d'interaction des particules 1 et 2

Il est impossible de résoudre exactement l'équation de Schrödinger associée à l'hamiltonien  $H$ . Il faut par conséquent, utiliser des méthodes d'approximation. Dans ce qui suit, nous en introduirons quelques unes qui sont souvent utilisées en mécanique quantique.

### **III.a) Théorie des perturbations :**

Réécrivons l'hamiltonien donné par l'expression (III.1) dans le système du centre de masse avec :  $m_1=m_2=m$ ,  $M \gg m$  et  $\vec{r}_i = \vec{R}_i - \vec{R}_0$  :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}_2} + V(\vec{r}_1) + V(\vec{r}_2) + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \quad (\text{III.2})$$

Le problème est équivalent à celui de deux particules dans un champ central  $\Delta_{\vec{r}_{1(2)}}$  : est le laplacien se rapportant aux coordonnées  $\vec{r}_{1(2)}$  qui repèrent la position de la particule 1(2) de masse  $m$ .

$V(\vec{r}_{1(2)})$  : potentiel d'interaction de la particule 1(2) avec la particule 3

$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$  : potentiel d'interaction des particules 1 et 2

L'équation de Schrödinger correspondant à l'hamiltonien (III.2) s'écrit :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}_2} + V(\vec{r}_1) + V(\vec{r}_2) + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) - E \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0 \quad (\text{III.3})$$

où :  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  est la fonction d'onde totale du système et  $E$  représente son énergie dans le système du centre de masse.

Nous allons décomposer le hamiltonien du système en deux parties :

$$H = H_0 + W \quad (\text{III.4})$$

$H_0$  : le hamiltonien dont on sait résoudre exactement l'équation de Schrödinger correspondante.

$W$  : représente une perturbation petite devant  $H_0$ .

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}_2} + V(\vec{r}_1) + V(\vec{r}_2) \quad (\text{III.5})$$

L'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$H_0 \psi_{(n_1, n_2)}^{(0)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_{(n_1, n_2)}^{(0)} \psi_{(n_1, n_2)}^{(0)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{III.6})$$

avec :

$$\psi_{(n_1, n_2)}^{(0)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_{n_1, \ell_1, m_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2, \ell_2, m_2}(\vec{r}_2) \quad (\text{III.7})$$

$$E_{(n_1, n_2)}^{(0)} = E_{n_1}^{(0)} + E_{n_2}^{(0)}$$

qui représentent respectivement les fonctions et les valeurs propres de  $H_0$ .  
Cherchons les corrections apportées à l'énergie et à la fonction d'onde si on tient compte de la perturbation  $W$  :

### Correction à l'énergie et à la fonction d'onde de l'état fondamental :

D'après la théorie des perturbations, la correction au premier ordre à l'énergie s'écrit :

$$E_{n_{01}, n_{02}}^{(1)} = \langle \psi_{n_{01}, n_{02}}^{(0)} | W | \psi_{n_{01}, n_{02}}^{(0)} \rangle \quad (\text{III.8})$$

$n_{01}, n_{02}$  : sont les nombres quantiques principaux qui repèrent l'état fondamental.

D'autre part, pour la correction à la fonction d'onde du fondamental on a :

$$| \psi_{n_{01}, n_{02}}^{(1)} \rangle = \sum_{(n_1, n_2) \neq (n_{01}, n_{02})} \frac{\langle \phi_{n_1, \ell_1, m_1} \phi_{n_2, \ell_2, m_2} | W | \phi_{n_{01}, \ell_{01}, m_{01}} \phi_{n_{02}, \ell_{02}, m_{02}} \rangle}{E_{(n_{01}, n_{02})}^{(0)} - E_{(n_1, n_2)}^{(0)}} | \phi_{n_1, \ell_1, m_1} \phi_{n_2, \ell_2, m_2} \rangle \quad (\text{III.9})$$

les expressions (III.8) et (III.9) permettent d'écrire la fonction d'onde et l'énergie de l'état fondamental du système représenté par l'hamiltonien  $H$  sous les formes suivantes :

$$E_{n_{01}, n_{02}} = E_{n_{01}, n_{02}}^{(0)} + E_{n_{01}, n_{02}}^{(1)} \quad (\text{III.10})$$

$$\psi_{n_{01}, n_{02}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{n_{01}, n_{02}}^{(0)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \psi_{n_{01}, n_{02}}^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{III.11})$$

Nous allons faire un certain nombre de suppositions :

- Considérons les deux particules 1 et 2 comme discernables ou bosoniques pour éviter les problèmes d'anti-symétrie mais interagissant de la même manière avec la particule 3.

$$V(\vec{r}_1) \equiv V(\vec{r}_2)$$

- Pour simplifier les calculs, nous choisissons :

$$W = V\left(\left|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right|\right) = v_0 \delta\left(\left|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right|\right)$$

Avec ces suppositions les relations (III.8) et (III.9), deviennent :

$$E_{n_{01}, n_{02}}^{(1)} = v_0 \int \left| \phi_{n_{01}, \ell_{01}, m_{01}}(\vec{r}_1) \right|^4 d\vec{r}_1 \quad (\text{III.12})$$

et

$$\left| \psi_{n_{01}, n_{02}}^{(1)} \right\rangle = \sum_{(n_1, n_2) \neq (n_{01}, n_{02})} C_{(n_1, n_2)} \left| \phi_{n_1, \ell_1, m_1} \phi_{n_2, \ell_2, m_2} \right\rangle \quad (\text{III.13})$$

où l'on a posé :

$$C_{(n_1, n_2)} = \frac{\left\langle \phi_{n_1, \ell_1, m_1} \phi_{n_2, \ell_2, m_2} \left| W \right| \phi_{n_{01}, \ell_{01}, m_{01}} \phi_{n_{02}, \ell_{02}, m_{02}} \right\rangle}{E_{(n_{01}, n_{02})}^{(0)} - E_{(n_1, n_2)}^{(0)}}$$

Il est compliqué de calculer la correction à la fonction d'onde directement de la relation (III.13) car tous les états différents du fondamental interviennent dans les calculs. Par contre le calcul du rayon carré moyen  $\langle r^2 \rangle_0$  dans l'état fondamental, grandeur qui nous intéresse le plus, peut être effectué simplement.

### Rayon carré moyen :

Le rayon carré moyen du système calculé dans l'état  $\left| \psi_{n_{01}, n_{02}} \right\rangle = \left| \psi_{n_{01}, n_{02}}^{(0)} \right\rangle + \left| \psi_{n_{01}, n_{02}}^{(1)} \right\rangle$ , est donné par :

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_{n_{01}, n_{02}} \left| r^2 \right| \psi_{n_{01}, n_{02}} \right\rangle &= \left\langle \psi_{n_{01}, n_{02}}^{(0)} \left| r^2 \right| \psi_{n_{01}, n_{02}}^{(0)} \right\rangle + 2 \left\langle \psi_{n_{01}, n_{02}}^{(0)} \left| r^2 \right| \psi_{n_{01}, n_{02}}^{(1)} \right\rangle \\ &+ \left\langle \psi_{n_{01}, n_{02}}^{(1)} \left| r^2 \right| \psi_{n_{01}, n_{02}}^{(1)} \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{III.14})$$

d'autre part, on a :

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_{n_{01}, n_{02}} \left| r^2 \right| \psi_{n_{01}, n_{02}} \right\rangle &= \left\langle \psi_{n_{01}, n_{02}} \left| r_1^2 \right| \psi_{n_{01}, n_{02}} \right\rangle + \left\langle \psi_{n_{01}, n_{02}} \left| r_2^2 \right| \psi_{n_{01}, n_{02}} \right\rangle \\ &= 2 \left\langle \psi_{n_{01}, n_{02}} \left| r_1^2 \right| \psi_{n_{01}, n_{02}} \right\rangle = 2 \left\langle \psi_{n_{01}, n_{02}} \left| r_2^2 \right| \psi_{n_{01}, n_{02}} \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{III.15})$$

Dans la suite des calculs on négligera le troisième terme du deuxième membre de la relation (III.14), car il est du second ordre. Ce qui nous permet d'écrire en utilisant (III.15):

$$\langle \Psi_{n_01, n_02} | r^2 | \Psi_{n_01, n_02} \rangle = 2 \langle \Psi_{n_01, n_02}^{(0)} | r_1^2 | \Psi_{n_01, n_02}^{(0)} \rangle + 4 \langle \Psi_{n_01, n_02}^{(0)} | r_1^2 | \Psi_{n_01, n_02}^{(1)} \rangle \quad (\text{III.16})$$

Intéressons nous plus particulièrement au deuxième terme du second membre de la relation (III.16) :

$$\langle \Psi_{n_01, n_02}^{(0)} | r_1^2 | \Psi_{n_01, n_02}^{(1)} \rangle = \langle \phi_{n_01, \ell_01, m_01} \phi_{n_02, \ell_02, m_02} | r_1^2 \sum_{(n_1, n_2) \neq (n_01, n_02)} C_{(n_1, n_2)} | \phi_{n_1, \ell_1, m_1} \phi_{n_2, \ell_2, m_2} \rangle \quad (\text{III.17})$$

qui peut se réécrire sous forme intégrale :

$$\langle \Psi_{n_01, n_02}^{(0)} | r_1^2 | \Psi_{n_01, n_02}^{(1)} \rangle = \sum_{(n_1, n_2) \neq (n_01, n_02)} C_{(n_1, n_2)} \int \phi_{n_01, \ell_01, m_01}(\vec{r}_1) \phi_{n_1, \ell_1, m_1}(\vec{r}_1) r_1^2 d\vec{r}_1 \int \phi_{n_2, \ell_2, m_2}(\vec{r}_2) \phi_{n_02, \ell_02, m_02}(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \quad (\text{III.18})$$

Puisque les  $\{\phi_{n, \ell, m}(\vec{r})\}$  forment une base orthonormée, nous pouvons écrire que :

- $\int \phi_{n_2, \ell_2, m_2}(\vec{r}_2) \phi_{n_02, \ell_02, m_02}(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 = \delta_{n_2, n_02} \delta_{\ell_2, \ell_02} \delta_{m_2, m_02}$
- $\int \phi_{n_1, \ell_1, m_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_01, \ell_01, m_01}(\vec{r}_1) r_1^2 d\vec{r}_1 = \int R_{n_01, \ell_01}(\vec{r}_1) R_{n_1, \ell_1}(\vec{r}_1) r_1^4 dr_1 \delta_{\ell_1, \ell_01} \delta_{m_1, m_01}$

(III.19)

Les deux expressions (III.19) permettent de tirer les règles de sélections suivantes :

$$n_2 = n_02, \ell_1 = \ell_01, \ell_2 = \ell_02, m_1 = m_01 \text{ et } m_2 = m_02$$

On en déduit, que seules les ondes "S" vont intervenir dans le calcul de la valeur moyenne du rayon carré c'est à dire :

$$\ell_1 = \ell_2 = \ell_01, \quad n_2 \text{ étant égal à } n_02$$

Donc, compte tenu des conditions précédentes imposées sur les nombres quantiques, le rayon carré moyen prendra finalement la forme suivante :

$$\langle \psi_{n_1, n_2} | r^2 | \psi_{n_1, n_2} \rangle = P_{n_1} + 2 \langle \phi_{n_1, \ell_1, m_1} \phi_{n_2, \ell_2, m_2} | r_1^2 | \phi_{n_1, \ell_1, m_1} \phi_{n_2, \ell_2, m_2} \rangle \quad (\text{III.20})$$

avec :

$$P_{n_1} = 4 \sum_{n_1 \neq n_{01}} C_{n_1} \langle \phi_{n_1, \ell_1, m_1} \phi_{n_2, \ell_2, m_2} | r_1^2 | \phi_{n_1, \ell_1, m_1} \phi_{n_2, \ell_2, m_2} \rangle$$

$$C_{n_1} = \frac{\langle \phi_{n_1, \ell_1, m_1} \phi_{n_2, \ell_2, m_2} | W | \phi_{n_1, \ell_1, m_1} \phi_{n_2, \ell_2, m_2} \rangle}{E_{(n_1, n_2)}^{(0)} - E_{(n_1, n_2)}^{(0)}}$$

**III.a.1) Application de la méthode des perturbations à l'atome d'hélium :**  
Dans le cas d'un atome ayant deux électrons [13] ( $Z = 2$ ), l'expression (III.1) devient:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \quad (\text{III.21})$$

$r_1, r_2$  sont les distances des électrons au noyau,  $r_{12}$  la distance qui sépare les deux électrons.

L'hamiltonien donné par (III.21) ne tient compte ni de l'interaction spin-orbite ni de celle spin-spin, il se sépare en deux parties :

$$H_0 = \frac{-\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad (\text{III.22})$$

$$W = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \quad (\text{III.23})$$

Pour l'atome de l'hélium [13] les fonctions et les énergies propres de  $H_0$  données par la relation (III.22), s'écrivent :

$$\psi_{n_1, \ell_1, m_1, n_2, \ell_2, m_2}^{(0)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_{n_1, \ell_1, m_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2, \ell_2, m_2}(\vec{r}_2) \quad (\text{III.24})$$

avec :

$$\phi_{n_i, \ell_i, m_i}(\vec{r}) = R_{n_i, \ell_i}(r_i) Y_{\ell_i}^{m_i}(\theta_i, \varphi_i) \quad (i=1,2) \quad (\text{III.25})$$

$Y_{\ell_i}^{m_i}(\theta_i, \varphi_i)$  sont les fonctions harmoniques sphériques.

La fonction d'onde radiale à pour expression :

$$R_{n_i, \ell_i}(r_i) = (Z/a)^{3/2} \frac{2}{n_i^2} \sqrt{\frac{(n_i - \ell_i - 1)!}{[(n_i + \ell_i)!]^3}} (r_i/n_i a)^{\ell_i} L_{n_i - \ell_i - 1}^{2\ell_i + 1}(r_i/n_i a) \exp(-r_i/n_i a) \quad (\text{III.26})$$

$$E_{n_1, n_2}^{(0)} = E_{n_1}^{(0)} + E_{n_2}^{(0)} \quad (\text{III.27})$$

avec :

$$E_{n_i}^{(0)} = -\frac{\hbar^2 Z^2}{2ma} \frac{1}{n_i^2}$$

et

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$$

Dans l'esprit du paragraphe précédent nous allons remplacer le potentiel donné par la relation (III.23), par un potentiel de Dirac qui simule son comportement à l'origine, soit :

$$W = v_0 \delta(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \quad (\text{III.28})$$

### Calcul des énergies de l'état fondamental et du premier état excité :

Dans ce qui suit, on s'intéresse au calcul du rayon carré moyen par la méthode des perturbations ; par la suite nous aurons à le comparer avec le rayon carré moyen obtenu par la méthode des inégalités de Bertlmann et Martin en nous servant des énergies de l'état fondamental et du premier excité, que nous calculerons par la méthode des perturbations.

#### □ état fondamental :

Utilisons la relation (III.12) pour chercher la correction à l'énergie au premier ordre :

$$E_1^{(1)} = v_0 \int |\phi_{1,0,0}(\vec{r}_1)|^4 d\vec{r}_1 \quad (\text{III.29})$$

#### □ premier état excité :

Le premier niveau excité de l'hamiltonien non perturbé  $H_0$  est quatre fois dégénéré : le sous- espace propre associé est sous- tendu par les quatre états :

$\{|\phi_{1,0,0}; \phi_{2,0,0}\rangle; |\phi_{1,0,0}; \phi_{2,1,-1}\rangle; |\phi_{1,0,0}; \phi_{2,1,0}\rangle; |\phi_{1,0,0}; \phi_{2,1,1}\rangle\}$ , qui correspondent à une situation où l'un des deux électrons est dans l'état fondamental  $n_2=1$ , alors que l'autre est dans un état du niveau  $n_2=2$ .

D'après la théorie des perturbations appliquée à un niveau dégénéré, il faut, pour obtenir l'effet de  $W$  au premier ordre, diagonaliser la matrice  $4 \times 4$  donnée par l'expression (III.30) :

$$W_{i,j} = \begin{pmatrix} W_{1,1} & W_{1,2} & W_{1,3} & W_{1,4} \\ W_{2,1} & W_{2,2} & W_{2,3} & W_{2,4} \\ W_{3,1} & W_{3,2} & W_{3,3} & W_{3,4} \\ W_{4,1} & W_{4,2} & W_{4,3} & W_{4,4} \end{pmatrix} \quad (\text{III.30})$$

Puisque tous les  $W_{ij} = 0$  pour  $i \neq j$  ( $i, j = 1, 2, 3, 4$ ), la matrice est donc diagonale, la correction au premier ordre du premier état excité, s'écrit :

$$W_{11} = E_{2s}^{(1)} = v_0 \int |\phi_{1,0,0}(\vec{r}_1)|^2 |\phi_{2,0,0}(\vec{r}_1)|^2 d\vec{r}_1 \quad (\text{III.31})$$

$$W_{22} = W_{33} = W_{44} = E_{1p}^{(1)} = v_0 \int |\phi_{1,0,0}(\vec{r}_1)|^2 |\phi_{2,1,0}(\vec{r}_1)|^2 d\vec{r}_1$$

### Calcul du rayon carré moyen :

D'après la relation (III.20) le rayon carré moyen s'écrit comme suit :

$$\langle \psi_{1,0,0,1,0,0} | r^2 | \psi_{1,0,0,1,0,0} \rangle = P_{n_1} + 2 \langle \phi_{1,0,0} \phi_{1,0,0} | r_1^2 | \phi_{1,0,0} \phi_{1,0,0} \rangle \quad (\text{III.32})$$

avec :

$$P_{n_1} = 4 \sum_{n_1 \neq 1} C_{n_1} \langle \phi_{1,0,0} \phi_{1,0,0} | r_1^2 | \phi_{n_1,0,0} \phi_{1,0,0} \rangle$$

$$C_{n_1} = \frac{\langle \phi_{n_1,0,0} \phi_{1,0,0} | W | \phi_{1,0,0} \phi_{1,0,0} \rangle}{E_{(1,1)}^{(0)} - E_{(n_1,1)}^{(0)}}$$

Dans le cas où  $\nu_0 = 1$ , nous obtenons :

$n_1$	$P_{n_1}$
2	0,1906910685
3	0,0313264674
4	0,0109669338
5	$5,16598432 \cdot 10^{-3}$
6	$9,97079776 \cdot 10^{-4}$

$$\langle \psi_{1,0,0,1,0,0} | r^2 | \psi_{1,0,0,1,0,0} \rangle = 1,5 + 0,283 \quad (\text{III.33})$$

soit :

$$\langle \Psi_{1,0,0,1,0,0} | r^2 | \Psi_{1,0,0,1,0,0} \rangle = 1,783$$

**III.b) Méthode de Hartree :**

Reprenons l'équation de Schrödinger donnée par la relation (III.3) en posant  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2)$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}_2} + V(\vec{r}_1) + V(\vec{r}_2) + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) - E_{1,2} \right] \phi_1(\vec{r}_1) \phi_2(\vec{r}_2) = 0 \quad (\text{III.34})$$

posons que :

$$\begin{aligned} H_1 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}_1} + V(\vec{r}_1) \\ H_2 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}_2} + V(\vec{r}_2) \\ V_{12} &= V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \end{aligned}$$

Multiplions (III.34) à gauche par  $\phi_2^*(\vec{r}_2)$  et intégrons sur  $\vec{r}_2$ , On obtient alors une nouvelle équation :

$$\int \phi_2^*(\vec{r}_2) H_1 \phi_2(\vec{r}_2) \phi_1(\vec{r}_1) d\vec{r}_2 + \int \phi_2^*(\vec{r}_2) H_2 \phi_2(\vec{r}_2) \phi_1(\vec{r}_1) d\vec{r}_2 + \int \phi_2^*(\vec{r}_2) V_{12} \phi_2(\vec{r}_2) \phi_1(\vec{r}_1) d\vec{r}_2 = \int \phi_2^*(\vec{r}_2) E_{12} \phi_1(\vec{r}_1) \phi_2(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \quad (\text{III.35})$$

Tenant compte de :

$$\begin{aligned} \int \phi_2^*(\vec{r}_2) \phi_2(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 &= 1 \\ \int \phi_2^*(\vec{r}_2) H_2 \phi_2(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 &= E_2 \\ \tilde{V}_{1,2} &= \int \phi_2^*(\vec{r}_2) V_{1,2} \phi_2(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \end{aligned} \quad (\text{III.36})$$

L'équation (III.35) devient :

$$H_1 \phi_1(\vec{r}_1) + E_2 \phi_1(\vec{r}_1) + \tilde{V}_{1,2} \phi_1(\vec{r}_1) = E_{12} \phi_1(\vec{r}_1) \quad (\text{III.37})$$

Elle peut se réécrire :

$$\left[ H_1 + \tilde{V}_{1,2} \right] \phi_1(\vec{r}_1) = E_{12} \phi_1(\vec{r}_1) \quad (\text{III.38})$$

où l'on a posé :

$$E_{1,2} = E_1 + E_2$$

et

$\tilde{V}_{1,2}$  représente le potentiel moyen vu par la particule 1.

Finalement, on obtient l'équation suivante :

$$\left( -\frac{\Delta_1}{2} + V(r_1) + \tilde{V}_{1,2} \right) \phi_1(\vec{r}_1) = E_1 \phi_1(\vec{r}_1) \quad (\text{III.39})$$

que nous utiliserons pour trouver les fonctions d'ondes individuelles qui vont permettre de construire la fonction d'onde totale du système à trois corps.

L'équation (III.39) est similaire à celle d'une équation de Schrödinger pour une particule dans un champ  $v(r)$ , la différence réside dans le fait que le potentiel  $v(r)$  entrant dans cette équation dépend des fonctions d'onde de l'autre particule. Ce n'est donc pas un vrai problème aux valeurs propres puisque  $v(r)$  dépend des fonctions d'onde individuelles de l'autre particule et change d'expression à chaque étape du calcul.

### **Application de la méthode de Hartree à l'atome d'hélium :**

Nous allons de nouveau appliquer les résultats du paragraphe précédent aux systèmes d'atomes ayant deux électrons (hélium), en prenant une interaction entre les deux électrons donnée par :

$$V_{1,2} = v_0 \delta(|r_1 - r_2|) \quad (\text{III.40})$$

Dans le cas de l'hélium,  $V(r_1)$  représente un potentiel coulombien ; pour résoudre l'équation (III.39), on part de la fonction d'onde suivante :

$$\phi_2(\vec{r}_2) = \phi_2^{(0)}(\vec{r}_2) = N_0 \exp(-2r_2) \quad (\text{III.41})$$

pour l'état fondamental :

$$\phi_2^{(0)}(\vec{r}_2) = \phi_1^{(0)}(\vec{r}_1)$$

En tenant compte de (III.40) et (III.41) la valeur moyenne de la perturbation devient :

$$\tilde{V}_{1,2}^{(0)} = v_0 \left| \phi_1^{(0)}(\vec{r}_1) \right|^2 \quad (\text{III.42})$$

On porte alors (III.42) dans l'équation de Schrödinger de la particule 1 donnée par (III.39) :

$$\left( -\frac{\Delta_1}{2} - \frac{ze^2}{r_1} + v_0 (N_0)^2 \exp(-4r_1) \right) \phi_1^{(n)}(\vec{r}_1) = E_1 \phi_1^{(n)}(\vec{r}_1) \quad (\text{III.43})$$

La méthode de Hartree est, dans la pratique, une approche numérique itérative [14,15]. On part d'une fonction d'onde individuelle (qui pourrait être, par exemple, la fonction d'onde de l'état fondamental de la particule 2) qui permet de calculer la perturbation "moyenne" à laquelle est soumise la particule 1. Cette dernière permet de calculer une nouvelle fonction d'onde pour la particule 1 et ainsi de suite. On arrête l'itération lorsque la convergence voulue est atteinte.

### III.c) Traitement par la méthode variationnelle de l'atome d'hélium :

Bien que les résultats donnés par la théorie des perturbations pour l'hélium soient satisfaisants, il n'est pas toujours justifié de considérer le terme  $(1/r_{12})$  comme petit (perturbation) devant les deux autres  $(Z/r_1$  et  $Z/r_2)$ , par conséquent la procédure de Ritz semble une alternative pour trouver une approximation des états. Elle a été appliquée pour la première fois à l'hélium par Kellner [16] et avec le même succès par Hylleraas [17]. Le point de départ de cette procédure est le principe variationnel de Ritz [18] qui s'écrit :

$$E [\psi] \equiv \frac{\int \psi^* H \psi d\tau}{\int |\psi|^2 d\tau} = \text{Min} \quad (\text{III.44})$$

H: est l'hamiltonien de l'hélium donné par l'expression (III.21) avec  $(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = e = \hbar = 2m = 1)$ .

$\psi$  : est une fonction d'essai dépendant d'un certain nombre de paramètres.

$d\tau$  : est l'élément de volume.

Dans la plupart des cas, on utilise deux coordonnées elliptiques ainsi que la distance interparticules [18], données par :

$$\begin{aligned} s &= r_1 + r_2 \\ t &= r_1 - r_2 \\ u &= r_{12} \end{aligned} \quad (\text{III.45})$$

Les variables  $s$  et  $u$  sont positives par définition,  $t$  peut prendre des valeurs aussi bien positives que négatives. Les exigences de la symétrie imposent que  $\psi$  est une fonction paire de  $t$  pour le para- hélium et une fonction impaire de  $t$  pour l'ortho- hélium. Rappelons que les fonctions propres d'un atome avec deux électrons sont soit symétriques, soit antisymétriques. Les états des fonctions symétriques sont appelés **para**, ceux des fonctions propres antisymétriques, **ortho** états.

Lorsque l'hamiltonien  $H$  est une fonction paire de  $t$  et lorsque l'intégrale donnée par (III.44) contient deux facteurs, la contribution de  $-t$  est identique avec celle de  $+t$ . Nous restreignons notre étude uniquement aux cas où les

valeurs de  $t$  sont positives et nous multiplions l'élément de volume par un facteur deux [18].

En termes de variables  $s$ ,  $t$  et  $u$ , le potentiel total s'écrit :

$$V(s, t, u) = -\frac{4zs}{s^2 - t^2} + \frac{1}{u} \quad (\text{III.46})$$

L'expression (III.44) s'écrit comme suit :

$$\frac{1}{N} \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt \left\{ u(s^2 - t^2) \left[ -\frac{1}{2} \psi^* \Delta_1 \psi - \frac{1}{2} \psi^* \Delta_2 \psi + |\psi|^2 V \right] \right\} \equiv E = \text{Min} \quad (\text{III.47})$$

L'opérateur de Laplace qui figure dans l'expression (III.47) peut être réécrit en utilisant le théorème de Green comme suit :

$$\overline{p_1^2} = -\int d\tau \psi^* \Delta_1 \psi = +\int d\tau (\text{grad}_1 \psi)^2 \quad (\text{III.48})$$

Donc :

$$\frac{1}{N} \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt \left\{ u(s^2 - t^2) \left[ -\frac{1}{2} (\text{grad}_1 \psi)^2 - \frac{1}{2} (\text{grad}_2 \psi)^2 + |\psi|^2 V \right] \right\} \equiv E = \text{Min} \quad (\text{III.49})$$

En exprimant  $\text{grad}_1$  en fonction des coordonnées  $s$ ,  $t$  et  $u$ , (III.44) prend la forme [18] suivante :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt \left\{ u(s^2 - t^2) \left[ \left( \frac{\partial \psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial u} \right)^2 \right] + 2 \frac{\partial \psi}{\partial u} \times \right. \\ & \left. \times \left[ s(u^2 - t^2) \frac{\partial \psi}{\partial s} + t(s^2 - u^2) \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] - \psi^2 [4zsu - s^2 + t^2] \right\} \equiv E = \text{Min} \quad (\text{III.50}) \end{aligned}$$

où :  $N$  est le facteur de normalisation qui vaut :

$$N = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u u(s^2 - t^2) \psi^2 dt$$

Les détails des calculs se trouvent dans l'appendice B.

### Calcul des énergies de l'état fondamental et du premier état excité :

Dans ce qui suit nous nous intéressons au calcul du rayon carré moyen par la méthode variationnelle ; par la suite, nous le comparerons avec le rayon carré moyen obtenu par la méthode des inégalités de Bertlmann et Martin en nous servant des énergies de l'état fondamental et du premier excité calculées par la méthode variationnelle.

#### ○ Etat fondamental :

Pour déterminer les caractéristiques de l'état fondamental, on prendra la fonction d'essai [18] à un seul paramètre  $\sigma$  suivante :

$$\psi = \exp(-(z - \sigma)s) \quad (\text{III.51})$$

Comme la fonction d'essai ne dépend que de la variable  $s$ , on obtient :

$$\delta \int_0^{\infty} ds \left\{ \frac{4}{15} s^5 \left( \frac{d\psi}{ds} \right)^2 - \left( \frac{4}{3} z - \frac{5}{12} \right) s^4 \psi - E \frac{4}{15} s^5 \psi^2 \right\} = 0 \quad (\text{III.52})$$

Ce qui réduit l'équation différentielle à la forme suivante :

$$\frac{d^2\psi}{ds^2} + \frac{5}{s} \frac{d\psi}{ds} - \left( E + 5 \frac{z}{s} - \frac{25}{16s} \right) \psi = 0 \quad (\text{III.53})$$

Nous obtenons alors la valeur propre de l'état fondamental  $E$  :

$$E = - \left( z - \frac{5}{16} \right)^2 \quad (\text{III.54})$$

Sa fonction propre correspond exactement à l'expression donnée par (III.51)

avec  $\sigma = \frac{5}{16}$

#### ○ Premier état excité :

Le calcul des fonctions propres et des énergies propres des états excités de l'hélium par la méthode variationnelle est beaucoup plus difficile comparé à celui de l'état fondamental ; en effet, les fonctions propres des états excités et

des états plus bas doivent être orthogonales. Cette condition réduit considérablement le nombre de fonctions d'essai à choisir pour approcher la fonction propre.

Le niveau P qui correspond à  $\ell = 1$  possède des caractéristiques qui le distinguent de l'état s :

- l'état P est dégénéré, le nombre quantique magnétique  $m$  peut prendre les valeurs 1, 0 et  $-1$  et donc à chaque valeur de  $m$  correspond une fonction propre.

- Les fonctions propres de cet état dépendent explicitement de l'orientation de l'atome dans l'espace, il faut par conséquent en tenir compte ; si  $(\vartheta_1, \varphi_1)$  sont les coordonnées polaires du premier électron, et  $(\vartheta_2, \varphi_2)$  celles du deuxième électron, les fonctions d'essai prendront la forme [18] suivante :

$$\begin{aligned} U_1 &= \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \left( F \sin \vartheta_1 \exp(i\varphi_1) \pm \tilde{F} \sin \vartheta_2 \exp(i\varphi_2) \right) & (m = 1) \\ U_0 &= \frac{\sqrt{6}}{4\pi} \left( F \cos \vartheta_1 \pm \tilde{F} \cos \vartheta_2 \right) & (m = 0) \quad \text{(III.55)} \\ U_{-1} &= \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \left( F \sin \vartheta_1 \exp(-i\varphi_1) \pm \tilde{F} \sin \vartheta_2 \exp(-i\varphi_2) \right) & (m = -1) \end{aligned}$$

Dans les relations (III.55) le signe moins correspond à l'ortho-hélium ( $2^3P$ ), et le signe plus au para-hélium ( $2^1P$ ).

Eckart [18] choisit la fonction d'onde radiale  $F$  comme le produit des fonctions d'ondes radiales des états 1s et 2p de l'atome d'hydrogène avec les charges nucléaires  $z_i$  et  $z_a$ , respectivement, soit :

$$F = r_1 \exp(-z_a r_1 / 2) \exp(-z_i r_2 / 2) \quad \text{(III.56)}$$

avec :

$$F(r_1, r_2) = \tilde{F}(r_2, r_1)$$

On porte la fonction d'onde (III.55) avec  $F$  donnée par (III.56) dans l'intégrale variationnelle de l'expression (III.50). En minimisant par rapport aux paramètres variationnels  $z_i$  et  $z_a$ , nous retrouverons l'énergie et la fonction d'essai de l'état ( $2^1P$ ) (voir tableau III.2).

#### Calcul du rayon carré moyen :

Le moment d'ordre deux de la densité du fondamental est défini comme suit :

$$\langle r^2 \rangle_0 = \frac{\int_0^\infty d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 (r_1^2 + r_2^2) \exp[-2(z-\sigma)(r_1 + r_2)]}{\int_0^\infty d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \exp[-2(z-\sigma)(r_1 + r_2)]} \quad (\text{III.57})$$

Sachant que :

$$r_1 = \frac{s+t}{2}, \quad r_2 = \frac{s-t}{2} \quad \text{et} \quad d^3r_1 d^3r_2 = d\tau = 2\pi^2(s^2 - t^2)udsdtdu$$

En coordonnées elliptiques, le moment d'ordre deux de la densité du fondamental s'écrit :

$$\langle r^2 \rangle_0 = \frac{1}{2} \frac{\int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt u (s^4 - t^4) \exp[-2(z-\sigma)s]}{\int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt u (s^2 - t^2) \exp[-2(z-\sigma)s]}$$

$$\langle r^2 \rangle_0 = \frac{6}{(z-\sigma)^2}$$

**Résultats pour d'autres fonctions d'essai :**

Le choix des fonctions d'onde d'essai n'étant pas unique [19, 20, 21], nous allons donner les énergies et les rayons carrés moyens trouvés avec d'autres fonctions.

Fonctions d'onde <sup>(v)</sup>	Paramètres <sup>(v)</sup> [L] <sup>-1</sup>	Energies <sup>(v)</sup> (u a)	Moments <sup>(v)</sup> (u a) <sup>-1</sup>
$\psi_1 = \exp-\alpha(r_1 + r_2)$	$\alpha = 1.6875$	-2.8477	2.1069
$\psi_2 = (1 + cu) \exp-(2s)$	$c=0.5572$	-2.8771	2.1354
$\psi_3 = (1 + cu) \exp-(1.8853s)$	$c=0.5252$	-2.8878	2.1759
$\psi_4 = (1 + cu) \exp-(ks)$	$c=0.3658$ $k = 1.8497$	-2.8911	2.1535
$\psi_5 = \exp-(ar_1 + br_2 + cr_{12})$	$a=2.206545$ $b=1.440414$ $c=0.207210$	-2.8995	2.4112

**Phénoménologie :**

Pour chercher les moments de la densité du fondamental par la méthode de Bertlmann et Martin nous allons utiliser la relation valable dans le cas des systèmes séparables.

$$\langle r^2 \rangle_{1s} = \frac{3\hbar^2}{m(E_{1\ell} - E_{1s})} \left[ 1 - \frac{1}{4} C \right] \quad (\text{III.58})$$

où les énergies sont celles du spectre expérimental.

Première approximation :

En prenant pour facteur correctif l'expression approchée dans le cas à deux corps, qui vaut :

$$C = \left[ \frac{E_{2s} + E_{1s} - 2E_{1p}}{E_{2s} - E_{1s}} \right]^2$$

et en utilisant les énergies expérimentales de l'atome d'hélium, nous obtenons :

$$(1-C/4)=0.7199$$

Deuxième approximation :

Dans le cas à deux corps, on observe la relation :

$$(1 - C/4) = (T)^{1/3}$$

T : représente la fraction de la règle de somme prise par la transition de l'état fondamental au premier état excité.

Dans le cas de l'hydrogène [18]  $T=0.4162$ , ce qui nous permet de retrouver le facteur correctif habituel c'est à dire  $(1-C/4) = 0.75$

Si on postule une loi du même type dans le cas de l'Hélium [22] où  $T=0.2762$ , le facteur correctif prend la valeur :

$$(1-C/4)=0.6512$$

Partant de la valeur non corrigée  $\langle r^2 \rangle = 3.861$ , le premier facteur correctif donne  $\langle r^2 \rangle = 2.895$  et le second 2.51 ; cette dernière valeur se rapproche sensiblement des valeurs trouvées par la méthode variationnelle [21].

### **III) Résultats et discussion :**

Nous avons commencé par calculer les énergies de l'état fondamental et du premier excité ainsi que les moments d'ordre deux de la densité du fondamental pour l'atome de l'hélium, en utilisant la méthode des perturbations et celle de Hartree en prenant le potentiel d'interaction entre les deux électrons égal à la fonction delta. Nous précisons que, pour la méthode de Hartree, les énergies et le moment sont calculés numériquement [14]. Nous portons dans le tableau (III.1) les résultats de ces calculs.

Les énergies sont exprimées en (u. a) alors que les rayons carrés moyens sont donnés en (u. a)<sup>-1</sup>.

**Tableau (III.1) :** Energies et rayons carrés moyens calculés par la méthode des perturbations <sup>(P)</sup> et la méthode de Hartree <sup>(H)</sup>.

Etats	$E^P$	$E^H$	$\langle r^2 \rangle_0^P$	$\langle r^2 \rangle_0^H$
Fondamental	-3.681	-3.42	1.738	1.76
Premier excité	-2.468	-2.17	-	-

Par la suite, nous avons calculé les mêmes grandeurs que précédemment à l'aide de la méthode variationnelle. Les résultats sont donnés dans le tableau (III.2) ainsi que les énergies du spectre yrast expérimental de l'atome d'hélium.

**Tableau (III.2) :** Energies expérimentales <sup>(exp)</sup> et énergies et rayon carré moyen calculés par la méthode variationnelle <sup>(v)</sup>.

Etats	Fonction d'essai	Paramètres	E <sup>v</sup>	E <sup>exp</sup>	$\langle r^2 \rangle_0^v$
1 <sup>1</sup> S	$\psi = \exp-(ar_1 + br_2 + cr_{12})$	a=2.206 b=1.440 c=-0.207	-2.8995	-2.9038	2.4112
2 <sup>1</sup> P	$U_0 = \frac{\sqrt{6}}{4\pi} (F \cos \vartheta_1 \pm \check{F} \cos \vartheta_2)$	z <sub>i</sub> =2.00 z <sub>a</sub> =0.97	-2.1225	-2.1238	-

Nous constatons que la méthode variationnelle permet d'avoir des valeurs de l'énergie remarquablement proches des valeurs expérimentales (à 0,15% seulement) ; cela était prévisible car la méthode variationnelle est très bien adaptée au calcul des énergies surtout lorsque la fonction d'essai est judicieusement choisie. Par contre, les énergies données par la méthode des perturbations et celle de Hartree sont beaucoup moins représentatives. Ces résultats s'expliquent par le fait que pour ces deux méthodes, nous avons supposé une interaction  $v_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$  entre les deux électrons au lieu de  $1/r_{12}$ .

Le moment d'ordre deux de la densité du fondamental, calculé par l'inégalité de Bertlmann Martin à trois corps non corrigée, est en désaccord avec les moments trouvés par les trois méthodes d'approximation, les résultats sont donnés dans le tableau (III.3).

**Tableau (III.3) :** Rapport entre les rayons carrés moyens calculés par les méthodes d'approximations et ceux calculés par les inégalités de Bertlmann-Martin non corrigées (GBM).

$\langle r^2 \rangle_0^P / \langle r^2 \rangle_0^{GBM}$	0.70
$\langle r^2 \rangle_0^H / \langle r^2 \rangle_0^{GBM}$	0.73
$\langle r^2 \rangle_0^V / \langle r^2 \rangle_0^{GBM}$	0.62

Rappelons que le facteur correctif introduit dans les systèmes à deux corps était choisi de sorte à reproduire les résultats des potentiels coulombien et harmonique. Si on postule une loi de même type pour l'atome d'hélium, l'utilisation de l'inégalité de Bertlmann- Martin corrigée permet d'avoir des moments, relativement proches de ceux calculés par les méthodes d'approximation, l'écart est de l'ordre de 20% par rapport à la valeur variationnelle, 6,6% par rapport à la valeur trouvée par la méthode des perturbations et de l'ordre de 2,3% pour la valeur donnée par la méthode de Hartree.

Dans le cas où nous considérons la relation observée à deux corps entre la fraction de la règle de somme emportée par le premier état excité et le facteur correctif, en supposant une loi similaire dans le cas à trois corps, le facteur correctif nous permet d'avoir une valeur du moment en bon accord avec la valeur variationnelle, l'écart n'étant que d'environ 4% (voir tableau III.4).

**Tableau (III.4) :** Rapport entre les rayons carrés moyens calculés par les méthodes d'approximation et ceux calculés par les inégalités de Bertlmann Martin corrigées (GBMC).

$\langle r^2 \rangle_0^P / \langle r^2 \rangle_0^{GBMC}$	0.93
$\langle r^2 \rangle_0^H / \langle r^2 \rangle_0^{GBMC}$	0.97
$\langle r^2 \rangle_0^V / \langle r^2 \rangle_0^{GBMC}$	0,959

Si l'hypothèse reliant le facteur correctif à la fraction de la règle de somme emportée par le premier état excité s'avérait générale (indépendante du potentiel dans le cas à deux corps), elle constituerait un procédé très puissant pour le traitement des systèmes à deux et trois corps réalistes. Dans la mesure où le spectre et la fraction de la règle de somme prise par le premier état excité, sont mesurables expérimentalement, l'utilisation des inégalités de Bertlmann et Martin permettrait de calculer les moments de la densité du fondamental d'une manière indépendante des modèles.

# Conclusion Générale

## **CONCLUSION GENERALE**

Dans ce travail, le but était d'étudier l'applicabilité et la fiabilité des inégalités de Bertlmann et Martin (IBM) dans le cas des problèmes à trois corps. Les relations de récurrence reliant les moments de la densité du fondamental aux différences d'énergies de la ligne yrast permettent, dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, la détermination des énergies des états de la ligne yrast ou des moments de la densité du fondamental, à partir des caractéristiques du fondamental.

Pour une meilleure illustration, nous avons repris leur application, dans le premier chapitre, aux systèmes à deux corps afin de calculer les énergies de la ligne yrast dans le cas des potentiels en loi de puissance.

Les énergies de la ligne yrast obtenues sans correction sont en bon accord avec les valeurs exactes (avec des écart relatifs ne dépassant pas quelques pour cent).

Par la suite, nous nous sommes intéressés aux problèmes à trois corps séparables et non séparables.

Dans le cas séparable, nous avons commencé par présenter les coordonnées de Jacobi qui offrent la possibilité de séparer les coordonnées relatives et celles du centre de masse. Nous avons, par la suite, établi des règles de somme valables dans le problème à trois corps.

Les inégalités de Bertlmann et Martin non corrigées ont été utilisées pour calculer les moments de la densité du fondamental à partir des énergies de la ligne yrast. Nous avons trouvé que les limites supérieures des moments donnés par les inégalités coïncident totalement avec les moments exacts.

A l'instar du cas à trois corps séparable, les inégalités de Bertlmann et Martin ont été utilisées pour calculer les moments de la densité du fondamental en utilisant les énergies calculées par deux méthodes d'approximation pour des systèmes à trois corps non séparables.

Les moments de la densité du fondamental obtenus dans le cas des systèmes d'atomes à deux électrons avec une interaction delta entre les électrons sont en désaccord avec les valeurs trouvées par les méthodes d'approximation ; l'introduction d'un facteur correctif identique à celui des systèmes à deux corps permet d'améliorer ces moments, l'écart passe de 42% à moins de 6,6% par rapport aux valeurs trouvées par la méthode des perturbations et de 36 à 2,3% par rapport aux valeurs obtenues avec la méthode de Hartree.

Dans le cas de l'atome d'Hélium, l'écart entre les valeurs des moments de la densité du fondamental calculés par la méthode des inégalités de Bertlmann et Martin et la méthode variationnelle est de l'ordre de 60%, l'introduction du facteur correctif permet de ramener cet écart à 20%. De plus, si nous considérons la relation observée à deux corps entre la fraction de la règle de somme emportée par le premier état excité et le facteur correctif, en supposant une loi similaire dans le cas à trois corps, les moments calculés par les (GBM) convergent d'une façon significative (moins de 5% d'écart) vers les valeurs variationnelles.

Nous concluons que, pour les systèmes à trois corps séparables, les inégalités de Bertlmann et Martin sont fiables pour l'estimation des énergies de la ligne yrast et des moments de la densité du fondamental au même titre que dans le cas à deux corps. Pour les systèmes non séparables, la fiabilité est plus difficile à tester. Si l'estimation du facteur correctif à partir du taux de transition emporté par le premier état excité s'avérait généralisable, la méthode constituerait un procédé très puissant pour le traitement des systèmes à deux et trois corps réalistes. Dans la mesure où le spectre et la fraction de la règle de somme prise par le premier état excité sont mesurables expérimentalement, l'utilisation des inégalités de Bertlmann et Martin permettra de calculer les moments de la densité du fondamental d'une manière indépendante des modèles.

Notre étude des relations entre le spectre des énergies du premier état excité de chaque moment angulaire  $\ell$  et les moments de la fonction d'onde du fondamental ouvre des perspectives nouvelles dans le problème à trois corps. Elles sont principalement basées sur la confirmation de l'hypothèse avancée d'une dépendance simple entre le facteur correctif transformant les inégalités de Bertlmann et Martin en une suite récurrente de relations dimensionnelles et la fraction de la règle de somme emportée par le premier état excité.

# Appendices

## Appendice A

### A- Inégalités de Bertlmann et Martin :

Nous allons dans ce qui suit, exposer plus en détails le cheminement qui conduit aux inégalités de Bertlmann et Martin valables pour des systèmes de trois corps interagissant dans un cas par des potentiels d'oscillateurs harmoniques à trois dimensions et dans l'autre par des potentiels du type Calogero à une dimension (oscillateurs harmoniques plus un terme centrifuge).

- **Trois corps de même masse interagissant par des potentiels d'oscillateurs harmoniques à trois dimensions :**

Le hamiltonien du système est donné par :

$$H_1 = \frac{\mathbf{p}_R^2}{6m} + \frac{\mathbf{p}_\rho^2}{m} + \frac{\mathbf{p}_\lambda^2}{m} + \frac{3K}{4}(\rho^2 + \lambda^2) \quad (\text{A.1})$$

L'opérateur de transition multipolaire s'écrit :

$$Q_{\ell_0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda}) = \rho^{\ell_\rho} Y_{\ell_\rho, 0}(\theta_\rho, \varphi_\rho) + \lambda^{\ell_\lambda} Y_{\ell_\lambda, 0}(\theta_\lambda, \varphi_\lambda) \quad (\text{A.2})$$

Le calcul du commutateur de  $Q_{\ell_0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda})$  avec  $H_1$  nous donne :

$$\begin{aligned} [H_1, Q_{\ell_0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda})]\psi &= [H_\rho, Q_{\ell_\rho, 0}(\vec{\rho})]\psi + [H_\lambda, Q_{\ell_\lambda, 0}(\vec{\lambda})]\psi \\ &= \frac{\hbar^2}{m} \left\{ -\ell_\rho(\ell_\rho + 1)\rho^{\ell_\rho-2} Y_{\ell_\rho, 0} \psi - \ell_\rho \rho^{\ell_\rho-1} Y_{\ell_\rho, 0} \frac{\partial \psi}{\partial \rho} - (\ell_\rho + 2)\rho^{\ell_\rho-1} Y_{\ell_\rho, 0} \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \right. \\ &\quad - \rho^{\ell_\rho} Y_{\ell_\rho, 0} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} + \ell_\rho(\ell_\rho + 1)\rho^{\ell_\rho-2} Y_{\ell_\rho, 0} \psi + \rho^{\ell_\rho} Y_{\ell_\rho, 0} (L_\rho^2 / \hbar^2 \rho^2) \psi + \rho^{\ell_\rho-1} Y_{\ell_\rho, 0} \\ &\quad \times \frac{\partial \psi}{\partial \rho} + \rho^{\ell_\rho} Y_{\ell_\rho, 0} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} - \rho^{\ell_\rho} Y_{\ell_\rho, 0} (L_\rho^2 / \hbar^2 \rho^2) \psi - \ell_\lambda(\ell_\lambda + 1)\lambda^{\ell_\lambda-2} Y_{\ell_\lambda, 0} \psi \\ &\quad - \ell_\lambda \lambda^{\ell_\lambda-1} Y_{\ell_\lambda, 0} \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} - (\ell_\lambda + 2)\lambda^{\ell_\lambda-1} Y_{\ell_\lambda, 0} \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} - \lambda^{\ell_\lambda} Y_{\ell_\lambda, 0} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \lambda^2} + \ell_\lambda(\ell_\lambda + 1)\lambda^{\ell_\lambda-2} \\ &\quad \left. \times Y_{\ell_\lambda, 0} \psi + \lambda^{\ell_\lambda} Y_{\ell_\lambda, 0} \frac{L_\lambda^2}{\hbar^2 \lambda^2} \psi + \lambda^{\ell_\lambda-1} Y_{\ell_\lambda, 0} \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} + \lambda^{\ell_\lambda} Y_{\ell_\lambda, 0} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \lambda^2} - \lambda^{\ell_\lambda} Y_{\ell_\lambda, 0} \frac{L_\lambda^2}{\hbar^2 \lambda^2} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

donc :

$$\left[ H_1, Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda}) \right] \psi = -\frac{\hbar^2}{m} \left\{ (2\ell_\rho + 1) \rho^{\ell_\rho - 1} Y_{\ell_\rho,0} \frac{\partial \psi}{\partial \rho} + (2\ell_\lambda + 1) \lambda^{\ell_\lambda - 1} Y_{\ell_\lambda,0} \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} \right\} \quad (\text{A.4})$$

Le double commutateur est donné par

$$\begin{aligned} \left[ Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda}), \left[ H_1, Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda}) \right] \right] &= \left[ Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}), \left[ H_\rho, Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}) \right] \right] \psi + \left[ Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}), \left[ H_\lambda, Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) \right] \right] \psi = \\ &+ \frac{\hbar^2}{m} \left\{ -(2\ell_\rho + 1) \rho^{\ell_\rho - 1} Y_{\ell_\rho,0} \rho^{\ell_\rho} Y_{\ell_\rho,0} \frac{\partial \psi}{\partial \rho} + (2\ell_\rho + 1) \rho^{\ell_\rho - 1} Y_{\ell_\rho,0} \rho^{\ell_\rho} \rho^{\ell_\rho - 1} Y_{\ell_\rho,0} \psi + (2\ell_\rho + 1) \right. \\ &\times \rho^{\ell_\rho - 1} Y_{\ell_\rho,0} \rho^{\ell_\rho} Y_{\ell_\rho,0} \frac{\partial \psi}{\partial \rho} - (2\ell_\lambda + 1) \lambda^{\ell_\lambda - 1} Y_{\ell_\lambda,0} \lambda^{\ell_\lambda} Y_{\ell_\lambda,0} \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} + (2\ell_\lambda + 1) \lambda^{\ell_\lambda - 1} Y_{\ell_\lambda,0} \lambda^{\ell_\lambda} \lambda^{\ell_\lambda - 1} Y_{\ell_\lambda,0} \psi \\ &\left. + (2\ell_\lambda + 1) \lambda^{\ell_\lambda - 1} Y_{\ell_\lambda,0} \lambda^{\ell_\lambda} Y_{\ell_\lambda,0} \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

finalement :

$$\begin{aligned} \left[ Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda}), \left[ H_1, Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda}) \right] \right] &= (\hbar^2 / m) \ell_\rho (2\ell_\rho + 1) \rho^{2\ell_\rho - 2} (Y_{\ell_\rho,0}(\varphi_\rho, \theta_\rho))^2 \\ &+ (\hbar^2 / m) \ell_\lambda (2\ell_\lambda + 1) \lambda^{2\ell_\lambda - 2} (Y_{\ell_\lambda,0}(\varphi_\lambda, \theta_\lambda))^2 \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

partant du fait que :

$$\langle 0_\rho 0_\lambda | (Y_{\ell_\rho,0}(\varphi_\rho, \theta_\rho))^2 | 0_\rho 0_\lambda \rangle = \langle 0_\rho 0_\lambda | (Y_{\ell_\lambda,0}(\varphi_\lambda, \theta_\lambda))^2 | 0_\rho 0_\lambda \rangle = 1 \quad (\text{A.7})$$

alors :

$$\begin{aligned} \langle 0_\rho 0_\lambda | \rho^{2\ell_\rho - 2} (Y_{\ell_\rho,0}(\varphi_\rho, \theta_\rho))^2 | 0_\rho 0_\lambda \rangle &+ \langle 0_\rho 0_\lambda | \lambda^{2\ell_\lambda - 2} (Y_{\ell_\lambda,0}(\varphi_\lambda, \theta_\lambda))^2 | 0_\rho 0_\lambda \rangle \\ &= \langle 0_\rho 0_\lambda | \rho^{2\ell_\rho - 2} | 0_\rho 0_\lambda \rangle + \langle 0_\rho 0_\lambda | \lambda^{2\ell_\lambda - 2} | 0_\rho 0_\lambda \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

la valeur moyenne de l'expression (A.6) dans l'état fondamental que nous notons dans ce qui suit par  $|0\rangle$  au lieu de  $|0_\rho 0_\lambda\rangle$ , s'écrit donc en tenant compte de (A.8) :

$$\begin{aligned} \langle 0 | [Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda}), [H_1, Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda})]] | 0 \rangle &= (\hbar^2 / m) \ell_\rho (2\ell_\rho + 1) \langle \rho^{2\ell_\rho - 2} \rangle_0 \\ &+ (\hbar^2 / m) \ell_\lambda (2\ell_\lambda + 1) \langle \lambda^{2\ell_\lambda - 2} \rangle_0 \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

D'autre part :

$$\begin{aligned} [Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda}), [H_1, Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda})]] &= 2Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho})H_\rho Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}) - (Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}))^2 H_\rho - H_\rho (Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}))^2 \\ &+ 2Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda})H_\lambda Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) - (Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}))^2 H_\lambda - H_\lambda (Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}))^2 \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

En prenant la valeur moyenne de l'expression et en introduisant la relation de fermeture sur les états propres de  $H_\rho$  et  $H_\lambda$ , nous obtenons l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \langle 0 | [Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda}), [H_1, Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda})]] | 0 \rangle &= + \sum_{j_\rho, j_\lambda} \{ 2 \langle 0 | Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}) | j_\rho j_\lambda \rangle \langle j_\rho j_\lambda | H_\rho Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}) | 0 \rangle \\ &- \langle 0 | H_\rho Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}) | j_\rho j_\lambda \rangle \langle j_\rho j_\lambda | Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}) | 0 \rangle - \langle 0 | Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}) | j_\rho j_\lambda \rangle \langle j_\rho j_\lambda | Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}) H_\rho | 0 \rangle \\ &+ 2 \langle 0 | Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) | j_\rho j_\lambda \rangle \langle j_\rho j_\lambda | H_\lambda Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) | 0 \rangle - \langle 0 | H_\lambda Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) | j_\rho j_\lambda \rangle \langle j_\rho j_\lambda | Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) | 0 \rangle \\ &- \langle 0 | Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) | j_\rho j_\lambda \rangle \langle j_\rho j_\lambda | Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) H_\lambda | 0 \rangle \} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Sachant que :

$$H_{\rho(\lambda)} |0\rangle = E_0 |0\rangle \text{ et } H_{\rho(\lambda)} |j_\rho j_\lambda\rangle = E_{j_\rho(j_\lambda)} |j_\rho j_\lambda\rangle \quad (\text{A.12})$$

L'expression (A.11) devient :

$$\begin{aligned} \langle 0 | [Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda}), [H_1, Q_{\ell,0}(\vec{\rho}, \vec{\lambda})]] | 0 \rangle &= 2 \sum_{j_\rho} (E_{j_\rho} - E_0) \left| \langle 0 | Q_{\ell_\rho,0}(\vec{\rho}) | j_\rho \rangle \right|^2 \\ &+ 2 \sum_{j_\lambda} (E_{j_\lambda} - E_0) \left| \langle 0 | Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) | j_\lambda \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Compte tenu de la relation (A.8), on a :

$$\begin{aligned} \sum_{j_p} (E_{j_p} - E_0) \left| \langle 0 | Q_{\ell_p,0}(\vec{\rho}) | j_p \rangle \right|^2 + \sum_{j_\lambda} (E_{j_\lambda} - E_0) \left| \langle 0 | Q_{\ell_\lambda,0}(\vec{\lambda}) | j_\lambda \rangle \right|^2 = \\ + (\hbar^2 / m) \ell_p (2\ell_p + 1) \langle \rho^{2\ell_p-2} \rangle_0 + (\hbar^2 / m) \ell_\lambda (2\ell_\lambda + 1) \langle \lambda^{2\ell_\lambda-2} \rangle_0 \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

En remplaçant  $(E_{j_p} - E_0)$  et  $(E_{j_\lambda} - E_0)$  par  $(E_{1\ell_p} - E_0)$  et  $(E_{1\ell_\lambda} - E_0)$  dans la relation (A.13), nous aboutissons à l'inégalité suivante :

$$\langle \rho^{2\ell_p} \rangle_0 + \langle \lambda^{2\ell_\lambda} \rangle_0 \leq \frac{\hbar^2 \ell_p (2\ell_p + 1)}{m(E_{1\ell_p} - E_0)} \langle \rho^{2\ell_p-2} \rangle_0 + \frac{\hbar^2 \ell_\lambda (2\ell_\lambda + 1)}{m(E_{1\ell_\lambda} - E_0)} \langle \lambda^{2\ell_\lambda-2} \rangle_0 \quad (\text{A.15})$$

• **Trois corps interagissant par des potentiels d'oscillateurs harmoniques plus une force centrifuge à une dimension :**

L'hamiltonien d'un tel système a pour expression :

$$H_2 = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{3}{8} \omega^2 r^2 + \frac{M}{r^2} \quad (\text{A.16})$$

$$\text{avec : } M = -\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{2} \left( \frac{g_3}{\sin^2 \varphi} + \frac{g_1}{\sin^2(\varphi + \frac{2}{3}\pi)} + \frac{g_2}{\sin^2(\varphi + \frac{4}{3}\pi)} \right)$$

Nous commençons par chercher l'opérateur de transition qui fait passer le système représenté par l'hamiltonien  $H_2$ , de l'état  $|00\rangle$  à l'état  $|0\ell\rangle$ .

$$Q_{\ell,0}|00\rangle = |0\ell\rangle \quad (\text{A.17})$$

Multiplions les deux membres de la relation (A.17) par  $\langle 0\ell|$

$$\langle 0\ell|Q_{\ell,0}|00\rangle = \langle 0\ell|0\ell\rangle \quad (\text{A.18})$$

Sous forme intégrale, nous avons :

$$\int_0^\infty r^{\ell+2a+1} Q_{\ell,0}(r, \varphi) \exp(-\beta r^2/2) r dr \int_0^\pi (\sin \varphi)^{2a+1} C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) d\varphi = \int_0^\infty r^{2\ell+2a+1} \exp(-\beta r^2/2) r dr \times \int_0^\pi (\sin \varphi)^{2a+1} (C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi))^2 d\varphi \quad (\text{A.19})$$

En utilisant les fonctions d'onde données par l'expression (II.15), et par identification des deux membres de (A.19), l'opérateur multipolaire de transition prend la forme suivante :

$$Q_{\ell 0}(r, \varphi) = r^\ell C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) \quad (\text{A.20})$$

Les inégalités de Bertlmann et Martin sont dérivées de la règle de somme de Thomas – Reiche - Kuhn (TRK), obtenue en calculant commutateur et double

commutateur de l'hamiltonien  $H_2$  avec l'opérateur de transition multipolaire  $Q_{\ell,0}(r, \varphi)$ .

Calculons pour cela le commutateur suivant  $[H_2, Q_{\ell,0}(r, \varphi)]$  :

$$\begin{aligned} [H_2, Q_{\ell,0}(r, \varphi)] &= r^\ell [H_2, C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi)] + [H_2, r^\ell] C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) = -\ell^2 r^{\ell-2} C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) \\ &- 2\ell r^{\ell-1} C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) \frac{\partial}{\partial r} - 2r^{\ell-2} \frac{\partial C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi)}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} - r^{\ell-2} \frac{\partial^2 C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi)}{\partial \varphi^2} \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Calculons ensuite le double commutateur suivant :

$$\begin{aligned} [Q_{\ell,0}(r, \varphi), [H_2, Q_{\ell,0}(r, \varphi)]] &= [H_2, Q_{\ell,0}(r, \varphi)] Q_{\ell,0}(r, \varphi) - Q_{\ell,0}(r, \varphi) [H_2, Q_{\ell,0}(r, \varphi)] \\ &= +\ell^2 r^{2\ell-2} (C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi))^2 + 2\ell r^{\ell-1} (C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi))^2 \{ \ell r^{\ell-1} + r^\ell (\partial/\partial r) \} \\ &+ 2\ell^2 r^{2\ell-2} (\partial C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi)/\partial \varphi) \{ C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) (\partial/\partial \varphi) + \partial C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi)/\partial \varphi \} \\ &+ r^{2\ell-2} (\partial^2 C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi)/\partial \varphi^2) C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) - \ell^2 r^{2\ell-2} (C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi))^2 \\ &- 2\ell r^{2\ell-1} (C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi))^2 \partial/\partial r - 2r^{2\ell-2} (\partial C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi)/\partial \varphi) C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) \\ &\times (\partial/\partial \varphi) - r^{2\ell-2} (\partial^2 C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi)/\partial \varphi^2) C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

finalement :

$$[Q_{\ell,0}(r, \varphi), [H_2, Q_{\ell,0}(r, \varphi)]] = 2\ell^2 r^{2\ell-2} (C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi))^2 + 2r^{2\ell-2} (\partial C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi)/\partial \varphi)^2 \quad (\text{A.23})$$

La valeur moyenne dans l'état fondamental ( $n=0, l=0$ ) de l'expression (A.23), s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle 00 | [Q_{\ell,0}(r, \varphi), [H_2, Q_{\ell,0}(r, \varphi)]] | 00 \rangle &= 2\ell^2 \langle 00 | r^{2\ell-2} (C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi))^2 | 00 \rangle \\ &+ 2 \langle 00 | r^{2\ell-2} (\partial C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi)/\partial \varphi)^2 | 00 \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

le premier terme du second membre s'écrit comme :

$$\langle 00 | r^{2\ell-2} (C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi))^2 | 00 \rangle = \int_0^\infty r^{2\ell-2} r^{2a+1} \exp(-\beta r^2 / 2) r dr \int_0^\pi (\sin \varphi)^{2a+1} (C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi))^2 d\varphi \quad (\text{A.25})$$

Posons :

$$\langle r^{2\ell-2} \rangle = \int_0^\infty r^{2\ell-2} r^{2a+1} \exp(-\beta r^2 / 2) r dr \quad (\text{A.26})$$

et

$$F_\ell^{a+1/2} = 2 \int_0^\pi (\sin \varphi)^{2a+1} (C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi))^2 d\varphi = \sqrt{\pi} 2^{\ell+1} \frac{\Gamma(a + \ell/2 + 1/2) \Gamma(a + \ell/2 + 1)}{\ell! (\ell + a + 1/2) \Gamma^2(a + 1/2)} \quad (\text{A.27})$$

pour le deuxième terme du second membre, on a :

$$\begin{aligned} \langle 00 | r^{2\ell-2} (\partial C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) / \partial \varphi)^2 | 00 \rangle &= \int_0^\infty r^{2\ell-2} r^{2a+1} \exp(-\beta r^2 / 2) r dr \\ &\times \int_0^\pi (\sin \varphi)^{2a+1} (\partial C_\ell^{a+1/2} / \partial \varphi)^2 d\varphi \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

puisque :

$$\frac{\partial C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi)}{\partial \varphi} = \frac{\partial \cos \varphi}{\partial \varphi} \frac{\partial C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi)}{\partial \cos \varphi} = -\sin \varphi (2a + 1) C_{\ell-1}^{a+3/2}(\cos \varphi) \quad (\text{A.29})$$

D'après la notation précédente, nous avons:

$$2 \int_0^\pi (\sin \varphi)^{2a+1} (\partial C_\ell^{a+1/2}(\cos \varphi) / \partial \varphi)^2 d\varphi = (2a + 1)^2 F_{\ell-1}^{a+3/2} \quad (\text{A.30})$$

avec :

$$F_{\ell-1}^{a+3/2} = \sqrt{\pi} 2^\ell \frac{\Gamma(a + \ell/2 + 1) \Gamma(a + \ell/2 + 3/2)}{(\ell - 1)! (\ell + a + 1/2) \Gamma^2(a + 3/2)} \quad (\text{A.31})$$

L'expression (A.24) devient :

$$\langle 00 | [Q_{\ell_0}(r, \varphi), [H_2, Q_{\ell_0}(r, \varphi)]] | 00 \rangle = \langle r^{2\ell-2} \rangle_0 \left[ \ell^2 F_\ell^{a+1/2} + (2a + 1)^2 F_{\ell-1}^{a+3/2} \right] \quad (\text{A.32})$$

D'autre part :

$$\left[ Q_{\ell,0}(r, \varphi), [H_2, Q_{\ell,0}(r, \varphi)] \right] = 2Q_{\ell,0}(r, \varphi)H_2Q_{\ell,0}(r, \varphi) - Q_{\ell,0}(r, \varphi)^2H_2 - H_2Q_{\ell,0}(r, \varphi)^2 \quad (\text{A.33})$$

En prenant la valeur moyenne de (A.33) dans l'état fondamental et en introduisant la relation de fermeture sur les états propres de  $H_2$ , nous aboutissons à :

$$\begin{aligned} \langle 00 | [Q_{\ell,0}(r, \varphi), [H_2, Q_{\ell,0}(r, \varphi)]] | 00 \rangle &= 2 \sum_j \langle 00 | Q_{\ell,0}(r, \varphi) H_2 | j \rangle \langle j | Q_{\ell,0}(r, \varphi) | 00 \rangle \\ &- \sum_j \langle 00 | Q_{\ell,0}(r, \varphi) | j \rangle \langle j | Q_{\ell,0}(r, \varphi) H_2 | 00 \rangle - \sum_j \langle 00 | H_2 Q_{\ell,0}(r, \varphi) | j \rangle \langle j | Q_{\ell,0}(r, \varphi) | 00 \rangle \\ &= 2 \sum_j (E_j - E_{00}) \langle j | Q_{\ell,0}(r, \varphi) | 00 \rangle^2 \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

Compte tenu de la relation (A.32) :

$$\sum_j (E_j - E_{00}) \langle 00 | Q_{\ell,0}(\cos\varphi) | j \rangle^2 = \langle r^{2\ell-2} \rangle_0 \left[ \ell^2 F_{\ell}^{a+1/2} + (2a+1)^2 F_{\ell-1}^{a+3/2} \right] \quad (\text{A.35})$$

En remplaçant  $(E_j - E_{00})$  par  $(E_{0\ell} - E_{00})$  la relation (A.35) devient :

$$(E_{0\ell} - E_{00}) \langle 00 | (Q_{\ell,0}(\cos\varphi))^2 | 00 \rangle \leq \langle r^{2\ell-2} \rangle_0 \left[ \ell^2 F_{\ell}^{a+1/2} + (2a+1)^2 F_{\ell-1}^{a+3/2} \right] \quad (\text{A.36})$$

Comme :

$$\langle 00 | (Q_{\ell,0}(\cos\varphi))^2 | 00 \rangle = \langle r^{2\ell} \rangle_0 F_{\ell}^{a+1/2} \quad (\text{A.37})$$

et

$$\frac{F_{\ell-1}^{a+3/2}}{F_{\ell}^{a+1/2}} = \frac{\ell(a + \ell/2 + 1/2)}{2(a + 1/2)^2} \quad (\text{A.38})$$

L'expression (A.36) prend la forme suivante :

$$\langle r^{2\ell} \rangle_0 \leq \frac{2\ell(\ell + a + 1/2)}{(E_{0\ell} - E_{00})} \langle r^{2\ell-2} \rangle_0 \quad (\text{A.39})$$

En multipliant les deux membres de cette inégalité par :

$$2 \int_0^{\pi} \sin \varphi^{2a+1} \partial \varphi \quad (\text{A.40})$$

on aboutit finalement à :

$$\langle 00 | r^{2\ell} | 00 \rangle \leq \frac{2\ell(\ell + a + 1/2)}{(E_{0\ell} - E_{00})} \langle 00 | r^{2\ell-2} | 00 \rangle \quad (\text{A.41})$$

## Appendice B

### B- Méthode variationnelle à trois corps :

L'énergie moyenne dans l'état  $|\psi\rangle$  s'écrit :

$$E[\psi] \equiv \frac{\int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) H \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{\int |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2} = \text{Min} \quad (\text{B.1})$$

Dans le cas d'un atome ayant deux électrons ( $Z = 2$ ), l'hamiltonien s'écrit :

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \quad (\text{B.2})$$

avec :

$$\nabla_{1(2)} = \frac{\partial}{\partial x_{1(2)}} + \frac{\partial}{\partial y_{1(2)}} + \frac{\partial}{\partial z_{1(2)}}$$

$r_1, r_2$  sont les distances des électrons au noyau,  $r_{12}$  la distance qui sépare les deux électrons.

Nous allons réécrire l'expression (B.1) en coordonnées elliptiques :

$$\begin{aligned} \vec{s} &= \vec{r}_1 + \vec{r}_2 \\ \vec{t} &= \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \\ \vec{u} &= \vec{r}_{12} \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

En coordonnées elliptques, le gradient s'écrit comme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial x_1} &= \frac{\partial \psi}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial x_1} + \frac{\partial \psi}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial x_1} + \frac{\partial \psi}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x_1} = \left( \frac{x_1}{r_1} \right) \left( \frac{\partial \psi}{\partial s} + \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + \frac{x_1 - x_2}{u} \frac{\partial \psi}{\partial u} \\ \frac{\partial \psi}{\partial y_1} &= \left( \frac{y_1}{r_1} \right) \left( \frac{\partial \psi}{\partial s} + \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + \frac{y_1 - y_2}{u} \frac{\partial \psi}{\partial u} \\ \frac{\partial \psi}{\partial y_1} &= \left( \frac{z_1}{r_1} \right) \left( \frac{\partial \psi}{\partial s} + \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + \frac{z_1 - z_2}{u} \frac{\partial \psi}{\partial u} \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Elevons au carré :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_1}\right)^2 &= \left(\frac{x_1}{r_1}\right)^2 \left(\frac{\partial \psi}{\partial s} + \frac{\partial \psi}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{x_1 - x_2}{u}\right)^2 \left(\frac{\partial \psi}{\partial u}\right)^2 + 2 \left(\frac{x_1(x_1 - x_2)}{r_1 u}\right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial u}\right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial s} + \frac{\partial \psi}{\partial t}\right) \\ \left(\frac{\partial \psi}{\partial y_1}\right)^2 &= \left(\frac{y_1}{r_1}\right)^2 \left(\frac{\partial \psi}{\partial s} + \frac{\partial \psi}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{y_1 - y_2}{u}\right)^2 \left(\frac{\partial \psi}{\partial u}\right)^2 + 2 \left(\frac{y_1(y_1 - y_2)}{r_1 u}\right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial u}\right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial s} + \frac{\partial \psi}{\partial t}\right) \\ \left(\frac{\partial \psi}{\partial z_1}\right)^2 &= \left(\frac{z_1}{r_1}\right)^2 \left(\frac{\partial \psi}{\partial s} + \frac{\partial \psi}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{z_1 - z_2}{u}\right)^2 \left(\frac{\partial \psi}{\partial u}\right)^2 + 2 \left(\frac{z_1(z_1 - z_2)}{r_1 u}\right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial u}\right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial s} + \frac{\partial \psi}{\partial t}\right) \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned} (\vec{\nabla}_1 \psi)^2 &= \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z_1}\right)^2 = \left(\frac{\partial \psi}{\partial s} + \frac{\partial \psi}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial u}\right)^2 \\ &+ 2 \left(\frac{r_1^2(x_1 x_2 - y_1 y_2 - z_1 z_2)}{r_1 u}\right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial u}\right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial s} + \frac{\partial \psi}{\partial t}\right) \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

D'autre part, nous savons que :

$$u^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2(x_1 x_2 + y_1 y_2 + z_1 z_2) \Rightarrow \frac{1}{2}[u^2 - r_1^2 - r_2^2] = -(x_1 x_2 + y_1 y_2 + z_1 z_2) \quad (\text{B.7})$$

Soit :

$$(\vec{\nabla}_1 \psi)^2 = \left(\frac{\partial \psi}{\partial s}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial u}\right)^2 + 2 \frac{\partial \psi}{\partial s} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{u^2 - r_1^2 - r_2^2}{r_1 u} \left(\frac{\partial \psi}{\partial u}\right) \left[\frac{\partial \psi}{\partial s} + \frac{\partial \psi}{\partial t}\right] \quad (\text{B.8})$$

En procédant de la même manière, nous trouvons pour  $(\vec{\nabla}_2 U)^2$  :

$$(\vec{\nabla}_2 \psi)^2 = \left(\frac{\partial \psi}{\partial s}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial u}\right)^2 - 2 \frac{\partial \psi}{\partial s} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{u^2 + r_2^2 - r_1^2}{r_2 u} \left(\frac{\partial \psi}{\partial u}\right) \left[\frac{\partial \psi}{\partial s} - \frac{\partial \psi}{\partial t}\right] \quad (\text{B.9})$$

D'où :

$$\begin{aligned}
(\overline{\nabla}_1 \psi)^2 + (\overline{\nabla}_2 \psi)^2 &= 2 \left\{ \left( \frac{\partial \psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial u} \right)^2 \right\} + \left\{ \left( \frac{u^2 - r_1^2 - r_2^2}{r_1 u} + \frac{u^2 - r_1^2 - r_2^2}{r_1 u} \right) \right. \\
&\quad \left. \times \frac{\partial \psi}{\partial u} \frac{\partial \psi}{\partial s} + \left( \frac{u^2 - r_1^2 - r_2^2}{r_1 u} - \frac{u^2 - r_1^2 - r_2^2}{r_1 u} \right) \frac{\partial \psi}{\partial u} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\}
\end{aligned} \tag{B.10}$$

$$\begin{aligned}
(\overline{\nabla}_1 \psi)^2 + (\overline{\nabla}_2 \psi)^2 &= 2 \left\{ \left( \frac{\partial \psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial u} \right)^2 \right\} + \left\{ \left( \frac{r_2 u^2 - r_1^2 r_2 - r_2^3 + u^2 r_1 + r_1 r_2^2 - r_1^3}{r_1 r_2 u} \right) \right. \\
&\quad \left. \times \frac{\partial \psi}{\partial u} \frac{\partial \psi}{\partial s} + \left( \frac{r_2 u^2 - r_1^2 r_2 - r_2^3 - u^2 r_1 - r_1 r_2^2 + r_1^3}{r_1 r_2 u} \right) \frac{\partial \psi}{\partial u} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\}
\end{aligned} \tag{B.11}$$

Sachant que :

$$r_1^3 \pm r_2^3 = (r_1 \pm r_2)(r_1^2 \mp r_1 r_2 + r_2^2) \tag{B.12}$$

on aboutit à :

$$\begin{aligned}
(\overline{\nabla}_1 \psi)^2 + (\overline{\nabla}_2 \psi)^2 &= 2 \left\{ \left( \frac{\partial \psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial u} \right)^2 \right\} + \left\{ \frac{s(u^2 - t^2)}{r_1 r_2 u} \frac{\partial \psi}{\partial u} \frac{\partial \psi}{\partial s} + \frac{t(s^2 - u^2)}{r_1 r_2 u} \frac{\partial \psi}{\partial u} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\}
\end{aligned} \tag{B.13}$$

Puisque :

$$r_1 r_2 = \frac{s^2 - t^2}{4} \tag{B.14}$$

alors :

$$\begin{aligned}
(\overline{\nabla}_1 \psi)^2 + (\overline{\nabla}_2 \psi)^2 &= 2 \left\{ \left( \frac{\partial \psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial u} \right)^2 \right\} + \frac{4}{u(s^2 - t^2)} \frac{\partial \psi}{\partial u} \\
&\quad \times \left[ s(u^2 - t^2) \frac{\partial \psi}{\partial s} + t(s^2 - t^2) \frac{\partial \psi}{\partial t} \right]
\end{aligned} \tag{B.15}$$

En remplaçant (B.15) dans l'expression donnée par (III.49), on obtient :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} \int_0^\infty \partial s \int_0^s \partial u \int_0^u \partial t \left\{ u(s^2 - t^2) \left[ \left( \frac{\partial \psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial u} \right)^2 \right] + 2 \frac{\partial \psi}{\partial u} \right. \\ & \left. \times \left[ s(u^2 - t^2) \frac{\partial \psi}{\partial s} + t(s^2 - u^2) \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] - \psi^2 [4zsu - s^2 + t^2] \right\} \equiv E \equiv Min \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

où N est le facteur de normalisation valant :

$$N = \int_0^\infty \partial s \int_0^s \partial u \int_0^u u(s^2 - t^2) \psi^2 \partial t \quad (\text{B.17})$$

## Appendice C

### C- Résolution de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Calogero :

A une dimension, les coordonnées de Jacobi peuvent être définies de la façon suivante :

$$\begin{aligned} R &= \frac{1}{3}(x_1 + x_2 + x_3) \\ x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2) \\ y &= \frac{1}{\sqrt{6}}(x_1 + x_2 - 2x_3) \end{aligned} \quad (C.1)$$

L'introduction de ces nouvelles coordonnées dans l'hamiltonien  $H_2$  permet d'avoir, en se plaçant dans le système du centre de masse :

$$H_2 = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{3}{8}\omega(x^2 + y^2) + \frac{1}{2}g_3 x^{-2} + \frac{1}{2}g_1 [\sqrt{3}y - x]^2 + \frac{1}{2}g_2 [\sqrt{3}y + x]^2 \quad (C.2)$$

L'hamiltonien donné par l'expression (C.2) n'est pas encore complètement séparé à cause des deux derniers termes. Nous allons l'écrire en coordonnées polaires ; l'expression (C.2) prendra la forme définitive suivante :

$$H_2 = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{3}{8}\omega^2 r^2 + \frac{M}{r^2} \quad (C.3)$$

avec :

$$M = \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{2} \left( \frac{g_3}{\sin^2 \varphi} + \frac{g_1}{\sin^2(\varphi + \frac{2}{3}\pi)} + \frac{g_2}{\sin^2(\varphi + \frac{4}{3}\pi)} \right)$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{3}{8}\omega^2 r^2 + \frac{M}{r^2} - E \right) \psi(r, \varphi) = 0 \quad (C.4)$$

où :  $\psi(r, \varphi)$  représente la fonction d'onde totale du système décrit par  $H_2$ , telle que :

$$\psi(r, \varphi) = R(r)f(\varphi)$$

Notons les valeurs propres de l'opérateur M par  $b_\ell^2$ ,  $\ell = 0, 1, 2, \dots$

$$Mf_\ell(\varphi) = b_\ell^2 f_\ell(\varphi) \quad (C.5)$$

Nous arrivons alors :

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{3}{8} \omega^2 r^2 + \frac{b_\ell^2}{r^2} - E \right) R(r) = 0 \quad (C.6)$$

La solution normalisée de cette équation est :

$$R_{n\ell}(r) = r^{b_\ell} \exp\left(-\frac{1}{4}(3/2)^{1/2} \omega r^2\right) L_n^{b_\ell}\left(\frac{1}{2}(3/2)^{1/2} \omega r^2\right) \quad (C.7)$$

$n = 0, 1, 2, \dots$ ,  $\ell = 0, 1, 2, \dots$

où :  $L_n^b$  sont les polynômes de Laguerre

Les énergies propres sont données par :

$$E_{n,\ell} = (3/2)^{1/2} \omega (2n + b_\ell + 3/2) \quad (C.8)$$

Déterminons à présent les valeurs et les vecteurs propres de l'opérateur M :  
avec  $g_1 = g_2 = 0$ ,  $g_3 = g$ .

$$Mf_\ell(\varphi) = \left( -\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{g}{2(\sin \varphi)^2} \right) f_\ell(\varphi) = b_\ell^2 f_\ell(\varphi) \quad (C.9)$$

peut être transformée en une équation géométrique de solution :

$$\begin{aligned} f_\ell(\varphi) &= (\sin \varphi)^{a+1/2} F\left(1/2(a+1/2-b_\ell), 1/2(a+1/2+b_\ell), 1+a; \sin^2 \varphi\right) \\ &= \cos \varphi (\sin \varphi)^{a+1/2} F\left(1/2(a+3/2-b_\ell), 1/2(a+3/2+b_\ell); 1+a; (\sin \varphi)^2\right) \end{aligned} \quad (C.10)$$

La fonction d'onde est donnée par :

$$\Psi_{n\ell}(r, \varphi) = r^{\ell+a+1/2} \exp(-1/4(3/2)^{1/2} \omega r^2) L_n^{\ell+a+1/2} (1/2(3/2)^{1/2} \omega r^2) (\sin \varphi)^{a+1/2} C_1^{a+1/2}(\cos \varphi) \quad (\text{C.11})$$

où :  $C_1^{a+1/2}(\cos \varphi)$  est un polynôme de Gegenbauer.

et  $a = \frac{1}{2}(1 + 2g)^{1/2}$ ,  $n$  et  $\ell$  étant deux nombres quantiques.

Les énergies des différents états ont alors pour expression :

$$E_{2n+\ell} = (3/2)^{1/2} \omega (2n + \ell + a + 3/2) \quad (\text{C.12})$$

# Bibliographie

## **BIBLIOGRAPHIE**

- [1] **Inequalities on heavy quark- antiquark systems.** R. A Bertlmann, A. Martin, Nuclear Physics B 168 ( 1980 ) 111-136.
- [2] **Bounds on radii and kinetic energies of N-particle systems.** R. A. Bertlmann, A. Martin, Nuclear Physics B 282( 1981 ) 35-44.
- [3] **Generalised Bertlmann-Martin inequalities for confining potentials.** R. J. Lombard, J. Marš. Physical Review D59, 076005 (1999)
- [4] **A new approximation methods for the Schrödinger equation.** F-Z. Ighezou, R. J. Lombard. Annals of Physics 278, 265-279, (1999).
- [5] **Towards a model independent analysis of single particle spectra: Application to hypernuclei.** R. J. Lombard, J. Mares. Physical Review C52, N° 1. 170 (1995)
- [6] **Bertlmann-Martin inequalities in hypernuclei.** R. J. Lombard, S. Marcos, J. Mares. Physical Review C50, N° 6. 2900 (1994).
- [7] **Bertlmann-Martin inequality for a weakly bound particle.** M. Lassaut, M. Keriaki and R J Lombard, S. Marcos, J. Mares. J. Phys. A: Gen. 31 (1998) 1621-1631. printed in the UK.
- [8] **Generalized Bertlmann-Martin inequalities and power-law potentials.** R. Mezhoud, F.Z. Ighezou, A. Chouchaoui, A.T. Kerris, R.J. Lombard. Annals of Physics (à paraître).
- [9] **Spectral analysis of  $^{208}Pb$  muonic atom.** F-Z. Ighezou, R. J. Lombard, J. Mares. Eur. Phys. J.A 11, 79-85 (2001).
- [10] **The nonrelativistic three-body problem for baryons.** J. M. Richard. Physics Reports 212, No. 1 (1992), 1-76.

- [11] **Solution of a three-body problem in one dimension.** F. Calogero. Journal of Mathematical Physics volume 10, Number 12 (1969).
- [12] **Table of integrals, series and products.** I. S. Gradshteyn. I. M. Ryzhik Academic Press (1996).
- [13] **Ground -state energie of N -dimensional two -electron atoms.** Sami M. Al-Jaber Il Nuovo Cimento, Vol.116 B, N.5
- [14] **Computational Physics, Fortran Version.** S. E. Koonin, D. C. Meredith. Addison- Wesley Publishing Company, 1989.
- [15] **Computatinnal of special functions.** Shanjie. Zhang, Jiamming Jin John Wiley and sons, Inc. 1977.
- [16] G. W. Kellner. Z. Physik vol. 44, N. 91 (1929)
- [17] E. A. Hylleraas. Z. Physik vol. 48, N. 469 (1928)
- [18] **Quantum Mechanics of One- and Two- Electron Systems.** Hans A. Bethe, Eduin E. Salpeter. Handcover, Januray 1977.
- [19] **Variational calculations on a correlated helium wave fuction using Maple.** Carl W. David. Physical Review D, vol. 36, number 10 (1987)
- [20] **The simple variational wavefuctions for the helium atom and the virial theorem.** K. L. Liu, Wai-Kee Li, Am. J. Phys., Vol. 58, No. 12, December 1990.
- [21] **Variational Description of 3-Body Coulomb Problem Through a Correlated Eckart- Gaussian Wavefunction.** A. F. Riveros, J. F. Rivas-Silva, Brazilian Journal of Physics, vol. 29, no. 3, September, 1999.
- [22] **The accurate calculation of atomic properties by numerical methods.** B.C.Webster, M. J.Jamieson, R. F. Stewart, Advance in atomic and molecular physics, VOL. 14.